REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE





UNIVERSITÉ SAAD DAHLEB DE BLIDA 1 FACULTÉ DE TECHNOLOGIE DÉPARTEMENT DE MÉCANIQUE

Projet de Fin d'Etudes Présenté pour l'obtention du Diplôme de Master en Génie Mécanique Option : Installations Energétiques et Turbomachines

Titre :

L'ÉCOULEMENT HYPERSONIQUE A TRAVERS UNE ONDE DE CHOC NORMALE SOUS L'EFFET DE L'ÉNERGIE DE VIBRATION ET LA DISSOCIATION DES MOLÉCULES.

Réalisé par :

> BOUDALI Rabie> BOUDANI Ibrahim

Promoteur :

Mr.SALHI Merouane <u>Co-promoteur :</u>

Mr.ROUDANE Mohamed

Année Universitaire : <u>2019 / 2020</u>

Résumé

Lorsqu'un véhicule spatial rentre dans les couches supérieures de l'atmosphère, sa vitesse est encore très importante. On parle des vitesses hypersoniques. Les phénomènes aérodynamiques associés conduisent à des températures très élevées, en particulier sur le nez de l'engin, conduisant à le protéger par un bouclier thermique. Le nombre de Mach doit être très supérieur à l'unité. Vu la complexité des phénomènes qu'on rencontre dans les écoulements hypersoniques.

Dans ce travail nous allons faire une étude sur l'effet de la température sur les gaz parfaits à un écoulement hypersonique à travers un corps. On appel cette phénomène un échauffement cinétique ou échauffement aérodynamique .ce phénomène c'est un résultat d'une énergie de vibration et la dissociation dégagé par les molécules du gaz qui applique une force thermique sur le corps.

Le but de notre étude est développer un programme de calcul numérique en langage FORTRAN permettant de déterminer les rapports thermodynamiques à travers une onde de choc normale à haute température. L'application seras faite pour un cas de vibration et dissociation des molécules d'AIR, faire une comparaison entre le gaz réel et le gaz parfait.

Mots clés : écoulement hypersonique, échauffement cinétique, nombre de mach, onde de choc normale, vibration, dissociation, force thermique.

Abstract

When a space vehicle enters the upper layers of the atmosphere, its speed is still very important. We talk about hypersonic velocities. The associated aerodynamic phenomena lead to very high temperatures, particularly on the nose of the spacecraft, leading to its protection by a heat shield. The Mach number must be much higher than the unit. Given the complexity of the phenomena encountered in hypersonic flows.

In this work we will make a study on the effect of temperature on perfect gases at hypersonic flow through a body. This phenomenon is called kinetic heating or aerodynamic heating and is the result of vibration energy and the dissociation released by the gas molecules applying a thermal force to the body.

The main of our study is to develop a numerical calculation program in FORTRAN language to determine the thermodynamic relationships through a normal shock wave at high temperature. The application will be made for a case of vibration and dissociation of AIR molecules, making a comparison between the real gas and the perfect gas.

Key words: hypersonic flow, kinetic heating, Mach number, normal shock wave, vibration, dissociation, thermal force.

ملخص

عندما تدخل مركبة فضائية الطبقات العليا من الغلاف الجوي، فإن سرعتها لا تزال بالغة الأهمية. إننا نتحدث عن السرعات الفائقة. تؤدي الظواهر الديناميكية الهوائية المرتبطة إلى درجات حرارة عالية جدًا، خاصة على مقدمة المركبة، مما يؤدي إلى حمايتها بواسطة درع حراري بحيث عدد الماك يجب ان يكون اكبر من الوحدة . نظرا لتعقد الظواهر التي تصادفها التدفقات فوق الصوتية فإن السريان فوق الصوت نحو موجة تصادم مستقيمة يرفقه تزايد في الضغط و درجة الحرارة لغاز مثالي , إن الحرارة النوعية و نسبتها لم تعد ثابتة بحيث تبدأ في التغير مع تغير في درجة الحرارة لغاز مثالي , إن الحرارة النوعية و ومعادلته تتغير فيصبح غازا حقيقيا , في هذه الحالة فإن تأثيرات درجة الحرارة و الضغط يسمحان لجزيئات الغاز بتحرير طاقة اهتزازية و تفكك جزيئي للغاز .

في هذا العمل سنقوم بدراسة تأثير درجة الحرارة على الغازات المثالية عند السريان فوق الصوتي عبر الجسم. وتسمى هذه الظاهرة بالتسخين الحركي أو التسخين الأيروديناميكي ، وهذه الظاهرة ناتجة عن طاقة اهتزاز وتفكك جزيئات الغاز التي تطبق قوة حرارية على الجسم.

الهدف من دراستنا هو تطوير برنامج حساب رقمي (FORTRAN) يسمح بتحديد العلاقات الديناميكية الحرارية من خلال موجة الصدمة العادية عند درجة حرارة عالية في حالة الاهتزاز والتفكك لجزيئات الهواء وإجراء مقارنة بين الغاز الحقيقي والغاز المثالي.

الكلمات المفتاحية : التدفق فوق الصوتي، التسخين الحركي , موجة اصطدام مستقيمة ،طاقة اهتزازية ، تفكك جزيئي , عدد الماك , قوة حرارية

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercie infiniment mon dieu tout puissant pour l'aide qu'il m'apporté pour la réalisation de ce modeste travail.

Je tiens à remercie mes très chers parents qui ont le droit de recevoir mes chaleureux remerciements pour le courage et le sacrifice qu'ils ont consentis pendant la durée mes études en leurs souhaitant une longue vie pleine de joie et de santé.

En préambule à ce mémoire, je souhaitais adresser mes remerciements les plus sincères à mon promoteur Monsieur SALHI Merouane ,mon co-promoteur Monsieur ROUDANE Mohamed et notre père monsieur le professeur chef département de mécanique de l'Université SAAD DAHLEB BLIDA Monsieur TEMMER Mustapha pour l'encadrement , sa compréhension et sa gentillesse durant tout le long de mon mémoire .

Sans oublie tous mes chers amis qui m'ont apporté leurs aide et qui ont ainsi contribué à l'élaboration de ce mémoire.

Je remercie aussi l'honorable jury devant lequel on a le privilège d'exposer notre travail.

Finalement toute personne ayant participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à :

Mes parents. Aucun hommage ne pourrait être à la hauteur de L'amour dont ils ne cessent de me combler. Que dieu leur procure bonne santé et longue vie.

A mon encadreur pour ses efforts et ses conseils.

Aux personnes dont j'ai bien aimé la présence dans ce jour, à mes sœurs et mes frères, ainsi que tous mes amis

Aux personnes qui m'ont toujours aidé et encouragé, qui étaient toujours à mes côtés, et qui m'ont accompagnaient durant mon chemin d'études supérieures, mes aimables amis, collègues d'étude et frères de cœur

TABLE DES MATIERES

Résumé	I
Remerciements	II
Dédicaces	
TABLE DES MATIERES	IV
LISTES DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUE ET TABLEAUX	V
LISTES DES SYMBOLES ET DES ABREVEATIONS	VI
INTRODUCTION GENERALE	01

CHAPITRE I :

GÉNÉRALITÉS SUR LA DYNAMIQUE DES GAZ

I.1. Introduction	3
I.2. Rappel thermodynamique03	3
I.3. Nombre de mach et différents régimes d'écoulement04	ł
I.3.1. Définition de nombre de mach04	ŀ
I.4. Types des écoulements autour d'un objet volant06	•
I.4.1. Écoulement subsonique06)
I.4.2. Écoulement sonique07	7
I.4.3. Écoulement supersonique07	,
I.4.4. Écoulement hypersonique10	ſ
I.5. Quelques aéronefs hypersoniques10	,
I.6. Les types des ondes de choc11	L
I.6.1. Onde de choc normale (droite)11	_
I.6.2. Onde de choc oblique1	3
I.6.3. Onde de choc attachée et détaché16	5
I.6.4. Onde de choc conique	5

5.5. Détente de Prandtl-Meyer17

CHAPITRE II :

ÉNERGIE VIBRATIONELLE ET LA DISSOCIATION MOLÉCULAIRE

I.1. Introduction	20
I.2. Echauffement cinétique	22
I.3. Ecoulement au voisinage du nez de la navette	23
I.4. Effets de gaz réel aux vitesses hypersonique	24
I.5. Vibration moléculaire	25
I.5.1. Grandeurs thermodynamiques d'un gaz parfait	27
I.5.2. Degré de liberté d'une molécule	27
I.6. La dissociation	28
I.6.1. Liste d'énergies de dissociation	29
I.6.2. Constante d'équilibre chimique	30

CHAPITRE III :

EQUATIONS MATHEMATIQUES ET DEVELOPPEMENTS NUMERIQUES

III.1. Introduction	33
III.2. Calcul de première partie	
III.2.1. L'équation d'énergie de vibration	33
III.2.2. L'équation de partition d'énergie	34
III.3. Calcul de deuxième partie	
III.3. 1.Les équations de base pour onde de choc normale	36
III.4. Calcul troisième partie	
III.4.1. Constant d'équilibre chimique de réaction	
III.4.2. Concentration molaire	40
III.4.3. Chaleur spécifique à pression constante Cp	41

III.4.4. Constante du gaz du mélange41
III.4.5. Rapport des Chaleurs spécifique de mélange gazeux42
III.5. Calcul des performances thermodynamiques après l'équilibre
III.5.1. L'énergie de vibration après l'équilibre chimique42
III.5.2. L'équation de la vitesse avant et après le choc
III.5.3. La masse volumique d'équilibre chimique42
III.5.4. La pression d'équilibre chimique43
III.5.5. La température d'équilibre chimique43
III.5.6. L'entropie d'équilibre chimique43
III.6 développement les programmes de calcul
Etape 1 : Effet de l'énergie de vibration sur les paramètres thermodynamiques après une onde de choc normale
Etape 2 : Effet de la dissociation sur le comportement d'un écoulement après une onde de choc normale

CHAPITRE IV :

RÉSULTAS ET COMMENTAIRES

IV.1. Effet de la vibration moléculaire sur le comportement d'un écoulement après une onde de cl normal	hoc 48
IV.2. Effet de la dissociation sur le comportement d'un écoulement après une onde de choc normale	59
CONCLUSION GENERALE	69
BIBLIOGRAPHIE	71

LISTES DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUE ET TABLEAUX

Figure (I.1) : propagation de l'onde dans un milieu en mouvement subsonique06				
Figure (I.2) : propagation de l'onde dans un milieu en mouvement sonique07				
Figure (I.3) : propagation de l'onde dans un milieu en mouvement supersonique08				
Figure (I.4) : un avion passe le mur du son08				
Figure (I.5) : onde de choc normal dans une section divergente d'une tuyère12				
Figure (I.6) : onde de choc oblique14				
Figure. (I.7): les caractéristiques d'une onde choc oblique14				
Figure (I.8): représentation des configurations caractéristiques pour une onde de choc oblique attaché et détachée				
Figure. (I.9): écoulement au voisinage du bord d'attaque17				
Figure (I.10): représentation d'une onde de choc conique17				
Figure (I.11): détente de prandtl-meyer18				
Figure (II.1): schéma de l'interaction de l'écoulement hypersonique avec le bouclier				
thermique				
Figure (II.2) : rentrée d'une capsule dans l'atmosphère de la terre 21				
Figure (II.3) : diagramme montre l'évolution de l'altitude de rentrée en fonction de la vitesse				
Figure (II.4) : échauffement cinétique en régime hypersonique autour d'un corps arrondi23				
Figure (II.5) : choc devant la navette spatiale lors de sa rentrée dans l'atmosphère23				
Figure (II.6) : modes d'énergie des molécules27				
Figure (III.1) : organigramme de la première étape- Effet de l'énergie de vibration sur les paramètres thermodynamiques après une onde de choc normale				
Figure (III.2) : organigramme de la deuxième étape- Effets de l'énergie de vibration et de la dissociation sur les paramètres thermodynamiques après une onde de choc normale45				
Figure (IV.1) : variation des chaleurs spécifiques CP en fonction de la température49				
Figure (IV.2): variation de la partition des énergies en fonction de la				

Figure (IV.3): la variation du rapport des chaleurs spécifiques γ en fonction de la température
Figure (IV.4): la variation du rapport de pression P_2/P_1 en fonction de M_1
Figure (IV.5): la variation du rapport de température T_2/T_1 en fonction de M_1
Figure (IV.6): la variation du rapport des masses volumiques ρ_2/ρ_1 en fonction de M ₁ 57
Figure (IV.7): la variation du rapport des nombres de Mach M_2/M_1 en fonction de M_1 58
Figure (IV.8): variation des chaleurs spécifiques C _P en fonction de la température59
Figure (IV.9): variation des chaleurs spécifiques C _v en fonction de la température60
Figure (IV.10): rapport des chaleurs spécifiques du gaz en fonction de la température61
Figure (IV.11): évolution des concentrations molaires en fonction de nombre de Mach62
Figure. (IV.12) : variation de l'entropie en fonction de nombre de Mach63
Figure. (IV.13): variation de la masse volumique en fonction du nombre de Mach
Figure (IV.14): variation des rapports des nombres de Mach en fonction du nombre de Mach M ₁
Figure (IV.15): variation des rapports des pressions en fonction du nombre de Mach M ₁ 66
Figure (IV.16): variation des rapports des températures en fonction du nombre de Mach M ₁ .67
Tableau (I.1) : représente des déférents régimes des écoulements
Tableau (II.1) : les principales constantes d'équilibre
Tableau (II.2) : Coefficients des constantes d'équilibre
Tableau (II. 3) : Liste d'énergies de dissociation de liaison
Tableau (III.1) : Température de vibration des différents gaz
Tableau (III.2) : Température de rotation des différents gaz
Tableau (III.3) : les constantes relatives de réaction

LISTES DES SYMBOLES ET DES ABREVEATIONS

Symboles	Désignation				
P					
T 2gp	Pression de gaz parfait pour onde de choc normal [Pa]				
I _{2gp}	Température de gaz parfait pour onde de choc normal [K]				
P _{2eq}	Pression d'équilibre chimique [Pa]				
T _{2eq}	Température d'équilibre chimique [K]				
P_0	Pression de référence égale à 1 atm				
<i>P</i> ₁	La pression en amont [Pa]				
<i>P</i> ₂	La pression en aval [Pa]				
<i>T</i> ₂	Température en amont [K]				
P _{2es}	Pression d'estimation de sortie [Pa]				
T_{2es}	Température s'estimation de sortie [K]				
R	Constante universelle des gaz parfait [J/(Kg.K)]				
r	Constante spécifique des gaz [J/(Kg.K)]				
V	La vitesse [m/s]				
V_2	La vitesse en aval [m/s]				
U ₁	La vitesse en amont				
U_{1n}	Le composant de U_1 perpendiculaire à l'onde de choc				
U_{1t}	Le composant de U_1 parallèle à l'onde de choc.				
U ₂	La vitesse en aval.				
U_{2n}	Le composant de U_2 perpendiculaire à l'onde de choc				
U_{2t}	Le composant de U_2 parallèle à l'onde de choc				
Cp	Chaleur spécifique de gaz à pression constante $[J/(Kg.K)]$				
C_v	Chaleur spécifique de gaz à volume constant [J/(Kg.K)]				
M_{2gp}	Le nombre de Mach de gaz parfait pour onde de choc normal				
C	Célérité du son [m/s]				
h	L'enthalpie [J]				
h_f	L'enthalpie de formation [J/mole]				
ev	énergie de vibration				
K _p	Constante d'équilibre de réaction chimique				

Ε	L'énergie d'une particule				
Z	Couplage rotation-vibration				
r _m	Constante du gaz du mélange				
Y	Concentration molaire %				
\mathcal{C}_m	Concentration massique %				
M_{m}	Masse molaire d'un mélange gazeux [Kg / m ³]				
DO	L'énergie de dissociation d'une molécule				
e_p	L'énergie de gaz parfait				
$\dot{Q}_{ m m}$	Débit massique [m ³ /s]				
Ι	Moment cinétique de la molécule				
Symboles Grecs	Désignation				
$ ho_{2gp}$	Masse volumique de gaz parfait pour onde de choc normal [Kg/m^3]				
ρ_{2eq}	Masse volumique de gaz réel à l'équilibre chimique [Kg/m^3]				
γ	Coefficient isentropique				
γ_{m}	Rapport des Chaleurs spécifique de mélange gazeux				
δ	La déflexion.				
E	L'angle entre l'onde de choc et l'écoulement en amont de choc.				
β	L'angle entre l'écoulement en aval du choc et plan du choc.				
$\theta_{ m v}$	Température caractéristique de vibration [K].				
θ_{r}	Température caractéristique de rotation [K].				
θ_t	Température de translation [K]				
θ	La fonction de Prandtl-Meyer				
Δs	L'entropie d'équilibre chimique				
ε	L'erreur en %				
ω	Vitesse angulaire [rad / s]				

Introduction générale

Le développement des technologies aérospatiales a récemment suscité un regain d'intérêt pour les recherches liées aux écoulements de fluides à grande vitesse. Les phénomènes aérodynamiques associés à une température très élevée, notamment sur le nez du véhicule, conduisent à le protéger avec une couche thermique. Le nombre de Mach doit être beaucoup plus grand que l'unité. L'énergie cinétique peut être mise en jeu pour regagner la faveur d'un phénomène aérodynamique spécifique, comme le choc, la sous forme thermique favorisant l'apparition des mêmes processus physico-chimiques tels que l'excitation vibrationnelle et la dissociation des molécules, l'excitation électronique des atomes et des molécules.

Compte tenu de la complexité des phénomènes rencontrés dans les écoulements hypersoniques qui fait actuellement l'objet d'études intensives. Dans ces conditions, pour calculer l'énergie interne, il faut considérer tous les modes d'énergie. Ainsi, l'écoulement de fluide autour de l'engin spatial lors de la rentrée peut être le siège de tels phénomènes. Dissociation ces espèces de diatomées telles que l'oxygène et l'azote réagissent. Il se produit lorsque la dissociation de ces molécules, la recombinaison et les ionisations vont transformer la composition initiale de l'air en un mélange de plusieurs espèces: O2, N2, NO, O, N, NO +, O2 +, N2 +, O +, N +, e-, ... dont les fractions massiques ou molaires sont fonction de la température et de la pression.

Dans les calculs d'énergie interne, il faut prendre en compte tous les modes d'énergies. L'écoulement de fluide autour du véhicule spatial lors de leur rentrée peut être le siège de tels phénomènes. Tous ces phénomènes se déroulent à des échelles de temps différents car ils nécessitent un certain nombre de collisions dont la probabilité augmente avec la montée en température. Du fait des vitesses atteintes et de l'altitude, la densité du fluide est généralement faible et il en résulte que le temps caractéristique de ces processus physico-chimiques peut être du même ordre de temps caractéristique de l'écoulement. Le but de ce travail est de faire une solution numérique d'un écoulement unidimensionnel réactif, non visqueux, hypersonique derrière le choc fort. Nous étudions les phénomènes hypersoniques, comme la vibration, la d'un choc fort en tenant compte des phénomènes physico-chimiques, comme la vibration, la dissociation des molécules. La simulation numérique des écoulements régis par les équations de la cinétique chimique modélisant le phénomène de dissociation .Les méthodes de calcul sont basées sur la technique directe en utilisant les relations et équations de la dynamique des gaz.

Dans chapitre 1 est consacré à l'étude sur les types des écoulements et les types des ondes de chocs et leurs grandeurs totales et ses équations d'état.

Dans chapitre 2 est consacré à l'étude d'échauffement cinétique, l'énergie de vibration des molécules et sa degrés de liberté en plus les effets de cette énergie sur le gaz réel. L'équilibre chimique du gaz réel généré à cause d'une dissociation des molécules du gaz.

Dans chapitre 3 est consacré à la détermination des paramètres thermodynamiques avant l'onde de choc à haute température, après onde de choc à haute température et en équilibre chimique (avec dissociation des moléculaires) pour les gaz (N_2, O_2, AIR) à l'aide des équations nécessaires.

Faire des programmes de calculs à l'aide de FORTRAN avec ces équations.

Dans chapitre 4, on présentera les principaux résultats relatifs au chapitre précèdent avec des explications détaillées.

CHAPITRE I :

GÉNÉRALITÉS SUR LA DYNAMIQUE DES GAZ

I.1. Introduction :

La dynamique des gaz est la branche de la mécanique des fluides traitant des écoulements compressibles. La mécanique des fluides classique s'intéresse aux écoulements pour lesquels la densité du fluide peut être considérée comme constante.

Cependant, à vitesses au –delà de Mach 0,3, les paramètres de compressibilité doivent être conservé dans les équations de Navier-stokes. La complexité ainsi apportée aux équations rend une résolution analytique très ardue. Dans bien des cas d'ingénierie, diverses simplifications sont effectuées afin de résoudre des problèmes en conservant des erreurs dans les limites de l'acceptable. C'est le cas des hypothèses suivantes : gaz parfaits, écoulements à une dimension, et écoulements isentropiques.

Les analyses en dynamique des gaz font souvent appel à diverses corrélations empiriques afin de contourner certains difficultés de calcules. [1]. [2]. [3].

I.2. Rappel thermodynamique:

L'équation d'état :

L'équation d'état d'un gaz parfait est donnée par :

$$P = \rho r T \tag{I.1}$$

Avec:

- T : la température en °K
- r : la constante des gaz parfait en J.mol⁻¹.K⁻¹

Pour l'air : r = 287.1029 J/ (kg. K)

L'équation de continuité :

L'équation de continuité doit traduire le principe de conservation de la masse. Pour un mouvement conservatif et permanent, elle est donnée par :

$$div(\rho V) = 0 \tag{1.2}$$

L'équation de la quantité de mouvement :

Cette équation est un principe de la mécanique newtonienne qui se traduit par l'équation de conservation de quantité de mouvement. Pour un fluide parfait en écoulement permanant et en négligeant les forces de volumes, elle est donnée par :

$$dP + \rho V dV = 0 \tag{I.3}$$

L'équation de l'énergie :

Pour un gaz parfait en écoulement permanant isentropique et en l'absence du travail des forces extérieures (travail des forces internes est nul), et en négligeant l'énergie potentielle, L'équation d'énergie s'écrit :

$$h + \frac{V_{2}^{2}}{2} = Cst$$

$$h_{1} + \frac{V_{1}^{2}}{2} = h_{2} + \frac{V_{2}^{2}}{2}$$
(I.4)

Avec :

$$h = CpT$$

I.3. Nombre de mach et différents régime d'écoulement :

I.3.1. Définition du nombre de Mach :

Le nombre de Mach est un nombre sans dimension, noté Ma, qui exprime le rapport de la vitesse locale d'un fluide à la vitesse du son dans ce même fluide. La vitesse du son dans un gaz variant avec sa nature et sa température, le nombre de Mach ne correspond pas à une vitesse fixe, il dépend des conditions locales. Il a été ainsi nommé en l'honneur du physicien et philosophe autrichien Ernst Mach par Jakob Ackeret [13]

Aux températures habituelles et dans l'air, la vitesse du son vaut environ 340 m s-1 ou

1224 km h-1.

Le nombre de Mach mesure le rapport entre les forces liées au mouvement et la Compressibilité du fluide. Une onde de choc est un type d'onde, mécanique ou d'une autre nature, associé à l'idée d'une transition brutale. Elle peut prendre la forme d'une vague de haute pression, et elle est alors souvent créée par une explosion ou un choc de forte intensité.

Ou mouvement imposé d'une manière quelconque à un gaz peut s'interpréter en considérant une succession de petites perturbations qui se propagent à la célérité du son. Si leur intensité est suffisante, elles impressionnent nos oreilles.

$$M_a = \frac{\mathrm{V}}{c} \tag{I.5}$$

M_a : est le nombre de Mach

V : est la vitesse de l'objet (par rapport à son environnement)

c : est la vitesse de propagation ou célérité du son dans l'environnement considéré. Elle représente la vitesse de propagation de tout ébranlement produit dans le milieu.

Le son découle de la propagation d'une onde de pression, ces ondes possèdent une source ainsi qu'une vitesse de propagation .Par analogie, le son comme les vagues provoquées par la projection d'une pierre dans un lac. Les vagues se déplacent à une certaine vitesse. La vitesse du son dépend du milieu de propagation, entre autre, de sa densité. Par définition, la vitesse du son est le rapport de la variation de pression sur la variation de densité et son symbole est C .il existe trois façons d'écrire l'équation :

La vitesse du son dans l'air, considéré comme un gaz parfait, s'exprime par :

$$C = \sqrt{\frac{\partial P}{\partial \rho}} \tag{I.5.1}$$

$$c = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}} \tag{I.5.2}$$

- \blacktriangleright *P* : la pression (Pa)
- ▶ ρ : la masse volumique (kg·m⁻³)
- > $\gamma = \frac{Cp}{Cv}$. γ étant le coefficient de compressibilité,

 c_p et c_v étant les capacités thermiques massiques isobare et isochore. Ce nombre ne dépend que du nombre d'atomes dans la molécule et vaut 1,4 pour l'air. L'équation d'état permet de la réécrire en fonction de la constante spécifique du gaz r (287 J. kg⁻¹.K⁻¹ pour l'air) et de la température T en kelvins :

$$c = \sqrt{\gamma r T} \tag{I.5.3}$$

I.4. Types d'écoulements autour d'un objet volant :

D'une manière générale, sauf obstacle, cet ébranlement se propage de la même façon dans toutes les directions. Ainsi, il se retrouve au bout d'une seconde répartie sur une sphère de 340 mètres de rayon. La surface d'une sphère étant proportionnelle au carré de son rayon, l'intensité de la perturbation décroît très rapidement avec la distance : c'est la cause principale de l'atténuation d'un son, beaucoup plus importante que la viscosité.

Dans ce qui suit, un objet volant en mouvement uniforme à la vitesse *V* sera assimilé à un point. [13]

I.4.1. Écoulement subsonique :

Si V < C (c'est-à-dire Ma < 1), l'objet volant à une vitesse inférieure à celle de l'accroissement des sphères de perturbation qu'il crée à chaque instant. De plus, il se trouve en permanence à l'intérieur de celles créées précédemment. Tout le monde peut faire l'expérience du phénomène : l'observateur fixe ressent le son très faible des premières sphères très dilatées, puis l'intensité augmente jusqu'à ce que l'objet volant soit au plus près et diminue enfin jusqu'à extinction.

De plus, le déplacement du point d'émission des sphères de perturbation donne naissance à l'effet Doppler. [13]







I.4.2. Écoulement sonique :

Si Ma = 1, l'objet volant colle en permanence à l'avant de toutes les sphères crées précédemment qui se retrouvent donc toutes tangentes à un plan perpendiculaire au mouvement de l'objet volant. La superposition d'une multitude de petites perturbations crée une grosse perturbation qui augmente considérablement la résistance de l'air : c'est le mur du son. [13]



Figure (I.2) : propagation de l'onde dans un milieu en mouvement sonique [13]

I.4.3 Écoulement supersonique :

Quand Ma > 1, l'objet volant laisse au contraire toutes les sphères de perturbation derrière lui. Un raisonnement simple montre qu'elles sont toutes tangentes à un cône appelé cône de Mach. [13]





Figure (I.3) : propagation de l'onde dans un milieu en mouvement supersonique [13]



Figure (I.4) : un avion passe le mur du son [18]

Les considérations qui précèdent donnent une idée de l'importance du nombre de Mach mais la réalité est nettement plus compliquée.

On distingue généralement les plages de vitesses suivantes :

Régime	Mach	km.h ⁻¹	m.s ⁻¹	Caractéristiques générales de l'aéronef
Subsonique	<1,0	<1 230	<340	Avions à hélices et avions commerciaux à réaction
Transsonique	0,8-1,2	980-1 475	270-410	Angle de flèche légèrement positif
Supersonique	1,0-5,0	1 230- 6 150	340- 1 710	Bords plus affutés
Hypersonique	5,0- 10,0	6 150- 12 300	1 710- 3 415	Revêtement en nickel-titane refroidi, forme très compacte, petites ailes
Hypersonique « haut »	10,0- 25,0	12 300- 30 740	3 415- 8 465	Tuiles thermiques en silice
Vitesse de rentrée atmosphérique	>25,0	>30 740	>8 465	Bouclier thermique ablatif, pas d'ailes, forme de capsule spatiale

Tableau (I.1) : représente des différents régimes des écoulements [13]

I.4.4. Écoulement Hypersonique :

En aérodynamique, les vitesses hypersoniques sont des vitesses qui sont hautement supersoniques. En général, on considère que ce régime d'écoulement est atteint à partir d'un Mach de 5 environ. Le régime hypersonique est un sous-élément du régime supersonique.

Le régime d'écoulement hypersonique est atteint lorsque des réactions de dissociation moléculaire sont présentes au sein du gaz en écoulement : ce dernier peut être localement

tellement chaud qu'un plasma se crée. Les propriétés habituelles de l'écoulement sont alors souvent modifiées (couche limite, turbulence).

L'étude des écoulements hypersoniques nécessite des souffleries très spéciales, ou l'utilisation de codes de calcul qui nécessitent la prise en compte de la dissociation moléculaire. [13]

Les écoulements hypersoniques sont intéressants principalement pour l'étude des écoulements rencontrés lors des rentrées atmosphériques :

- 1. autour des têtes de rentrée de missiles balistiques .
- 2. autour des navettes ou capsules spatiales.

I.5. Quelques aéronefs hypersoniques :

Aéronef hypersonique expérimental HTV-2 (Mach 20).

Planeur hypersonique Avangard (Mach 20).

Planeur hypersonique "Advanced HypersonicWeapon" en développement par l'armée américaine (Mach 17)

Missile antiaérien 40N61 du futur système de défense antimissile S-400F2 et S-500 (Mach 12). [5]. [6]

Missile anti-missile Sprint (Mach 10).

Missile aérobalistique hypersonique Russe Kinjal (Mach 10).

Planeur hypersonique porteur de charges nucléaires chinois, DF-ZF/Wu-14 (Mach 10).

Prototype d'avion sans pilote hypersonique X-43 Scramjet (un peu moins de Mach 10).

Missile du système antibalistique américain THAAD (Mach 8)

Chapitre I :

Missile de croisière hypersonique Zircon (Mach 8).

Missile furtif quasi-balistique 9M723 utilisé dans le système de missile courte portée Iskander-M (Mach 7).

Missile de croisière hypersonique BrahMos-II en développement conjointement par la Russie et l'Inde (Mach 7).

Missile antiaérien 48N63, 48N6DM4 du système de défense antimissile S-400 Triumph (Mach 6,54). [7].[8]

Prototype d'avion sans pilote hypersonique X-51 Wave Rider (Mach 6).

Prototype d'aéronef hypersonique chinois Xingkong 2 (Mach 6).

I.6. Les type des ondes de choc :

Une onde de choc est un type d'onde, mécanique ou d'une autre nature, associé à l'idée d'une transition brutale. Elle peut prendre la forme d'une vague de haute pression, et elle est alors souvent créée par une explosion ou un choc de forte intensité.

Ou mouvement imposé d'une manière quelconque à un gaz peut s'interpréter en considérant une succession de petites perturbations qui se propagent à la célérité du son. Si leur intensité est suffisante, elles impressionnent nos oreilles.

Dans certaines conditions, elles peuvent être confinées dans une zone à l'extérieur de laquelle aucun son n'est audible. Ce phénomène, appelé onde de choc, se rencontre dans de nombreux problèmes de dynamique des gaz, tout particulièrement en aérodynamique supersonique

Un mobile crée des ondes de choc lorsque sa vitesse devient supérieure à la célérité du son. Il est permis de dire qu'un choc se produit lorsque le mobile rencontre des particules gazeuses qui n'ont pas été prévenues de son arrivée.

I.6.1 .Onde de choc normale (droite) :

La vitesse de propagation d'une onde de choc dépend conditions de pression et densité de part et d'autre de choc .Dans le cas où la vectrice vitesse est perpendiculaire au front du choc.

Les ondes de choc normal peuvent se produire dans la section divergente d'une tuyère.



Figure (I.5) : onde de choc normal dans une section divergente d'une tuyère [19]

Conditions de part et d'autre du choc :

Choc

Amont

 P_1,T_1,ρ_1,M_1

Ecoulement isentropique

 P_2, T_2, ρ_2, M_2

Aval

Ecoulement isentropique

Saut l'entropie

Un choc droit est une recompression brutale, elle vérifie :

$$P_1 < P_2 \rho_1 < \rho_2 T_1 < T_2 M_1 > M_2$$

Relation d'Hugoniont :

Conservation de la masse : Sur une surface S de choc fixée, on a :

$$\left|\dot{Q_m}\right| = \rho_1 u_1 S = \rho_2 u_2 S \tag{I.6}$$

On a $\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{u_2}{u_1} = \frac{M_2 c_2}{M_1 c_1}$ Ou $\frac{P_2}{P_1} = \frac{M_1}{M_2} \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{\frac{1}{2}}$ par la loi d'état.

Conservation de la quantité de mouvement :

$$|\dot{Q_m}|(u_2 - u_1) = (P_1 - P_2)S$$
 (I.7)

On a en introduisant le nombre de Mach, la relation $\frac{P_2}{P_1} = \frac{1+\gamma M_1^2}{1+\gamma M_2^2}$

Conservation de l'énergie :

$$h_1 + \frac{u_1^2}{2} = h_2 + \frac{u_2^2}{2} \tag{I.8}$$

On passe ici par la conservation de l'énergie totale .car le choc casse la continuité isentropique, on ne peut donc pas utiliser saint-venant. Seule l'énergie totale est conservée.

En introduisant les chaleurs spécifiques, on a
$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{1 + \frac{\gamma - 1}{2}M_2^2}{1 + \frac{\gamma - 1}{2}M_1^2}$$
 (I.9)

Grandeurs totales : On peut considérer que par la conservation de l'enthalpie totale uniquement, seule la température totale est conservée, à l'inverse de la pression et de la densité totale.

Les relations précédentes mènent à
$$M_2^2 = \frac{M_1^2 + \frac{2}{\gamma - 1}}{\frac{2\gamma}{\gamma - 1}M_1^2 - 1}$$
 (I.10)

La relation est bijective, on peut aussi remarquer que $\underset{M_{1\to+\infty}^2}{\lim}M_2^2 = \frac{\gamma-1}{2\gamma}$ (la relation ne se vaut plus en hypersonique. Les gaz devenant ionisée)

On obtient les trois relations suivantes :

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{2\gamma}{\gamma+1} M_1^2 - \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{(\gamma+1)M_1^2}{2+(\gamma-1)M_1^2} \qquad M_1^2 = \frac{(\gamma+1)P_2 + (\gamma-1)P_1}{2\gamma P_1}$$
(I.11)

I. 6.2 Onde de choc oblique :

Les ondes de choc obliques se développent lorsque l'écoulement change de direction et que ce changement de direction s'accompagne d'une compression à travers l'obstacle ce qui provoque une déclaration d'un écoulement et en parallèle une augmentation de pression. Elle correspond à la situation ou l'onde de choc incliné d'un angle ϵ par rapport l'écoulement incident (amont du choc). L'angle β donne l'inclinaison de l'écoulement aval (qui est dévié par l'onde de choc). Il en résulte que l'angle δ représente le changement de direction de

l'écoulement . On notera aussi respectivement V_1 et V_2 les vitesses en amont et en aval de l'onde de choc. [9]

$$\boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\beta} \tag{I.12}$$

Avec :

- δ : La déflexion.
- \mathbb{C} : L'angle entre l'onde de choc et l'écoulement en amont de choc.

 β : L'angle entre l'écoulement en aval du choc et plan du choc.

Conditions de part et d'autre du choc :

Les ondes de choc obliques apparaissent au niveau des rampes de compression (un changement d'orientation de la paroi)

M ₀ >1	Onde de choc oblique	M L'M o rent and
	Focalisation	Ecould 2
Écoulement	Ondes de Mach	
	8 8 8	x

Figure (I.6) : onde de choc oblique [20]





 U_1 : La vitesse en amont.

 U_{1n} : Le composant de U_1 perpendiculaire à l'onde de choc.

 U_{1t} : Le composant de U_1 parallèle à l'onde de choc.

 U_2 : La vitesse en aval.

 U_{2n} : Le composant de U_2 perpendiculaire à l'onde de choc.

 U_{2t} : Le composant de U_2 parallèle à l'onde de choc.

Relation d'Hugnoiot :

Conservation de la masse : $\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2$ (I.13)

Conservation de la quantité de mouvement : on projette suivant $\vec{n}et\vec{\tau}$

Suivant $\vec{n}: P_1 + \rho_1 u_{1n}^2 = P_2 + \rho_2 u_{2n}^2$

Suivant $\vec{\tau}$: $\rho_1 u_{1\tau} u_{1n} = \rho_2 u_{2\tau} u_{2n}$

Conservation de l'énergie :
$$h_1 + \frac{u_{1n}^2 + u_{1\tau}^2}{2} = h_2 + \frac{u_{2n}^2 + u_{2\tau}^2}{2}$$
 (I.14)

Dans la direction normale au choc : $u_{1n} > u_{2n}$

Dans la direction tangentielle : $u_{1\tau} = u_{2\tau}$

Il y a donc déviation de l'écoulement vers l'onde de choc.

Dans la direction normale au choc, les relations obtenues pour les chocs droits sont toujours valables, il suffit de remplacer M_1 par $M_{1n} = \frac{u_{1n}}{c_1} = M_1 \sin(\alpha)$

Ainsi :

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{2\gamma}{\gamma+1} M_1^2 \sin^2(\alpha) - \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{(\gamma+1)M_1^2 \sin^2(\alpha)}{2+(\gamma-1)M_1^2 \sin^2(\alpha)}$$
(I.15)

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{2\gamma}{\gamma - 1}M_1^2 \sin^2(\alpha) - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\right) \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} + \frac{2}{(\gamma + 1)M_1^2 \sin^2(\alpha)}\right)$$
(I.16)

I.6.3. Onde de choc attachée et détaché :

On dit pour un choc oblique qu'il est attaché ou détaché, s'il y a un changement de la déflexion $\ll \delta \gg$.

Si la valeur de δ devient plus élevée, $\delta max > \delta$ on dit que le choc oblique est détaché.

Si la valeur de δ devient plus petite, $\delta max < \delta$ on dit que le choc oblique est attaché.



Figure (I.8) : Représentation des configurations caractéristiques pour une onde de choc oblique attaché et détachée

I.6.4. Onde de choc conique :

Lorsqu'un avion se déplace à une vitesse proche de celle du son, les ondes sonores qui se propagent devant lui n'ont pas le temps de « s'échapper » : il se forme une barrière d'air très comprimé devant le nez de l'avion. Si l'avion va à une vitesse supersonique, il franchit le mur du son, libérant les ondes accumulées devant lui. Une onde de choc conique se forme le cône de Mach en générant un formidable bang. Plus l'avion va vite, plus l'angle d'ouverture au sommet du cône est faible. [10]

Celle-ci est alors délimitée par un cône (dit cône de Mach), dont le sinus du demi-angle au sommet est donné par le rapport des vitesses de l'onde et de l'avion. Plus il est rapide et plus le cône est étroit.



Figure (I.9) : Écoulement au voisinage du bord d'attaque



Figure (I.10) : Représentation d'une onde de choc conique [13]

I.6.5. Détente de Prandtl-Meyer :

La **détente de Prandtl-Meyer** est la détente isentropique d'un gaz à partir d'un milieu homogène, plan, en écoulement supersonique. Elle a été établie par Ludwig Prandtl et son élève Theodor Meyer [11].



Figure (I.11) : Détente de Prandtl-Meyer. [13]

Relation de Prandtl :

La relation de Prandtl établit la relation entre les vitesses en amont et en aval du choc. En partant de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. On exprime la pression à l'aide de la définition de la vitesse du son : $c^2 = \frac{\gamma P}{\rho}$. On tire donc :

$$\rho_1 V_1 \left(V_1 + \frac{c_1^2}{\gamma U_1} \right) = \rho_2 V_2 \left(V_2 + \frac{c_2^2}{\gamma U_2} \right)$$
(I.17)

Qui peut naturellement simplifie retenant compte de la conservation de la masse. $\rho_1 V_1 = \rho_2 V_2$. Donc :

$$\frac{c_1^2}{\gamma U_1} - \frac{c_2^2}{\gamma U_2} = V_2 - V_1 \tag{I.18}$$

On introduit alors la vitesse du son à l'état sonique associé aux états statiques (I.17) et (I.18) : elle vérifie :

$$c^{2} = \frac{\gamma + 1}{2}c_{*}^{2} - \frac{\gamma - 1}{2}V^{2}$$
 (I.19)

Où (c,V) peuvent être pris dans l'état (1) ou (2) :

$$c_1^2 = \frac{\gamma + 1}{2} c_*^2 - \frac{\gamma - 1}{2} V_1^2 \tag{I.20}$$

$$c_2^2 = \frac{\gamma + 1}{2}c_*^2 - \frac{\gamma - 1}{2}V_2^2 \tag{I.21}$$

Remplaçant (I.20) et dans (I.21) et en divise par (I.18) on trouve :

$$\frac{\gamma+1}{2\gamma V_1 V_2} c_*^2 + \frac{\gamma-1}{2\gamma} = 1$$
 (I.22)

D'où :

$$c_*^2 = V_1 V_2 \tag{I.23}$$

L'équation est appelée La relation de Prandtl, utilisé comme relation intermédiaire d'un choc normale :

A partir de l'équation (I.23) on obtient :

$$c_*^2 = V_1 V_2 = c_* c_* \Rightarrow 1 = \frac{V_1 V_2}{c_* c_*}$$
 (I.24)

D'où :

$$M_2^* = \frac{1}{M_1^*} \tag{I.24}$$

On remplace l'équation (I.19) dans (I.24) on obtient :

$$M_2^2 = \frac{1 + [(\gamma - 1/2)]M_1^2}{\gamma M_1^2 - (\gamma - 1)/2}$$
(I.25)

La relation est la seule pour les ondes de choc droites faisant intervenir le nombre de Mach après le choc. Toutes les autres sont définies en fonction du Mach en amont du choc.

Fonction de Prandtl-Meyer :

La relation entre la rotation de l'écoulement dans un faisceau de détente tel que celui de la figure s'exprime au moyen de la fonction de Prandtl-Meyer [11]. [12].

$$\theta = \nu(M_2) + \nu(M_1) \tag{I.26}$$

Avec, pour un gaz parfait :

$$v(M) = \sqrt{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \arctan \sqrt{\frac{\gamma-1}{\gamma+1} - (M^2 - 1)} - \arctan \sqrt{M^2 - 1}$$
(I.27)

CHAPITRE II :

ÉNERGIE VIBRATIONNELLE ET LA DISSOCIATION MOLÉCULAIRE

II.1. Introduction :

En quelques années passé, les solutions apportées aux problèmes de l'aérodynamique supersonique, on supposait que l'air était généralement un gaz inerte et que le rapport des chaleurs spécifiques était constant plus récemment, certains de ces problèmes ont été résolus, permettant certaines réactions chimiques ainsi que l'excitation des vibrations des molécules.

Dans ce cas, il a été supposé que l'air est en équilibre thermodynamique partout où le flux d'air s'écoule.

La température du côté aval de l'onde de choc, qui se forme lorsque le corps se déplace dans un gaz à des nombres de Mach élevés, est suffisamment élevée pour induire des réactions chimiques et l'excitation de vibrations moléculaires. Si ces processus se produisent très lentement, les réactions et les vibrations peuvent être considérées comme gelées et la solution gamma constante est applicable.

Si ces processus se produisent très lentement, les réactions et les vibrations peuvent être considérées comme gelées et la solution gamma constante est applicable.

Un troisième cas qui peut se présenter est qu'une réaction particulière n'est ni suffisamment rapide pour être reclassée comme gelée, ni suffisamment lente :

Pour être considérée comme étant en équilibre chimique. Cela se produit lorsque le temps caractéristique de la réaction est comparable au rapport entre la longueur caractéristique du problème et la vitesse d'écoulement. Les problèmes d'écoulement avec des taux de réaction chimique finis ou des taux finis d'excitation des vibrations moléculaires sont considérablement plus difficiles à résoudre que les problèmes d'écoulement gelé ou d'équilibre.

Le présent article est consacré au développement d'une méthode générale permettant de traiter les écoulements gelés et d'équilibre ainsi que les écoulements hors équilibre dans des situations simples, l'idée centrale étant d'introduire l'énergie vibratoire et le degré de dissociation comme deux éléments supplémentaires.

Si le processus mesuré par l'une ou l'autre de ces variables est figé ou en équilibre, alors l'affirmation formelle de ce fait permet d'éliminer cette variable des équations.



Figure (II.1) : Schéma de l'interaction de l'écoulement hypersonique avec le bouclier thermique [13]



Figure (II.2) : Rentrée de la Capsule dans l'atmosphère de la terre [13]



Figure (II.3) : diagramme montre l'évolution de l'altitude de rentrée en fonction de la vitesse

II.2. Echauffement cinétique :

Dans le domaine hypersonique, la transition de couche limite joue un rôle déterminant pour ce qui concerne la distribution des flux de chaleurs pariétaux intenses autour du point d'arrêt. La prévision de ce phénomène présente donc un grand intérêt ayant une incidence directe sur la définition du bouclier thermique du véhicule de rentrée.

L'évaluation de cet échauffement cinétique résulte du calcul des couches limites qui se développent le long de la paroi du véhicule. Les forces de viscosité à l'intérieur de la couche limite effectuent un travail de cisaillement sur le fluide. Ce processus, est souvent appelé échauffement aérodynamique ou cinétique, augmente également la température de surface des corps placés dans un écoulement à grande vitesse (essais aux souffleries hypersoniques) ou des corps déplaçant a grandes vitesses dans un fluide au repos (navette spatiale, engaine balistique).


Figure (II.4) : Echauffement cinétique en régime hypersonique autour d'un corps arrondi.

II.3. Ecoulement au voisinage du nez de la navette :

On va maintenant étudier l'écoulement au voisinage du nez de la navette spatiale en vol hypersonique lors de sa rentrée dans l'atmosphère. Devant la navette, au nez arrondi en vol hypersonique stationnaire à un nombre de Mach très élevé (vitesse de l'engin par rapport à la vitesse du son dans l'air au repos), se produit un choc détaché supposé droit sur l'axe de symétrie passant par le point d'arrêt du nez de l'engin. C'est le cas le plus intéressant car les températures correspondantes sont très élevées.





V : représente la vitesse de rentrée,

M : nombre de Mach.

 P_1, T_1, C_1 , Sont respectivement la pression, la température et la vitesse de son au point considéré.

II.4. Effets de gaz réel aux vitesses hypersonique :

A des températures très élevées atteintes en aval des ondes de choc, l'écoulement subit diverses transformations telles que l'excitation de l'énergie de vibration, la dissociation des molécules et l'ionisation des atomes formés. [17] [15]

Les phénomènes sont endothermiques de sorte que les températures sont très inférieures à celles calculées en gaz parfait. A titre d'exemple, pour un mobile entrant dans l'atmosphère à une vitesse de 4 Km/s, l'air est porté à une température de 5000 K environ, alors que, sans effet de gaz réel cette température est de 8000 K comme l'indique la figure (II.5). Le degré d'ionisation est de l'ordre de 10⁻⁵, il reste faible, mais suffisant dans ce cas là pour perturber les liaisons radio avec l'engin en cours de la rentrée au point de les supprimer complètement.



Cas de gaz réel :



Effets de gaz réel sur la température derrière l'onde de choc droite

II.5. Vibration moléculaire :

Une vibration moléculaire se produit lorsque les atomes d'une molécule sont dans un mouvement périodique pendant que la molécule dans son ensemble subit un mouvement de translation et de rotation. La fréquence du mouvement périodique est appelée fréquence de vibration. Une molécule non-linéaire constituée de n atomes possède 3n-6 modes normaux de vibration, alors qu'une molécule linéaire n'en possède que 3n-5, puisque la rotation autour de son axe moléculaire ne peut être observée. Une molécule diatomique ne possède ainsi qu'un mode normal de vibration. Les modes normaux des molécules polyatomiques sont indépendants les uns des autres, chacun d'entre eux impliquant des vibrations simultanées des différentes parties de la molécule. [17]

En première approximation, le mouvement de vibration normal peut être décrit comme une sorte de mouvement harmonique simple. Dans cette approximation, l'énergie de vibration est une fonction quadratique (parabole) des déplacements atomiques et la première harmonique est de deux fois la fréquence de la fréquence fondamentale. En réalité, les vibrations sont anharmoniques et la première harmonique a une fréquence qui est légèrement inférieure à deux fois la fondamentale. L'excitation des harmoniques supérieures demande progressivement de moins en moins d'énergie supplémentaire et conduit à la dissociation de la molécule, l'énergie potentielle de la molécule ressemblant plus à un potentiel de Morse.

Les atomes à des sphères rigides et les molécules à des atomes liées par des ressorts rigides. Au cours des collisions inélastiques qui ont lieu entre les particules au sein du fluide,

l'énergie d'une molécule ou d'un atome se répartit sur les différents modes de stockage suivants [15]

- Energie cinétique de translation liée au mouvement d'agitation brownien des particules.



(a). Energie de translation

- Energie de **rotation** liée au mouvement de rotation qu'acquiert la molécule autour de son centre d'inertie par suite des chocs avec d'autres particules. Les atomes ne sont pas sensibles à la rotation en raison d'une inertie de rotation pratiquement nulle.



(b). Energie de rotation

- Energie de **vibration** des molécules liée au mouvement de vibration des atomes de la molécule le long de l'axe formé par la liaison inter-atomique.



(c). Energie de vibration





II.5.1. Grandeurs thermodynamiques d'un gaz parfait :

Si les différentes formes d'énergie d'une particule, atome ou molécule, sont supposées indépendantes les unes des autres, c'est à dire s'il n'y a pas couplage entre les différents degrés de liberté de la particule (degrés de translation, rotation, vibration, électronique et nucléaire), l'énergie d'une particule a pour valeur :

$$E = E_i^t + E_j^r + E_k^v + E_l^e + E_m^n$$
(II.1)
translation rotation vibration électronique nucléaire

T 1)

II.5.2. Degré de liberté d'une molécule :



Gaz parfait monoatomique

- 3 degrés de liberté de translation
- 0 degrés de liberté de rotation
- ➢ 0 degrés de liberté de vibration

Gaz parfait diatomique :

- 3 degrés de liberté de translation
- 2 degrés de liberté de rotation
- 2 degrés de liberté de vibration

Fonction thermodynamique l'énergie de vibration est donnée par :

$$e_{v} = \frac{r\theta_{v}}{exp\left(\frac{\theta_{v}}{T}\right) - 1} \tag{II.5}$$

Ou
$$r = \frac{R}{M_{gaz}}$$
, le gaz est diatomique.

Avec :

M : la masse molaire du gaz

R : constante des gaz, elle vaut 8.316

La rotation des molécules autours de trois axes orthogonaux (X, Y, Z).

$$e_{rot} = r_t \left(1 - \frac{\theta_t}{\theta_t + 3T} \right) \tag{II.6}$$

II.6. La dissociation :

En chimie, l'énergie de dissociation d'une liaison (D0) réfère à l'une des mesures de l'énergie d'une liaison chimique. Elle correspond au changement d'enthalpie lors d'un clivage homolytique1 avec des réactifs et des produits de la réaction d'hémolyse à 0 K (zéro absolu). D'ailleurs, l'énergie de dissociation d'une liaison est parfois appelée l'enthalpie de dissociation d'une liaison. Cependant, ces termes ne sont pas strictement équivalents car l'enthalpie de dissociation d'une liaison réfère à la réaction de dissociation dans les conditions normales de température et de pression. Cela amène une différence d'environ 1,5 kilocalorie par mole (kcal/mol), ou 6 kJ/mol, dans le cas d'une liaison hydrogène dans une grande molécule organique. [13] [15] [17]

II.6.1. Liste d'énergies de dissociation :

Liaison Liaison		Énergie de dissociation d'une liaison			Note
		(kcal/mol)	(kJ/mol)	(eV)	
С–Н	liaison carbone- hydrogène	98	410	4,25	
C–F	liaison carbone-fluor	117	490	5,08	L'une des plus fortes liaisons simples avec le carbone.
C–Cl	liaison carbone- chlore	79	331	3,43	
C–Br	liaison carbone- brome	69	285	2,95	
C–C	liaison carbone- carbone	83-85	347–356	3,60– 3,69	
ClCl	dichlore	58	242	2,51	Se distingue par sa couleur jaunâtre.
Br–Br	dibrome	46	192	1,99	
I–I	diiode	36	151	1,57	
H–H	dihydrogène	104	436	4,52	

Chapitre II:

O–H	hydroxyle	110	460	4,77	
0=0	dioxygène	119	497	5,15	
N≡N	diazote	226	945	9,79	L'un des liens les plus forts.

Tableau (II.1) : Liste d'énergie de dissociation de liaisons [13]

Les propriétés de l'air sont notablement modifiées et la composition du mélange n'est pas nécessairement à l'équilibre chimique, l'écoulement est le lieu des réactions chimiques et il est dit relaxé ou hors équilibre chimique et ionique. En outre la paroi peut participer aux réactions par le biais du pouvoir catalytique du matériau qui favorise ou non la recombinaison des espèces chimique.

L'enchaînement des phénomènes déroule comme suit : tout d'abord sous l'effet de l'augmentation de la température la vibration des molécules commence à avoir lieu, l'oscillation s'amplifie et les atomes se séparent, c'est le phénomène de dissociation des molécules. Si la température est encore très élevée, la collision entre les atomes et les molécules est très intense et donne lieu à l'ionisation. Dans l'ordre on a la vibration de l'oxygène puis de l'azote, dissociation de l'oxygène puis de l'azote, ainsi que l'ionisation des atomes et des molécules

II.6.2. Constante d'équilibre chimique :

En chimie, une constante d'équilibre caractérise l'état d'équilibre d'un système chimique. Elle est donc associée à un état du système qui ne peut pas évoluer de manière spontanée. La valeur de la constante d'équilibre dépend uniquement de la réaction chimique considérée et de la température. Les constantes d'équilibre sont généralement données à 25 °C [13].

Chapitre II:

Les principales constantes d'équilibre sont présentées dans le tableau suivant:

Constante d'équilibre	Symbole	Type d'équilibre
Produit ionique de l'eau	Ke	Dissociation de l'eau
Produit de solubilité	Ks	Équilibre hétérogène entre une substance faiblement soluble et ses ions dans une solution saturée
Constante de dissociation (Constante d'acidité et Constante de basicité)	K_{a} et K_{b}	Dissociation d'un acide faible ou d'une base faible
Constante de complexation	ßn	Formation d'un ion complexe
Constante de partage ou de distribution	K _D	Équilibre de distribution entre des solvants non miscibles

Tableau (II.2) : les principales constantes d'équilibre [13]

Les constantes définies dans l'expression de la constante d'équilibre, qui apparaît dans l'expression de la constante inverse de la vitesse de réaction sont listées dans le tableau cidessous et la constante d'équilibre (Keq) est défini comme suit [15] :

$$K_{eq}(T) = \exp(C_0 + C_1 z + C_2 z^2 + C_3 z^3 + C_4 z^4) \quad , \qquad z = \frac{10000}{T} \quad (\text{II.7})$$

Réactions	C_0	Cı	C ₂	Сз	<i>C</i> ₄				
Réactions de dissociation									
$R_1 \rightarrow R_{11}$: $O_2 + m \Leftrightarrow O + O + m$	1.335	-4.127	-0.616	0.096	-0.005				
$R_{12} \rightarrow R_{22}: N_2 + m \iff N + N + m$	3.898	-12.611	0.683	-0.118	0.006				
$R_{22} \rightarrow R_{33}: NO + m \iff N + O + m$	1.549	-7.784	0.228	-0.043	0.002				
Reactions associative									
$R_{34}: N_2 + O \iff NO + N$	2.349	-4.828	0.455	-0.075	0.004				
R_{35} : NO + O \Leftrightarrow N + O ₂	0.215	-3.657	0.843	-0.136	0.007				
$R_{36}: O + O_2^+ \iff O_2 + O^+$	-0.411	-1.998	-0.002	0.005	0.000				
$R_{37}: NO + O \iff N + O_2$	1.963	-3.116	0.692	-0.103	0.005				
R_{38} : O + NO ⁺ \Leftrightarrow NO + O ⁺	1.705	-6.223	0.522	-0.090	0.005				
$R_{39}: N_2 + O^+ \Leftrightarrow O + N_2^+$	2.391	-2.443	-0.080	0.027	-0.002				
R_{40} : N + NO ⁺ \Leftrightarrow NO + N ⁺	2.132	-5.550	-0.249	0.041	-0.002				
$R_{41}: O_2 + NO^+ \iff NO + O_2^+$	2.115	-4.225	0.524	-0.095	0.005				
R_{42} : $N + NO^+ \iff NO + N^+$	1.746	-3.838	-0.013	0.013	-0.001				

Tableau (II.3) : Coefficients des constantes d'équilibre [13]

CHAPITRE III :

ÉQUATIONS MATHÉMATIQUES ET DÉVELOPPEMENTS NUMÉRIQUES

Chapitre III: équations mathématiques et développements numériques

III.1. Introduction :

Les perspectives de l'industrie aérospatiale européenne et américaine on redonnée l'intérêt à l'étude des écoulements a grand nombre de Mach et forte incidence qui se produisent lors de la rentrée dans l'atmosphère d'une navette spatiale. Les conditions physiques réalisées dans l'écoulement autour d'un engin en régime hypersonique sont aux limites des possibilités de simulation expérimentale en raison notamment des températures très élevées et de l'atmosphère raréfiée.

On a recherché à évaluer les effets majeurs des phénomènes de gaz réel (dissociation chimique, déséquilibre chimique, etc.) sur un écoulement externe hypersonique dans les conditions typiques de la rentrée atmosphérique d'un engin spatial.

Notre travail consiste à faire un programme FORTON a l'aide des équations de dynamique de gaz et thermo-chimique, Il contient trois parties :

- La première partie est de calculer la partition de l'énergie de vibration en fonction de la température, ainsi que d'autre paramètres thermodynamiques.
- > La deuxième partie est de faire une application sur une onde de choc droite
- La troisième partie est de faire une application sur une dissociation des molécules à haute température avec une onde de choc droite
- ♦ Dans les trois cas, on fait un exemple de calcule pour trois gaz (O_2 , N_2 , AIR).

III.2. Calcul de première partie :

III.2.1. L'équation d'énergie de vibration :

La molécule est successible de tourner sur elle-même le mouvement de rotation s'exprime avec les molécules les plus simples, soit les molécules diatomiques. Une vibration moléculaire se produit lorsque les atomes d'une molécule sont dans un mouvement périodique pendant que la molécule dans son ensemble subit un mouvement de translation et de rotation. L'énergie de vibration est donnée par :

$$e_{v} = \frac{r\theta_{v}}{exp\left(\frac{\theta_{v}}{T}\right) - 1}$$

Où
$$r = \frac{R}{M_{gaz}}$$
, le gaz est diatomique.

Avec :

M : la masse molaire du gaz

R : constante des gaz, elle vaut 8.316

La rotation des molécules autours de trois axes orthogonaux (X, Y, Z).

L'énergie de gaz parfait est calculée comme suit :

$$e_p = \frac{5}{2}rT \tag{III.1}$$

III.2.2. L'équation de partition d'énergie :

En physique statistique, la fonction de partition est une grandeur fondamentale qui englobe les propriétés statistiques d'un système à l'équilibre thermodynamique.

C'est une fonction de la température et d'autres paramètres, tels que le volume contenant un gaz par exemple. La plupart des variables thermodynamiques du système, telles que l'énergie totale, l'entropie, l'énergie libre ou la pression peuvent être exprimées avec cette fonction et ses dérivées.

Il y a en réalité plusieurs types de fonction de partition, chacune correspondant à un ensemble statistique (ou de façon équivalente, à différents types d'énergie libre). La fonction de partition canonique s'applique à un ensemble canonique dans lequel le système peut échanger de la chaleur avec son environnement à température, volume et nombre de particules fixes. La fonction de partition grande canonique s'applique à un ensemble grand canonique dans lequel le système peut échanger de la chaleur et des particules avec son environnement à température, volume et potentiel chimique fixés.

La partition est donnée par la formule suivante :

$$partition = \frac{e_v}{C_v T + e_v}$$
(III.2)

Pour les gaz à haute température, l'énergie tend vers rT.

Pour calcule $C_{P_{réel}}$:

Le $C_{P_{r\acute{e}el}}$ est la somme du $C_{P_{vibration}}$ et $C_{P_{gaz parfait}}$.

Le $C_{P_{vibration}}$ est donnée par la formule suivante :

$$C_{P_{vib}} = \frac{de_v}{dT} = r \left(\frac{\theta_v}{T}\right)^2 \frac{exp\left(\frac{\theta_v}{T}\right)}{\left[exp\left(\frac{\theta_v}{T}\right) - 1\right]^2}$$
(III. 3)

Le $C_{P_{gaz parfait}}$ est calculé comme suit :

$$C_{P_{gp}} = \frac{7}{2}r \tag{III.4}$$

Calcul du pourcentage du $C_{P_{vibration}}$ dans $C_{P_{réel}}$:

$$\% C_{P_{vib}} = \frac{C_{P_{vib}}}{C_{P_{r\acute{e}el}}} \times 100 \tag{III.5}$$

Calcul du C_{Pspectrale}

Pour l'air : $1001.1058 + 4.0661289 \times 10^{-2}T - 6.337699 \times 10^{-4}T^2 + 2.7474759 \times 10^{-6}T^3 - 4.0338459 \times 10^{-9}T^4 + 3.0697736 \times 10^{-12}T^5 - 1.3509355 \times 10^{-15}T^6 + 3.472262 \times 10^{-19}T^7 - 4.8467531 \times 10^{-23}T^8 + 2.8411878 \times 10^{-27}T^9$

Pour O_2 : 3.1375 + 1.6361 × 10⁻³ T - 8.0527 × 10⁻⁷T² + 2.2743 × 10⁻¹⁰T³ - 3.1230 × 10⁻¹⁴T⁴ + 1.6031 × 10⁻¹⁸T⁵

Pour N_2 : 3.3728 + 2.3040 × 10⁻⁴T + 6.0395 × 10⁻⁷T² - 3.7855 × 10⁻¹⁰T³ + 8.2344 × 10⁻¹⁴T⁴ - 8.2344 × 10⁻¹⁸T⁵

Calcul du coefficient isentropique γ

$$\gamma = \frac{C_P}{C_v} = \frac{C_{P_{gp}} + C_{P_{vib}}}{C_{v_{gp}} + C_{v_{vib}}}$$
(III.6)

Pour un gaz diatomique :

$$\gamma = \frac{C_P}{C_v} = \frac{\frac{7}{2}r + C_{P_{vib}}}{\frac{5}{2}r + C_{v_{vib}}}$$
(III.7)

Les températures caractéristiques de vibration de différents gaz sont données par le tableau suivant :

Gaz	02	N ₂	Air
$\boldsymbol{\theta}_{v}(\ \ \mathbf{K})$	2274	3392.7	3052

Tableau (III.1) : Température de vibration des différents gaz

Les températures caractéristiques de rotation sont données par le tableau suivant :

Gaz	02	N ₂
$\theta_r(^{\circ}K)$	2	2.86

Tableau (III.2) : Température de rotation des différents gaz

III.3. Calcul deuxième partie :

Dans cette étape, on va utiliser des équations base pour les calculer l'état 2 après l'onde de choc droite d'un gaz parfait et un gaz réel en tenant compte de vibration.



III.3.1. Les équations de base pour onde de choc normale :

L'état 2 en gaz parfait, peut être déterminé facilement en utilisant les équations de base pour onde de choc normale.

$$P_{2gp} = P_1 \times \left[1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1} (M_1^2 - 1) \right]$$
(III.8)

$$T_{2gp} = T_1 \frac{1}{M_1^2} \left[1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1} (M_1^2 - 1) \right] \left[1 + \frac{\gamma-1}{\gamma+1} (M_1^2 - 1) \right]$$
(III.9)

$$\rho_{2gp} = \rho_1 \frac{1 + \frac{\gamma + 1}{2} M_1^2}{1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_1^2} \tag{III.10}$$

$$M_{2gp}^2 = \frac{1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_1^2}{\gamma M_1^2 - \frac{\gamma - 1}{2}}$$
(III.11)

Pour un gaz réel, les paramètres de l'état 2 sont calculés à partir des équations suivantes :

$$\rho_1 V_1 = \rho_2 V_2 \tag{III.12}$$

$$P_1 + \rho_1 V_1^2 = P_2 + \rho_2 V_2^2 \tag{III.13}$$

$$C_{p_{r\acute{e}el}}T_1 + \frac{1}{2}V_1^2 = C_{p_{gp}}T_2 + \frac{1}{2}V_2^2 + e_{\nu_2}$$
(III.14)

$$\frac{P_2}{\rho_2} = rT_2$$

Avec

$$e_{\nu 2} = \frac{r\theta_{\nu}}{exp\left(\frac{\theta_{\nu}}{T_2}\right) - 1} \tag{II.15}$$

$$C_{p_{gp}} = \frac{\gamma r}{\gamma - 1} \text{ Avec } \gamma = 1.4$$

$$C_{p_{r\acute{e}el}} = \frac{de_v}{dT} = r \left(\frac{\theta_v}{T_1}\right)^2 \frac{exp\left(\frac{\theta_v}{T_1}\right)}{\left[exp\left(\frac{\theta_v}{T_1}\right) - 1\right]^2}$$
(III.16)

$$C_{p_{r\acute{e}el}} = C_{p_{vib}} + C_{p_{gp}} \tag{III.17}$$

Troisième étape :

a) 1^{ere}partie:

Dans cette partie, on calcul quelques paramètres initiaux.

Pour la molécule $\ll N_2 \gg$:

$$r_{N_2} = \frac{R}{M_{N_2}} \tag{III.18}$$

$\gamma_{diatomique} = 1.4$

$$C_{p_{N_2}} = \frac{7}{2}rN_2$$
 (III.19)

Pour l'atome $\ll N \gg$:

$$r_N = \frac{R}{M_N} \tag{III.20}$$

$\gamma_{monoatomique} = 1.67$

$$C_{p_N} = \frac{5}{2} r_N \tag{III.21}$$

$$C_{\nu_N} = \frac{3}{2} r_N \tag{III.22}$$

Calcul des paramètres de performances de l'état (1) avant le choc :

$$V_1 = M_1 \sqrt{\gamma_{dia} \times r_{N_2} \times T_1}$$
(III.23)

$$\rho_1 = \frac{P_1}{r_{N_2} \times T_1}$$
(III.24)

$$e_{v_1} = \frac{r_{N_2} \times \theta_{v_{N_2}}}{exp\left(\frac{\theta_{v_{N_2}}}{T_1}\right) - 1}$$
(III. 25)

b) 2^{eme}partie :

Dans cette 2^{eme} partie, on calcul les performances thermodynamiques d'un écoulement après une onde de choc normale, dans le cas d'un gaz parfait.

$$P_2 = P_1 \left[1 + \frac{2 \times \gamma_{dia}}{\gamma_{dia} + 1} (M_1^2 - 1) \right]$$
(III.26)

$$T_{2} = T_{1} \left[\frac{1}{M_{1}^{2}} \left(1 + \frac{2 \times \gamma_{dia}}{\gamma_{dia} + 1} (M_{1}^{2} - 1) \right) \left(1 + \frac{\gamma_{dia} - 1}{\gamma_{dia} + 1} (M_{1}^{2} - 1) \right) \right] \quad (\text{III.27})$$

$$\rho_2 = \rho_1 \left(\frac{\frac{\gamma_{dia} + 1}{2} M_1^2}{1 + \frac{\gamma_{dia}}{2} M_1^2} \right)$$
(III.28)

$$M_2 = \sqrt{\frac{1 + \frac{\gamma_{dia} - 1}{2} M_1^2}{\gamma_{dia} \times M_1^2 - \frac{\gamma_{dia} - 1}{2}}}$$
(III.29)

$$V_2 = M_2 \sqrt{\gamma_{dia} \times \rho_2 \times T_2} \tag{III.30}$$

III.4. Calcul troisième partie :

Dans cette partie, on calcul les performances thermodynamiques à l'équilibre après une dissociation à haute température. Dans notre cas on prend le cas le plus simple, une dissociation d'une molécule, qui se dissocie en deux atomes, par exemple :

$$N_2 \leftrightarrow 2N$$

III.4.1. Constant d'équilibre chimique de réaction :

A l'équilibre chimique, la constante d'équilibre K_{eq} est calculée en fonction de la température seulement à partir de la relation empirique suivante :

$$K_{eq} = exp(A_0 + A_1Z + A_2Z^2 + A_3Z^3 + A_4Z^4)$$
(III.31)
Où $Z = \frac{10000}{T_{2es}}$

Les constantes A_0 à A_4 relativement à l'azote, sont donnés par le tableau suivant :

Réaction	A ₀	A ₁	<i>A</i> ₂	<i>A</i> ₃	A ₄
$N_2 + \boldsymbol{0} = 2N + \boldsymbol{0}$	3.898	-12.611	0.683	-0.118	0.006

$$K_{eq_j}(T) = exp \left[A_{1,j} + A_{2,j}Z + A_{3,j}Z^2 + A_{4,j}Z^3 + A_{,j}Z^4 \right]$$

Z = 10000/T

réaction	A ₀	<i>A</i> ₁	<i>A</i> ₂	<i>A</i> ₃	A ₄
$\boldsymbol{0}_2 \leftrightarrow \boldsymbol{0} + \boldsymbol{0}$	1.335	-4.127	-0.616	-0.093	-0.005
$N_2 \leftrightarrow N + N$	3.898	-12.611	0.683	-0.118	0.006

Tableau (III.3) : les constantes relatives de réaction

Il y'a signalé, qu'on démarre les calculs en estiment que :

$$\begin{cases} T_{2_{es}} = t_{2_{gp}} \\ P_{2_{es}} = P_{2_{gp}} \end{cases}$$

Le constant d'équilibre d'une telle réaction est donnée par :

$$K_p = R \times T_{2_{es}} \times K_{eq} \tag{III.32}$$

Le constant d'équilibre est reliée aussi, aux concentrations molaires par la formule suivante :

$$K_{p} = \frac{Y_{N}^{2}}{Y_{N_{2}}^{2}} \left(\frac{P_{2es}}{P_{0}}\right)$$
(III.33)

III.4.2. Concentration molaire :

Où P_0 est une pression de référence égale à 1 atm .

Cette équation plus celle de bilan d'espèces suivante :

$$Y_{N_2} + Y_N = 1$$
 (III.34)

Permet de calculer les concentrations molaires Y_{N_2} et Y_N .

$$\left(\frac{P_{2_{es}}}{P_0}\right)Y_N^2 - K_p + K_pY_N = 0$$
(III.35)

$$\Delta = K_p^2 + 4 \times \left(\frac{P_{2_{es}}}{P_0}\right) \times K_p \tag{III.36}$$

On aura comme solutions :

$$Y_N = \frac{-K_p + \sqrt{\Delta}}{2 \times \left(\frac{P_{2es}}{P_0}\right)} \tag{III.37}$$

$$Y_{N_2} = 1 - Y_N$$
 (III.38)

La masse molaire d'un mélange gazeux est :

$$M_m = \sum_i Y_i M_i \tag{III.39}$$

$$M_m = Y_{N_2} \times M_{N_2} + Y_N \times M_N \tag{III.40}$$

Les concentrations massiques sont déduites aisément par la formule :

$$C_{i} = \frac{Y_{i} \times M_{i}}{M_{m}}$$
(III.41)
$$C_{N_{2}} = \frac{Y_{N_{2}} \times M_{N_{2}}}{M_{m}}$$
$$C_{N} = \frac{Y_{N} \times M_{N}}{M_{m}}$$

III.4.3. Chaleur spécifique à pression constante Cp :

Les chaleurs spécifiques à pression et volume constant du mélange sont calculées comme suit :

$$C_{p_m} = \sum_i C_i C_{p_i} \tag{III.42.a}$$

$$C_{p_m} = C_{N_2} C_{p_{N_2}} + C_N C_{P_N}$$
 (III.42.b)

$$C_{\nu_m} = \sum_i C_i C_{\nu_i} \tag{III.43.a}$$

$$C_{\nu_m} = C_{N_2} C_{\nu_{N_2}} + C_N C_{\nu_N}$$
 (III.43.b)

En tenant compte de la vibration :

$$C_{p_{r\acute{e}el}} = C_{p_m} + C_{N_2} C_{p_{vib_{N_2}}}$$

$$C_{v_{r\acute{e}el}} = C_{v_m} + C_{N_2} C_{v_{vib_{N_2}}}$$

$$C_{p_{vib_{N_2}}} = C_{v_{vib_{N_2}}} = r_{N_2} \left(\frac{\theta_{v_{N_2}}}{T_{2es}}\right)^2 \frac{exp\left(\frac{\theta_{v_{N_2}}}{T_{2es}}\right)}{\left(exp\left(\frac{\theta_{v_{N_2}}}{T_{2es}}\right) - 1\right)^2}$$
(III.44)

Avec

III.4.4. Constante du gaz du mélange :

La constante du gaz du mélange est :

$$r_m = \sum_i C_i \times r_i \tag{III.45.a}$$

$$r_m = C_{N_2} \times r_{N_2} + C_N r_N \tag{III.45.b}$$

III.4.5. Rapport des Chaleurs spécifique de mélange gazeux :

D'où le rapport des chaleurs spécifiques de mélange gazeux est :

$$\gamma_m = \frac{C_{p_m}}{C_{\nu_m}}$$

En tenant compte de la vibration :

$$\gamma_m = \frac{C_{p_{r\acute{e}el}}}{C_{v_{r\acute{e}el}}}$$

III.5. Calcul des performances thermodynamiques après l'équilibre :

III.5.1. L'énergie de vibration après l'équilibre chimique :

On admet que l'équilibre vibrationnel et chimique et atteint juste après le choc, l'énergie de vibration est donné par la relation :

$$e_{v_{N_2}} = \frac{r_{N_2} \times \theta_{v_{N_2}}}{exp\left(\frac{\theta_{v_{N_2}}}{T_{2\rho_c}}\right) - 1}$$
(III.46)

III.5.2. L'équation de la vitesse avant et après le choc :

La vitesse V_2 est calculée à partir de l'équation d'énergie du gaz avant et après le choc s'écrit donc :

$$V_{2} = \sqrt{2\left[C_{p_{N_{2}}} \times T_{1} + \frac{V_{1}^{2}}{2} + e_{v_{1}} - C_{P_{M}}T_{2_{es}} - C_{N_{2}} \times e_{v_{N_{2}}} - C_{N}Hfo_{N}\right]}$$
(III.47)

III.5.3. La masse volumique d'équilibre chimique :

$$\rho_{2_{eq}} = \frac{\rho_1 \times V_1}{V_2} \tag{III.48}$$

III.5.4. La pression d'équilibre chimique :

$$P_{2_{eq}} = (P_1 + \rho_1 \times V_1^2) - (\rho_2 \times V_2^2)$$
(III.49)

III.5.5. La température d'équilibre chimique :

$$T_{2_{eq}} = \frac{P_{2_{eq}}}{\rho_2 \times r_m}$$
 (III.50)

En tenant compte de la vibration

$$T_{2_{eq}} = \frac{P_{2_{eq}}}{\rho_2 \times r_{r\acute{e}el}} \tag{III.51}$$

III.5.6. L'entropie d'équilibre chimique :

Finalement en calcul l'entropie avec la relation suivante :

$$\Delta S = ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) - C_v \otimes ln\left[\left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{(1-\gamma)}\right]$$
(III. 52)

III.6.développement les programmes de calcul :

La programmation facilitez-nous les calculs scientifiques de majeure partie des gros calculs industriel .Notre intérêt est écrire l'effet d'énergie vibratoire des molécules sur les paramètres thermodynamiques après une onde de choc normale comme une première étape et l'effet de la dissociation sur le comportement d'un écoulement après une onde de choc normale comme une deuxième étape sous forme un programme de calcul. **Etape 1 : Effet de l'énergie de vibration sur les paramètres thermodynamiques après** <u>une onde de choc normale :</u>



Figure (III.1) : Organigramme de la première étape- Effet de l'énergie de vibration sur les paramètres thermodynamiques après une onde de choc normale.

Cet organigramme représente des déférentes étapes qu'on utilise dans notre programme

Dans la première partie du programme, nous allons faire une déclaration des variables pour les conditions d'entrée $P_{1,}T_{1}, \theta_{\nu}, R, \gamma, \xi$ du gaz et de sortie dans l'état initial, étape suivante faire une boucle de température .la température va varie entre T [100K,20000K] avec un pas de n =100 et r_m=R/m_{gaz}.

Faire un affichage des résultats en fonction de Température : (T,e_p) , $(T,Cp_{réel},Cp_{spectrale})$, (T, gamma), (T, erreur %)

Deuxième partie : calculer les déférents paramètres thermodynamiques pour les deux cas

(gaz parfait et gaz réel) à travers une onde de choc normale en fonction de la variation de nombre de mach. Le nombre de mach va prendre une valeur entre [1,30] avec un pas n=1.

A la fin on va faire un affichage des résultats :

 $(M_1, T_{2gp}/T_1, T_{r2}/T_1)$, $(M_1, P_{2gp} / P_1, P_{r2} / P_1)$, $(M_1, \rho_{2gp} / \rho_1, \rho_{r2} / \rho_1)$

Etape 2 : Effet de la dissociation sur le comportement d'un écoulement après une onde de choc normale :





Figure (III.2) : Organigramme de la deuxième étape- Effets de l'énergie de vibration et de la dissociation sur les paramètres thermodynamiques après une onde de choc normale.

Cet organigramme représente la deuxième étape de l'effet de l'énergie de vibration avec la dissociation sur les déférents paramètres thermodynamiques dans les deux cas : gaz réel et gaz parfait monoatomique et diatomique (N, N₂ et O_2 , O) on utilise dans notre programme :

Dans la première partie du programme, nous allons faire une déclaration des variables pour les conditions d'entrée $P_{1,}T_{1}, \theta_{\nu}, R, \gamma, \xi$ du gaz et de sortie dans l'état initial, comme le programme précède. Mach va varie entre [1,40] avec un pas n = 1

Deuxième partie cas de la dissociation on va calcul les performances thermodynamique a l'état d'équilibre chimique on ajoute l'équation d'équilibre chimique pour les conditions d'entrée et de sortie pour les deux cas gaz parfait et gaz réel à travers une onde de choc normale

A la fin on va faire un affichage des résultats pour la sortie en fonction de Mach

CHAPITRE IV :

RÉSULTATS ET COMMENTAIRES

IV.1. Effet de la vibration moléculaire sur le comportement d'un écoulement après une onde de choc normal :





Figure (IV.1) : Variation des chaleurs spécifiques C_P en fonction de la température

La figure (IV.1) représente la variation des chaleurs spécifiques C_P en fonction de la température jusqu'à 20000 K, pour les gaz N2, O2 et l'air, et pour les modèles gaz parfait et calorifiquement imparfait. Le graphe du gaz réel (calorifiquement imparfait) est présenté en injectant les énergies de vibrations. A basse température on remarque que les deux modèles GP et GR suivent la même allure, si la température T₀ augmente ,on remarque que les deux modèles GP et GR prennent la même allure jusqu'à 10000 K, dans ce cas on peut dire que les deux modèles GP et GR sont calorifiquement parfait . On remarque aussi que le C_P et reste constante pour le modèle GP pour n'apporte qu'elle valeurs de la pression T₀ et donne des valeurs toujours inferieur par rapport au modèle GR. Mais si la température T_0 augmente supérieur à 10000 K, on peut voir la différence entre les deux modèles GP et GR, ce qui montre les effets de la température caractéristique de vibration θ_v , cette variation va influent sur le comportement thermodynamique de l'écoulement, et dans ce cas on peut dire que notre modèle est thermiquement parfait et calorifiquement imparfait.



Figure (IV.2) : variation de la partition des énergies en fonction de la température

Chapitre IV:

La figure (IV.2) représente la variation de la partition de l'énergie de vibration par rapport à l'énergie totale $\left(\frac{e_v}{C_v.T+e_v}\right)$ en pourcentage en fonction de la température, pour trois gaz différents (O₂, N₂ et l'air), on peut remarquer que cette grandeur est négligeable a base température et augmente de façon aigué jusqu'à une température de 5000 K, après cette valeur on remarque une augmentation faible jusqu'à 20000K, a cette position la partition égale 32% environ.





Figure (IV.3): la variation du rapport des chaleurs spécifiques γ en fonction de la température

La figure (IV.3) représente la variation du rapport des chaleurs spécifiques γ en fonction de la température jusqu'à 20000 K, pour les gaz N2, O2 et l'air, et pour notre calorifiquement imparfait. Le graphe du gaz réel (calorifiquement imparfait) est présenté en injectant les énergies de vibrations. Si la température T₀ augmente on remarque que le rapport des chaleurs spécifiques γ diminue jusqu'à une valeur de 1.25 environ, ce qui ne pas le cas d'un gaz parfait ou le rapport égale à 1,4 pour les gaz diatomiques, cette diminution montre les effets de la température caractéristique de vibration θ , cette variation va influent sur le comportement thermodynamique de l'écoulement, donc l'énergie de vibration conduit à une diminution du coefficient isentropique en fonction de la température, et dans ce cas on peut dire que notre modèle est thermiquement parfait et calorifiquement imparfait.





Figure (IV.4) : la variation du rapport de pression P_2/P_1 en fonction de M_1

Les figures ci-contre montrent l'évolution du rapport de la pression à travers une onde de choc normale pour un gaz parfait et un gaz réel en fonction du nombre de mach. L'allure a une forme exponentielle, c'est-à-dire la pression de gaz augmente progressivement avec le nombre de mach. On remarque que les deux courbes du gaz parfait et gaz réel ce rapproche. Donc la vibration à une faible influence sur la précision .elle permit une augmentation de la pression à du nombre de mach élever, contrairement à la température cette fois ci, c'est le gaz qui à la masse molaire la plus grande adopte une pression réel élevée et c'est le cas de O_2 , mais les valeurs ce rapproche.





Figure (IV.5): la variation du rapport de température T_2/T_1 en fonction de M_1

Les graphes ci-dessus montrent l'évolution du rapport de température à travers une onde de choc normale, pour un gaz parfait et un gaz réel en fonction du nombre de mach M₁. elles représentes la variation du rapport de la température avant et après le chocs en fonction du nombre du mach M1 a l'amont du choc, on remarque clairement que le rapport T2/T1 est proportionnel au nombre de mach a l'amont du choc dans les deux cas (gaz parfait -réel).On remarque aussi que dans le cas d'un gaz parfait est supérieur a celui dans le cas d'un gaz réel

(en tenant compte de la dissociation), ceci est expliquer du fait que lors de la dissociation y a des pertes de chaleurs (chaleurs cédée).La température des gaz après une onde de choc normale augmente avec le nombre de mach. La vibration influe sur l'écoulement, la température pour un gaz réel est inférieure que celle d'un gaz parfait pour des nombres de mach élevés.





Figure (IV.6) : La variation du rapport des masses volumiques ρ_2/ρ_1 en fonction de M_1

L'évolution de la masse volumique en fonction de nombre de mach M_1 , se fait de la même manière que la température et la pression. La masse volumique augmente avec le nombre de mach. Les deux courbes de gaz parfait et gaz réel se séparent de plus en plus quand le nombre de mach augmente et cela est remarquable pour les trois gaz. Donc l'énergie de vibration permet une augmentation importante de la masse volumique. Donc on conclue que la masse molaire de gaz influe sur la masse molaire de la même que la pression.




Figure (IV.7) : la variation du rapport des nombres de Mach M_2/M_1 en fonction de M1

Ces courbes montrent une diminution de nombre de mach M_2 en fonction de nombre de mach M_1 . Elles représentent la variation du rapport M2/M1 en fonction du M1 dans les deux, on remarque qu'ils sont inversement proportionnels aux nombres de mach M1, on peut remarquer aussi qu'ils sont presque identique (une petite variation), pour le cas d'un gaz réel le rapport et un peux petit que dans le cas d'un gaz parfait. La vibration conduite à une diminution plus importante de M2 à des valeurs élevées de M1 plus que les gaz fait ; cela est représenté par une séparation remarquable entre les deux gaz.





Figure (IV.8) : Variation des chaleurs spécifiques C_P en fonction de la température

Ce graphe montre l'évolution de la chaleur spécifique à pression constante en fonction de la température T₂. L'allure représente une certaine convergence entre les deux courbes après 20000 K, le $Cp_metCp_{réel}$ augmente la température, jusqu'à atteindre une valeur de 1300

environ. On présence d'un gaz parfait l'augmentation est progressive et moins importante par rapport à un gaz réel. Il est remarquable que la vibration fait augmenter le C_p de l'air chaud.



Figure (IV.9): Variation des chaleurs spécifiques C_V en fonction de la température

Cette allure montre l'évolution de la chaleur spécifique à volume constant en fonction de la température T_2 . L'allure représente une augmentation du *Cv* avec la température, elle est plus importante pour un gaz réel ou on trouve une augmentation suivi par une diminution, en suit les deux courbes s'approchent pour une température plus de 20000 K, on a Cv gaz réel a une valeur plus que 1000 par contre pour le mélange il est on dessous de 600, jusqu'à avoir des valeurs presque les mêmes à 30000 K.





Cette allure montre l'évolution du coefficient isentropique en fonction de la température T₂. Les deux courbes prennent la même façon de croissance, sauf le gaz réel est toujours inferieur par rapport au gaz parfait. en suite sous l'effet de la haute température et, la molécule vas dissocie et on retrouve les molécules monoatomique. En présence de la vibration et la dissociation, telle qu'il est montré par l'allure rouge, la vibration fait diminuer γ jusqu'à 1.26, ensuite en présence de la chimie, la valeur du coefficient isentropique augmente pour atteindre 1.67.



Figure (IV.11) : Evolution des concentrations molaires en fonction de nombre de

Mach

Ce graphe représente l'évolution des concentrations molaires des deux espèces $(X_{N2}etX_N)$ en fonction de nombre de Mach (M_1) .

A très faible valeurs de nombre de Mach on a $(X_{N2} = X_{O2} = 1 \text{ et } X_N = X_O = 0)$, cela montre que les molécules N₂ et O₂ n'est pas encore dissocie, ensuite en faisons varié le nombre de Mach progressivement à des valeurs élevées, X_{N2} vas diminuer et X_N vas augmenter à son tour et cela signifie la présence de la dissociation des molécules. Lorsqu'on atteint par exemple m1=35 on remarque qu'on est à la fin de la dissociation tel que $(Y_{N2} = 0.01 \text{ et } Y_N = 0.99)$ on est à l'équilibre chimique. Physiquement ces courbes montrent donc l'évolution de chaque espèce entre le choc et le point d'équilibre. On observe premièrement la diminution des concentrations de l'oxygène O₂ et de l'azote N₂ de la valeur initiale (21%, 79%) à la valeur d'équilibre.



Figure (IV.12) : Variation de l'entropie en fonction de nombre de Mach

Cette figure montre la variation de l'entropie en fonction du nombre de Mach « M_1 », à travers une onde de choc normale à très haute température. Pour un gaz parfait, on remarque que l'entropie augmente lentement avec le nombre de Mach, elle atteint seulement une valeur de 2300 pour $M_1 = 40$. Par contre en présence de la chimie et la vibration et la dissociation, elle augmente progressivement jusqu'à atteindre un rapport de 4500 à $M_1 = 40$. Donc le comportement réel faite augmenté l'entropie par car c'est le l'onde de chocs normale Δ S>0.



Figure (IV.13): Variation de la masse volumique en fonction du nombre de Mach

Cette figure montre la variation de la masse volumique en fonction du nombre de Mach « M_1 », à travers une onde de choc normale à très haute température. Pour un gaz parfait, on remarque que la masse volumique augmente lentement avec le nombre de Mach, elle atteint seulement un rapport de (5.59) pour $M_1 = 40$. Par contre en présence de la chimie et la vibration, elle augmente progressivement jusqu'à atteindre un rapport de (10.50) à $M_1 = 24$, ensuite elle diminue à une valeur de moins de (7) à $M_1 = 40$. Donc la vibration faite augmenté la masse volumique par car c'est le phénomène d'incompressibilité.





 M_1

Cette figure montre les variations des nombres de mach M_2 sans dissociation et M_2 avec la dissociation en fonction du nombre de Mach « M_1 », à travers une onde de choc normale à très haute température. On peut remarquer clairement que les deux courbes prennent la même forme de décroissance, et les valeurs obtenus sous l'effet de la dissociation est toujours inferieure de ceux obtenus par le nombre de Mach sans dissociation. Cette différence influe le comportement réel en présence de la chimie et de vibration pour les ondes de chocs.





Cette allure représente l'évolution de rapport de pression à travers une onde de choc normale, en fonction de nombre de Mach « M_1 ». La pression de gaz augmente progressivement avec le nombre de Mach. On remarque que les deux courbes se rapproche ; pour un gaz parfait elle atteint « 1055.99*10⁵pa» à $M_1 = 30$, mais elle marque une valeur légèrement élevée en présence de la chimie et la vibration, jusqu'à atteindre «1135.82*10⁵pa », car à l'équilibre chimique, la pression est légèrement plus grande que celle d'un gaz parfait.



Figure (IV.16): Variation des rapports des températures en fonction du nombre de Mach M1

Chapitre IV:

Cette allure montre l'évolution du rapport de température à travers une onde de choc normale en fonction du nombre de Mach « M_1 ». On remarque que la température augmente avec le nombre de mach, mais car elle est rapide pour un gaz parfait est atteint des valeurs élevées, elle arrive jusqu'à plus de « 300 » (c a d T2=300*T1 pour les gaz parfait), par contre en présence de la vibration et la dissociation, elle atteint seulement presque la moitié pour M1=40. Cela est évident, car derrière une onde de choc normale les phénomènes sont endothermiques de sorte que la température obtenue à des nombres de Mach élevées est inférieure à celles d'un gaz parfait et c'est l'influence de la chimie. On constate encore que pour un nombre de Mach égal à 10 la dissociation de N2 n'a pas encore à lieu, ceci s'explique par la faible température, ceci laisse entendre qu'à Mach égale à 10 le gaz peut être considéré figé. D'autre part, pour un nombre de Mach infini au-dessus de 20, la dissociation de N2 est très importante, même si elle n'est pas totale.

Conclusion générale

Cette étude, nous permis de conclure que dans le cas des molécules trois types d'énergies interviennent :

- ✤ L'énergie vibrationnelle ; L'énergie rotationnelle ; L'énergie de translation.
- * L'énergie de vibration est négligeable pour un gaz parfait et important pour un gaz réel.
- L'énergie de vibration augmente quand la température augmente ; pour des températures élevée l'énergie de vibration tend vers rT, donc la partition est voisine de 30%.
- L'énergie de vibration à une influence sur les paramètres thermodynamiques de l'écoulement :
- Elle conduit à une diminution de la température et de nombre de mach.
- Elle conduit à une augmentation de la pression et de la masse volumique.
- Elle conduit à une diminution du coefficient isentropique.
- Les molécules sont décrites en termes de niveaux d'énergie de rotation, de vibration et de niveau électronique ; la molécule peut donc accumulé de l'énergie dans l'un ou l'autre de ces niveaux qui joue le rôle de réservoir énergétique.
- Les molécules constituent un gaz réel ont structure interne : structure électronique, possibilité de rotation et de vibration des atomes qui, constituent les molécules.
- Les niveaux électroniques supérieurs pour une molécule peuvent être négligé, car la température caractéristiques électroniques de ces états excités est <1500°K.</p>
- L'écoulement derrière une onde de choc normale à haute température subit diverses transformations ; les phénomènes de dissociation apparaissent à très haute température et à mach élevées.
- Les Phénomène de réactions chimiques se produisant à hautes températures (on commence à la prendre en compte au-dessus de 1500K) faisant apparaître des composés qui n'existent pas à température ambiante, de par leur instabilité.
- Les phénomènes derrière une onde de choc normale, sont endothermiques de sorte que les températures sont inférieures à celles qu'en a calculées en gaz parfait.
 - L'équilibre chimique est atteint quand les propriétés du système où proprement dit, les performances thermodynamiques tendent vers une valeur constante (pression, température, masse volumique, concentration....).

- Les résultats trouvés ont un grand intérêt chez les aérodynamiciens. La connaissance de la composition chimique du gaz donne une information sur le type des parois à utiliser pour protéger l'engin en vol et tout ce qui concerne l'état général de l'appareil.
- Il est intéressant de faire une étude complète sur le nez de l'appareil en 2D ou en 3D mais ça prend plus de temps à fin de préparer un code de calcul traitant ce genre de problèmes.

Bibliographie

[1] John, E.A., Gas Dynamics, Boston, Allyn and Bacon, 1969.

[2] Liempann, H.P., & Roshko.A , .Elements of Gas Dynamics , New York : Wiley and son , 1958.

[3] Shapiro, Asher .H., The Dynamics and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow colume II New York, The Ronald Press Company, & I 1953.

[4] (https://www.lachimie.fr/thermodynamique/loi-gaz-parfait).

[5] (en) « 40N6 » [archive], sur www.deagel.com, 27 août 2018 (consulté le 3 novembre 2018)

[6] (en) « S-400F » [archive], sur www.deagel.com, 27 décembre 2017 (consulté le 3 novembre 2018)

[7] (en) « www.deagel.com/Defensive-eapons/48N6_a000994001.aspx?br=ro& - Traducteur »[archive], sur www.microsofttranslator.com, mise à jour le 25 septembre 2018 (consulté le 2 novembre 2018).

[8] (en) « www.deagel.com/Defensive-Weapons/48N6DM_a000994003.aspx?br=ro&=& - Traducteur » [archive], sur www.microsofttranslator.com, mise à jour le 25 septembre 2018 (consulté le 2 novembre 2018).

[9] https://perso.univ-lyon1.fr/marc.buffat/COURS/AERO_HTML/node51.html

[10] https://www.larousse.fr/encyclopedie/animations/Mur_du_son

[11] Theodor Meyer, Über zweidimensionale Bewegungsvorgänge in einem Gas, das mit Überschallgeschwindigkeit Strömt, Université de Göttingen, 1908.

[12] (en) John D. Anderson, Jr., Fundamentals of Aerodynamics, McGraw-Hill Education, 1991 (ISBN 0-07-001679-8)

[13] Wikipédia L'encyclopédie

[14] Nabil GHENDOUR, Samir OUCHENE, Rachid ALLOUCHE, Renane. Laboratoire de science de l'aéronautique, Université Saad Dahleb de Blida le 12 novembre 2015

[15], J.THOUVENIN. Le journal physique et le radium Juillet 1958. Centre d'études nucléaires de Saclay.

[16] Francis Meunier : livre Thermodynamique des ingénieurs, Paris 2004

[17] HAOUI Rabah et ALLOUCHE Rachid .18 ^{ème} congrès français, Article : écoulement d'air ionisé en hors équilibre chimique derrière une onde de choc droite. Grenoble le 27-31.08.2007

[18] https://www.pourlascience.fr/sd/spatial/le-bang-sonique

[19]https://www.researchgate.net/publication/312587555_Notes_de_Cours_de_Gazodynamique

[20] http://hmf.enseeiht.fr/travaux/CD0910/tpld/mfi/anciens/2003/TPLD_02-03/chocoblique.html

[21] Feldman, Saul : Hypersonic conical shocks for dissociation Air in The thermodynamic Equilibrium 12 Dec 1957

[22] Lighthill, M.J: Dynamics of dissociating Gas, equilibrium flow.Jour.Fluid Mech Jan 1957