



HAL
open science

Etude d'un jet d'azote supercritique utilisé dans un prototype industriel de traitement de surface à faible impact environnemental

Patrice Dubs

► **To cite this version:**

Patrice Dubs. Etude d'un jet d'azote supercritique utilisé dans un prototype industriel de traitement de surface à faible impact environnemental. Autre. Université Henri Poincaré - Nancy 1, 2010. Français. NNT : 2010NAN10121 . tel-01746333

HAL Id: tel-01746333

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01746333>

Submitted on 29 Mar 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

Université Henri Poincaré, Nancy 1

Ecole doctorale d'Énergie, Mécanique et Matériaux (EMMA), ED409

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de

Docteur, spécialité « Mécanique et énergétique »

par

Patrice Dubs

Etude d'un jet d'azote supercritique utilisé dans un prototype
industriel de traitement de surface à faible impact
environnemental

Soutenue publiquement le 05 Novembre 2010

- Composition du jury -

Dr. Philippe HABERSCHILL	INSA, Lyon - CETHIL	Rapporteur
Pr. Mohammed LACHI	Université Reims Champagne Ardenne - LTM/GRESPI	Rapporteur
Pr. Bernard BAUDOIN	Ecoles des Mines, Douai	Président
Dr. Abdel TAZIBT	Directeur R&D, CRITT TJFU, Bar-le-Duc	Invité
Pr. Riad BENELMIR	Nancy Université, Faculté des sciences et technologies - LERMAB	Directeur de thèse
Dr. Mohammed KHALIJ	Nancy Université, ESSTIN - LEMTA	Co-directeur

C'est parce qu'il y a un vrai danger, de vrais échecs, une vraie damnation terrestre, que
les mots de victoire, de sagesse ou de joie ont un sens.

Simone de Beauvoir

Extrait de *Pour une morale de l'ambiguïté*

A ma famille

Avant-propos

Le présent travail de thèse est partie intégrante du projet JAZOLTHOP (**J**et d'**AZ**Ote **L**iquide sous **T**rès **H**aute **P**ression) qui vise à développer un nouveau procédé propre et performant de préparation de surface. Ce projet est initié par le CRITT TJF&U (Centre **R**égional d'**I**nnovation et de **T**ransfert de **T**echnologie - **T**echniques **J**et **F**luide et **U**sinage) de Bar-le-Duc et soutenu par l'ANR (Agence **N**ationale de la **R**echerche), dans le cadre de son programme de recherche PRECODD (**P**rogramme **E**COtechnologies et **D**éveloppement **D**urable), et la Région Lorraine, le GIP objectif Meuse, les Conseils généraux de la Meuse (55), de la Meurthe & Moselle (54) et de la Moselle (57). Ce projet fait intervenir des partenaires universitaires : le Laboratoire d'**E**nergétique et de **M**écanique **T**héorique et **A**ppliquée (LEMTA) de Nancy, et le Laboratoire de **P**hysique et **M**écanique des **M**atériaux (LPMM) de Metz. Le nouveau procédé en question repose sur l'injection d'azote supercritique et son impact sur le revêtement à traiter.

À long terme, l'objectif du projet JAZOLTHOP est de faire de ce procédé un outil de préparation de surface à haut rendement. Le présent travail a été mené au LEMTA qui apporte ses connaissances et compétences dans le domaine de la modélisation numérique d'écoulements par volumes finis. Le LPMM étudie l'interaction entre le jet d'azote et le revêtement à traiter¹ sur lequel impacte le jet, ce qui en fait un partenaire privilégié dans le cadre du projet. Le projet JAZOLTHOP traite directement du problème de réduction de consommation de l'énergie et de la pollution et s'inscrit alors dans le développement durable et l'éco-conception. C'est pourquoi des entreprises partenaires apportent leurs expertises industrielles en termes de marché, d'évaluation des résultats, et de développement de la technologie encore naissante : Nitrocision LLC (Idaho Falls, USA), le CM2T (Nancy), Technilor (Hagondange), et Procer SAS (Saint-Louis).

¹ Thèse en cours de H. Laribou, Université Paul Verlaine Metz, LPMM, UMR 7554.

Remerciements

Le présent travail de thèse n'aurait jamais pu aboutir sans l'assistance et la participation, à différents niveaux, de nombreuses personnes.

En particulier, je souhaite remercier les professeurs Christian Moyne et Fabrice Lemoine, directeurs successifs du Laboratoire d'Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée, dans lequel j'ai réalisé ma thèse, pour m'avoir accueilli.

Je tiens à remercier monsieur Mohammed Khalij, Maître de Conférences et encadrant de cette thèse pour la confiance qu'il m'a accordée au cours de ce projet. Le précieux temps qu'il m'a consacré, ses conseils clairs et précis, sa rigueur et son ouverture d'esprit m'auront permis d'avancer et d'aboutir à la production de ce travail.

Mes plus sincères remerciements vont également à Abdel Tazibt et Raphaël Masiello, respectivement directeur de recherches et directeur au sein du CRITT TJF&U de Bar-le-Duc. Leur motivation et leur implication au sein de notre collaboration a permis de faire évoluer le projet JAZOLTHOP dont ils sont également les initiateurs. L'ANR, et les collectivités locales sont vivement remerciées pour le cofinancement de ce projet.

Je tiens à remercier monsieur Philippe Haberschill, Maître de Conférences à l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, habilité à diriger des recherches ainsi que monsieur Mohammed Lachi, Professeur à l'université de Reims pour avoir accepté de lire, et juger ce mémoire. Leurs remarques et leurs conseils m'auront permis d'apporter les corrections nécessaires à ce travail. Je suis également très reconnaissant envers monsieur Bernard Baudoin, Professeur à l'école des Mines de Douai, pour avoir accepté d'examiner ce mémoire.

Le projet JAZOLTHOP dont fait partie ce travail n'aurait pas pu évoluer sans la participation de partenaires impliqués, motivés et toujours à l'écoute : le Professeur Claude Fressengeas et les Docteurs Véronique Jean-Claude et Denis Entemeyer et mon collègue doctorant Hicham Laribou à l'Université Paul Verlaine de Metz. Pour leurs mêmes qualités, je souhaiterais également citer mes partenaires au CRITT Metal2T à Longwy : Pascal Brunot et Alexandre Bastien, au CRITT TJFU : Nicolas Delpech. Un grand merci à Giles Parent et Jean-Pierre Soudieux pour leur aide et leur investissement personnel dans cette aventure. Le prototype de l'installation « jet d'azote » nous aura souvent joué des tours durant ces années. Certes, nos nombreuses heures de travail en passées en commun pour tenter de l'exploiter et

de l'analyser expérimentalement n'apparaissent pas dans ce mémoire mais elles nous auront permis de mieux appréhender la problématique.

Je remercie également le Docteur Christian Tenaud, directeur de recherches CNRS pour son aide et ses conseils quant à l'écriture d'un code de calculs aux volumes finis pour un écoulement compressible de fluide réel. Je lui suis très reconnaissant pour l'expérience et les connaissances qu'il m'a apportées même si l'écriture du code n'a pas pu aboutir durant cette période de thèse.

J'aimerais exprimer toute ma gratitude et ma reconnaissance à mes plus proches collègues à l'antenne du LEMTA basée à l'ESSTIN, qui ont toujours suivi avec intérêt mon travail et ont contribué à l'enrichir en m'offrant leurs connaissances et leur soutien : le Professeur Benoît Oesterlé, les Docteurs Anne Tanière, Nicolas Rimbart, Abdelhamid Kheiri, Salahedine Skali-Lami et Amine Mehel. Un clin d'œil à mes collègues doctorants : Laurent Claudotte, Mickael Mohaupt, Thomas Ara et Clément Baillard grâce auxquels j'ai pu travailler dans une ambiance conviviale et très agréable. Par ailleurs, que serait devenu ce travail sans le soutien et les moyens informatiques et logistiques ? Un grand merci à Jean-Paul Gobert, Eric Dupal, Marie-Luce Boulet et Edith Lang qui ont toujours œuvré avec efficacité et bonne humeur dans ces domaines.

Je suis également très reconnaissant envers mon ami, le docteur Boris Piotrowski, dont le soutien, la générosité et les encouragements auront été sans faille depuis notre rencontre.

Enfin, je remercie du fond de mon cœur toute ma famille pour la joie, la confiance et le soutien qu'ils ont apporté tout au long de mon travail.

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre 1 : Phénoménologie de l'écoulement étudié	9
1.1 Ecoulements compressibles.....	9
1.1.1 Généralités.....	9
1.1.2 Phénomènes de chocs et de détente.....	11
1.1.3 Etat générateur et évolution isentropique.....	12
1.1.4 Jets compressibles	13
1.2 Caractéristiques du fluide.....	15
1.2.1 Introduction de l'outil thermodynamique	15
1.2.2 Domaine hypercritique (ou « supercritique »)	17
1.2.3 Propriétés thermo-physiques de l'azote	20
1.2.4 Détente de Joule-Thomson.....	23
1.2.5 Bilan	25
1.3 Phénoménologie d'un jet compressible sous détendu de fluide parfait	26
1.3.1 Caractéristiques du jet libre.....	27
1.3.1.1 Influence du rapport de pression	27
1.3.1.2 Détail de la structure du jet	30
1.3.1.3 Influence de la géométrie de la buse	32
1.3.1.4 Instationnarités et turbulence	33
1.3.2 Impact normal d'un jet sous détendu de gaz sur une plaque plane.....	34
1.3.3 Bilan	36
1.4 Phénoménologie d'un jet compressible de fluide réel	37
1.4.1 Injection de fluide supercritique.....	37
1.4.2 Effets de fluide réel - phénomènes de changement de phase.....	38
1.4.3 Bilan	40
1.5 Bilan de l'étude phénoménologique : stratégie de l'étude	41

Chapitre 2 : Modélisation physique **47**

2.1 Hypothèses et définitions	47
2.2 Mise en équation	49
2.3 Fermeture thermodynamique des équations de conservation	51
2.3.1 Introduction	51
2.3.2 Loi d'état des gaz parfaits	55
2.3.3 Loi d'état de Van der Waals.....	56
2.3.4 Les équations d'états cubiques pseudo-empiriques	57
2.3.5 Une équation d'état de référence pour l'azote : « loi d'état exacte ».....	59
2.3.6 Bilan	60
2.4 Notions d'hyperbolicité.....	65
2.4.1 Définitions mathématiques.....	65
2.4.2 Cas des équations d'Euler 1D	66
2.5 Stabilité thermodynamique, hyperbolicité du système d'équations : contraintes sur la loi d'état.....	69
2.6 Bilan	71

Chapitre 3 : Modélisation numérique **75**

3.1 Discrétisation spatiale du domaine d'étude : méthode des volumes finis.....	76
3.2 Méthode numérique.....	81
3.2.1 Discrétisation des équations du modèle physique.....	81
3.2.2 Le problème de Riemann et l'approche de Godunov	82
3.2.3 Solveur de Riemann approché de Roe	89
3.2.4 Précisions sur les discrétisations spatiales et temporelles	94
3.2.4.1 Discrétisation spatiale : décentrage et ordre de discrétisation.....	94
3.2.4.2 Discrétisation temporelle.....	95
3.2.5 Préconditionnement du système d'équation.....	97
3.3 Qualité de la méthode numérique.....	98
3.4 Implémentation dans le code de calculs Fluent®.....	99

Chapitre 4 : Résultats et discussions

105

4.1 Résultats des simulations numériques sur le cas test du tube à choc	107
4.1.1 Configuration	107
4.1.2 Tube à choc pour un gaz parfait	109
4.1.3 Tube à choc pour un fluide réel.....	114
4.1.4 Conclusions	119
4.2 Jet libre supersonique sous-détendu à NPR=10	119
4.2.1 Description de l'étude	120
4.2.2 Cas du gaz parfait.....	120
4.2.3 Jet libre supersonique sous-détendu de fluide réel à NPR=10.....	123
4.2.4 Jet libre supersonique sous-détendu à NPR=10 : comparaison fluide parfait/fluide réel.....	125
4.2.5 Conclusions	128
4.3 Etude paramétrique d'une configuration industrielle : jet supersonique sous-détendu de gaz parfait en impact sur une surface plane	129
4.3.1 Présentation des configurations étudiées.....	129
4.3.2 Paramètres variables de l'étude.....	130
4.3.3 Evolution globale de la structure du jet en fonction des paramètres de l'étude....	131
4.3.4 Ecoulement dans la buse	136
4.3.5 Structure du jet supersonique sous-détendu impactant	139
4.3.6 Zone de détente jusqu'au disque de Mach	141
4.3.7 Re-compression au travers du disque de Mach.....	143
4.3.8 Zone proche de l'impact.....	143
4.3.9 Caractéristiques à l'impact du jet supersonique sous-détendu.....	145
4.3.10 Conclusions	152
4.4 Prise en compte des effets de fluide réel : vers la compréhension des phénomènes mis en jeu dans le procédé de traitement de surface	153
4.4.1 Résultats de simulation numérique	153
4.4.2 Conclusion et perspectives d'étude dans le cas réel : analyse expérimentale exploratoire du procédé de traitement de surface.....	156

Conclusion générale et perspectives 161

**Annexe 1 : Calcul des capacités calorifiques du fluide à partir de la loi
d'état 165**

**Annexe 2 : Eléments de conception de bancs d'expérimentations optiques
168**

Nomenclature

Alphabet latin

c	m.s^{-1}	Vitesse de propagation du son dans le milieu
C_v	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	Capacité calorifique à volume constant
C_p	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	Capacité calorifique à pression constante
D_e	m	Diamètre de buse
e_{tot}	J.kg^{-1}	Energie totale massique
F	J.kg^{-1}	Energie libre de Helmholtz massique
G	J.kg^{-1}	Enthalpie libre de Gibbs massique
h	J.kg^{-1}	Enthalpie massique
e_i	J.kg^{-1}	Energie interne massique
M	-	Nombre de Mach
M_w	kg.mol^{-1}	Masse atomique, pour l'azote $M_w=28,013 \cdot 10^{-3} \text{ kg.mol}^{-1}$
l_e	m	Longueur de buse
P	Pa	Pression
R	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$	Constante universelle des gaz
$r_g=R/M_w$	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	Constante du gaz de masse atomique M_w
r/D_e	-	Distance adimensionnée dans la direction radiale
s	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	Entropie
T	K	Température
\vec{U}	m.s^{-1}	Vecteur vitesse
u_i	m.s^{-1}	Composante du vecteur vitesse dans la direction i
v	$\text{m}^3.\text{kg}^{-1}$	Volume massique
V	m^3	Volume
x/D_e	-	Distance adimensionnée dans la direction longitudinale
x_p/D_e	-	Distance d'impact adimensionnée entre la section de sortie du jet et la surface impactée perpendiculairement
Z	-	Facteur de compressibilité

Alphabet grec

τ	-	Coefficient de compressibilité isotherme
γ	-	Rapport des capacités calorifiques $\gamma = C_p/C_v$
	kg.m^{-3}	Masse volumique
μ	Pa.s	Viscosité du fluide
J_T	-	Coefficient de Joule-Thompson
	m.s^{-1}	Valeur propre du système d'équations
T	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$	Conductivité thermique

Indices

DM	Disque de Mach
e	Propriété sur la surface d'éjection
inj	Propriété dans les dans le réservoir (conditions d'injection)
l	Liquide saturé
g	Gaz saturé
sat	Propriété à la saturation liquide-gaz
C	Propriété du fluide à l'état critique (thermodynamique)
tr	Point triple du fluide
ref	Propriété de reference (évaluée à un état de reference)

Abréviations

CARS	Coherent Anti Stokes Raman Scattering
CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direct Numerical Simulation
EOS	Equation Of State
HVOF	High Velocity Oxygen Fuel
LES	Large Eddy Simulation
NPR	Nozzle Pressure Ratio
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
UDF	User Defined Function (Fluent ®)
UDRGM	User Defined Real Gas Model (Fluent ®)

Introduction générale

Le traitement de surface est une opération effectuée sur un matériau qui a pour conséquence de modifier son aspect (texture, propriétés électriques ou optiques, etc.) ou sa fonction (principalement en termes de durabilité, tenue en température, réduction des frottements, etc.) afin de l'adapter à des conditions d'utilisation imposées. Pour ce faire, la fonction du traitement de surface est : soit de déposer un revêtement sur un matériau (qui est alors appelé *substrat*), soit de retirer un revêtement sur un matériau (on parle alors généralement d'une opération de *nettoyage*), soit de modifier directement les caractéristiques de la surface du matériau. La nature même de l'opération peut être mécanique, chimique, électrochimique ou physique. Le traitement de surface fait partie intégrante des procédés industriels de fabrication d'objets divers. Il permet de lutter contre la corrosion des métaux, l'usure (par frottements par exemple) des matériaux, ou simplement d'améliorer l'aspect d'une surface (opération de polissage, par exemple). En réponse à des problématiques techniques, économiques ou environnementales, de plus en plus de nouvelles fonctions sont ajoutées aux surfaces des objets et de nouveaux procédés sont mis au point pour assurer des fonctions déjà existantes. Le développement des procédés de traitement de surface est alors directement lié à ces problématiques (par exemple, l'évolution des procédés jusqu'ici inadaptés car trop onéreux, polluants, nocifs, etc.). Ces procédés de traitement de surface sont extrêmement variés et font intervenir des technologies telles que la pulvérisation par plasma (éventuellement assistée par laser), l'attaque chimique sèche (*Chemical Vapor Deposition*, utilisation de plasmas) ou humide (dépôt chimique dynamique), les dépôts de poudre par voie électrostatique, etc. Par exemple, le dépôt d'un revêtement anti-usure est une opération de traitement de surface classique qui joue un rôle prépondérant dans le domaine de la tribologie.

Pour les opérations de nettoyage (décapage) en particulier, des techniques traditionnelles de préparation de surface existent depuis quelques décennies. Les techniques les plus répandues sont à base de jet d'eau (voir par exemple Louis et Schikorr [1] pour une description des aspects phénoménologiques mis en jeu dans le procédé, Leu *et al.* [2] pour une analyse mathématique et expérimentale de l'efficacité du procédé). Mais il existe également des systèmes thermiques (comme le cold spray, voir Alkhimov *et al.* [3] pour la présentation du procédé et Dykhuizen et Smith [4] pour les caractéristiques de l'écoulement). Des systèmes chimiques (bains acides, solvants), ou des systèmes mécaniques (via les techniques

de sablage ou de grenailage qui utilisent des particules abrasives) se trouvent aussi dans les procédés de préparation de surface. De plus récentes technologies à base de jets cryogéniques permettent d'allier à l'effet mécanique d'arrachement (dû à l'énergie d'impact délivrée par le jet), un effet de choc thermique (cristallisation du dépôt à décaper), et un effet mécanique supplémentaire d'arrachement dû à la très forte détente de ces substances qui sont gazeuses à l'état naturel pour la plupart (voir par exemple Charbit *et al.* [5], Toscano et Ahmadi [6]). Un nouveau procédé de traitement de surface par jet d'azote supercritique est étudié dans ce travail de thèse. Le concept a été mis au point en 2001 par l'entreprise NitroCision LLC¹ et développé depuis lors (voir Hume *et al.* [7], [8] pour les brevets américains publiés en 2006). Il s'apparente par nature à cette dernière classe de procédés cryogéniques. Le principe même du procédé de préparation de surface (Figure I.1) réside dans l'impact à grande vitesse (de 500 à 800 m/s) du jet résultant de la détente de l'azote, initialement sous haute pression (jusqu'à 3800 bar) et basse température (jusqu'à -140 °C).

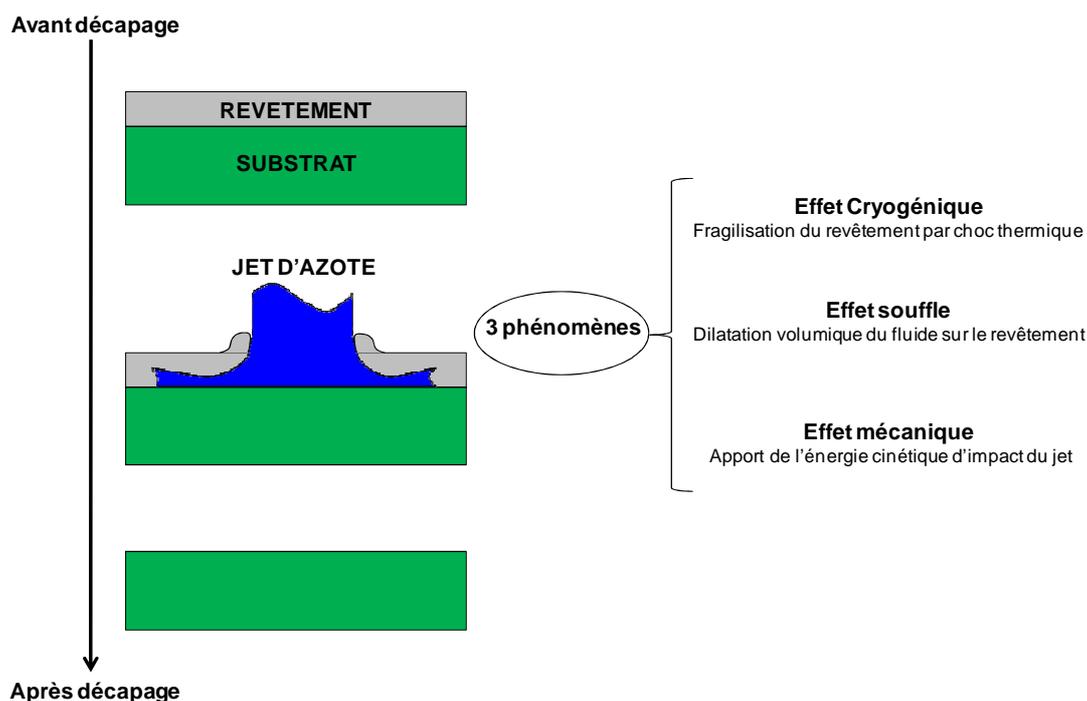


Figure I.1 : Principe de fonctionnement du procédé de traitement de surface par jet d'azote supercritique.

L'azote est mis sous très haute pression et basse température grâce à de nombreuses transformations thermodynamiques via une installation technique illustrée sur la photographie Figure I.2a et non détaillée ici (elle comporte différents étages de compression et de refroidissement).

¹ <http://www.nitrocision.com/>

L'azote s'échappe ensuite par un orifice cylindrique de dimension micrométriques appelé *buse de projection*, pour se détendre à l'air libre et former le jet (Figure I.2b). Il est acheminé vers la buse de projection à l'aide d'une conduite appelée *tube de collimation*.

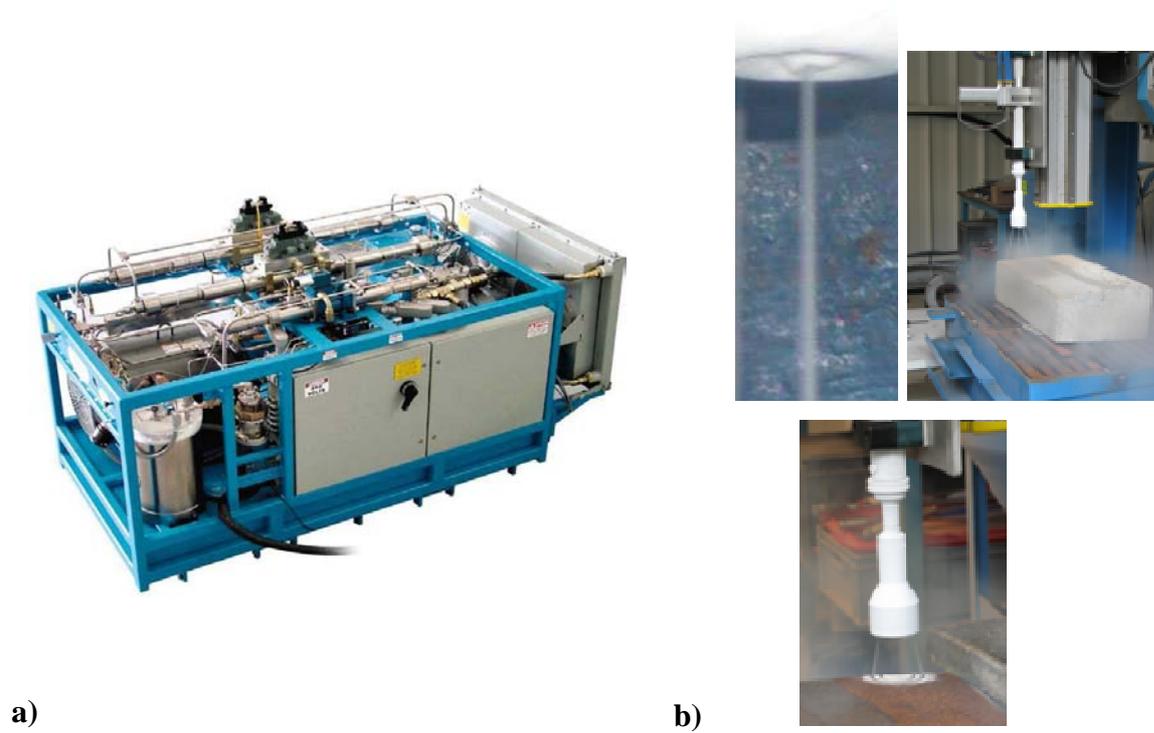


Figure I.2 : Photographies illustrant : a) la source d'azote et les dispositifs de conditionnement thermique et de mise sous pression ; b) le jet d'azote supercritique à la sortie de la buse.

En amont de la buse, la pression et la température de l'azote obtenues à la sortie du dispositif de compression et de refroidissement (*conditions génératrices*) sont paramétrables suivant les conditions d'utilisation, et le type de revêtement à traiter. De plus, différentes buses peuvent être utilisées (par exemple, des buses à tête rotative, ou multi jets,...) comme le montre la Figure I.3.



Figure I.3 : Différentes buses utilisées pour le traitement de surface par jet d'azote.

Les applications visées par ce procédé intègrent des opérations de nettoyage, telles que la décontamination (enlèvement des couches radioactives des pièces métalliques pour la récupération sélective des ensembles contaminés), le démantèlement (séparation du revêtement sur des matériaux métalliques sans modification de leurs propriétés), et le désassemblage multi-matériaux. Les fonctions du procédé sont en adéquation avec les besoins des secteurs industriels tels que la métallurgie, la pétrochimie, l'aéronautique, l'automobile, et le nucléaire. Par exemple, le procédé de décapage par jet d'azote supercritique s'applique sur l'isolant thermique des boosters de navettes spatiales qui sont composées d'un matériau capable de résister à de très fortes contraintes thermomécaniques lors de leur entrée dans l'atmosphère (l'entreprise NitroCision LLC a reçu le prix NASA pour les avancées obtenues dans ce domaine [9]). D'une manière générale, les enjeux liés à la maîtrise et au développement d'une telle technologie de traitement de surface sont multiples. D'un point de vue technique et économique, la fonctionnalisation des surfaces est un verrou majeur dans la conception des nouveaux produits puisqu'il tend vers la maîtrise de la conception et de la caractérisation de ces surfaces et ce, dans tous les secteurs industriels. Par exemple, les techniques classiques de décapage ont généralement pour inconvénient d'entraîner des défauts à l'interface et de modifier les caractéristiques mécaniques des substrats. L'enjeu environnemental est également prépondérant pour ce nouveau procédé, d'autant plus que les contraintes législatives et normatives apparaissent. Le traitement de surface est historiquement une étape polluante de la fabrication de produits, à travers l'utilisation de solvants chlorés par exemple. La mise au point de procédés de traitement de surface « propres », ne faisant plus appel à des solvants (passage de procédés humides à des procédés secs), ou utilisant des solvants moins polluants, répond à une demande forte de la société et à des impératifs de normes de rejets pour les industriels. Dans cette optique, le nouveau procédé permet l'économie des ressources naturelles telles que l'eau et les abrasifs utilisés en décapage par jet d'eau et en sablage, ce qui constitue un intérêt environnemental de premier plan. En France, selon le Centre d'Information sur l'eau (CIEAU²), la consommation annuelle d'eau par habitant est estimée à 37,5 m³. Une installation classique de décapage par jet d'eau utilise l'eau du réseau urbain à raison de 3758 m³ par an, soit 100 fois la consommation d'un habitant. On estime le volume d'eau utilisée en décapage à 100000 m³ par an. Les abrasifs sont 50 fois moins performants que le jet d'eau. A performances équivalentes, les quantités d'abrasifs consommées et devant être traitées, représentent quelques milliers de tonnes par an.

² <http://www.cieau.com/>

C'est autant de matières naturelles extraites des roches en carrières. Par opposition, le procédé à base de jet d'azote utilise, par sa définition, un gaz neutre. Il ne génère pas de déchets additionnels : il n'y a pas d'utilisation de produits chimiques, de gaz à effet de serre, pas de rejets abrasifs et pas de pollution du fluide nécessitant de lourdes opérations de récupération et de traitement qui consomment de l'énergie et qui impactent directement sur l'environnement. En effet, un atelier classique de traitement de surface à base de jet d'eau génère des bains liquides (acides ou basiques) contenant des métaux lourds et éventuellement des cyanures. Les opérations de récupération et de traitement de l'eau génèrent trois types de déchets principaux : les déchets liquides, les boues d'hydroxydes métalliques, les résines échangeuses d'ions utilisées dans le traitement des eaux de rinçage. Ces déchets sont ensuite soit valorisés soit éliminés. Ils sont particulièrement agressifs et toxiques pour l'environnement. A l'échelle nationale, 200000 tonnes de boues d'hydroxydes sont mises en centre de stockage. Enfin, un enjeu en termes de santé apparaît également de plus en plus important. Par exemple, l'opération de décapage par sablage dégage des vapeurs nocives qui obligent de confiner le substrat dans un environnement étanche. L'opération de décapage par bain acide dégage des vapeurs des différents acides utilisés (sulfurique, chlorhydrique, cyanhydrique, fluorhydrique, etc.) et présente également de graves dangers pour la santé.

En résumé, le jet d'azote supercritique, utilisé dans le nouveau procédé de traitement de surface, est obtenu lors de la détente d'un état initial sous haute pression et basse température, dans un réservoir, à un état aux conditions normales de pression et de température, dans le milieu ambiant, au travers d'une buse de projection axisymétrique de diamètre 0,2 mm (Figure I.4). Le jet issu de l'injecteur vient ensuite impacter perpendiculairement une paroi. Ce travail de thèse a alors pour principal objectif la compréhension des caractéristiques dynamiques et thermiques du jet d'azote et de son impact (Figure I.4). Même si la technologie de ce procédé existe à l'heure actuelle sous forme d'un prototype, son fonctionnement repose sur des bases empiriques et les phénomènes physiques qu'il met en jeu sont encore bien mal appréhendés. Afin de mener l'objectif à terme, les bases théoriques nécessaires à la compréhension des phénomènes physiques mis en jeu dans cet écoulement doivent, dans un premier temps, être acquises.

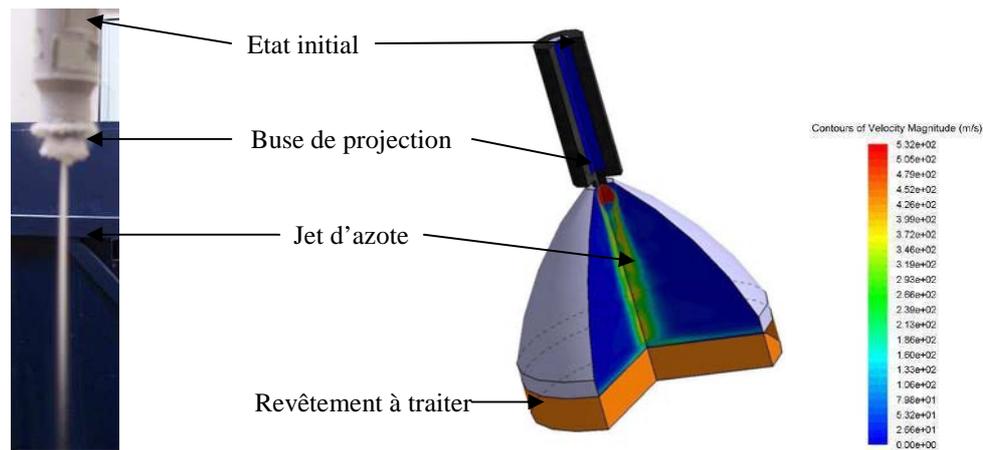


Figure I.4 : Photographie du jet d'azote (à gauche) ; Illustration du champ de vitesse dans le jet obtenu par simulation numérique (à droite).

Une modélisation numérique permettra de quantifier les effets des paramètres influant sur le jet et ses propriétés à l'impact. Des questions surgissent naturellement quant aux phénomènes physiques mis en œuvre lors de la détente (forte et rapide) du fluide : comment se déroule cette détente ? Comment évoluent la pression, la vitesse et la température de l'azote à la sortie de la buse jusqu'à l'impact ? Le détail de la structure de l'écoulement et son comportement en fonction des paramètres d'influence est encore mal appréhendée tant les bases de données expérimentales, théoriques et numériques disponibles à ce jour sont pauvres. Le travail, résumé ici, vise à essayer de répondre à ces questions.

D'abord, dans le premier chapitre (*Chapitre 1*), nous décrirons les phénomènes physiques liés à l'injection de fluide sous pression en dressant un état de l'art de l'ensemble des données de la littérature scientifique. Pour ce faire, nous ne nous limiterons pas dans les sources de ces données, elles pourront être théoriques, expérimentales ou même numériques. Une première partie présente les propriétés générales d'un écoulement compressible qui constitue la nature de l'écoulement étudié ici. Ensuite, les caractéristiques du fluide sont présentées. Il apparaît que l'écoulement dépend de la nature du fluide injecté. En effet, lorsqu'un gaz sous pression est injecté dans une atmosphère au repos, l'écoulement obtenu correspond à un jet supersonique sous-détendu. Depuis les dernières décennies, beaucoup d'auteurs se sont intéressés aux phénomènes physiques mis en jeu dans un jet supersonique sous détendu, et notamment la structure complexe d'onde de chocs qu'il contient. Lorsque la pression d'injection devient suffisamment grande (à température supercritique donnée), les propriétés du fluide s'éloignent peu à peu de celle du gaz et les effets de fluide réel apparaissent et influencent l'écoulement. C'est pourquoi ces différentes configurations de jets

sont étudiées, et un bilan est dressé en fin de chapitre. Ce bilan permet de définir la stratégie d'étude qui a été menée dans le travail de thèse.

Au *Chapitre 2*, la modélisation mathématique des phénomènes physiques mis en œuvre dans le jet est présentée. Cette modélisation est effectuée en accord avec la stratégie décrite dans le *Chapitre 1* qui vise à augmenter pas à pas le degré de complexité du modèle. Les équations régissant le mouvement fluide (équation de Navier-Stokes) sont développées. Comme les caractéristiques du fluide influence la nature de l'écoulement, un premier modèle est élaboré en considérant le fluide idéal et l'écoulement monophasique. Ce modèle est ensuite amélioré en prenant en compte les effets de fluide réel (notamment via l'utilisation d'une loi d'état adéquat) dans l'écoulement monophasique.

Une solution analytique aux modèles physiques ainsi élaborés n'est pas envisageable ; l'utilisation de l'outil numérique CFD (Computational Fluid Dynamics) est nécessaire. Ainsi, au *Chapitre 3*, le modèle numérique des équations mathématiques (posées au *Chapitre 2*), est présenté. En particulier, le passage du problème physique au problème numérique, et le traitement particulier que la méthode numérique nécessite pour notre type d'écoulement sont abordés.

Une fois tous les outils physiques et numériques décrits en détails dans ces chapitres, les résultats obtenus sont exposés au *Chapitre 4*. Des cas tests de validations sont préalablement étudiés en vue de juger de la qualité des solutions numériques obtenues par rapport à des solutions exactes (lorsqu'elles existent) ou des résultats issus de la littérature. Enfin, l'analyse de configurations rencontrées dans le milieu industriel est menée et l'influence de différents paramètres sur les caractéristiques du jet d'azote est étudiée.

Références bibliographiques

- [1] H. Louis, W. Schikorr - FUNDAMENTAL ASPECTS IN CLEANING WITH HIGH-SPEED WATER JETS. *Papers Presented at the International Symposium on Jet Cutting Technology*, pp. 217-228, 1982.
- [2] M. C. Leu, P. Meng, E. S. Geskin, L. Tismeneskiy - Mathematical modeling and experimental verification of stationary waterjet cleaning process. *Journal of manufacturing science and engineering*, vol. 120 (3), pp. 571-579, 1998.
- [3] A.P. Alkhimov, V.F. Kosareve, A.N. Papyrin - A Method of Cold Gas-Dynamic Deposition. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, vol. 315 (5), pp. 1062-1065, 1990.
- [4] R.C. Dykhuizen, M.F. Smith - Gas Dynamic Principles of Cold Spray. *Journal of Thermal Spray Technology*, vol. 7 (2), pp. 205-212, 1998.
- [5] G. Charbit, E. Badens, O. Boutin - Applications industrielles des technologies supercritiques : Etat de l'art et perspectives, *Mécanique & Industries*, vol. 5 (5), pp.541, 2004.
- [6] C. Toscano, G. Ahmadi - Particle removal mechanisms in cryogenic surface cleaning. *Journal of Adhesion*, vol. 79 (2), pp. 175-201, 2003.
- [7] H. R. Hume, R. R. Warnecke, G. L. Palmer, L.J. Fekete - United States Patent Application 20060053165 Kind Code A1 SYSTEM AND METHOD FOR DELIVERY CRYOGENIC FLUID. March 9, 2006
- [8] H. R. Hume, R. R. Warnecke, G. L. Palmer, L.J. - United States Patent Application 20060049274 SYSTEM AND METHOD FOR DELIVERY CRYOGENIC FLUID. March 9, 2006
- [9] NASA Space Flight Awareness Supplier Award³ - NITROCISION, March 25, 2005

³ <http://sfa.nasa.gov/sfaawards.cfm>

Chapitre 1 : Phénoménologie de l'écoulement étudié

Les phénomènes physiques mis en jeu dans le jet compressible issu de la détente de l'azote supercritique doivent être convenablement identifiés et leur compréhension bien appréhendée afin de pouvoir les modéliser. Un examen de la littérature en relation avec la problématique scientifique abordée permet d'identifier les différents phénomènes mis en jeu lors de l'injection de fluide sous haute pression. En particulier, les notions phénoménologiques propres aux écoulements compressibles sont revues dans le paragraphe 1.1 afin d'introduire les caractéristiques d'un jet compressible. Comme la nature du fluide influe sur l'écoulement, le paragraphe 1.2 se propose alors d'étudier les caractéristiques du fluide et leurs évolutions en fonction de l'état thermodynamique dans lequel se trouve le fluide. Ensuite, une étude approfondie et critique de l'état de l'art permet de dresser les bases de ce travail de thèse en fonction de la nature du fluide injecté (paragraphe 1.3 et 1.4). Enfin, une fois ces connaissances acquises, la stratégie d'étude menée dans le cadre de ce travail est mise en place dans le paragraphe 1.5.

1.1 Ecoulements compressibles

1.1.1 Généralités

Un fluide compressible est généralement défini comme un fluide au sein duquel la masse volumique peut varier. Des variations de la masse volumique influencent naturellement les écoulements. L'origine physique d'une variation de la masse volumique peut être diverse. Par exemple, des inhomogénéités de la température ou de la pression dans l'écoulement. Cependant, un écoulement peut être considéré comme incompressible bien que la masse volumique du fluide qui s'écoule peut varier. Ce type d'écoulement entre dans le cadre de l'approximation de Boussinesq où les variations de la masse volumique sont négligées partout sauf là où les effets de la gravité apparaissent (comme dans le gradient de pression au sein de l'écoulement). Le nombre de Mach est le nombre adimensionnel permettant de distinguer un écoulement compressible d'un écoulement incompressible. Il permet de caractériser les effets de compressibilité intrinsèque liés à la propagation d'ondes acoustiques (ondes de pression). Le nombre de Mach M est défini comme étant le rapport entre la vitesse locale dans l'écoulement u et la vitesse de propagation des ondes acoustiques dans le fluide considéré (*i.e.* la vitesse de propagation du son) c :

$$M = \frac{u}{c} \quad (1.1)$$

Il est communément admis que les effets de compression peuvent être négligés pour les nombres de Mach inférieurs à 0,3.

Dans un écoulement incompressible, les perturbations de pression se déplacent avec une vitesse infinie dans le fluide, conduisant à un nombre de Mach nul quelle que soit la vitesse locale du fluide. Par opposition, dans un écoulement compressible, une perturbation de pression ponctuelle se propage dans toutes les directions à la vitesse locale du son (qui est finie). Trois principales configurations d'écoulement compressible sont distinguées suivant les valeurs du nombre de Mach : le régime subsonique ($M < 1$), sonique ($M = 1$) et supersonique ($M > 1$). Pour illustrer les phénomènes liés à ces régimes, considérons un point matériel P se déplaçant à une vitesse u dans un fluide. Au cours de son mouvement, le point matériel engendre au sein du fluide des perturbations de pression (*i.e.* il est la source d'émission d'ondes acoustiques), qui engendrent elles-mêmes des variations de masse volumique, etc. En fonction du régime d'écoulement, ces perturbations se propagent différemment (Figure 1.1).

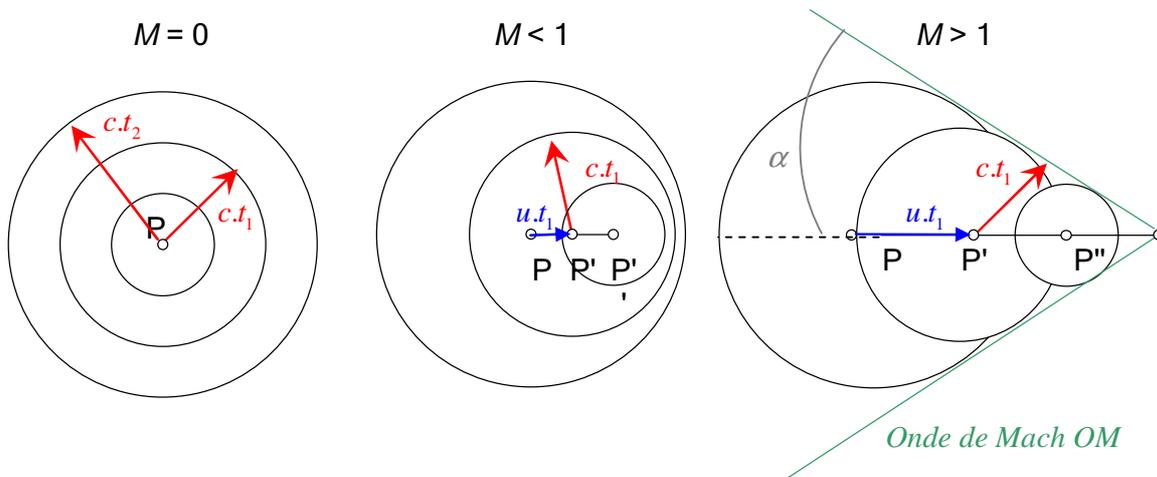


Figure 1.1 : Propagation d'ondes de pression et évolution des fronts d'onde en fonction du régime d'écoulement (distingué par le nombre de Mach).

Supposons, dans un premier temps, P immobile, le nombre de Mach vaut $M=0$ (à gauche sur la Figure 1.1). Dans ce cas, les ondes acoustiques émises de P se propagent à la vitesse du son c et forment des fronts d'onde sphériques, de rayon ct_1 à l'instant t_1 et ct_2 à l'instant t_2 . Tout l'espace est instantanément et uniformément affecté par l'émission des ondes de pression. Notons que dans ce cas, la source a été considérée immobile, mais cette situation peut aussi être interprétée comme le cas limite où la source se déplace à la vitesse u et la célérité du son est infinie, ce qui correspond à l'hypothèse d'incompressibilité. Dès lors que la

particule fluide est en mouvement à une vitesse u subsonique ($M < 1$), le front d'onde émis ne forme plus des sphères concentriques aux différents instants (au milieu sur la Figure 1.1). Tout le champ peut encore être affecté par les ondes de pression mais cette fois de manière inhomogène. Chaque onde se déplaçant plus rapidement dans le sens de l'écoulement que dans sa direction opposée. La position de la source P sera toujours à l'intérieur du front d'onde. Dans le cas de l'écoulement compressible supersonique ($M > 1$), le point matériel se déplace plus vite que les perturbations qu'il engendre. Les ondes de perturbations ne peuvent plus remonter l'écoulement et s'accumulent le long de lignes (ou surfaces) de discontinuités infinitésimales d'angle $\alpha = \arcsin(M^{-1})$, appelées ondes de Mach (à droite sur la Figure 1.1). Ainsi, contrairement au cas subsonique où les ondes sonores se propagent dans tout le champ, dans le cas supersonique (et sonique), les ondes ne se propagent uniquement que dans une partie du champ. Dans le cas supersonique, deux zones ont été distinguées : une zone perturbée par les ondes (à l'intérieur de la zone conique située derrière la source), et une zone morte (*i.e.* de laquelle aucune information ne peut provenir et vers laquelle aucune information ne peut parvenir).

1.1.2 Phénomènes de chocs et de détente

Dans un écoulement compressible où la vitesse n'est pas uniforme, les ondes de Mach produites vont diverger (l'écoulement est progressivement accéléré et détendu) ou converger (l'écoulement est progressivement ralenti et comprimé). L'écoulement supersonique typique sur une marche descendante est représenté sur la Figure 1.2 et fait apparaître les faisceaux de détente et de compression.

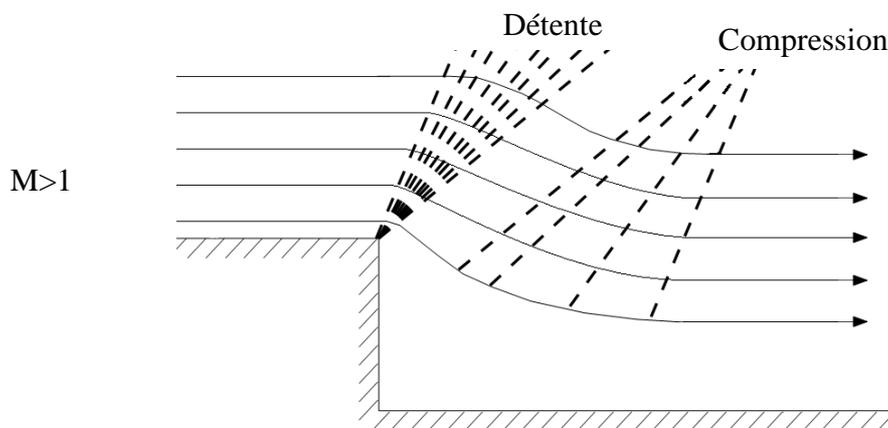


Figure 1.2 : Formation de faisceaux de détente et de compression dans un écoulement supersonique sur une marche descendante.

En particulier, pour un écoulement supersonique ($M > 1$), la structure de l'écoulement peut être totalement modifiée par l'apparition de zones de compression et de détente. En effet, pour de tels écoulements compressibles à grande vitesse (vitesse comparable à la vitesse sonique locale), il existe des singularités (zones localisées) où les caractéristiques de l'écoulement varient très fortement et très rapidement afin de s'adapter aux contraintes : les ondes de chocs. Un choc (i.e. onde de choc) est alors défini comme une zone très mince de l'écoulement (typiquement d'une épaisseur de l'ordre de 10^{-7} m) à travers laquelle les grandeurs physiques varient très rapidement. Une telle onde de choc peut être normale à la direction de l'écoulement (on parle alors de choc droit), ou inclinée par rapport à la direction de l'écoulement (on parle alors de choc oblique) (figure 1.3). Expérimentalement, les visualisations optiques mettent en évidence des variations de l'indice de réfraction du milieu qui est relié à la masse volumique locale. La figure 1.3 témoigne d'une variation brutale de la masse volumique sur une longueur très courte et met en évidence l'existence d'une discontinuité au sein de l'écoulement : l'onde de choc. Au travers d'une onde de choc, les grandeurs de l'écoulement (la vitesse, la pression, la masse volumique, l'entropie,...) varient donc de manière discontinue.

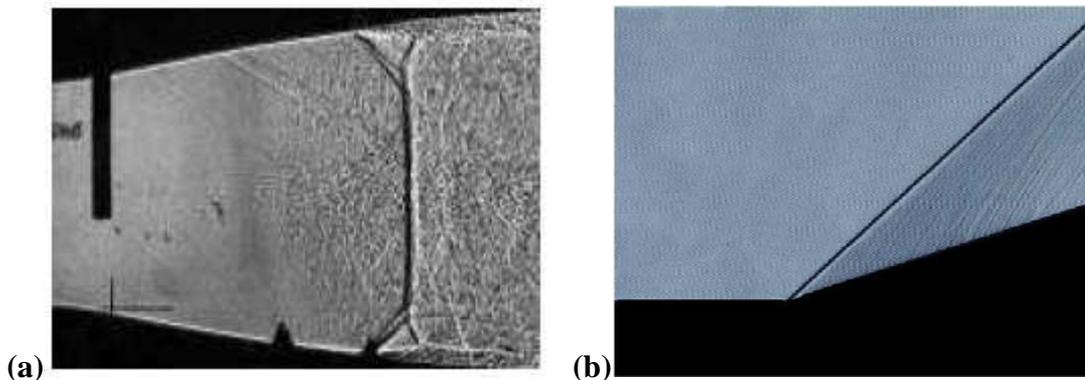


Figure 1.3 : Visualisation d'ondes de choc : (a) choc droit à la sortie d'une tuyère de Laval ; (b) choc oblique sur une rampe de compression.

1.1.3 Etat générateur et évolution isentropique

L'état générateur d'un écoulement compressible est l'état où le fluide est à la vitesse nulle. Cet état peut être fictif. La loi de Thomson se base sur la conservation de l'enthalpie totale, et s'écrit pour un fluide idéal, non visqueux, et un écoulement unidimensionnel isentropique adiabatique (équations 1.2). Notons que l'enthalpie totale se conserve également pour une transformation irréversible (avec frottements, en présence de conduction de chaleur,...). Soit, en écrivant la conservation de l'enthalpie totale entre l'état générateur (indice 0) et un état final (indice e) dans une géométrie unidimensionnelle :

$$h_0 + \frac{1}{2}u_0^2 = h_e + \frac{1}{2}u_e^2 \Rightarrow \begin{cases} T_e = T_0 \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_e^2\right)^{-1} \\ P_e = P_0 \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_e^2\right)^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} \\ \rho_e = \rho_0 \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M_e^2\right)^{\frac{1}{1-\gamma}} \end{cases} \quad (1.2)$$

Ces équations sont souvent utilisées dans les études des tuyères de Laval où l'écoulement subsonique entre dans un convergent, devient sonique au col (la plus petite section de passage du fluide) et supersonique dans le divergent. En particulier, elles permettent de prédire les caractéristiques de l'état critique (qui correspond à l'état où le fluide s'écoule à la vitesse sonique). Dans le cas d'une tuyère de Laval, l'état au col de la tuyère correspond à l'état critique. En utilisant ces relations, nous pourrions estimer les conditions de pression, température et masse volumique qui règnent au niveau de la section de sortie de la buse de projection (qui pourrait s'apparenter au col d'une tuyère de Laval) en fonction de celles qui règnent au niveau du tube de collimation (où la vitesse du fluide est quasiment nulle). Au travers des ondes de chocs, ces relations ne sont pas respectées, puisqu'il y a notamment un saut d'entropie.

1.1.4 Jets compressibles

Un jet est un écoulement issu d'un espace confiné jaillissant dans un espace ouvert. Dans un jet compressible (sonique ou supersonique), le fluide est soumis à trois différents phénomènes. Tout d'abord, la différence de pression avec le milieu extérieur qui modifie la vitesse et la trajectoire des particules fluide. De plus, le fluide est soumis à une inertie extrêmement importante (proportionnelle à la vitesse au carré). Enfin, la viscosité du fluide amortit l'ensemble de ces phénomènes et tend à équilibrer le jet avec le milieu ambiant. L'interaction conjointe de ces phénomènes régie la structure du jet. Schématiquement, la structure d'un jet supersonique axisymétrique (suivant l'axe du jet) se décompose classiquement en trois zones distinctes (Figure 1.4) :

- Le cœur potentiel qui débute à la section d'éjection (typiquement la section de sortie de la buse) et qui est le siège des phénomènes de détente et de re-compression (au travers d'ondes de chocs). L'écoulement dans cette zone est isolé du milieu ambiant et les effets de viscosité y sont négligeables. En périphérie du cœur du jet, se développe la couche de mélange. Elle est le siège d'un fort cisaillement entre le fluide injecté, qui s'écoule à haute

vitesse, et le milieu ambiant, qui est au repos. C'est pourquoi la couche de mélange est quelque fois appelée couche de cisaillement.

- La région de transition : dans cette zone, la couche de cisaillement atteint l'axe du jet. L'augmentation du mélange entre le fluide injecté et le milieu ambiant tend vers l'homogénéisation de la pression.

- La zone lointaine : le jet est globalement subsonique et la pression sensiblement identique à la pression du milieu ambiant.

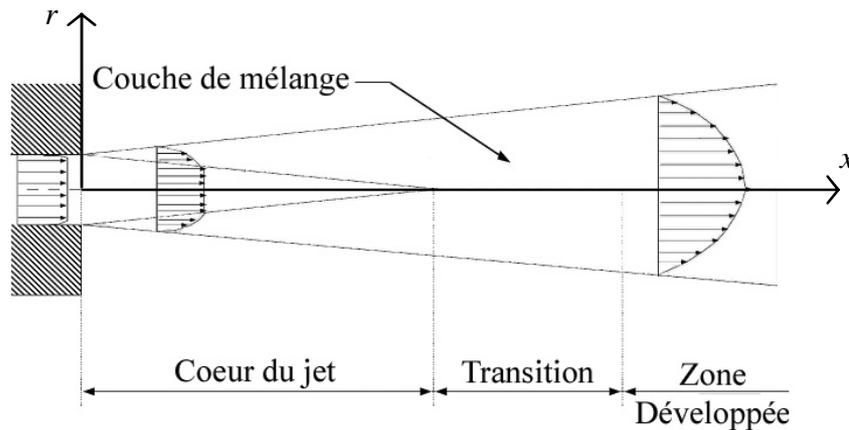


Figure 1.4 : Schéma de la structure globale d'un jet compressible.

Les notions fondamentales propres aux écoulements compressibles ont été introduites dans ce paragraphe (pour approfondir ces notions, voir Shapiro [1], Courant et Friedrichs [2] et Yahya [3], par exemple). Elles permettent de décrire les phénomènes de détente et d'ondes de chocs qui sont présents dans les jets compressibles. La différence de pression à la sortie d'un jet compressible supersonique est un paramètre clé influençant la structure du jet. Lorsque la pression à la sortie du jet est supérieure à la pression dans le milieu dans lequel le jet débouche, on parle de jet sous-détendu et inversement, lorsqu'elle est inférieure, on parle de jet sur-détendu (voir Antsupov [4]). Le jet issu de la détente de l'azote supercritique étudié dans ce travail correspond à un jet sous détendu.

Avant d'examiner plus en détail les caractéristiques d'un tel jet compressible sous détendu, on étudie préalablement, dans la section suivante, les propriétés du fluide puisque la nature de l'écoulement en dépend fortement.

1.2 Caractéristiques du fluide

1.2.1 Introduction de l'outil thermodynamique

Afin de déterminer les caractéristiques du fluide, on étudie les variables et les fonctions thermodynamiques qui caractérisent l'état du fluide. On distingue les variables intensives qui ne dépendent pas de la quantité de matière qu'elles représentent et les variables extensives qui dépendent de la quantité de matière qu'elles représentent. La température T et la pression P sont des variables intensives. Le volume v et le nombre de moles d'atomes/molécules de fluide n sont des variables extensives. Rappelons qu'une variable d'état nous informe uniquement sur l'état actuel du système et ne tient pas compte de « l'historique » des transformations subies par le fluide. Les fonctions d'état thermodynamique sont l'énergie interne e_i (la lettre ' U ' est généralement utilisée mais nous la réservons, dans notre cas, pour la vitesse des particules fluides), l'enthalpie h , l'entropie s , l'énergie libre de Gibbs G , et l'énergie libre d'Helmholtz F . Les fonctions d'état ne dépendent que des états initial et final d'une transformation. Les lois d'état (ou équations d'état) permettent de décrire le système thermodynamique à partir d'une équation liant les variables thermodynamiques. D'une manière générale, l'équation d'état $f(P, \rho, T) = 0$ peut être représentée dans l'espace à trois dimensions (P, ρ, T) ou (P, v, T) , ou encore projetée dans un espace à deux dimensions où une variable du triplet (P, T, v) a préalablement été fixée comme le montre la Figure 1.5 (voir par exemple Borel [5]).

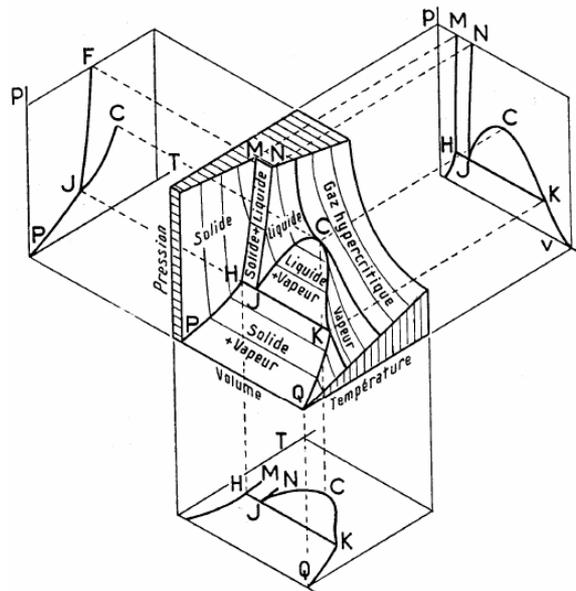


Figure 1.5 : Schématisation du diagramme (P, v, T) d'un corps pur et projections permettant d'obtenir les digrammes (P, T) , (P, v) , (T, v) , (voir par exemple Borel [5]).

Dans la bibliographie, on distingue parfois la notion de loi d'état thermique $P = P(\rho, T)$, qui permet d'évaluer les variations de pression en fonction des variations de la masse volumique (ou du volume) et de la température, et de loi d'état calorique $e_i = e_i(\rho, T)$, qui exprime les variations d'énergie interne en fonction des variations de la masse volumique (ou du volume) et de la température.

La matière peut se trouver dans 4 états : solide (S), liquide (L), gaz (G) et plasma. Plusieurs phases existent pour certains états (essentiellement pour les phases solides). C'est l'ordre qui règne au sein de la matière qui permet de distinguer ces 4 états. Ainsi, la phase solide est caractérisée par un ordre à grande distance, il n'y a pas (ou peu) d'agitation au sein de la matière et plusieurs phases solides existent (que l'on distingue par rapport à l'arrangement spécifique des atomes/molécules/particules qui la compose). Les phases liquides sont caractérisées par un ordre à courte distance pour lequel les molécules sont désordonnées à grande distance. Il existe généralement une seule phase liquide pour un même matériau. Enfin, la phase gazeuse est caractérisée par un désordre à toute distance. Une seule phase gazeuse est possible par matériau. Il en est de même pour un plasma, qui est un gaz de particules chargées (électrons et ions), obtenu dans des conditions extrêmes par décharges électriques dans des gaz à des températures comprises entre quelques milliers et plusieurs millions de Kelvin. Le diagramme de Clapeyron ($P=f(V)$ à T fixé) ci-après (Figure 1.6), permet de distinguer les différents états de la matière du corps pur (voir Borel [5]) :

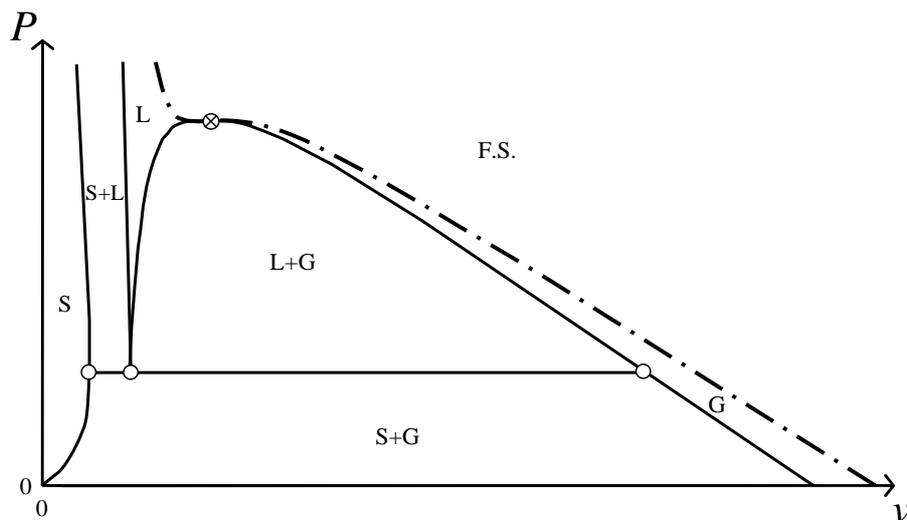


Figure 1.6 : Diagramme (P, v) d'un corps pur et distinction des phases gazeuse (G), liquide (L), solide (S) et du domaine hypercritique (F.S.) par les courbes de saturation (—) et l'isotherme critique (---) ; point triple (O) et point critique (X).

Notons que dans ce diagramme, nous avons tracé un « palier » à l'intérieur du dôme où les phases liquide et gazeuse du fluide coexistent pour une température sous critique donnée (à l'intérieur des courbes de saturation). Ce palier représente la pression de saturation, qui est la pression à laquelle le liquide et le gaz sont en équilibre. Les expériences montrent que le liquide et le gaz peuvent exister un peu au-delà de la courbe d'équilibre (Figure 1.7).

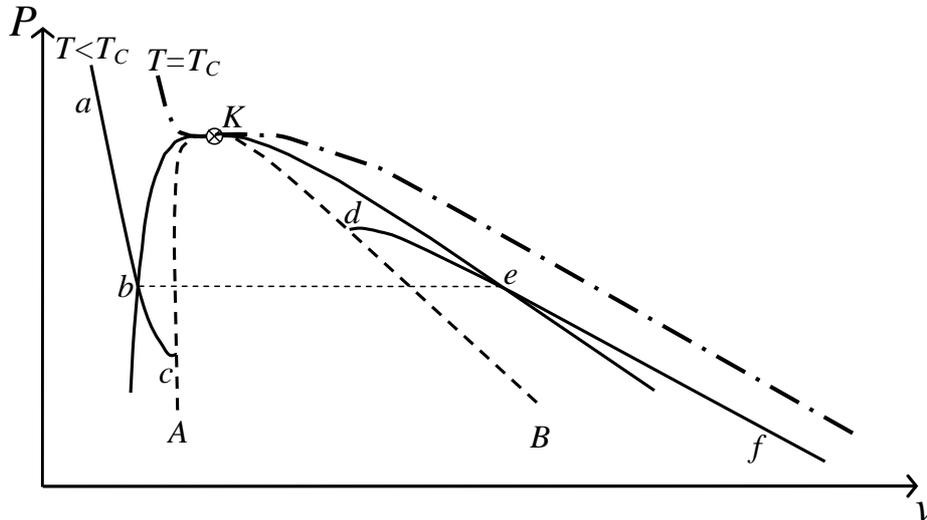


Figure 1.7 : Diagramme de Clapeyron d'un corps pur - précisions dans le domaine de coexistence des phases liquide et gazeuse du fluide.

Sur la Figure 1.7, le point e représente la vapeur saturante, où le fluide est entièrement gazeux, et le point b représente le liquide de saturation, où le fluide est entièrement liquide. En un point quelconque du palier \widehat{be} , la phase vapeur et la phase liquide coexistent, la vapeur possède les mêmes propriétés intensives que la vapeur saturante au point e , et le liquide possède les mêmes propriétés intensives que le liquide au point b . Les segments courbes \widehat{bc} et \widehat{de} de l'isotherme correspondent respectivement aux états de liquide surchauffé, et de vapeur sous-refroidie. Ce sont des états tous deux métastables, dans lesquels les inégalités thermodynamiques sont encore valables. La courbe spinodale \widehat{AKB} est le lieu des points terminaux des isothermes du liquide et du gaz sur (et à l'intérieur) de laquelle les inégalités thermodynamiques ne sont plus vérifiées. A l'intérieur de cette courbe, aucun corps ne peut être homogène (c'est-à-dire exister sous une seule phase).

1.2.2 Domaine hypercritique (ou « supercritique »)

Le domaine fluide regroupe l'ensemble des domaines liquide, gazeux, le domaine de coexistence liquide et gazeux, et le domaine hypercritique. Considérons une substance gazeuse pure donnée, si la densité est suffisante, il existe une température en dessous de laquelle, la condensation du gaz vers l'état liquide aura lieu : c'est la température de

condensation du fluide. De la même manière, il existe une température au-delà de laquelle cette condensation ne peut plus avoir lieu, c'est la température critique. Naturellement, le même constat est fait relativement à la pression, et définissant ainsi la pression critique. A pression et température critiques, la masse volumique des deux phases liquide et gazeuse de la substance pure est la même : c'est la masse volumique critique. La distinction entre liquide et gaz disparaît, et laisse place à la notion de fluide hypercritique (on trouve également dans la littérature l'appellation *fluide supercritique*). Le point critique de l'azote est caractérisé par les valeurs de pression P_c , de température T_c et de masse volumique ρ_c suivantes, obtenues expérimentalement par Nowak *et al.* [6] :

$$\begin{cases} P_c = 33,96 \text{ bar} \\ T_c = 126,19 \text{ K} \\ \rho_c = 313,30 \text{ kg.m}^{-3} \end{cases} \quad (1.3)$$

Au point critique, un corps pur est thermiquement et mécaniquement instable (voir Greer et Moldover [7], Sengers *et al.* [8]). En particulier, on distingue notamment le point d'inflexion de l'isotherme critique, qui implique :

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2} \right)_T (v = v_c, T = T_c) = 0, \text{ et } \left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_T (v = v_c, T = T_c) = 0 \quad (1.4)$$

Le coefficient de compressibilité isotherme χ_T qui traduit la variation relative du volume du fluide sous l'effet d'une pression appliquée à température constante, devient alors infini au point critique :

$$\chi_T = -\frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_T \xrightarrow{T=T_c, P=P_c} \infty \quad (1.5)$$

Sur le reste de l'isotherme critique, il est fini et positif : $\chi_T(T = T_c, P \neq P_c) > 0$. De nombreuses autres singularités apparaissent au point critique et dans le domaine hypercritique. En effet, considérons un système thermodynamique représentant le fluide à l'équilibre. Alors, si le système est entièrement liquide ou entièrement gazeux, l'ajout d'une quantité finie de chaleur à pression constante résulte en une augmentation finie de la température et du volume, la capacité calorifique à pression constante C_p est finie. Lorsqu'une quantité finie de chaleur est fournie à pression constante à un système en équilibre liquide-gaz, la chaleur latente d'évaporation constitue le « seuil » de chaleur à fournir afin que l'intégralité du liquide s'évapore, les capacités calorifiques du liquide et du gaz étant finies et constantes. En revanche, si le fluide est maintenu à la pression et la température critiques, il se

dilata infiniment (cf. l'analyse sur χ_T faite précédemment), on en déduit que la capacité calorifique à pression constante C_p est infinie au point critique (voir par exemple Rocard [9]).

Dans le domaine hypercritique, les propriétés du fluide varient continûment de celles proches du liquide à celles proches du gaz. Depuis la découverte de l'isotherme critique au XIX^{ème} siècle par De La Tour¹, les fluides supercritiques ont suscité beaucoup d'intérêt de la part de la communauté scientifique internationale. En particulier, depuis quelques décennies, de nombreux procédés industriels sont développés pour exploiter le pouvoir solvant des fluides supercritiques [10]. La figure 1.8 montre le diagramme (P, T) d'un corps pur.

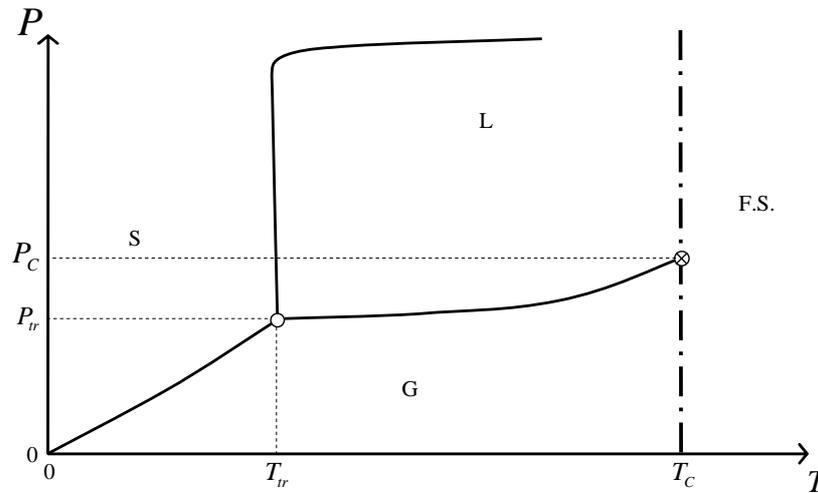


Figure 1.8 : Diagramme (P, T) du corps pur. Symboles : même légende que pour la Figure 1.6.

Le point triple de l'azote est caractérisé par la coexistence des 3 phases liquide, solide, et gazeuse et les valeurs de pression P_r et de température T_r suivantes (Nowak *et al.* [6]) :

$$\begin{cases} P_r = 12523\text{Pa} \\ T_r = 63,15\text{K} \end{cases} \quad (1.6)$$

On remarque que le domaine de coexistence des phases liquide et gazeuse bornée par deux courbes de saturations dans le diagramme (P, v) (Figure 1.6) se ramène à une seule courbe dans le diagramme (P, T) (Figure 1.8). Dans le diagramme (P, T) , la pression de saturation représente la pression à laquelle le liquide et le gaz sont à l'équilibre à température donnée. Et les courbes de saturations dans le diagramme (P, v) représentent les masses volumiques du liquide et du gaz qui sont différentes. Ces courbes se rejoignent au point critique, où il n'y a qu'une seule phase et donc qu'une seule masse volumique. Par exemple, pour l'azote, la pression de saturation est donnée en fonction de la température par Nowak *et al.* [6] . Lorsque les courbes de saturation sont franchies il y a un changement de phase (discontinu) alors que

¹ Charles Cagniard de Latour (1777 - 1859), ingénieur et physicien français.

lorsque l'isotherme critique est franchie, il n'y en a pas. Le fluide passe de liquide (ou gaz) à supercritique sans discontinuité.

1.2.3 Propriétés thermo-physiques de l'azote

Les propriétés physiques de l'azote évoluent de manière très importante lorsque la pression et la température varient sur une large plage de valeurs. L'azote est un fluide relativement bien référencé dans la littérature, et de nombreux auteurs se sont intéressés à mesurer ses différentes propriétés thermo-physiques depuis plusieurs décennies. Le NIST² (National Institute of Standards and Technology) regroupe plus de 14000 données expérimentales issues de différents auteurs. La Figure 1.9 montre le diagramme (P , h) de l'azote d'après les données du NIST (logiciel REFPROP® [11]).

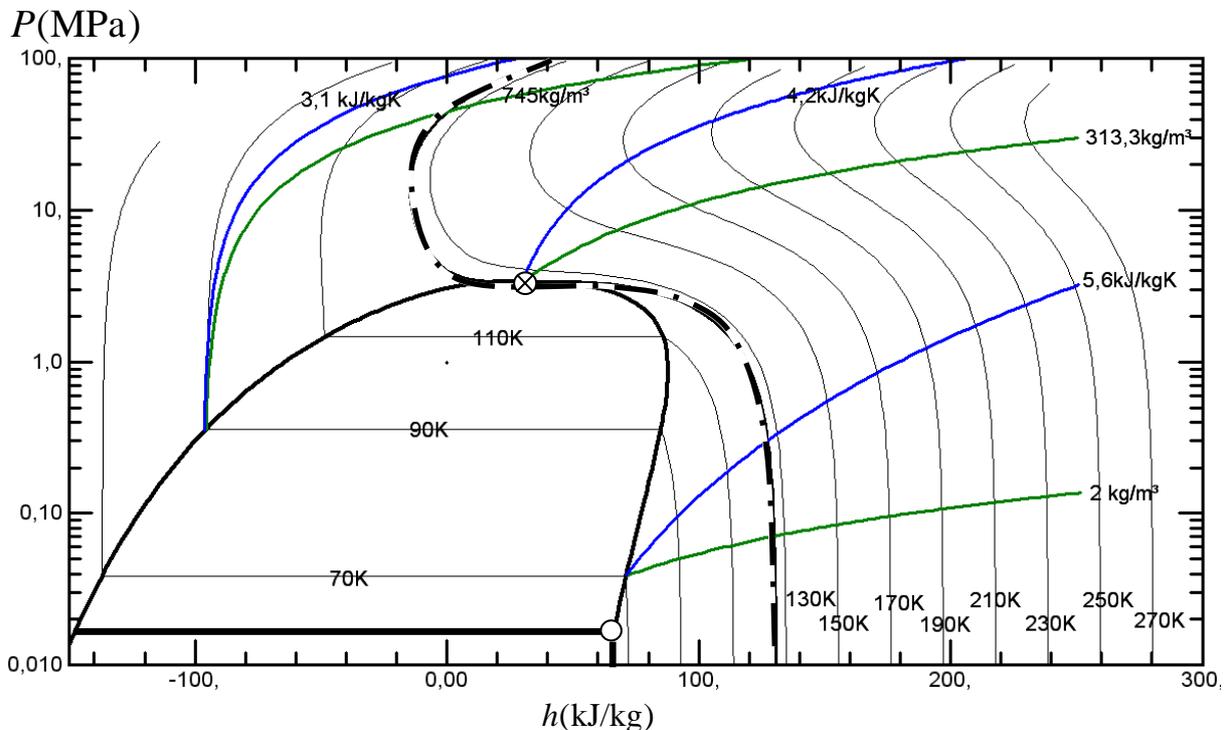


Figure 1.9 : Diagramme (P , h) de l'azote ; courbes de masse volumique constante (—) ; isentropes (—) ; courbes de saturation (—) ; isothermes (—) ; isotherme critique (—) ; point triple (○) et point critique (⊗).

Ce diagramme permet de constater que les propriétés varient bien continument lorsque l'isotherme critique est franchie, les isentropes et les courbes de masse volumique constante restant continues au travers de cette isotherme. Dans le domaine hypercritique (à droite de l'isotherme critique sur le diagramme), les propriétés de l'azote passent de celles proches du liquide à celles proches du gaz. Par exemple, la masse volumique de l'azote varie d'environ

² <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>

1 kg.m^{-3} à 830 kg.m^{-3} lorsque la pression varie respectivement de 10^5 Pa à 10^8 Pa aux abords de la température critique. Afin de simplifier ce diagramme et pouvoir le réutiliser par la suite, même pour d'autres substances, nous le schématisons (Figure 1.10).

Sur ce schéma apparaissent trois isothermes T_1 et T_2 (en plus de l'isotherme critique T_C) telles que $T_1 < T_C < T_2$, trois isentropes s_1, s_2, s_3 telles que $s_1 > s_2 > s_3$ et trois courbes de masse volumique constante ρ_1, ρ_2, ρ_3 telles que $\rho_1 < \rho_2 < \rho_3$. De plus, on distinguera sur le schéma le réservoir en amont de l'injecteur (où le fluide est à l'état i) et le milieu ambiant dans lequel est injecté l'azote (où le fluide est à l'état f), afin de constater des variations de la pression et la température lors de la détente (représentée grossièrement par une flèche).

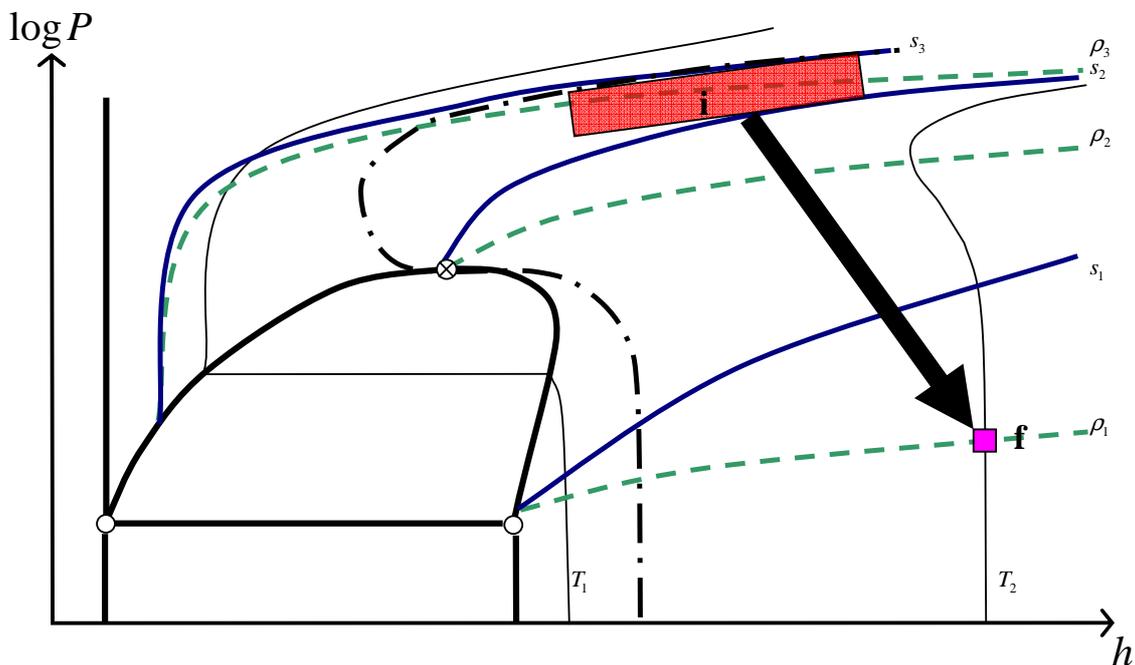


Figure 1.10 : Schématisation du diagramme (P, h) de l'azote initialement dans le réservoir (ensemble d'états initiaux envisagés **i**) qui se détend dans le milieu ambiant (état **f**); courbes de masse volumique constante (.....) avec $\rho_1 < \rho_2 < \rho_3$; courbes d'entropie constante (—) avec $s_1 > s_2 > s_3$; courbes de saturation (—); isothermes (—) avec $T_1 < T_C < T_2$ et isotherme critique (---); point triple (O) et point critique (X).

Dans le réservoir, le fluide se trouve dans le domaine hypercritique (comme l'indiquent les courbes de saturation et l'isotherme critique). Dans les conditions du milieu ambiant, le fluide se trouve également dans le domaine hypercritique. Il est alors crucial de savoir comment se comportent les propriétés de l'azote dans ce vaste domaine afin de connaître les transformations thermodynamiques subies par le fluide lors de la détente.

Le facteur de compressibilité Z d'un fluide permet de comparer les propriétés du fluide à celles du gaz parfait. Lorsque $Z=1$, le fluide peut être considéré comme idéal. D'ailleurs, pour le fluide idéal, les isothermes sur le diagramme (P, h) sont verticales. Il est défini par :

$$Z = P/\rho rT \quad (1.7)$$

Les variations du facteur de compressibilité de l'azote en fonction de la pression sont tracées sur la Figure 1.11 pour différentes isothermes.

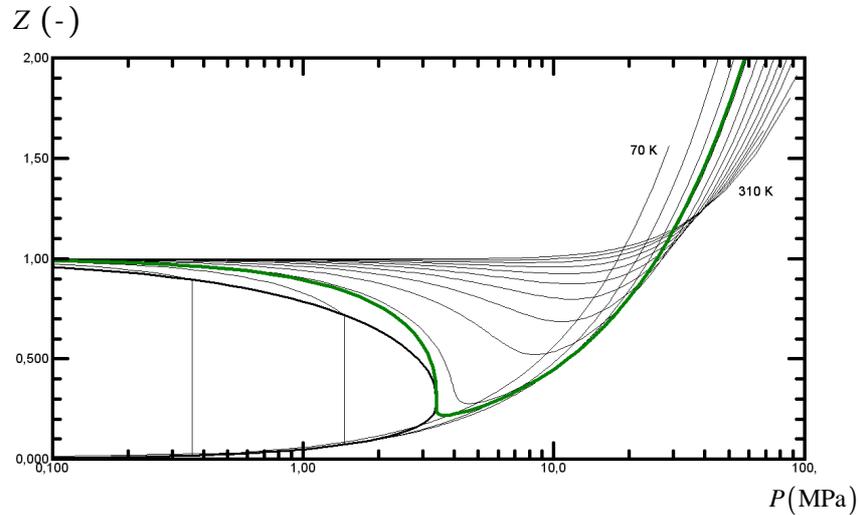


Figure 1.11 : Facteur de compressibilité de l'azote en fonction de la pression pour différentes températures de gauche à droite $T=70$ K à 310 K par pas de 20 K et l'isotherme critique (—); courbes de saturation (—).

On remarque que dès que la pression est suffisamment grande (quelle que soit la température), les propriétés de l'azote s'éloignent peu à peu de la configuration idéale.

La vitesse de propagation du son dans le fluide joue également un rôle capital dans un écoulement compressible (paragraphe 1.1). La Figure 1.12 représente les variations de la vitesse du son dans l'azote en fonction de la température pour différentes pressions. Dès que la température diminue vers la température critique à une pression donnée, la vitesse du son augmente dans l'azote.

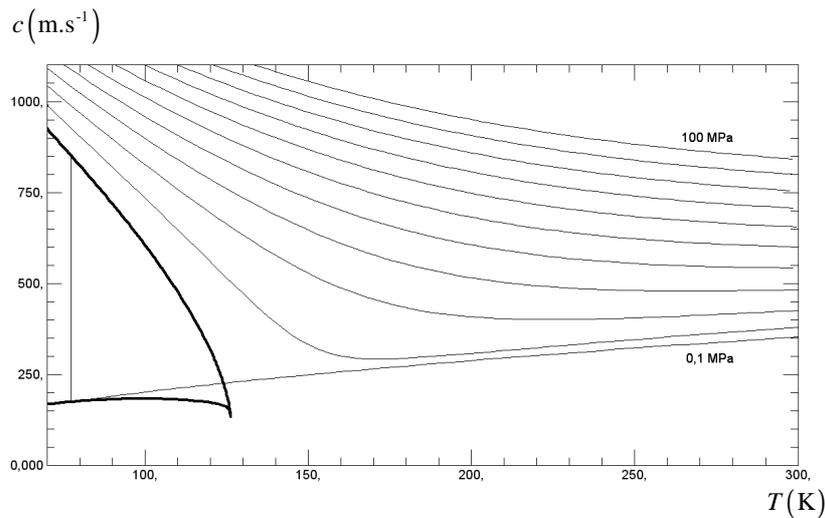


Figure 1.12 : Vitesse de propagation du son dans l'azote en fonction de la température pour différentes pressions de bas en haut : $P=0,1$ MPa, et $P=10$ MPa à 100 MPa par pas de 10 MPa; courbes de saturation (—).

1.2.4 Détente de Joule-Thomson

La détente de Joule-Thomson est souvent étudiée en thermodynamique, elle représente la détente que subit un fluide qui s'écoule dans un conduit comportant un rétrécissement brusque puis une augmentation rapide de la section transversale du conduit (Figure 1.13). Supposons qu'il n'y ait pas d'échange de chaleur entre le fluide et le milieu extérieur (écoulement adiabatique). On considère l'évolution d'une masse de fluide comprise, à un instant donné, entre la section S_1 placée en amont et S_2 placée en aval de l'étranglement. Après un certain intervalle de temps, ces sections se sont déplacées en S'_1 (éloignée de l_1 par rapport à S_1) et S'_2 (éloignée de l_2 par rapport à S_2). On note P_i , V_i , T_i , s_i , et h_i respectivement la pression, le volume, la température, l'entropie et l'enthalpie du fluide, où $i=1$ représente les propriétés en amont de l'étranglement, et $i=2$ en aval. Pour une détente, la pression et la densité du fluide sont plus faibles en aval qu'en amont ($P_2 < P_1$ et $V_2 > V_1$), ainsi $l_2 > l_1$.

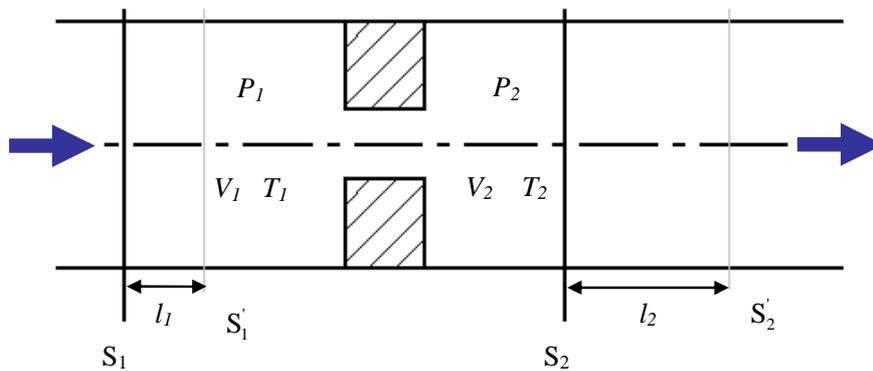


Figure 1.13 : Domaine d'étude d'une détente de Joule Thomson.

On montre, assez facilement, grâce au 1^{er} principe de la thermodynamique, que lors de la détente adiabatique, l'enthalpie totale du fluide est conservée. Cela ne signifie pas que l'enthalpie du fluide ne varie pas lors de l'écoulement. En effet, la diminution de la pression au travers de l'étranglement s'accompagne d'une accélération du fluide. Donc, l'énergie cinétique augmente, et par conséquent, l'enthalpie diminue lorsque le fluide entre dans l'étranglement. Inversement, lorsque la section de passage augmente à nouveau pour retrouver sa taille initiale, l'énergie cinétique diminue et l'enthalpie retrouve sa valeur initiale. La transformation de Joule-Thomson est irréversible, elle s'accompagne d'une augmentation d'entropie d'une valeur de :

$$s_2 - s_1 = \int_{P_2}^{P_1} \left(\frac{V}{T} \right) dP \quad (1.8)$$

Le coefficient de Joule-Thomson permet de relier les variations de la température aux variations de la pression dans l'écoulement isenthalpe, il est défini par :

$$\alpha_{JT} = \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_h = \frac{-1}{C_p} \left(\frac{\partial h}{\partial P} \right)_T \quad (1.9)$$

Ainsi, l'évolution de la température au travers de l'étranglement est donnée par la relation suivante, avec $P_2 < P_1$:

$$T_2 - T_1 = \int_{P_1}^{P_2} \alpha_{JT} dP = - \int_{P_2}^{P_1} \alpha_{JT} dP \quad (1.10)$$

Suivant les conditions de pression et de température, α_{JT} peut être positif ou négatif. Une valeur positive du coefficient implique une diminution de température du fluide ($T_2 < T_1$) lors du passage adiabatique de l'étranglement. La courbe reliant les points (P, T) pour lesquels $\alpha_{JT} = 0$ est appelée courbe d'inversion Joule-Thomson. La détermination expérimentale de la courbe d'inversion d'une substance requiert des mesures très précises de la capacité calorifique et des autres propriétés de la substance pour des conditions de pression et de température allant jusqu'à cinq fois la température critique et douze fois la pression critique. La

Figure 1.14 montre la courbe d'inversion de Joule-Thomson de l'azote. De plus, sur cette figure, un ensemble d'états amont (i) et aval (f) représentatifs des états initiaux et finaux de la détente que subit l'azote dans le procédé de traitement de surface étudié ont été représentés.

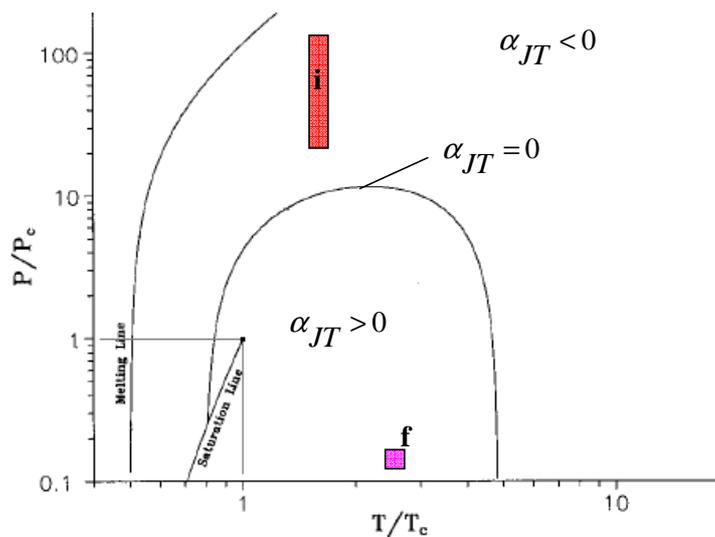


Figure 1.14 : Courbe d'inversion de Joule Thomson ($\alpha_{JT} = 0$) de l'azote dans le diagramme (P, T) selon le NIST ([11]) ; ensemble d'états initiaux (i) et finaux (f) envisagés dans le procédé de traitement de surface.

En considérant de tels états initiaux et finaux, on constate que si la détente de l'azote correspond à une détente de Joule Thomson, alors, celle-ci s'accompagne d'abord d'une diminution de température puis d'une augmentation de la température.

1.2.5 Bilan

Les caractéristiques du fluide ont été étudiées dans cette section. Il apparaît qu'entre les conditions d'injection envisagées et les conditions du milieu ambiant, les propriétés du fluide varient de manière très importante (par exemple, la masse volumique varie d'un rapport 800 entre ces deux états). De plus, de nombreuses singularités apparaissent au point critique.

Il est difficile de prédire *a priori* le « chemin » thermodynamique qui sera suivi lors de la détente que subit l'azote en passant de l'état initial dans les conditions d'injection à l'état final dans les conditions du milieu ambiant. Ces deux états appartiennent au domaine hypercritique du fluide où les propriétés varient continûment (sans changement de phase) en passant de celles proche du liquide à celles proche du gaz. Par ailleurs, de fortes singularités apparaissent au point critique. Si la détente de l'azote entre les états initiaux et finaux considérés s'apparente à une détente de Joule-Thomson, alors cette détente s'accompagnera d'abord d'un refroidissement puis d'un réchauffement.

En vue d'une modélisation de l'écoulement d'azote supercritique, les propriétés thermo-physiques du fluide devront être convenablement prises en compte. En fonction des conditions de pression et de température, celles-ci peuvent s'éloigner des propriétés du fluide parfait. Dans la section suivante, on étudie en détail les caractéristiques du jet compressible en analysant les données disponibles dans la littérature. On s'intéresse d'abord aux jets compressibles de fluide parfait. Ensuite, les aspects particuliers du jet compressible de fluide supercritique sont examinés.

1.3 Phénoménologie d'un jet compressible sous détendu de fluide parfait

La physique des jets compressibles, obtenus lorsqu'un fluide est injecté dans une atmosphère au repos au travers d'une section (la section de sortie d'une buse ou d'une tuyère par exemple), a été introduite au paragraphe 1.1. Il est apparu que cet écoulement est caractérisé par le rapport NPR (Nozzle Pressure Ratio) entre la pression statique du fluide dans la section de sortie du jet et la pression statique du milieu dans lequel le fluide est injecté. En particulier, pour $NPR > 1$, l'écoulement correspond à un jet sous détendu. Dans ce paragraphe, nous détaillons la structure du jet sous détendu de fluide parfait obtenu à l'aval de la section d'ajutage (à partir de laquelle est injecté le fluide). En général, cette section est la section critique (le jet est sonique à l'ajutage). Ce paragraphe est particulièrement dédié au fluide parfait, c'est-à-dire au fluide dont le facteur de compressibilité est proche de 1 (voir paragraphe 1.2 précédent). Selon les conditions de pression et de température, le fluide parfait peut être gazeux ou hypercritique. Pour simplifier, on le dénommera gaz par la suite. Dans les secteurs de l'aéronautique et de l'aérospatiale, les jets sous détendus (soniques ou supersoniques) se retrouvent dans l'écoulement à l'aval du corps propulsif, qu'il s'agisse d'un moteur de fusée ou d'un moteur d'avion à flux supersonique (voir Ferri [12]). De nombreuses applications industrielles très variées utilisent également les jets sous détendus. Par exemple, dans les techniques émergentes de découpe de matériau par laser (utilisé pour le prototypage rapide, l'usinage des capteurs solaires et de certains composants électroniques,...), les performances et l'efficacité de la découpe est intimement liée au jet de gaz servant à minimiser le dépôt d'impuretés sur le substrat et à refroidir le faisceau laser (voir Steen [13], Chen *et al.* [14], Mai et Lin [15]). Dans un autre procédé de traitement de surfaces, les jets sous détendus apparaissent dans les sprays thermiques HVOF (High Velocity Oxygen Fuel) [16]. Ils interviennent également dans le forage de puits pétrolifères [17].

Ainsi, à l'aide des données de la littérature, nous étudierons dans ce paragraphe les aspects phénoménologiques fondamentaux liés aux jets sous-détendus de fluide parfait et en particulier le détail de la structure d'ondes de chocs et de détente qu'il contient. Deux configurations sont généralement distinguées dans la littérature : le jet libre (non impactant) et le jet impactant.

Les effets de fluide réel, qui apparaissent lorsque le facteur de compressibilité ne vaut plus 1, sont étudiés dans le paragraphe 1.4 suivant.

1.3.1 Caractéristiques du jet libre

1.3.1.1 Influence du rapport de pression

La structure du jet sous-détendu varie de manière très importante en fonction du rapport NPR . Les premières études de ce type d'écoulement datent des années 50 (voir par exemple les analyses expérimentales et théoriques d'Adamson *et al.* [18], et d'Ashkenas *et al.* [19]). En France, récemment, Lehnasch et Bruel [20], Dauplain [21] ont modélisé numériquement des jets supersoniques sous détendus de gaz parfaits pour différents rapports NPR . Les configurations étudiées dans ces travaux étaient des configurations de jet libre (non impactant) et pour des rapports de pression $NPR < 20$. Ces travaux montrent l'influence du rapport de pression sur la structure de l'écoulement.

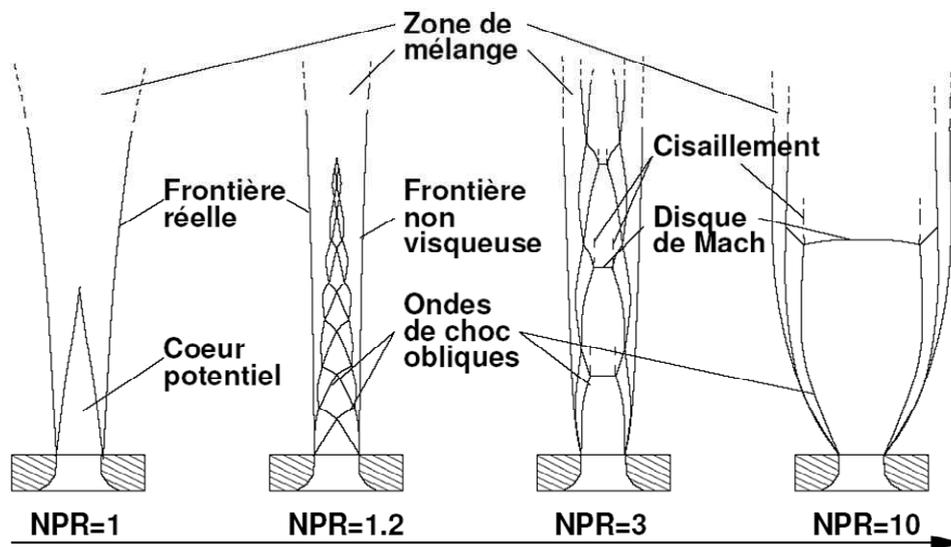


Figure 1.15 : Evolution de la structure du jet sous détendu en fonction du rapport NPR (figure tirée de la thèse de Dauplain [21]).

Il apparaît que la structure de l'écoulement est fortement dépendante de NPR (Figure 1.15) puisqu'elle passe d'un jet où seule la viscosité amortit l'énergie contenue dans le jet idéalement détendu ($NPR=1$) à un jet où une structure de chocs en diamants équilibre la pression dans le cœur potentiel avec le milieu ambiant ($NPR=1,2$).

Lorsque $3 < NPR < 10$, l'écoulement se détend très fortement et s'accélère (à des vitesses supersoniques) à la sortie de l'orifice, une onde de choc forte apparaît alors, le disque de Mach, au travers de laquelle l'écoulement se re-comprime et devient subsonique. Le détail de la structure du jet supersonique sous détendu avec $3 < NPR < 10$ est donné par la figure suivante, conformément à l'étude pionnière de Donaldson *et al.* [22], [23].

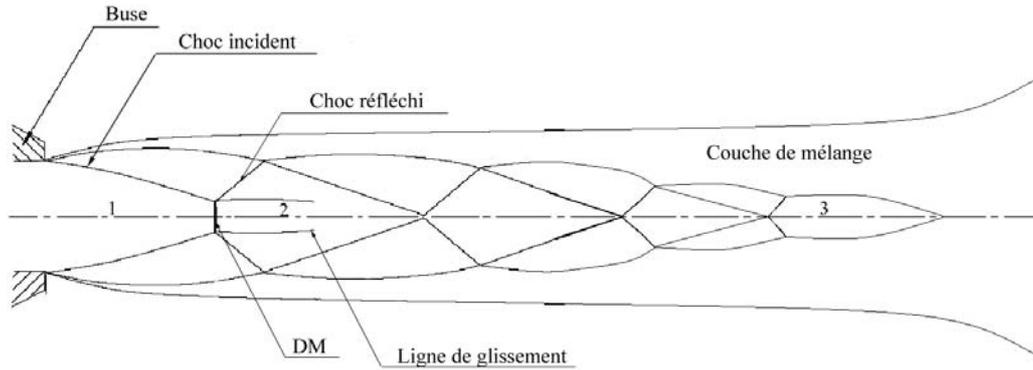


Figure 1.16 : Structure du jet sous détendu à $NPR=5$ (Donaldson *et al.* [22], [23]) ; DM : Disque de Mach, 1 : Zone de détente initiale, 2 : Zone subsonique, 3 : fin du cœur du jet.

Cette structure de l'écoulement a clairement été identifiée par de nombreuses observations expérimentales, qui se sont d'abord basées, historiquement, sur des techniques classiques d'ombroscopie ou de strioscopie (sensibles aux variations d'indice de réfraction, i.e. de masse volumique, voir Shirai *et al.* [24]), puis sur des techniques plus poussées comme la diffusion Rayleigh (qui permettrait d'obtenir des mesures de masse volumique [25], mais dont la précision et la complexité de mise en œuvre nécessite encore de nos jours des recherches afin de l'adapter de manière stricte aux jets sous détendus). Par exemple, les observations de Dam *et al.* [26], Yip *et al.* [27], Timmerman *et al.* [28] permettent de caractériser expérimentalement la structure de l'écoulement et de constater de l'évolution de cette structure en fonction de NPR de manière essentiellement qualitative. En revanche, une étude expérimentale quantitative sur des écoulements supersoniques en général reste encore délicate de nos jours. En effet, l'introduction de sondes physiques peut altérer considérablement l'écoulement. Et inversement, les conditions sévères auxquelles sont soumises les sondes dans ce type d'écoulement, mènent rapidement à leur endommagement. Sans compter que les quantités mesurées dans un écoulement compressible demandent à être interprétées avec précaution. Toutefois, quelques mesures de type intrusives ont pu être menées avec succès sur des jets supersoniques sous détendus. Par exemple, Zapryagaev *et al.* [29], [30] ont étudié la structure de jets supersoniques non parfaitement détendus (sous-détendu et sur-détendu) débouchant dans l'air libre à la sortie d'une tuyère convergente-divergente à l'aide de sondes de Pitot. Ils ont obtenu l'évolution de la pression dynamique en fonction de la distance axiale par rapport à la section de sortie du jet et la distance radiale par rapport à l'axe du jet. Cela a permis de distinguer les différentes zones de la structure de choc et de détente et les instabilités les séparant. Les méthodes optiques, non-intrusives, permettant de fournir des données quantitatives pertinentes sont généralement complexes et nécessitent une mise en

œuvre poussée. Cependant, parmi les rares études quantitatives à l'aide de techniques de diagnostic optique, quelques unes ont pu être menées avec succès sur des jets supersoniques sous détendus. Par exemple, la spectroscopie Raman a été utilisée pour caractériser un jet supersonique sous détendu. Woodmansee *et al.* [31] ont utilisé la spectroscopie Raman dans sa variante CARS (Coherent AntiStokes Raman Scattering). La Figure 1.17 montre une observation par ombroscopie du jet sonique sous-détendu à $NPR=3,36$ par Foglesong *et al.* [32] et les mesures de pression et de température sur l'axe du même jet obtenues par l'analyse du spectre de la lumière diffusée par effet Raman avec la technique CARS utilisée par Woodmansee *et al.* [31].

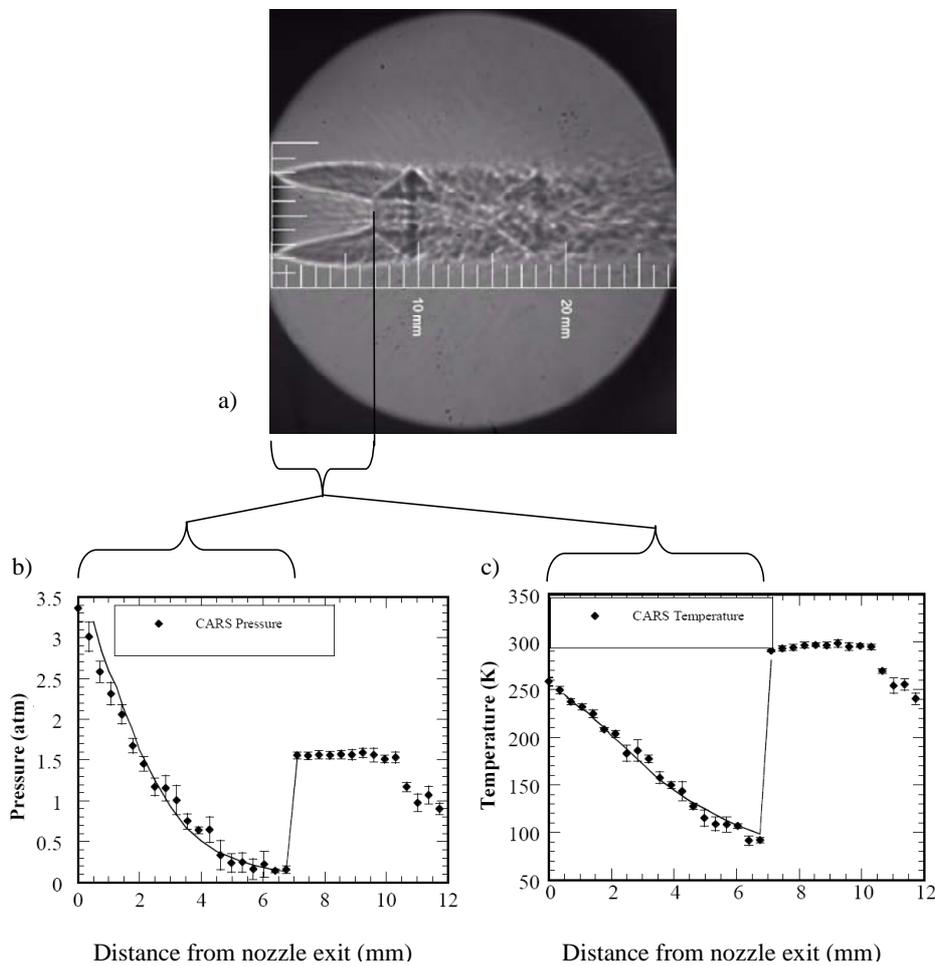


Figure 1.17 : Jet sonique sous d étendu à $NPR=3,36$. (a): Ombroscopie de Foglesong *et al.* [32]; (b): Mesures des variations de pression, et (c): de température, en fonction de la distance sur l'axe du jet (Woodmansee *et al.* [31] à l'aide de la méthode CARS).

La méthode CARS consiste à focaliser avec une lentille un faisceau de lumière monochromatique (comme un faisceau laser) sur un volume de mesure de faibles dimensions au sein de l'écoulement étudié, et à analyser la lumière diffusée (son intensité est mesurée avec un détecteur). La diffusion Raman est un mode de diffusion de la lumière qui n'est pas

élastique, de l'énergie est échangée entre un photon incident et le milieu diffusant. Ainsi, la lumière diffusée n'a pas la même longueur d'onde que la lumière incidente. Plus précisément, on parle de décalage Stokes lorsque le milieu absorbe de l'énergie et lorsque la longueur d'onde de la lumière diffusée est décalée vers le rouge (énergie plus petite, longueur d'onde plus grande). Dans ce cas, un phonon est créé. A l'inverse, on parle de décalage anti-Stokes lorsque le milieu fournit de l'énergie au photon incident. Dans ce cas, un phonon est absorbé. La longueur d'onde de la lumière diffusée est décalée vers le bleu (énergie plus grande, longueur d'onde plus petite). Au final, c'est l'analyse du spectre de la lumière diffusée par effet Raman qui permet de mesurer la pression, la température et même la vitesse (en exploitant l'effet Doppler capturé par la technique).

D'après l'étude de Woodmansee *et al.* [31], il apparaît que dans le cœur du jet, dans la zone de détente qui se situe dès la sortie de la buse jusqu'au disque de Mach, la pression chute très fortement (de plusieurs ordres de grandeur) de même pour la température. Au travers du disque de Mach, la pression et la température re-augmentent. Dans la zone subsonique, la pression et la température se stabilisent. En aval de cette zone, où l'écoulement est à nouveau supersonique, la pression et la température s'alignent aux valeurs prescrites dans la chambre de détente. En fait, l'écoulement est successivement accéléré, refroidi et détendu puis ralenti, réchauffé et comprimé jusqu'à atteindre l'équilibre dans la zone développée.

Pour $NPR > 10$, on trouve peu de données disponibles dans la littérature. Cependant, il apparaît que la structure de l'écoulement dans la zone de détente initiale jusqu'au disque de Mach est sensiblement identique (voir Yuceil *et al.* [33]). L'intensité extrêmement importante de l'onde de choc droite annule toute oscillation à l'aval du choc. Selon l'importance du rapport NPR , le disque de Mach peut s'incurver dans le sens de l'écoulement.

1.3.1.2 Détail de la structure du jet

D'après les constats précédents, le jet se détend très fortement dès la sortie de la buse. De plus au travers du disque de Mach de forts gradients de pression et de température (i.e. de masse volumique) sont observés. Il s'avère très utile de pouvoir prédire la position et le diamètre du disque de Mach avant de faire le calcul numérique des équations sur tout le domaine. En effet, cela permettra d'avoir un premier maillage adapté au niveau de l'onde de choc et ainsi d'en faciliter la convergence. Comme nous l'avons vu, plusieurs travaux d'études, effectués par différents auteurs, ont permis de décrire la structure des jets sous détendus. Différents auteurs ont proposé des corrélations donnant la position (x_{DM}) et le diamètre (D_{DM}) du disque de Mach en fonction de NPR . Afin d'obtenir des résultats

comparables, il est commun d'adimensionner la position et le diamètre du disque de Mach par le diamètre de l'orifice d'injection D_e . Par exemple, Cumber *et al.* [34] ont obtenu des corrélations valables pour $NPR < 40$ par modélisation numérique, et Palmer et Hanson [35] ont obtenu des résultats valables pour $NPR < 600$ avec la méthode des caractéristiques. Ashkenas et Sherman [19] obtiennent une formule de régression basée sur des expérimentations pour x_{DM}/D_e à partir d'un jet libre issu d'une buse sonique axisymétrique, et donnent une estimation de D_{DM}/D_e qui vaut 1,26 et 10,17 pour $NPR=10$ et 530 respectivement. Palmer et Hanson [35] fournissent également des courbes de fitting (interpolation polynomiale d'ordre 4) sur les données expérimentales de Love *et al.* [36] et Vick *et al.* [37] pour D_{DM}/D_e . La Figure 1.18 donne l'évolution du diamètre et de la position du disque de Mach en fonction de NPR d'après ces différents auteurs et une régression de type puissance est effectuée sur les données de Palmer et Hanson [35] pour $NPR > 100$ pour la position et le diamètre du disque de Mach, données respectivement par :

$$x_{DM}/D_e = 0,809NPR^{0,538} \quad (1.11)$$

$$D_{DM}/D_e = 0,501NPR^{0,560} \quad (1.12)$$

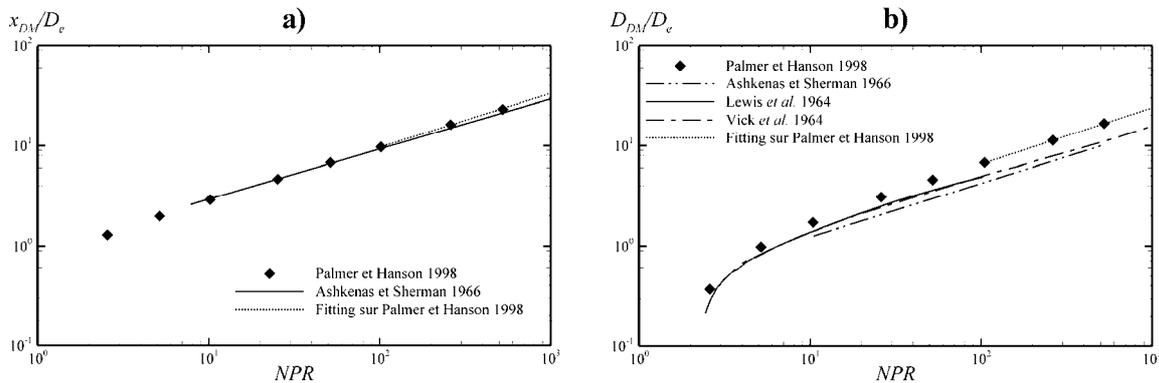


Figure 1.18 : Position x_{DM}/D_e (a), et diamètre D_{DM}/D_e (b) du disque de Mach en fonction du rapport NPR pour un jet sonique d'air (Palmer et Hanson [35], Ashkenas et Sherman [19], Love *et al.* [36] et Vick *et al.* [37]).

Notons toutefois, que d'autres paramètres influent également sur la position et le diamètre du disque de Mach (de manière moins importante que le rapport NPR) : le nombre moyen de Mach dans la section de sortie du jet M_e , ou encore le rapport des chaleurs spécifiques sur la section de sortie du jet γ_e . Contrairement aux résultats disponibles dans la littérature pour l'évolution du diamètre du disque de Mach et de sa position en fonction du rapport NPR , seules des données qualitatives permettent de prédire que le disque de Mach s'éloigne de la section de sortie du jet (i.e. augmente) et que son diamètre diminue (i.e. diminue) lorsque M_e augmente [34].

1.3.1.3 Influence de la géométrie de la buse

En toute rigueur, le rapport NPR ne permet pas à lui seul de déterminer avec exactitude la structure du jet. En particulier, Addy [38] et Otobe *et al.* [39] ont montré l'influence de la géométrie de la buse (profil de buse) sur la structure du jet sous-détendu. La forme du profil de la buse conditionne l'évolution de la couche limite et celle du profil de vitesse dans la buse, et influence alors les conditions sur la section de sortie de la buse et donc la structure du jet. La Figure 1.19 montre la variation de la frontière du jet pour différents NPR pour trois profils de buses différents d'après les résultats d'Otobe *et al.* [39]. De manière globale, le profil de la vitesse dans la section de sortie de la buse est différent pour une buse convergente profilée (profil relativement plat) par rapport à une buse convergente à section droite (rétrécissement brusque de la section de passage du fluide). Lorsque le profil de buse tend vers une section droite, le développement de la couche limite est réduit, les lignes de courant se contractent à l'entrée de la buse, ce qui a tendance à réduire la section efficace de passage de l'écoulement. A la sortie de la buse, l'angle d'épanouissement du jet diminue lorsque la section de passage diminue, la zone initiale de détente s'allonge (x_{DM} augmente) et le diamètre du disque de Mach D_{DM} diminue.

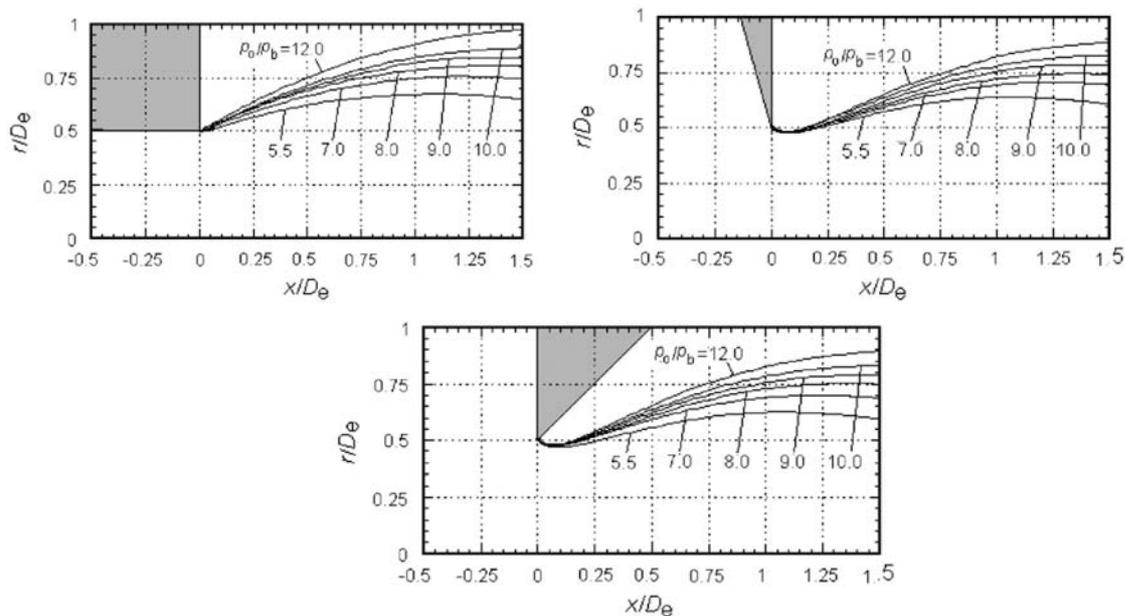


Figure 1.19 : Evolution de la frontière du jet axisymétrique sous détendu de gaz parfait en fonction du rapport de pressions totales p_0/p_b entre la section de sortie du jet ($x/D_e=0$) et le milieu ambiant pour différents profils de buse selon Otobe et al. [39].

1.3.1.4 Instationnarités et turbulence

Il est apparu que dans la zone de détente initiale du jet, jusqu'au disque de Mach, les effets de la viscosité sont négligeables. Toutefois, la turbulence naît à la base de l'orifice de sortie du jet (sur les bords de l'injecteur) et se développe à la périphérie du jet jusqu'à l'axe. Au-delà, le jet devient alors complètement turbulent. L'instabilité de Kelvin-Helmholtz est caractéristique d'une couche de mélange où règne un fort cisaillement entre les deux courants de fluide de vitesses différentes. Elle se présente en fait comme une succession d'instabilités : tout d'abord par l'apparition de tourbillons périodiques (dans le temps et dans l'espace), puis ces tourbillons interagissent entre eux, ce qui provoque une modification locale de la périodicité, et enfin des structures turbulentes tridimensionnelles apparaissent. De plus, dès la sortie de la buse, suite à l'intense détente du jet, il règne un fort gradient de vitesse qui peut induire des effets de force centrifuge et courber les lignes de courant de l'écoulement. Ces instabilités donnent naissance à des tourbillons longitudinaux de Taylor-Görtler. La taille de ces structures tourbillonnaires croît par entraînement du fluide ambiant, pendant qu'elles sont convectées vers l'aval (voir Zapryagaev *et al.* [40]). L'interaction de ces structures tourbillonnaires avec la structure de chocs est d'ailleurs à l'origine de la nature particulièrement instationnaire du jet fortement sous-détendu (elle génère des perturbations de pression). La couche de mélange du jet est alors constituée d'un nombre fini de tourbillons longitudinaux de Taylor-Görtler contrarotatifs (voir Figure 1.20).

Il en résulte qu'en fonction du rapport NPR et de la position des chocs dans le jet, différents types de couplage pourront apparaître et éventuellement déstabiliser complètement le jet en aval.

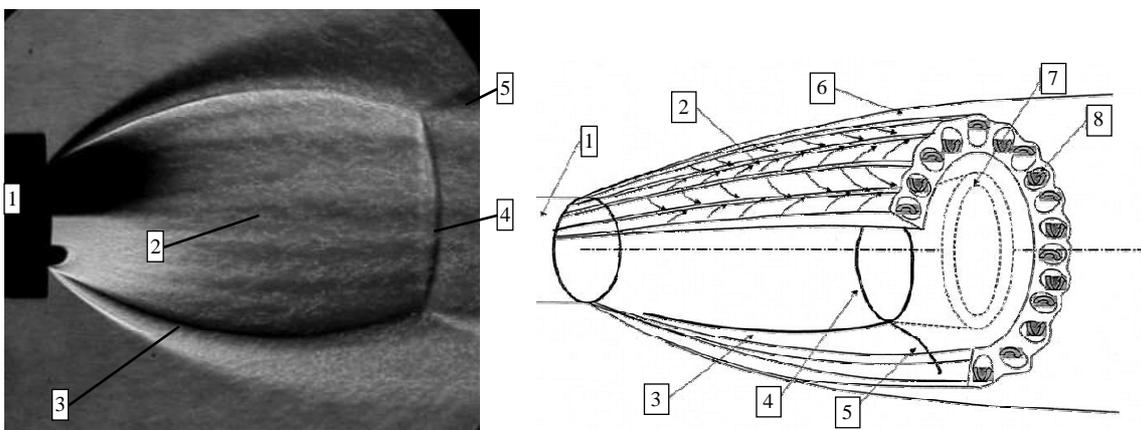


Figure 1.20 : Strioscopie du jet supersonique sous-détendu ($NPR=10$, $M_e=1,5$) d'après Zapryagaev *et al.* [40], et schématisation de la structure du jet : **1**: buse, **2**: couche tourbillonnaire de structures longitudinales, **3**: choc incident, **4**: disque de Mach, **5**: choc réfléchi, **6**: couche de mélange du jet (couche de cisaillement), **7**: couche de mélange du disque de Mach, **8**: un des tourbillons de Taylor-Görtler qui compose la couche **2**.

1.3.2 Impact normal d'un jet sous détendu de gaz sur une plaque plane

Pour des jets supersoniques sous-détendus en impact normal sur une surface plane, le rapport NPR n'est pas le seul paramètre d'influence de l'écoulement. En effet, dans la configuration en impact, le rapport NPR et la distance d'impact x_p/D_e (qui représente en fait le rapport adimensionnel entre : la distance x_p entre l'orifice de sortie du jet et la plaque plane impactée perpendiculairement, et le diamètre de buse D_e) influencent de manière combinée la structure du jet. Si le rapport NPR ou le nombre de Mach est suffisamment grand pour une distance d'impact donnée, un choc normal à l'écoulement peut apparaître près de la paroi impactée. Celui-ci peut s'ajouter à la structure de choc proche de la sortie de la buse. En aval de ce choc, l'écoulement est subsonique et une bulle de recirculation peut apparaître (Donaldson et Snedeker [22], [23], Rahimi *et al.* [41], et Phalnikar *et al.* [42], Ladd *et al.* [43]). De même, à NPR donné, l'impact peut se situer dans le cœur du jet en fonction de la distance d'impact x_p/D_e . La structure du jet étant particulièrement complexe dans le cœur du jet où des ondes de chocs et de détente interviennent pour égaliser la pression du jet à la pression du milieu ambiant, l'écoulement proche de l'impact va également dépendre de la distance d'impact x_p/D_e . Par exemple, Mitchell *et al.* [44] ont effectué des observations à l'aide d'ombroscopie du jet supersonique sous détendu impactant perpendiculairement sur une surface plane (Figure 1.21a), la structure de l'écoulement est schématisée (Figure 1.21b) et la bulle de recirculation qui apparaît en aval du disque de Mach est détaillée (Figure 1.21c).

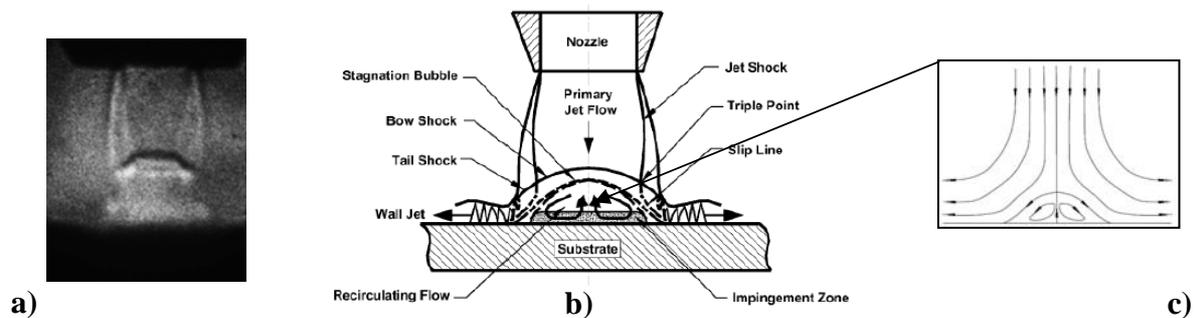


Figure 1.21 : Étude du jet sous détendu ($NPR=5$, $M_e=1,83$) de Mitchell *et al.* [44] (a) Ombroscopie, (b) Structure du jet, (c) Détail des lignes de courant dans la zone d'impact.

La bulle de recirculation a un rôle capital dans l'écoulement proche de la paroi d'impact et notamment sur le profil de pression, ainsi que sur le transfert thermique sur la paroi impactée. En effet, lorsque l'impact a lieu en aval du disque de Mach, dans le cœur potentiel du jet, la pression dynamique dans la région subsonique est plus petite que celle dans la région supersonique (dans la couche de mélange du jet). Ainsi, le point d'arrêt central (correspondant à l'intersection entre la paroi et l'axe du jet, soit en $r/D_e = 0$ à $x=x_p$) n'est plus

le point où la pression est maximale sur la surface impactée lorsque d'une bulle de recirculation existe dans la zone proche de l'impact. Ce maximum est situé sur le contour (formant un anneau) de la bulle de recirculation. L'allure typique des profils de pressions observés sur la surface d'impact d'un jet sous-détendu est donnée sur la Figure 1.22.



Figure 1.22 : Allure du profil de pression adimensionnée par la pression d'éjection P/P_e sur la surface impactée (en $x=x_p$) par un jet sous-détendu en fonction de la position radiale r/D_e : (a) sans bulle de recirculation ; (b) avec la présence d'une bulle de recirculation à l'impact.

Concernant le transfert de chaleur sur la surface impactée, les phénomènes entrant en compétition sont tout aussi nombreux. Contrairement au jet subsonique, la seule vitesse du jet (caractérisée par le nombre de Reynolds), n'est pas seule à intervenir dans le transfert de chaleur à l'impact. En effet, le nombre de Reynolds est fonction du rapport de pression NPR pour le jet sous-détendu et comme l'écoulement peut être localement supersonique, le nombre de Mach va également intervenir. Ainsi, il y a une influence conjointe du rapport NPR et de la distance impact x_p/D_e sur le transfert de chaleur. Par exemple, l'étude expérimentale de Rahimi *et al.* [41] montre que les profils radiaux de la température de la paroi adiabatique varient suivant la distance de projection x_p/D_e . En particulier, lorsqu'une bulle de recirculation apparaît, le constat est le même que pour la pression, le transfert de chaleur est maximal sur le contour de la bulle. L'analyse numérique de Cumber *et al.* [45] a permis de retrouver ces caractéristiques pour $NPR < 2$.

Outre ces phénomènes soulignant l'influence conjointe du rapport NPR et de la distance d'impact x_p/D_e , des interactions instationnaires entre la structure de chocs et l'impact et des phénomènes acoustiques, peuvent apparaître et devenir importants (voir Powell [46], Alvi et Iyer [47], et Kim et Park [48]). Ces phénomènes peuvent causer des dommages par fatigue sur l'injecteur. Expérimentalement, en se référant à l'étude de Rahimi *et al.* [41], les auteurs ont remarqué que pour certaines combinaisons de valeurs de rapport de pressions et de distance de tirs, le jet devient très instable. Dans ces conditions, des variations de températures allant jusqu'à 4 K ont été enregistrées alors que pour un jet stable, ces variations ne dépassaient pas 0,1 K.

1.3.3 Bilan

Dans cette section, nous avons détaillé la structure du jet sous-détendu (sonique et supersonique) de fluide parfait obtenu à l'aval de la section d'ajutage. Selon les conditions de pression et de température, le fluide parfait peut être gazeux ou hypercritique, il est caractérisé par un facteur de compressibilité très proche de 1. Pour la configuration du jet libre (sans impact), les caractéristiques d'un jet sous-détendu de gaz sont relativement bien connues pour des NPR relativement modérés ($NPR < 20$) grâce à des études expérimentales et numériques disponibles dans la littérature. Pour la configuration du jet en impact normal sur une surface plane, l'influence conjointe du NPR et de la distance d'impact x_p/D_e (ou distance de projection) sur la structure du jet semble encore mal appréhendée.

Plus loin dans ce travail, nous étudierons essentiellement, par simulation numérique, les propriétés du jet supersonique sous-détendu en impact en raison de son implication dans le procédé de traitement de surface étudié. Toutefois, comme la configuration du jet libre est bien plus documentée, un tel jet sera caractérisé et comparé aux résultats de la littérature pour un rapport de pression déjà étudié (par exemple $NPR=10$). Cela permettra de valider les calculs (paragraphe 4.2). Ensuite, la configuration du jet impactant sur une surface plane sera abordée pour différents NPR ($100 < NPR < 1000$) et différentes distances de projection $25 < x_p/D_e < 200$ (paragraphe 4.3).

Au paragraphe 1.2, les caractéristiques de l'azote ont été étudiées et il est apparu que les propriétés du fluide varient de manière très importante entre l'état initial (en amont de la buse) et l'état final (dans les conditions du milieu ambiant) de la détente correspondant à une configuration typique utilisée dans le traitement de surface par jet d'azote. C'est pourquoi, avant de détailler les différents éléments permettant une analyse numérique du jet, il nous semble primordial de caractériser les effets de fluide réel, qui apparaissent lorsque le facteur de compressibilité ne vaut plus 1, dans le jet sous-détendu. Ceux-ci sont étudiés dans le paragraphe suivant.

1.4 Phénoménologie d'un jet compressible de fluide réel

Il a été montré précédemment (paragraphe 1.2) que dans le domaine hypercritique, les propriétés du fluide varient continument de celles proches du gaz à celles proches du liquide. Ainsi, lorsque la pression d'injection devient suffisamment grande, des effets de fluide réel peuvent également apparaître et influencer l'écoulement obtenu en sortie de buse. De plus, lorsqu'un gaz qui n'est pas suffisamment pur ou saturé (lorsqu'il contient de la vapeur d'eau par exemple) est injecté dans une atmosphère au repos, une phase liquide peut apparaître par condensation dans le jet sous détendu. Ceci se produit notamment dans le cas des jets froids où la température chute en amont du disque de Mach (voir par exemple Cinar *et al.* [49], Otope *et al.* [50]).

1.4.1 Injection de fluide supercritique

On s'intéresse ici aux phénomènes liés à l'injection d'un fluide supercritique dans un milieu ambiant au repos (généralement à l'état gazeux, ou dans le domaine hypercritique proche du gaz). Ce type d'écoulement suscite l'intérêt d'études scientifiques (principalement numériques) depuis quelques années notamment grâce à des applications industrielles dans les secteurs agro-alimentaire et pharmaceutique. En effet, le procédé RESS (Rapid Expansion of Supercritical Solution) permet de générer des poudres fines et des microparticules de produits organiques lorsque ces produits sont injectés au travers d'une buse supersonique, sous forme dissoute dans un fluide supercritique (principalement le CO_2) et formant ainsi une solution supercritique. Par exemple, Ksibi *et al.* [51] et Ben Moussa *et al.* [52] ont étudié, par simulation numérique, le jet résultant de la détente de CO_2 sous pression et température supercritiques au travers d'une buse cylindrique dans une chambre remplie de CO_2 au repos. Ils montrent que l'écoulement est fortement accéléré dès la sortie de la buse jusqu'à une vitesse supersonique du fait de la chute importante de pression (jusqu'à une pression inférieure à la pression dans la chambre). Le fluide, se re-comprime ensuite, au travers d'une onde de choc forte, le disque de Mach, de façon à s'aligner à la pression de la chambre, sa vitesse passe brutalement de supersonique à subsonique. Suivant les conditions d'injections, différentes cellules de chocs peuvent apparaître ensuite au travers desquelles l'écoulement est successivement détendu et accéléré puis comprimé et ralenti. En périphérie radiale de ce cœur potentiel du jet, la couche de cisaillement, qui naît au niveau de l'orifice de sortie de la buse, croît et augmente le mélange entre le fluide au repos dans la chambre et le fluide injecté. Un résultat important de cette étude, est qu'au sein du jet issu de la détente du fluide supercritique aucun changement de phase n'a été détecté par le modèle utilisé. Cette détente fait passer le

fluide d'un état initial i à un état final f qui ont été reportés dans le diagramme (P, h) du CO_2 de la Figure 1.23 et obtenu selon les données du NIST ([11]). La détente est schématisée à titre indicatif par la flèche qui ne représente pas le chemin de la transformation thermodynamique subie par le fluide lors de la détente.

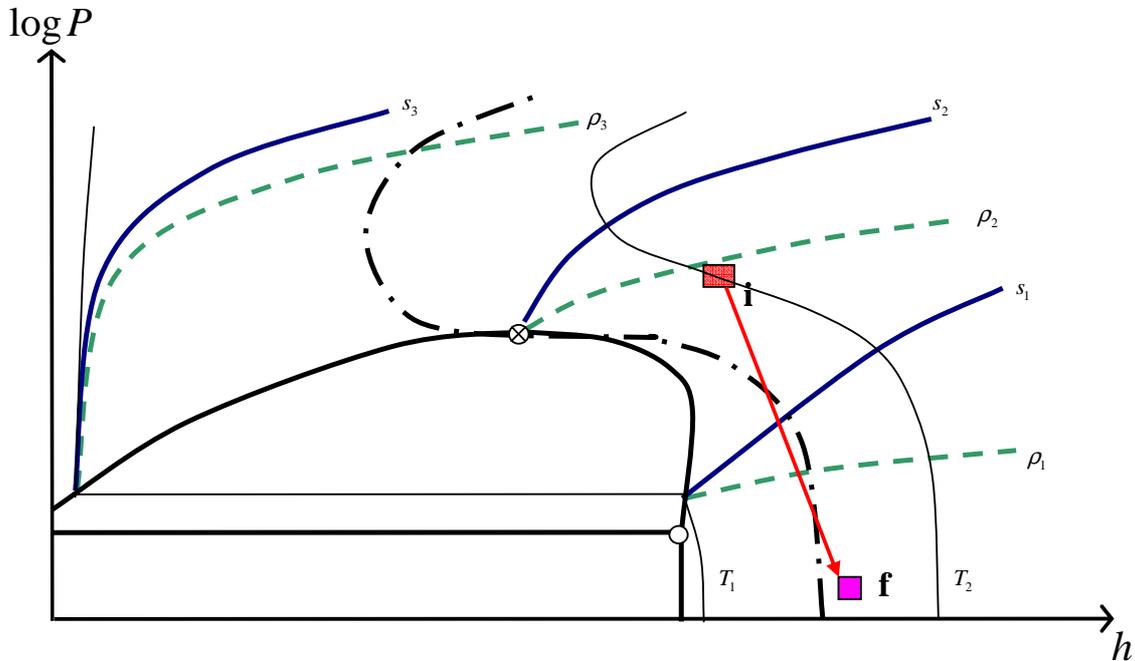


Figure 1.23 : Schématisation du diagramme (P, h) du CO_2 selon le NIST ([11]) – même légende que la Figure 1.10 ; Etat initial (i) et final (f) de la détente étudiée par Ksibi *et al.* [51].

La structure d'écoulement décrite par ces auteurs est semblable à la structure décrite dans le paragraphe précédent, à savoir une structure de jet supersonique sous-détendu de gaz parfait. Notons, toutefois qu'afin de modéliser ce type écoulement compressible et non visqueux de fluide réel, les différents auteurs soulignent la nécessité de prendre en compte les spécificités physiques et thermodynamiques liées à la nature du fluide réel qui interviennent dans les équations de conservation et dans le schéma numérique (utilisation d'une loi d'état adéquat,...). Ces notions seront approfondies dans les chapitres 2 et 3.

1.4.2 Effets de fluide réel - phénomènes de changement de phase

L'injection d'éthylène supercritique dans un gaz (conditions sous critiques dans la chambre de détente) est observée par Wu *et al.* [53]. Des simulations numériques des jets observés par Wu *et al.* [53] ont été effectuées par Star et Edwards [54]. Ces auteurs montrent que le jet résultant de la détente du fluide est sensible aux conditions d'injection. A pression d'injection constante, et en faisant varier la température d'injection, ils constatent que l'on passe d'un jet comportant une structure d'ondes de chocs comme celle présentée

précédemment, dans l'étude de Ksibi *et al.*[51], à un jet multi-phasique où une phase liquide apparaît (figure 1.24). Le fluide supercritique initial se détend d'abord continument vers l'état gazeux (sans changement de phase, en accord avec la section 1.2 précédente) et la détente se poursuit par condensation de la phase gazeuse en liquide. Les auteurs supposent que suivant les conditions d'entrée, à l'issue de la perte de pression, la phase liquide du fluide peut apparaître dans la buse.

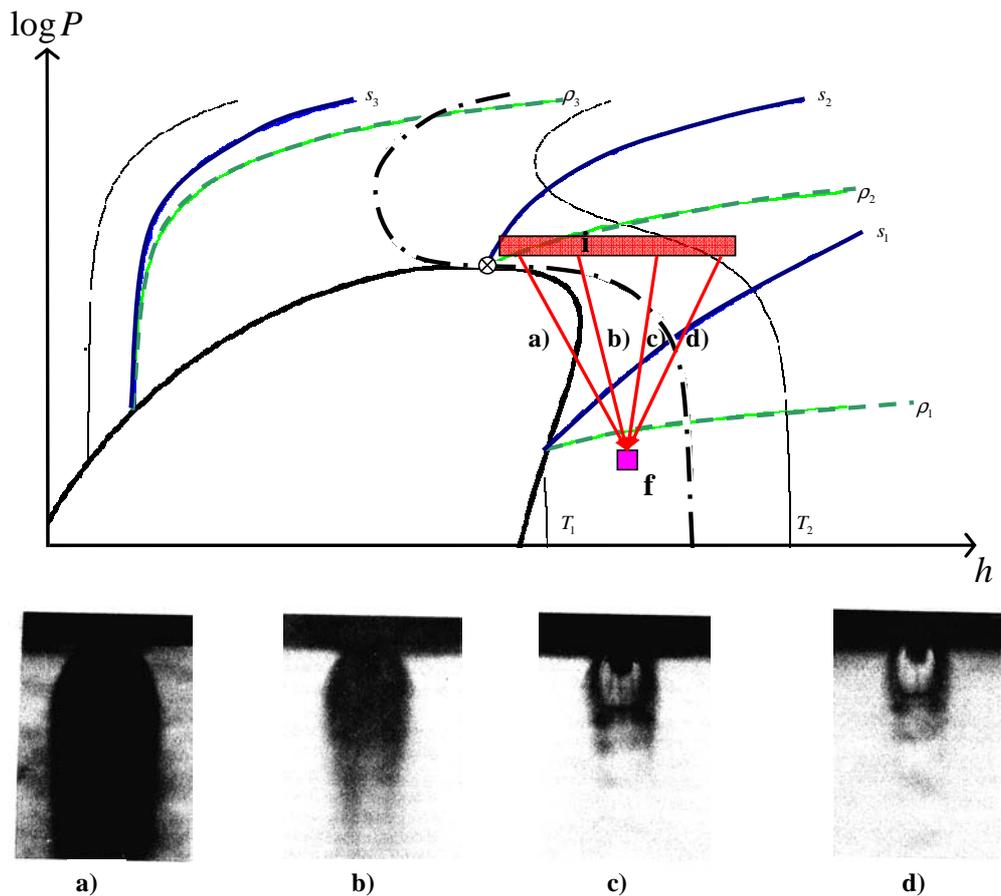


Figure 1.24 : Schématisation du diagramme (P, h) de l'éthylène et des 4 détentees étudiées par Wu *et al.* [53] – même légende que la figure 1.6 ; Ombroscopie des jets résultants des 4 détentees d'éthylène supercritique obtenues par Wu *et al.* [53].

Ainsi, en fonction des conditions d'injection, les effets de fluide réel peuvent se manifester (en contraste avec les phénomènes décrits pour le gaz, ou plus généralement le fluide idéal, au paragraphe 1.3). Des configurations extrêmes peuvent alors être envisagées comme l'apparition d'une phase solide dans le jet lors de la forte chute de température, ou le fluide initialement sous pression et température supercritiques peut devenir liquide au sein même de l'injecteur.

1.4.3 Bilan

Pour le fluide réel, les données de la littérature sont beaucoup plus rares que dans le cas du gaz parfait. Les caractéristiques d'un jet de fluide supercritique (pour des NPR où la pression sur la surface de sortie du jet est inférieure à la pression critique) s'apparentent à celles du jet sous détendu de gaz qui sont relativement bien connues pour la configuration de jet libre et pour des NPR relativement modérés grâce à des études expérimentales et numériques disponibles dans la littérature.

Des cas particuliers subsistent toutefois. En effet, en fonction des conditions d'injection, le jet peut comporter un régime multiphasique local : apparitions de gouttes liquides ou de pellets solides. Un tel changement de phase dans le jet est difficilement prédictible *a priori*. La modélisation d'un tel phénomène n'est pas envisagée comme première approximation dans cette étude. Des fortes variations des propriétés thermo-physiques du fluide peuvent avoir lieu au cours du processus de détente dans le jet. Lors de la modélisation de l'écoulement celles-ci seront prises en compte avec des lois d'état de fluide réel. En prenant en compte ces variations avec une telle loi d'état, l'éventuel changement de phase qui peut avoir lieu dans le jet, pourra ainsi être détecté, et même s'il n'est pas pris en compte dans la modélisation, cela permettra de mettre en évidence la possible apparition de ce phénomène.

1.5 Bilan de l'étude phénoménologique : stratégie de l'étude

Dans ce premier chapitre, les premières bases de l'étude du jet issu de la détente de l'azote sous haute pression ont pu être posées grâce à une étude bibliographique. En effet, les phénomènes physiques mis en jeu dans l'écoulement rencontré dans le cadre de l'étude ont été identifiés. Ces éléments phénoménologiques sont issus de diverses analyses des différentes bases de données scientifiques (expérimentales, numériques ou théoriques). La nature de l'écoulement correspond à un jet sous-détendu. En particulier, la complexité de l'écoulement a été soulignée puisqu'il s'agit d'un régime d'écoulement compressible, supersonique, pouvant faire intervenir des effets de fluide réel. La complexité de l'écoulement limite souvent les travaux référencés dans la bibliographie à des comparaisons globales (typiquement sur l'aspect géométrique de la structure de choc ou sur l'évolution axiale de la pression statique ou du nombre de Mach). Et ce à partir de modèles de comportement de fluide parfaits monophasiques pour la plupart, pour des configurations de jet libre et pour des niveaux de détente relativement faibles. Le manque de données expérimentales ne serait-ce que qualitatives se fait également ressentir. Tous ces éléments ne nous permettent pas d'étudier directement l'écoulement dans son ensemble. C'est pourquoi nous adoptons une stratégie qui vise à augmenter pas à pas le degré de complexité (et de réalisme) de la modélisation.

Tout d'abord, on considère le jet sous-détendu monophasique mono-espèce (jet d'azote dans l'azote) de gaz parfait. Deux principaux paramètres d'influence doivent être étudiés : le rapport de sous détente (NPR) et la distance d'impact (x_p/D_e). L'état de l'art des jets sous-détendus confirme que peu de modélisations avancées n'ont été véritablement tentées pour les paramètres considérés $100 < NPR < 1000$ et $25 < x_p/D_e < 200$. Par ailleurs, il apparaît que ces paramètres influencent très fortement la structure du jet. D'un point de vue physique, le régime compressible confère à la pression un nouveau rôle thermodynamique en plus de son rôle mécanique joué en régime incompressible qui induit un fort couplage du système d'équations régissant le mouvement du fluide. La prise en compte d'une masse volumique variable renforce la non-linéarité de ces équations. Les difficultés d'ordre numérique, que l'on rencontre pour des écoulements compressibles, semblent être particulièrement amplifiées dans cette configuration d'écoulement. Et ce, d'autant plus que le jet est supersonique et que le rapport de détente est élevé. Une attention particulière doit ainsi être portée sur le choix des méthodes d'évaluation des flux convectifs, sur la gestion du

maillage et la définition des conditions aux limites ainsi que sur la robustesse de la méthode numérique. Les principes sous-jacents à l'évaluation des flux convectifs, point clé de la résolution du système qui, à grands nombres de Mach, est essentiellement de nature hyperbolique, seront tout particulièrement développés. Une représentation correcte du comportement physique du fluide compressible impose en effet de propager l'information à une vitesse finie dans les directions caractéristiques, et non plus à vitesse infinie dans les directions de l'écoulement, comme on pourrait le faire en régime incompressible. En particulier les solveurs de Roe, adaptés pour approcher les vitesses d'ondes dans des directions physiquement significatives, seront utilisés afin de simuler correctement les structures physiques des discontinuités qui apparaissent au sein de l'écoulement. Pour ce qui est de la turbulence, des modèles RANS sont principalement utilisés dans la littérature. Toutefois, la modélisation de la turbulence compressible reste encore à ce jour le point faible de ce type de modèle, tant la représentation des nouveaux modes de transferts énergétiques par les fluctuations de masse volumique reste délicate à interpréter et à vérifier expérimentalement. C'est pourquoi, la prise en compte des effets de turbulence dans le jet ne sera pas une priorité de l'étude numérique. Nous nous limiterons au fluide visqueux sans adjoindre de fermeture turbulente au système d'équations régissant le mouvement fluide.

Ensuite, les effets de fluide réel doivent être pris en compte afin de décrire au mieux l'évolution des grandeurs physiques dans le jet. Pour ce faire, les propriétés thermo-physiques du fluide qui varient continument dans le domaine hypercritique doivent être convenablement modélisées à l'aide d'une loi d'état adéquat. La prise en compte de ces effets de fluide réel impose un traitement particulier dans les méthodes numériques classiques qui ont été élaborés pour le gaz parfait.

Références bibliographiques

- [1] A. H. Shapiro - The Dynamics and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow. 2 volumes, New York: Ronald (1953).
- [2] R. Courant, K. O. Friedrichs - Supersonic Flow and Shock Waves. New York: Springer-Verlag (1977).
- [3] S. M. Yahya - Fundamentals of Compressible Flow. New Delhi: Wiley Eastern, (1982).
- [4] A. V. Antsupov - Properties of underexpanded and overexpanded supersonic gas jets. *Soviet Physics: Technical Physics*, vol. 19 (1974), pp. 234–238.
- [5] L. Borel - Thermodynamique et énergétique. Presses polytechniques et universitaires romandes, Lausanne (1991).
- [6] P. Nowak, R. Kleinrahm, W. Wagner - Measurement and correlation of the (p, ρ , T) relation of nitrogen. II. Saturated-liquid and saturated-vapour densities and vapour pressures along the entire coexistence curve. *J. Chem. Thermodynamics*, vol. 29 (1997), pp. 1157-1174.
- [7] S. C. Greer, M. R. Moldover - Thermodynamic Anomalies at Critical Points of Fluids. *Annual Review of Physical Chemistry*, vol. 32 (1981), pp. 233-265.
- [8] J. V. Sengers, J. M. H. Levelt Sengers - Thermodynamic Behavior of Fluids Near the Critical Point. *Annual Review of Physical Chemistry*, vol. 37 (1986), pp. 189-222.
- [9] Y. Rocard - Thermodynamique. Paris: Masson, (1952).
- [10] P. G. Jessop, W. Leitner (Eds.) - Chemical Synthesis using Supercritical Fluids. Weinheim: VCH/Wiley, (1999).
- [11] E. W. Lemmon, M. L. Huber, M. O. McLinden - NIST Standard Reference Database 23: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties-REFPROP, Version 7.0, National Institute of Standards and Technology, Standard Reference Data Program, Gaithersburg, 2002.
- [12] A. Ferri - Review of scramjet propulsion technology. *J. Aircraft*, vol. 5(1) (1968), pp.3-10.
- [13] W. M. Steen - Laser material processing. Berlin: Springer, (1991).
- [14] K. Chen, Y. L. Yao, V. Modi - Gas dynamics effects on laser cut quality. *Journal of Manufacturing Processes*, 3(1) (2001), pp.38-49.
- [15] C.-C. Mai, J. Lin - Flow structures around an inclined substrate subjected to a supersonic impinging jet in laser cutting. *Optics & Laser Technology*, vol. 34 (2002), pp.479-486.
- [16] W. L. Oberkampf, M. Talpallikar - Analysis of a High-Velocity Oxygen Fuel (HVOF) Thermal Spray Torch Part 1: Numerical Formulation. *Journal of Thermal Spray Technology*, vol. 5(1) (1996), pp.53-61.
- [17] M. A. Wilkinson, J. W. Tester - Computational Modelling of the Gas-Phase Transport Phenomena During Flame-Jet Thermal Spallation Drilling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 36(14) (1993), pp.3459-3475.
- [18] T. Adamson, J. Nicholls - On the structure of jets from highly underexpanded nozzles into still air. *Journal of Aerospace Science*, vol. 26 (1959), pp.16-24.
- [19] H. Ashkenas and F.S. Sherman - Structure and utilization of supersonic free jets in low density wind tunnel. In: *Rarefied Gas Dynamics*, Academic, New York, 1966.
- [20] G. Lehnasch - Contribution à l'étude numérique des jets supersoniques sous-détendus. *Thèse de doctorat de l'Université de Poitiers*, 2005.
- [21] A. Dauplain - Allumage des moteurs de fusées cryotechniques. *Thèse de doctorat de l'Institut National Polytechnique de Toulouse*, 2006.

- [22] C. D. Donaldson and R. Snedeker - A study of free jet impingement. Part 1. Mean properties of free and impinging jets. *J. Fluid Mech.*, vol. 45(2) (1971), pp281-319.
- [23] C. D. Donaldson and R. Snedeker - A study of free jet impingement. Part 2. Free jet turbulent structure and impingement heat transfert. *J. Fluid Mech.*, vol. 45(3) (1971), pp477-512.
- [24] H. Shirai, K. Tabei, F. Takakusagi - Density measurements of underexpanded free jets of air from circular and square nozzles by means of moiré-schlieren method. *JSME Inter-national Journal, Series II*, vol. 35(2) (1992), pp.212–217.
- [25] G. S. Elliott, M. Samimy - Rayleigh scattering technique for simultaneous measurements of velocity and thermodynamic properties. *AIAA Journal*, vol. 34(11) (1996), pp.2346-2352.
- [26] N. J. Dam, M. Rodenburg, R. A. L. Tolboom, G. G. M. Stoffels, P. M. Huisman-Kleinherenbrink, J. J. ter Meulen - Imaging of an underexpanded nozzle flow by UV laser Rayleigh scattering. *Experiments in Fluids*, vol. 24 (1998), pp93-101.
- [27] B. Yip, K. Lyons, M. Long, M. Mungal, R. Barlow, R. Dibble - Visualization of a supersonic underexpanded jet by planar Rayleigh scattering. *Phys. Fluids A*, vol.1(9) (1989), pp1449.
- [28] B. H. Timmerman, D. W. Watt, P. J. Bryanston-Cross - Holographic interferometric tomography for the study of unsteady compressible flows. *SPIE Int. Symp. on Optical Science, Engineering and Instrumentation*. Paper no. 2546-40, San Diego, 1995.
- [29] V. I. Zapryagaev and N. G. Bobrikov - Investigation of the streamwise vortices in a shear layer of the initial region of the supersonic underexpanded jet. In : *EUROMECH Colloquium 403*, 1999.
- [30] V. I. Zapryagaev, A. N. Kudryavtsev, A. V. Lokotko, A. V. Solotchin, A. A. Pavlov, A. Hadjadj - An Experimental and Numerical Study of a Supersonic-Jet Shock-Wave Structure. *Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch*, 630090 Novosibirsk, Russia, 2002.
- [31] M. A. Woodmansee, J. P. Kuehner, R. P. Lucht, J. C. Dutton - Pressure, Temperature and Density Measurements using high resolution N₂ CARS, *Paper No. AIAA 98-3456, 34th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, Cleveland, Ohio, July 13-15, 1998.
- [32] R. E. Foglesong, S. M. Green, R. P. Lucht, J. C. Dutton, - Dual-Pump Coherent Anti-Stokes Raman Scattering for Simultaneous Pressure/Temperature Measurement, *AIAA Journal*, vol. 36(2) (1998), pp.234-240.
- [33] K.B. Yuceil, M.V. Otugen, E. Arik - Underexpanded sonic jets: A PIV study, *10th International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*, Lisbon, 10-13 July, 2000.
- [34] P. S. Cumber, M. Fairweather, S. A. E. G. Falle, J. R. Giddings - Predictions of the structure of turbulent, highly underexpanded jets, *Journal of Fluids Engineering*, vol. 117 (1995).
- [35] J. Palmer, R. Hanson - Application of method of characteristics to underexpanded, freejet flows with vibrational nonequilibrium. *AIAA Journal*, vol. 36(2) (1998), pp193-200.
- [36] E. S. Love, C. E. Grigsby, L. P. Lee, and M. J. Woodling, 1959. Experimental and Theoretical Studies of Axisymmetric Free Jets. NASA TR R-6.
- [37] A. R. Vick, E. H. Andrews, J. S. Dennard, and C. B. Craidon, 1964. Comparisons of Experimental Free-Jet Boundaries with Theoretical Results Obtained with the Method of Characteristics. NASA TN D-2327.
- [38] A. L. Addy - Effects of axisymmetric sonic nozzle geometry on Mach disk characteristics. *AIAA Journal*, vol. 19 (1981), pp.121-122.
- [39] Y. Otobe, H. Kashimura, S. Matsuo, T Setoguchi, H.-D. Kim - Influence of nozzle geometry on the near field structure of highly underexpanded sonic jet. *Journal of Fluid and Structures*, vol. 24 (2008), pp281-293.

- [40] V. I. Zapryagaev, A. V. Solotchin - Three-dimensional structure of flow in a supersonic underexpanded jet. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, vol. 32(4) (1991), pp. 503-507.
- [41] M. Rahimi, I. Owen, J. Mistry - Impingement heat transfer in an under-expanded axisymmetric air jet. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 46 (2003), pp.263-272.
- [42] K. A. Phalnikar, F. S. Alvi, C. Shih - Behavior of free impinging supersonic microjets. *AIAA Paper 2001-3047*, 2001.
- [43] J. A. Ladd, W. W. Bower, F. S. Alvi - Experimental and computational investigation of supersonic impinging jets. *AIAA Journal*, vol. 40(4) (2002), pp.509-609.
- [44] D. Mitchell, D. Honnery, J. Soria - Optical measurements in free and impinging underexpanded jets. *Conference Paper, 13th International Symposium on Application of Laser to Fluid Mechanics*, 2006.
- [45] P. S. Cumber, M. Fairweather, S. A. E. G. Falle, J. R. Giddings - Predictions of impacting sonic and supersonic jets. *Journal of Fluids Engineering*, vol. 119 (1997).
- [46] A. Powell - The sound-producing oscillations of round underexpanded jets impinging on normal plates. *J. Acoust. Soc. Am.*, vol.83 (1988), pp515-533.
- [47] F. S. Alvi and K. G. Iyer - Mean and unsteady flowfield properties of supersonic Impinging jets with lift plates. *AIAA Paper 99-1829* (1999).
- [48] S.I. Kim, S.O. Park - Oscillatory behavior of supersonic impinging jet flows. *Shock Waves*, vol. 14(4) (2005), pp.259-272.
- [49] G. Cinar, B. S. Yilbas, M. Sunar - Study into nucleation of steam during expansion through a nozzle. *Int. J. Multiphase Flow*, vol. 23(6) (1997), pp.1171-1188.
- [50] Y. Otobe, S. Matsuo, M. Tanaka, H. Kashimura, T Setoguchi - A study on characteristics of under-expanded condensing jet. *JSME International Journal Series B*, vol. 49(4) (2006), pp. 1165-1172.
- [51] H. Ksibi, C. Tenaud, P. Subra and Y. Garrabos - Numerical simulation of rapid expansion of supercritical fluid. In : *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, vol.15(4) (1996).
- [52] A. B. Moussa, H. Ksibi, C. Tenaud, M. Baccar - Paramètres géométriques de contrôle de la détente d'un fluide supercritique. In: *International Journal of Thermal Sciences*, vol.44 (2005), pp 774-786.
- [53] P-K Wu, T. H. Chen and C.D. Carter - Injection of supercritical Ethylene in Nitrogen. In: *Journal of Propulsion and Power*, vol. 2(4) (1996).
- [54] A. M. Star, J. R. Edwards, K.-C. Lin, S. Cox-Stouffer, T. A. Jackson - Numerical Simulation of Injection of Supercritical Ethylene into Nitrogen. *33rd AIAA Fluid Dynamics conference* (Orlando, Fl, 21-24 june 2003), AIAA paper No 4267.
- [55] Oswald M., Micci M.M., Spreading angle and centreline variation of density of supercritical nitrogen jets. *Atomization and Sprays*, 2002, Vol. 11 : 91-106

Chapitre 2 : Modélisation physique

Les phénomènes physiques mis en jeu dans l'écoulement issu de la détente de l'azote initialement sous haute pression et basse température ont été identifiés dans le chapitre précédent à l'aide d'un examen de la littérature en relation avec la problématique scientifique abordée. Dans ce chapitre nous détaillons les modèles mathématiques de ces phénomènes. En particulier, la modélisation de l'écoulement compressible monophasique (que le fluide soit dans le domaine supercritique ou à l'état gazeux) est abordée. Dans un premier temps le fluide est supposé parfait. Avec cette hypothèse, le modèle mathématique décrivant le mouvement fluide est présenté. Ensuite, les spécificités du fluide réel sont incorporées au modèle. Pour ce faire, différentes loi d'états sont comparées afin de prendre en compte au mieux les caractéristiques du fluide. La loi d'état permet de fermer thermodynamiquement le système d'équations permettant de décrire l'évolution du fluide dans l'espace au cours du temps. Selon la nature de la loi d'état, des difficultés peuvent être rencontrées lors de la résolution du système d'équations régissant le mouvement fluide (données non physiques fournies par la loi d'état, perte d'hyperbolicité du système). Ces notions sont également abordées ici.

2.1 Hypothèses et définitions

Les principes fondamentaux de la mécanique des milieux continus sont les lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Physiquement, l'élément infinitésimal mathématique correspond à un volume fluide infiniment petit par rapport à l'échelle macroscopique, mais renfermant toujours un nombre suffisamment important de particules fluides. Dans la suite, le fluide considéré est composé d'une seule phase d'un seul constituant (corps pur). On peut ainsi toujours y définir statistiquement un état constant pendant les échelles de temps moléculaires (défini par la masse moyenne sur l'unité de volume ρ , la vitesse barycentrique moyenne \bar{U} , l'énergie interne moyenne e_i , l'énergie cinétique moyenne $e_c = \|\bar{U}\|^2 / 2$, l'énergie potentielle moyenne e_p , et l'énergie totale moyenne $e_{tot} = e_i + e_c + e_p$). Le milieu est considéré comme fluide, le champ de déformation macroscopique restant continu sous l'action du champ de contraintes. Les forces massiques (forces de Coriolis, forces électromagnétiques et force de pesanteur) sont considérées négligeables. De même, les flux radiatifs ne sont pas pris en compte. Enfin, on suppose que l'équilibre thermodynamique est toujours établi, ce qui revient à considérer que les temps

caractéristiques du mouvement du fluide restent toujours beaucoup plus grands que les temps de relaxation des particules vers leur niveau d'équilibre énergétique. Une unique température d'équilibre T permet ainsi d'être introduite (fonction du niveau d'énergie interne global) et l'état du fluide pourra être plus simplement décrit par une variable vectorielle cinématique (la vitesse \vec{U} ou la quantité de mouvement par unité de volume $\rho\vec{U}$) et deux variables thermodynamiques (température et masse volumique).

On se fixe dans un référentiel galiléen associé au centre de la section de l'orifice de sortie de la buse, soit le repère orthonormé $(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ sur la Figure 2.1. On adopte une description eulérienne de l'évolution de l'état du fluide en chaque point. On considère un volume fluide élémentaire Ω de surface extérieure $\partial\Omega$ ("peau") et de normale unitaire extérieure à cette surface \vec{n} évoluant dans l'espace à trois dimensions et dans le temps t .

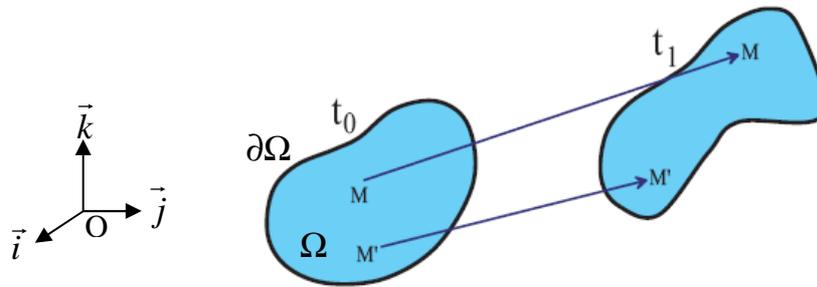


Figure 2.1 : Référentiel, repère et volume fluide étudié.

On considère le fluide Newtonien. La loi de Newton s'applique en chaque point pour le tenseur des contraintes visqueuses $\vec{\tau}_{visc}$: le champ des forces de cisaillement reste proportionnel en chaque point au champ de déformation).

De plus, comme le jet étudié est issu d'un orifice cylindrique, nous supposons qu'il est axisymétrique. Afin d'alléger les écritures, nous nous plaçons alors dans un système de coordonnées cylindriques (O, x, r, θ) , selon la direction axiale (O, x) , la direction radiale (O, r) et d'angle orthoradial θ (Figure 2.2).

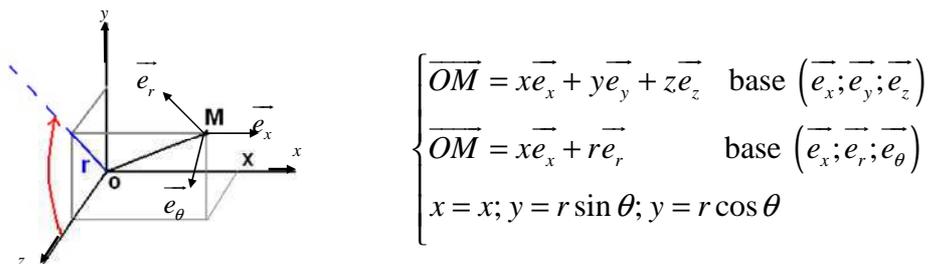


Figure 2.2 : Système de coordonnées cylindriques.

2.2 Mise en équation

Compte tenu des hypothèses précédentes (paragraphe 2.1), les équations de Navier-Stokes, qui regroupent les équations de conservation de la masse (soit ρ par unité de volume), de la quantité de mouvement (soit $\rho\vec{U}$ par unité de volume) et de l'énergie totale (soit ρe_{tot} par unité de volume), permettent de décrire l'évolution des particules fluide au cours du temps. En considérant le vecteur d'état du champ conservatif $\mathbf{Q} = (\rho, \rho\vec{U}, \rho e_{tot})^T$, ces équations s'écrivent alors sous leur forme intégrale suivante :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mathbf{Q} dV + \oint_{\partial\Omega} [\mathbf{F}_C(\mathbf{Q}) - \mathbf{F}_D(\mathbf{Q})] \cdot \vec{n} dS = \int_{\Omega} \mathbf{S} dV \quad (2.1)$$

Le théorème d'Ostrogradski permet de ramener l'intégrale de surface à une intégrale de volume :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mathbf{Q} dV + \int_{\Omega} \text{div}([\mathbf{F}_C(\mathbf{Q}) - \mathbf{F}_D(\mathbf{Q})]) dV = \int_{\Omega} \mathbf{S} dV \quad (2.2)$$

Le vecteur \mathbf{F}_C représente les termes convectifs qui résultent du mouvement propre du fluide. Il s'écrit :

$$\mathbf{F}_C = \begin{pmatrix} \rho\vec{U} \\ \rho\vec{U} \otimes \vec{U} + P\vec{I} \\ (\rho e_{tot} + P)\vec{U} \end{pmatrix}$$

Le vecteur \mathbf{F}_D représente les termes diffusifs et s'écrit :

$$\mathbf{F}_D = \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{\tau}_{visc} \\ (\vec{\tau}_{visc}) \cdot \vec{U} - \vec{q} \end{pmatrix}$$

Le vecteur \mathbf{S} représente les termes sources. Compte tenu des hypothèses formulées précédemment, il n'y a pas de termes sources ($\mathbf{S} = \mathbf{0}$).

Le vecteur vitesse \vec{U} a pour composantes $\vec{U} = (u_x; u_r; u_{\theta})^T$. Les composantes $\tau_{xx}, \tau_{rr}, \tau_{\theta\theta}, \tau_{xr}$ du tenseur des contraintes visqueuses $\vec{\tau}_{visc}$ sont données par :

$$\tau_{xx} = 2\mu \left(\frac{2}{3} \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{1}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} \right); \tau_{rr} = 2\mu \left(\frac{2}{3} \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{1}{3} \frac{u_r}{r} \right);$$

$$\tau_{xr} = \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial x} \right); \tau_{\theta\theta} = 2\mu \left(\frac{2}{3} \frac{u_r}{r} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_r}{\partial r} \right).$$

2.3 Fermeture thermodynamique des équations de conservation

2.3.1 Introduction

Les équations de conservation qui viennent d'être posées font intervenir des variables d'état thermodynamique : la température T et la pression P , et la masse volumique ainsi que la fonction d'état énergie interne e_i (on peut faire apparaître l'enthalpie $h = e_i + P/\rho$). Afin de pouvoir résoudre ces équations, il est nécessaire d'introduire une fermeture thermodynamique qui relie ces grandeurs entre elles. Dans ce qui suit, le couple de variables (ρ, T) a été choisi comme indépendant. Il s'agit alors d'exprimer P et e_i (ou h) en fonction de couple de variables (ρ, T) . Rappelons que les fonctions d'état ne dépendent que des états initial et final d'une transformation thermodynamique. Appliquons ce raisonnement à l'énergie interne. Soient ρ_{ref} et T_{ref} respectivement la masse volumique et la température définissant un état de référence. Soit γ une transformation permettant de passer de l'état (ρ_{ref}, T_{ref}) à (ρ, T) qui est représentée sur la figure 2.3. Alors l'énergie interne vérifie :

$$e_i(\rho, T) - e_i(\rho_{ref}, T_{ref}) = \int_{\gamma} de_i(\rho, T) \quad (2.6)$$

La différentielle totale exacte de l'énergie interne du fluide étant définie en fonction des dérivées partielles définies par rapport au couple de variables (ρ, T) :

$$de_i(\rho, T) = \left. \frac{\partial e_i}{\partial \rho} \right|_T d\rho + \left. \frac{\partial e_i}{\partial T} \right|_{\rho} dT \quad (2.7)$$

Soient les deux transformations γ_1 et γ_2 telles que :

$$\gamma_1 : (\rho_{ref}, T_{ref}) \xrightarrow{T=cste} (\rho, T_{ref})$$

$$\gamma_2 : (\rho, T_{ref}) \xrightarrow{\rho=cste} (\rho, T)$$

Les transformations thermodynamiques γ , γ_1 et γ_2 sont schématisées sur la figure 2.3 :

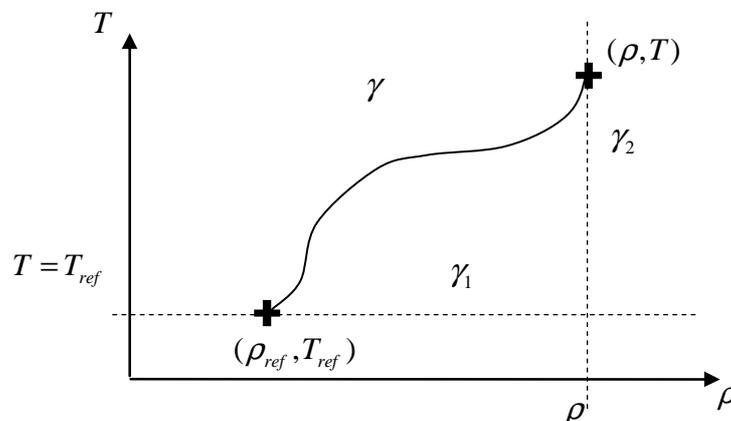


Figure 2.3 : Schématisation d'une transformation thermodynamique quelconque.

Comme l'historique de la transformation n'est pas pris en compte, on a en particulier :

$$\int_{\gamma} de_i(\rho, T) = \int_{\gamma_1} de_i(\rho, T) + \int_{\gamma_2} de_i(\rho, T)$$

avec $\int_{\gamma_1} de_i(\rho, T) = \int_{\rho=\rho_{ref}}^{\rho} \left(\frac{\partial e_i}{\partial \rho} \Big|_{T=T_{ref}} \right) d\rho$, et $\int_{\gamma_2} de_i(\rho, T) = \int_{T=T_{ref}}^T \left(\frac{\partial e_i}{\partial T} \Big|_{\rho=\rho} \right) dT$

D'où :

$$e_i(\rho, T) = e_i(\rho_{ref}, T_{ref}) + \int_{\rho=\rho_{ref}}^{\rho} \frac{\partial e_i(\rho, T)}{\partial \rho} \Big|_{T=T_{ref}} d\rho + \int_{T=T_{ref}}^T \frac{\partial e_i(\rho, T)}{\partial T} \Big|_{\rho=\rho} dT \quad (2.1)$$

Explicitons alors les dérivées partielles de l'énergie interne qui apparaissent dans l'équation (2.1). Tout d'abord, la dérivée partielle de l'énergie interne par rapport à la température à masse volumique constante fait intervenir la capacité calorifique à volume constant du fluide qui est définie par :

$$\left(\frac{\partial e_i}{\partial T} \right)_{\rho} = C_v(\rho, T) \quad (2.2)$$

Pour la dérivée partielle de l'énergie interne par rapport à la masse volumique à température constante, on se sert de l'équation fondamentale de Gibbs qui permet de formuler l'énergie interne en fonction de l'entropie par :

$$de_i = \frac{P}{\rho^2} d\rho + T ds \quad (2.3)$$

La différentielle totale exacte de l'entropie pouvant être écrite en fonction de ses dérivées partielles définies par rapport au couple de variables (ρ, T) :

$$ds(\rho, T) = \frac{\partial s}{\partial \rho} \Big|_T d\rho + \frac{\partial s}{\partial T} \Big|_{\rho} dT \quad (2.4)$$

Or, les relations de Maxwell donnent en particulier :

$$\frac{\partial s}{\partial \rho} \Big|_T = \frac{-1}{\rho^2} \frac{\partial P}{\partial T} \Big|_{\rho} \quad (2.5)$$

Finalement, par identification des termes devant d dans (2.3), en utilisant (2.4), on peut réécrire la dérivée partielle de l'énergie interne par rapport à la masse volumique :

$$\frac{\partial e_i(\rho, T)}{\partial \rho} \Big|_T = \frac{1}{\rho^2} \left[P(\rho, T) - T \frac{\partial P(\rho, T)}{\partial T} \Big|_{\rho} \right] \quad (2.6)$$

En annexe A.1, il est démontré comment $C_v(\rho, T)$ peut être obtenu à partir de la loi d'état thermique donnant $P(\rho, T)$. Le résultat est rappelé ici, il fait intervenir une « constante » d'intégration $C_v(\rho_{ref}, T)$ qui est uniquement fonction de la température :

$$C_v(\rho, T) = C_v(\rho_{ref}, T) - T \int_{\rho_{ref}}^{\rho} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 P(\rho, T)}{\partial T^2} \Big|_{\rho} d\rho \quad (2.7)$$

En conclusion, on peut réécrire l'énergie interne à partir de (2.1) sous la forme :

$$\begin{aligned} e_i(\rho, T) = & e_i(\rho_{ref}, T_{ref}) + \int_{\rho_{ref}}^{\rho} \frac{P(\rho, T_{ref})}{\rho^2} d\rho - \int_{\rho_{ref}}^{\rho} \frac{T_{ref}}{\rho^2} \left[\frac{\partial P}{\partial T} \Big|_{\rho}(\rho, T_{ref}) \right] d\rho \\ & + \int_{T_{ref}}^{T} C_v(\rho_{ref}, T) dT - \int_{T_{ref}}^{T} \left[T \int_{\rho_{ref}}^{\rho} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \Big|_{\rho} d\rho \right] dT \end{aligned} \quad (2.8)$$

Donc il est clair que pour avoir une forme explicite de l'énergie interne $e_i(\rho, T)$, il suffit de connaître la loi d'état thermique donnant $P(\rho, T)$ et la fonction d'intégration $C_v(\rho_{ref}, T)$ provenant de $C_v(\rho, T)$.

On remarque que si l'on avait choisit de réécrire l'équation de conservation de l'énergie totale en faisant intervenir l'enthalpie (à la place de l'énergie interne), nous aurions eu besoin de connaître la formulation $H(P, T)$ en faisant intervenir le couple de variables (P, T) :

$$h(P, T) = h(P_{ref}, T_{ref}) + \int_{P_{ref}}^{P} \frac{\partial h(P, T)}{\partial P} \Big|_{T=T_{ref}} dP + \int_{T_{ref}}^{T} \frac{\partial h(P, T)}{\partial T} \Big|_{P=P} dT \quad (2.9)$$

Cette forme s'obtient de la même manière que l'on a obtenu la formulation explicite $I(\rho, T)$, à savoir à partir de ces dérivées partielles (voir annexe A.1 pour les calculs). Soit :

$$\frac{\partial h}{\partial T} \Big|_P = C_p(P, T) \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial h}{\partial P} \Big|_T = \frac{1}{\rho} + \frac{T}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_P \quad (2.11)$$

Ainsi, l'enthalpie est donnée en fonction des variables (P, T) par la relation :

$$\begin{aligned} h(P, T) = & h(P_{ref}, T_{ref}) + \int_{T_{ref}}^{T} C_p(P_{ref}, T) dT + \int_{T_{ref}}^{T} \left[\int_{P_{ref}}^P \frac{T}{\rho^2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial T^2} \Big|_P dP \right] dT \\ & + \int_{P_{ref}}^P \frac{1}{\rho(P, T_{ref})} dP + \int_{P_{ref}}^P \frac{T_{ref}}{\rho^2(P, T_{ref})} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_P dP \end{aligned} \quad (2.12)$$

Ce type d'écriture nécessite en particulier de connaître la masse volumique en fonction de la pression et de la température (P, T) , dont la forme est très difficile (voire impossible) à

obtenir en général. L'écriture de l'enthalpie en fonction du couple de variable (ρ, T) est légèrement plus complexe et ne fait plus intervenir la capacité calorifique à pression constante, mais elle a l'avantage de faire intervenir $P(\rho, T)$, et non plus $C_p(P, T)$. L'obtention de $h(\rho, T)$ se fait toujours à partir des dérivées partielles, qui sont (voir annexe A.1):

$$\left. \frac{\partial h(\rho, T)}{\partial T} \right|_{\rho} = C_v(\rho, T) + \frac{1}{\rho} \left. \frac{\partial P(\rho, T)}{\partial T} \right|_{\rho} \quad (2.13)$$

$$\left. \frac{\partial h(\rho, T)}{\partial \rho} \right|_T = \left(\frac{1}{\rho} + T \right) \left. \frac{\partial P(\rho, T)}{\partial \rho} \right|_T \quad (2.14)$$

Ainsi, l'enthalpie est donnée en fonction des variables (ρ, T) par la relation :

$$h(\rho, T) = e_i(\rho, T) + \frac{P(\rho, T)}{\rho} \quad (2.15)$$

Où l'énergie interne est donnée par la relation (2.8). Donc il est clair que pour avoir une forme explicite de l'enthalpie $H(\rho, T)$, il suffit de connaître la loi d'état thermique donnant $P(\rho, T)$ et la fonction d'intégration $C_v(\rho_{ref}, T)$ provenant de la définition de $C_v(\rho, T)$.

Le choix des fonctions d'intégration $C_v(\rho_{ref}, T)$ et $C_p(P_{ref}, T)$ qui apparaissent dans les définitions de la capacité calorifique à volume constant et de la capacité calorifique à pression constante respectivement, se fait en général à partir du gaz thermiquement parfait (voir par exemple Moran et Shapiro [1]), soit :

$$C_v(\rho_{ref}, T) = \sum_{i=0}^{i=4} C_v^i T^i \quad (2.16)$$

$$C_p(P_{ref}, T) = \sum_{i=0}^{i=4} C_p^i T^i \quad (2.17)$$

Où C_v^i , et C_p^i sont des constantes données dans le tableau 2.1.

	C_v^i	C_p^i	unité
$i=0$	742,8	1039,5	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$i=1$	0,3017911	0,3017911	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-2}$
$i=2$	$8,109228 \cdot 10^{-5}$	$8,109228 \cdot 10^{-5}$	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-3}$
$i=3$	$8,263892 \cdot 10^{-9}$	$8,263892 \cdot 10^{-9}$	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-4}$
$i=4$	$1,537235 \cdot 10^{-13}$	$1,537235 \cdot 10^{-13}$	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-5}$

Tableau 2.1 : Coefficients intervenant dans les des fonctions d'intégration $C_v(\rho_{ref}, T)$ et $C_p(P_{ref}, T)$ permettant d'obtenir les capacité calorifiques de l'azote.

En conclusion, que ce soit pour l'énergie interne ou l'enthalpie, nous avons montré qu'il était nécessaire de connaître la loi d'état thermique donnant $P(\rho, T)$. C'est pourquoi dans la suite on s'intéresse à différentes lois d'état.

En particulier, on s'intéresse aux lois d'état : des gaz parfaits (paragraphe 2.3.2), de Van der Waals (notée VdW) [2] (paragraphe 2.3.3), de Peng-Robinson [3] (notée PR) (paragraphe 2.3.4), de Redlich-Kwong [4] (notée RK) (paragraphe 2.3.4), de Soave-Redlich-Kwong [5] (notée SRK) (paragraphe 2.3.4). Ces lois d'état sont généralement décrites par la thermodynamique classique (voir Prausnitz *et al.* [6], Hirshfelder *et al.* [7], Reid *et al.* [8]). Afin de prendre en compte toutes les spécificités des propriétés des corps purs, de nouvelles lois d'états ont été mises en place ces dernières années (voir Span *et al.* [9], Xiang et Deiters [10]). Ces équations d'état visent généralement à formuler une équation explicite en énergie libre de Helmholtz (ou *fugacité*) et sont valables sur de larges plages de valeurs de pression et de température. C'est pourquoi elles sont souvent appelées *lois d'état exactes*.

2.3.2 Loi d'état des gaz parfaits

La loi d'état des gaz parfaits (ou plus généralement fluide parfait) se base sur la théorie cinétique des gaz, qui suppose qu'il n'y a aucune interaction entre les molécules, ou particules du gaz. Celui-ci correspond alors à un gaz dilué c'est à dire un gaz à pression réduite. Schématiquement, un gaz parfait est alors un ensemble d'atomes (ou molécules, ou particules) identiques sans interaction entre eux et soumis à une agitation perpétuelle et aléatoire (dite agitation moléculaire ou thermique) dans une enceinte (réelle ou virtuelle). Il en résulte une énergie potentielle nulle. La pression du gaz est due aux nombreux chocs parfaitement élastiques des atomes du gaz sur les parois de l'enceinte qui le contient. Ainsi, la loi d'état des gaz parfaits s'exprime en fonction de la masse volumique et de la température :

$$P(\rho, T) = \rho r_g T \quad (2.18)$$

Où r_g est la constante massique du gaz parfait valant $r_g = R/M_w$, M_w est la masse atomique du fluide (en $g.mol^{-1}$), et $R = 8,314 J.K^{-1}.mol^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits.

Pour un fluide parfait, la loi de Joule permet d'obtenir les résultats suivants :

$$\left. \frac{\partial e_i}{\partial \rho} \right|_T = \left. \frac{\partial e_i}{\partial P} \right|_T = 0, \text{ et } \left. \frac{\partial h}{\partial \rho} \right|_T = \left. \frac{\partial h}{\partial P} \right|_T = 0.$$

Ainsi, l'énergie interne et l'enthalpie du gaz parfait ne dépendent que de la température :

$$de_i = C_v dT \quad (2.19)$$

$$dh = C_p dT \quad (2.20)$$

Les deux capacités calorifiques C_v et C_p ne dépendent que de la température et sont reliées par la relation de Mayer, qui donne $C_p - C_v = r_g$. En général, on suppose que pour un

gaz parfait les capacités calorifiques sont constantes, le rapport des capacités γ est alors également constant. On parle dans ce cas de *gaz parfait (idéal) à capacités calorifiques constantes*. Selon la nature du gaz parfait, la valeur de γ peut être précisée. En effet, pour un gaz parfait monoatomique on fixe généralement $\gamma=5/3$ alors que pour un gaz parfait diatomique on fixe $\gamma=7/5$. La relation de Meyer $C_p - C_v = r_g$ et la définition $\gamma = C_p/C_v$ donnent les relations suivantes pour les capacités calorifiques du gaz parfait :

$$C_p = \frac{\gamma r_g}{\gamma - 1} \quad (2.21)$$

$$C_v = \frac{r_g}{\gamma - 1} \quad (2.22)$$

En outre pour le gaz parfait, à partir de la relation (2.22) et la définition de l'énergie interne (2.26), il est possible de relier la loi d'état thermique et calorifique, i.e. de relier les variations de pression aux variations d'énergie interne et de masse volumique :

$$P = (\gamma - 1) \rho e_i \quad (2.23)$$

Une telle relation s'avérera très pratique par la suite dans le cadre du développement numérique permettant de résoudre les équations de conservation (2.1) du modèle. Pour des lois d'état plus complexe cette relation n'est pas vérifiée.

L'énergie interne et l'enthalpie peuvent être écrites en fonction du couple de variables (ρ, T) pour le gaz parfait en intégrant les relations (2.19) et (2.20) à partir d'un état de référence (ρ_0, T_0) où l'énergie interne vaut $e_i(\rho_0, T_0) = e_i^0$ et l'enthalpie vaut $h(\rho_0, T_0) = h^0$:

$$e_i(\rho, T) = e_i^0 + C_v (T - T_0) \quad (2.24)$$

$$h(\rho, T) = h^0 + C_p (T - T_0) \quad (2.25)$$

De même, l'entropie du gaz parfait est exprimée en fonction du couple de variables (ρ, T) en intégrant la relation (2.3) à partir d'un état de référence (ρ_0, T_0) où l'entropie vaut $s(\rho_0, T_0) = s^0$:

$$s(\rho, T) = s^0 + C_v \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) + r_g \ln\left(\frac{\rho_0}{\rho}\right) \quad (2.26)$$

2.3.3 Loi d'état de Van der Waals

En tenant compte des interactions mutuelles d'attraction et de répulsion entre les atomes et de la nature non ponctuelle de ces atomes, Van der Waals a proposé des

modifications par rapport à la loi des gaz parfaits. Tout d'abord, les atomes ont une certaine taille (soit un volume b) et vu leur très grand nombre N , ils occupent un volume propre : $V_b = Nb$ dit *covolume*. De plus, l'existence d'interactions mutuelles (attraction-répulsion) a pour effet de diminuer la pression au voisinage des parois d'un facteur proportionnel au carré de la densité des atomes. L'équation d'état de Van der Waals s'écrit alors :

$$P(\rho, T) = \frac{\rho r_g T}{1 - B\rho} - A\rho^2 \quad (2.27)$$

Où les constantes A et B sont définies pour une substance pure par rapport aux conditions critiques de pression P_C , de volume V_C et de température T_C :

$$A = \frac{27}{8} Br_g T_C \text{ (exprimé en } Pa.kg^{-2}.m^6 \text{)} \text{ et } B = \frac{1}{8} \frac{r_g T_C}{P_C} \text{ (exprimé en } kg^{-1}.m^3 \text{)}.$$

2.3.4 Les équations d'états cubiques pseudo-empiriques

Ce type de loi d'état se base sur des corrélations expérimentales (notamment au point critique). De plus, elles font intervenir le facteur d'excentricité Ω du fluide (il dépend de la structure atomique) :

$$\Omega = -\log_{10} \left(\frac{P_{sat}(T = 0,7T_C)}{P_C} \right) - 1$$

$P_{sat}(T = 0,7T_C)$ est la pression de saturation à la température $T = 0,7T_C$ (qui est proche du point d'ébullition en général).

2.3.4.1 L'équation de Peng-Robinson

L'équation d'état de Peng-Robinson est une équation d'état cubique qui se base sur l'équation de Van der Waals mais qui apporte une modélisation différente de la diminution de la pression dues aux interactions mutuelles entre les atomes, elle s'écrit :

$$P(\rho, T) = \frac{\rho r_g T}{1 - B\rho} - \frac{A(T)\rho^2}{1 + 2B\rho - B^2\rho^2} \quad (2.28)$$

Où les termes $A(T)$ et B sont définis par rapport au point critique (qui dépend du fluide) :

$$A(T) = A(T_C) + A(T_C).C \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_C}} \right)$$

$$\text{où } A(T_C) = 0,457236 \frac{(RT_C)^2}{P_C}, \text{ et } C = 0,37464 + 1,54226\Omega - 0,26992\Omega^2, B = 0,077796 \frac{RT_C}{P_C}.$$

2.3.4.2 L'équation de Redlich-Kwong

L'équation d'état de Redlich-Kwong est une équation d'état cubique semblable à l'équation de Peng-Robinson, elle s'écrit :

$$P(\rho, T) = \frac{\rho r T}{1 - B\rho} - \frac{a(T)\rho^2}{1 + B_0\rho} \quad (2.29)$$

Où les termes $a(T)$, B_0 et B sont définis par rapport au point critique (qui dépend du fluide) :

$$a(T) = a_0 \left(\frac{T_c}{T} \right)^n, \text{ avec } a_0 = 0,42747 \frac{(RT_c)^2}{P_c}, \text{ et } n = 0,4986 + 1,1735\Omega + 0,475\Omega^2,$$

$$B_0 = 0,08664 \frac{RT_c}{P_c}, \text{ et}$$

$$B = \frac{1}{\rho_c} - \frac{RT_c}{P_c + \frac{a_0 \rho_c^2}{(1 + \rho_c^2 B_0)}}.$$

2.3.4.3 L'équation de Soave-Redlich-Kwong

L'équation d'état de Soave-Redlich-Kwong est une amélioration de l'équation d'état de Redlich-Kwong apportée par Soave, elle s'écrit :

$$P(\rho, T) = \frac{\rho r T}{1 - B\rho} - \frac{A\rho^2 \alpha(T)}{1 + B\rho} = \frac{\rho r T + \rho^2 (rT \cdot B - A \cdot \alpha(T)) + \rho^3 A \cdot B \cdot \alpha(T)}{1 - \rho^2 B^2} \quad (2.30)$$

Où les termes $\alpha(T)$, A et B sont définis par rapport au point critique (qui dépend du fluide) :

$$A = 0,42747 \frac{(RT_c)^2}{P_c},$$

$$B = 0,08664 \frac{RT_c}{P_c}, \text{ et}$$

$$\alpha(T) = \left(1 + C \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right)^2 \text{ avec } C = 0,48508 + 1,5517\Omega - 0,15613\Omega^2.$$

On constate que $P(\rho, T)$ n'est pas définie pour $\rho = \frac{1}{B}$ ($\approx 1046,46 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ pour l'azote). Nous prendrons cette valeur comme limite supérieure pour la masse volumique dans la définition de $P(\rho, T)$: $\rho \in \left] 0; \frac{1}{B} \right[$.

2.3.5 L'équation d'état de référence pour l'azote : « loi d'état exacte »

Les lois d'états fondamentales, présentées précédemment, sont bien mal adaptées pour une utilisation dans un large domaine de pression et de température. Pour l'azote, comme pour quelques rares autres corps purs, des équations de référence ont pu être développées, principalement à l'aide des techniques d'interpolation multi-composantes de regroupement de données expérimentales (issues de travaux de différentes sources à travers le temps). C'est le cas du récent travail fourni par Span *et al.* [9], qui utilise plus de 14000 données expérimentales. Ce type d'équation d'état fournit des résultats précis sur de vastes domaines de pression et de température. La base de ces travaux consiste à fournir une formulation explicite de l'énergie libre de Helmholtz $F(\rho, T)$. Xiang et Deiters [10] ont également proposé une formulation explicite de l'énergie d'Helmholtz $F(\rho, T)$ en utilisant l'équation de Lee-Kesler et le principe des états correspondants. L'équation d'état, les fonctions d'état, et les autres propriétés thermodynamiques qui en découlent, sont alors déduites de $F(\rho, T)$. En effet, la différentielle totale de $F(\rho, T)$, est réécrite comme suit :

$$dF = de_i - Tds - sdT = \left(\frac{\partial e_i}{\partial \rho} \Big|_T - T \frac{\partial s}{\partial \rho} \Big|_T \right) d\rho + \left(\frac{\partial e_i}{\partial T} \Big|_\rho - T \frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\rho - s \right) dT \quad (2.31)$$

Nous pouvons alors identifier le terme devant $d\rho$ en utilisant (2.5) :

$$P(\rho, T) \equiv \rho^2 \frac{\partial F(\rho, T)}{\partial \rho} \Big|_T \quad (2.32)$$

L'équation d'état du fluide donnant la variation de la pression en fonction de la température et de la masse volumique est donc donnée par la relation (2.32) qui repose sur la formulation explicite de l'énergie libre d'Helmholtz. De plus, il est aisé d'obtenir les relations suivantes :

$$e_i(\rho, T) \equiv F(\rho, T) - T \frac{\partial F(\rho, T)}{\partial T} \Big|_\rho \quad (2.33)$$

$$h(\rho, T) \equiv F(\rho, T) - T \frac{\partial F(\rho, T)}{\partial T} \Big|_\rho + \rho \frac{\partial F(\rho, T)}{\partial \rho} \Big|_T \quad (2.34)$$

$$C_v(\rho, T) \equiv -T \left(\frac{\partial^2 F(\rho, T)}{\partial T^2} \right) \Big|_\rho \quad (2.35)$$

$$C_p(\rho, T) = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \Big|_\rho + \rho^2 T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \rho \partial T} \right)^2 \left(\rho^2 \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} \Big|_T + 2\rho \frac{\partial F}{\partial \rho} \Big|_T \right)^{-1} \quad (2.36)$$

2.3.6 Bilan : comparaison des lois d'état

Afin de dresser le bilan de la modélisation des propriétés thermo-physiques du fluide à l'aide d'une loi d'état, nous comparons les équations d'état qui ont été présentées précédemment. Bien entendu, cette comparaison s'effectue dans les domaines où le fluide reste monophasique (que le fluide soit liquide, gazeux, ou hypercritique). Les diagrammes qui suivent (figures 2.4, 2.5 et 2.6) montrent l'évolution de la pression en fonction de la masse volumique du fluide pour trois températures différentes : une isotherme sous critique ($T = 100 \text{ K} < T_C$), l'isotherme critique ($T = T_C = 126,19 \text{ K}$), et une isotherme hypercritique ($T = 250 \text{ K} > T_C$).

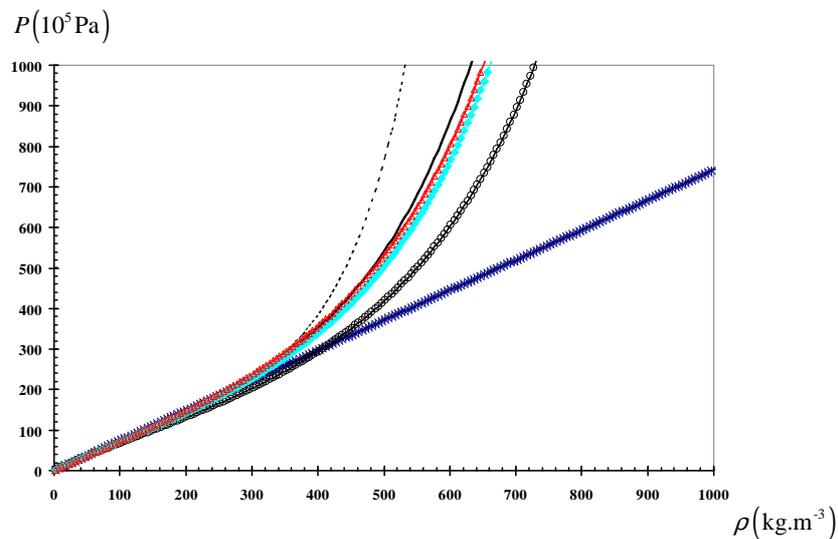


Figure 2.4 : Diagramme P- à la température hypercritique $T=250\text{K}$ ($T > T_C$) – Comparaison des différentes lois d'état : Van der Waals (----), Gaz parfait (*—*), Peng-Robinson (—○—) Redlich-Kwong (—◆—), Soave-Redlich-Kwong (—▲—) et Loi exacte (—).

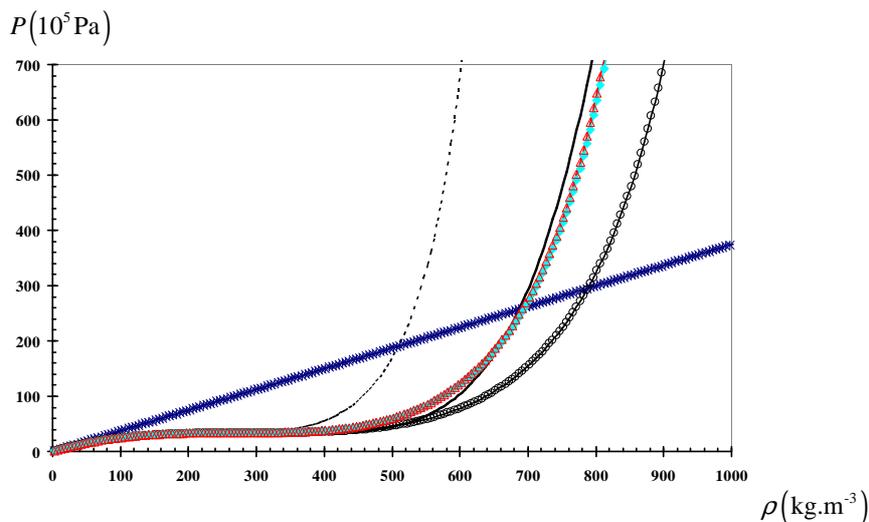


Figure 2.5 : Diagramme P- à la température critique $T=T_C=126,19\text{K}$ – Comparaison des différentes lois d'état : Van der Waals (----), Gaz parfait (*—*), Peng-Robinson (—○—) Redlich-Kwong (—◆—), Soave-Redlich-Kwong (—▲—) et Loi exacte (—).

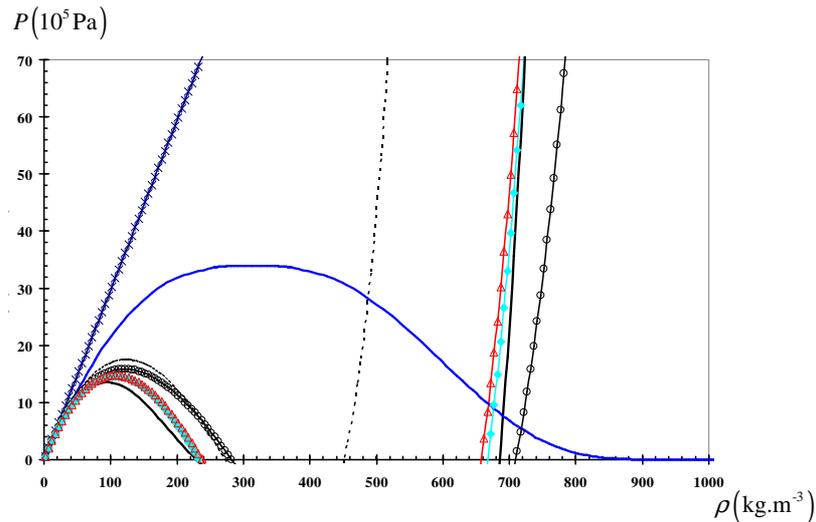


Figure 2.6 : Diagramme P- à la température sous-critique $T=100\text{K}$ ($T < T_c$) - Comparaison des différentes lois d'état : Van der Waals (---), Gaz parfait (—*), Peng-Robinson (—○—), Redlich-Kwong (—◆—), Soave-Redlich-Kwong (—▲—) et Loi exacte (—); Courbes de saturation (—).

Nous nous intéressons aux domaines monophasiques du fluide (domaine supercritique, état gazeux, état liquide), i.e. la zone située à l'extérieur des courbes de saturations pour une température sous critique donnée. Notons que sur la Figure 2.6 les courbes de saturations ont été obtenues à l'aide de la loi d'état de référence.

Ces diagrammes mettent en évidence des différences notables pour les différentes lois d'état. La loi des gaz parfaits décrit bien le comportement du fluide lorsque la pression et la masse volumique sont relativement faibles (i.e. pour $P < 5P_c$ pour une température supercritique, pour $P < P_c$ à la température critique et dans le domaine gazeux pour une température sous-critique). Dès lors que la pression est au-delà de ces valeurs pour $T \geq T_c$ la masse volumique est sur-estimée. Par exemple, la masse volumique du gaz parfait est deux fois plus grande que celle prédite par l'équation d'état exacte pour $P=750 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ à $T=250 \text{ K}$. A l'inverse, pour une température sous-critique, la masse volumique du liquide peut être supérieure à la masse volumique du gaz de jusqu'à 2 ordres de grandeurs. La loi d'état de Van der Waals a un domaine de définition limité de part sa formulation puisqu'elle prédit une pression négative pour une masse volumique suffisamment grande. Cela peut être la source d'erreurs numériques lors d'un calcul aux volumes finis. Les 3 équations d'état cubiques étudiées ici donnent des résultats relativement similaires et une bonne concordance est notée avec l'équation exacte (notamment pour les lois d'état de Redlich-Kwong et de Soave-Redlich-Kwong). La principale différence se situe au niveau de la prévision des masses volumiques du liquide et du gaz à une température sous-critique donnée. Dans le cadre de

notre étude, nous avons choisi d'utiliser 3 de ces lois d'état pour des raisons propres à chacune d'entre elles. La loi d'état des gaz parfait, bien que peu représentative du comportement des propriétés du fluide dans une large plage de valeurs de pression et de température, est utilisée pour sa simplicité de mise en œuvre et sa stabilité dans le cadre de la modélisation d'un écoulement compressible, comme cela sera mis en évidence au paragraphe 2.5. La loi d'état de référence pour l'azote, basée sur les travaux de Span *et al.* [9] et Xiang et Deiters [10], bien que très complexe à mettre en œuvre, est utilisée pour la précision qu'elle fournit dans tous les domaines monophasiques (liquide, gaz ou fluide hypercritique). Cette précision ayant un coût, notamment celui du calcul puisque la formulation explicite de l'énergie libre de Helmholtz de l'azote fait intervenir à elle seule plus de 150 coefficients. L'implémentation de cette loi d'état dans un code de calcul de mécanique des fluides, qui devra résoudre l'équation d'état (thermique et calorifique) pour tous les nœuds du domaine de calculs à chaque itération et ce jusqu'à convergence, s'en voit donc pénalisée. C'est pourquoi, la loi d'état de Soave-Redlich-Kwong, est également utilisée. Elle offre un bon compromis en simplicité de mise en œuvre, représentativité du comportement du fluide dans une large plage de valeurs de pression et de température, et adaptabilité à un code de calcul de mécanique des fluides.

Les figures 2.7, 2.8 et 2.9 montrent l'évolution de l'énergie interne du fluide en fonction de la masse volumique du fluide pour une isotherme sous-critiques, l'isotherme critique, et une isotherme hypercritique, pour chacune de ces 3 lois d'état.

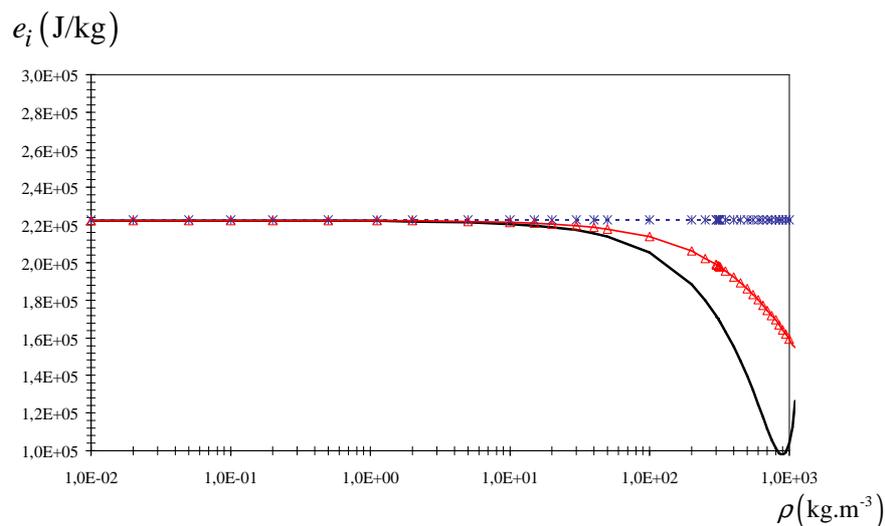


Figure 2.7 : Variation de l'énergie interne du fluide en fonction de la masse volumique à la température hypercritique $T=250\text{K}$ ($T > T_c$) – Comparaison des différentes lois d'état : Gaz parfait (---*), Soave-Redlich-Kwong (---Δ) et Loi exacte (—).

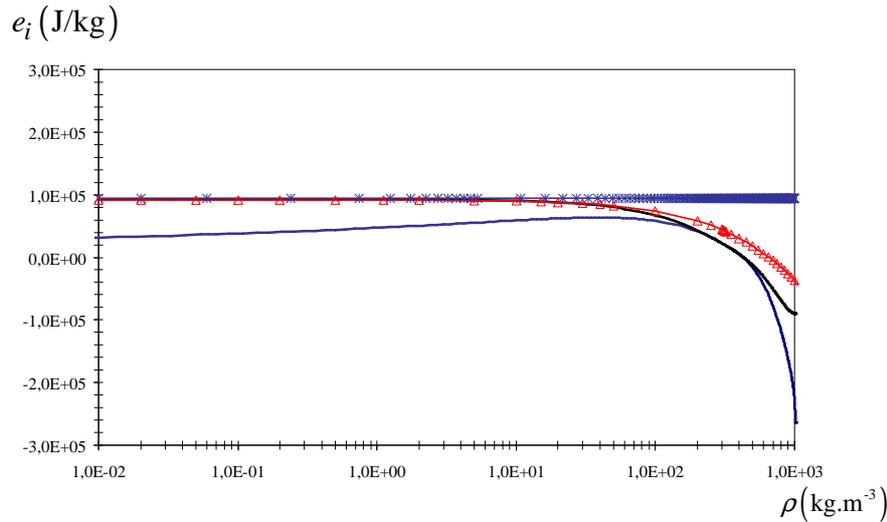


Figure 2.8 : Variation de l'énergie interne du fluide en fonction de la masse volumique à la température critique $T=T_c=126,19\text{K}$ – Comparaison des différentes lois d'état : Gaz parfait ($\text{---}\ast\text{---}$), Soave-Redlich-Kwong ($\text{---}\triangle\text{---}$) et Loi exacte (---) ; Courbes de saturation (---).

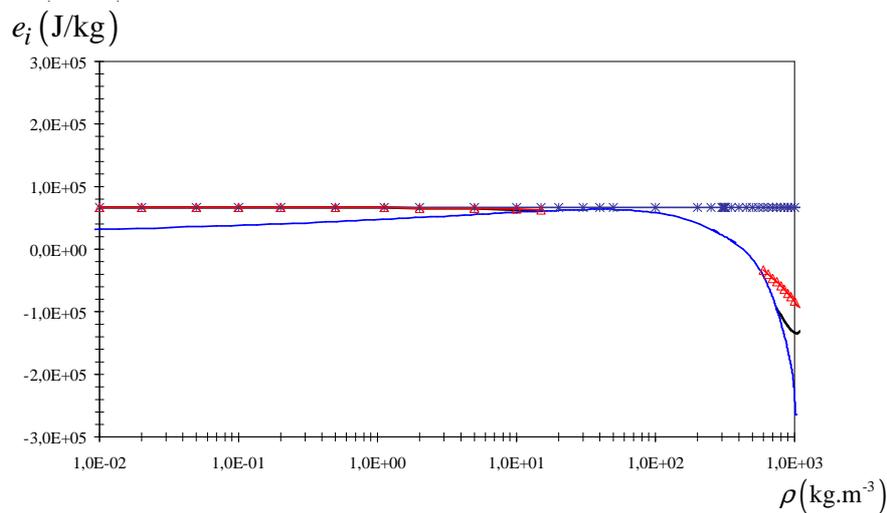


Figure 2.9 : Variation de l'énergie interne du fluide en fonction de la masse volumique à la température sous-critique $T=90\text{K}$ ($T < T_c$) – Comparaison des différentes lois d'état : Gaz parfait ($\text{---}\ast\text{---}$), Soave-Redlich-Kwong ($\text{---}\triangle\text{---}$) et Loi exacte (---) ; Courbes de saturation (---).

Comme l'énergie interne est calculée à partir de la loi d'état thermique, les différences soulignées précédemment apparaissent également ici. La capacité calorifique à volume constant C_v intervient dans le calcul de l'énergie interne, elle est composée en partie d'une fonction qui dépend uniquement de la température. Comme cela a été dit précédemment, cette fonction est calculée à partir du gaz parfait (i.e. lorsque la masse volumique tend vers 0). Plus la masse volumique augmente (i.e. lorsque la pression augmente, quelle que soit la température), plus l'erreur par rapport à la loi d'état exacte augmente. L'énergie interne du gaz parfait ne dépend pas de la masse volumique, et diverge de celle de la loi exacte lorsque la masse volumique augmente. Pour la loi de SRK, la différence est plus faible.

Afin de finaliser la fermeture thermodynamique des équations de conservation, il reste à spécifier les propriétés de transport (viscosité et conductivité thermique) du fluide. Celles-ci sont obtenues à l'aide des travaux menés par Lemmon et Jacobsen [11] qui donnent des expressions de $\mu(\rho, T)$ et de $\lambda_T(\rho, T)$ valables dans tous les domaines monophasiques du fluide (qu'il soit gazeux, liquide ou dans le domaine hypercritique). Sur la figure 2.10 et la figure 2.11, sont présentées les variations de la viscosité et de la conductivité thermique en fonction de la température à pression constante. On remarque que la conductivité thermique connaît aussi une singularité aux abords du point critique alors que la viscosité n'en possède pas.

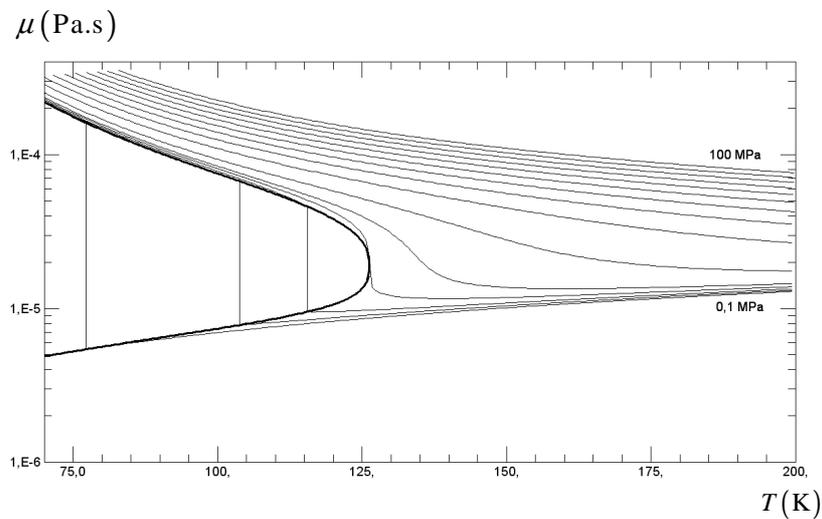


Figure 2.10 : Variation de la viscosité du fluide en fonction de la température pour différentes isobares du bas vers le haut : $P=0,1\text{MPa}$, $P=0,5\text{MPa}$, $P=1\text{MPa}$, $P=P_C=3,3958\text{MPa}$, $P=5\text{MPa}$ et $P=10\text{MPa}$ à 100MPa par pas de 10MPa .

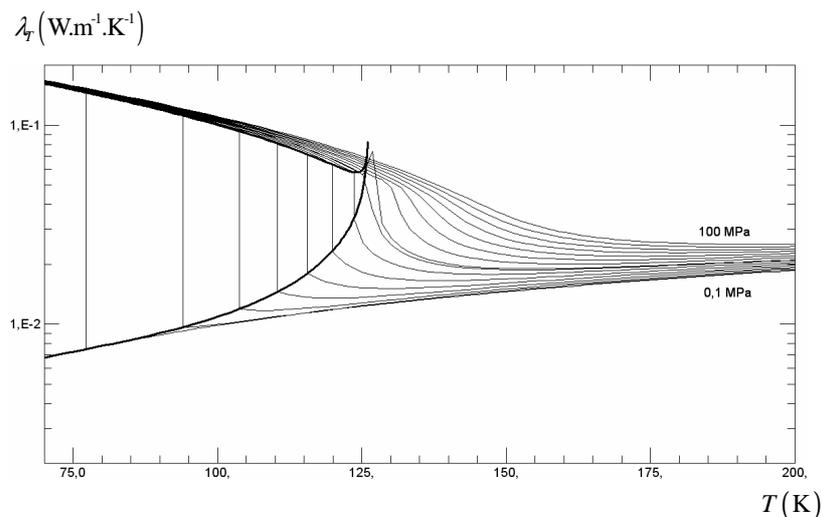


Figure 2.11 : Variation de la conductivité thermique du fluide en fonction de la température pour différentes isobares du bas vers le haut : $P=0,1\text{MPa}$, $P=0,5\text{MPa}$, $P=1\text{MPa}$, $P=P_C=3,3958\text{MPa}$, $P=5\text{MPa}$ et $P=10\text{MPa}$ à 100MPa par pas de 10MPa .

2.4 Notions d'hyperbolicité

Un modèle d'écoulement compressible a été mis en place dans la section 2.2 précédente, il vise à assurer la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale en formant un système d'équations. La loi d'état permet de fermer le système d'équations (section 2.3). Nous étudions maintenant les propriétés des équations ainsi formées, en introduisant préalablement quelques définitions mathématiques.

2.4.1 Définitions mathématiques

Prenons un vecteur $\mathbf{u}(x,t)$ de n composantes indépendantes $u_i(x,t)$ (avec $i = \{1, \dots, n\}$) qui sont fonctions d'une dimension d'espace x et du temps t . Soit un système homogène quasi-linéaire de n équations aux dérivées partielles :

$$\frac{\partial \mathbf{u}(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u}(x,t))}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (2.37)$$

Le vecteur des flux $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ a n composantes $f_i(u_1, \dots, u_n)$ (avec $i = \{1, \dots, n\}$) qui sont des fonctions des composantes $u_i(x,t)$ de $\mathbf{u}(x,t)$. Le système (2.37) est équivalent à :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (2.38)$$

Où \mathbf{A} est la matrice jacobienne (de dimension $n \times n$) de la fonction flux $\mathbf{f}(\mathbf{u}(x,t))$:

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial u_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial u_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial u_n} \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

Les valeurs propres λ_i sont les racines du polynôme caractéristique $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I})$ où \mathbf{I} est la matrice identité, elles sont données par l'équation :

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0 \quad (2.40)$$

Le système (2.38) est hyperbolique si les valeurs propres λ_i de \mathbf{A} (matrice jacobienne de \mathbf{f}) sont réelles (positives ou négatives). De plus, dans ce cas, la matrice jacobienne \mathbf{A} est diagonalisable.

2.4.2 Cas des équations d'Euler 1D

Typiquement, le système (2.38) est obtenu à partir des équations de conservation (2.1) dans le cas monodimensionnel non visqueux (sans diffusion) et sans terme source. Les équations d'Euler monodimensionnelles ainsi obtenues réduisent le vecteur d'état \mathbf{u} et le vecteur de flux $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ (purement convectif) à :

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e_i + \frac{1}{2} \rho u^2 \end{bmatrix}, \text{ et } \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ u \left(\rho e_i + \frac{1}{2} \rho u^2 + P \right) \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

Dans ce cas, la matrice jacobienne du flux convectif se réduit à :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 + \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{e_i} + \left(\frac{1}{2} u^2 - e_i \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial e_i} \Big|_{\rho} & 2u - u \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial e_i} \Big|_{\rho} & \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial e_i} \Big|_{\rho} \\ -u \left(e_i + \frac{P}{\rho} + \frac{1}{2} u^2 \right) + u \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{e_i} + \left(\frac{1}{2} u^2 - I \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial e_i} \Big|_{\rho} \right) & \left(e_i + \frac{P}{\rho} + \frac{1}{2} u^2 \right) - u^2 \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial e_i} \Big|_{\rho} & u \left(1 + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial e_i} \Big|_{\rho} \right) \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

On remarque cette matrice fait apparaître des termes de dérivées partielles de pression par rapport à la masse volumique (à énergie interne constante) et par rapport à l'énergie interne (à masse volumique constante). Pour alléger les écritures, on notera par la suite :

$$P_{\rho I} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial e_i} \Big|_{\rho} = \frac{\partial P}{\partial (\rho e_i)} \Big|_{\rho} \quad (2.43)$$

$$P_{\rho} = \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{\rho e_i} \quad (2.44)$$

Il est important de noter le terme constant ρe_i dans la dérivée partielle (2.44) qui ne signifie pas que l'énergie interne e_i est constante dans cette dérivée. En effet, une identification des termes dans les différentielles totales de la pression exprimées par rapport aux couples indépendants de variables (ρ, e_i) et $(\rho, \rho e_i)$ donne la relation :

$$\left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_{e_i} = e_i \left. \frac{\partial P}{\partial \rho e_i} \right|_{\rho} + \left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_{\rho e_i} = e_i P_{\rho I} + P_{\rho} \quad (2.45)$$

La vitesse de propagation du son c dans le milieu considéré est donnée par :

$$c^2 = \left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_S = \frac{C_p}{C_v} \left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_T \quad (2.46)$$

En utilisant les relations de Maxwell, on trouve une relation importante entre les dérivées partielles de la pression (2.43), (2.44) et la vitesse de propagation du son :

$$P_{\rho} = c^2 - \left(e_i + \frac{P}{\rho} \right) P_{\rho I} \quad (2.47)$$

Ainsi, la matrice jacobienne des flux convectifs \mathbf{A} écrite en (2.42) peut être réécrite en utilisant les relations (2.45) et (2.47), et en faisant apparaître l'enthalpie $h = e_i + P/\rho$:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -u^2 + c^2 - P_{\rho I} \left(h - \frac{1}{2} u^2 \right) & 2u - u P_{\rho I} & P_{\rho I} \\ u \left(c^2 + h(-1 - P_{\rho I}) + \frac{1}{2} u^2 (-1 + P_{\rho I}) \right) & \left(h + \frac{1}{2} u^2 \right) - u^2 P_{\rho I} & u(1 + P_{\rho I}) \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

Le polynôme caractéristique de cette matrice vaut alors :

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = (u - \lambda)^2 \left[\lambda^2 - 2\lambda u + u^2 - c^2 \right] \quad (2.49)$$

Les valeurs propres λ_i de la matrice jacobienne des flux convectifs (que l'on appelle également valeur propre du système d'équation (2.37)) sont alors obtenues en résolvant l'équation (2.40), soit :

$$\begin{cases} \lambda_1 = u \\ \lambda_2 = u + c \\ \lambda_3 = u - c \end{cases} \quad (2.50)$$

Physiquement, les valeurs propres du système représentent les vitesses d'ondes propageant les ondes élémentaires de discontinuités associées au système, ainsi que les directions caractéristiques du système (i.e. les courbes de l'espace-temps définies par $dx/dt = \lambda_i$ sur lesquelles les équations différentielles partielles (EDP) deviennent ordinaires). Ces résultats

sont d'autant plus importants qu'aucune hypothèse à été faite sur la fermeture thermodynamique des équations, ils sont donc valables quelle que soit la loi d'état choisie pour fermer thermodynamiquement le système. De plus, la condition d'hyperbolicité du système d'équations devient simplement :

$$c^2 \left(= \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_s = \frac{C_p}{C_v} \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_T \right) > 0 \quad (2.51)$$

En particulier, si l'on choisit la loi d'état des gaz parfaits (2.18) pour fermer thermodynamiquement le système ainsi formé (voir paragraphe 2.3), on a :

$$c^2 = \gamma r_g T \quad (2.52)$$

Compte tenu de cette définition, la vitesse du son est réelle (et positive) pour un gaz parfait sans condition.

Nous nous sommes intéressé dans cette section aux caractéristiques des équations purement convectives en ne tenant pas compte des termes diffusifs à partir des équations de conservation (2.1). La raison est qu'il est généralement admis que ce sont ces termes convectifs qui imposent les conditions les plus sévères sur les techniques numériques de discrétisation des équations (qui seront abordées au chapitre 3).

En conclusion, dans le cas des équations d'Euler à une dimension d'espace (obtenues en négligeant les effets de la viscosité, et les transferts thermiques au sein du fluide) fermées avec la loi d'état des gaz parfait : le système est strictement hyperbolique. En fait, il est possible d'étendre la même démarche à des dimensions spatiales d'ordre plus élevé. On montre ainsi que pour la loi d'état des gaz parfait, l'hyperbolicité est assurée sans condition pour le système d'équations d'Euler. En revanche, pour une loi d'état plus générale, la condition d'hyperbolicité qui impose que les valeurs propres du système soient réelles (*i.e.* qui implique simplement une condition sur la célérité du son : $c^2 > 0$), n'est pas aussi aisément respectée. C'est l'objet du paragraphe suivant.

2.5 Stabilité thermodynamique, hyperbolicité du système d'équations : contraintes sur la loi d'état

Différentes lois d'état ont été retenues précédemment pour fermer le modèle d'écoulement compressible monophasique. Pour la loi d'état des gaz parfait, le système d'équations de conservation est strictement hyperbolique. Mais qu'en est-il pour une loi d'état plus générale ?

Une analyse thermodynamique particulière (voir Kirilin et al. [12], Baidakov [13]) permet de montrer que pour assurer la stabilité thermodynamique d'un système, les conditions suivantes doivent être respectées :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_v > 0 \\ \left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_T > 0 \text{ (} P \text{ est une fonction croissante de } \rho \text{ sur une isotherme } T \text{)}. \end{array} \right. \quad (2.53)$$

La première condition qui stipule que la capacité calorifique à volume constant doit être positive est généralement facilement respectée. En revanche, la seconde condition n'est pas respectée dans une partie du domaine de coexistence des phases liquide et gazeuse (zone instable) où l'isotherme sous critique change de pente (P devient croissante en fonction de V , i.e. décroissante en fonction de ρ) pour une loi d'état de type « fluide réel » (c'est en fait le cas pour toute loi d'état plus complexe que la loi d'état des gaz parfaits). Dans cette même zone, l'hyperbolicité du système d'équation à résoudre est perdue. En effet, pour une isotherme sous-critique $T < T_C$, l'allure de la courbe $P(\rho, T)$ donnée par la loi d'état de SRK, et la loi d'état exacte est schématisée sur la Figure 2.12.

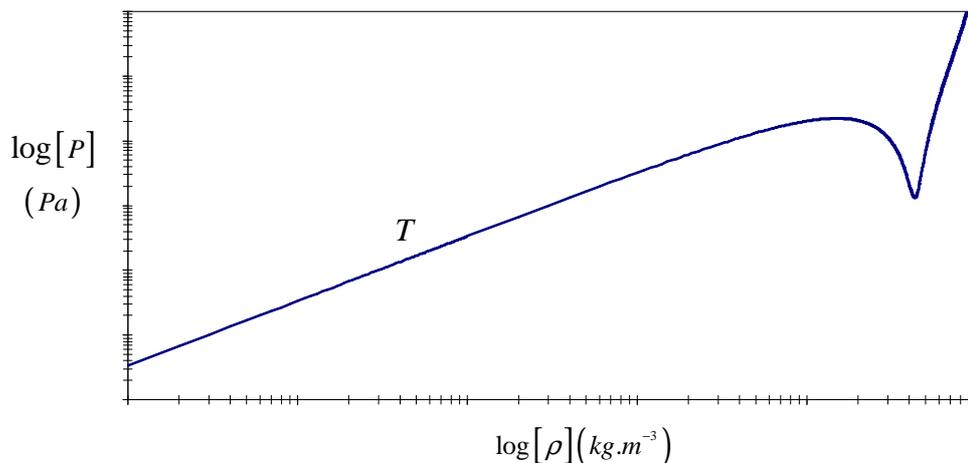


Figure 2.12 : Allure de $P(\rho, T)$ pour une isotherme sous critique pour la loi d'état de Soave-Redlich-Kwong et la loi d'état exacte.

Il apparaît clairement qu'il existe une région où $\left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_T < 0$. Cette région est située dans le domaine de coexistence des phases liquide et gazeuse du fluide. Dans ce cas, la vitesse du son donnée algébriquement par la relation (2.46) n'est pas réelle. De même, au point critique $\left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_T = 0$, ce qui implique une vitesse du son nulle au point critique : $c(\rho, T) = 0$. Il est alors évident que les valeurs propres de la jacobienne des flux convectifs deviennent toutes égales, ces matrices ne sont plus diagonalisables et le système des équations de conservation n'est plus hyperbolique. La région concernée de l'espace (P, ρ) est souvent appelée *zone elliptique*.

Dans les domaines monophasiques du fluide (domaine supercritique, état gazeux, état liquide) ces contraintes sont respectées. Elles sont même respectées dans une partie du domaine de coexistence des deux phases liquide et gazeuse (zone métastable). Alors qu'elles ne le sont pas dans la zone instable. On peut penser à modifier la loi d'état de telle sorte que la stabilité thermodynamique soit assurée quelle que soit la pression et la température et que les difficultés rencontrées dans la zone elliptique soient shuntées. Une telle tentative a d'ailleurs été menée sans succès par Jaouen [14].

Ainsi, il sera utile de pouvoir restreindre le domaine de validité de l'équation d'état aux domaines monophasiques du fluide réel pour la résolution numérique des équations de conservation. Le domaine de coexistence des deux phases, liquide et gazeuse, de l'azote apparaît pour toute température sous-critique. Ce domaine est borné par les courbes de saturation. La pression de saturation P_{sat} à la température $T = T_0$ peut-être définie telle que les deux aires 1 et 2 soient égales (règle de Maxwell) sur la Figure 2.13.

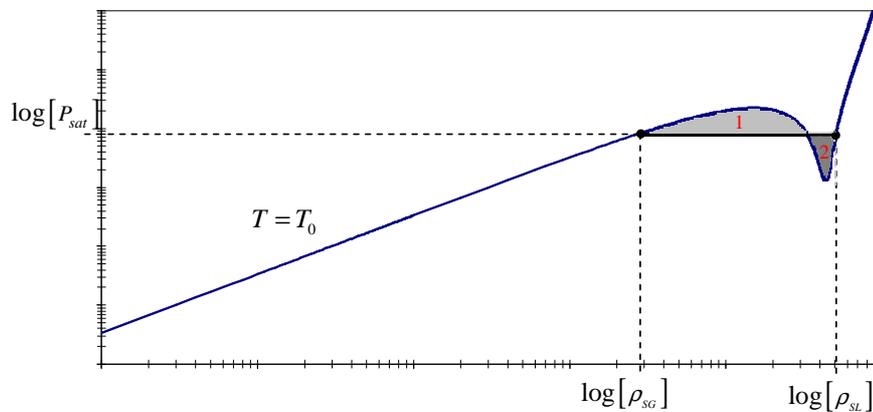


Figure 2.13 : Allure de $P(\rho, T)$ pour une isotherme sous critique – obtention de la pression de saturation à partir de la règle de Maxwell.

A la pression de saturation $P = P_{sat}$, ρ_{SG} et ρ_{SL} sont respectivement les masses volumiques de la vapeur saturée et du liquide saturé à la température $T = T_0$ donnée. Afin d'obtenir $P_{sat}(T_0)$, ρ_g , et ρ_l , il faut résoudre le système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\rho=\rho_{SG}}^{\rho=\rho_{SL}} P(\rho, T = T_0) d\rho = P_{sat}(T_0) \\ P(\rho = \rho_g, T = T_0) = P_{sat}(T_0) \\ P(\rho = \rho_l, T = T_0) = P_{sat}(T_0) \end{array} \right. \quad (2.54)$$

La résolution analytique de ce système pour une loi d'état quelconque n'est pas triviale. Le calcul numérique de ces grandeurs pour toute température $T = T_0 < T_C$ est une bonne alternative.

Une autre alternative est d'utiliser des lois semi-empiriques. En particulier, pour l'azote Nowak *et al.* [15] proposent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \ln\left(\frac{P_{sat}(T)}{P_C}\right) = \frac{T_C}{T} \sum_{i=1}^4 \left[N_i^{sat} \cdot \left(1 - \frac{T}{T_C}\right)^{\alpha_i} \right] \\ \ln\left(\frac{\rho_l(T)}{\rho_C}\right) = \sum_{i=1}^4 \left[N_i^{SL} \cdot \left(1 - \frac{T}{T_C}\right)^{\beta_i} \right] \\ \ln\left(\frac{\rho_g(T)}{\rho_C}\right) = \frac{T_C}{T} \sum_{i=1}^5 \left[N_i^{SG} \cdot \left(1 - \frac{T}{T_C}\right)^{\gamma_i} \right] \end{array} \right. \quad (2.55)$$

Où les constantes N_i^{sat} , N_i^{SL} , N_i^{SG} , α_i , β_i et γ_i sont données dans le tableau ci-après :

i	N_i^{sat}	N_i^{SL}	N_i^{SG}	α_i	β_i	γ_i
1	-6,12445284	1,48654237	-1,70127164	1	0,3294	0,34
2	1,26327220	-0,280476066	-3,70402649	1,5	2/3	5/6
3	-0,765910082	0,0894143085	1,29859383	2,5	8/3	7/6
4	-1,77570564	-0,119879866	-0,561424977	5	35/6	13/6
5			-2,68505381			14/3

Tableau 2.2 : Constantes utilisées pour déterminer la pression de saturation $P_{sat}(T)$, la masse volumique du gaz saturé $\rho_g(T)$, et la masse volumique du liquide saturé $\rho_l(T)$ en fonction de la température, Nowak *et al.* [15].

2.6 Bilan

La modélisation mathématique des phénomènes physiques mis en jeu dans l'écoulement, qui ont été identifiés dans le chapitre précédent, a été étudiée dans ce chapitre. Dans le cadre de la stratégie d'étude qui a été mise en place, un premier modèle d'écoulement compressible monophasique a d'abord été étudié. Il est valable quelle que soit la fermeture thermodynamique choisie pourvu que le fluide reste monophasique dans l'écoulement. La fermeture thermodynamique est donnée par l'écriture de la loi d'état. Différentes lois d'états existent pour décrire les caractéristiques du fluide dans le vaste domaine de pression et de températures rencontré. Plusieurs d'entre elles ont été étudiées et comparées entre elles. Au final, trois lois d'état ont été retenues.

La première est la loi d'état des gaz parfait. Bien que simpliste, elle décrit bien les propriétés du gaz. Dès que la pression devient suffisamment grande (trois fois la pression critique) ou la température suffisamment petite (proche de la température critique et en dessous), la loi d'état des gaz parfaits ne traduit plus convenablement le comportement du fluide. De plus, l'implémentation de la loi d'état des gaz parfaits dans un code de calculs numérique de CFD est relativement aisée et ne requiert pas de traitement particulier.

Pour prendre en compte les effets de fluide réel, plusieurs lois ont été étudiées. En particulier, une loi d'état exacte qui se base sur la formulation explicite de l'énergie libre de Helmholtz.

Des lois d'état intermédiaires entre le gaz parfait et la loi d'état exacte ont également été étudiées et comparées entre elles. La loi d'état de Soave-Redlich-Kwong a été retenue, elle fournit un bon compromis entre facilité de mise en œuvre et qualité de la modélisation du comportement du fluide. Contrairement à la loi d'état des gaz parfaits, l'implémentation des lois d'état complexes dans un code de calculs CFD est beaucoup plus laborieuse. D'une part, du fait de sa modélisation et d'autre part du fait de la singularité mise en évidence dans la région instable.

Références bibliographiques

- [1] M. J. Moran, H. N. Shapiro - Fundamentals of Engineering Thermodynamics. *John Wiley & Sons, Inc*, 1988.
- [2] J. D. Van der Waals - On the continuity of the gaseous and liquid states, 1873.
- [3] D. Y. Peng, D. B. Robinson - A New Two-Constant Equation of State, *Ind. Eng. Chem. Fundamentals*, vol.15(1) (1976).
- [4] O. Redlich, J. N. S. Kwong - On the Thermodynamics of Solutions. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions, *Chem Rev.*, vol.44 (1949).
- [5] G. Soave - Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State, *Chem. Eng. Science*, vol. 27 (1972).
- [6] J. Prausnitz, R. Lichtenthaler, E. de Azevedo - Molecular Thermodynamics for Fluid- phase Equilibrium, *Prentice -Hall, Inc.*, 1986.
- [7] J. O. Hirshfelder, C. F. Curtis, R. B. Bird - Molecular Theory of Gases and Liquids, *John Wiley and Sons, Inc.*, 1964.
- [8] R. C. Reid, J. M. Prausnitz, T. K. Sherwood - The Properties of Gases and Liquids, *Mc Graw Hill Book Co., NY*, 1977.
- [9] R. Span, E W Lemmon, R T Jacobsen, W Wagner, A Yokozeki - A reference Equation of State for the Thermodynamic Properties of Nitrogen for Temperatures from 63.151 to 1000K and Pressures to 2200MPa. In: *J. Phys. Chem. Ref. Data*, vol.29(6) (2000).
- [10] H. W. Xiang, U. K. Deiters - A new generalized corresponding-states equation of state for the extension of the Lee-Kesler equation to fluids consisting of polar and larger nonpolar molecules. In: *Chemical Engineering Science*, vol.63 (2008), pp1490-1496.
- [11] E. W. Lemmon, and R. T. Jacobsen - Viscosity and Thermal Conductivity Equations for Nitrogen, Oxygen, Argon, and Air. In: *International Journal of Thermophysics*, Vol. 25(1) (2004).
- [12] V. Kirillin, V. Sytchev, A. Sheindlin - Thermodynamique technique, *Technique soviétique, éditions Mir Moscou*, 1974. Traduction française Editions Mir 1981.
- [13] V. G. Baidakov - Explosive Boiling of Superheated Cryogenic Liquids, *Weinheim: Wiley-VCH*, 2007, pp.7-25.
- [14] S. Jaouen - *Etude mathématique et numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase*. PhD thesis, Univ. Paris 6, 2001.
- [15] P. Nowak, R. Kleinrahm, W. Wagner - Measurement and correlation of the (p, ρ , T) relation of nitrogen. II. Saturated-liquid and saturated-vapour densities and vapour pressures along the entire coexistence curve. *J. Chem. Thermodynamics*, vol. 29 (1997), pp. 1157-1174.

Chapitre 3 : Modélisation numérique

Il n'existe pas de solution analytique aux équations du modèle physique élaboré dans le chapitre 2. Pour les résoudre, l'utilisation de l'outil numérique CFD (Computational Fluid Dynamics) est nécessaire. Nous employons le code de calculs Fluent®¹, qui se sert de la méthode numérique des volumes finis pour discrétiser le modèle mathématique continu formant un système d'équations de conservation. Cette méthode présente le principal avantage d'être conservative de par sa formulation. Un autre avantage de la méthode des volumes finis est qu'il existe plusieurs schémas numériques pour résoudre les termes non linéaires qui apparaissent dans les équations (vues au chapitre 2). La première partie de ce chapitre présente les aspects généraux et terminologiques liés à la méthode des volumes finis et en particulier la discrétisation spatiale du domaine physique continu en un domaine numérique. Ensuite, la méthode numérique est présentée en détail. Celle-ci vise à résoudre les équations du modèle physique discrétisées dans l'espace numérique afin d'obtenir une solution numérique approchée de la solution au problème physique. La méthode est basée sur le calcul numérique d'un bilan local des flux (convectifs et diffusifs) dans chaque volume discret de contrôle. Pour les écoulements compressibles, les flux convectifs sont généralement obtenus en résolvant un problème de Riemann local (à l'aide d'un *solveur de Riemann*). La physique du problème de Riemann et les outils mathématiques utilisés pour la modéliser sont également introduits dans ce chapitre avant de spécifier en détail les caractéristiques du solveur de Riemann approché de Roe utilisé dans le code de calculs. Comme la méthode numérique permet d'obtenir une solution approchée, il est nécessaire d'introduire des critères permettant de juger de sa qualité. Enfin, les aspects spécifiques au code de calculs utilisé sont présentés. En particulier, l'implémentation de la loi d'état permettant de décrire les propriétés du fluide réel (par opposition à la loi d'état des gaz parfaits).

¹ Version 6.3.26 - Fluent Inc., 10 Cavendish Court, Lebanon

3.1 Discrétisation spatiale du domaine d'étude : méthode des volumes finis

La première étape de la méthode des volumes finis est la discrétisation spatiale du domaine de calcul. Elle vise à décomposer le domaine physique de calcul Ω de contour extérieur $\partial\Omega$ en un domaine numérique composé de sous-domaines distincts C_i (volumes de contrôles ou mailles). On obtient ainsi un maillage ou triangulation dont l'ensemble des éléments, noté $T = \cup C_i$, représente le domaine numérique discret. Dans la suite, on considèrera généralement des cas à deux dimensions d'espace pour lequel le maillage peut être constitué d'éléments triangulaires ou quadrilatéraux reliés entre eux par leurs sommets. Le passage du domaine physique continu au domaine numérique discret est illustré sur la Figure 3.1.

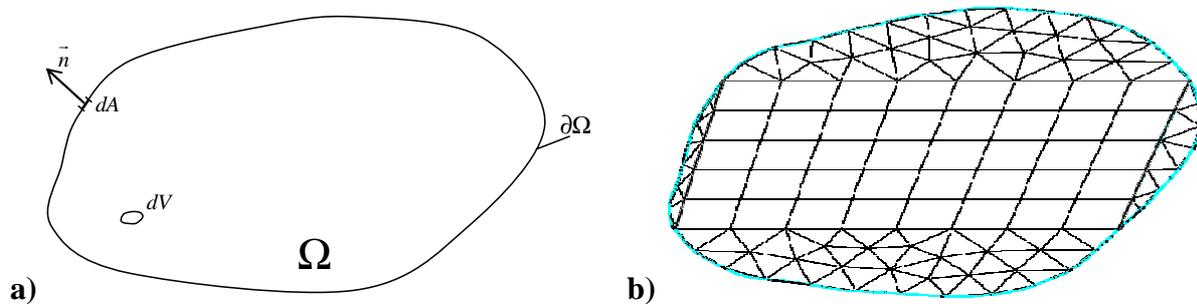


Figure 3.1 : Domaine physique continu (a) discrétisé en un domaine numérique (b).

Deux approches différentes existent lors de la décomposition du domaine de calcul en volumes de contrôles C_i : l'approche *Cell-Centred*, et l'approche *Cell-Vertex*. Dans l'approche *Cell-Centred*, les mailles C_i constituent les volumes de contrôle C_i et les nœuds i sont centrés aux mailles (les sommets des mailles n'interviennent pas). Alors que dans l'approche *Cell-Vertex* (centrée aux nœuds), de nouveaux volumes de contrôle C'_i (maillage dual) sont construits et centrés autour des sommets i du maillage initial (qui deviennent alors les nœuds), les mailles C_i initiales n'interviennent plus. Ces deux approches sont illustrées dans la Figure 3.2. La principale différence entre ces deux approches réside dans les mailles situées sur la frontière du domaine numérique dont le traitement est légèrement plus complexe avec une approche *Cell-Vertex*.

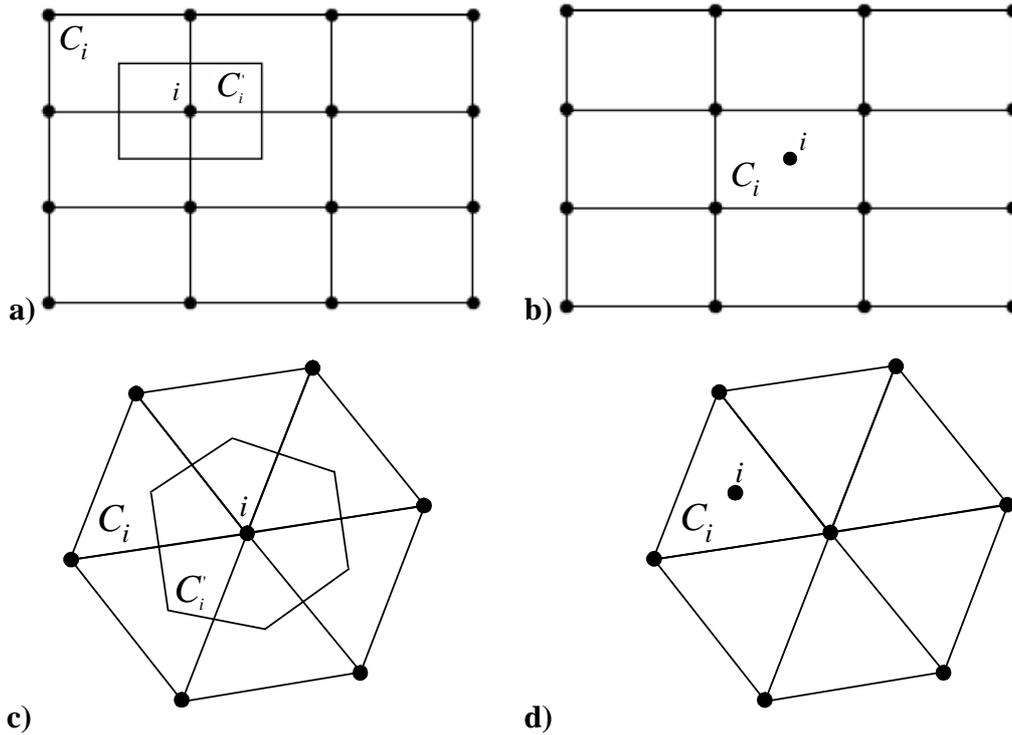


Figure 3.2 : Approche *Cell-Vertex* sur un maillage composé de mailles quadrilatérales (a) et triangulaires (c) et approche *Cell-Centred* sur un maillage composé de mailles quadrilatérales (b) et triangulaires (d).

L'approche *Cell-Centred* est utilisée dans le code de calculs. C'est aux nœuds du maillage que la solution numérique approchée de la solution physique du problème est calculée. Soit le nœud i du maillage T placé au centre du volume de contrôle C_i , et C_j un volume de contrôle voisin de C_i . On note Γ_i la frontière du volume de contrôle C_i . Ainsi, Γ_i représente les faces du volume de contrôle C_i . On note Γ_{ij} l'ensemble $\Gamma_i \cap \Gamma_j$, i.e. la face commune de deux volumes de contrôle voisins C_i et C_j . La Figure 3.3 suivante schématise la discrétisation spatiale dans le cadre de l'approche *Cell-Centred*.

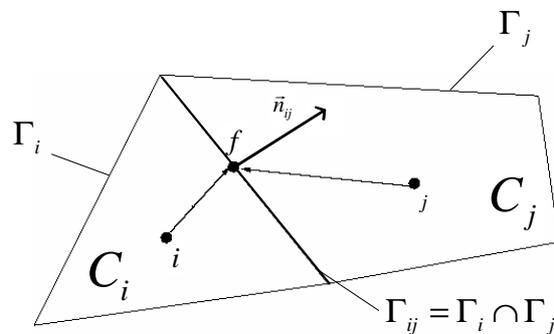


Figure 3.3 : Représentation à deux dimensions d'espace de la discrétisation spatiale (approche *Cell-Vertex*) : maille C_n centrée sur le nœud n , Γ_n représente l'ensemble des faces de la maille C_n ($n=\{i,j\}$). Γ_{ij} est la face commune aux mailles C_i et C_j ; f est le centre de la face Γ_{ij} et \vec{n}_{ij} sa normale extérieure.

Le maillage du domaine numérique peut être structuré (*i.e.* les mailles au sein du domaine ont la même forme, le même nombre de mailles voisines) ou non structuré (*i.e.* les mailles sont réparties de manière totalement arbitraire dans le domaine numérique). Les maillages structurés présentent l'avantage de faciliter la discrétisation spatiale des équations et particulièrement au niveau du lien unidirectionnel entre deux nœuds voisins. Le plus simple des maillages structurés est le maillage cartésien (voir Figure 3.4a). Notons que l'emploi de ce type de maillage est très limité en cas de présence de profils courbes ou inclinés dans les frontières du domaine d'étude. Pour palier à ce problème, les maillages curvilignes (voir Figure 3.4b) peuvent être générés par la résolution d'équations elliptiques aux dérivées partielles qui visent à transposer un maillage cartésien souhaité dans le domaine numérique dans le domaine physique (voir Figure 3.4c). Toutefois, il est évident que l'utilisation d'un maillage structuré ne peut pas être effectuée sur n'importe quel domaine d'étude en particulier si la géométrie de celui-ci est complexe. C'est pourquoi dans le plus général des cas, le maillage est non structuré et il peut être hybride (*i.e.* composé d'éléments de différentes formes : des triangles et des quadrilatères dans le cas à deux dimensions).

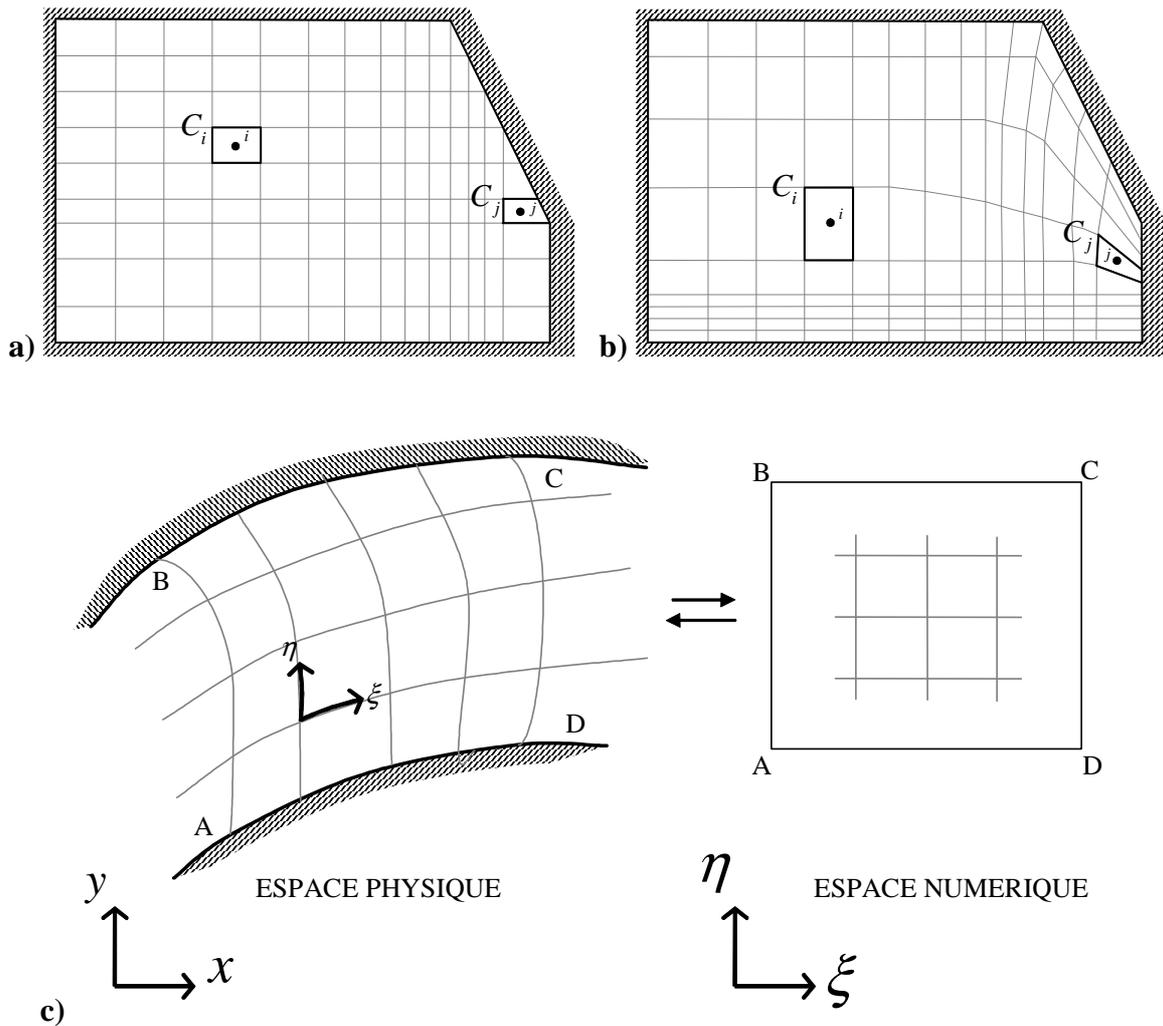


Figure 3.4 : Maillages structurés cartésien (a) et curviligne (b). Obtention du maillage structuré curviligne dans l'espace physique à partir d'une grille régulière dans l'espace numérique (c).

La Figure 3.5 montre un exemple de maillage initial utilisé pour les simulations numériques présentées dans le chapitre 4. Le maillage du domaine numérique de calcul s'effectue par blocs (on décompose 4 blocs) de mailles quadrilatérales : le bloc 1 représente le tube de collimation en amont de la buse (il comporte 80×80 nœuds), le bloc 2 représente la buse (il comporte 80×40 nœuds), le bloc 3 représente la partie inférieure de la chambre dans laquelle est injecté l'azote à l'aval de la buse (il comporte 240×120 nœuds), et le bloc 4 sa partie supérieure (il comporte 240×40 nœuds). Notons que la buse représentée dans ce maillage a une longueur de 1mm et un diamètre de 0,2mm, le tube de collimation a une longueur de 5mm et un diamètre de 1,6mm. La chambre de détente en aval de la buse a une longueur de 15mm et un diamètre de 20mm.

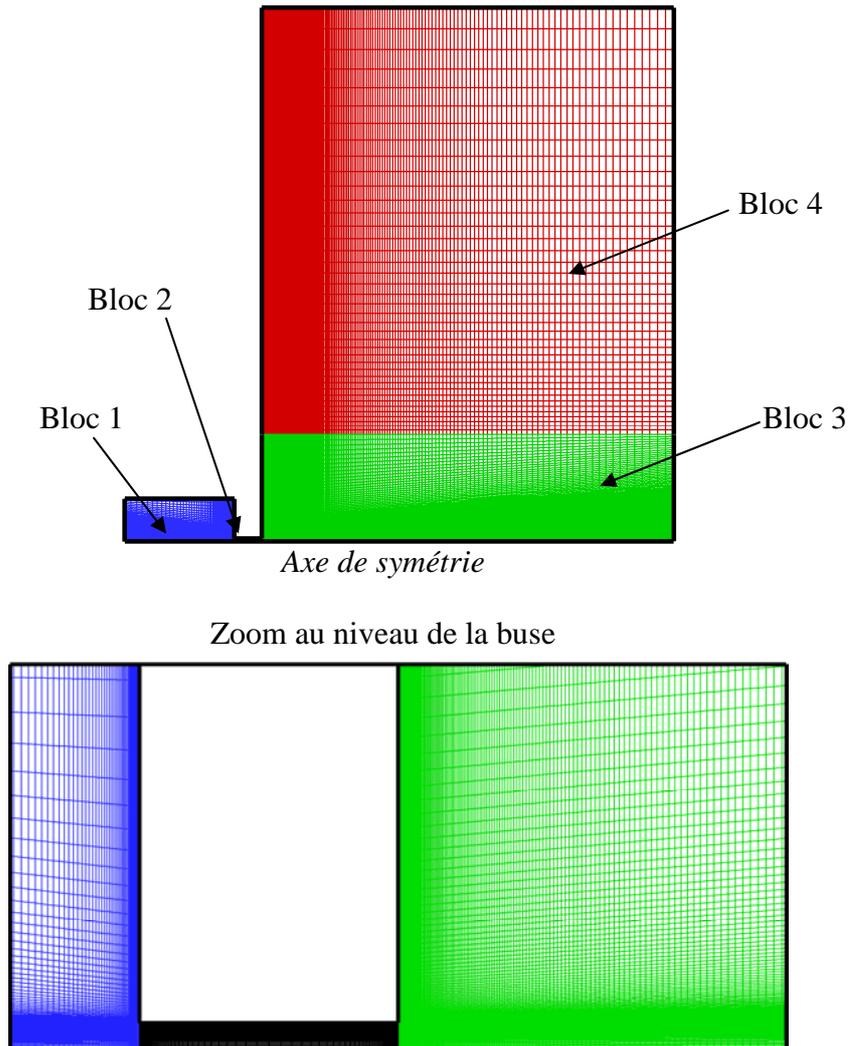


Figure 3.5 : Exemple de maillage utilisé dans nos simulations d'un jet axisymétrique issu d'une buse.

Etant donné les dimensions géométriques d'un tel domaine d'étude, certaines mailles vont être étirées dans une direction. Au final, la solution numérique obtenue à la fin d'une simulation numérique doit être indépendante du maillage c'est pourquoi différents maillages sont testés pour chaque configuration d'écoulement. De plus, en raison de la présence de forts gradients de pression, de vitesse ou de température dans les configurations d'écoulement étudiées, le maillage est raffiné localement au cours des simulations. Inversement, dans les zones de l'écoulement où les variables évoluent peu, il doit y avoir le moins de mailles possibles de telle sorte que le temps de calcul soit minimisé. Au chapitre 4, on spécifiera les dimensions des maillages finaux pour lesquels les résultats de simulations sont présentés.

Les aspects liés à la discrétisation du domaine d'étude ont été détaillés dans ce paragraphe. La seconde étape de la méthode des volumes finis consiste à reformuler le système d'équations de conservation du modèle physique (voir chapitre 2) dans le domaine numérique. Le paragraphe suivant détaille cette étape.

3.2 Méthode numérique

3.2.1 Discrétisation des équations du modèle physique

Reprenons la formulation intégrale des équations de conservation telles qu'elles ont été présentées dans le chapitre précédent. Elles permettent en particulier de décrire l'évolution d'une phase fluide dans l'espace (sur un volume fluide Ω de surface extérieure $\partial\Omega$ ("peau") et de normale unitaire extérieure à cette surface \vec{n}) et dans le temps t :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mathbf{Q} dV + \oint_{\partial\Omega} [\mathbf{F}_c(\mathbf{Q}) - \mathbf{F}_p(\mathbf{Q})] \cdot \vec{n} dS = \int_{\Omega} \mathbf{S} dV \quad (3.1)$$

Ces équations sont reformulées sur les volumes de contrôle discrets tels qu'ils ont été schématisés sur la Figure 3.3. Pour ce faire, on introduit d'abord le vecteur d'état conservatif discret \mathbf{Q}_i^n qui est une approximation de la moyenne du vecteur d'état $\mathbf{Q}(x, r, \theta, t)$ sur la maille C_i (qui a un volume $V(C_i)$) à l'instant t^n :

$$\mathbf{Q}_i^n = \frac{1}{V(C_i)} \int_{C_i} \mathbf{Q}(x, r, \theta, t) dV \quad (3.2)$$

De plus, on introduit le flux numérique convectif discret $\tilde{\mathbf{F}}_{C_{ij}}(\mathbf{Q}_i^n, \mathbf{Q}_j^n, n_{ij})$ qui est une approximation du flux convectif physique $\mathbf{F}_c(\mathbf{Q})$ entre la maille C_i et une maille voisine C_j pendant un intervalle de temps Δt . Ce flux numérique est fonction des deux états adjacents \mathbf{Q}_i^n et \mathbf{Q}_j^n à l'instant t^n entre les mailles C_i et C_j qui ont pour interface commune Γ_{ij} de normale extérieure \vec{n}_{ij} . Soit :

$$\tilde{\mathbf{F}}_{C_{ij}}(\mathbf{Q}_i^n, \mathbf{Q}_j^n, n_{ij}) = \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{F}_c(\mathbf{Q}) \vec{n}_{ij} dS \quad (3.3)$$

De cette manière, le bilan des flux convectifs sur la frontière Γ_i la maille C_i revient à la somme des flux convectifs numériques entre la maille C_i sur l'ensemble des mailles adjacentes C_j qui ont une interface commune Γ_{ij} avec C_i :

$$\sum_j \tilde{\mathbf{F}}_{C_{ij}}(\mathbf{Q}_i^n, \mathbf{Q}_j^n, n_{ij}) = \oint_{\Gamma_i} \mathbf{F}_c(\mathbf{Q}) \vec{n} dS \quad (3.4)$$

Le flux diffusif numérique et le vecteur source numérique sont des approximations du flux diffusif physique et du vecteur source physique respectivement. Ils sont considérés constants sur le même intervalle de temps Δt et ils dépendent de l'état moyen \mathbf{Q}_i^n dans la maille C_i à l'instant t^n :

$$\tilde{\mathbf{F}}_{D_i}(\mathbf{Q}_i^n) = \oint_{\Gamma_i} \mathbf{F}_D(\mathbf{Q}) \bar{n} dS \quad (3.5)$$

$$\tilde{\mathbf{S}}_i(\mathbf{Q}_i^n) = \int_{C_i} \mathbf{S}(\mathbf{Q}) dV \quad (3.6)$$

La discrétisation temporelle, entre les instants t^n et $t^{n+1} = t^n + \Delta t$, du terme instationnaire dans le membre de gauche de l'équation (3.1) peut par exemple s'écrire au premier ordre :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mathbf{Q} dV = V(C_i) \frac{\mathbf{Q}_i^{n+1} - \mathbf{Q}_i^n}{\Delta t} \quad (3.7)$$

Un schéma d'intégration temporelle plus précis peut être écrit au second ordre, de même que la nature du schéma d'intégration temporelle qui vise à déterminer à quel instant sont évalués les flux peut être implicite ou explicite. Afin de poursuivre la présentation, dans ce paragraphe, on garde l'expression écrite en (3.7). Les équations discrètes de conservation s'écrivent alors directement (par la nature même de la méthode des volumes finis) à partir de la formulation intégrale conservative écrite en (3.1) :

$$\mathbf{Q}_i^{n+1} = \mathbf{Q}_i^n + \frac{\Delta t}{V(C_i)} \left[\sum_j \tilde{\mathbf{F}}_{C_{ij}}(\mathbf{Q}_i^n, \mathbf{Q}_j^n, n_{ij}) + \tilde{\mathbf{F}}_{D_i}(\mathbf{Q}_i^n) + \tilde{\mathbf{S}}_i(\mathbf{Q}_i^n) \right] \quad (3.8)$$

Le système d'équations discrètes ainsi formé permet de déterminer l'état discret \mathbf{Q}_i^{n+1} dans la C_i à l'instant t^{n+1} . C'est la base de la méthode numérique. Il reste maintenant à expliciter la manière dont est effectué le bilan des flux sur chacune des mailles du maillage (paragraphe 3.2.2) et le calcul numérique des différents membres de l'équation (3.8) (paragraphe 3.2.3).

3.2.2 Le problème de Riemann et l'approche de Godunov

La méthode des volumes finis consiste à faire un bilan local des flux sur chaque maille du maillage. En particulier, les flux convectifs sont généralement obtenus en résolvant un problème de Riemann local à chaque face d'une maille, pour les écoulements compressibles. Ainsi, avant de détailler l'écriture des flux numériques, nous proposons d'étudier le problème de Riemann. Physiquement, le problème de Riemann vise à résoudre une équation (ou un système d'équations) aux dérivées partielles, hyperbolique (la notion a été introduite au chapitre 2), connaissant une solution initiale continue par morceaux. Prenons le cas des équations d'Euler à une dimension d'espace x , permettant de décrire l'évolution du fluide (dont l'état est représenté par le vecteur conservatif $\mathbf{Q} = (\rho, \rho u, \rho E_{tot})^T$) au cours du temps t :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{Q})}{\partial x} = 0 \\ \mathbf{Q} = (\rho, \rho u, \rho e_{tot})^T, \mathbf{F}(\mathbf{Q}) = (\rho u, \rho u^2 + P, u(\rho e_{tot} + P))^T \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Avec la condition initiale :

$$\mathbf{Q}(x, t = 0) = \mathbf{Q}^{(0)}(x) = \begin{cases} \mathbf{Q}_L & \text{si } x < 0 \\ \mathbf{Q}_R & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

Le problème de Riemann (3.9)-(3.10), vise alors à résoudre le système d'équations (3.9) ayant pour condition initiale (3.10). Les propriétés du système d'équations conservatives, et plus particulièrement les propriétés des équations d'Euler, ont été étudié précédemment, au paragraphe 2.1.4. Il était apparu que les valeurs propres du système sont : $\lambda_1 = u - c$, $\lambda_2 = u$ et $\lambda_3 = u + c$ (dans l'ordre croissant) où c est la célérité du son (réelle et positive) dans le milieu considéré. Rappelons ici que ce résultat est valable quelle que soit la loi d'état utilisée pour fermer thermodynamiquement le système, pourvu que le système reste hyperbolique. Compte tenu de cette propriété, la solution du problème de Riemann (3.9)-(3.10), dans le plan (x, t) , est alors donnée sur la Figure 3.6. Chacune des trois ondes i (étant associée à une valeur propre λ_i du système) propagent des sauts de discontinuité du vecteur \mathbf{Q} , à partir de l'origine à la vitesse λ_i .

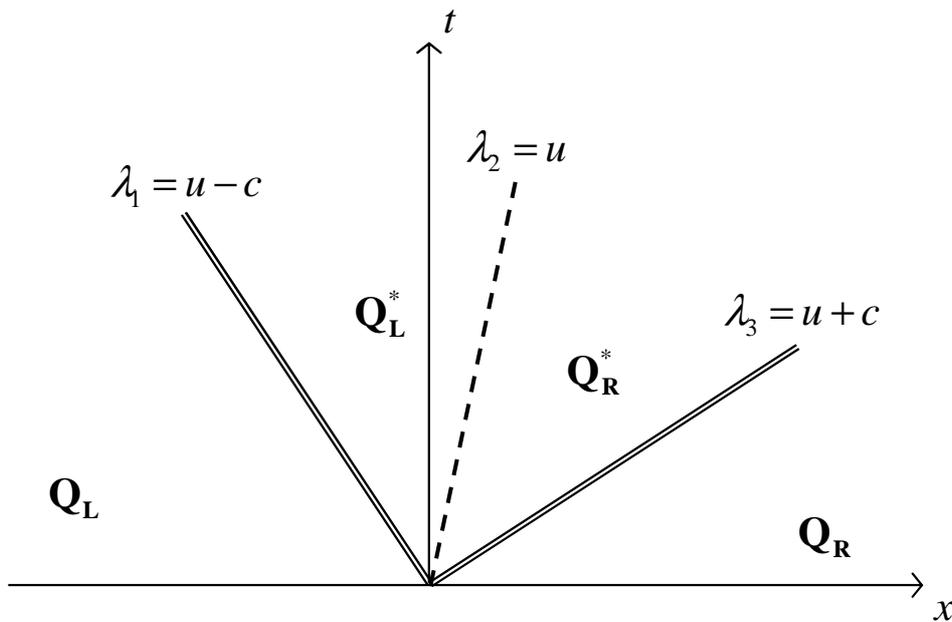


Figure 3.6 : Allure de la solution du problème de Riemann dans le cadre du système d'équations d'Euler monodimensionnelles.

La solution du problème de Riemann est similaire en temps et fait apparaître 4 régions dans le plan (x, t) séparées par les trois courbes caractéristiques de pente $1/\lambda_i$ représentant les trois ondes élémentaires i se propageant à la vitesse caractéristique λ_i . Notons que la vitesse de propagation de ces ondes ne correspond pas aux vitesses caractéristiques auxquelles elles sont associées. Naturellement, la solution à gauche de la courbe caractéristique associée à la vitesse $\lambda_1 = u - c$ est simplement l'état initial \mathbf{Q}_L et la solution à droite de la courbe caractéristique associée à vitesse $\lambda_3 = u + c$ est simplement l'état initial \mathbf{Q}_R . Pour $t > 0$, deux nouveaux états \mathbf{Q}_L^* et \mathbf{Q}_R^* apparaissent. Ces deux états sont séparés par la courbe caractéristique associée à la vitesse $\lambda_2 = u$ qui est l'onde élémentaire de discontinuité de contact (ou *ligne de glissement*). Afin de savoir comment évoluent les grandeurs physiques de l'écoulement dans ces différentes régions, les équations d'Euler peuvent être reformulées en fonction des variables primitives (ou physiques) en utilisant le vecteur d'état non conservatif $\mathbf{W} = (\rho, u, P)^T$. Cette manipulation est relativement aisée lorsque les équations d'Euler sont fermées par la loi d'état des gaz parfait qui a le grand avantage de pouvoir fournir un lien direct entre les variations de pressions et d'énergie interne (on rappelle un des résultat du chapitre 2 qui donne pour le gaz parfait $P = (\gamma - 1)\rho e_i$, et $\rho e_{tot} = P/(\gamma - 1) + \rho u^2/2$). Dans ce cas, avec la loi d'état des gaz parfaits, le système des équations d'Euler (3.9) peut être réécrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = \mathbf{0} \\ \mathbf{W} = \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ P \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}(\mathbf{W}) = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & 1/\rho \\ 0 & \rho c^2 & u \end{bmatrix} \end{array} \right. \quad (3.11)$$

Où la matrice jacobienne des flux non conservatif a pour valeurs propres $\lambda_1 = u - c$, $\lambda_2 = u$ et $\lambda_3 = u + c$ (les mêmes que pour le système (3.9)). Ainsi, sur les courbes caractéristiques, les équations caractéristiques du système deviennent :

$$\left\{ \begin{array}{l} dP - \rho c du = 0 \quad \text{sur} \quad dx/dt = \lambda_1 = u - c \\ dP - c^2 d\rho = 0 \quad \text{sur} \quad dx/dt = \lambda_2 = u \\ dP + \rho c du = 0 \quad \text{sur} \quad dx/dt = \lambda_3 = u + c \end{array} \right. \quad (3.12)$$

Détaillons maintenant les évolutions des grandeurs physiques au travers de ces 3 ondes caractéristiques.

Pour l'onde de discontinuité de contact (associée à la vitesse $\lambda_2 = u$), la relation suivante (invariants de Riemann généralisés) est respectée :

$$du = dP = 0 \quad (3.13)$$

La discontinuité de contact est donc une onde au travers de laquelle la pression et la vitesse du fluide sont constantes alors que la masse volumique varie de manière discontinue tout comme les variables qui en dépendent (l'énergie interne, l'entropie, la température, la vitesse du son,...). La même analyse montre que les deux autres ondes élémentaires de vitesse $\lambda_1 = u - c$ et $\lambda_3 = u + c$, sont des ondes acoustiques qui propagent des variations de pression, de masse volumique et de vitesse. Il peut s'agir d'ondes de détente ou d'ondes de choc.

Si l'on suppose que l'onde associée à la vitesse $\lambda_3 = u + c$ est une onde de choc, les relations données par les invariants de Riemann généralisés correspondent aux relations de saut de Rankine-Hugoniot permettant de connaître l'état en amont du choc $\mathbf{W}_R^* = (\rho_R^*, u^*, P^*)^T$ en fonction de l'état connu $\mathbf{W}_R = (\rho_R, u_R, P_R)^T$ à l'aval du choc mobile. On obtient les relations permettant de connaître le saut de masse volumique ρ_R^*/ρ_R et la variation de vitesse $u^* - u_R$ au travers du choc en fonction des pressions P^* et P_R et de la masse volumique ρ_R :

$$\begin{cases} \frac{\rho_R^*}{\rho_R} = \frac{P^*/P_R + \alpha}{\alpha P^*/P_R + 1} \\ u^* - u_R = (P^* - P_R) \sqrt{\frac{2}{(\gamma+1)\rho_R}} \sqrt{\frac{1}{P^* + \alpha P_R}} \end{cases}, \text{ avec } \alpha = (\gamma-1)/(\gamma+1). \quad (3.14)$$

La même démarche peut être appliquée en supposant que l'onde élémentaire associée à la vitesse $\lambda_1 = u - c$ est une onde de choc. Il s'agira de déterminer l'état en amont du choc $\mathbf{W}_L^* = (\rho_L^*, u^*, P^*)^T$ en fonction de l'état connu $\mathbf{W}_L = (\rho_L, u_L, P_L)^T$ à l'aval du choc mobile. On obtient les relations donnant le saut de masse volumique ρ_L^*/ρ_L et la variation de vitesse $u^* - u_L$ au travers du choc en fonction des pressions P^* et P_L et de la masse volumique ρ_L :

$$\begin{cases} \frac{\rho_L^*}{\rho_L} = \frac{P^*/P_L + \alpha}{\alpha P^*/P_L + 1} \\ u^* - u_L = -(P^* - P_L) \sqrt{\frac{2}{(\gamma+1)\rho_L}} \sqrt{\frac{1}{P^* + \alpha P_L}} \end{cases}, \text{ avec } \alpha = (\gamma-1)/(\gamma+1). \quad (3.15)$$

Dans le cas d'une onde de détente, pour connaître les variations des propriétés physiques, il est nécessaire de reformuler les équations d'Euler en fonction du vecteur d'état non conservatif $\mathbf{W} = (\rho, u, s)^T$ (voir Toro [1] pour les détails). En effet, la formulation (3.11)-(3.12) précédente montre uniquement que la masse volumique, la vitesse et la pression varient à travers l'onde de détente. Ainsi, si l'on considère que l'onde élémentaire associée à la vitesse $\lambda_1 = u - c$ est une onde de détente, on obtient :

$$\begin{cases} du + \frac{c}{\rho} d\rho = 0 \\ ds = 0 \Rightarrow d(P\rho^{-\gamma}) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\rho_L^*}{\rho_L} = \left(\frac{P^*}{P_L}\right)^{\frac{1}{\gamma}} \\ u^* - u_L = -\frac{2c_L}{(\gamma-1)} \left[\left(\frac{P^*}{P_L}\right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - 1 \right] \end{cases} \quad (3.16)$$

De la même manière, si l'on considère que l'onde élémentaire associée à la vitesse $\lambda_3 = u + c$ est une onde de détente, on obtient :

$$\begin{cases} du - \frac{c}{\rho} d\rho = 0 \\ ds = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\rho_R^*}{\rho_R} = \left(\frac{P^*}{P_R}\right)^{\frac{1}{\gamma}} \\ u^* - u_R = \frac{2c_R}{(\gamma-1)} \left[\left(\frac{P^*}{P_R}\right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - 1 \right] \end{cases} \quad (3.17)$$

L'entropie est donc constante au travers de l'onde de détente qui a une forme d'éventail bornée par des courbes caractéristiques correspondant au *pied* et à la *queue* de la détente.

Ainsi, les relations (3.13) à (3.17) permettent de décrire entièrement les 4 solutions possibles au problème de Riemann qui sont schématisées sur la Figure 3.7. La solution exacte du problème de Riemann est alors obtenue en combinant les relations parmi (3.13) à (3.17) correspondant à la structure rencontrée (Figure 3.7) qui est déterminée en fonction des niveaux de pression de part et d'autre de chacune des ondes $\lambda_1 = u - c$, et $\lambda_3 = u + c$ (l'onde associée à $\lambda_2 = u$ étant toujours une discontinuité de contact).

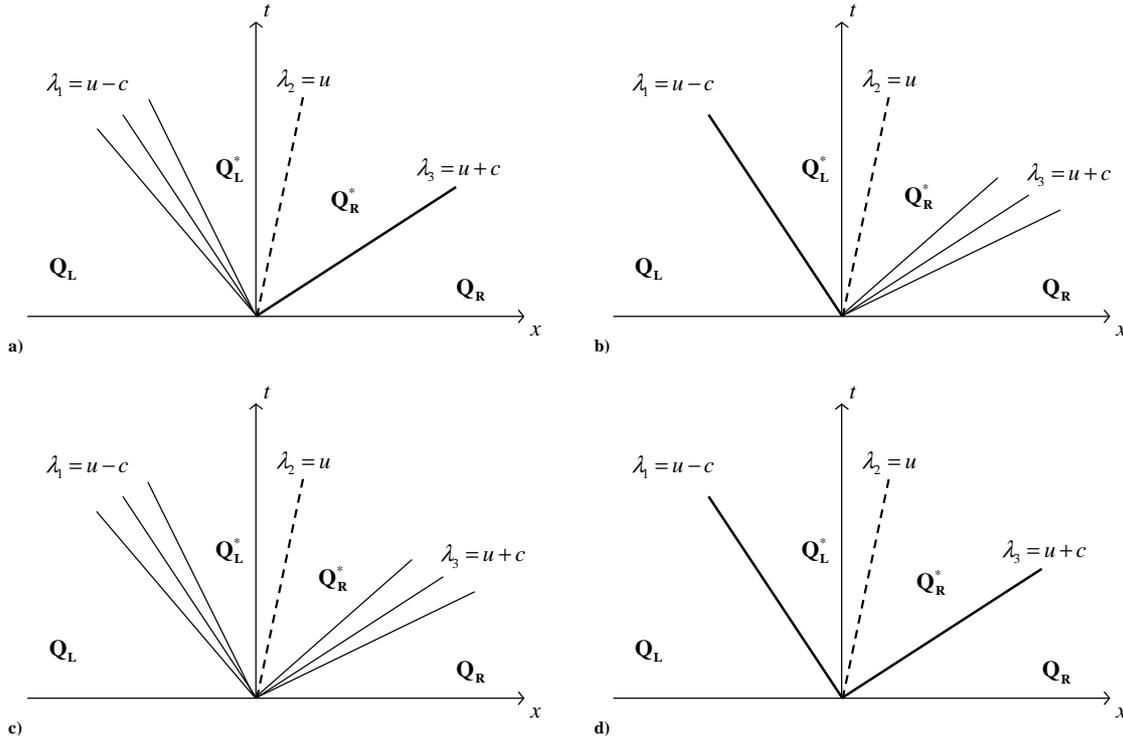


Figure 3.7 : Les solutions du problème de Riemann suivant la nature des ondes associées aux vitesses caractéristiques $\lambda_1 = u - c$, $\lambda_2 = u$, et $\lambda_3 = u + c$ qui sont respectivement : a) une onde de détente, une discontinuité de contact, et une onde de choc; b) une onde de choc, une discontinuité de contact, et une onde de détente; c) une onde de détente, une discontinuité de contact, et une onde de détente; d) une onde de choc, une discontinuité de contact, et une onde de choc.

Par exemple, pour la structure où les ondes élémentaires associées à $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ sont respectivement une onde de détente à gauche, une discontinuité de contact et une onde de choc à droite (Figure 3.7a), on obtient la relation implicite permettant de déterminer la pression P^* dans la région inconnue (de part et d'autre de la ligne de glissement) :

$$-\frac{2c_L}{(\gamma-1)} \left[\left(\frac{P^*}{P_L} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - 1 \right] + (P^* - P_R) \sqrt{\frac{2}{(\gamma+1)\rho_R}} \sqrt{\frac{1}{P^* + \alpha P_R}} + u_R - u_R = 0 \quad (3.18)$$

La résolution de cette relation ne peut pas être analytique, une méthode numérique itérative est nécessaire (par exemple la méthode classique de Newton-Raphson). Elle conduit à la détermination de la pression en aval du choc à droite P^* , qui permet de déterminer u^* et ρ_R^* (par la relation (3.14)). Ainsi, comme au travers de la discontinuité de contact, la pression et la vitesse ne varient pas (relation (3.13)), il reste à déterminer la masse volumique ρ_L^* à l'aval de la détente qui est donnée par la relation (3.16). De cette manière les états intermédiaires Q_L^* et Q_R^* sont entièrement définis et le problème de Riemann (3.9) fermé par la loi d'état des gaz parfaits est résolu de manière exacte. Toutefois, cette résolution exacte du problème

de Riemann (présentée ici à 1 dimension d'espace) est extrêmement couteuse en temps de calcul. C'est pourquoi, on résout généralement le problème de Riemann de manière approchée.

La performance d'un solveur de Riemann approché dépend du choix de la formulation du flux numérique. Historiquement, Godunov [2] a eu l'idée de résoudre numériquement les équations de conservation (formant un système non linéaire d'équations aux dérivées partielles) en résolvant un problème de Riemann local, entre deux mailles voisines du domaine numérique, afin d'obtenir le flux numérique (voir Figure 3.8).

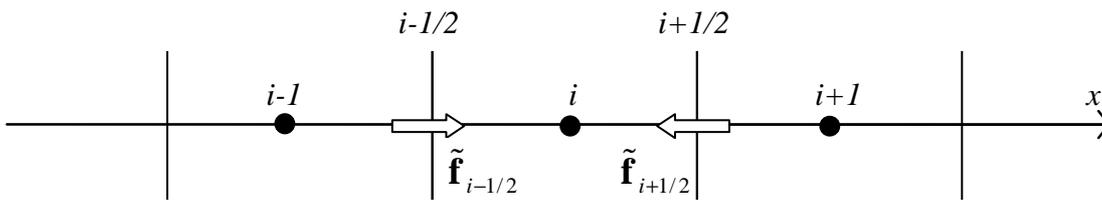


Figure 3.8 : Illustration de la méthode de Godunov visant à résoudre un problème de Riemann local entre deux volumes de contrôles voisins issus de la discrétisation spatiale du domaine.

Plus précisément, l'accroissement du flux entre deux mailles voisines est décomposé en fonction des accroissements élémentaires liés à la propagation des ondes caractéristiques (obtenues via la résolution du problème de Riemann local). L'évolution temporelle d'une discontinuité initiale entre deux états constants différents sur deux volumes finis adjacents peut alors être calculée. Ainsi, d'après la méthode de Godunov, un schéma numérique conservatif permettant de résoudre (3.9) est alors de la forme :

$$\mathbf{Q}_i^{n+1} = \mathbf{Q}_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\tilde{\mathbf{f}}_{i+1/2} - \tilde{\mathbf{f}}_{i-1/2} \right] \quad (3.19)$$

Où $\tilde{\mathbf{f}}_{i+1/2}$ est le flux numérique (également appelé *flux numérique de Godunov*) exprimé à l'interface entre le volume de contrôle i et ses volumes de contrôle voisins $i-1$ et $i+1$ (voir Figure 3.8). La valeur du flux numérique $\tilde{\mathbf{f}}_{i+1/2}$ à l'interface entre deux mailles est la solution sur la ligne caractéristique $x/t=0$, du problème de Riemann local. La démarche est ensuite étendue à l'ensemble du domaine numérique en supposant que la solution est continue par morceaux. Notons que pour des dimensions d'espace supérieures (à 2 ou 3 dimensions d'espace), la même démarche est applicable à cause du caractère d'invariance rotationnelle des équations d'Euler (voir Toro [1]).

3.2.3 Solveur de Riemann approché de Roe

Les solveurs de Riemann approchés se distinguent du solveur exact avec un temps de calcul plus acceptable. Le solveur de Roe [3] fait partie des plus célèbres. Il se base sur la démarche détaillée dans le paragraphe précédent visant à résoudre numériquement le problème de Riemann inhérent à la méthode de Godunov (la démarche a été détaillée pour la loi d'état des gaz parfaits). La généralisation du solveur de Riemann à une loi d'état quelconque est encore très ouverte, pour plus d'informations à ce sujet, on se référera aux travaux de Montagné *et al.* [4], Collela et Glaz [5], Menikoff et Plohr [6], Ivings *et al.* [7].

Deux grands types de solveurs de Riemann approchés existent. Le premier type de solveur de Riemann approché consiste à trouver un état moyen $\bar{\mathbf{Q}}$ tel que le flux numérique à l'interface $\tilde{\mathbf{f}}_{i+1/2}$ soit une approximation du flux physique $\mathbf{F}(\bar{\mathbf{Q}})$ évalué à l'état moyen $\bar{\mathbf{Q}}$. Les solveurs HLL [8] et HLLC [9] font partie de ce type de solveur de Riemann approchés. Le seconde type de schéma vise à trouver directement une approximation du flux numérique $\tilde{\mathbf{f}}_{i+1/2}$. Le solveur de Roe [3] fait partie de ce type de schéma.

On s'intéresse ici au solveur de Riemann approché de Roe. Reprenons les équations de Navier Stokes qui régissent l'écoulement compressible axi-symétrique telles quelles ont été présentées dans le chapitre 2 :

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_C}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}_C}{\partial r} + \frac{1}{r}(\mathbf{G}_C - \mathbf{G}_D) - \frac{\partial \mathbf{F}_D}{\partial x} - \frac{\partial \mathbf{G}_D}{\partial r} = \mathbf{S}_{\text{axi}} \quad (3.20)$$

Avec :

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_x \\ \rho u_r \\ \rho e_{\text{tot}} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{F}_C = \begin{pmatrix} \rho u_x \\ \rho u_x^2 + P \\ \rho u_x u_r \\ (\rho e_{\text{tot}} + P)u_x \end{pmatrix}; \quad \mathbf{G}_C = \begin{pmatrix} \rho u_r \\ \rho u_r u_x \\ \rho u_r^2 + P \\ (\rho e_{\text{tot}} + P)u_r \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F}_D = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{rx} \\ u_x \tau_{xx} + u_r \tau_{xr} + \lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{G}_D = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xr} \\ \tau_{rr} \\ u_x \tau_{rx} + u_r \tau_{rr} + \lambda_T \frac{\partial T}{\partial r} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S}_{\text{axi}} = \frac{-1}{r} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \tau_{\theta\theta} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Les termes diffusifs sont traités avec des schémas centrés classiques et ne présentent pas d'intérêt particulier dans la suite. Les flux convectifs peuvent être réécrits dans leur forme quasi-linéaire suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{F}_c}{\partial x} = \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x}, & \mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{F}_c}{\partial \mathbf{Q}} \\ \frac{\partial \mathbf{G}_c}{\partial r} = \mathbf{B} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial r}, & \mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{G}_c}{\partial \mathbf{Q}} \end{cases} \quad (3.21)$$

Les matrices jacobiennes des flux convectifs (\mathbf{A} et \mathbf{B}) sont diagonalisables si le système est hyperbolique (voir chapitre 2). Dans la méthode de Roe, la matrice jacobienne \mathbf{A} (en fait, $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{Q})$), est remplacée par une matrice constante $\bar{\mathbf{A}}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)$ qui est une fonction des états \mathbf{Q}_L et \mathbf{Q}_R de part et d'autre de l'interface, de sorte à remplacer la loi de conservation non linéaire du problème de Riemann initial par un problème linéaire à coefficient constant. Les conditions initiales du problème de Riemann local restent inchangées. La nouvelle matrice $\bar{\mathbf{A}}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)$ n'est pas définie de manière stricte, elle dépend du choix des états moyens. L'état moyen de Roe permet de capturer les discontinuités de manière exacte, il définit en particulier :

$$\bar{\mathbf{A}}(\mathbf{Q}) = \mathbf{A}(\bar{\mathbf{Q}}) \quad (3.22)$$

De plus, cette nouvelle matrice $\bar{\mathbf{A}}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)$ (on utilisera la notation $\bar{\mathbf{A}} = \bar{\mathbf{A}}(\mathbf{Q}_L, \mathbf{Q}_R)$ abrégée dans la suite) garantit la validité des lois de conservation au travers des discontinuités :

$$\mathbf{F}_c(\mathbf{Q}_R) - \mathbf{F}_c(\mathbf{Q}_L) = \bar{\mathbf{A}} \cdot (\mathbf{Q}_R - \mathbf{Q}_L) \quad (3.23)$$

Pour trouver la matrice $\bar{\mathbf{A}}$, l'idée originale de Roe consiste à définir un nouveau vecteur \mathbf{Z} tel que la différence des états à gauche et à droite et la différence des flux évalués à droite et à gauche soient de la même forme (évolution quadratique en fonction de \mathbf{Z}) :

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_R - \mathbf{Q}_L = \mathbf{X} \cdot (\mathbf{Z}_R - \mathbf{Z}_L) \\ \mathbf{F}_c(\mathbf{Q}_R) - \mathbf{F}_c(\mathbf{Q}_L) = \mathbf{Y} \cdot (\mathbf{Z}_R - \mathbf{Z}_L) \end{cases} \quad (3.24)$$

Ce qui permet de reformuler la différence des flux :

$$\mathbf{F}_c(\mathbf{Q}_R) - \mathbf{F}_c(\mathbf{Q}_L) = \mathbf{Y} \cdot \mathbf{X}^{-1} \cdot (\mathbf{Q}_R - \mathbf{Q}_L) \quad (3.25)$$

En identifiant cette relation avec (3.23), la matrice $\bar{\mathbf{A}}$ s'identifie avec $\mathbf{Y} \cdot \mathbf{X}^{-1}$.

Roe [2] montre que :

$$\mathbf{Z} = \sqrt{\rho} \begin{pmatrix} 1 \\ u_x \\ u_r \\ e_{\text{tot}} + P/\rho \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

Ainsi, l'état moyen $\bar{\mathbf{Q}}$ au sens de Roe est alors défini par :

$$\begin{cases} \bar{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R} \\ \bar{u}_x = \frac{\sqrt{\rho_L} u_{xL} + \sqrt{\rho_R} u_{xR}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\ \bar{u}_r = \frac{\sqrt{\rho_L} u_{rL} + \sqrt{\rho_R} u_{rR}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\ \bar{h} = \frac{\sqrt{\rho_L} h_L + \sqrt{\rho_R} h_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \end{cases} \quad (3.27)$$

De plus, on introduit la vitesse du son moyenne au sens de Roe :

$$\bar{c}^2 = \bar{P}_\rho + h \bar{P}_{\rho l} \quad (3.28)$$

Les vitesses d'ondes sont les valeurs propres λ_i de la matrice jacobienne $\bar{\mathbf{A}}$ des flux convectifs évalués à l'état moyen de Roe, soit :

$$\begin{cases} \lambda_1 = \bar{u} - \bar{c} \\ \lambda_2 = \lambda_3 = \bar{u} \\ \lambda_4 = \bar{u} + \bar{c} \end{cases} \quad (3.29)$$

La matrice $\bar{\mathbf{A}}$ est donc la matrice \mathbf{A} évaluée à l'état moyen $\bar{\mathbf{Q}}$. L'expression trouvée au chapitre 2 pour la matrice \mathbf{A} était valable à 1 dimension d'espace. Dans le cas axisymétrique, on obtient :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -u_x^2 + c^2 - P_{\rho l} \cdot \left(h - \frac{1}{2} u_x^2 - \frac{1}{2} u_r^2 \right) & 2u_x - u_x P_{\rho l} & -u_r P_{\rho l} & P_{\rho l} \\ -u_x u_r & u_r & u_x & 0 \\ u_x \left(c^2 - h - P_{\rho l} \cdot \left(h - \frac{1}{2} u_x^2 - \frac{1}{2} u_r^2 \right) \right) & h - u_x^2 P_{\rho l} & -u_x u_r P_{\rho l} & u_x (1 + P_{\rho l}) \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

D'après (3.30), la matrice $\bar{\mathbf{A}}$ fera donc intervenir \bar{P}_ρ et $\bar{P}_{\rho l}$. La définition de ces deux quantités ne pose pas de problème pour la loi d'état des gaz parfaits. En revanche, il en est tout autre pour une loi d'état quelconque. Le principal inconvénient est qu'il n'est pas possible de trouver une définition unique de \bar{P}_ρ et $\bar{P}_{\rho l}$. Par exemple, Montagné *et al.* [4] proposent :

$$\frac{1}{\bar{P}_{\rho l}} = \frac{\frac{1}{2} \left[\left(\left(\frac{(P_\rho)_L}{(P_{\rho l})_L} + \frac{(P_\rho)_R}{(P_{\rho l})_R} \right) \Delta P + \left(\frac{1}{(P_{\rho l})_L} + \frac{1}{(P_{\rho l})_R} \right) \tilde{C}^4 \Delta \rho \right) \Delta \rho + \Delta(\rho e_i) \Delta P \right]}{(\Delta P)^2 + \tilde{C}^4 (\Delta \rho)^2},$$

$$\frac{\bar{P}_\rho}{\bar{P}_{\rho l}} = \frac{\frac{1}{2} \left[\left(\left(\frac{(P_\rho)_L}{(P_{\rho l})_L} + \frac{(P_\rho)_R}{(P_{\rho l})_R} \right) \Delta P + \left(\frac{\tilde{C}^4}{(P_{\rho l})_L} + \frac{\tilde{C}^4}{(P_{\rho l})_R} \right) \Delta \rho \right) \Delta \rho - \tilde{C}^4 \Delta(\rho e_i) \Delta P \right]}{(\Delta P)^2 + \tilde{C}^4 (\Delta \rho)^2}, \quad \tilde{C}^2 = \frac{c_R^2 + c_L^2}{2}.$$

Les matrices jacobiniennes des flux convectifs (la démonstration est faite pour \mathbf{A} , mais il en est de même pour \mathbf{B}) sont ensuite réécrites par décomposition spectrale, sous la forme :

$$\mathbf{A} = \mathbf{R}(\mathbf{A}) \cdot \mathbf{\Lambda}(\mathbf{A})^{-1} \quad (3.31)$$

Où la matrice \mathbf{R} est la matrice () composée par les vecteurs propres à droite de la matrice \mathbf{A} , et la matrice $\mathbf{\Lambda}$ est la matrice diagonale dont les composantes sont les valeurs propres λ_i de \mathbf{A} :

$$= \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_x + c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_x - c \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{A}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{c^2} & 0 & \frac{1}{c^2} & \frac{1}{c^2} \\ \frac{u_x}{c^2} & 0 & \frac{u_x + c}{c^2} & \frac{u_x - c}{c^2} \\ \frac{u_r}{c^2} & c & \frac{u_r}{c^2} & \frac{u_r}{c^2} \\ \frac{h}{c^2} - \frac{1}{P_{\rho l}} & u_r c & \frac{h + u_x c}{c^2} & \frac{h - u_x c}{c^2} \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

En conclusion, le flux numérique du schéma de Roe s'écrit alors :

$$\tilde{\mathbf{f}}_{i+1/2} = \frac{1}{2} [\mathbf{F}_C(\mathbf{Q}_R) + \mathbf{F}_C(\mathbf{Q}_L)] - \frac{1}{2} [\mathbf{R}(\bar{\mathbf{A}}) \cdot |(\bar{\mathbf{A}})| \cdot \mathbf{R}^{-1}(\bar{\mathbf{A}})] \cdot (\mathbf{Q}_R - \mathbf{Q}_L) \quad (3.34)$$

L'approche par les solveurs de Riemann approchés s'inspire directement de la résolution d'un problème hyperbolique par la méthode des caractéristiques. Par leur construction, ces outils doivent se restreindre strictement aux parties hyperboliques. Ces schémas sont précis. En effet, une discontinuité peut être calculée à l'intérieur d'une seule cellule, sans aucune erreur d'évaluation. Cela explique l'appellation familière de *schéma à capture de choc*. Dans la présentation du solveur de Roe qui vient d'être établie, l'interpolation des variables sur les faces des volumes de contrôle a été écrite au premier ordre.

La méthode MUSCL (Monotonic Upwind Scheme for Conservative Laws) proposée par Van Leer [10], [11], [12] permet de porter la précision des solveurs de Riemann au second ordre par reconstruction de la solution. L'extension au second ordre implique la création d'oscillations, que l'on peut détruire à leur source par l'utilisation de limiteurs. Les méthodes ENO (Essentially Non Oscillatory), puis WENO (Weighted Essentially Non Oscillatory) approfondissent la méthode MUSCL, en autorisant la reconstruction de la solution jusqu'au 11^{ème} ordre (voir Shu et Osher [13], Jiang et Shu [14]).

De plus, il est possible de limiter l'utilisation des solveurs de Riemann aux régions avec discontinuités, et de choisir des schémas moins dissipatifs et plus rapides dans le reste de la simulation : c'est le cas d'une approche hybride.

3.2.4 Précisions sur les discrétisations spatiales et temporelles

Après avoir précisé les principes de la méthode des volumes finis et détaillé la méthode numérique de résolution des équations de conservation, nous apportons finalement quelques remarques sur la discrétisation spatiale. Dans l'approche centrée aux mailles, les variables sont évaluées au centre des mailles. Cependant, les valeurs des variables sur les faces des mailles sont également requises dans le calcul des flux numériques convectifs. Le premier point de cette section montre comment sont obtenues ces valeurs. En outre, le deuxième point de cette section apporte quelques précisions sur la discrétisation temporelle qui a brièvement été introduite précédemment.

3.2.4.1 Discrétisation spatiale : décentrage et ordre de discrétisation

Les valeurs des variables d'écoulement doivent être estimées sur les faces des mailles dans le calcul des flux numériques convectifs. Pour ce faire, elles sont interpolées à partir des valeurs au centre des mailles (aux nœuds i et j sur la figure 3.9) qui sont connues grâce à des méthodes de décentrage : les schémas UPWIND. L'appellation *UPWIND* indique que le décentrage permettant d'obtenir la valeur d'une variable à l'interface entre deux mailles est réalisé à partir de la maille amont par rapport à la direction de la vitesse normale à l'interface considérée.

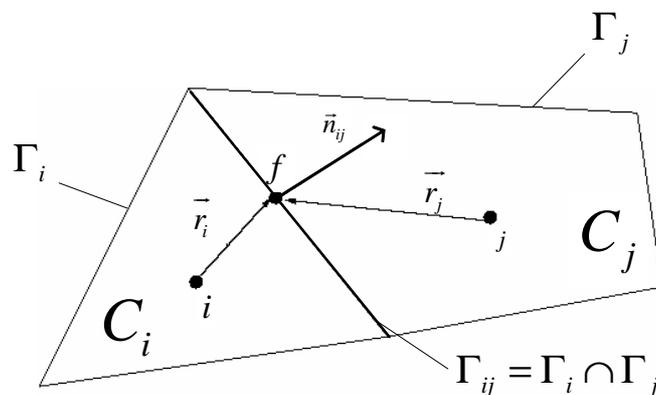


Figure 3.9 : Rappel de la discrétisation spatiale. Légende : voir figure 3.3.

Dans le code de calculs utilisé, deux schémas UPWIND sont disponibles : au premier ordre et au second ordre.

Pour le schéma UPWIND au premier ordre, les valeurs des variables à l'interface Γ_{ij} commune aux deux mailles voisines C_i et C_j , sont prises égales à celles au centre de la maille située à l'amont par rapport à la vitesse normale à l'interface. Dans ce cas, la valeur

d'une variable d'écoulement au centre de la maille représente une moyenne sur l'ensemble de la maille.

Le schéma UPWIND au second ordre est une extension à un ordre spatial supérieur du schéma UPWIND du premier ordre. Pour ce schéma, les valeurs des variables à l'interface sont reconstruites. Cette reconstruction est linéaire, et elle donne la valeur $\phi_{i+1/2}$ à l'interface par rapport à la valeur ϕ au centre de la maille amont à l'aide d'un développement limité en série de Taylor faisant intervenir le gradient $\overline{\text{grad}\phi}$ de ϕ exprimé au centre de la maille amont et le vecteur \vec{r}_i (schématisé sur la figure 3.9):

$$\phi_{i+1/2} = \phi + \overline{\text{grad}\phi} \cdot \vec{r}_i \quad (3.35)$$

Cette extension au second ordre spatial est plus précise qu'au premier ordre. Cependant, elle ne peut pas être effectuée sans précaution, puisqu'au second ordre, le schéma devient dispersif et des trains d'ondes oscillantes peuvent apparaître, notamment près des discontinuités (voir paragraphe suivant).

Pour pallier à ce problème, un schéma TVD est également disponible dans le code de calculs : le schéma MUSCL au troisième ordre d'erreur (voir Van Leer [11]).

3.2.4.2 Discrétisation temporelle

La discrétisation temporelle, entre les instants t^n et $t^{n+1} = t^n + \Delta t$, du terme instationnaire dans les équations de conservation est donnée au premier ordre par :

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} = \frac{\mathbf{Q}_i^{n+1} - \mathbf{Q}_i^n}{\Delta t} \quad (3.36)$$

Au second ordre, on a :

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} = \frac{3\mathbf{Q}_i^{n+1} - 4\mathbf{Q}_i^n + \mathbf{Q}_i^{n-1}}{2\Delta t} \quad (3.37)$$

Quel que soit l'ordre de discrétisation temporelle choisi parmi ces deux possibilités, le schéma d'intégration temporelle vise à résoudre un système d'équations linéarisées du type :

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} = R.H.S(\mathbf{Q}) \quad (3.38)$$

Où le membre de droite $R.H.S(\mathbf{Q})$ de ce système d'équations représente la discrétisation spatiale des équations de conservation. Deux possibilités s'offrent à nous pour résoudre ce

système d'équations selon que le membre de droite soit évalué à l'instant t^{n+1} ou t^n : le schéma implicite d'intégration temporelle et le schéma explicite. Dans la version implicite, la solution recherchée dans une maille (à l'instant t^{n+1}) est calculée à partir des solutions dans les mailles voisines évaluées à l'instant t^{n+1} , par exemple au premier ordre :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} &= \frac{\mathbf{Q}_i^{n+1} - \mathbf{Q}_i^n}{\Delta t} = R.H.S(\mathbf{Q}^{n+1}) \\ \Rightarrow \mathbf{Q}_i^{n+1} &= \mathbf{Q}_i^n + R.H.S(\mathbf{Q}^{n+1})\Delta t\end{aligned}\quad (3.39)$$

Dans la version explicite, la solution recherchée dans une maille (à l'instant t^{n+1}) est calculée à partir des solutions dans les mailles voisines évaluées à l'instant t^n , par exemple au premier ordre :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} &= \frac{\mathbf{Q}_i^{n+1} - \mathbf{Q}_i^n}{\Delta t} = R.H.S(\mathbf{Q}^n) \\ \Rightarrow \mathbf{Q}_i^{n+1} &= \mathbf{Q}_i^n + R.H.S(\mathbf{Q}^n)\Delta t\end{aligned}\quad (3.40)$$

Le schéma d'intégration temporelle implicite est inconditionnellement stable par rapport au pas de temps Δt choisi. A chaque pas de temps Δt de la phase implicite, l'équation (3.39) est résolue de manière itérative en définissant un pas de temps local propre à chaque cellule.

La version explicite est soumise à un critère de stabilité. Ce critère de stabilité s'exprime par une condition sur le pas de temps Δt et fait intervenir le nombre de Courant-Friedrich-Levy (ou *nombre de Courant*, CFL, voir Courant *et al.* [15]). Le pas de temps de la phase explicite est un pas de temps global contrairement au schéma implicite. Comme ce pas de temps est soumis à un critère de stabilité, il n'est pas contrôlé, mais calculé à partir du nombre CFL et le pas de temps global est le minimum des pas de temps locaux propres à chaque maille.

$$\Delta t = \min_i \left(\frac{2CFL}{\sum_f \lambda_f^{\max} A_f} V(C_i) \right) \quad (3.41)$$

Où $V(C_i)$ est le volume de la maille (à deux dimensions d'espace, $V(C_i)$ correspond à l'aire de la maille), A_f à l'aire des faces de la maille (à deux dimensions d'espace, A_f correspond à la longueur des arêtes de la maille), et λ_f^{\max} le maximum des valeurs propres du système associé à la face f .

3.2.5 Préconditionnement du système d'équation

Dans l'écoulement, le nombre de Mach va varier sur une large plage de valeurs d'une part à cause de la sensibilité de la vitesse du son aux conditions de pression et de température et d'autre part à cause du niveau de vitesse du fluide au repos dans le milieu ambiant. Les algorithmes numériques présentés précédemment connaissent des problèmes de convergence (oscillations de pression) aux faibles nombres de Mach à cause des perturbations dans les vitesses d'onde. Les techniques de preconditionnement permettent de palier ce problème en altérant les vitesses caractéristiques de propagation des ondes élémentaires de telle sorte quelles soient de l'ordre de grandeur de la vitesse convectée (voir Weiss et Smith [16], Turkel [17]). Si l'on reprend l'exemple des équations d'Euler 1D :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{Q})}{\partial x} = 0 \\ \mathbf{Q} = (\rho, \rho u, \rho e_{tot})^T, \mathbf{F}(\mathbf{Q}) = (\rho u, \rho u^2 + P, u(\rho e_{tot} + P))^T \end{array} \right. \quad (3.42)$$

Alors la première étape de la technique de preconditionnement consiste à réexprimer le système dans les variables non conservatives :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{W}} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{Q})}{\partial x} = \mathbf{0} \\ \mathbf{W} = \begin{bmatrix} P \\ u \\ T \end{bmatrix}, \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{W}} = \begin{bmatrix} \rho_p & 0 & \rho_T \\ \rho_p u & \rho & \rho_T u \\ \rho_p h - 1 & \rho_T u & \rho_T h + \rho h_T \end{bmatrix} \end{array} \right. \quad (3.43)$$

Où ρ_p et ρ_T représentent respectivement les dérivées partielles de la masse volumique par rapport à la pression et par rapport à la température et h_T celle de l'enthalpie par rapport à la température.

Ensuite, la matrice $\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{W}}$ est remplacée par une matrice de preconditionnement \mathbf{P} :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{Q})}{\partial x} = \mathbf{0} \\ \mathbf{W} = \begin{bmatrix} P \\ u \\ T \end{bmatrix}, \mathbf{P} = \begin{bmatrix} \Theta & 0 & \rho_T \\ \Theta u & \rho & \rho_T u \\ \Theta h - 1 & \rho u & \rho_T h + \rho h_T \end{bmatrix}, \text{ avec} \end{array} \right. \quad (3.44)$$

$$\Theta = \left(\frac{1}{u_{ref}^2} - \frac{\rho_T}{\rho C_P} \right) \quad (3.45)$$

La vitesse de référence u_{ref} qui apparaît dans (3.44) est telle que $u_{ref} = c$ lorsque l'écoulement est sonique ou supersonique ($u \geq c$) et $u_{ref} = 0$ lorsque $u \ll c$ (à faible nombre de Mach). De plus, en introduisant la matrice de préconditionnement, les valeurs propres du système d'équation (3.43) sont modifiées, cela permet d'éviter les difficultés de convergence de la méthode numérique qui est rencontrée à faible nombre de Mach (où les vitesses d'onde deviennent infinies).

3.3 Qualité de la méthode numérique

La qualité d'une méthode numérique est liée à 4 propriétés fondamentales : la précision, la consistance, la stabilité et la convergence. Ces notions sont abordées en détail dans les travaux de Hirsch [18], Smith [19], et Mitchell et Griffiths [20]. La précision de la méthode numérique est principalement dictée par l'ordre de la discrétisation des équations aux dérivées partielles et l'erreur de troncature qu'elle produit. Une méthode numérique est stable si les erreurs ne s'amplifient pas au cours du processus itératif de calcul. La consistance de la méthode numérique traduit sa représentativité des équations aux dérivées partielles quand les discrétisations temporelle et spatiale s'affinent. La stabilité et la consistance d'une méthode numérique sont obtenues grâce à des critères à respecter. Généralement ces critères sont fournis par des analyses mathématiques poussées (par exemple l'analyse de stabilité de Von Neumann). Contrairement aux autres propriétés, la notion de convergence est plus abstraite, il n'y a pas de moyen pour la mesurer et il est difficile, voire impossible, de prouver théoriquement la convergence d'une méthode numérique donnée. Toutefois, le théorème de Lax (valable pour des problèmes linéaires) stipule que si une méthode numérique est stable et consistante, alors elle est convergente. En pratique, ce sont les expériences numériques effectuées avec la méthode qui permettent de juger de sa convergence. Les critères de convergence permettent, eux, de savoir si une simulation numérique a convergé vers une solution. Ces critères peuvent être numériques (sur l'évolution des résidus) ou physiques (sur l'évolution d'une grandeur d'écoulement en un point du domaine de calculs).

En mécanique des fluides, le système d'équations devient hyperbolique lorsque le terme de convection est prépondérant face au terme de diffusion. Les écoulements supersoniques sont particulièrement concernés, puisqu'ils présentent la plupart du temps un nombre de Reynolds élevé. Lors de la résolution numérique d'équations hyperboliques, les solutions obtenues présentent deux défauts typiques : la dispersion et la diffusion (parfois appelé dissipation) illustrées sur la figure 3.10 pour la convection d'une discontinuité à la

vitesse U (voir par exemple LeVeque [21] pour plus de détails) ; la convection d'une variable $\phi(x, t)$ à la vitesse U est représentée par le problème suivant :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad \text{avec} \quad \phi(x, t = 0) = \begin{cases} \phi^0 & \text{pour } x \leq x_0 \\ 0 & \text{pour } x > x_0 \end{cases}$$

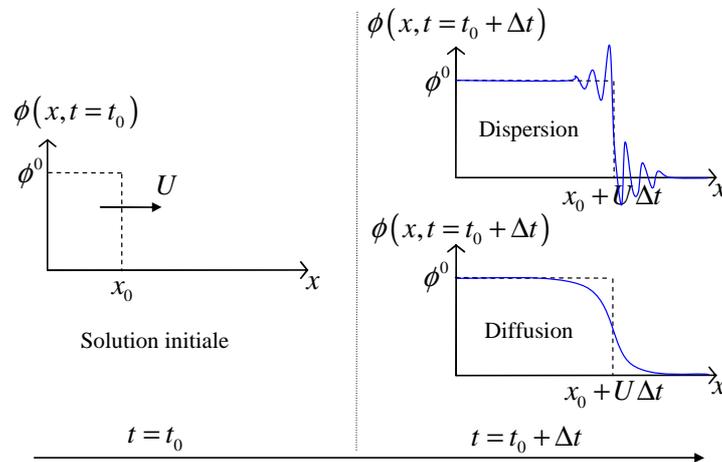


Figure 3.10 : Erreurs numériques (dispersion et diffusion) typiquement rencontrées lors de la simulation de la convection à la vitesse U d'une variable ϕ présentant une discontinuité ; solution numérique (—) et exacte (---).

La dispersion, ou erreur sur la vitesse de propagation des plus hautes fréquences, est à l'origine du phénomène de Gibbs (oscillations autour des discontinuités). Elle apparaît lorsque l'erreur produite par le schéma est d'ordre impair. Les schémas centrés font tous partie de cette catégorie. On notera que les oscillations numériques créées peuvent donner des valeurs non physiques, comme une pression négative. Il existe des schémas positifs qui garantissent de rester dans le domaine physique. La positivité, ou monotonie est l'aptitude d'un schéma à interdire la création de valeurs non physiques. La diffusion est une erreur de l'amortissement des hautes fréquences. Il faut noter que l'opérateur de diffusion, qui calcule l'effet de la viscosité du fluide, dissipe les hautes fréquences de la même manière. Ainsi, un schéma diffusif (ou dissipatif) induit une viscosité artificielle. Le contrôle de l'erreur de diffusion est assuré par des méthodes à variation totale diminuante (TVD).

3.4 Implémentation dans le code de calculs Fluent®

En accord avec les éléments présentés jusqu'ici, le solveur *Density-Based* de Fluent, qui est utilisé, permet de modéliser l'écoulement compressible. Les équations de conservation sont résolues simultanément à l'aide du schéma TVD Roe à découpage de différence de flux. De plus, le solveur est adapté aux fluides réels. En ce sens, la loi d'état du fluide est donnée par l'utilisateur à l'aide du module *User Defined Real Gas Model* (UDRGM) dans lequel on implémente la loi d'état de type fluide réel (comme la loi d'état exacte formulée à l'aide des

travaux de Span *et al.* [22] et Xiang et Deiters [23] présentée au chapitre 2, par exemple) à l'aide de sous-routines programmées en C. Fluent résout les équations de conservation en termes de variables primitives (représentées par le vecteur d'état non conservatif $\mathbf{W} = (P; \vec{U}; T)^T$). De ce fait, les quantités thermodynamiques indispensables aux calculs (comme la capacité calorifique à pression constante, la vitesse du son, les dérivées de masse volumique par rapport à la pression et la température) sont requises et doivent être retournées par les sous-routines en fonction des variables thermodynamiques (P, T). De plus, à des fins de post-processing, ce module permet de spécifier d'autres grandeurs thermodynamiques qui n'interviennent pas directement dans la résolution des équations de conservation comme l'énergie interne, l'entropie, etc. en fonction des variations de pression et de température. Evidemment, toutes ces fonctions thermodynamiques sont calculées à partir de l'équation d'état utilisée (voir chapitre 2). La Figure 3.11 résume tous ces éléments en schématisant l'algorithme de la méthode numérique.

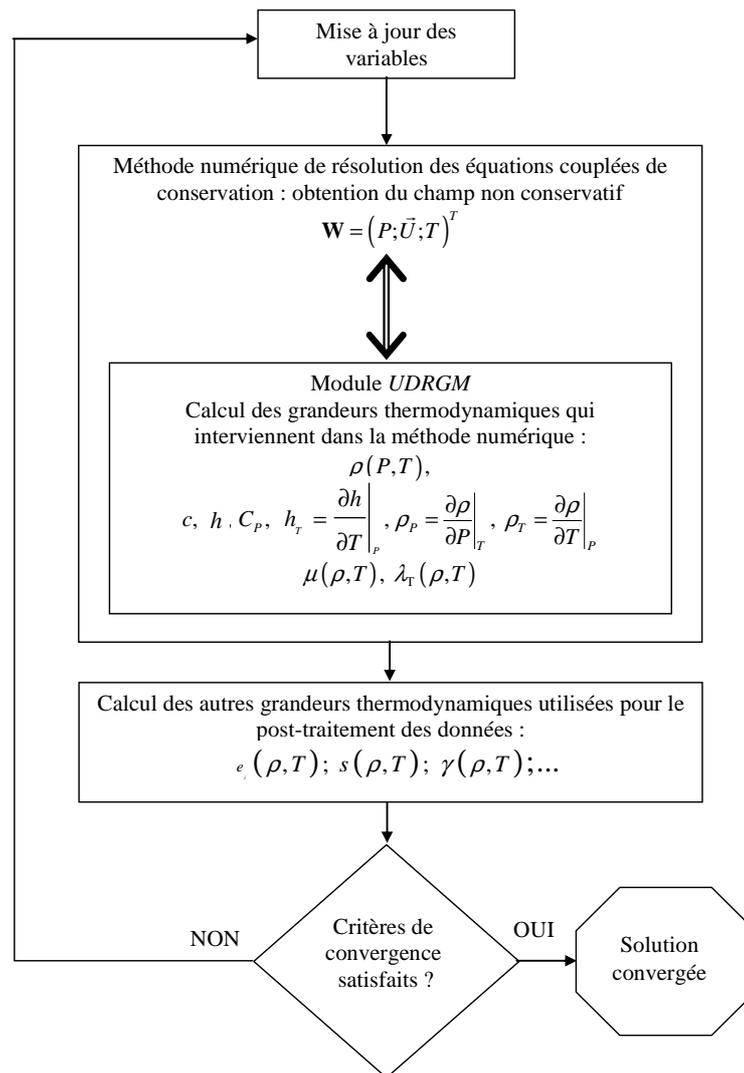


Figure 3.11 : Schématisation de la méthode numérique.

Comme les grandeurs thermodynamiques doivent être calculées en fonction de la pression et de la température, il est nécessaire d'inverser les lois d'état qui ont été donnée en fonction de la masse volumique et de la température au chapitre 2. Analytiquement, cette procédure est très complexe voire impossible pour la loi d'état exacte du fait de sa formulation. Une procédure numérique itérative est une bonne alternative pour exprimer (P,T) à partir de (ρ, T) qui est connue. Pour ce faire, nous utilisons l'algorithme de Newton-Raphson présenté sur la Figure 3.12. Ensuite, toutes les autres grandeurs thermodynamiques sont obtenues en fonction du couple de variables (ρ, T) à partir des formules du chapitre 2.

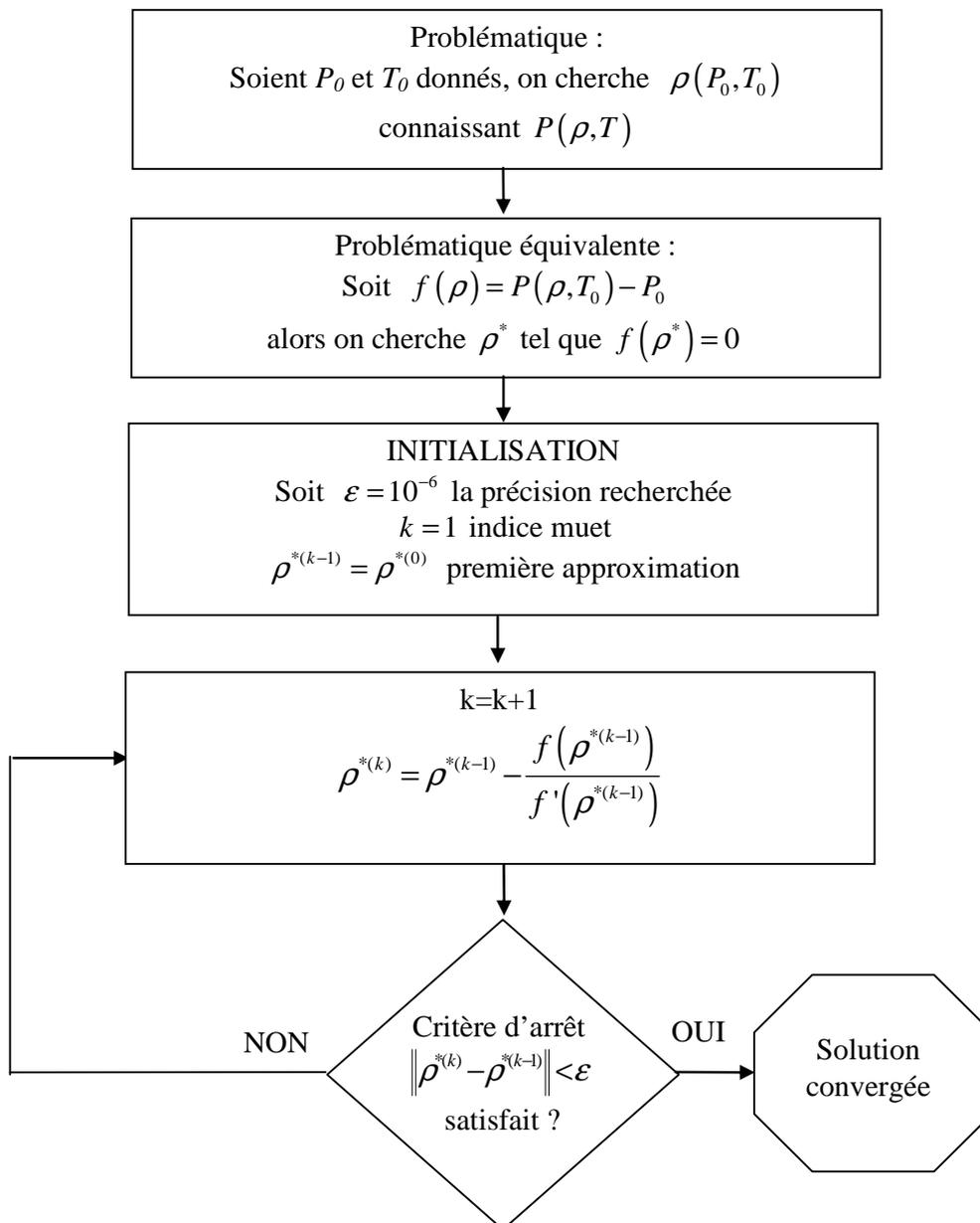


Figure 3.12 : Algorithme de Newton-Raphson utilisé pour inverser les lois d'état de fluide réel.

Un dernier point reste à préciser : le domaine de validité de la loi d'état de fluide réel. Nous avons vu au chapitre 2, que ce type de lois d'état (qu'il s'agisse de la loi dite exacte ou de la loi de Soave Redlich Kwong) permet de décrire les propriétés du fluide sur une large plage de valeurs de pression et de température. Cependant, il y a des zones de l'espace (P, T) dans lesquelles ces lois d'états produisent des solutions non physique comme une pression négative (zone instable). De même, selon les conditions de pression et de température, une loi d'état de type fluide réel peut amener à la perte d'hyperbolicité du système d'équations à résoudre (zone elliptique). En outre, le modèle physique modélise l'écoulement monophasique. Or il peut arriver qu'au cours du processus itératif de calcul, des états qui se trouveraient dans le domaine de coexistence de plusieurs phases soient calculés. De tels phénomènes numériques mettent à mal le code de calcul qui ne pourra converger vers une solution physique. Il est donc nécessaire de pouvoir gérer ces cas particuliers dans la méthode numérique. Sur la Figure 3.13 on schématise le domaine de validité de la loi d'état pour les simulations numériques : d'une part pour toute pression inférieure à la pression du point triple, les propriétés du fluide sont décrites par la loi d'état des gaz parfaits (y compris le domaine de coexistence gaz-solide), et d'autre part si, lors de la simulation, l'état du fluide est dans le domaine liquide, la simulation est arrêtée. Une partie de l'état métastable du domaine de coexistence gaz-liquide est conservée (en supposant le fluide entièrement gazeux) lorsque la courbe de saturation du gaz est franchie puisqu'elle ne pose pas de problème numérique.

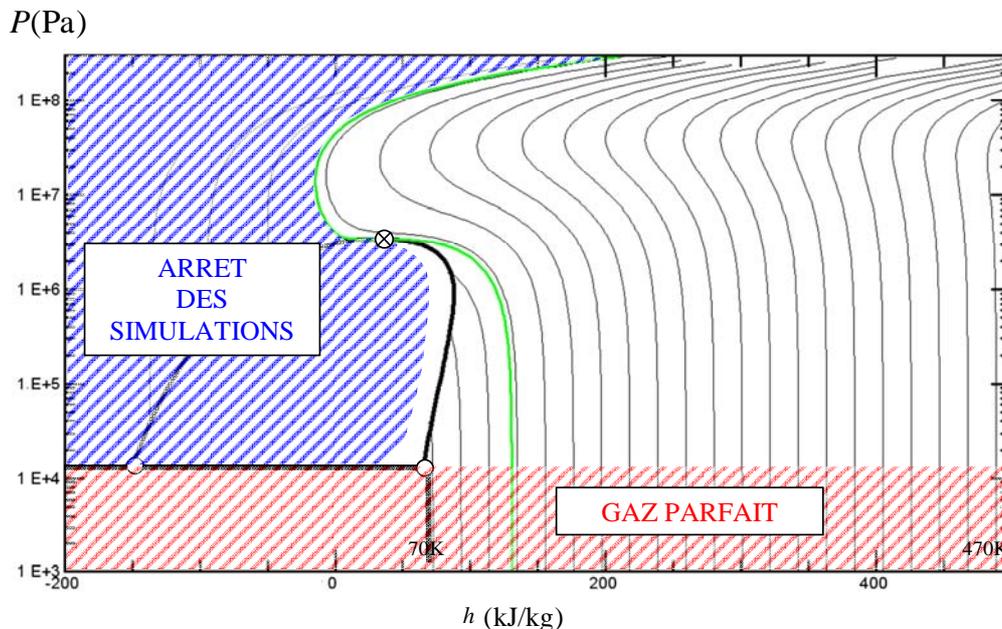


Figure 3.13 : Restriction du domaine de validité de la loi d'état pour les simulations numériques schématisées dans le diagramme (P, h) de l'azote : isotherme critique (—); courbes de saturation (—); isothermes de 70K à 470K par pas de 20K (—); point triple (O) et point critique (X).

Chapitre 4 : Résultats et discussions

Dans ce chapitre, le modèle numérique présenté précédemment est appliqué via le code de calcul commercial FLUENT[®]. Une première partie montre les résultats issus de simulations numériques effectuées sur des cas tests numériques visant à résoudre le problème classique du tube à choc. L'objectif est multiple. Premièrement, l'écoulement dans un tube à choc est représentatif de la physique du problème de Riemann, dont la résolution a été détaillée au chapitre 3. En particulier, l'écoulement fait apparaître une structure d'ondes caractéristiques comprenant un faisceau de détente, une onde de choc et une ligne de glissement. D'ailleurs toutes ces caractéristiques sont également présentes dans le jet sous-détendu. Deuxièmement, il s'agit d'étudier le comportement des différents schémas d'interpolation numérique (Upwind au 1^{er} et au 2^{ème} ordre, MUSCL, présentés au chapitre 3), et en particulier de vérifier la précision et la robustesse de la méthode numérique employée. De plus, ce cas test est mené dans un premier temps, en supposant un fluide parfait (modélisé avec la loi d'état des gaz parfait). Pour cette configuration, une solution analytique existe. La solution numérique obtenue y est alors comparée. Ensuite, le même cas est étudié en modélisant les propriétés du fluide avec une loi d'état de fluide réel. Dans cette configuration il n'y a pas de solution analytique. Cependant en comparant la solution obtenue dans ce cas à celle obtenue pour le fluide parfait, les effets de fluide réel sur l'écoulement pourront ainsi être mis en évidence.

Ensuite la méthode numérique est appliquée à une configuration de jet libre sous-détendu de référence pour laquelle des données sont disponibles dans la littérature. Dans cet écoulement, les ondes de détente et de choc sont très intenses. Le cas de référence retenu dans cette configuration est celui d'un jet sonique ($M_e=1$) à $NPR=10$. Nous cherchons à vérifier que la structure de ce jet dans la zone proche de l'orifice de sortie du jet soit bien reproduite par rapport aux résultats de la littérature, en termes de position et de diamètre du disque de Mach, de diamètre initial, etc. Les simulations de ce jet sont effectuées pour le gaz parfait et pour le fluide réel. La comparaison des différents résultats entre eux permet de vérifier l'implémentation de la loi d'état des fluides réels dans le code de calculs et son comportement dans le cadre d'une simulation d'un tel jet.

Enfin, le jet sous-détendu impactant perpendiculairement à une surface plane est abordé à l'aide d'une étude paramétrique effectuée en fonction du rapport de pression et de la distance d'impact. Les configurations étudiées correspondent à des conditions de type industriel rencontrées dans le procédé de traitement de surface. Bien sûr, des hypothèses simplificatrices préalables sont émises par rapport à la réalité. L'écoulement dans la buse est modélisé et la géométrie de buse considérée est un simple orifice cylindrique ayant un diamètre et une longueur fixée. Pour cette étude, les simulations sont effectuées en modélisant d'abord les propriétés du fluide avec la loi d'état des gaz parfaits. Ensuite, les effets de fluide réel sont pris en compte en utilisant la loi d'état exacte, l'écoulement étant toujours supposé compressible monophasique. Ces différents résultats sont comparés entre eux.

4.1 Résultats des simulations numériques sur le cas test du tube à choc

4.1.1 Configuration

L'azote est contenu dans un tube, formant une enceinte adiabatique, dans deux états thermodynamiques différents à gauche (état indicé L) et à droite (état indicé R) d'une membrane (voir Figure 4.1). Le tube est pris suffisamment long pour éviter les effets de bords (pour éviter la réflexion des ondes sur les parois verticales à gauche et à droite). En fait, la configuration d'écoulement étudiée ici est quasi unidimensionnelle. Le tube a une longueur de 1 m et un diamètre de 0,1 m, la membrane est située en $x=0$ m. L'écoulement dans un tube à choc est purement convectif (les effets visqueux sont négligeables) et il met en évidence des phénomènes instationnaires comportant des zones de gradients importants. C'est une application directe du problème physique de Riemann qui a été abordé au chapitre 3.

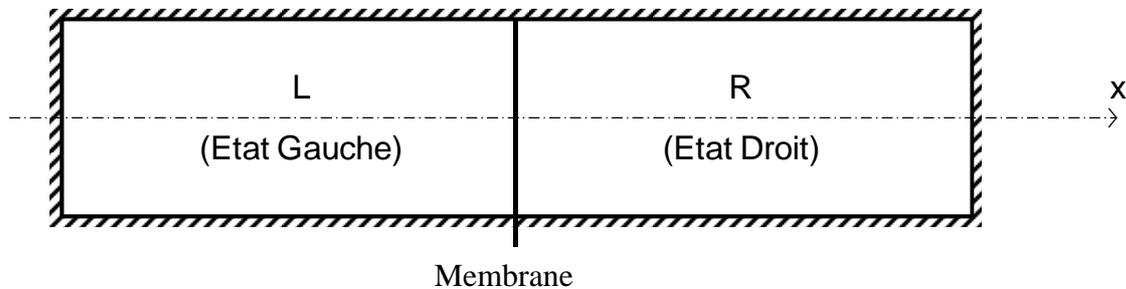


Figure 4.1 : Tube à choc : domaine d'étude.

Initialement, les états à gauche et à droite du diaphragme sont imposés par les conditions de pression P et de température T et la vitesse \vec{U} qui a pour seule composante u dans la direction longitudinale x . Ils sont respectivement représentés par les vecteurs d'état physique $\mathbf{W}_L = (P_L, T_L, u_L)^T$ et $\mathbf{W}_R = (P_R, T_R, u_R)^T$.

Dans la configuration étudiée, on suppose l'azote au repos à l'état initial ($u_L = u_R = 0$), et à la même température de part et d'autre du diaphragme ($T_L = T_R$). De plus on impose une pression élevée à gauche et une pression plus basse à droite ($P_R < P_L$). Le tableau 4.1 résume ces états initiaux choisis pour la configuration étudiée.

	Etat initial à gauche	Etat initial à droite
Pression	P_L	$P_R < P_L$
Température	T_L	$T_R = T_L$
Masse volumique (loi d'état)	$L = (P_L, T_L)$	$R = (P_R, T_R)$
Vitesse (m.s^{-1})	$u_L = 0$	$u_R = 0$

Tableau 4.1 : Tube à choc : Etats initiaux.

A l'instant $t=0$, survient la rupture instantanée du diaphragme. Comme les états initiaux ont été choisis tels que $P_L > P_R$, la structure d'ondes caractéristiques fait apparaître simultanément : un faisceau de détente à gauche associé à la vitesse caractéristique $\lambda_1 = u - c$ au travers duquel le fluide passe de l'état \mathbf{W}_L à l'état intermédiaire \mathbf{W}_L^* , une onde de choc droite associée à la vitesse caractéristique $\lambda_3 = u + c$ au travers de laquelle le fluide passe de l'état \mathbf{W}_R à l'état intermédiaire \mathbf{W}_R^* , et une discontinuité de contact (ligne de glissement) associée à la vitesse caractéristique $\lambda_2 = u$ qui sépare les états \mathbf{W}_L^* et \mathbf{W}_R^* . Cette structure a été détaillée au chapitre 3, elle est rappelée sur la Figure 4.2 suivante :

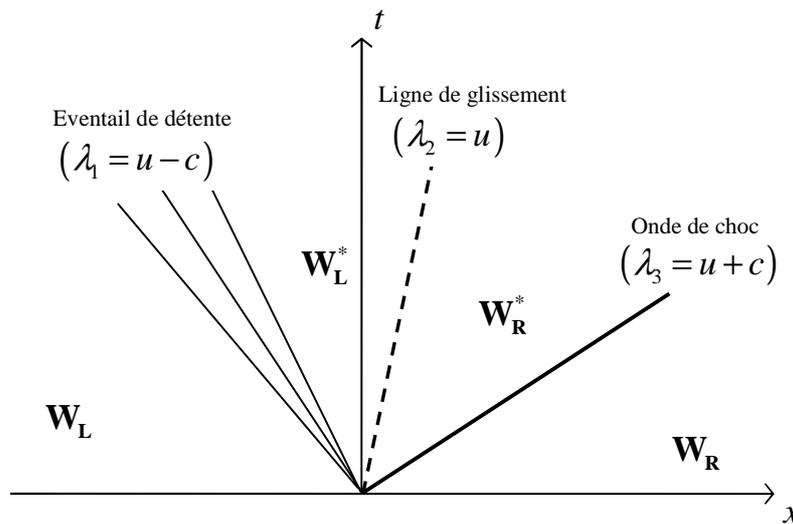


Figure 4.2 : Solution du problème de Riemann associé au tube à choc étudié; les ondes associées aux vitesses caractéristiques $\lambda_1 = u - c$, $\lambda_2 = u$ et $\lambda_3 = u + c$ sont respectivement : une onde de détente, une discontinuité de contact, et une onde de choc.

En d'autres termes, l'onde de compression se propage à la vitesse U_c de gauche à droite (du milieu en surpression vers le milieu en dépression). Dans le même temps, une onde de détente se forme et se propage en sens inverse du choc à la vitesse U_d . Les deux discontinuités sont séparées par une ligne de glissement isobare se déplaçant à la vitesse U_g (voir Figure 4.3).

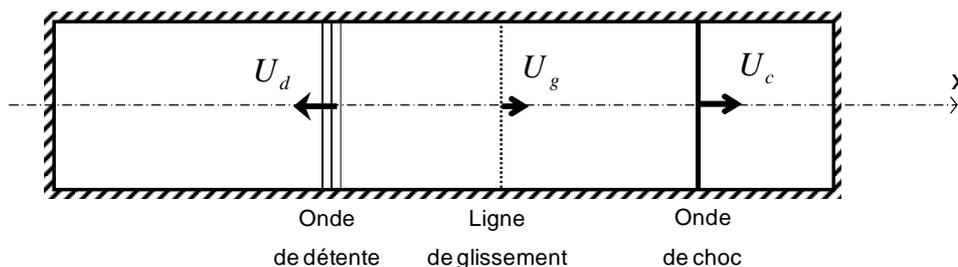


Figure 4.3 : Tube à choc : apparition de l'onde de choc, du faisceau de détente et de la ligne de glissement après rupture du diaphragme.

4.1.2 Tube à choc pour un gaz parfait

Dans cette section, les propriétés du fluide sont représentées par la loi d'état des gaz parfait, i.e. la masse volumique et les autres grandeurs thermodynamiques sont déterminées à l'aide de la loi d'état des gaz parfait (la constante du gaz vaut $r_g=R/M_w=297 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et le rapport des capacités calorifiques $\gamma=1,4$). Le tableau 4.2 spécifie les états initiaux choisis pour la configuration étudiée.

	Etat initial à gauche	Etat initial à droite
Pression (Pa)	$P_L=5.10^7$	$P_R=1.10^5$
Température (K)	$T_L=300$	$T_R=300$
Masse volumique (loi d'état) (kg.m^{-3})	$\rho_L=561,548$	$\rho_R=1,123$
Vitesse (m.s^{-1})	$u_L=0$	$u_R=0$

Tableau 4.2 : Tube à choc pour un gaz parfait : Etats initiaux.

Le problème est instationnaire, et on étudie la solution du problème à un instant donné. Nous avons choisi ici un temps arbitraire de $t = 0,1 \text{ ms}$ pour la fin des simulations afin de pouvoir représenter les résultats (profils de différentes grandeurs mécaniques et thermiques sur l'axe du tube).

Les simulations numériques sont effectuées à l'aide d'un maillage du domaine d'étude qui est constitué d'éléments quadrilatéraux comportant 1000 nœuds dans la direction longitudinale du tube.

Une solution précise en temps est recherchée, c'est pourquoi le schéma d'intégration temporelle choisi ici est implicite au second ordre. Le solveur de Riemann approché de Roe à découpage de différence de flux est utilisé dans le code de calculs Fluent, et plusieurs schémas numériques d'interpolation (reconstruction) des variables conservatives sur les faces des mailles sont testés : le schéma UPWIND au premier ordre, et au second ordre et le schéma TVD du troisième ordre MUSCL.

La Figure 4.4 montre les variations de la pression (Figure 4.4a), de la vitesse (Figure 4.4b), de la température (Figure 4.4c), de la masse volumique (Figure 4.4d) et du nombre de Mach (Figure 4.4e) sur l'axe central du tube à choc, obtenus pour les 3 schémas numériques ainsi que pour la solution exacte du problème de Riemann sous l'hypothèse du gaz parfait. La dénomination « exacte » indique que cette solution a été obtenue à l'aide d'un solveur de Riemann exact dont le fonctionnement a été présenté dans le chapitre 3.

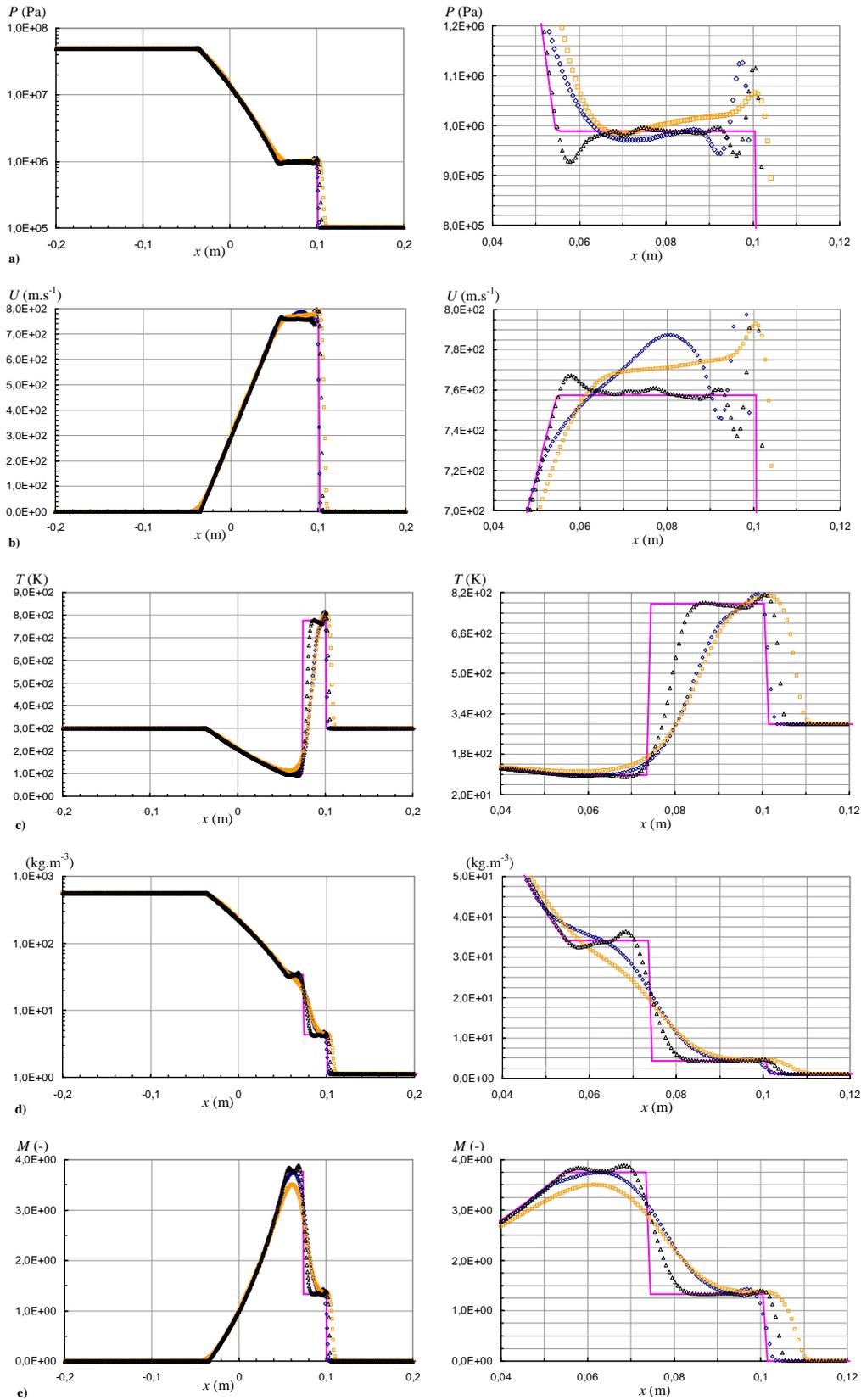


Figure 4.4 : Solution numérique obtenue à $t=0,1\text{ms}$ pour les différents schémas (\square : UPWIND à l'ordre 1 ; \diamond : UPWIND à l'ordre 2 ; \triangle : MUSCL d'ordre 3), comparé à la solution du solveur de Riemann exact (—) ; Grandeurs sur l'axe du tube : (a): pression, (b): vitesse, (c): température, (d): masse volumique (e): nombre de Mach.

Physiquement, la Figure 4.4 montre que les résultats reproduisent bien l'ensemble des phénomènes physiques de choc et de détente dans le tube à choc. Plus précisément, la Figure 4.5 permet de différencier les différents états dans le tube à choc en traçant la pression et la masse volumique sur l'axe du tube à choc adimensionnées par leurs valeurs dans l'état initial à gauche du diaphragme (i.e. P/P_L et ρ/ρ_L respectivement).

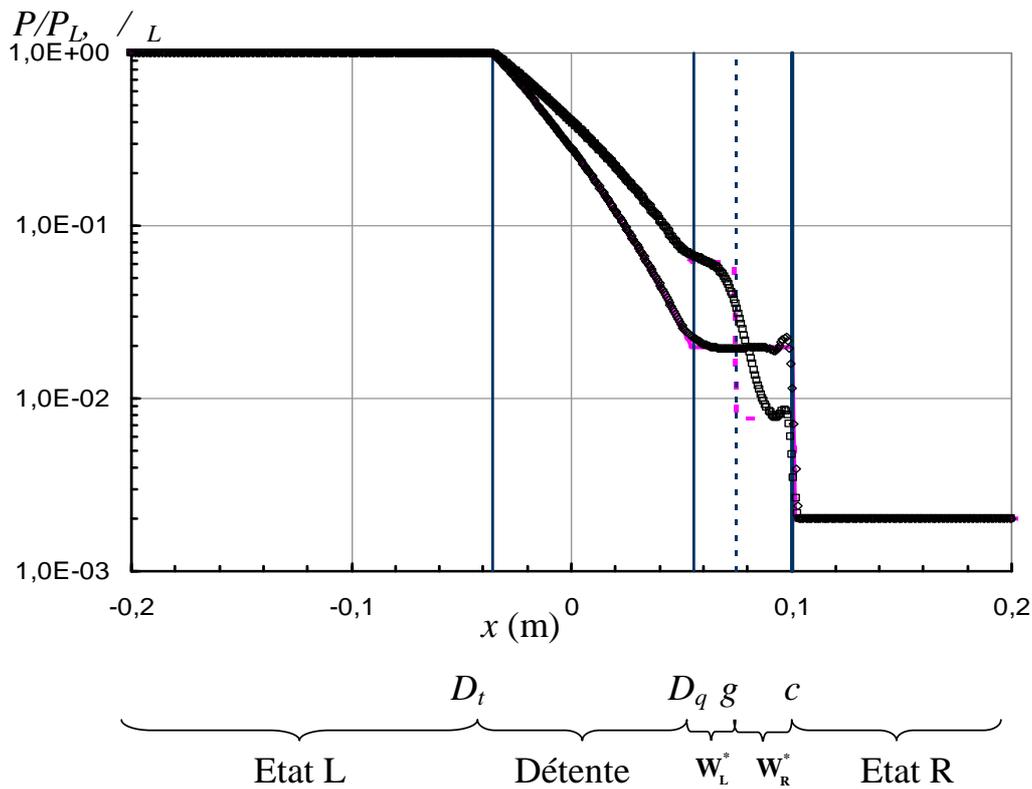


Figure 4.5 : Courbes représentant les rapports P/P_L (\diamond : simulation numérique ; — : solveur exact) et ρ/ρ_L (\square : simulation numérique ; - - - : solveur exact) à $t=0,1$ ms. Distinction des différents états (Etat L : état initial à gauche du diaphragme ; Détente ; Etats intermédiaires \mathbf{W}_L^* et \mathbf{W}_R^* ; Etat R : état initial à droite du diaphragme) et des différentes discontinuités (D_t : tête de la détente ; D_q : queue de la détente ; g : ligne de glissement ; c : choc) dans le tube à choc.

Les deux états intermédiaires \mathbf{W}_L^* et \mathbf{W}_R^* sont situés entre la queue de la détente et l'onde de choc : soit entre $0,056 \text{ m} < x < 0,101 \text{ m}$ d'après la solution exacte, Figure 4.5). Ils sont séparés par la ligne de glissement qui se situe à $x=0,075 \text{ m}$ d'après la solution exacte. La pression et la vitesse sont bien constantes au travers de la ligne de glissement alors qu'on observe un saut de la température qui entraîne un saut de la masse volumique, et du nombre de Mach du fait d'un saut de la vitesse du son (Figure 4.4).

D'un point de vue numérique, la Figure 4.4 montre que le schéma UPWIND au 1^{er} ordre est moins précis que les deux autres. L'allure des profils obtenus pour ce schéma laisse apparaître une diffusion numérique assez importante (profils lissés au travers des discontinuités, voir *chapitre 3*). Pour les deux autres schémas d'ordre supérieur, le schéma d'ordre 3 est le plus précis même si la dispersion numérique est notable pour ces schémas: on constate des oscillations au travers de la ligne de glissement et de l'onde de choc (on les appelle parfois *undershoot* et *overshoot* à la queue de la détente et avant l'onde de choc). Pour l'ensemble des schémas, la ligne de glissement est la discontinuité la moins bien représentée.

Notons que pour les simulations présentées ici, le pas de temps a été fixé à $t=10^{-6}$ s pour les schémas UPWIND (au premier et au second ordre), les 5 premiers pas de temps du calcul ont été effectuées avec un nombre CFL=0,1. Le nombre CFL a ensuite été augmenté à la valeur CFL=1, sans soucis de stabilité. Par contre, pour une simulation effectuée directement avec CFL=1 avec ces schémas, le code de calcul diverge dans les premiers pas de temps.

Pour le schéma MUSCL, l'obtention de la solution convergée présentée précédemment a été plus laborieuse. En effet, avec les mêmes valeurs de pas de temps ($t=10^{-6}$ s) et du nombre de CFL (CFL=1), le code de calcul converge vers une solution non physique avec ce schéma. Pour résoudre le problème, le nombre de CFL a été modifié. Rappelons que le nombre CFL influence la stabilité et la convergence, et qu'il intervient même directement dans le calcul des flux convectifs numériques dans le schéma MUSCL. Ainsi, les solutions convergées (qui ont été présentées sur la Figure 4.4) ont été obtenues avec un pas de temps de $t=10^{-7}$ s un nombre de CFL=0,6 pour le schéma MUSCL. Afin d'illustrer ce problème numérique, la Figure 4.6 montre le profil de la pression et de la vitesse sur l'axe du tube obtenu pour les deux simulations numériques effectuées avec le schéma MUSCL : la simulation qui a bien convergé vers la solution physique du problème (en prenant $t=10^{-7}$ s et CFL=0,6) et la simulation qui a convergé vers une solution non physique (en prenant $t=10^{-6}$ s et CFL=1 utilisé pour les schémas UPWIND précédents).

Enfin, il est également important de remarquer que la simulation numérique qui s'est déroulée avec succès avec le schéma MUSCL a nécessité un temps de calcul environ 10 fois supérieur aux autres.

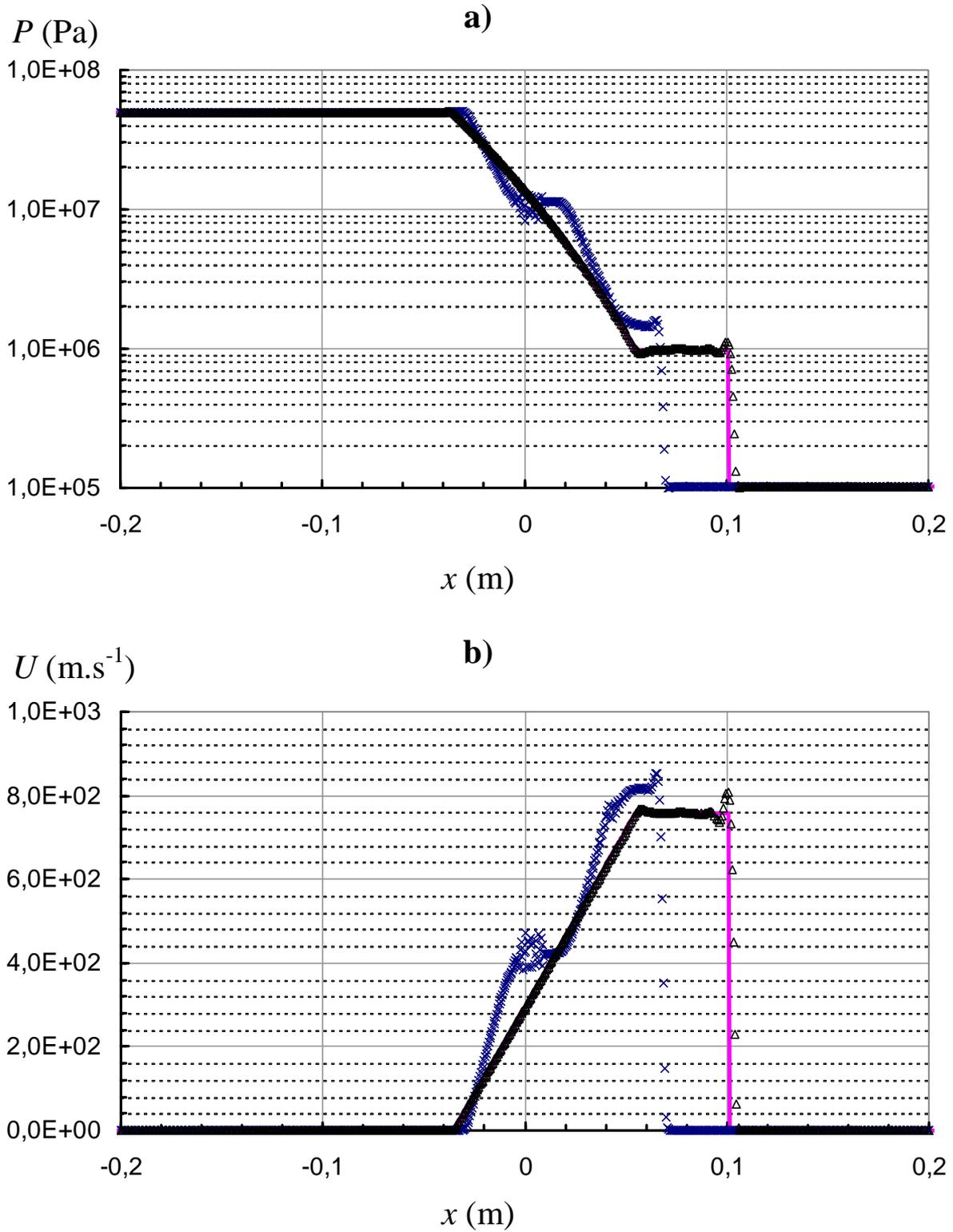


Figure 4.6 : Illustration du problème numérique survenu pour la simulation numérique du tube à choc avec le schéma MUSCL. Solution à $t=0,1$ ms montrant les profils de pression (a) et de vitesse (b) sur l'axe du tube pour les simulations (\times : CFL=1 et $t=10^{-6}$ s ; Δ : CFL=0,6 et $t=10^{-7}$ s) et solution du solveur de Riemann exact (—).

4.1.3 Tube à choc pour un fluide réel

Dans cette section, les propriétés réelles du fluide sont prises en compte en utilisant une loi d'état de fluide réel développée au chapitre 2. La loi d'état de fluide réel choisie ici est la loi d'état exacte. Dans la section précédente, l'emploi de la loi d'état des gaz parfaits permettait d'obtenir une solution analytique (à la base du solveur de Riemann exact). L'emploi d'une loi d'état de fluide réel, ne permet pas d'obtenir une telle solution analytique : il n'existe pas de solveur de Riemann exact généralisé (utilisable pour n'importe quelle loi d'état). La pression, la température et la vitesse dans le tube à gauche et à droite du diaphragme à l'instant initial sont les mêmes que précédemment. Le tableau 4.3 spécifie les états initiaux choisis pour la configuration étudiée.

	Etat initial à gauche	Etat initial à droite
Pression (Pa)	$P_L=5.10^7$	$P_R=1.10^5$
Température (K)	$T_L=300$	$T_R=300$
Masse volumique (loi d'état) (kg.m^{-3})	$\rho_L=427,80$	$\rho_R=1,13$
Vitesse (m.s^{-1})	$u_L=0$	$u_R=0$

Tableau 4.3 : Tube à choc pour un fluide réel : Etats initiaux.

Il apparaît que les effets de fluide réel se manifestent déjà sur l'état initial à haute pression sur la masse volumique : la loi d'état de fluide réel donne $\rho_L=427,80 \text{ kg.m}^{-3}$ qui diffère de la valeur prédite précédemment par la loi des gaz parfaits ($\rho_L=561,548 \text{ kg.m}^{-3}$).

Ici, l'objectif de l'étude n'étant plus de comparer les différents schémas numériques mais de mettre en évidence les effets de fluide réel, on compare alors les solutions obtenues avec celles obtenues précédemment avec la loi d'état des gaz parfaits. Dans la section précédente, il a été montré que le schéma numérique UPWIND d'ordre 2 fournissait de bons résultats dans le cas du gaz parfait et qu'il était notamment plus stable que le schéma MUSCL (voir section 4.1.1) et plus précis que le schéma UPWIND d'ordre 1. La fermeture thermodynamique n'influençant pas sur le schéma d'interpolation numérique, nous choisissons le schéma numérique UPWIND d'ordre 2 pour les présentes simulations.

Le temps final choisi pour l'arrêt des simulations est toujours $t=0,1\text{ms}$. Les figures 4.7 à 4.11 montrent les variations de la pression, de la vitesse, de la température, de la masse volumique et du nombre de Mach sur l'axe central du tube à choc, obtenus pour le tube à choc avec la loi d'état de fluide réel, comparé à celle obtenue avec la loi d'état des gaz parfaits ainsi que pour la solution exacte du problème de Riemann (avec l'hypothèse du gaz parfait).

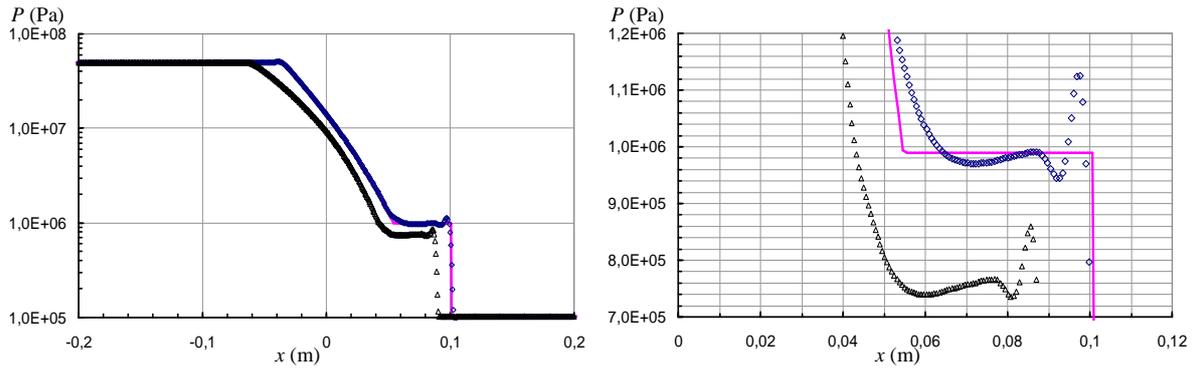


Figure 4.7 : Pression sur l'axe du tube à choc à $t=0,1$ ms. Solution numérique obtenue pour le tube à choc de fluide réel (Δ : schéma UPWIND d'ordre 2), comparé à la solution numérique obtenue pour le tube à choc de gaz parfait (\diamond : UPWIND à l'ordre 2) et solution du solveur de Riemann exact pour le gaz parfait (— magenta).

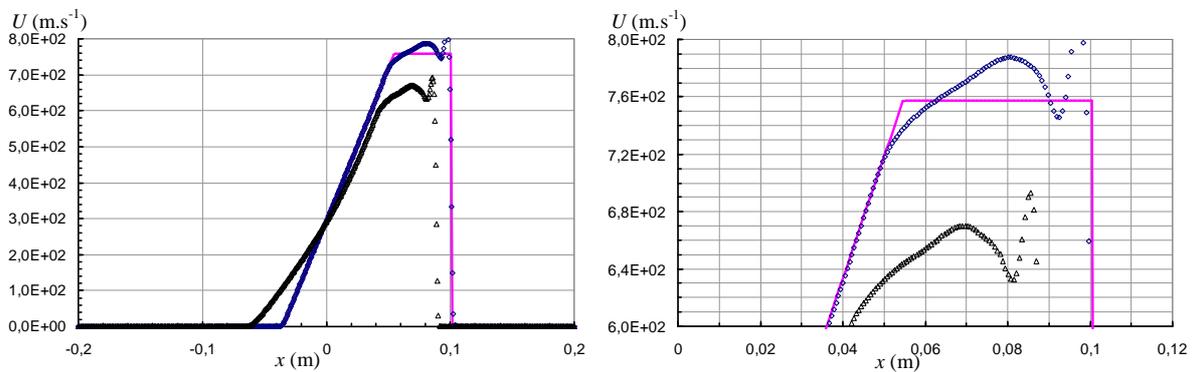


Figure 4.8 : Vitesse sur l'axe du tube à choc à $t=0,1$ ms. Symboles : même légende que la Figure 4.7.

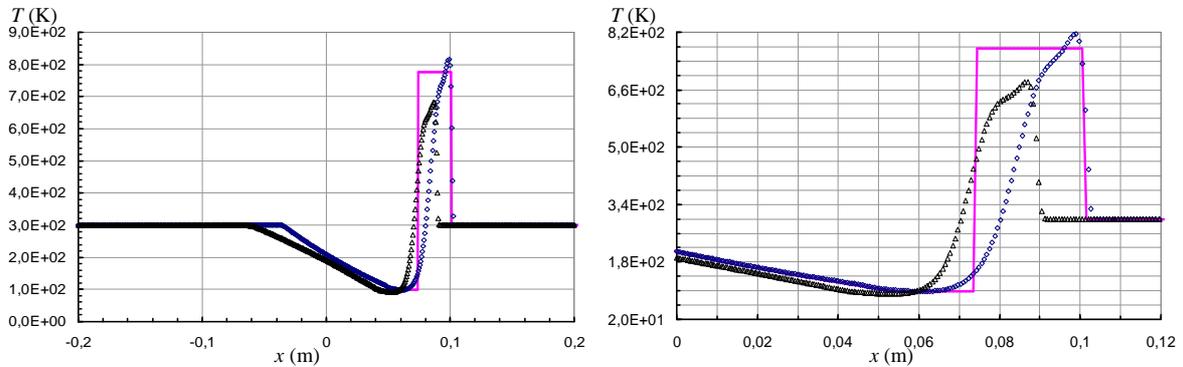


Figure 4.9 : Température sur l'axe du tube à choc à $t=0,1$ ms. Symboles : même légende que la Figure 4.7.

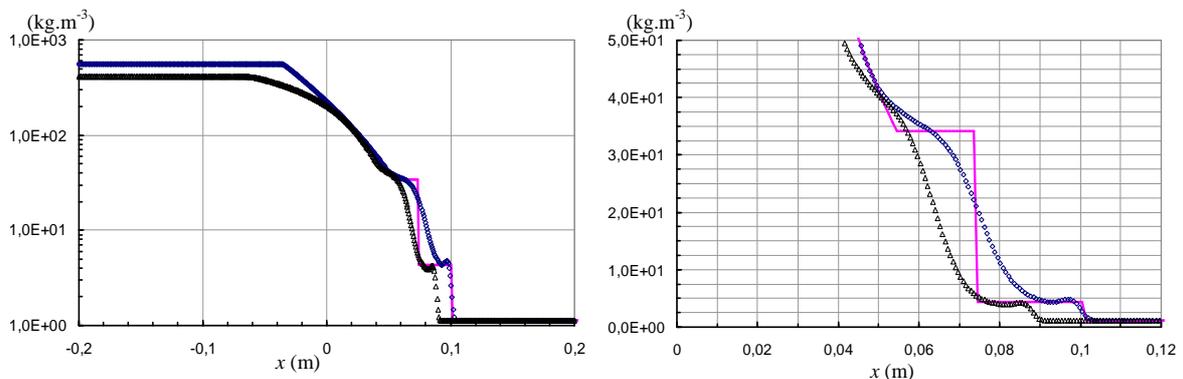


Figure 4.10 : Masse volumique sur l'axe du tube à choc à $t=0,1$ ms. Même légende que la Figure 4.7.

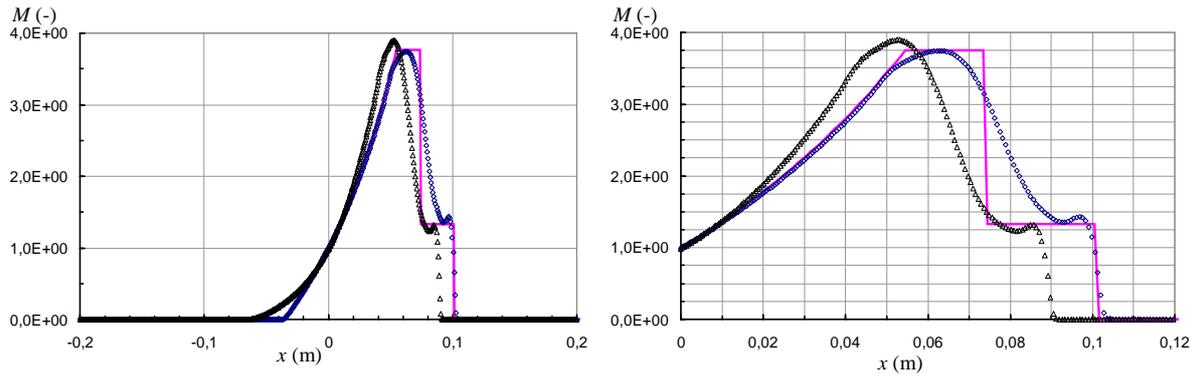


Figure 4.11 : Nombre de Mach sur l'axe du tube à choc à $t=0,1$ ms. Même légende que la Figure 4.7.

Les résultats montrent de légères différences entre les solutions obtenues pour la loi d'état de fluide réel et pour la loi d'état des gaz parfaits. La détente de l'état de la gauche du tube (haute pression) jusqu'à l'état intermédiaire \mathbf{W}_L^* est relativement identique dans les deux cas (comme le montrent les variations de température et de pression). Toutefois, l'état intermédiaire obtenu à 0,1 ms à l'issue de la détente est légèrement différent pour le fluide réel : la pression est plus petite ($7,6 \cdot 10^5$ Pa pour le fluide réel contre $9,9 \cdot 10^5$ Pa pour le gaz parfait), la température est sensiblement plus faible (91,3 K pour le fluide réel contre 98,2 K pour le gaz parfait), et la vitesse est plus petite ($637 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ pour le fluide réel contre $756 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ pour le gaz parfait). Cela donne un nombre de Mach plus grand dans ce cas (3,89 pour le fluide réel contre 3,75 pour le gaz parfait). A l'issue de la détente à 0,1 ms, le fait que le nombre de Mach soit plus grand tandis que la vitesse soit plus petite dans le cas du fluide réel, indique que la vitesse du son y est plus petite que celle du gaz parfait. Ensuite, au travers de la ligne de glissement, la physique est toujours bien respectée pour le fluide réel puisque la pression et la vitesse restent constantes alors les autres grandeurs évoluent brusquement vers l'état \mathbf{W}_R^* . Par exemple, la température augmente. Cette augmentation est plus petite dans le cas du fluide réel (de 91,3 K à 660 K pour le fluide réel contre 98,2 K à 775 K pour le gaz parfait). Notons que ces dernières valeurs sont prises en ne tenant pas compte des oscillations dues à la dispersion du schéma numérique : pour le gaz parfait, on peut se référer à la solution exacte, pour le fluide réel une moyenne est effectuée. La Figure 4.12 permet de comparer la position des différentes discontinuités dans le tube à choc obtenus dans le cas du gaz parfait à ceux obtenus dans le cas du fluide réel en traçant la pression et la masse volumique sur l'axe du tube à choc adimensionnées par leurs valeurs dans l'état initial à gauche du diaphragme (i.e. P/P_L et ρ/ρ_L respectivement).

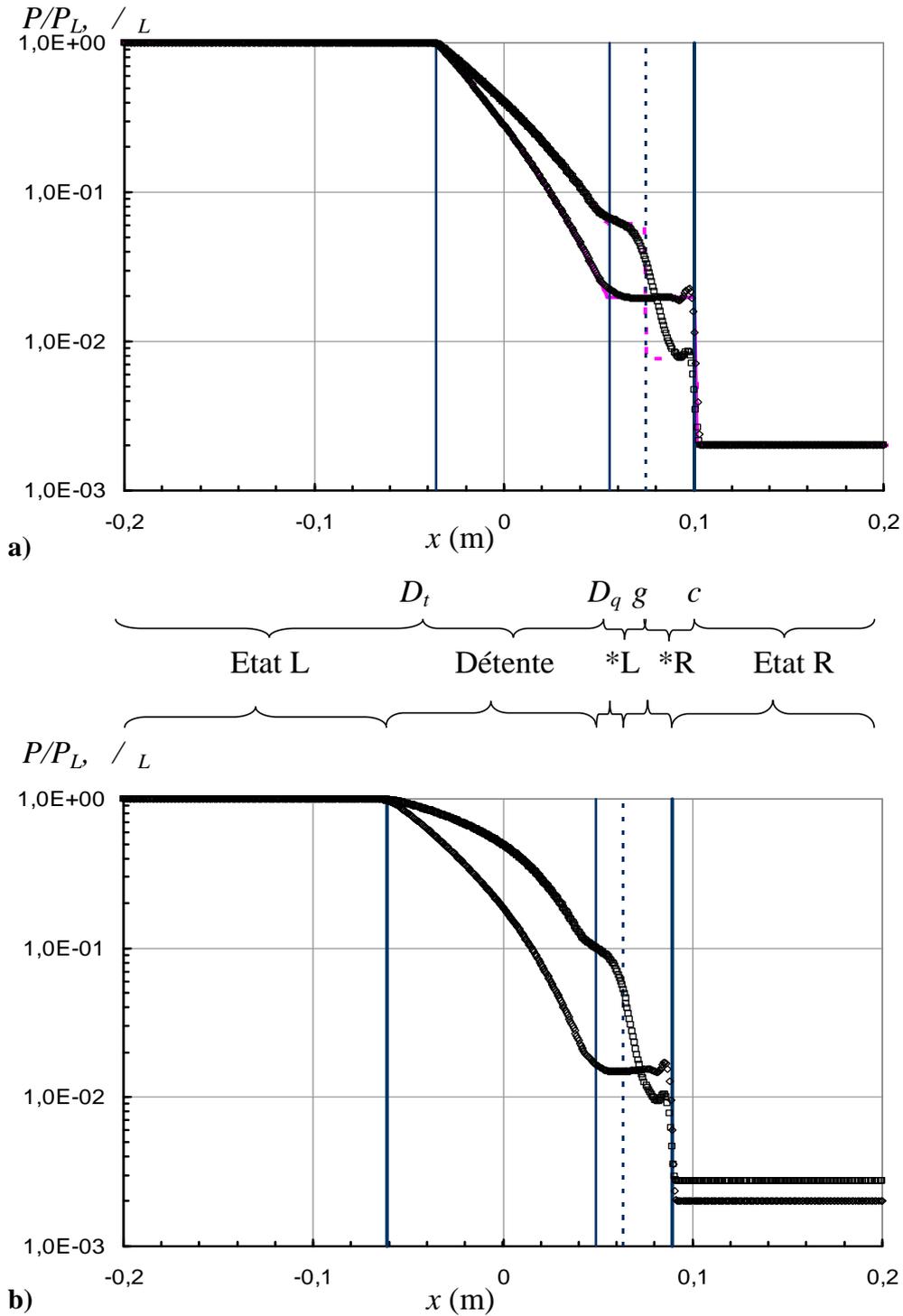


Figure 4.12 : Courbes représentant les rapports P/P_L (\diamond) et ρ/ρ_L (\square) à $t=0,1\text{ms}$ pour : a) le gaz parfait, b) le fluide réel. Distinction des différents états dans le tube à choc (voir légende de la Figure 4.5).

On constate que la détente du fluide réel est plus rapide que la détente du gaz parfait puisqu'au même instant final, la tête de la détente du fluide réel se situe plus à gauche que celle pour le gaz parfait. Alors qu'à l'inverse, l'onde de compression est plus lente du fait de la plus petite vitesse dans l'état intermédiaire.

Afin de pouvoir mieux caractériser la détente, la Figure 4.13 montre la variation d'entropie massique relative à l'état initial à gauche du diaphragme (i.e. $s-s_L$) sur l'axe du tube pour le cas du gaz parfait et pour le fluide réel en fonction de la position.

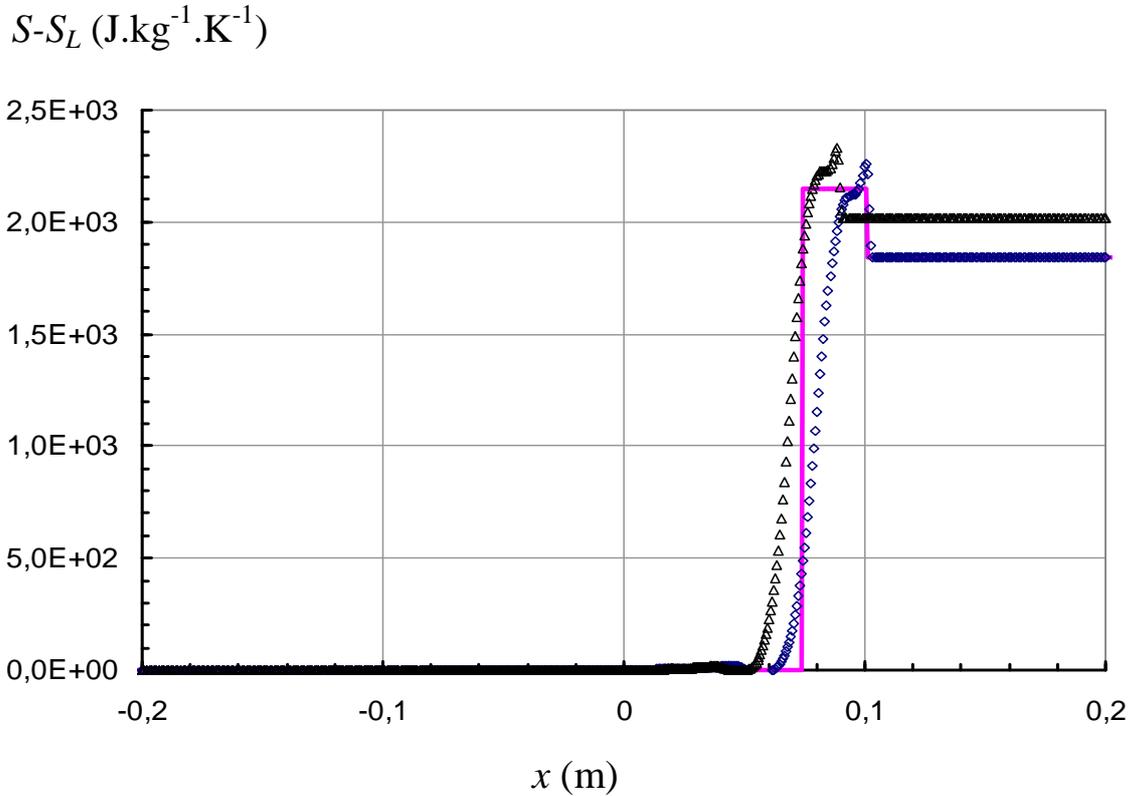


Figure 4.13 : Variation de l'entropie massique $s-s_L$ sur l'axe du tube à choc en fonction de la position à $t=0,1\text{ms}$. Solution numérique obtenue pour le tube à choc de fluide réel (Δ : schéma UPWIND d'ordre 2), comparé à la solution numérique obtenue pour le tube à choc de gaz parfait (\diamond : UPWIND à l'ordre 2) et solution du solveur de Riemann exact pour le gaz parfait (—).

Il est important de noter que l'entropie du fluide réel est très différente de l'entropie du gaz parfait, par exemple à l'état initial à gauche $s_L = 4822,52 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pour le fluide réel alors que $s_L = 6577,70 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pour le gaz parfait. Ainsi, en étudiant la quantité $s-s_L$ on ne tient pas compte de cette différence puisque ce sont les variations de l'entropie au travers des discontinuités qui nous intéressent. On constate que les deux détente (à la fois celle du gaz parfait et celle du fluide réel) sont isentropiques. Au travers de la ligne de glissement, il y a un important saut d'entropie. Ce saut d'entropie est plus grand dans le cas du fluide réel que dans le cas du gaz parfait. Au travers de l'onde de choc, il y a également un saut d'entropie, il est le plus petit dans le cas du fluide réel.

4.1.4 Conclusions

Des simulations numériques ont été menées grâce à un modèle d'écoulement monophasique compressible en utilisant différentes loi d'état. Tout d'abord, des premiers cas test numériques visant à résoudre le problème du tube à choc ont permis d'étudier le comportement de différents schémas d'interpolation numérique avec la loi d'état des gaz parfait pour laquelle une solution exacte a été calculée. Les résultats obtenus pour les différents schémas numériques montrent que la méthode numérique traduit bien la physique rencontrée dans ce type de problème : les différentes ondes (détente, discontinuité de contact et onde de choc) sont bien représentées et l'évolution des grandeurs au travers de ces ondes correspond bien à la physique. De plus, la méthode numérique est d'autant plus précise que l'ordre du schéma d'interpolation est augmenté. Toutefois, pour un schéma MUSCL d'ordre 3, des difficultés numériques de convergence ont été mises en évidence. Ces problèmes ont pu être résolus en modifiant quelques paramètres numériques (le nombre CFL et le pas de temps) qui influencent grandement le temps de calculs nécessaire afin de mener à bien la simulation numérique. C'est la raison pour laquelle le schéma Upwind d'ordre 2 a été choisi pour le reste des simulations. Il sera également utilisé pour les simulations de jet sous détendu.

Ensuite, la même configuration de tube à choc a été étudiée pour un fluide réel. Dans un premier temps, cette simulation a permis de s'assurer que la méthode numérique est apte à prendre en compte une loi d'état complexe. Dans un second temps, elle a permis de caractériser l'écoulement du fluide réel par rapport au gaz parfait. Même si la détente subie par le fluide est isentropique dans les deux cas, des effets de fluide réel sur l'écoulement ont été mis en évidence. En effet, à l'état initial choisi, les propriétés du fluide réel diffèrent déjà de celles prédites par la loi d'état des gaz parfaits. De plus, l'état à l'issue de la détente (état intermédiaire) à 0,1 ms est différent en termes de pression et de température. Il en est résulté une vitesse à l'issue de la détente est plus faible dans le cas du fluide réel. De plus, dans la configuration étudiée, la détente du fluide réel est plus rapide que la détente du gaz parfait. Au contraire, l'onde de choc est plus lente dans le cas du fluide réel et le saut d'entropie au travers de cette onde est plus petit (cela est dû à la vitesse plus faible).

4.2 Jet libre supersonique sous-détendu à NPR=10

L'aptitude de la méthode numérique à bien représenter les phénomènes physiques de détente et de choc a été prouvée dans la section précédente. On s'intéresse alors à une

configuration d'écoulement plus complexe : le jet sous détendu axisymétrique, et en particulier à un cas de référence qui est étudié dans la littérature.

4.2.1 Description de l'étude

Dans cette partie, on s'intéresse au jet libre (sans impact) fortement sous-détendu de gaz parfait avec un rapport de pression $NPR=10$. Le fluide entre dans le domaine d'étude axisymétrique en passant par une surface qui représente la section de sortie de la buse qui a un diamètre D_e . La géométrie et les dimensions du domaine d'étude sont spécifiées en Figure 4.14.

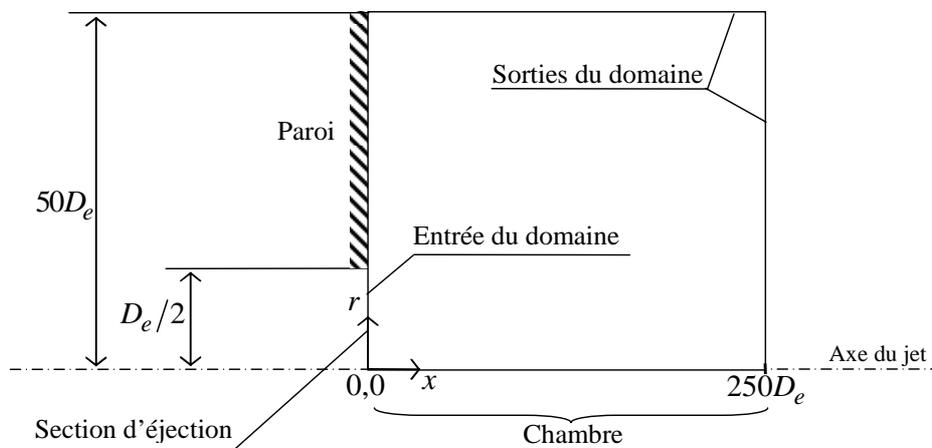


Figure 4.14 : Domaine d'étude utilisé pour la simulation du jet fortement sous-détendu avec un rapport de pression $NPR=10$.

Le maillage du domaine d'étude est constitué d'éléments quadrilatéraux. Des solutions indépendantes du maillage ont été obtenues pour chacun des cas étudiés et pour ce faire différentes simulations ont été effectuées pour s'en assurer. De plus, les mailles sont resserrées dans les zones à fort gradient de pression et de vitesse. Au final, le maillage utilisé correspond à 400×800 noeuds. Une condition aux limites de pression statique P est imposée à l'entrée ($P=P_e$) et à la sortie ($P=P_a$) du domaine, telle que $P_e/P_a=NPR=10$. De plus, à l'entrée, le nombre de Mach vaut $M_e=1$. Sur les parois solides (hachurées sur la Figure 4.14), sont imposées des conditions de non glissement. De plus, ces parois sont supposées adiabatiques. La température d'injection imposée à l'entrée du domaine est égale à la température à la sortie du domaine, et la valeur $T_e=T_a=300K$ a été choisie.

4.2.2 Cas du gaz parfait

La structure proche de l'orifice de sortie du jet libre supersonique sous-détendu est étudiée afin de valider le modèle. La Figure 4.15 montre les contours du nombre de Mach

obtenus par simulation numérique. Ils sont comparés à la structure de chocs (chocs incident, réfléchi et disque de Mach), ainsi que la frontière du jet, obtenus par Otobe et al. [1] (lignes solides noires).

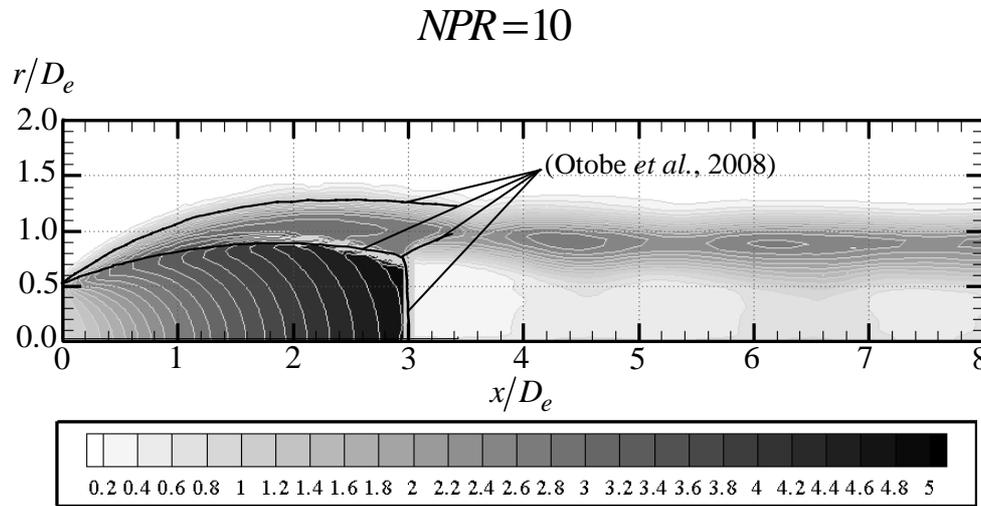


Figure 4.15 : Contours du nombre de Mach obtenus pour le cas test de jet fortement sous détendu de gaz parfait à $NPR=10$.

On note une très bonne concordance des résultats numériques obtenus avec ceux d'Otobe *et al.* [1] notamment pour la position x_{DM} et le diamètre D_{DM} du disque de Mach. Les résultats donnent $x_{DM}/D_e=3,01$ et $D_{DM}/D_e=1,50$. Ces valeurs sont en bon accord avec les corrélations de Cumber *et al.* [2] qui obtiennent $x_{DM}/D_e=3,23$ et $D_{DM}/D_e=1,49$, et ceux de Palmer et Hanson [3], qui donnent $x_{DM}/D_e=2,90$ et $D_{DM}/D_e=1,30$. Les chocs incident et réfléchi sont également bien représentés. On remarque également que la couche de mélange entre le jet et le fluide au repos dans la chambre commence sur le bord de la buse et est supersonique. Une légère surestimation de l'épaisseur du jet est observée par rapport à [1].

La Figure 4.16 montre les variations de la pression statique adimensionnée P/P_e , de la température adimensionnée T/T_e , du nombre de Mach M et de la variation adimensionnée de l'entropie $(s-s_e)/r$ en fonction de la position sur l'axe du jet ($r/D_e=0$). On constate que dès la sortie du jet et jusqu'à la position x_{DM}/D_e , l'écoulement supersonique s'accélère puisque le nombre de Mach augmente de 1 à 4,73. La pression et la température chutent très fortement à des valeurs inférieures aux valeurs prescrites dans la chambre. On montre bien le caractère isentropique de cette forte détente. A la position x_{DM}/D_e , il y a le disque de Mach, l'écoulement devient subsonique, se re-comprime et s'échauffe. Un saut d'entropie est également observé au travers du disque de Mach. Au-delà de la position x_{DM}/D_e , l'écoulement

subsonique s'accélère et se détend puis se comprime et ralentit successivement et de manière isentropique. L'examen détaillé des Figure 4.15 et Figure 4.16 permet de constater la structure proche de l'écoulement. Les résultats obtenus sont en bon accord avec la littérature ([1], [2], [3]).

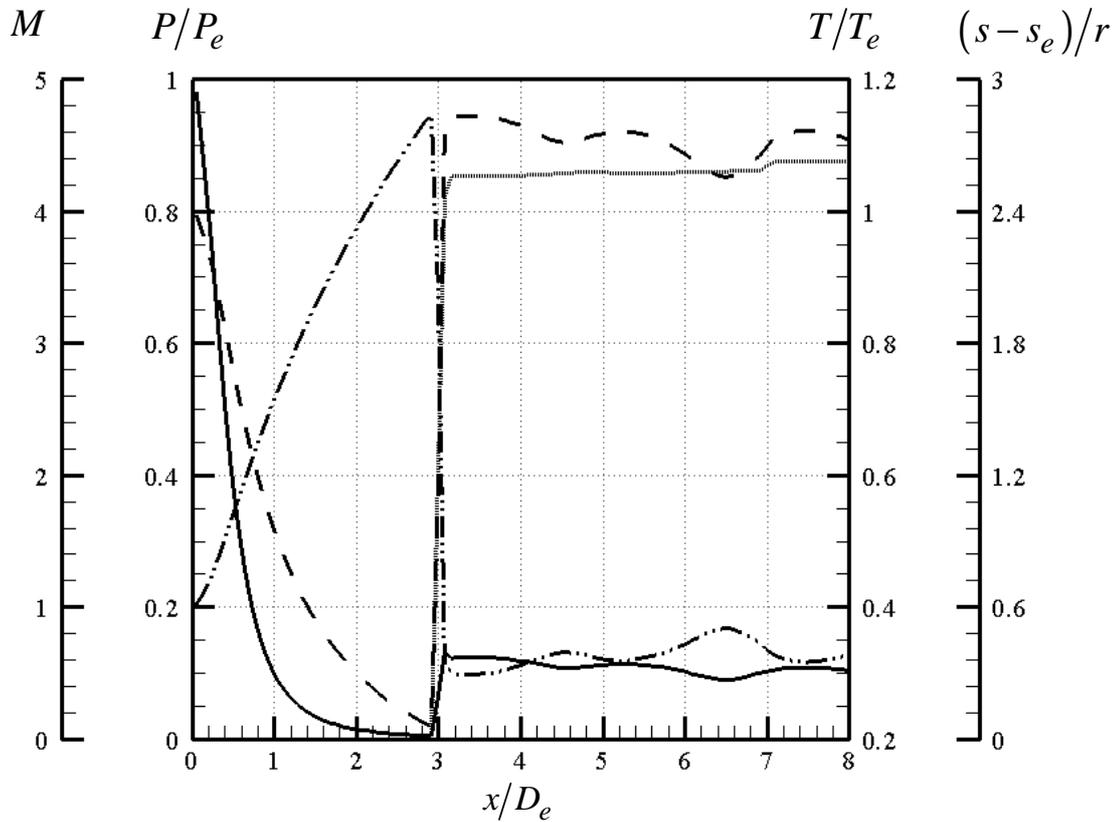


Figure 4.16 : Variations de la pression statique P/P_e (—), du nombre de Mach M (-.-.-), de la température T/T_e (- - -) et de l'entropie $(s-s_e)/r$ (.....) sur l'axe du jet obtenus pour le cas test de jet fortement sous détendu de gaz parfait à $NPR=10$.

4.2.3 Jet libre supersonique sous-détendu de fluide réel à NPR=10

Dans cette partie, on s'intéresse à la même configuration de jet libre fortement sous-détendu sonique à $NPR=10$ en utilisant cette fois la loi d'état du fluide réel. Dans ces conditions de pression et de température à l'entrée du domaine, les effets de fluide réel ne sont pas prépondérant (voir paragraphe 1.2.3). Cette simulation a principalement pour but de valider l'implémentation de la loi d'état de fluide réel dans le code de calculs et de vérifier l'aptitude du code de calculs à reproduire les caractéristiques dynamiques et thermiques du jet sous-détendu en utilisant une telle loi d'état.

Les Figure 4.17 à Figure 4.20 montrent respectivement les champs du nombre de Mach, de la température, de la masse volumique et de la vitesse obtenus par la simulation numérique pour le jet sous détendu de fluide réel à $NPR=10$.

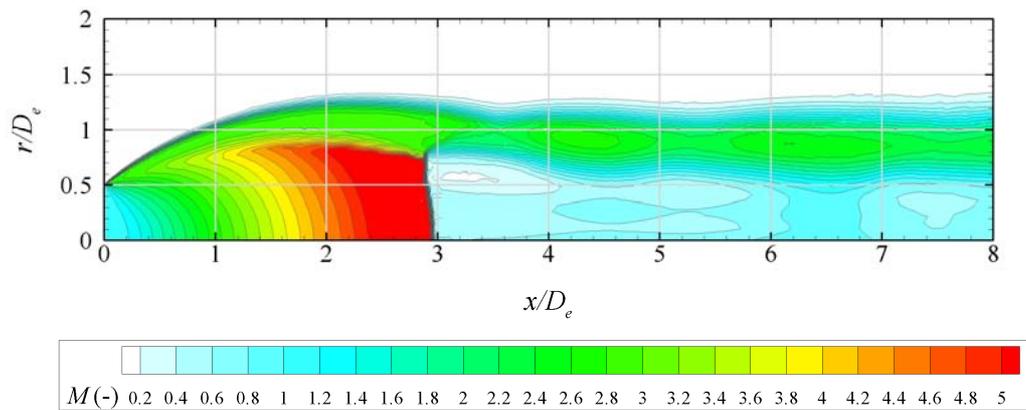


Figure 4.17 : Contours du nombre de Mach dans le jet fortement sous détendu de fluide réel à $NPR=10$.

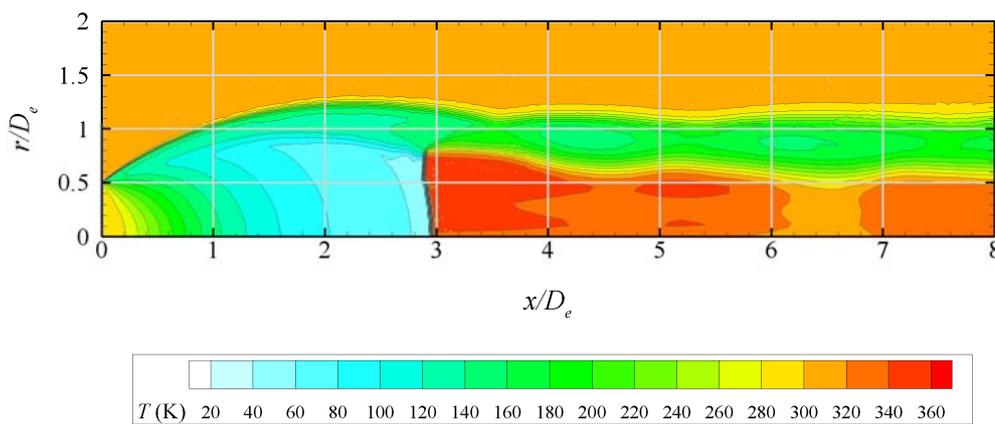


Figure 4.18 : Contours de température dans le jet fortement sous détendu de fluide réel à $NPR=10$.

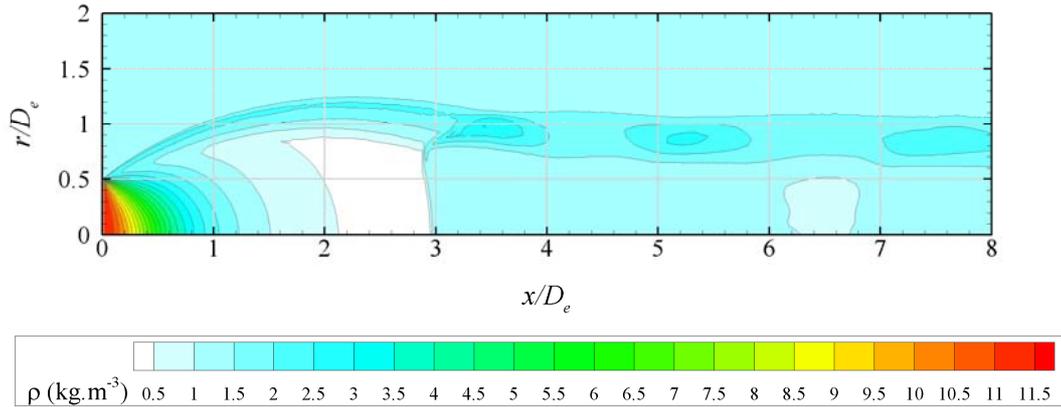


Figure 4.19 : Contours de masse volumique dans le jet fortement sous détendu de fluide réel à $NPR=10$.

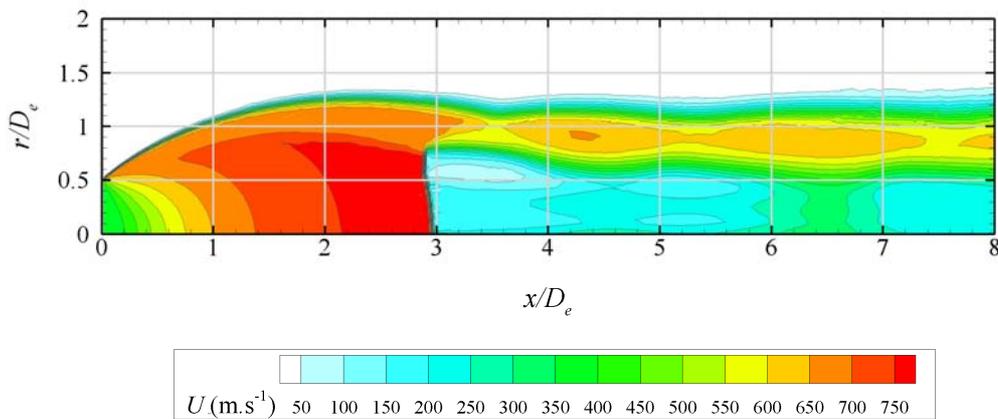


Figure 4.20 : Contours de vitesse dans le jet fortement sous détendu de fluide réel à $NPR=10$.

Ces figures montrent bien que la structure du jet de fluide réel obtenue par la simulation numérique correspond à jet un libre supersonique sous-détendu. La méthode numérique est bien capable de reproduire les phénomènes de détente et de re-compression au travers d'une onde de choc de forte intensité présents dans le jet et ce, en prenant en compte une loi d'état complexe.

De même que cela a été fait pour le jet de gaz parfait, on trace sur la Figure 4.21, les variations de la pression statique adimensionnée P/P_e , de la température adimensionnée T/T_e , du nombre de Mach M et de la variation adimensionnée de l'entropie $(s-s_e)/r$ en fonction de la position sur l'axe du jet ($r/D_e=0$).

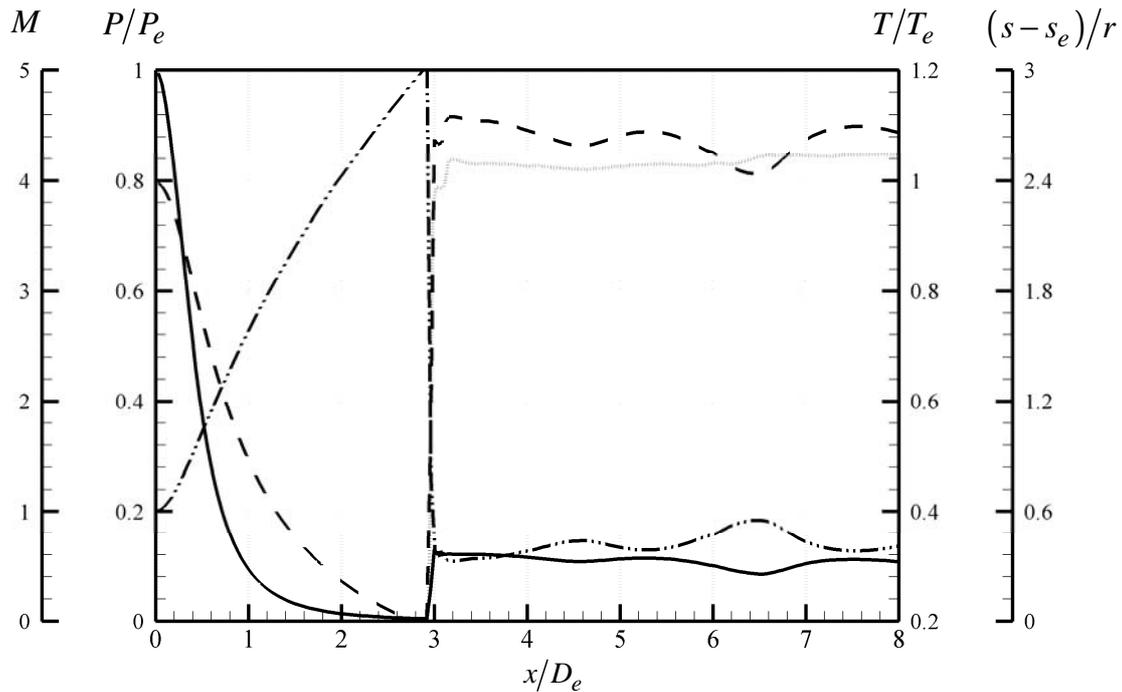


Figure 4.21 : Variations de la pression statique P/P_e (—), du nombre de Mach M (— · —), de la température T/T_e (---) et de l'entropie $(S-S_e)/r$ (.....) en fonction de la position x/D_e sur l'axe du jet obtenu pour le cas test de jet fortement sous détendu de fluide réel à $NPR=10$.

Il est important de noter que le caractère isentropique de la détente est également observé pour le cas du fluide réel.

4.2.4 Jet libre supersonique sous-détendu à $NPR=10$: comparaison fluide parfait/fluide réel

L'évolution des grandeurs d'écoulement dans le jet obtenue dans le cas du fluide réel est comparée à celle obtenue pour le gaz parfait en comparant les figures 4.16 et 4.21. On remarque que les sauts de pression, température, masse volumique et vitesse au travers du disque de Mach sont quasiment semblables dans les deux cas. Cependant, le nombre de Mach calculé à l'amont du disque de Mach est plus important dans le cas du jet de fluide réel.

La structure du jet obtenue dans le cas du fluide réel est comparée à celle obtenue pour le gaz parfait en traçant les contours du nombre de Mach et de masse volumiques pour les deux cas sur les Figure 4.22 et Figure 4.23. La position et le diamètre du disque de Mach obtenues pour le gaz parfait sont bien retrouvés dans le cas du fluide réel pour cette configuration. La frontière du jet possède le même rayon de courbure initial dans les deux cas.

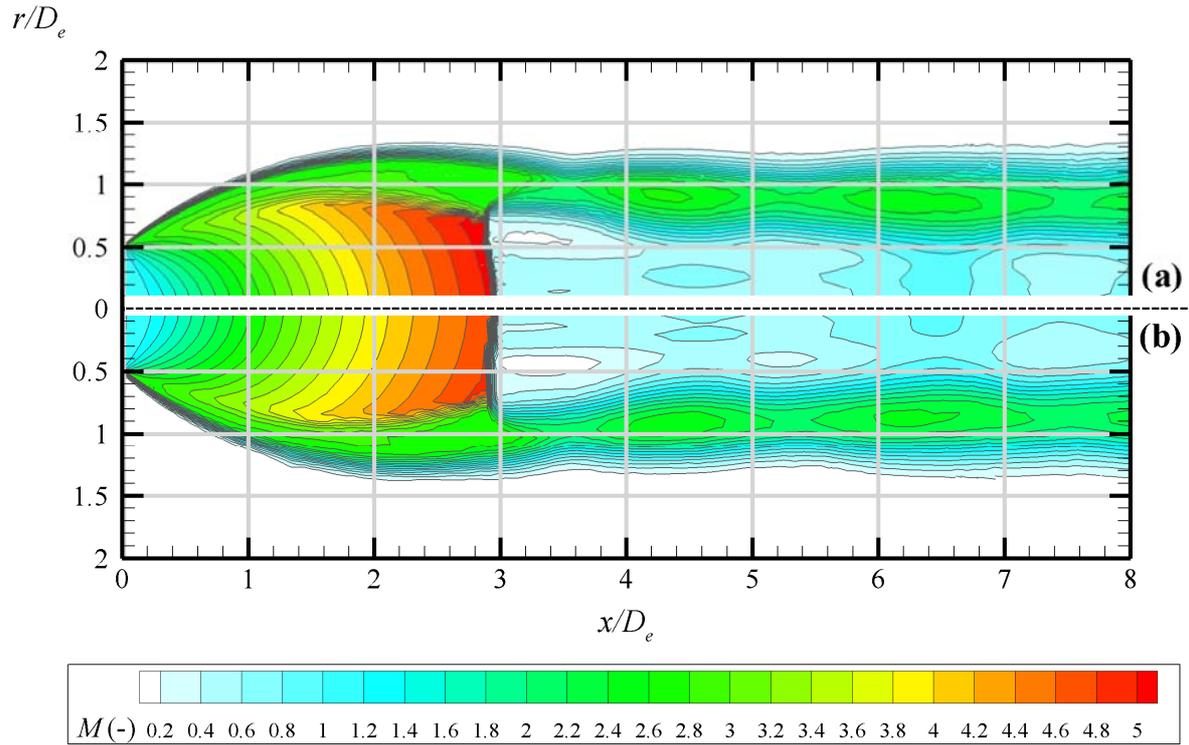


Figure 4.22 : Contours du nombre de Mach dans le jet fortement sous détendu à $NPR=10$: (a) : avec la loi d'état de fluide réel ; (b) : avec la loi d'état de gaz parfait.

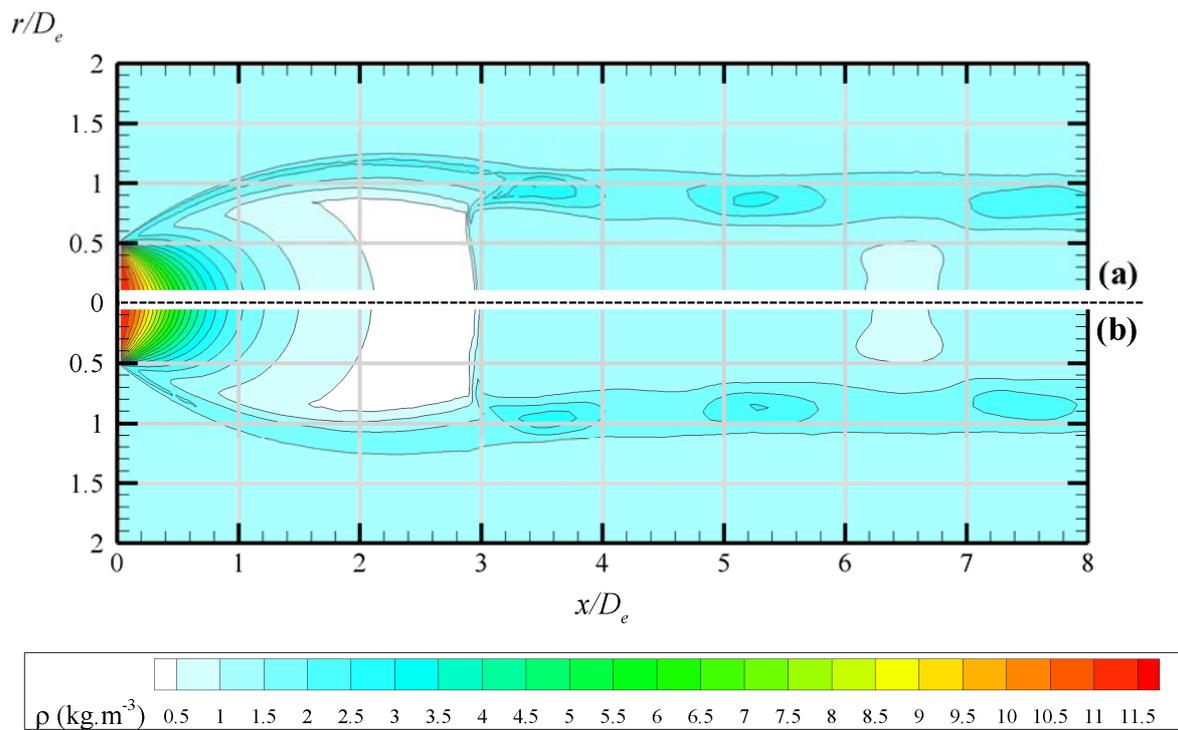


Figure 4.23 : Contours de masse volumique dans le jet fortement sous détendu à $NPR=10$. (a) : avec la loi d'état de fluide réel ; (b) : avec la loi d'état de gaz parfait.

La Figure 4.24 montre les transformations subies par le fluide sur l'axe du jet dans le diagramme (P, h) entre l'état initial (**i**) qui correspond à l'état sur la section de sortie de l'orifice du jet et l'état final (**f**) qui correspond à l'état sur l'axe du jet à une distance $x/D_e=250$.

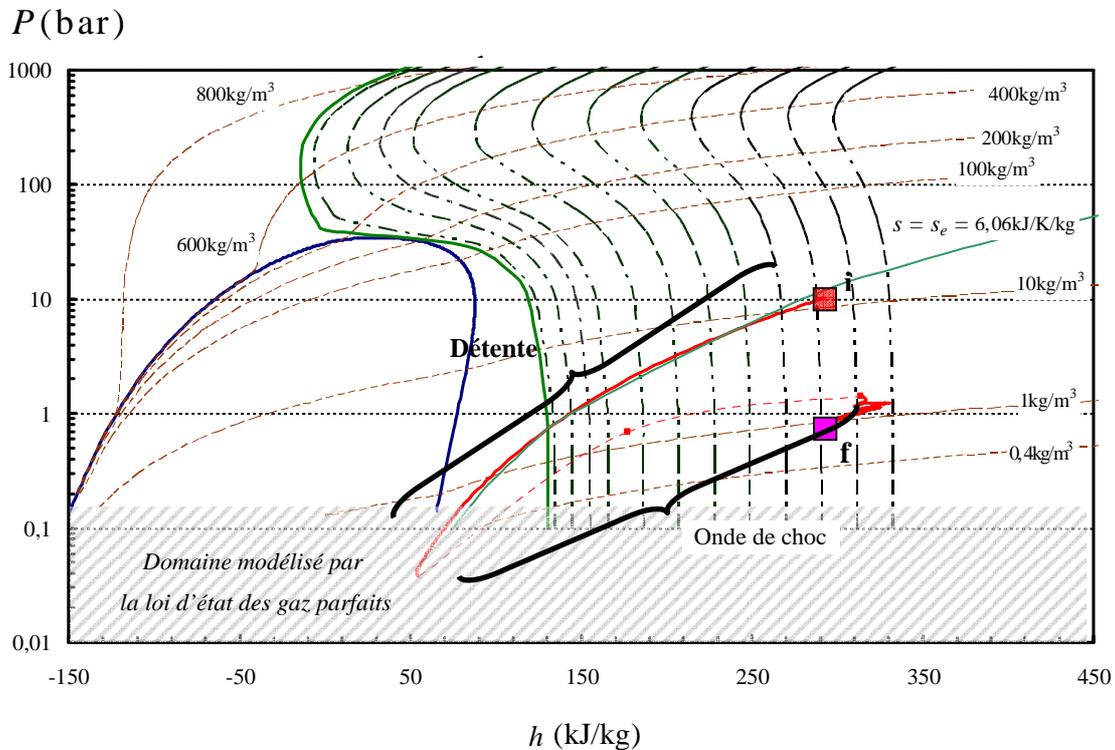


Figure 4.24 : Chemin thermodynamique suivi sur l'axe du jet dans le jet fortement sous détendu de fluide réel à $NPR=10$; **i** : état initial du fluide sur la section de sortie du jet, **f** : état final du fluide sur l'axe du jet à une distance $x/D_e=250$; Courbes de saturation liquide et gazeuse (—) ; isothermes de 130K à 350K par pas de 20K de gauche à droite (—) ; isotherme critique (—) ; isentrope $S=6,06\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ (—) ; courbes de masse volumique constante (---).

On constate que d'après les résultats obtenus pour le jet de fluide réel, la détente isentropique passerait par un changement d'état vers le solide. Ce qui signifie que des particules solides apparaîtraient dans le jet par solidification du gaz. Ce changement d'état n'est pas pris en compte dans le modèle, puisque pour toute pression inférieure à la pression du point triple, les propriétés du fluide sont modélisées par la loi d'état des gaz parfaits (voir paragraphe 3.4). La prise en compte d'un tel changement d'état n'est pas trivial et n'est pas abordé ici, il doit faire l'objet d'une étude poussée.

Enfin, notons que pour obtenir ces résultats avec la loi d'état de fluide réel, le temps de calculs est multiplié par 40 (par rapport au cas du gaz parfait) notamment à cause de la procédure itérative permettant d'inverser la loi d'état (i.e. obtenir la masse volumique à partir de la pression et de la température) qui est appelée dans chaque cellule du maillage à chaque itération du processus de calcul. C'est ce qui rend très pénalisant ce type de simulations.

4.2.5 Conclusions

Une configuration de jet axisymétrique libre et fortement sous-détendu de gaz parfait, avec un rapport $NPR=10$ et une température d'injection égale à la température dans la chambre, a été étudiée et comparée avec des résultats de la littérature. Pour cette configuration, le modèle a pu convenablement reproduire la structure globale de l'écoulement. De plus, une bonne concordance sur la taille et la position de l'onde de choc (le disque de Mach) est retrouvée. La périphérie du jet est elle aussi bien représentée. De plus, les profils de pression statique, de température et d'entropie sur l'axe du jet ont permis de décrire la détente du gaz (qui est une détente isentropique) de la section d'éjection à l'onde de choc, puis le saut des différentes grandeurs au travers de l'onde de choc. En aval de l'onde de choc, le jet se stabilise peu à peu vers les conditions prescrites dans la chambre.

Ce jet a ensuite été simulé en prenant en compte les propriétés du fluide réel avec une loi d'état complexe. D'un point de vue numérique, l'intégration de la loi d'état complexe dans le code de calcul a été validée puisque la solution obtenue est semblable à la solution obtenue pour le gaz parfait. Dans les conditions de pression et de température dans le jet et dans la chambre, les propriétés du fluide varient peu par rapport à celle du gaz parfait. Toutefois, l'étude de cette configuration avec la loi d'état du fluide réel a permis de montrer que même si la position et le diamètre du disque de Mach ainsi que la frontière du jet ne changent pas, la loi d'état de fluide réel prévoit un changement de phase. Ce changement de phase n'a pas été pris en compte dans la modélisation actuelle (chapitre 3). En effet, celle-ci impose des modifications sur la formulation de la loi d'état afin de conserver l'hyperbolicité du système d'équations à résoudre ainsi que la prise en compte effective des deux phases dans les équations de conservation et dans le schéma numérique. Des recherches approfondies doivent encore être menées en ce sens.

4.3 Etude paramétrique d'une configuration industrielle : jet supersonique sous-détendu de gaz parfait en impact sur une surface plane

4.3.1 Présentation des configurations étudiées

En première approximation dans cette partie, les propriétés physiques du fluide sont décrites par la loi des gaz parfaits (et les propriétés de transport comme la conductivité thermique et la viscosité sont calculées à partir de la théorie cinétique des gaz). L'écoulement est supposé compressible stationnaire en moyenne, visqueux et monophasique (aucun changement de phase n'est pris en compte). Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie (voir Chapitre 2) sont résolues simultanément à l'aide du schéma TVD Roe-FDS au second ordre décentré (UPWIND, voir Chapitre 3).

La géométrie du domaine d'étude est spécifiée sur la Figure 4.25. Cette géométrie fait intervenir les paramètres géométriques de l'étude : la longueur et le diamètre de buse, soit l_{buse} et D_e respectivement. Pour ces paramètres géométriques, des valeurs représentatives d'une buse utilisée dans le cadre d'une application de traitement de surface sont utilisées dans ce travail, à savoir : $l_{buse} = 1\text{mm}$, $D_e = 0,2\text{mm}$.

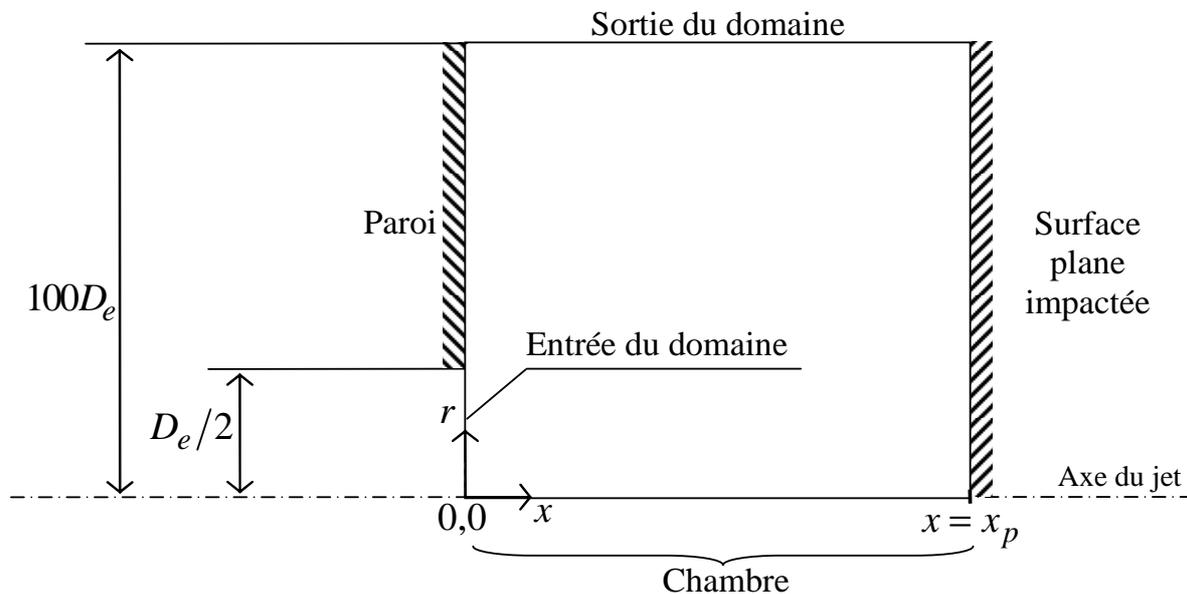


Figure 4.25 : Domaine d'étude utilisé pour les simulations des configurations industrielles de jet sous-détendu de gaz parfait en impact sur une surface plane.

Le maillage de ce domaine s'effectue par blocs à l'aide d'éléments quadrilatéraux resserrés au niveau des zones où l'écoulement connaît de fortes perturbations. Les conditions aux limites sont imposées sur les frontières du domaine de calculs. A l'entrée, sont prescrites des conditions d'injection en termes de pression, et de température (état générateur).

A la sortie, sont prescrites les conditions atmosphériques de pression et de température. Sur la surface d'impact, la vitesse axiale (axe x) est imposée nulle. De même sur la frontière de l'injecteur, la composante de la vitesse orthogonale à la paroi est imposée nulle. De plus, la paroi de l'injecteur est supposée adiabatique. Enfin, une condition de symétrie est imposée sur l'axe du jet.

4.3.2 Paramètres variables de l'étude

Nous cherchons à caractériser le jet d'azote issu de la détente du fluide au travers de la buse qui est un orifice cylindrique dans notre cas. Les conditions sur la section de sortie de la buse ne sont pas connues a priori dans notre application. C'est à l'entrée du domaine de calcul, dans le plenum (Figure 4.25), que l'azote est injecté à différentes conditions de pression P_{inj} et à la température T_{inj} , dans une chambre à la pression $P_a=1,01325 \cdot 10^5$ Pa, et à la température $T_a=300$ K. Une étude paramétrique est menée en fonction de ces conditions d'injection. La distance d'impact est également un paramètre influençant le comportement du jet qui a été identifié et souligné au Chapitre 1. L'étude paramétrique proposée ici propose de tenir compte de ce paramètre. Techniquement, ce paramètre est souvent appelé la distance de tir (ou de projection) et représente la distance entre l'orifice de sortie du jet et la surface impactée perpendiculairement par le jet. Afin que l'étude soit représentative d'un jet utilisé dans le cadre d'une application de traitement de surface, on considère l'ensemble des valeurs $d_{tir} = \{5 \text{ mm}; 10 \text{ mm}; 15 \text{ mm}; 20 \text{ mm}; 40 \text{ mm}\}$. Dans la suite, on utilisera la formulation adimensionnelle de ce paramètre en faisant intervenir le diamètre de buse : x_p/D_e , que l'on dénommera toujours *distance d'impact*. L'ensemble de valeurs pour ce paramètre considérées ici est alors : $x_p/D_e = \{25 ; 50; 75; 100; 200\}$. Pour des raisons de temps de calcul, toutes ces distances n'ont pas été simulées pour une condition d'injection donnée. Le Tableau 4.4 regroupe l'inventaire des 25 différentes configurations étudiées.

Cas	C1	C2	C3	C4	C5	C6
P_{inj} (Pa)	$5,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^8$	$1,5 \cdot 10^8$	$2,0 \cdot 10^8$	$2,5 \cdot 10^8$	$3,0 \cdot 10^8$
T_{inj} (K)	130	130	130	130	130	130
x_p/D_e (-)	{25; 50; 75; 100; 200}			{50; 75; 100; 200}		{100; 200}

Tableau 4.4 : Conditions d'injection (pression P_{inj} et température T_{inj}) retenues pour l'étude d'une configuration de type industrielle et ensemble de distances d'impact considérées pour chacune.

4.3.3 Evolution globale de la structure du jet en fonction des paramètres de l'étude

Premièrement, nous décrivons l'allure globale des solutions afin de faire apparaître l'influence du *NPR* (ici, les conditions d'injection ont été paramétrées à l'entrée du plénum qui précède la buse, le *NPR* est directement lié à la pression d'injection) et de la distance d'impact x_p/D_e . Les résultats obtenus en termes de champs du nombre de Mach et de température dans le jet sont présentés sur les figures 4.26 à 4.30 qui suivent en fonction de la distance d'impact et des conditions d'injection.

Elles font clairement apparaître une dépendance simultanée de la structure du jet aux deux paramètres *NPR* et x_p/D_e .

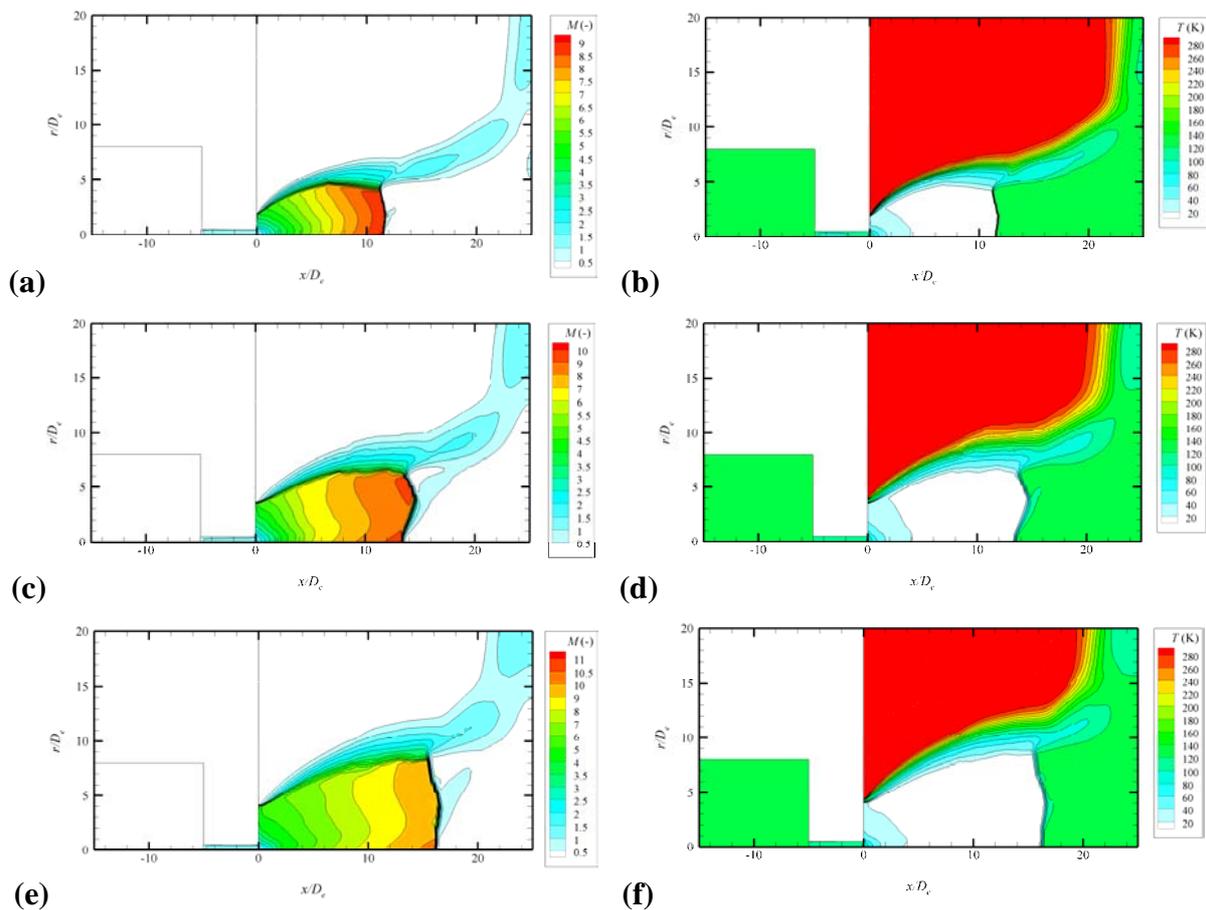


Figure 4.26 : Résultats obtenus pour une distance d'impact de $x_p/D_e=25$. Champ du nombre de Mach dans le jet pour les cas : (a) : C1, (c) : C2, (e) : C3; et champ de température dans le jet pour les cas : (b) : C1, (d) : C2, (f) : C3.

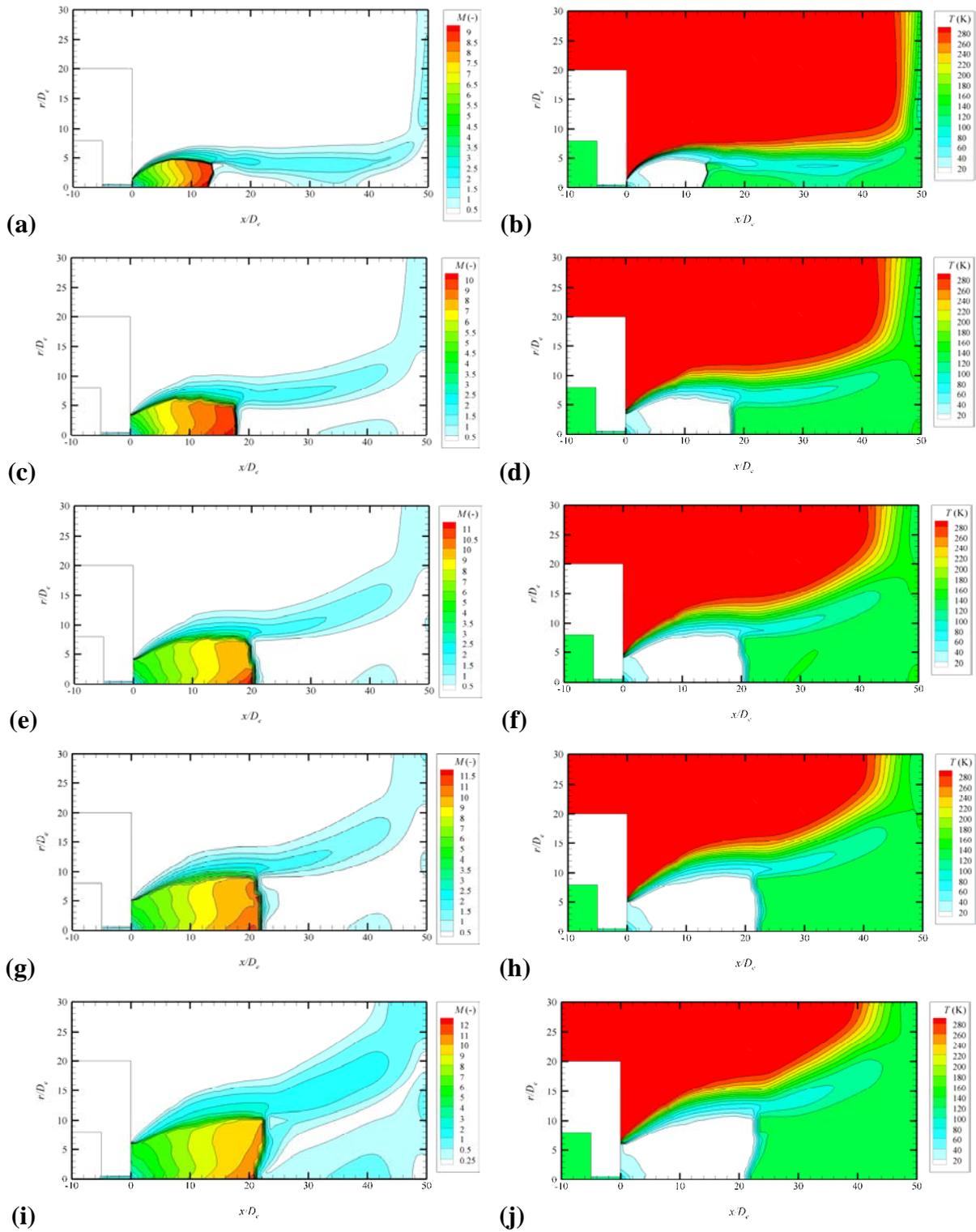


Figure 4.27 : Résultats obtenus pour une distance d'impact de $x_p/D_e=50$. Champ du nombre de Mach dans le jet pour les cas : (a) : C1, (c) : C2, (e) : C3, (g) : C4, (i) : C5; et champ de température dans le jet pour les cas : (b) : C1, (d) : C2, (f) : C3, (h) : C4, (j) : C5.

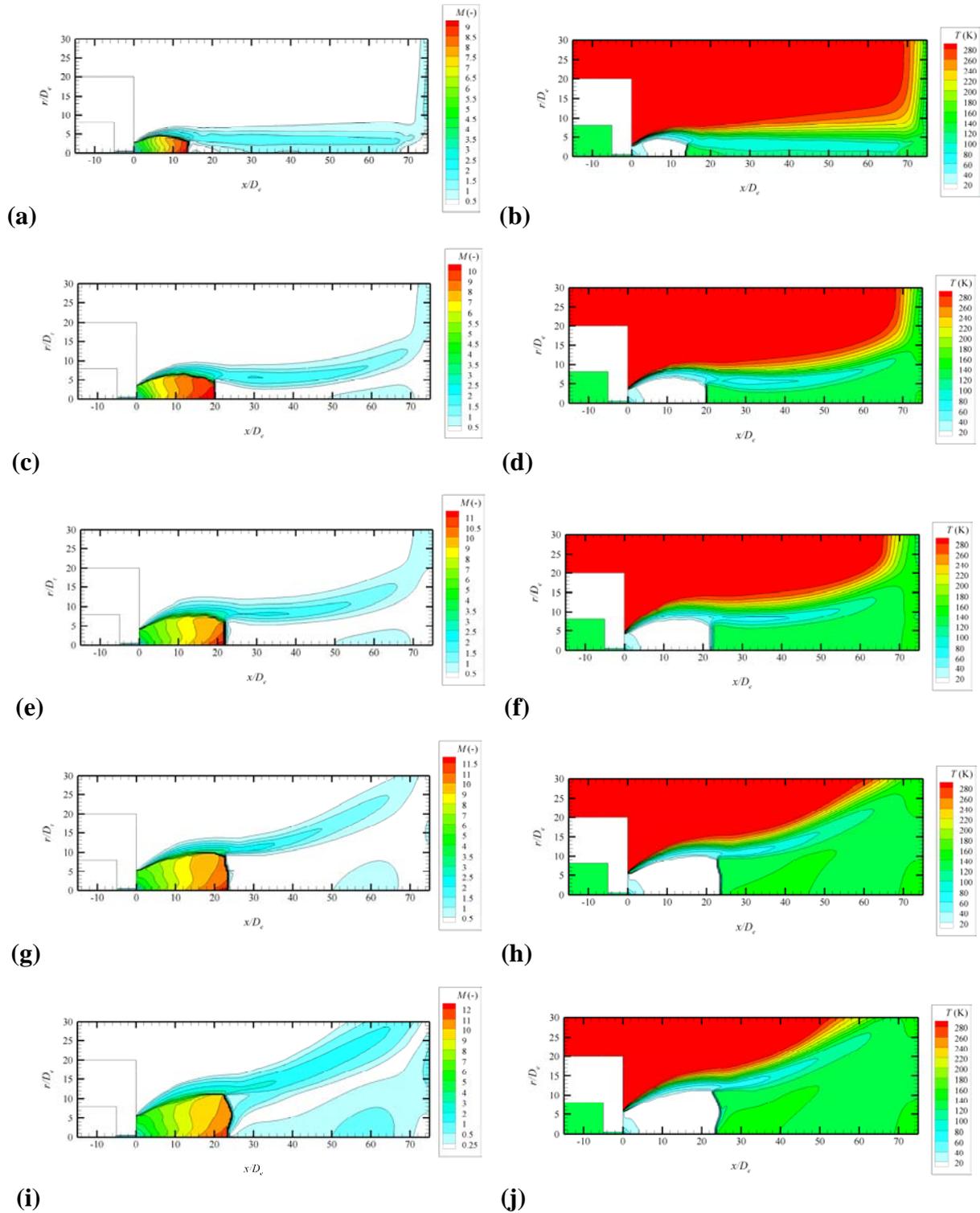


Figure 4.28 : Résultats obtenus pour une distance d'impact de $x_p/D_e=75$. Champ du nombre de Mach dans le jet pour les cas : (a) : C1, (c) : C2, (e) : C3, (g) : C4, (i) : C5; et champ de température dans le jet pour les cas : (b) : C1, (d) : C2, (f) : C3, (h) : C4, (j) : C5.

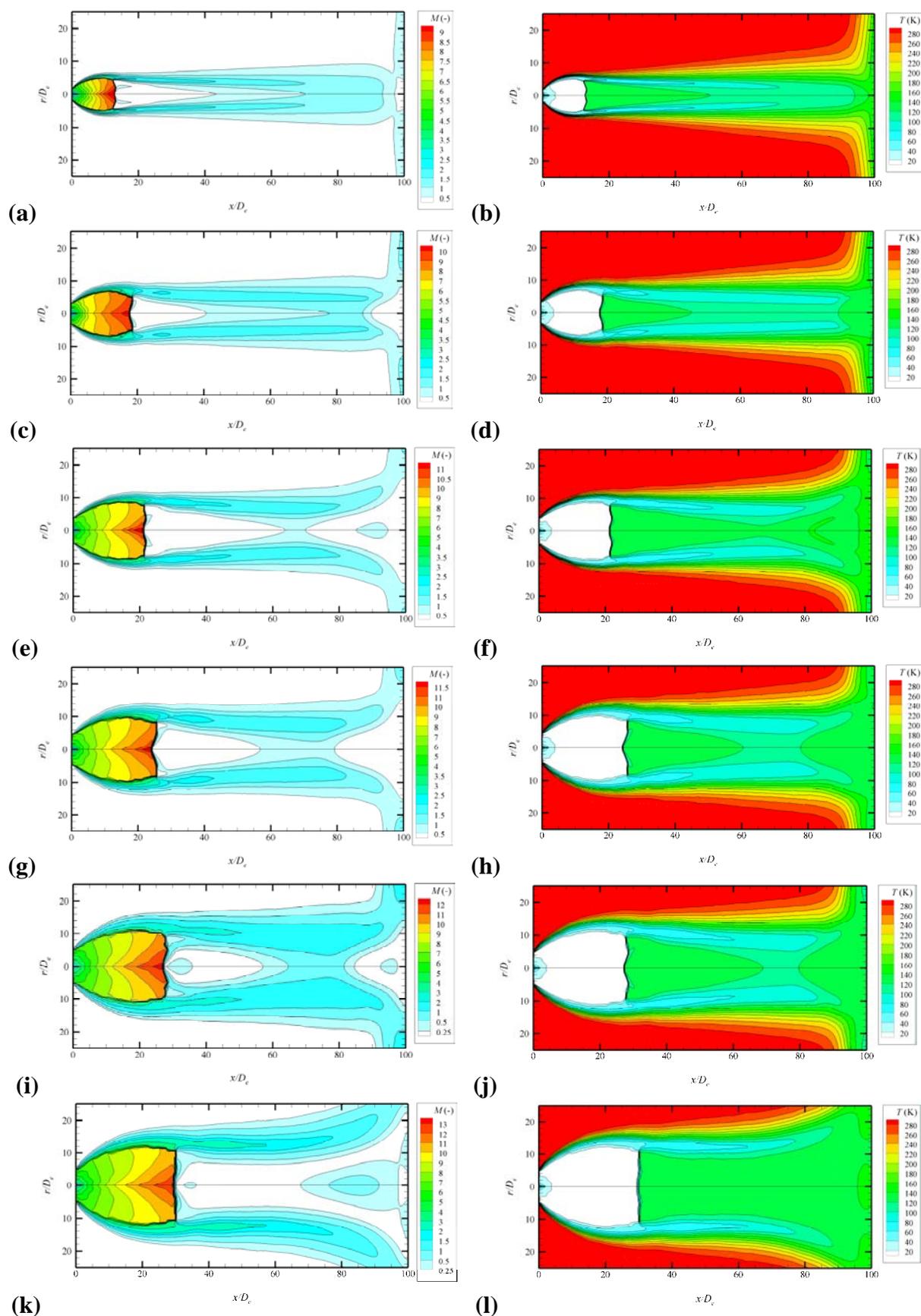


Figure 4.29 : Résultats obtenus pour une distance d'impact de $x_p/D_e=100$. Champ du nombre de Mach dans le jet pour les cas : (a) : C1, (c) : C2, (e) : C3, (g) : C4, (i) : C5, (k) : C6; et champ de température dans le jet pour les cas : (b) : C1, (d) : C2, (f) : C3, (h) : C4, (j) : C5, (l) : C6.

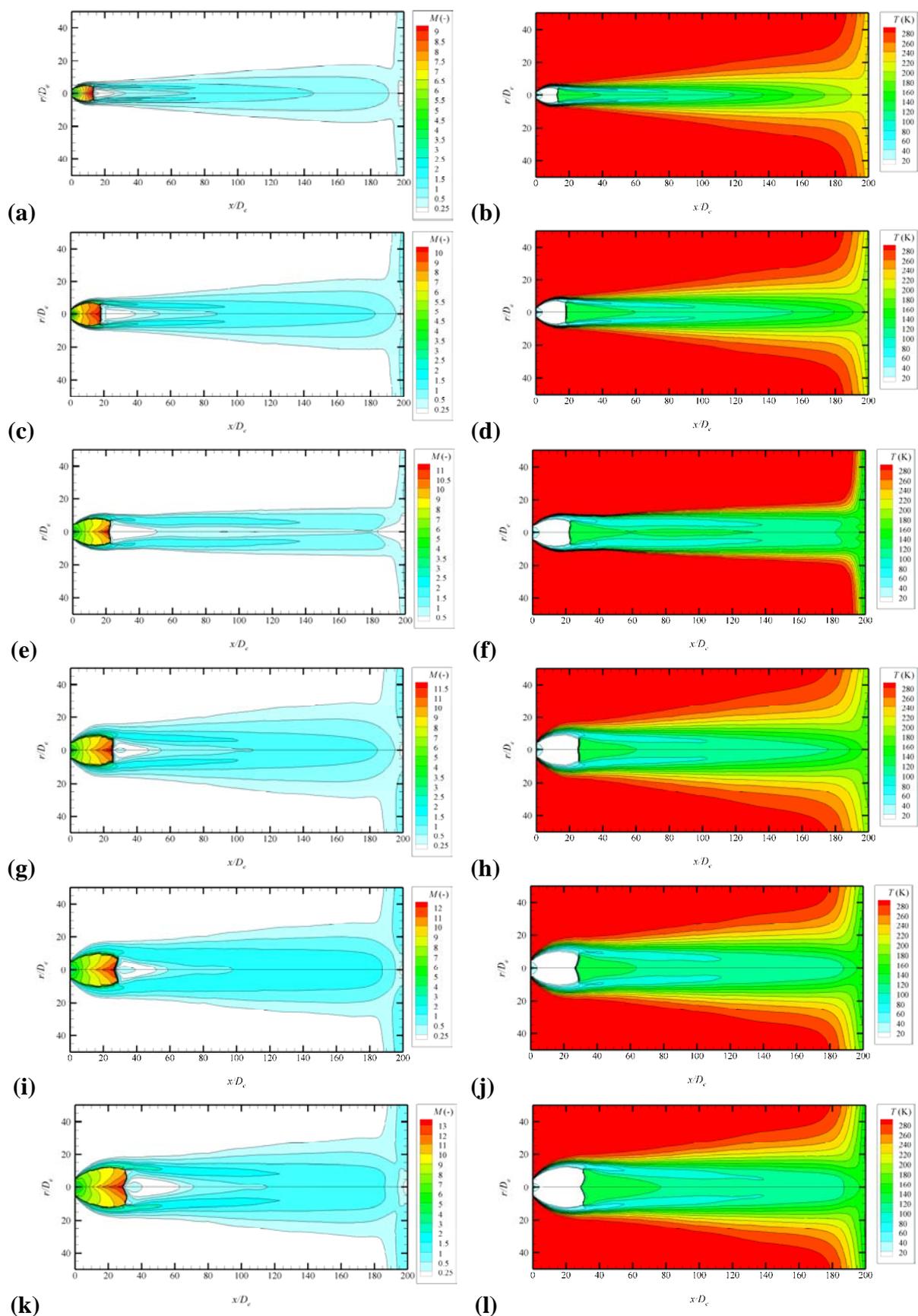


Figure 4.30 : Résultats obtenus pour une distance d'impact de $x_p/D_e=200$. Champ du nombre de Mach dans le jet : (a) : C1, (c) : C2, (e) : C3, (g) : C4, (i) : C5, (k) : C6 ; et champ de température dans le jet : (b) : C1, (d) : C2, (f) : C3, (h) : C4, (j) : C5, (l) : C6.

4.3.4 Écoulement dans la buse

On s'intéresse en premier lieu à l'écoulement au sein de la buse. En fonction des conditions d'injection, les résultats obtenus en terme de pression (et de NPR) et du nombre de Mach sur la section de sortie de la buse (où $x=0$ mm), et au col (exposant *) qui est définit comme étant la section sonique où $M = M^* = 1$, sont reportées dans la Tableau 4.5.

Cas	Valeurs sur l'axe à la section sonique	Valeurs sur l'axe à la section de sortie		Valeurs moyennes sur la section de sortie		
	P^* (Pa)	M_e (-)	P_e (Pa)	P_e (Pa)	M_e (-)	$NPR = \frac{P_e}{P_a}$
C1	$2,64.10^7$	1,26	$1,89.10^7$	$1,68.10^7$	1,23	$1,66.10^2$
C2	$5,28.10^7$	1,27	$3,78.10^7$	$3,26.10^7$	1,22	$3,21.10^2$
C3	$7,92.10^7$	1,26	$5,71.10^7$	$4,66.10^7$	1,24	$4,60.10^2$
C4	$1,06.10^7$	1,26	$7,55.10^7$	$6,34.10^7$	1,25	$6,26.10^2$
C5	$1,33.10^7$	1,27	$9,46.10^7$	$7,93.10^7$	1,23	$7,83.10^2$
C6	$1,58.10^8$	1,27	$1,11.10^8$	$1,00.10^8$	1,22	$9,90.10^2$

Tableau 4.5 : Résultats obtenus : propriétés dans la buse.

Nous comparons d'abord ces valeurs avec le cas idéal. Pour un fluide parfait compressible, les conditions d'arrêt sont constantes lors d'une transformation isentropique. En particulier, la pression d'arrêt P^0 peut être déterminée en connaissant la pression P et le nombre de Mach local M par la relation :

$$\frac{P^0}{P} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}}$$

En utilisant cette relation au col, où la pression vaut $P = P^*$ et le nombre de Mach vaut $M = M^* = 1$, on retrouve, avec moins de 2 % d'erreur, les conditions d'injection ($P^0 \approx P_{inj}$) où le fluide est quasiment au repos. Le même constat peut être fait en utilisant la valeur de la pression statique sur l'axe au niveau de la section de sortie du jet ($P_e(r=0)$) où le nombre de Mach vaut $M_e(r=0)$. Ainsi, les propriétés isentropiques de l'écoulement sont bien reproduites dans la buse.

De plus, on constate que l'écoulement n'est pas sonique sur la section de sortie de la buse ($M_e > 1$). En fait, la Figure 4.31 montre que le rétrécissement brusque de la section de passage du fluide à l'entrée de la buse incurve fortement les lignes de courant et la section

sonique de l'écoulement est plus petite et décalée par rapport à la section d'entrée de la buse (abscisse x^*). Les résultats obtenus montrent la même tendance pour tous les cas avec cette buse. Pour simplifier, seuls les résultats du cas C2 sont présentés.

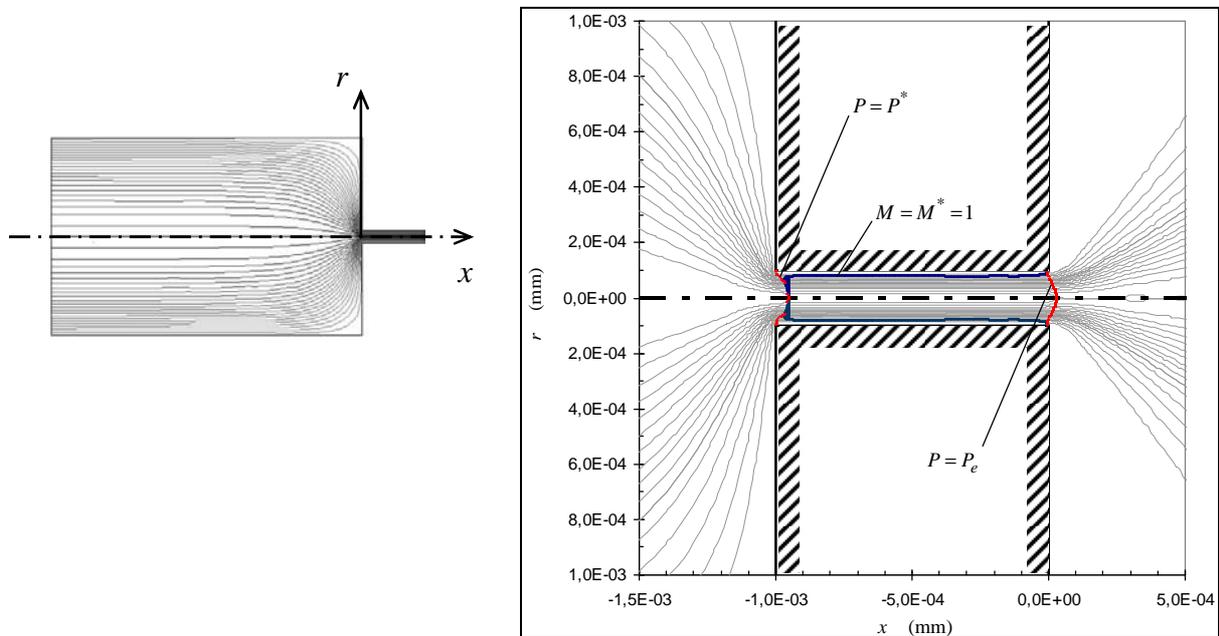


Figure 4.31 : Lignes de courant (—), ligne sonique (—), et isobares (---) dans la buse obtenues pour le cas C2.

Pour mieux caractériser l'écoulement dans la buse, la figure 4.32 montre les évolutions de la pression réduite par rapport aux conditions d'injection, soit P/P_{inj} , et du nombre de Mach M sur l'axe ($r=0$) dans la buse ($-5 \text{ mm} \leq x \leq 0 \text{ mm}$), pour le cas C2. Au col, on a $M=M^*=1$ et $P^*/P_{inj} = 0,528$ et, à la sortie $M_e=1,27$ et $P_e/P_{inj} = 0,378$, qui correspondent bien (avec 1 % d'erreur) aux valeurs auxquelles on aurait pu s'attendre en supposant un écoulement isentropique unidimensionnel (respectivement $P_e/P_{inj} = 0,528$ et $P_e/P_{inj} = 0,376$).

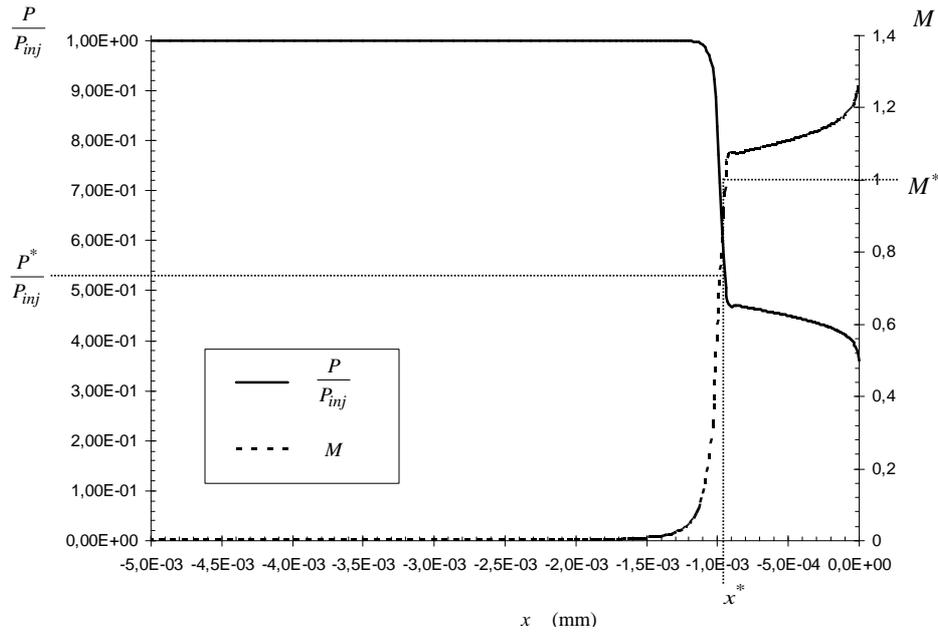


Figure 4.32 : Variations de la pression statique adimensionnée P/P_{inj} et du nombre de Mach M sur l'axe dans la buse obtenues pour le cas C2.

Le Tableau 4.4 a également montré que les valeurs moyennes de la pression sur la section de sortie sont inférieures aux valeurs relevées sur l'axe. En effet, les valeurs obtenues de la pression moyenne sur la surface de sortie (P_e) sont inférieures (jusqu'à 17% pour le cas C3) aux valeurs sur l'axe $P_e(r=0)$. La Figure 4.33 trace le profil radial de pression sur la section de sortie de la buse pour le cas C2, et montre bien que ces profils ne sont pas plats. C'est la raison pour laquelle, dans cette étude, le domaine de calcul n'a pas été réduit à l'aval de la buse uniquement, et la géométrie de buse a été conservée.

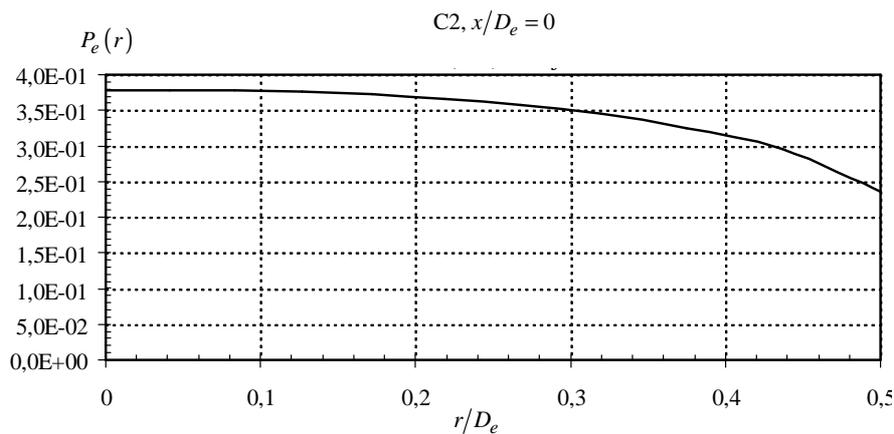


Figure 4.33 : Profil radial de pression sur la section de sortie de la buse pour le cas C2.

4.3.5 Structure du jet supersonique sous-détendu impactant

Sur la Figure 4.34, on trace P/P_e représentant le rapport entre la pression statique sur l'axe du jet et la pression statique à la sortie de la buse (en $x=0, r=0$) en fonction de la position sur l'axe (pour $0 \leq x \leq x_p$). La pression dans la chambre a également été adimensionnée par la pression P_e (ce qui donne le rapport NPR^{-1}). Sur la Figure 4.35, on trace le nombre de Mach sur l'axe du jet.

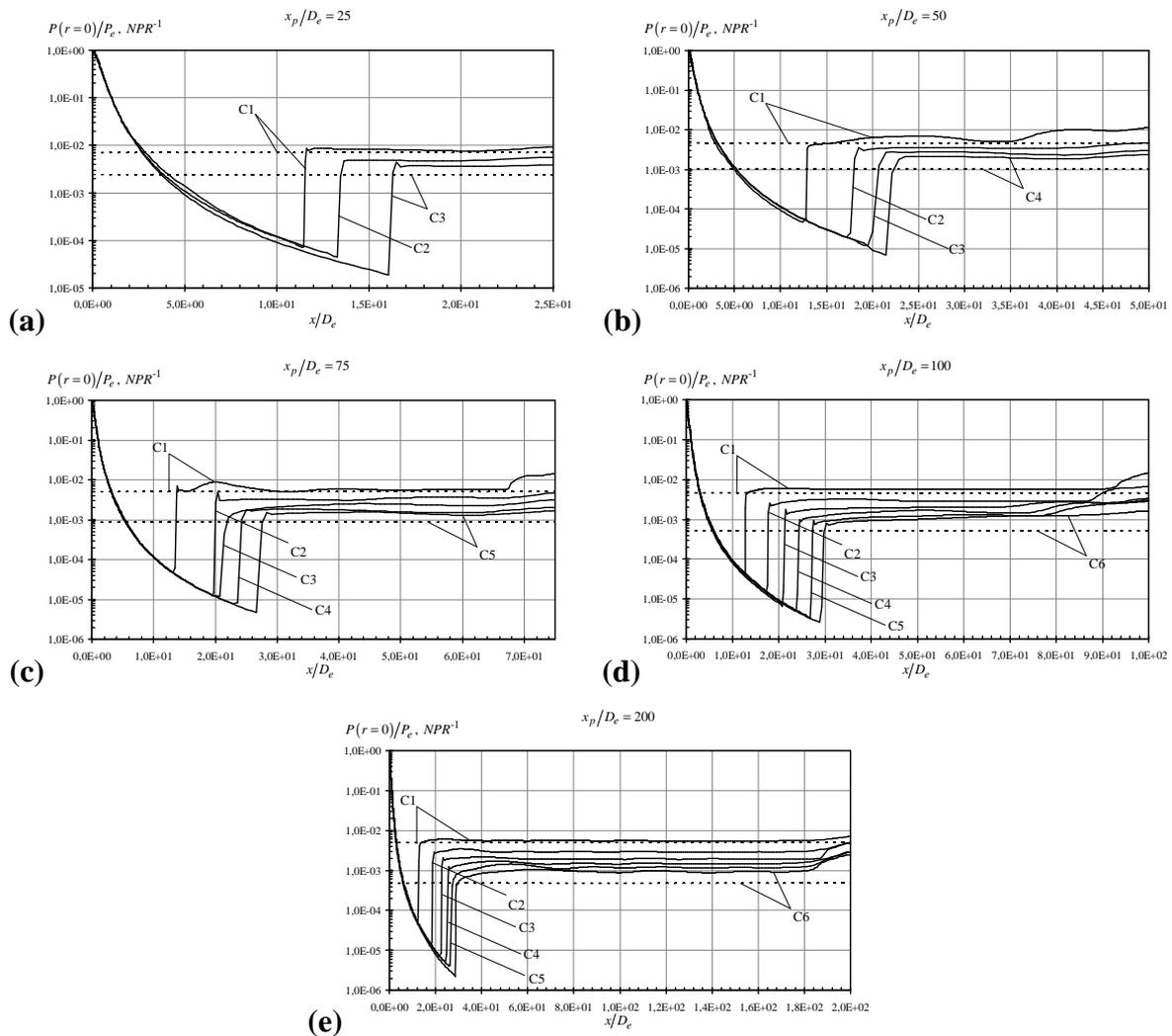


Figure 4.34 : Profils de la pression sur l'axe du jet adimensionnée par la pression de sortie P/P_e (—) et du rapport NPR^{-1} (- - -) obtenus pour les différents cas C1 à C6 en fonction de la distance d'impact x_p/D_e ; (a): $x_p/D_e=50$, (b): $x_p/D_e=75$, (c): $x_p/D_e=100$, (d): $x_p/D_e=200$.

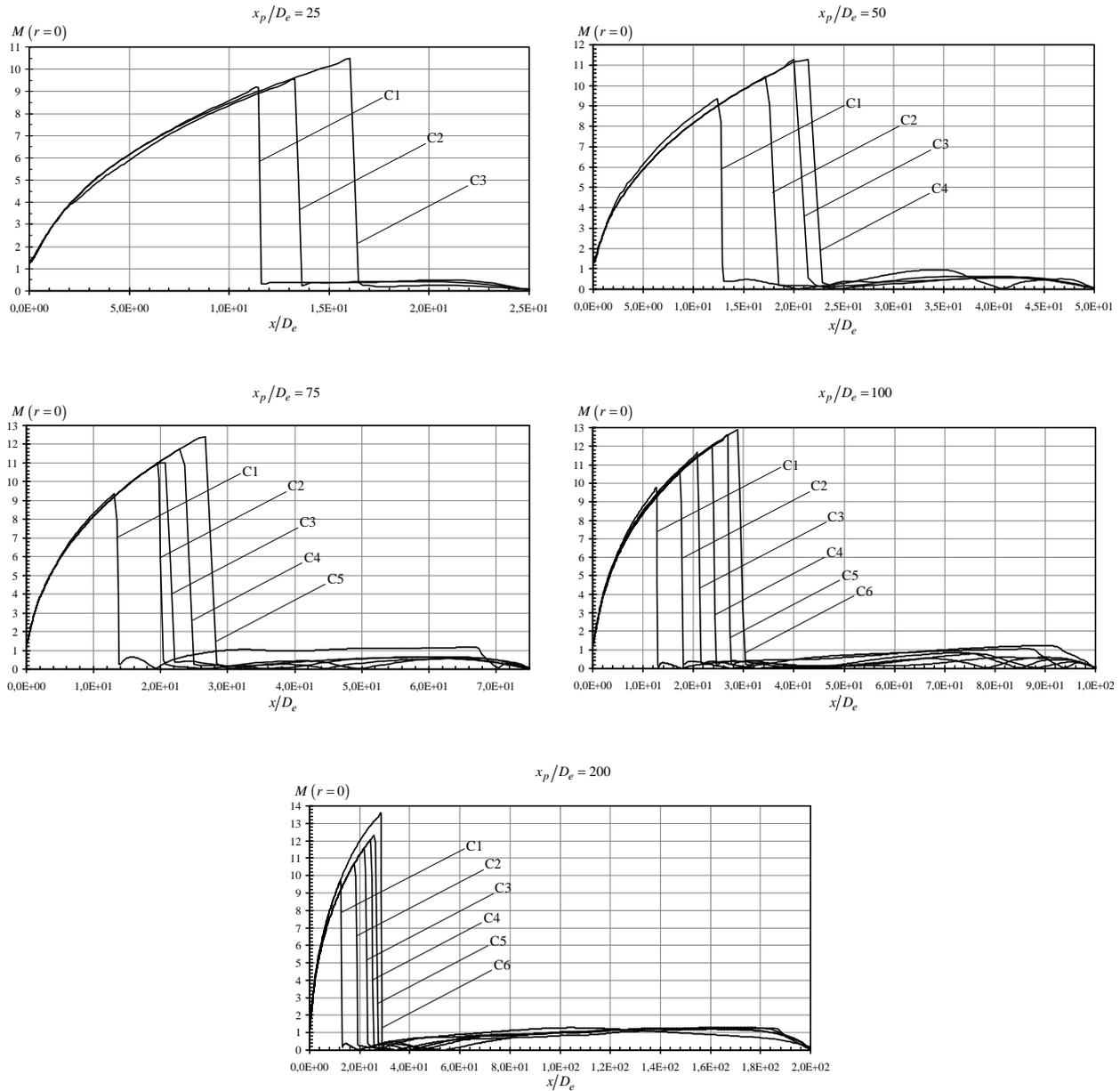


Figure 4.35 : Profils du nombre de Mach sur l’axe du jet obtenus pour les différents cas en fonction de la distance d’impact.

L’étude globale du jet à l’aide des figures 4.35 et 4.36, permet de définir les caractéristiques du jet sous-détendu. Trois zones sont distinguées. Dès la sortie de la buse, une première zone de détente et d’accélération supersonique apparaît. Ensuite, intervient la compression au travers d’une onde de choc qui rend l’écoulement subsonique. Enfin, la pression et le nombre de Mach se stabilise globalement.

Examinons plus précisément les caractéristiques du jet dans ces différentes zones.

4.3.6 Zone de détente jusqu'au disque de Mach

D'abord, on examine les propriétés au niveau de la détente qui se situe dès la sortie de la buse jusqu'au disque de Mach ($0 \leq x \leq x_{DM}^-$ où x_{DM}^- est la limite amont de la position du disque de Mach).

A distance d'impact donnée, on constate que les profils sont similaires. La détente semble ainsi être sensiblement identique jusqu'au disque de Mach quelle que soit le cas C1 à C6. Cependant, plus le rapport NPR est élevé, plus la pression décroît, et plus l'écoulement est accéléré. Le disque de Mach s'éloigne de la section de sortie lorsque le rapport augmente.

Lorsque la distance d'impact varie pour un cas donné, les profils sont modifiés. En effet, la pression minimale jusqu'à laquelle se détend le fluide en amont du disque de Mach varie en fonction de la distance d'impact. Le constat est le même pour le nombre de Mach. Par exemple, pour le cas C1 et avec une distance d'impact de $x_p/D_e = 50$, le jet se détend jusqu'à la pression minimale de $P(x_{DM}^-)/P_e = 5,38.10^{-5}$, et le nombre de Mach augmente à $M(x_{DM}^-) = 9,3$. Pour le même cas C1 mais avec $x_p/D_e = 200$, les valeurs respectives obtenues sont : $P(x_{DM}^-)/P_e = 4,54.10^{-5}$ et $M(x_{DM}^-) = 9,69$. Cette influence doit être limitée par une valeur seuil de la distance d'impact puisque pour la distance $x_p/D_e = 100$, et le même cas C1, les valeurs correspondantes de la pression et du nombre de Mach sont respectivement $P(x_{DM}^-)/P_e = 4,63.10^{-5}$ et $M(x_{DM}^-) = 9,62$, qui sont très proches des valeurs obtenues pour $x_p/D_e = 200$.

La distance d'impact et les conditions d'injection influent de manière liée sur la détente du jet. La figure 4.36 montre les évolutions de la position et du diamètre du disque de Mach obtenues dans notre étude (marques) en fonction de la distance de tir pour les différents cas C1 à C6. Obtenir une comparaison quantitative avec la littérature est relativement difficile, puisque la base de données (aussi bien numérique qu'expérimentale) dans la littérature s'étant rarement à un rapport NPR aussi important, et sur une telle plage de distances d'impact. Toutefois, Palmer et Hanson [3], donnent la position et le diamètre du disque de Mach en fonction du rapport NPR pour un jet sonique libre (sans impact) pour NPR allant jusqu'à $NPR < 600$. La position et le diamètre du disque de Mach obtenus par Palmer et Hanson [3] sont également reportés sur la Figure 4.36. La distance de projection n'a pas été prise en compte dans [3], c'est pourquoi la position et le diamètre du disque de Mach ont été considéré constants quelle que soit la distance de tir. On compare d'abord l'évolution de

x_{DM}/D_e et de D_{DM}/D_e par rapport à NPR obtenus dans les résultats présent avec ceux de la littérature (existante pour les jets libres). Pour ce faire, il est logique de penser qu'en fait la configuration de jet libre s'apparente à un impact à une distance infinie, nous représentons donc les résultats pour la plus grande distance d'impact considérée, *i.e.* $x_p/D_e = 200$. Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux de la littérature pour $NPR < 600$ et au-delà, la tendance générale, à savoir que x_{DM}/D_e et D_{DM}/D_e augmentent avec NPR, est également bien respectée. En effet, les résultats suivent bien les régressions obtenues dans le chapitre 1 (équations 1.11 et 1.12) à partir de Palmer et Hanson. Ensuite, l'influence de la distance d'impact sur x_{DM}/D_e et D_{DM}/D_e est mise en évidence sur la même figure pour chaque cas C1 à C6 (qui correspondent à des NPR précis ; voir tableau 4.5).

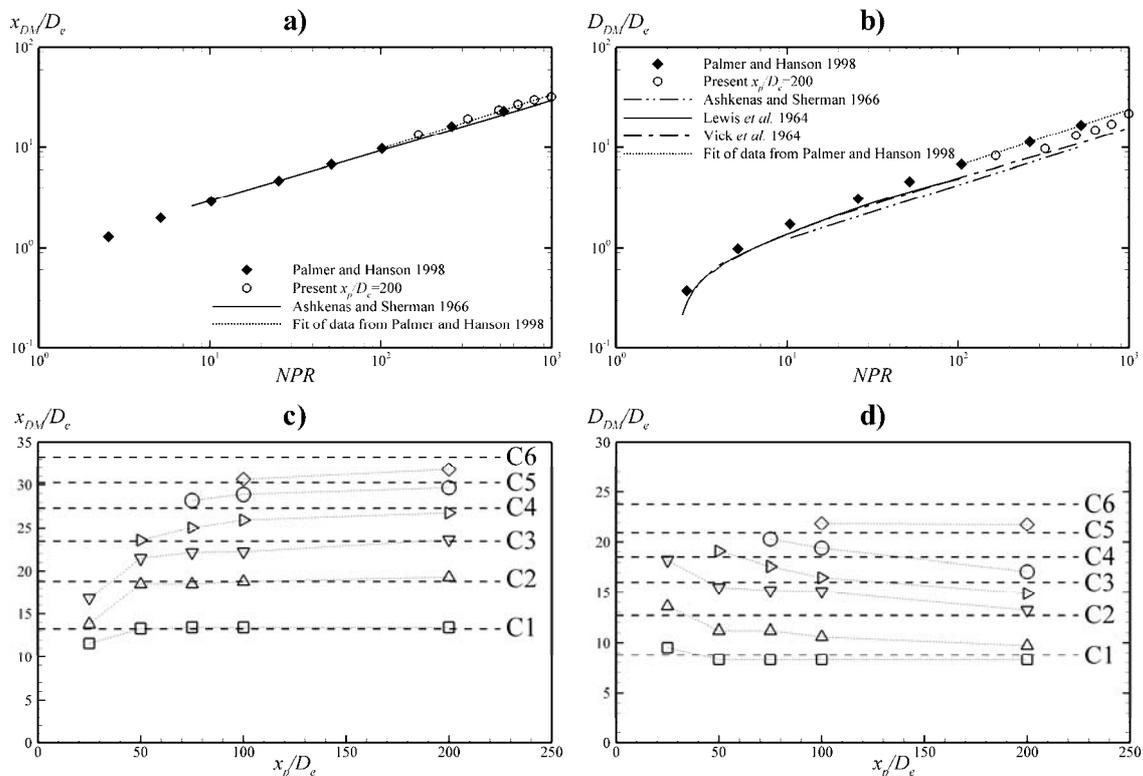


Figure 4.36 : Position x_{DM}/D_e et diamètre D_{DM}/D_e du disque de Mach obtenus pour les différentes conditions d'injection en fonction de la distance d'impact x_p/D_e .

On constate qu'il y a une influence non négligeable de la distance d'impact sur la position et le diamètre du disque de Mach. De plus, cette influence est liée au rapport de pression. Globalement, on constate que la position du disque de Mach diminue et que son diamètre augmente lorsque la plaque se rapproche de la section de sortie de la buse. De plus il y a une distance d'impact seuil au-delà de laquelle l'impact n'a plus d'influence et cette distance seuil est d'autant plus grande que le rapport de pression est grand.

De plus, les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux obtenus par Palmer et Hanson [3], avec relativement peu d'écart sur la position du disque de Mach. Un écart plus important est noté pour le diamètre du disque de Mach.

L'examen de la figure 4.36 renforce le constat précédent fait à partir des figures 4.34 et 4.35. En effet, il est clair que la pression statique $P(x_{DM}^-)$ (resp. le nombre de Mach $M(x_{DM}^-)$) à la fin de la détente, est une fonction décroissante (resp. croissante) de NPR à x_p donnée et décroissante (resp. croissante) en fonction de x_p à NPR donné.

4.3.7 Re-compression au travers du disque de Mach

On examine les propriétés à l'aval du disque de Mach ($x = x_{DM}^+$ où x_{DM}^+ est la limite aval de la position du disque de Mach). Le gaz se re-comprime au travers du disque de Mach et l'écoulement devient subsonique. On constate que la valeur de la pression atteinte lors de cette re-compression est sensiblement identique à la valeur NPR^{-1} pour les « faibles » conditions d'injection (C1), quelle que soit la distance d'impact. Par contre, lorsque NPR devient grand en fonction de la distance de projection (i.e. C4 pour $x_p/D_e = 50$, C5 pour $x_p/D_e = 75$ et C6 pour $x_p/D_e = \{100; 200\}$), la pression obtenue à la position x_{DM}^+ est supérieure à NPR^{-1} . Ceci met en évidence l'influence de la paroi.

4.3.8 Zone proche de l'impact

On étudie les phénomènes liés à l'impact. Dans certains cas, la pression augmente près de l'impact, dans d'autres, elle reste stable. Afin d'expliquer ce phénomène, on trace sur la figure 4.37 les contours du nombre de Mach pour deux cas C1 et C5 (le NPR augmente du haut vers le bas sur la figure) et deux distances d'impact (x_p/D_e augment de la gauche vers la droite sur la figure).

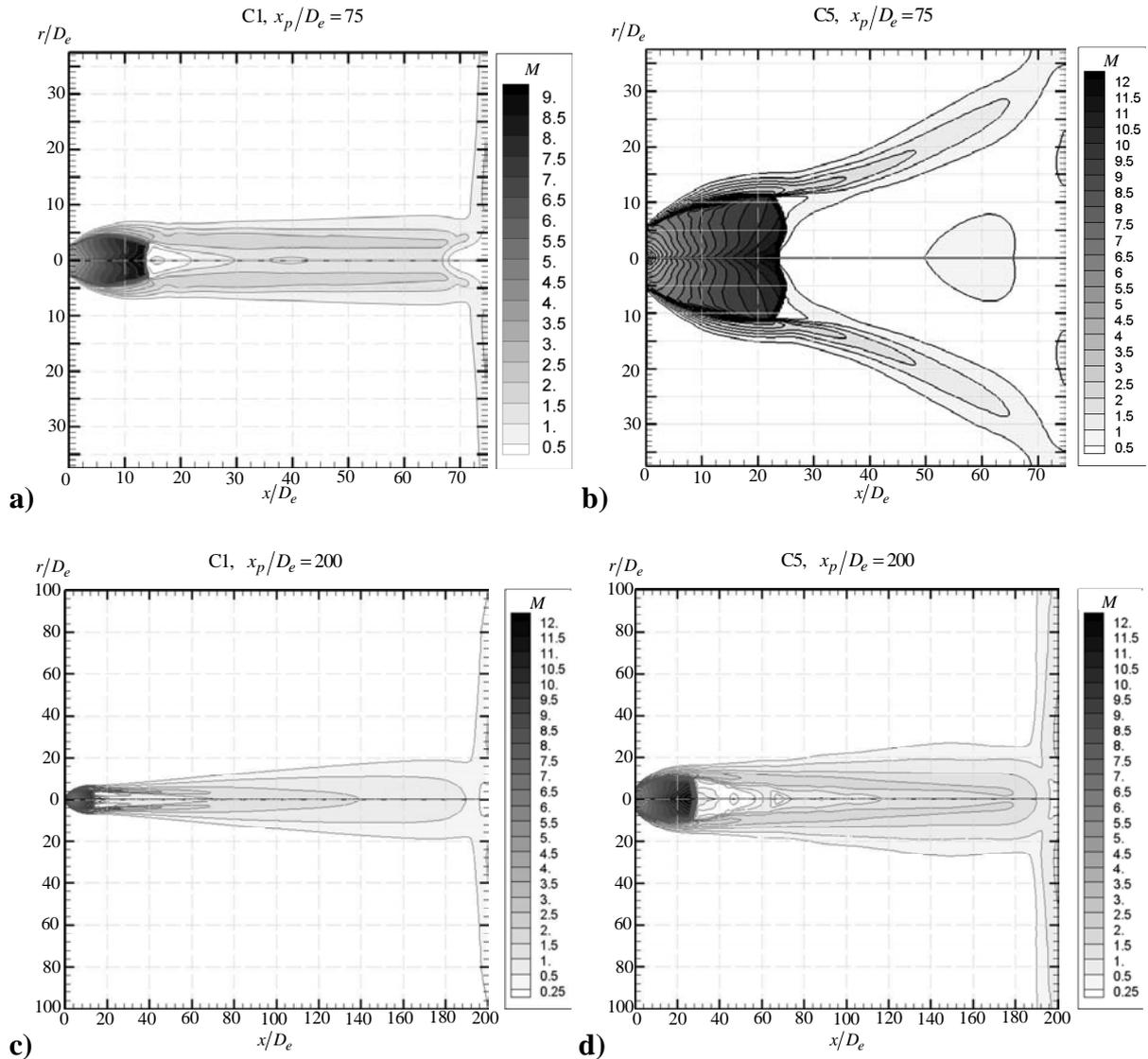


Figure 4.37 : Contours du Nombre de Mach pour $x_p/D_e = 75$: a) cas C1 et b) cas C5 ; et pour $x_p/D_e = 200$: c) cas C1 and d) cas C5

On constate que la couche de mélange du jet peu atteindre ou non l'axe du jet avant l'impact en fonction du NPR et de x_p/D_e . Pour $x_p/D_e = 75$, et pour le cas C1, la couche de mélange du jet atteint clairement l'axe à $x/D_e \approx 28$. Dans la zone $28 < x/D_e < 67$, la couche de mélange a atteint l'axe du jet, le nombre de Mach et la pression sont pratiquement constants et valent respectivement $M \approx 1$ (Figure 4.35), et $P \approx 5.50 \cdot 10^{-3} P_e$ (Figure 4.34). La recompression du jet due à l'impact se produit alors à $x/D_e \approx 67$, où le nombre de Mach chute et la pression augmente vers $P \approx 1.31 \cdot 10^{-2} P_e$.

Pour $x_p/D_e = 75$, et pour le cas C5, la couche de mélange du jet est déviée et n'atteint pas l'axe. Au-delà de la position x_{DM} , le nombre de Mach et la pression sont pratiquement constants et valent respectivement $M = 0.31$, et $P \approx 1.43 \cdot 10^{-3} P_e$.

Pour $x_p/D_e = 200$, et pour le cas C1, la couche de mélange du jet atteint clairement l'axe à $x/D_e \approx 72$. Dans la zone $72 < x/D_e < 196$, la couche de mélange a atteint l'axe du jet, le nombre de Mach et la pression sont pratiquement constants et valent respectivement $M \approx 1$, et $P \approx 5.60 \cdot 10^{-3} P_e$. La re-compression du jet due à l'impact se produit alors à $x/D_e \approx 196$, où le nombre de Mach chute vers $M = 0$, et la pression augmente vers $P \approx 7.32 \cdot 10^{-3} P_e$.

Pour $x_p/D_e = 200$, et pour le cas C5, la couche de mélange du jet atteint l'axe à $x/D_e \approx 112$. Dans la zone $112 < x/D_e < 195$, le nombre de Mach et la pression sont pratiquement constants et valent respectivement $M \approx 1$, et $P \approx 1.16 \cdot 10^{-3} P_e$.

De ce fait, en fonction des conditions d'injection et de la distance d'impact, la zone de re-compression due à l'impact peut s'étendre jusqu'au disque de Mach.

4.3.9 Caractéristiques à l'impact du jet supersonique sous-détendu

On s'intéresse maintenant à l'impact du fluide sur la paroi adiabatique située en $x = x_p$ et plus particulièrement aux profils de température et de pression sur cette paroi. La température T du fluide sur la paroi adiabatique est adimensionnée par le rapport $(T - T_a) / (T_{inj} - T_a)$. La pression statique P sur cette paroi est adimensionnée par le rapport P/P_a . Les figures 4.38 à 4.42 montrent la variation de ces rapports dans la direction radiale en fonction des différentes conditions et les différentes distances d'impact.

$$x_p/D_e = 25$$

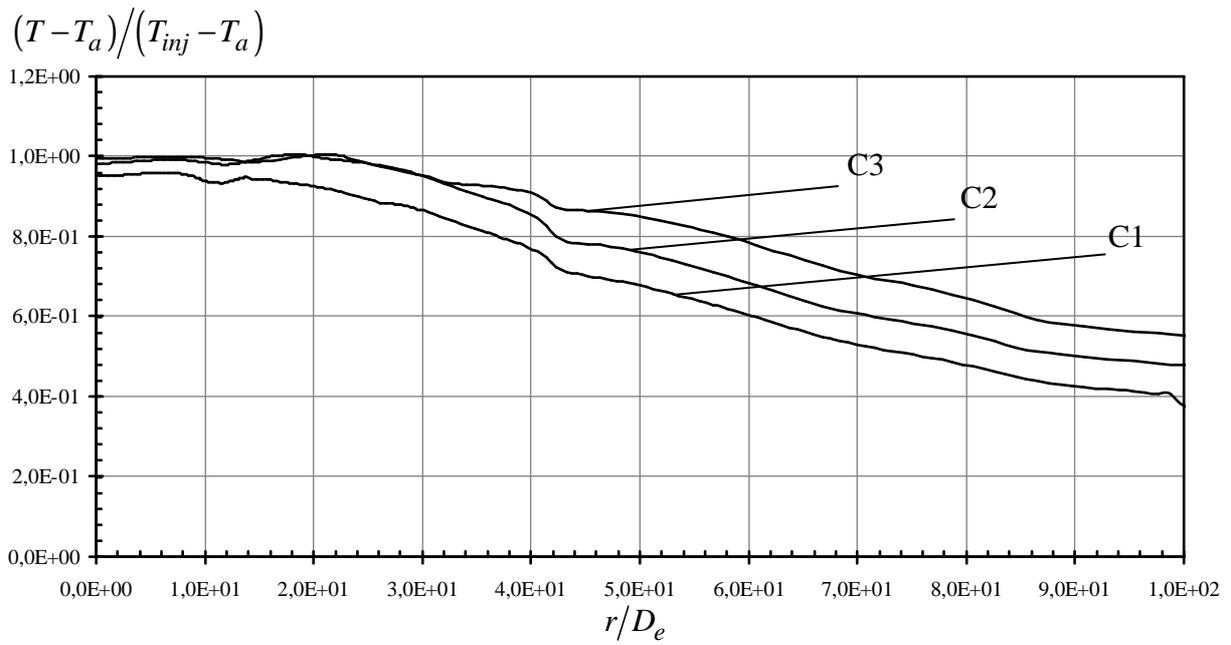
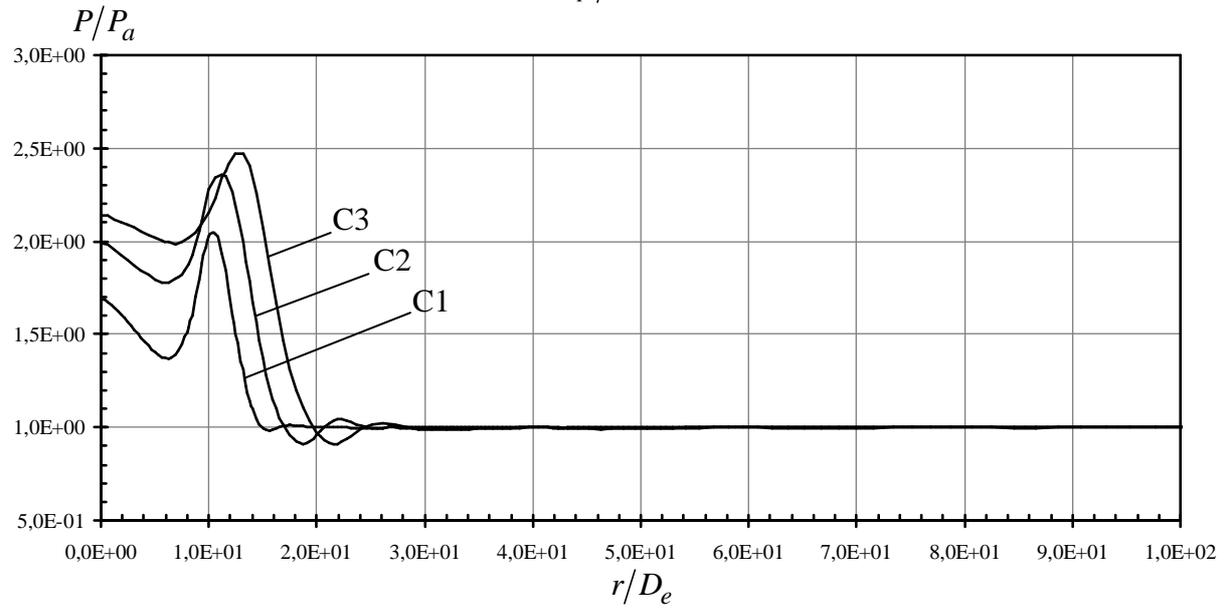


Figure 4.38 : Profils de pression et de température adimensionnés en fonction de la position radiale sur la surface d'impact placée en $x_p/D_e=25$ pour les différentes conditions d'injection.

$$x_p/D_e = 50$$

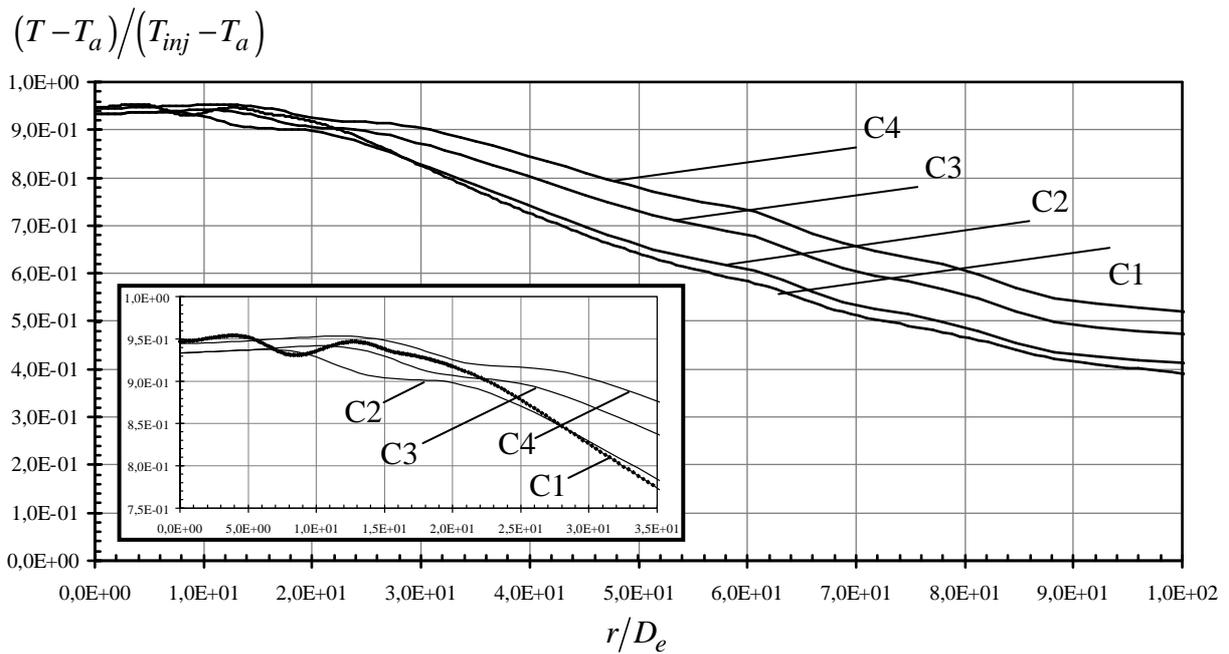
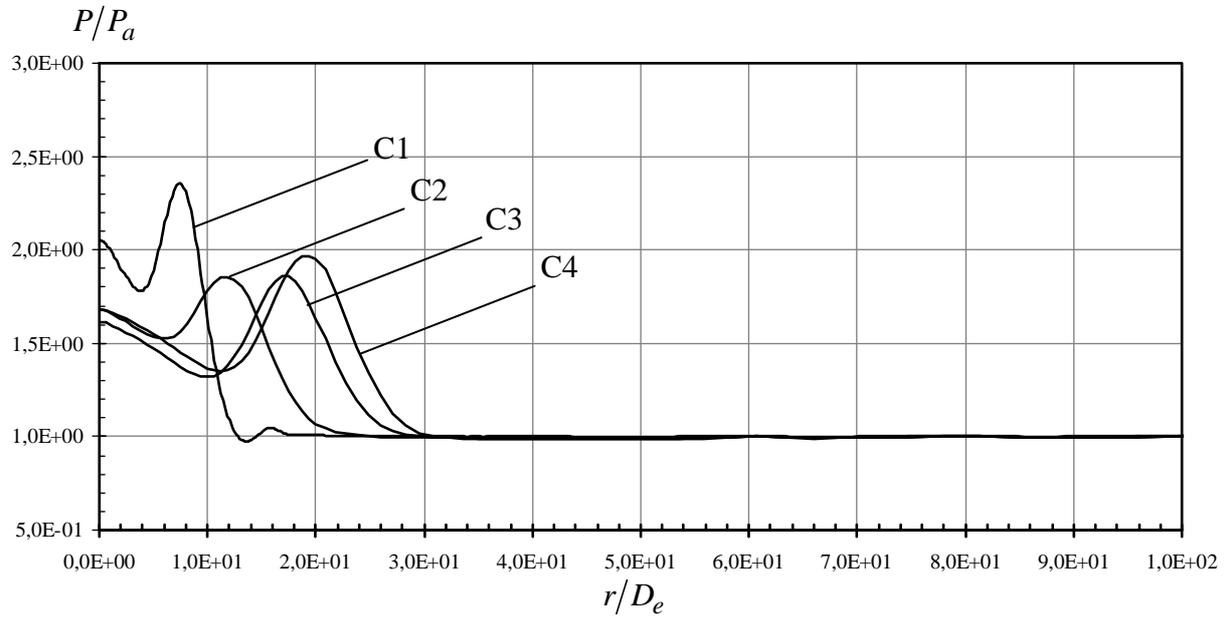


Figure 4.39 : Profils de pression et de température adimensionnés en fonction de la position radiale sur la surface d'impact placée en $x_p/D_e=50$ pour les différentes conditions d'injection.

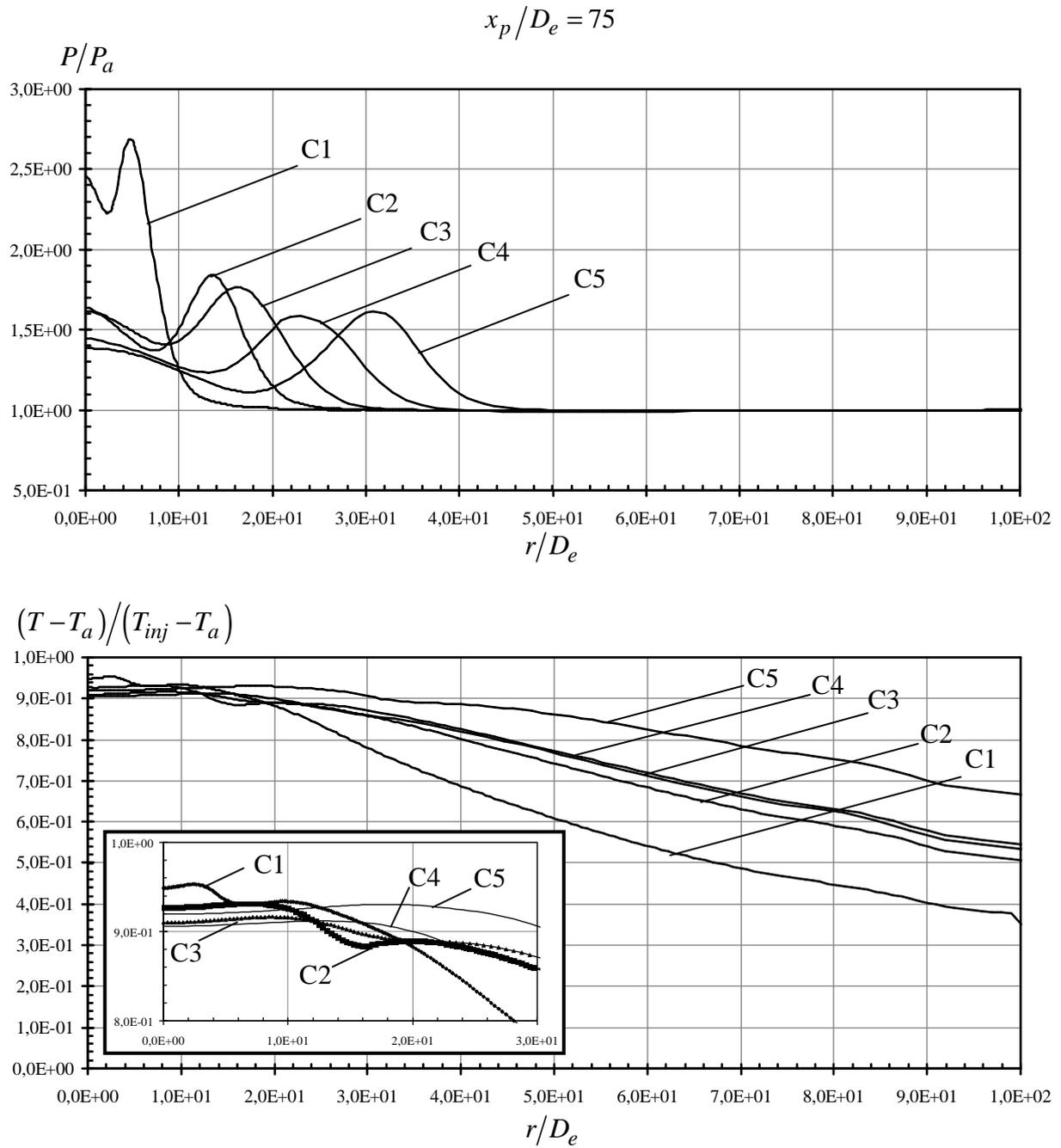


Figure 4.40 : Profils de pression et de température adimensionnés en fonction de la position radiale sur la surface d'impact placée en $x_p/D_e=75$ pour les différentes conditions d'injection.

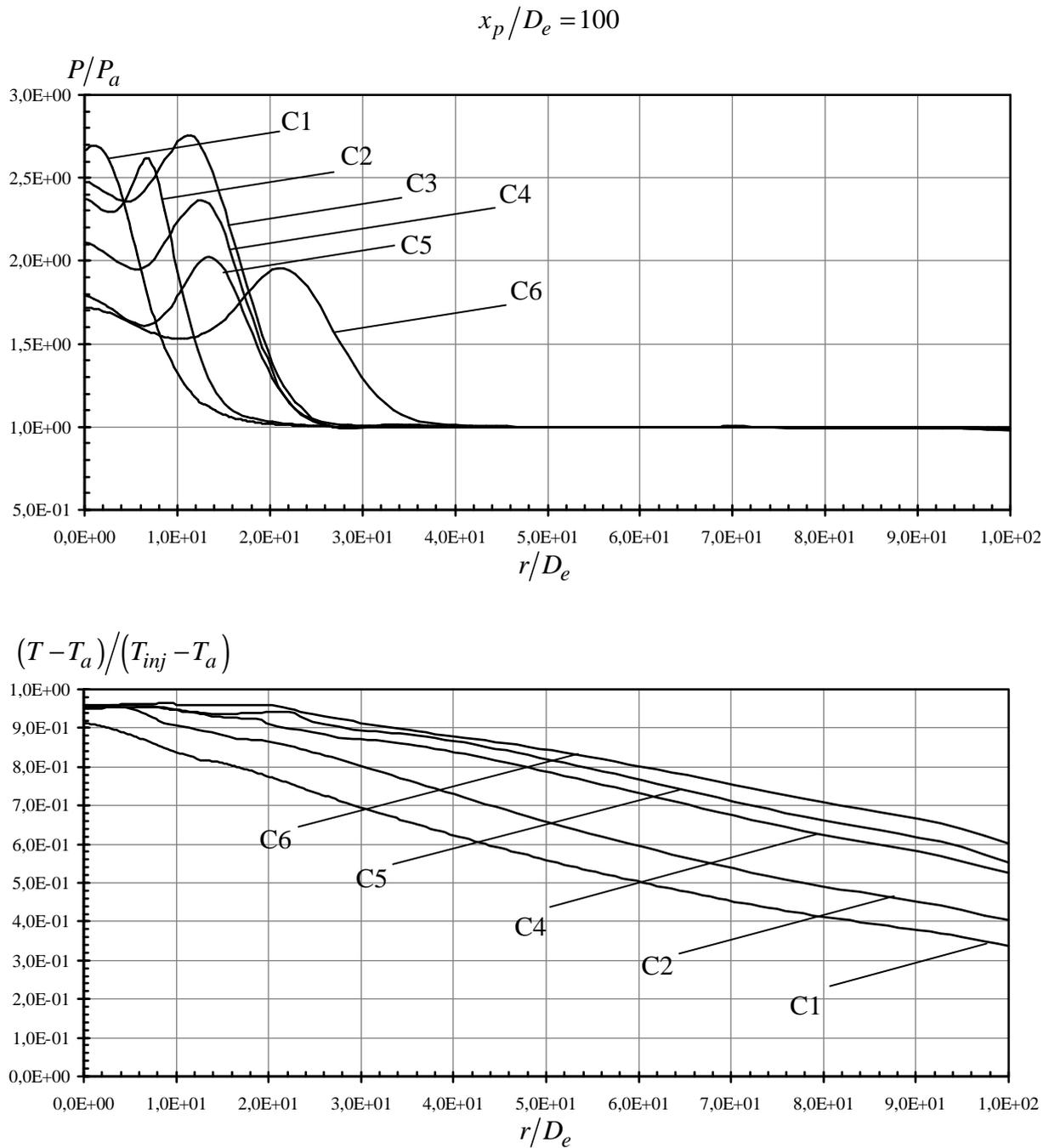


Figure 4.41 : Profils de pression et de température adimensionnés en fonction de la position radiale sur la surface d'impact placée en $x_p/D_e=100$ pour les différentes conditions d'injection.

$$x_p/D_e = 200$$

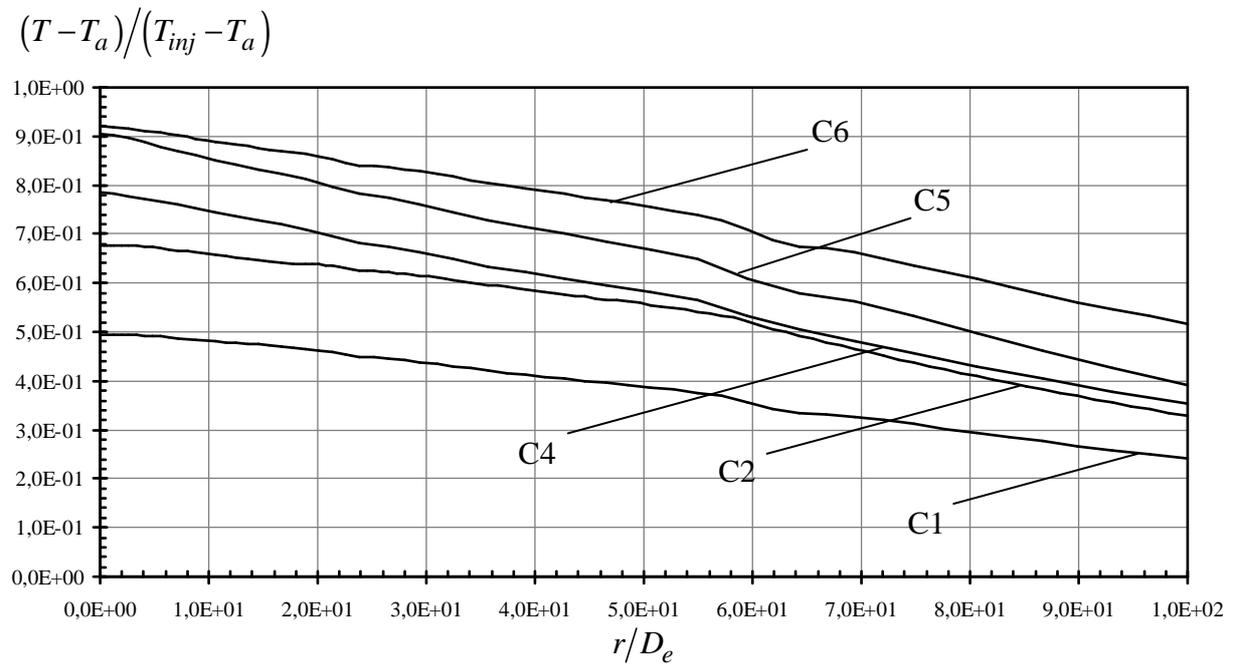
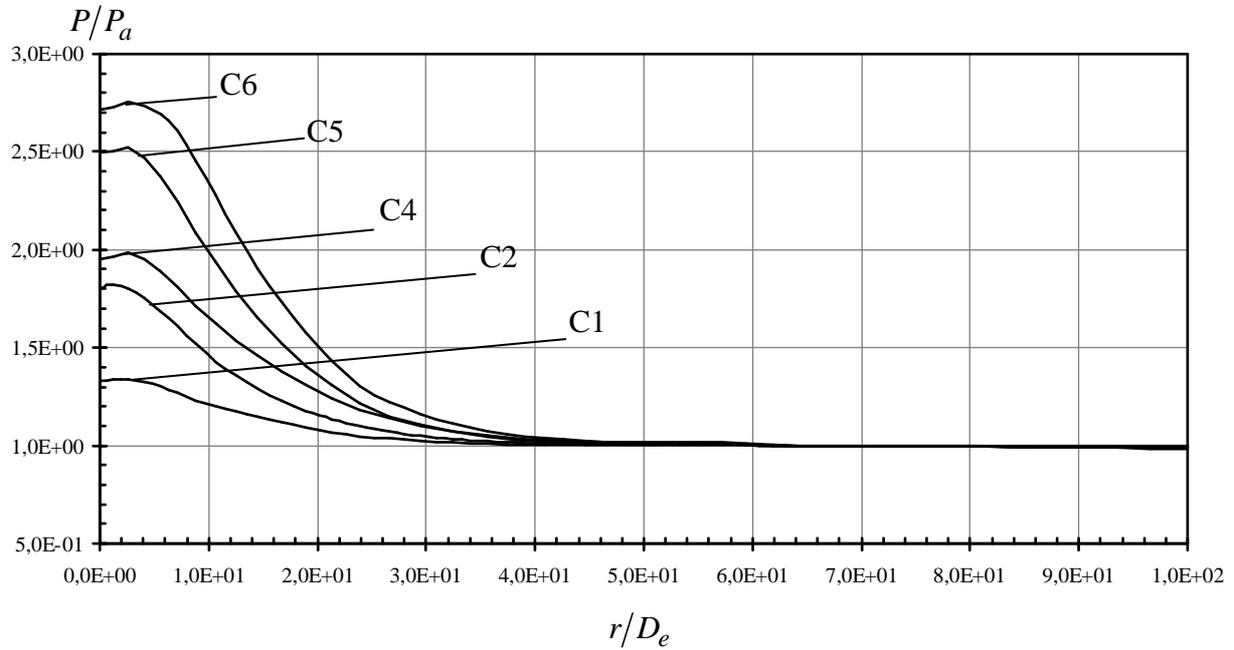


Figure 4.42 : Profils de pression et de température adimensionnés en fonction de la position radiale sur la surface d'impact placée en $x_p/D_e=200$ pour les différentes conditions d'injection.

On constate qu'il y a une zone à l'impact où la pression est plus importante que la pression ambiante atteignant même une valeur pic et que cette zone est d'autant plus grande que les conditions d'injection sont importantes quelle que soit la distance d'impact. Par exemple, pour la distance d'impact de $x_p/D_e = 25$, le pic se situe aux coordonnées radiales $r = 10,78D_e$; $11,25D_e$; $13,13D_e$ pour les conditions d'injection C1; C2; C3 respectivement et pour la distance d'impact de $x_p/D_e = 100$, le pic se situe aux coordonnées radiales $r = 0,75D_e$; $6,42D_e$; $11,08D_e$; $12,61D_e$; $13,84D_e$; $20,92D_e$ pour les conditions d'injection C1; C2; C3; C4; C5 et C6 respectivement. La pression statique au pic, qui se situe alors à la coordonnée radiale $r_p/D_e > 0$, est toujours supérieure à la pression statique sur le point d'arrêt $r/D_e = 0$ ce qui est caractéristique de la présence d'une bulle de recirculation à l'impact. La valeur de la pression statique au pic varie avec les conditions d'injection pour une distance d'impact donnée. Cette variation ne semble pas suivre un comportement identique quelle que soit la distance d'impact. En effet, pour la distance d'impact $x_p/D_e = 25$, la pression au pic augmente de $P = 2,04P_a$; $2,34P_a$; $2,47P_a$ pour les conditions C1; C2; C3 respectivement alors que pour la distance $x_p/D_e = 50$, elle diminue de $P = 2,34P_a$; $1,86P_a$; $1,85P_a$ pour les conditions C1; C2; C3 et re-augmente à $P = 1,97P_a$ pour la condition C4. La valeur de la pression au pic n'excède pas $P = 2,75P_a$ qui est la valeur maximale obtenue pour la condition d'injection C6 et la distance d'impact $x_p/D_e = 200$.

L'analyse peut être poursuivie pour le rapport $(T - T_a)/(T_{inj} - T_a)$ dont les variations sur la paroi adiabatique ($x = x_p$) sont reproduites en fonction de la distance d'impact et des conditions d'injection sur les mêmes figures 4.38 à 4.42. On montre bien qu'il existe une zone près de l'axe ($r/D_e = 0$) dans laquelle ce rapport est maximal et que cette zone est d'autant plus grande que les conditions d'injection sont importantes à une distance d'impact donnée. Cette zone coïncide avec la bulle de recirculation dont l'existence a été mise en évidence précédemment à l'aide des profils de pression sur la surface d'impact. Cela signifie que le transfert de chaleur entre le jet et la surface impactée est maximal dans la bulle de recirculation. Au-delà de cette zone, le rapport (et le flux de chaleur échangé par le jet et la surface d'impact) diminue fortement en suivant une évolution radiale quasi-linéaire dont la pente négative décroît lorsque la pression d'injection augmente.

4.3.10 Conclusions

Des résultats ont été obtenus en fonction des différents paramètres de travail (distance de tir, conditions génératrices du jet en termes de pression et de température, géométrie de la buse d'injection,...). Une fois comparés entre eux, ces résultats ont permis d'estimer l'influence des paramètres de travail sur le jet et sa structure. Les calculs ont été effectués à l'aide du logiciel commercial Fluent.

La configuration de jet impactant a été abordée. Différents NPR ont été envisagés, et pour chacun plusieurs distances de projections ont été considérées. L'étude a permis de caractériser l'influence de chacun de ces deux paramètres sur la détente du fluide à la sortie de la buse. L'écoulement en sortie de buse correspond également à un jet supersonique sous-détendu. Dans la zone de détente (de la buse jusqu'au disque de Mach), les profils de pression statique et du nombre de Mach sur l'axe se superposent quasiment pour une distance d'impact donnée en fonction des conditions d'injection. La position et le diamètre du disque de Mach ont été comparés à des corrélations issues de la littérature obtenus pour des jets libres à même condition d'injection. Une bonne corrélation a été trouvée pour la position du disque de Mach. Des différences plus significatives sont observées pour le diamètre du disque de Mach. Toutefois, le rapport NPR n'est pas le seul à influencer sur la position et le diamètre du disque de Mach, puisqu'il a été montré qu'ils varient en fonction de la distance d'impact lorsque l'impact est suffisamment proche de la buse (pour une condition d'injection donnée). Au travers du disque de Mach, l'écoulement se re-comprime et redevient subsonique. Il a été montré qu'en fonction des paramètres de l'étude, la couche de mélange supersonique du jet pouvait être déviée de l'axe du jet, cela a une influence notable sur les profils de pression et de température sur la paroi impactée. En effet, l'impact du jet sur la paroi adiabatique a également été caractérisé. Les profils radiaux de pression statique sur la paroi impactée soulignent la présence d'une bulle de recirculation pour certaines combinaisons des paramètres NPR et x_p/D_e .

Dans la section suivante, on présente les résultats obtenus en prenant en compte les effets de fluide réel. De nombreux problèmes numériques de convergence et de stabilité ont été rencontrés pour ces simulations dès lors que NPR excède 50 environ.

4.4 Prise en compte des effets de fluide réel : vers la compréhension des phénomènes mis en jeu dans le procédé de traitement de surface

4.4.1 Résultats de simulation numérique

L'écoulement est supposé compressible stationnaire en moyenne, et turbulent. Les trois équations de conservation sont résolues simultanément à l'aide du schéma TVD Roe-FDS au premier ordre (décentré UPWIND). Dans cette partie, la loi d'état du fluide est la loi dite exacte prenant en compte les effets de fluide réel. Les propriétés de transport (conductivité thermique et viscosité) sont calculées à partir des données du NIST (voir *Chapitre 1*). Aucun changement de phase n'est pris en compte.

La géométrie du domaine d'étude est le même que dans la partie précédente (figure 4.25). Le maillage du domaine s'effectue par blocs à l'aide d'éléments quadrilatéraux resserrés au niveau des zones où l'écoulement connaît de fortes perturbations.

Les conditions aux limites sont imposées sur les frontières du domaine de calculs. A l'entrée, sont prescrites des conditions d'injection en termes de pression, de température. A la sortie, sont prescrites les conditions atmosphériques de pression et de température. Sur la surface d'impact, la vitesse axiale (axe x) est imposée nulle. De même sur la frontière de l'injecteur, la composante de la vitesse orthogonale à la paroi est imposée nulle. De plus, la paroi de l'injecteur est supposée adiabatique. Enfin, une condition de symétrie est imposée sur l'axe du jet.

L'azote est injecté dans les conditions $P_{inj}=500$ MPa, $T_{inj}=130$ K, dans une chambre à pression $P_a=1,01325 \cdot 10^5$ Pa, et à température $T_a=300$ K. Les paramètres géométriques de la buse sont fixés à une longueur de $l_e=1$ mm, et un diamètre $D_e=0,2$ mm. La distance de projection $x_p/D_e=50$.

On montre la structure du jet obtenue en termes de nombre de Mach et de profil de pression sur l'axe du jet, d'une part dans le cas du gaz parfait (Figure 4.43) et d'autre part dans le cas gaz réel (Figure 4.44). La Figure 4.45 montre la variation de température sur l'axe du jet obtenue dans le cas du gaz parfait (4.45a) et dans le cas du fluide réel (4.45b).

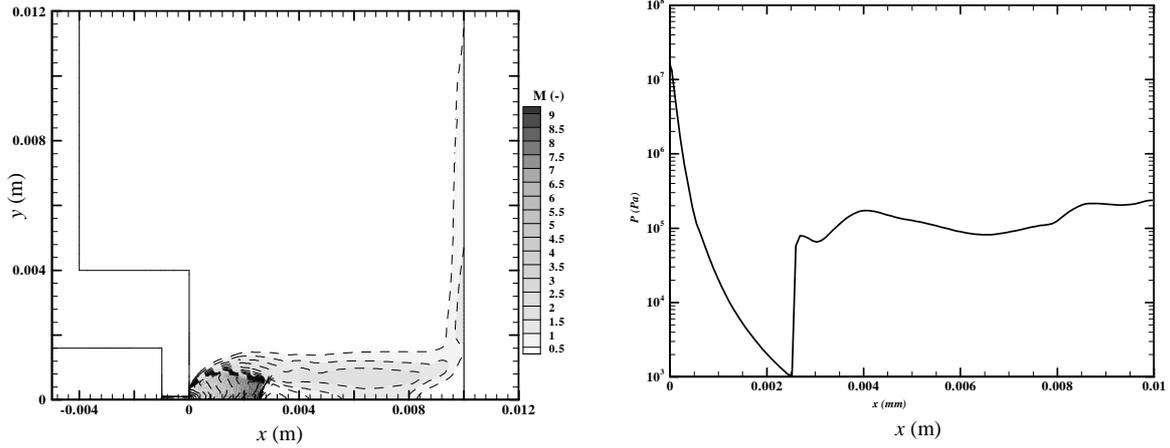


Figure 4.43 : Cas du gaz parfait : champ du nombre de Mach pour un jet d'azote $P_{inj}=500.10^5$ Pa, $T_{inj}=130$ K et profil de pression statique sur l'axe du jet pour une distance de projection de $x_p/D_e = 50$

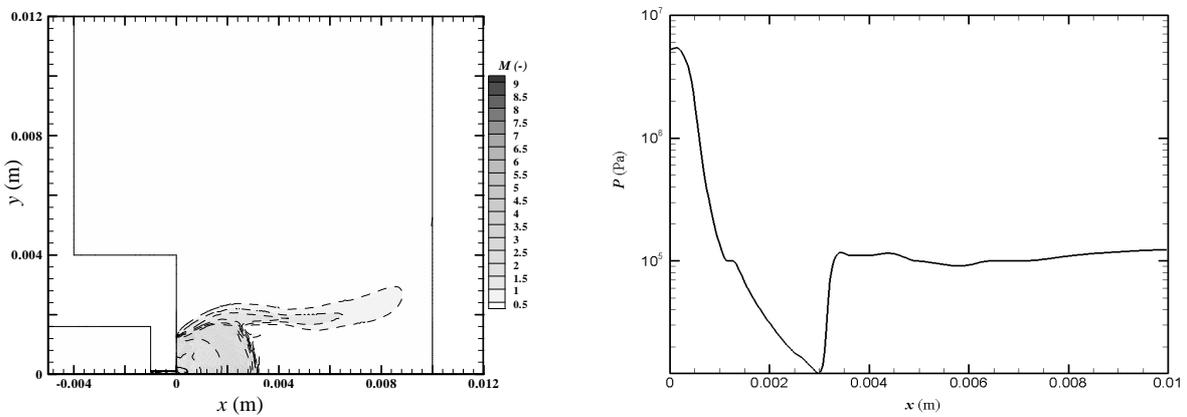


Figure 4.44 : Cas du fluide réel : champ du nombre de Mach pour un jet d'azote $P_{inj}=500.10^5$ Pa, $T_{inj}=130$ K et profil de pression statique sur l'axe du jet pour une distance de projection de $x_p/D_e = 50$

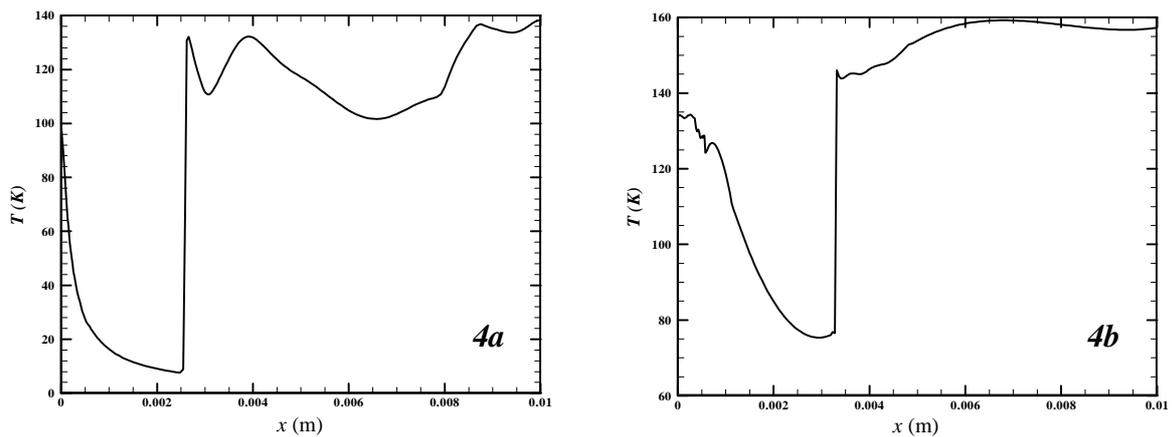


Figure 4.45 : Température sur l'axe du jet pour $P_{inj}=500.10^5$ Pa, $T_{inj}=130$ K, $x_p/D_e = 50$
 4a : cas du gaz parfait et 4b : cas du fluide réel

Dans le cas de l'injection de gaz parfait, le code de calcul converge sans difficulté vers une solution dont la structure obtenue est celle d'un jet supersonique sous détendu, dont le rapport de pression vaut $NPR=166$ et le nombre de Mach sur la section de sortie vaut $M_e=1,26$ (cas C1 dans le paragraphe 4.3). Pour le fluide réel, le rapport de pression $NPR=56,11$ est moins important que précédemment alors que le nombre de Mach à la sortie de la buse est plus élevé $M_e=1,6$. L'écoulement est fortement accéléré en sortie de buse jusqu'à une vitesse supersonique $M=6,8$ (contre 9,2 pour le gaz parfait) tandis que la pression et la température chutent fortement pour atteindre des valeurs inférieures aux conditions ambiantes, respectivement : $8,65 \cdot 10^{-4}$ Pa (contre $5,87 \cdot 10^{-5}$ Pa pour le gaz parfait) 77 K (contre 11,3 K pour le gaz parfait). Le disque de Mach de diamètre D_{DM} valant $D_{DM}/D_e=8,67$ (contre $D_{DM}/D_e=5,69$ pour le gaz parfait), apparaît alors à une abscisse $x_{DM}/D_e=15,85$ (contre $x_{DM}/D_e=12,85$ pour le gaz parfait), au travers duquel l'écoulement redevient subsonique. Cette structure est en bon accord avec celle obtenue pour le gaz parfait. En comparant avec les corrélations obtenues par la méthode des caractéristiques (Palmer et Hanson [3]) pour un jet sonique libre (sans impact) d'air, qui donnent $x_{DM}/D_e=12,27$ et $D_{DM}/D_e=8,48$, on obtient un écart de 5% sur l'abscisse du disque de Mach et de 49% sur son diamètre. Ainsi, la vitesse et la chute de température en sortie de buse sont plus fortes pour un gaz parfait que dans le cas du fluide réel. L'utilisation de la loi d'état des gaz parfait surestime cette chute de température. Les résultats qui ont été obtenus précédemment pour le tube à choc montraient déjà que la détente du fluide réel est plus rapide que celle du gaz parfait et que la vitesse obtenue à l'issue de la détente est moins importante. On constate également que la couche de mélange du jet de fluide réel est nettement déviée par l'impact alors qu'elle ne l'est pas pour le gaz parfait. De ce fait, la température sur l'axe du jet chute lorsque la couche de mélange atteint l'axe pour le gaz parfait alors qu'elle est quasiment constante pour le fluide réel dans la zone subsonique.

Toutefois, il faut noter que les simulations effectuées avec la loi d'état de fluide réel sont très couteuse en temps de calcul. De plus, la plupart des simulations prenant en compte les effets de fluide réel dans le modèle monophasique ne sont pas arrivées à convergence pour des rapport de pression supérieurs à 50. Pour ces cas, l'échec des simulations est suspecté de provenir d'un passage de la détente dans le domaine multiphasique du fluide. A ce jour, ce phénomène n'est pas traité. Des efforts de recherche encore important doivent être menés en ce sens afin de pouvoir modéliser convenablement le jet sous-détendu de fluide réel.

4.4.2 Conclusion et perspectives d'étude dans le cas réel : analyse expérimentale exploratoire du procédé de traitement de surface

Compte tenu des résultats obtenus dans l'étude numérique présentée précédemment, on commente dans cette section quelques résultats d'expérimentation issus du travail de thèse de H. Laribou (LPMM) [4] partenaire du projet JAZOLTHOP, qui ont été menés sur le prototype d'installation nitrogénique délivrant le jet d'azote supercritique. Ce prototype de décapage vise à injecter l'azote supercritique au travers d'une buse afin qu'il impacte perpendiculairement un matériau (cible) qui va subir sous l'effet de la température et de la pression des sollicitations thermomécaniques conduisant à un endommagement complexe et multiple (voir figure 4.46).

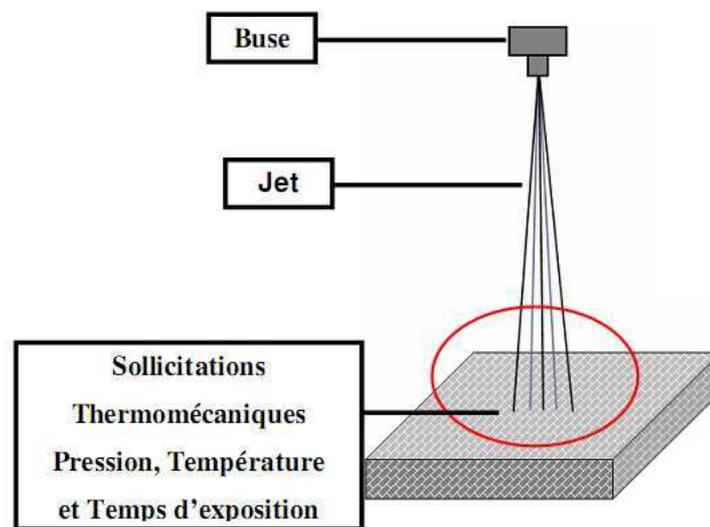


Figure 4.46 : Schématisation du prototype de traitement de surface par jet d'azote supercritique.

La compréhension des processus d'interaction jet-revetement à traiter est très complexe tant ces mécanismes sont variés et encore méconnus. Des résultats de tests de la qualité des substrats ont été obtenus après traitement nitrogénique dans le cadre de campagnes d'essais de décapage d'échantillons modèles et représentatifs d'applications réelles. Cette étude de l'interaction du jet supersonique et du revêtement a ainsi eu pour objectif de déterminer les mécanismes d'enlèvement de matière : mécanisme d'érosion, d'endommagement du matériau à l'impact, de décollement ou de cisaillement du revêtement. Un mécanisme d'érosion pourrait être le micro-cisaillement du revêtement par l'impact de l'outil équivalent. Le revêtement est fragilisé par le jet d'azote supercritique. Sa contraction thermo-élastique entraîne une micro-fissuration qui pourrait être à l'origine d'un second mécanisme. En prenant appui sur le substrat résistant, l'outil équivalent agit au niveau de

l'interface et décolle le revêtement par cisaillement et extension de la fissure ou par écartement des lèvres de la fissure. Ces mécanismes d'enlèvement de matière peuvent intervenir à différents degrés et selon différentes modalités, selon la nature du jet au contact (gazeux, solide, liquide), et selon la nature du substrat et de la couche de matière à enlever.

Enfin, des essais de décapage sur des échantillons calibrés ont été menés sur des échantillons et dépôts référencés (plusieurs combinaisons dépôt/substrat ont été choisies). Ces essais ont consisté à effectuer des analyses physicochimique, métallurgique de la qualité du décapage. Les échantillons ont ensuite pu être observés au Microscope électronique à balayage (voir figure 4.47).

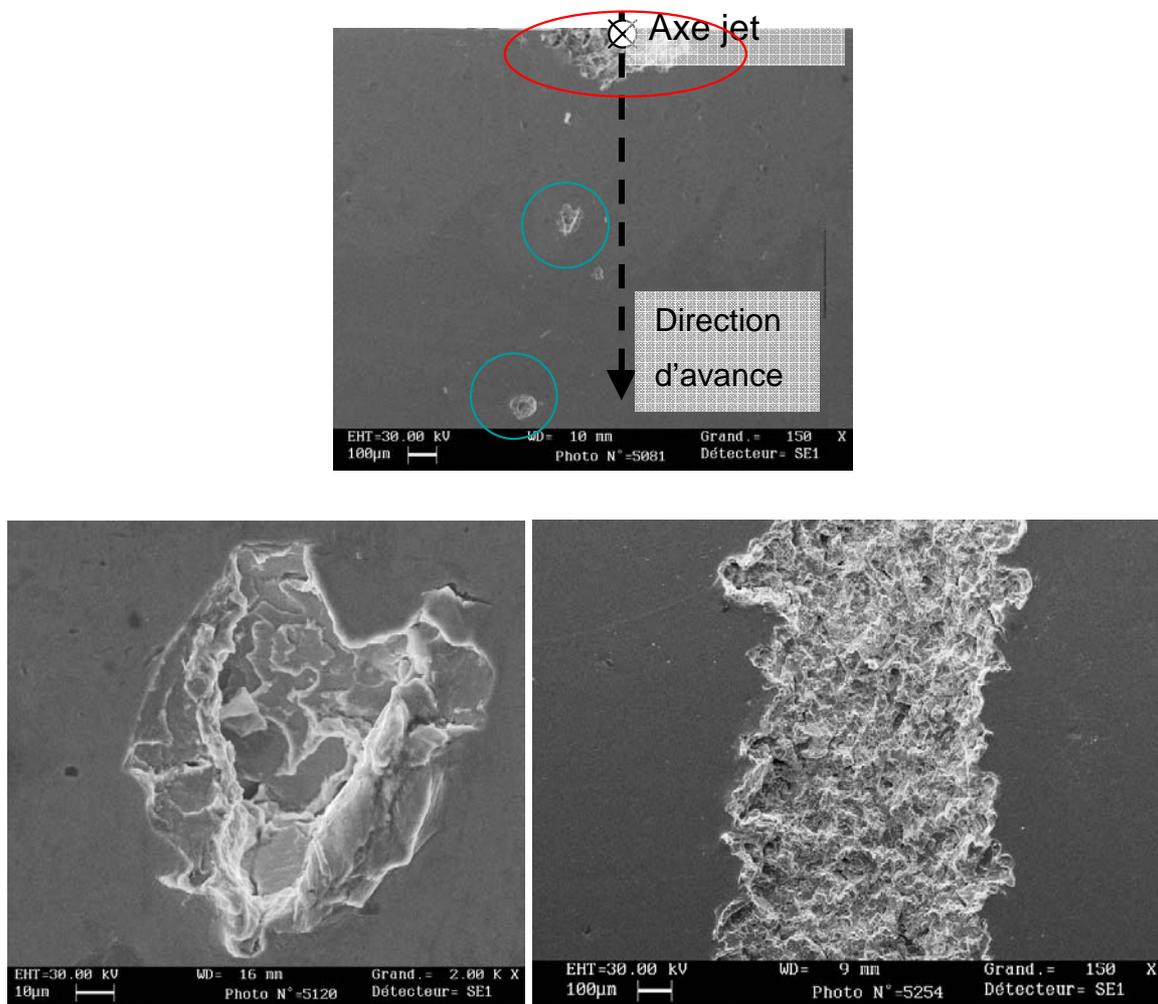


Figure 4.47 : Observation au MEB d'un revêtement métallique impacté par le jet d'azote supercritique.

Ces observations mettent en évidence un endommagement assez important du revêtement par le jet puisque des cratères sont formés sur la surface d'impact, dans lesquels le fluide supercritique se détend ensuite ce qui permet la « décapsulation » de la matière à ces endroits. Les résultats de simulation prenant en compte le fluide réel ont montré que le jet pouvait passer par un régime multiphasique dans lequel une phase solide apparaît. La phase solide serait alors transportée dans le jet et pourrait être à l'origine de tels phénomènes.

La compréhension plus fine des phénomènes physiques mis en jeu lors de la très forte détente de l'azote au travers de la buse et du processus d'interaction jet-revêtement à traiter nécessite indiscutablement de plus amples investigations expérimentales. La visualisation par caméra rapide de la détente du jet et des mécanismes d'endommagement sur échantillons de différentes natures ont été envisagées dans le cadre de cette thèse. Dans ce but, un banc d'expérimentation optique a été conçu (voir annexe A2). Malheureusement, son exploitation n'a pas pu être menée dans le cadre du présent travail de thèse en raison de défaillances dans le prototype délivrant le jet d'azote.

Références bibliographiques

- [1] Y. Otake, H. Kashimura, S. Matsuo, T. Setoguchi, H.-D. Kim – Influence of nozzle geometry on the near field structure of highly underexpanded sonic jet. *Journal of Fluid and Structures*, 24 (2008), pp281-293.
- [2] P. S. Cumber, M. Fairweather, S. A. E. G. Falle, J. R. Giddings - Predictions of the structure of turbulent, highly underexpanded jets. *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 117, pp599-604, 1995.
- [3] J. Palmer, and R. Hanson - Application of method of characteristics to underexpanded, freejet flows with vibrational nonequilibrium. In: *AIAA Journal*, Vol. 36 (2), pp193-200, 1998.
- [4] H. Laribou, C. Fressengeas, D. Entemeyer, V. Jeanclaude, A. Tazibt - Surface Damage by Impact of Nitrogen Jet under High Pressure and Low Temperature. *TMS 2010 139th Annual Meeting and Exhibition, Supplemental Proceedings*, Volume 1 (2010), Materials Processing and Properties, pp. 627-634

Conclusion générale et perspectives

Un nouveau procédé propre et performant de préparation de surface est étudié. Il se base sur l'injection d'azote sous haute pression et basse température et son impact sur un revêtement à traiter. Fonctionnant de manière empirique et malheureusement encore peu fiable, ce procédé met en jeu des phénomènes physiques encore bien mal appréhendés. L'étude bibliographique menée dans la première partie de ce mémoire montre le besoin d'améliorer les connaissances générales et la compréhension de ces phénomènes. Ces phénomènes sont complexes car de nombreux paramètres sont à prendre en compte comme la transformation thermodynamique subie par le fluide lors de la forte détente, les propriétés du fluide, et la nature de l'écoulement. Ce travail de thèse répond ainsi à un véritable besoin afin de pouvoir développer la technologie naissante. Dans l'optique de quantifier les effets des paramètres influant sur le jet et sur les propriétés à l'impact, une modélisation numérique a été développée et menée à l'aide d'une stratégie qui vise à augmenter pas à pas le degré de complexité (et de réalisme) de la modélisation.

Un premier modèle a été fondé en supposant l'écoulement monophasique mono-espèce (jet d'azote dans l'azote) de gaz parfait. La configuration d'écoulement dans ce cas correspond alors à un jet sous-détendu. La modélisation numérique de ce type d'écoulement nécessite un schéma numérique capable de représenter convenablement les différentes caractéristiques du jet, notamment la détente forte et rapide du fluide et la structure d'onde de choc qu'il contient. Des cas test de simulation ont permis de s'en assurer. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les prévisions théoriques, expérimentales et/ou numériques existantes. Ensuite, des simulations numériques de configurations de types industrielles ont pu être menées à l'aide de ce modèle. Les caractéristiques de l'écoulement et des propriétés à l'impact ont pu être étudiés en fonction de paramètres d'influence qui ont été identifiés à l'aide de la bibliographie qui s'étend rarement à des rapports de pression aussi élevé et à des plages de distance d'impact aussi vaste. La structure obtenue pour le jet sous détendu à $NPR > 100$ est comparable à celle obtenue pour des rapports moins importants. Toutefois cette structure est très sensible aux deux paramètres. En effet, l'influence conjointe du rapport de pression et de la distance d'impact sur la structure de l'écoulement a clairement été mise en évidence et quantifiée de manière rigoureuse avec ce modèle. Lorsque la comparaison avec les résultats de la littérature a été possible, les résultats obtenus ici ont montré un bon

comportement. Au-delà, les tendances globales auxquelles on s'attend théoriquement, sont confirmées.

Cependant ce premier modèle souffre d'un degré de réalisme relativement faible dû à la modélisation des propriétés du fluide. La prise en compte des fortes variations des propriétés du fluide dans le domaine supercritique nécessite l'utilisation de lois d'état du fluide réel. L'état de l'art a montré que plusieurs travaux ont déjà été effectués afin de reproduire convenablement l'ensemble des variations des propriétés thermo-physiques de substances pures classiques. Malgré une forte activité de recherche pour comprendre les phénomènes liés à l'injection de fluide supercritique, seules très peu d'études pertinentes ont été menées à bien. Elles montrent que les effets de fluide réels influencent l'écoulement mais que sa structure globale peut toujours s'apparenter à la structure identifiée pour le gaz parfait dans certaines conditions d'injection. Le manque cruel de résultats expérimentaux et de modèles dédiés à ce type de phénomènes nous ont poussés à adapter le modèle utilisé pour le gaz parfait au fluide réel. Cette adaptation (généralisation du solveur de Riemann approché utilisé dans la méthode numérique à une loi d'état complexe) est loin d'être triviale d'autant plus que le code de calculs utilisé pour mener à bien les simulations est un code commercial qui ne peut pas être modifié. Toutefois, l'intégration de loi d'état de fluide réel dans le code a été validée par des cas test. Le premier test a consisté à résoudre le problème dans un tube à choc. Les résultats obtenus montrent que la détente adiabatique du fluide réel est isentropique comme celle du gaz parfait. Les états initial et final de la détente diffèrent de ceux du gaz parfait. Le second test a consisté à simuler un jet supersonique sous détendu de fluide réel avec un rapport de sous-détente relativement modéré ($NPR=10$). Les résultats obtenus ont été comparés à ceux obtenus dans le cas du gaz parfait. Dans ce jet, les propriétés du fluide ne sont pas très différentes de celles du gaz parfait. L'intérêt du test a été de démontrer l'aptitude de la méthode numérique à représenter les caractéristiques du jet sous détendu (détente forte et rapide, re-compression au travers d'une onde de choc,...) tout en prenant en compte une loi d'état complexe. Une fois ces tests effectués, des simulations numériques ont été menées pour des cas représentatifs du jet d'azote utilisé dans le procédé de traitement de surface étudié.

Néanmoins, les modèles présentés comportent des limites qui offrent des perspectives d'évolution très intéressantes. En effet, dans certains cas, les simulations effectuées en prenant en compte les effets de fluide réel dans le modèle monophasique ne sont pas arrivées à convergence. Pour ces cas, l'échec des simulations est suspecté de provenir d'un passage de la détente dans le domaine multiphasique du fluide. Afin de pouvoir prendre en compte ce

phénomène, les équations du mouvement et les modèles devront tenir compte d'un possible changement de phase qui n'est pas détectable *a priori*. Il apparaît hors de portée de mettre en place un modèle « multi fluides » à phases compressibles qui permettrait par exemple de modéliser un jet gazeux compressible dans lequel des gouttes se condenseraient et de suivre l'évolution des interfaces entre les gouttes liquides et le gaz (étant donné le nombre de gouttes qui se condenseraient). Toutefois, il apparaît qu'un modèle d'écoulement diphasique à un seul fluide (modèle de mélange) est une extension directe du modèle monophasique présenté ici. Un découpage adéquat de l'espace des phases peut être effectué en regroupant le domaine hypercritique et l'état gazeux comme une seule phase au sein de laquelle les propriétés varient de manière continue et distinguant l'état liquide. Un modèle diphasique à un fluide vise alors à décrire l'évolution du mélange homogène des deux phases où des gouttes liquides sont transportées dans la combinaison des phases gazeuse et hypercritique à l'équilibre thermique et mécanique. L'ajout d'équations de transport permettra de calculer l'évolution de la taille des gouttes, et de leur nombre par unité de volume. Une attention particulière devra être portée sur la fermeture thermodynamique des équations de conservation.

Annexe 1 : Calcul des capacités calorifiques du fluide à partir de la loi d'état

On considère un système thermodynamique fermé constitué par un fluide, monophasique, composé d'un seul constituant. Afin d'étudier et modéliser les transformations et les échanges d'énergie que subit le fluide lors de son évolution dans l'écoulement, nous disposons des variables d'état, des fonctions d'état et des équations d'état. Les variables d'état (thermodynamique) peuvent être intensives ou extensives. Les variables intensives ne dépendent pas de la quantité de matière qu'elles représentent, par exemple la température T et la pression P , contrairement aux variables extensives, que sont, par exemple, le volume V ou la masse m . Par la suite, nous utiliserons de préférence la masse volumique ρ plutôt que le volume. Elle est définie comme suit :

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (\text{A.1})$$

Les fonctions d'état sont des grandeurs massiques : l'énergie interne e_i , l'enthalpie h , l'entropie s , l'énergie libre de Gibbs G , et l'énergie libre d'Helmholtz F . Toutes ces fonctions d'état nous informent uniquement sur l'état « actuel » du système étudié et ne tiennent pas compte de « l'historique » des transformations apportées au système. En d'autres termes, seuls les états initiaux et finaux sont pris en compte.

Nous pouvons écrire la différentielle totale exacte de l'énergie interne du fluide, et ses dérivées partielles définies par rapport au couple de variables (ρ, T) :

$$de_i(\rho, T) = \left. \frac{\partial e_i}{\partial \rho} \right|_T d\rho + \left. \frac{\partial e_i}{\partial T} \right|_\rho dT \quad (\text{A.2})$$

On introduit la capacité calorifique à volume constant du fluide qui est définie par :

$$C_V = \left(\frac{\partial e_i}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial e_i}{\partial T} \right)_\rho \quad (\text{A.3})$$

L'enthalpie du fluide est définie par rapport au couple de variables (ρ, T) par :

$$h(\rho, T) = e_i(\rho, T) + \frac{P(\rho, T)}{\rho} \quad (\text{A.4})$$

La différentielle totale exacte de l'enthalpie fait intervenir ses dérivées partielles :

$$\begin{aligned} dh(\rho, T) &= \left. \frac{\partial h}{\partial \rho} \right|_T d\rho + \left. \frac{\partial h}{\partial T} \right|_{\rho} dT \\ &= de_i(\rho, T) - \frac{1}{\rho^2} P(\rho, T) d\rho + \frac{1}{\rho} dP(\rho, T) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

On introduit alors la capacité calorifique à pression constante du fluide qui est définie par :

$$C_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p \quad (\text{A.6})$$

L'équation fondamentale de Gibbs permet de formuler l'énergie interne (et l'enthalpie) en fonction de l'entropie par :

$$de_i = \frac{P}{\rho^2} d\rho + T ds \quad (\text{A.7})$$

$$dh = \frac{1}{\rho} dP + T ds \quad (\text{A.8})$$

Ces fonctions d'état sont liées entre elles. Les dérivées partielles de chacune de ces fonctions peuvent être explicitées en fonction des variables d'état. En effet, en utilisant les propriétés mathématiques suivantes :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right|_{\rho} \right) \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right|_P \right) \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right|_T \right) = -1 \quad (\text{A.9})$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right|_s \right) \left(\frac{\partial T}{\partial s} \right|_P \right) \left(\frac{\partial s}{\partial P} \right|_T \right) = -1 \quad (\text{A.10})$$

$$\left(\frac{\partial h}{\partial e_i} \right|_T \right) \left(\frac{\partial e_i}{\partial T} \right|_h \right) \left(\frac{\partial T}{\partial h} \right|_{e_i} \right) = -1 \quad (\text{A.11})$$

Et en manipulant les équations (A.2), (A.7) et (A.8), on retrouve les relations de Maxwell :

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \rho} \right|_T = \frac{-1}{\rho^2} \left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_{\rho} \quad (\text{A.12})$$

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \rho} \right|_P = \frac{-1}{\rho^2} \left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_s \quad (\text{A.13})$$

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_s = \rho^2 \left. \frac{\partial s}{\partial P} \right|_{\rho} \quad (\text{A.14})$$

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_P = \rho^2 \left. \frac{\partial s}{\partial P} \right|_T \quad (\text{A.15})$$

Par identification dans (A.7), en utilisant (A.12), on peut réécrire la dérivée partielle de l'énergie interne par rapport à la masse volumique :

$$\left. \frac{\partial e_i(\rho, T)}{\partial \rho} \right|_T = \frac{1}{\rho^2} \left[P(\rho, T) - T \left. \frac{\partial P(\rho, T)}{\partial T} \right|_\rho \right] \quad (\text{A.16})$$

De la même manière, pour l'enthalpie, cela nous donne :

$$\left. \frac{\partial h(\rho, T)}{\partial \rho} \right|_T = \left(\frac{1}{\rho} + T \right) \left. \frac{\partial P(\rho, T)}{\partial \rho} \right|_T \quad (\text{A.17})$$

$$\left. \frac{\partial h(\rho, T)}{\partial T} \right|_\rho = C_v(\rho, T) + \frac{1}{\rho} \left. \frac{\partial P(\rho, T)}{\partial T} \right|_\rho \quad (\text{A.18})$$

En appliquant le théorème de Schwarz à la différentielle totale exacte de l'énergie interne, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\left. \frac{\partial e_i(\rho, T)}{\partial T} \right|_\rho \right) \Big|_T &= \frac{\partial}{\partial T} \left(\left. \frac{\partial e_i(\rho, T)}{\partial \rho} \right|_T \right) \Big|_\rho, \text{ soit :} \\ \left. \frac{\partial C_v(\rho, T)}{\partial \rho} \right|_T &= - \frac{T}{\rho^2} \left. \frac{\partial^2 P(\rho, T)}{\partial T^2} \right|_\rho \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

L'intégration du résultat précédent, à T constant, en fonction de ρ pris sur l'intervalle $[\rho_0; \rho]$ où ρ_0 est une valeur référence de la masse volumique, nous donne la relation explicite liant les variations de la capacité calorifique à volume constant à celles de la masse volumique et de la température :

$$C_v(\rho, T) = C_v(\rho_0, T) - T \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{1}{\rho^2} \left. \frac{\partial^2 P(\rho, T)}{\partial T^2} \right|_\rho d\rho \quad (\text{A.20})$$

De plus, en utilisant la relation mathématique :

$$\left. \frac{\partial h(\rho, T)}{\partial T} \right|_\rho = \left. \frac{\partial h(\rho, T)}{\partial T} \right|_\rho + \left. \frac{\partial h(\rho, T)}{\partial \rho} \right|_T \left. \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_\rho, \text{ on a :}$$

$$C_p(\rho, T) = C_v(\rho, T) - \frac{T}{\rho^2} \left(\left. \frac{\partial P(\rho, T)}{\partial T} \right|_\rho \right) \left(\left. \frac{\partial \rho(P, T)}{\partial T} \right|_\rho \right) \quad (\text{A.21})$$

Ce résultat peut être réécrit sous la forme :

$$C_p(\rho, T) = C_v(\rho, T) + \frac{T}{\rho^2} \frac{\left(\left. \frac{\partial P(\rho, T)}{\partial T} \right|_\rho \right)^2}{\left(\left. \frac{\partial P(\rho, T)}{\partial \rho} \right|_T \right)} \quad (\text{A.22})$$

Annexe 2 : Eléments de conception de bancs d'expérimentations optiques

Afin d'observer les phénomènes physiques mis en jeu dans le jet d'azote, deux bancs d'essais optiques devraient permettre :

- l'observation de la structure du jet à un instant donné, par une technique combinée (voir Kleine *et al.* [1]) de visualisation par strioscopie (mise en évidence des zones de forts gradients de masse volumique dans le jet) et par interférométrie de Mach-Zender (quantification des gradients de masse volumique dans le jet) représenté sur la figure A.1,
- l'observation de l'évolution de la structure du jet au cours d'un très court intervalle de temps donné (quelques microsecondes), à l'aide d'une méthode pseudo-PIV (voir figures A.1 et A.2). Cela permettra de distinguer une éventuelle phase solide ou liquide dans le jet et d'en estimer la vitesse (par exemple, l'apparition des gouttes d'azote liquide et leur transport dans le jet) en obtenant deux images successives de l'écoulement séparées de quelques microsecondes.

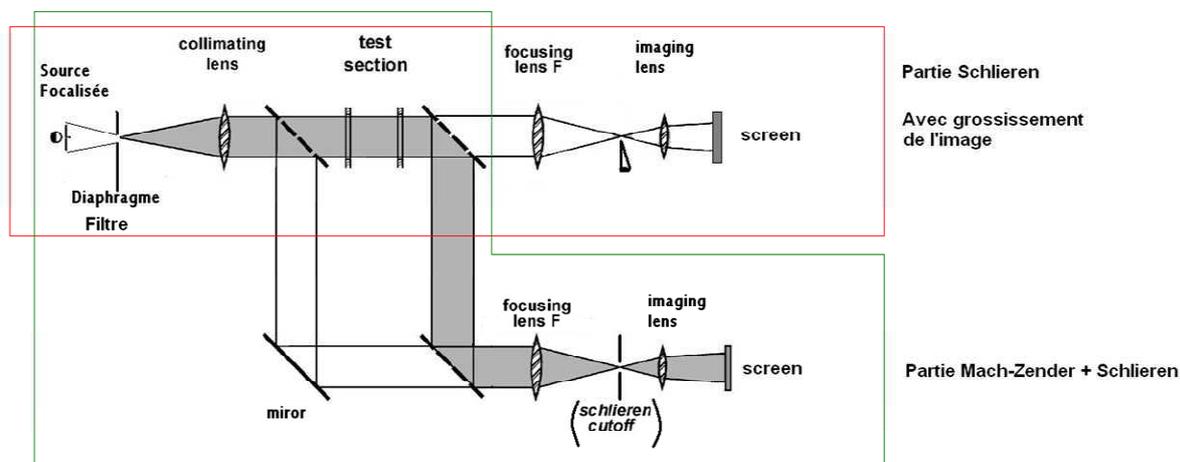


Figure A.1 – Schéma de principe du banc optique permettant l'observation par strioscopie et par interférométrie Mach-Zender.

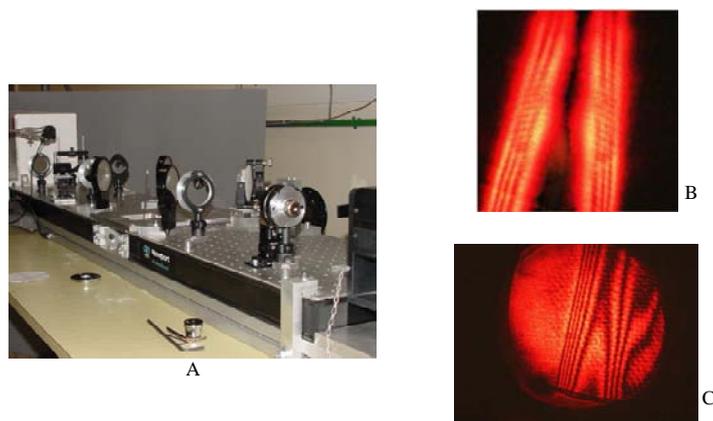


Figure A.2 – A : Photographie du banc d'optique qui a permis l'observation d'une flamme d'une bougie par strioscopie (B) et par interférométrie Mach-Zender (C).

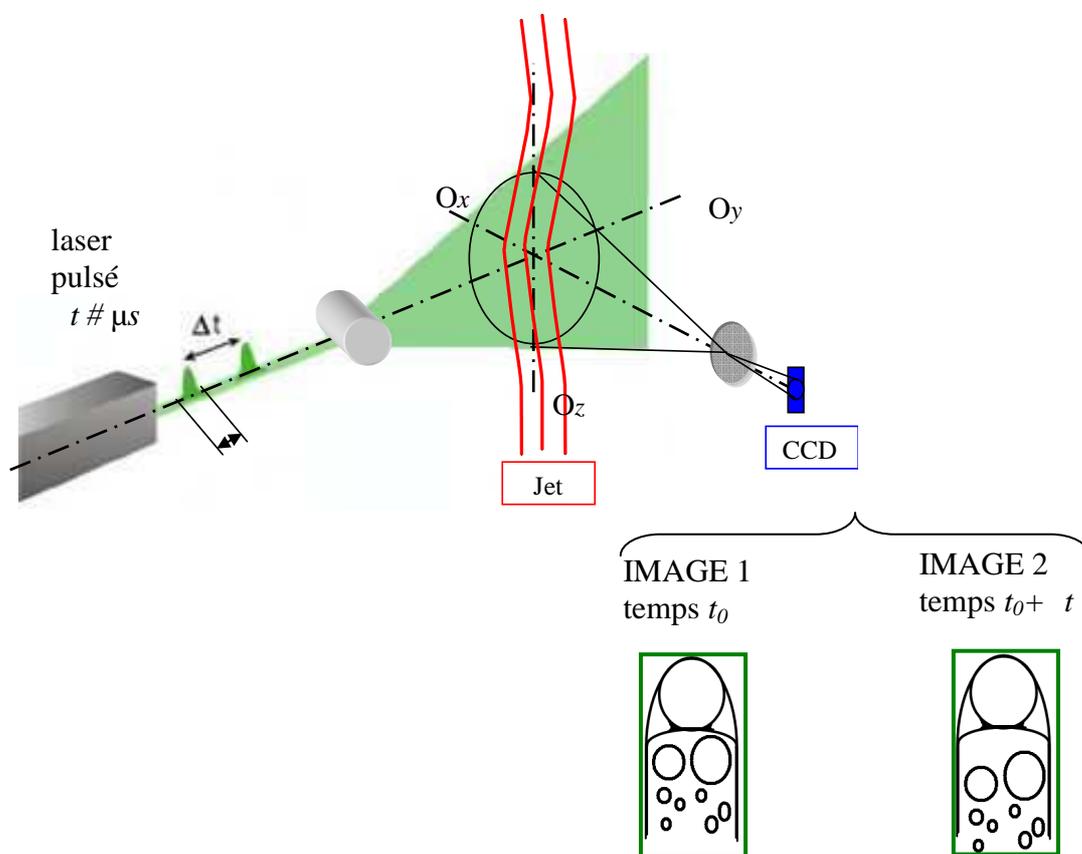


Figure A.3 – Schéma de principe d'un banc de pseudo-PIV qui permet l'observation instantanée dans le jet de 2 images espacées de quelques microsecondes.

Références bibliographiques

- [1] H. Kleine, H. Grönig and K. Takayama - Simultaneous Shadow, Schlieren and Interferometric Visualization of Compressible Flows. In: *Optics and Lasers in Engineering*, vol.44, Issues 3-4, March-April 2006, pp 170-189.

Titre Etude d'un jet d'azote supercritique utilisé dans un prototype industriel de traitement de surface à faible impact environnemental

Résumé Un nouveau procédé propre et performant de préparation de surface reposant sur l'utilisation d'un jet d'azote sous très haute pression et basse température est développé. Comparativement aux techniques classiques de préparation de surface, ce nouveau procédé apporte des avantages environnementaux (pas de génération de déchets additionnels), techniques (modes d'action sur le revêtement à traiter) et énergétiques (consommation d'énergie). Cependant, le fonctionnement du procédé de traitement de surface en question, qui existe sous forme de prototype à l'heure actuelle, repose sur des bases empiriques et les phénomènes physiques qu'il met en jeu sont encore bien mal appréhendés. Pour comprendre ces phénomènes et les modéliser, une analyse numérique est présentée. Cette analyse s'inclut dans une stratégie d'étude qui vise à augmenter progressivement le degré de complexité de la modélisation. Un premier modèle vise à décrire l'évolution du fluide en temps et en espace en supposant un écoulement compressible visqueux et axisymétrique. Dans ce modèle, le fluide est considéré comme parfait. Une extension directe de ce modèle est ensuite présentée, elle propose de tenir compte des effets de fluide réel dans l'écoulement compressible monophasique. Ces modèles sont implémentés dans un code de calculs par volumes finis. Des cas tests sont étudiés afin de valider les modèles numériques. Une étude sur des configurations de type industrielles, représentatives des conditions d'utilisation du procédé de traitement de surface par jet d'azote, est ensuite menée.

Mots-clés Traitement de surface, azote, jet, compressible, sous-détendu, supercritique, simulation numérique, volumes finis.

Title Study on a supersonic high pressure ratio underexpanded impinging jet used in a new surface treatment process through numerical simulations

Abstract A new and efficient process of surface treatment is developed and exists in prototype form at present. The process aims at injecting an inert gas, such as nitrogen, at supercritical conditions through a nozzle. The jet resulting from the expansion of the fluid at high pressure and supercritical temperature impinges normally a flat surface. Alternatively to water jet technologies, which need expansive purification of water after use, and to other classical surface treatment process, this process provides environmental (no generation of additional waste), technical (action on the coating) and energetical (efficiency) benefits. However, the physical phenomena involved in the jet are still poorly understood at present. To understand and model these phenomena, numerical analysis is presented. This analysis is part of a study strategy that aims at gradually increasing the complexity of modeling. A first model aims at describing the evolution of the fluid in time and space, assuming a compressible axisymmetric viscous flow. In this model, the fluid is assumed perfect. A direct extension of this model is then presented where real fluid effects are taken into account in the compressible flow. These models are implemented in finite volume CFD code. Test cases are studied to validate the numerical models. A study of industrial-type configurations, representative of the conditions of use of the process of surface treatment by nitrogen is then conducted.

Keywords Surface Treatment, nitrogen, jet, compressible, underexpanded, supercritical, numerical simulation, finite volumes.