



République algérienne démocratique et populaire
Ministère de l'enseignement supérieur de la recherche scientifique



Université Saad Dahled-Blida1

Faculté de technologie

Filaire : Génie mécanique

Spécialité : Installation énergétique et turbomachine

Mémoire de fin d'études pour l'obtention du diplôme de Master II

Thème :

**Investigation numérique sur les nouvelles formes de
l'enthalpie**

Réalisé par :

- **BOUFATAH YOUSRA**
- **CHOUIA KHAOULA**

Promoteur :

Mr SALHI MEROUANE

Année universitaire

2021/2022

Résumé:

Dans ce travail nous avons essayé de développer la forme d'enthalpie par une nouvelle forme très facile à utiliser à n'importe quelle condition.

Le calcul de l'enthalpie est essentiel dans la thermodynamique informatique et les champs connexes.

Pour cela, Une nouvelle forme d'enthalpie a été étudiée numériquement à l'aide du logiciel FORTRAN. La nouvelle équation comprenait le thermique et les imperfections caloriques représentées par le modèle de gaz réel, en se concentrant sur l'équation d'état de Berthelot dans son développement, et combiné avec un autre phénomène. Contrairement aux approches précédentes, il a été constaté que la nouvelle forme d'enthalpie est très facile à utiliser à n'importe quelle condition, sans utiliser de tables et de graphiques et particulièrement important pour corriger le Modèle de température HT et pour calculer le changement d'enthalpie lorsqu'il varie avec la pression. Ce travail est complété avec un développement théorique approprié, les applications de la thermodynamique et de la dynamique des gaz à une variété des exemples travaillés, y compris la combustion et le flux supersonique. Ce type de travail peut compléter expérimental fonctionne en offrant une bonne vue du processus. En particulier, le calcul de l'enthalpie reste difficile dans la plupart des domaines. Mais avec cette étude, nous étendons le calcul des changements d'enthalpie avec les propriétés thermodynamiques les circonstances.

Mots-clés:

Enthalpie, températures élevées, pressions élevées, paramètres de stagnation, modèle de gaz réel, thermique et calorique imperfections. Flux supersonique.

Abstract:

In this work we have tried to develop the enthalpy form by a new form very easy to use under any condition.

The calculation of enthalpy is essential in computational thermodynamics and related fields. For this case, a new form of enthalpy was studied digitally using the FORTRAN software. The new equation included the thermal and caloric imperfections represented by the actual gas model, focusing on Berthelot's equation of state in its development, and combined with another phenomenon. In contrast to previous approaches, it was found that the new form of enthalpy is very easy to use at any condition, without using tables and charts and particularly important to correct the high temperature model HT and to compute the change in enthalpy when it varies with pressure. This work is complemented with appropriate theoretical development, applications of thermodynamics and gas dynamics to a variety of worked examples, including combustion and supersonic flow. This type of work may complement experimental works by offering a good view of the process. In particular, the enthalpy computation remains difficult in most fields. But with this study, we extend the calculation of the changes with the thermodynamics properties whatever the circumstances.

Keywords:

Enthalpy, high temperatures, high pressures, stagnation parameters, real gas model, thermal and caloric imperfections. Supersonic flow.

ملخص:

في هذا العمل حاولنا تطوير شكل المحتوى الحراري بشكل آخر جديد سهل الاستخدام للغاية تحت أي شرط من الشروط.

حساب المحتوى الحراري ضروري في الديناميكا الحرارية الحسابية والمجالات ذات الصلة. في هذه الحالة ، تمت دراسة شكل جديد من المحتوى الحراري رقميا باستخدام برنامج FORTRAN. تضمنت المعادلة الجديدة العيوب الحرارية والسرعات الحرارية التي يمثلها نموذج الغاز الحقيقي، مع التركيز على معادلة Berthelot في تطويرها ، ودمجها مع ظاهرة أخرى. على عكس الأساليب السابقة ، وجد أن شكل المحتوى الحراري الجديد سهل الاستخدام للغاية تحت أي ظرف من الظروف ، دون استخدام الجداول والرسوم البيانية ومهم بشكل خاص لتصحيح نموذج درجة حرارة المرتفعة HT ولحساب التغير في المحتوى الحراري عندما يختلف مع الضغط. ويكمل هذا العمل مع التطوير النظري المناسب، وتطبيقات الديناميكا الحرارية وديناميكيات الغاز لمجموعة متنوعة من الأمثلة التي تم العمل عليها ، بما في ذلك الاحتراق والتدفق الأسرع من الصوت. يمكن لهذا النوع من العمل أن يكمل الأعمال التجريبية من خلال تقديم رؤية جيدة للعملية. على وجه الخصوص ، لا يزال حساب المحتوى الحراري صعبا في معظم المجالات . ولكن مع هذه الدراسة ، قمنا بتوسيع حساب تغيرات المحتوى الحراري مع ظروف الخصائص الديناميكية الحرارية .

الكلمات المفتاحية:المحتوى الحراري ، ودرجات الحرارة العالية ، والضغط العالية ، ومعلمات الركود ، ونموذج الغاز الحقيقي ، والعيوب الحرارية والسرعات الحرارية. تدفق أسرع من الصوت.

Remerciements

Ce travail est l'aboutissement d'un long cheminement au cours duquel nous avons bénéficié de l'encadrement, des encouragements et du soutien de plusieurs personnes, à qui nous tenons à dire profondément merci.

Tout d'abord, nous tenons à remercier le bon Dieu tout puissant de nous avoir donné la volonté, le courage et la force d'entreprendre ce modeste travail.

Nous tenons à remercier notre encadreur **Dr. Salhi Marouane** pour accepter d'encadrer ce travail, sa disponibilité, ses remarques et conseils constructives.

Nous désirons aussi remercier les membres du jury qui nous font le grand honneur d'évaluer ce travail.

Un grand merci à notre chère faculté dans laquelle nous avons passé des moments inoubliables.

Ainsi, nous remercions tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.



Dédicaces

Je Dédie ce modeste travail à Aux plus chers de ma vie, la source et la raison de mon existence mon père et ma mère, pour leur tendresse, leur conseil, leurs sacrifices, leur présence à mes côtés et leur soutien aux quels je dois tous, qu'il trouvent ici l'expression de mon éternelle reconnaissance et de ma profonde affection.

Mes chers parents que Dieu vous protège.

A ma sœur Zahra la source de mes sourires. A mes très chères frère Mouhamed Amine et Abd el noure. A ma grand-mère Rabi yarhamha.



Yousra Boufatah



Dédicaces

À mes chers parents

A mon cher Mari et ma petite fille Maria Rassil

À mes frères

À toute ma famille

A à ceux qui m'ont soutenu dans les moments les plus
difficiles

À tous ceux-là je dédie ce travail



Khaoula Chouia

Sommaire

INTRODUCTION	1
1.1.Introduction :	4
1.2. Les gaz réels :	5
1.3. Les gaz parfaits :	5
1.4.Interaction entre les molécules :	5
1.5.Equation général :	7
1.6. Les équations des gaz réel (par ordre de complexité) :	8
1.6.1 .L'équation d'état de Van der Waals :	8
1.6.2.Equation de BERTHELOT:	11
1.6.3. Equation de CAUSIUS (1880):	12
1.6.4. Equation de REDLICH-KWONG (1949):	12
1.6.5 Equation de BERTTIE-BRIDGEMAN (1928):	13
1.6.6. Equation de Dieterici :	13
1.6.7.Equation de Wohl :	14
1.6.8.Equation de Berthelot Modifiée :	14
1.7. Les coordonnées du point critique- équations réduites :	14
1.7.a. application pour l'équation de Berthelot :	15
1.7.b. Calcul les constants a, b et R:	16
1.7.c. Equation réduite :	16
1.8.Equations de VIRIEL:	17
1.9. Facteur de compressibilité:	18
1.10. Choix de l'équation d'état :	18
1.12. Conclusion:	22
2.1. Introduction:	24
2.2. Hypothèses de base :	25
2.3. Configuration des équations :	26
2.3.1. L'équation de la conservation d'énergie :	26
2.3.3. Détermination la différentielle dp/ρ :	28
2.3.4. Détermination les paramètres thermodynamique pour les gaz réels :	29
2.3.5 Détermination du nombre de Mach :	32
2.3.6. La chaleur spécifique à volume constante $cv(T, \rho)$:	35
2.3.7. La chaleur spécifique à pression constante cpT, ρ :	35
2.3.8 Rapport des chaleurs spécifiques γ :	36

3.1. Introduction :	39
3.2. l'analyse numérique :	39
3.3 .Résolution d'une équation non linéaire :	40
3.3.1.Méthode de dichotomie :	40
.3.4 .Calcul numérique des rapports thermodynamique :	40
3.5. Résolution d'un système d'équation non linéaire	42
3.5.1 Méthode de Newton :	42
3.5.2. Algorithme de la méthode de Newton appliquée aux systèmes :	44
3.5.3. Le choix de la solution initial :	45
3.6. Détermination des paramètres critiques :	45
3.7. L'intégration numérique :	45
3.7.1. Méthode de Gauss-Legendre :	45
3.8. Calcul des erreurs	48
3.8.1. Erreur du modèle gaz parfait :	51
3.8.2. Erreur du modèle haute température :	51
4.1.Introduction :	53
4.2.Résultats pour les caractéristique d'un gaz réel :	53
CONCLUSION GENERALE	60
REFERENCES	61

Table des tableaux

Tableau 1.1 : Constantes a et b de l'équation de Van Der Waals.....	10
Tableau 1. 2 : comparaison entre les valeurs expérimentales de l'air et les résultats numériques pour chaque équation du gaz réel.....	19
Tableau 1. 3 : Valeurs numériques de la masse volumique ρ par le modèle de Berthelot pour des différentes pressions.....	21
Tableau 1.4 : Valeurs expérimentales de la masse volumique ρ pour des différentes.....	22
Tableau 3.1 : Abscisses et coefficients associés de la quadrature d'intégration du 64e Gauss Legendre	47
Tableau 3.2 : les équations thermodynamiques des modèles GP et HT...	49
Tableau 3.3 : Les coefficients polynômiaux du C_p	50
Tableau 4.1 : variation d'enthalpie pour H_2 pour les modèles HT et RG	55

Liste des figures

Figure 1. 1. Énergie potentielle moléculaire en fonction de la distance.....	6
Figure 1 .2. Réseaux d'isothermes : a) isothermes du CO ₂ , obtenues expérimentalement. b) Isothermes d'un gaz parfait....	7
Figure 1.3 : représentation de l'effet de covolume.....	8
Figure 1.4. Forces de Van der Waals subies par une molécule loin de toutes parois et proche d'une paroi	9
Figure 1. 5. La représentation des isothermes de Van Der Waals sur le diagramme de Clapeyron (P, V).....	11
Figure 1. 6 : représentation graphique de l'état du fluide pour le cas d'un gaz réel	15
Figure 4.1: variation d'enthalpie en fonction de température.....	53
Figure 4. 2: variation d'enthalpie d'un gas reel en fonction de temperature	54
Figure 4.3: Variation d'erreur relative donnée par la variation d'enthalpie en fonction de température	54
Figure 4.4: Variation de la vitesse en fonction du nombre de Mach en amont	57
Figure 4.5 . Variation de l'erreur relative donnée par la vitesse du gaz réel en fonction de la température	58
Figure 4.6 Variation de l'enthalpie pour les gaz H ₂ , O ₂ et N ₂ en fonction de la température	59

Nomenclature

LISTE DES SYMBOLES

A	Constante des forces intermoléculaire.
b	Constante de taille moléculaire.
U	Energie interne.
V	Volume spécifique.
H	Enthalpie.
M	Nombre de Mach
P	Pression.
Q	Chauffer.
R	constante des gaz
S	Entropie
T	Température.
V	rapidité
W	Travail.
C_p	Chaleur spécifique à pression constante.
C_v	Chaleur spécifique a volume constant.
C_T	Constant déterminée à température constante
C_s	Célérité du son.
b_1, b_2	Coefficients de la fonction de la condensation
γ	Rapport des chaleurs spécifiques.
ρ	densité.
θ	constante d'Energie vibratoire moléculaire
ε	Tolérance.
I	coefficient calorimétrique de clapeyron.

INTRODUCTION

Pour en revenir à l'histoire, c'était le néerlandais scientifique Heike KamerlinghOnnes qui a remporté le 1913 Prix Nobel en physique. Il a été le premier à présenter le concept. L'enthalpie est écrite H. Auparavant, la lettre H représentait la chaleur, mais a été placée dans le Littérature de Dalton en 1909 et crédité par Heike KamerlinghOnnes. Porter a officiellement proposé en 1922 qui deviennent le symbole accepté de l'enthalpie de KamerlinghOnnes.

Le terme enthalpie désigne une thermodynamique. Quantité correspondant à une fonction d'état étendue, c'est-à-dire une fonction d'état proportionnelle à la quantité de la matière actuelle. En revanche, l'enthalpie est indépendante de Comment un système atteint son état . Il est basé sur le situation initiale et sur la situation finale sans Considérant les États intermédiaires.

L'enthalpie est un potentiel thermodynamique qui synthétise en une seule fonction l'énergie interne de le système (lié à sa température et à sa quantité de la matière) et les travaux (liés à sa pression) requis pour occuper son volume. L'unité de mesure de l'enthalpie dans le système international des unités (SI) est Joule, Bien que d'autres unités historiques soient encore parfois utilisées. Il est couramment utilisé lors de l'étude des changements d'état impliquant l'énergie d'un système dans de nombreux produits chimiques. Processus biologiques et physiques.

En d'autres termes, l'enthalpie représente le total Énergie d'un système thermodynamique : son énergie interne (U) (c'est-à-dire l'énergie nécessaire à la création du système), plus le travail (PV), qui correspond au Travail que le système doit fournir contre la pression pour occuper son volume. C'est particulièrement important quand il pour décrire les transformations à constante pression. C'est particulièrement le cas pour la plupart des produits chimiques réactions qui ont lieu à la pression atmosphérique. La vient

La variation de l'enthalpie est alors égale à la quantité de chaleur libéré ou absorbé par le système, selon Que la réaction soit exothermique ou endothermique. De plus, une réaction exothermique est caractérisée par le fait qu'il produit de l'enthalpie et un endothermique réaction par le fait qu'elle le consomme.

Cependant, lorsqu'un liquide subit des changements de État (condensation, évaporation) ou exothermique / endothermique réactions (combustion, chimique polymérisation), le lien entre u , p et v est perdu pendant la transformation afin qu'il ne soit pas possible de lier leurs valeurs initiales et finales. De plus, P et V sont des variables codépendances qui sont souvent difficiles (et pas toujours utile) pour séparer.

La relation la plus simple de l'enthalpie est basée sur La théorie du gaz parfaite avec un CP de chaleur spécifique constant, représenté par $\Delta H = CP \Delta T$ à, le comportement réel a été ignoré, et ce dernier a été prouvé par beaucoup auteurs et chercheurs de son manque de sérieux et de son Résultats inacceptables, en particulier à haute température.

Le modèle à haute température HT qui est basé sur l'imperfection calorique, c'est-à-dire $C_p = C_p(T)$ et $C_v = C_v(T)$ a réussi à obtenir des résultats satisfaisants à haut Température. Cependant, nous sommes tombés dans la question sur les changements de l'enthalpie à haute pression.

Il existe de nombreuses références dans la thermodynamique et transfert de chaleur qui contient des tables et des graphiques pour l'enthalpie. Mais malheureusement la plupart d'entre eux sont présenté à la pression atmosphérique. Ainsi, nous ne pouvons pas Jetez un œil à la haute pression.

Le premier auteur qui a tenté de percer le Les problèmes de pression sont Lee Kesler. Il a développé un Méthode facile pour évaluer le changement d'enthalpie. à l'exception il n'est pas général pour tout fluide, mais limité à simple fluides et il est à noter que l'auteur a utilisé beaucoup approches et approximations pour calculer le Les intégrations et les facteurs acentriques. C'est aussi, Les équations dépendent totalement des tables et des graphiquetoutes les étapes du calcul, ce dernier n'est pas toujours disponible. et leur utilisation prolonge le processus de calcul.

Nous avons récemment résolu le problème de l'entropie dans des conditions de pression et de température élevées, les résultats sont très satisfaisants et Monté pour toutes les conditions et la solution a été faite en peu de temps. C'est ce qui nous encourage à terminer leurs travaux de recherche en développant une nouvelle formule générale d'enthalpie valide à n'importe quelle condition.

La présente étude s'est concentrée sur l'enquête d'une nouvelle forme d'enthalpie en utilisant numériquement Logiciel de la centrale électrique de Fortran. Avec l'hypothèse du modèle de gaz réel, les relations thermodynamiques sont développées en utilisant l'équation de l'état de Berthelot Cette équation d'état est utilisée pour tenir compte des effets des forces intermoléculaires. Il est prévu que L'imperfection calorique pourrait être représentée par Incorporant l'expression de Planck dans le Cp et le Cv.

L'enquête couvre les deux thermodynamiques et champs de dynamique des gaz. En les appliquant à deux cas : Premièrement, le calcul de l'enthalpie de variation d'Hydrogène gazeux qui est très utile dans de nombreux exemples. Comme la combustion. Par exemple, et deuxièmement. à calculer et valider la vitesse du débit supersonique. Une comparaison a été faite pour chaque cas afin de noter la différence pour prendre une idée de la limitation de études antérieures et efficacité de la nouvelle forme.

Chapitre 1 :

Généralités sur Les gaz Réels

1.1.Introduction :

Le modèle du gaz idéal (parfait) s'applique aux gaz raréfiés pour lesquels la distance entre les molécules est très grande et donc, aucune interaction entre les molécules n'est considérée. On dit alors que les molécules, dans ce cas, se déplacent indépendamment des unes des autres et que les forces d'attraction à l'intérieur du système thermodynamique sont négligeables. Le résultat est que l'énergie interne d'un gaz parfait est donnée seulement par l'énergie cinétique des molécules et que la contribution de l'énergie potentielle est négligeable.

La définition d'un gaz parfait :

- ❖ L'interaction entre les molécules se limite à des chocs élastiques. Il n'existe pas des forces d'attraction et/ou de répulsion entre les molécules.
- ❖ Les molécules n'occupent pas d'espace (volume nul)
- ❖ Les molécules se déplacent aléatoirement.

Les deux premières suppositions d'un gaz parfait sont fausses pour tous les gaz puisqu'à des températures suffisamment basses, tous les gaz se condensent et se transforment en liquide (les liquides et les solides ont des volumes non nuls). Dans la réalité, les molécules interagissent entre elles et l'énergie potentielle associée à ces interactions devient de plus en plus importante lorsque les molécules sont proches les unes des autres. Le modèle de gaz parfait ne permet pas d'expliquer complètement le comportement de tous les gaz, indépendamment de son état thermodynamique à cause de ces énergies d'attraction et de répulsion.

Nous cherchons une nouvelle équation d'état des gaz car l'expérience montre que le comportement des gaz réels s'écarte de celui des gaz parfaits aux fortes pressions. Van der Waals a proposé une équation en 1873. Cela, avec d'autres travaux, lui a valu le prix Nobel 1910 .

Ce chapitre fournit un aperçu sur le développement des équations d'état pour le calcul des propriétés thermodynamiques des gaz. En commençant par l'équation d'état des gaz parfaits, ses applications et ces limites puis les premières modélisations des équations d'état semi-empirique des gaz réels datant du 19^{ème} siècle et leurs développement pendant le 20^{ème} siècle, le lecteur est invité à suivre les grandes lignes du développement de ces équations en insistant sur les changements des approches moléculaires (notion de covolume et des forces d'attraction intermoléculaires) entre le modèle des gaz parfaits, et les modèles des gaz réels. Ainsi que l'impact sur le calcul des fonctions thermodynamiques tel que l'énergie interne, l'entropie et l'enthalpie. On procédera aussi dans ce chapitre spécifiquement à l'étude (détermination des coefficients de

covolume et de l'attraction moléculaire à partir du point critique) et l'application du modèle de Berthelot pour les gaz réels.

1.2. Les gaz réels :

Le modèle de gaz idéal ou parfait s'applique aux gaz raréfiés où la distance entre les molécules est très grande. Dans ce gaz les molécules se déplacent indépendamment les unes des autres. Les forces d'attraction à l'intérieur du système sont négligeables. Le résultat est que l'énergie interne d'un gaz parfait est due seulement à l'énergie cinétique des molécules. La contribution provenant de l'énergie potentielle est négligeable. Cependant, dans la réalité, les molécules interagissent entre elles et cette interaction devient importante quand les molécules sont proches les unes des autres. Le modèle de gaz parfait ne peut pas expliquer complètement le comportement de tous les gaz, indépendamment de son état thermodynamique.

1.3. Les gaz parfaits :

Rappelons la définition d'un gaz parfait :

1. L'interaction entre les molécules se limite à des choc élastiques. Il n'existe pas des forces d'attraction et/ou de répulsion entre elles.
2. Les molécules n'occupent pas d'espace (volume nul)
3. Les molécules se déplacent aléatoirement.

Les deux premières suppositions sont fausses pour tous les gaz puisque à des températures suffisamment basses tous les gaz se condensent et se transforment en liquides. De plus les liquides et solides ont des volumes non nuls, ce qui est une manifestation du volume occupé par les molécules.

1.4. Interaction entre les molécules :

Il y a deux contributions à l'interaction entre les molécules. À des distances de l'ordre de quelques diamètres, les molécules subissent des forces d'attraction. Cette attraction est responsable de la condensation d'un gaz en liquide à des basses températures. À des températures assez basses l'énergie cinétique des molécules ne permet pas à celles-ci d'échapper aux forces d'attraction et elles s'unissent.

Une deuxième contribution à l'interaction entre les molécules se manifeste comme une force répulsive à des distances petites par rapport au centre de masse des molécules. Cette répulsion est responsable du fait que les liquides et les solides ont un volume fini.

L'interaction entre les molécules (forces d'attraction et de répulsion) crée une énergie potentielle qui contribue à l'énergie interne du gaz. L'attraction correspond à une diminution de l'énergie interne (énergie potentielle négative) et la répulsion à son augmentation (énergie potentielle positive). La figure 1.1 illustre, de forme générale, la variation de l'énergie potentielle avec la distance entre les molécules. À des grandes distances l'énergie potentielle tend vers zéro et elle devient négative (forces d'attraction) au fur et à mesure que la distance diminue. À des distances inférieures à d (voir figure 1.1), les forces de répulsion prédominent et l'énergie potentielle est positive.

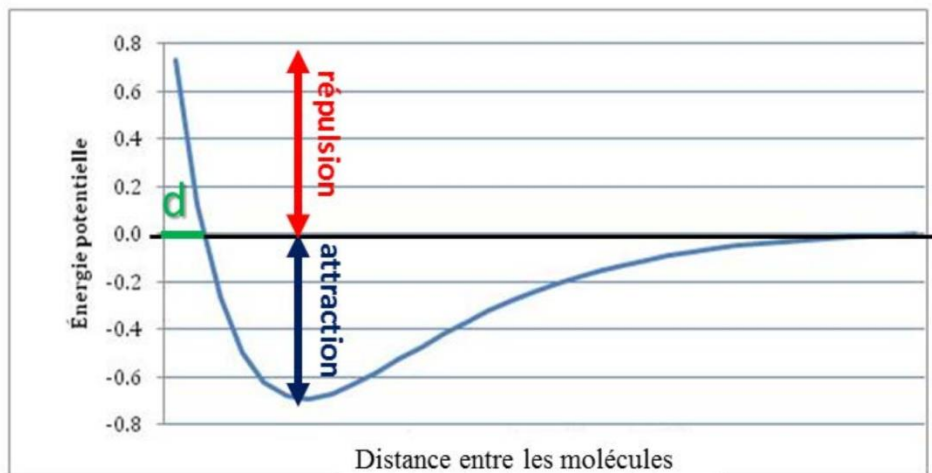


Figure 1. 1. Énergie potentielle moléculaire en fonction de la distance entre les molécules

À la distance d , l'énergie potentielle est minimum. À des grandes distances l'énergie potentielle tend vers 0.

Les interactions moléculaires affectent les propriétés macroscopiques en particulier l'équation d'état. Par exemple, les isothermes d'un gaz réel ont des formes différentes de celles données par la loi des gaz parfaits, surtout à des hautes pressions et des basses températures. La figure(2a) montre quelques isothermes du CO₂ obtenues expérimentalement. On doit les comparer avec les isothermes d'un gaz parfait, figure(2b). Les courbes se ressemblent quand la pression est basse et la température élevée. Mais les différences sont importantes à des températures inférieures à 50°C et pressions supérieures à 1 atmosphère.

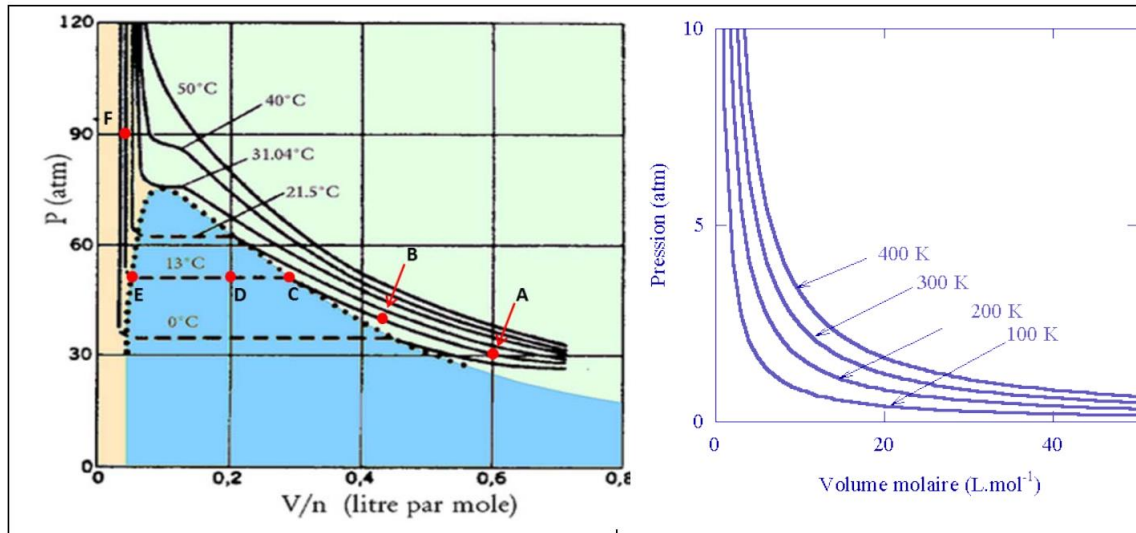


Figure 1 .2. Réseaux d'isothermes : a) isothermes du CO2, obtenues expérimentalement. b) Isothermes d'un gaz parfait.

1.5. Equation général :

La théorie cinétique des gaz amène à remplacer l'équation caractéristique des gaz parfaits $P v = RT$ par une équation générale.

$$(P+\pi) (V-b)=RT \quad (1.1)$$

Avec :

Π : excès de pression due à l'attraction mutuelle des particules (pression intérieure). La pression au sein de fluide est supérieure à la pression au voisinage de la paroi (tient compte des forces intermoléculaires).

b : le covolume, c'est le volume minimum que peut occuper l'unité de masse du gaz considéré (tient compte du volume propre des molécules ≈ 4 fois)

$$\text{C.A.D : } b \cong 2 \frac{n\pi.\varnothing^3}{3} = \frac{16}{3} n. \pi. r^3 \quad (1.2)$$

Avec : **n** : nombre de molécules.

\varnothing :diamètre des molécules $\approx 2 \div 3 \text{ \AA}$

1.6. Les équations des gaz réel (par ordre de complexité) :

1.6.1 .L'équation d'état de Van der Waals :

Van der Waals dans son modèle a introduit deux corrections :

- Les molécules ont un volume non nul est incompressible (volume exclu).
- Ils existent des forces d'attraction entre ces molécules (pression interne).

a. Correction de volume (le covolume) :

Chaque molécule occupe donc un volume qui n'est plus disponible pour les autres. Celles-ci ne sont donc pas susceptibles de se déplacer dans le volume V du récipient mais dans un volume inférieur que nous noterons $V - B$. La grandeur B , positive, est appelé covolume et a la dimension d'un volume.

Le covolume est proportionnel au nombre de molécules donc à la quantité de matière n ce que nous écrivons $B = nb$. La grandeur b est le covolume molaire et a la dimension d'un volume molaire.

Nous transformons alors l'équation d'état des gaz parfaits en une équation d'état de gaz à molécules non ponctuelles (mais n'interagissant pas entre elles) en remplaçant V par $V - B$:

$$P(V - B) = nRT \quad (1.3)$$

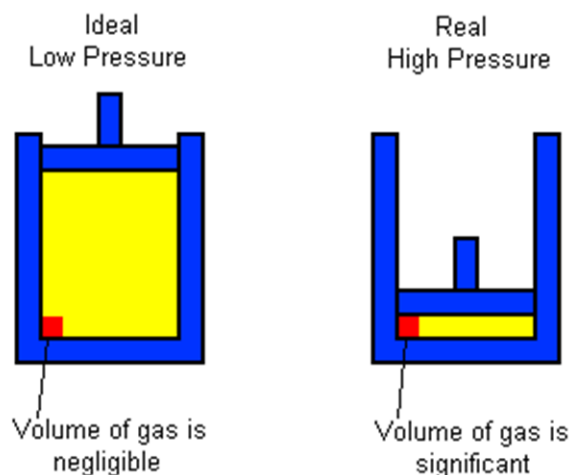


Figure 1.3 : représentation de l'effet de covolume

b. Correction de pression (pression interne) :

Considérons une molécule au sein du gaz, loin de toute paroi du récipient. A cause des forces de Vander Waals, elle est attirée de toute part par les autres molécules du gaz. Mais la situation est symétrique, donc ces attractions se compensent entre elles. (figure 1. 4)

Considérons maintenant une molécule proche d'une paroi. Les attractions de Van der Waals qu'elle subit l'attirent vers l'intérieur du récipient. La pression exercée par le gaz réel sur la paroi est donc inférieure à celle qu'exercerait un gaz parfait. La différence entre ces deux pressions est appelée pression interne p_i .

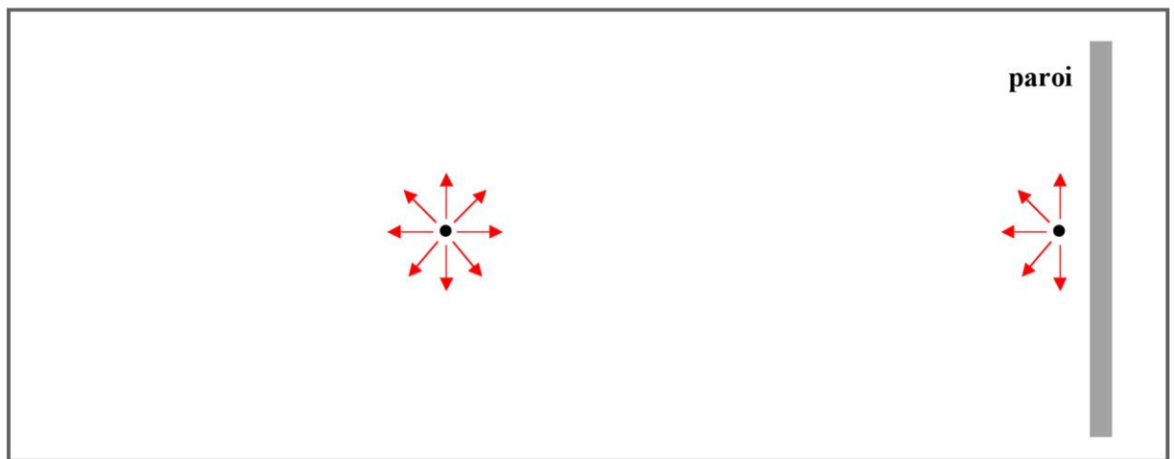


Figure 1.4. Forces de Van der Waals subies par une molécule loin de toutes parois et proche d'une paroi

Des considérations théoriques quantitatives montrent que la pression interne est proportionnelle au carré de la quantité de matière n et inversement proportionnelle au carré du volume V . En notant a le coefficient de proportionnalité, appelé coefficient de pression interne, nous écrivons donc :

$$p_i = a \frac{n^2}{V^2} \quad (1.4)$$

Le terme $(p + p_i)$ représente la pression exercée par le gaz parfait, la pression p exercée par le gaz réel est effectivement inférieure.

Nous transformons alors l'équation d'état des gaz parfaits en une équation d'état de gaz interagissant entre elles en remplaçant p par

$p + p_i :$

$$(p + a \frac{n^2}{V^2}) V = nRT \quad (1.5)$$

En tenant compte à la fois du covolume et de la pression interne nous écrivons l'équation d'état de Van der Waals pour n moles de gaz :

$$(P + a \frac{n^2}{V^2}) (V - B) = nRT \quad (1.6)$$

Avec,

P est la pression absolue du gaz réel

a et b sont des constantes positives de l'équation de Van Der Waals qui dépendent de la nature du fluide (et non pas des variables d'état $P, V \dots$). Le tableau 1.1 donne quelques valeurs de ces paramètres.

Tableau 1.1. Constantes a et b de l'équation de Van Der Waals

Fluide	$a \times 10$ (Pa. m ⁶ /mol ²)	$b \times 10$ (Pa. m ⁶ /mol ²)
H ₂ O	5,536	3,049
O ₂	1,378	3,183
H ₂	0,2476	2,661
N ₂	1,408	3,913

C .Etude expérimentale des gaz réels :

La représentation des isothermes de Van Der Waals sur le diagramme de Clapeyron (P, V), nous permet de constater les faits suivants (Figure ci-dessous):

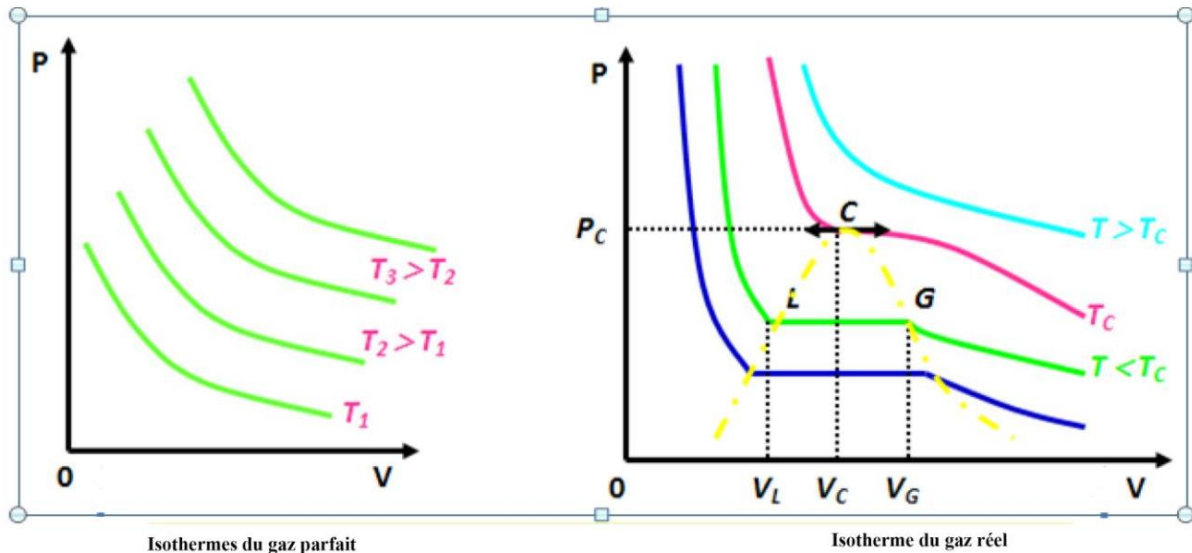


Figure 1. 5.La représentation des isothermes de Van Der Waals sur le diagramme de Clapeyron (P, V),

- ❖ Les gaz réels ont un comportement très différent de celui des gaz parfaits aux hautes pressions.
- ❖ La loi des gaz parfaits $PV = RT$ ne permet plus de décrire les gaz réels. D'où la nécessité d'autres lois plus complexes pour étudier les gaz réels.
- ❖ De plus le comportement des gaz réels montre qu'il sont liquéfiables à une température inférieure à la température critique TC .

1.6.2.Equation de BERTRHELOT:

Elle s'écrit:

$$\left(p + \frac{a}{Tv^2}\right)(v - b) = RT \quad (1.7)$$

Ou bien :

$$P(T, v) = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{Tv^2} \quad (1.8)$$

$$P(T, \rho) = \frac{\rho RT}{(1-\rho b)} - \frac{a\rho^2}{T} \quad (1.9)$$

Avec: $a = 3 P_c V_c^2$, $b = \frac{V_c}{3}$ et $R = \frac{8 P_c V_c}{3 T_c}$.

1.6.3. Equation de CAUSIUS (1880):

S'exprime par:

$$\left(P + \frac{a}{T(v+c)^2}\right)(v-b) = RT \quad (1.10)$$

Ou bien :

$$P(T, v) = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{T(v+c)^2} \quad (1.11)$$

$$P(T, \rho) = \frac{\rho RT}{(1-\rho b)} - \frac{a\rho^2}{T(1+c\rho)^2} \quad (1.12)$$

$$a = \frac{27R^2T_c^3}{64P_c}, \quad b = V_c - \frac{RT_c}{4P_c}, \quad c = \frac{3RT_c}{8P_c} - V_c$$

Cette équation constitue une amélioration de l'équation de VAN DER WAALS. Elle donne une approximation assez bonne dans le domaine correspondant à : $v > 1 V_c$, $P < 4P_c$, $T < 2T_c$.

Mauvaise approximation dans le domaine des gaz à pression et température élevées et dans le domaine des liquides.

1.6.4. Equation de REDLICH-KWONG (1949):

S'exprime par:

$$(v-b) \left[P + \frac{a}{\sqrt{T}v(v-b)} = RT \right] \quad (1.13)$$

$$P(T, v) = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{v(v-b)\sqrt{T}} \quad (1.14)$$

$$P(T, \rho) = \frac{\rho RT}{(1-\rho b)} - \frac{a\rho^2}{\sqrt{T}(1-\rho b)} \quad (1.15)$$

$$a = \frac{0.42748 R^2 T_c^{2.5}}{P_c} \quad \text{et} \quad b = \frac{0.08662 R T_c}{P_c}$$

Basée sur des considérations théoriques et pratiques. Fournit une bonne approximation pour les températures $T > T_c$.

Dans les domaines des liquides et du gaz à masse volumique élevée, les résultats quoique moins bons sont satisfaisants

1.6.5 Equation de BERTTIE-BRIDGEMAN (1928):

S'exprime par:

$$P(T, v) = \frac{RT}{v^2} \left(1 - \frac{c}{vT^3}\right) \left(v + B_0 - \frac{bB_0}{v}\right) - \frac{A_0}{v^2} \left(1 - \frac{a}{v}\right) \quad (1.16)$$

$$P(T, \rho) = RT \rho + \left(B_0 RT - A_0 - \frac{Rc}{T^2}\right) \rho^2 - \left(-B_0 b RT + A_0 a - \frac{R B_0 c}{T^2}\right) \rho^3 + \frac{R B_0 b c}{T^2} \rho^4 \quad (1.17)$$

Les constantes $a, b, c, a_0,$ et B_0 sont déterminées empiriquement à partir des données expérimentales P, v, T .

- En général, elle peut être appliquée pour $v > 2 v_c$ et $T > 1.5 T_c$

1.6.6. Equation de Dieterici :

$$\text{S'exprime par : } P(T, v) = \frac{RT}{(v-b)} e^{\frac{-a}{RTv}} \quad (1.18)$$

$$P(T, \rho) = \frac{\rho RT}{(1-\rho b)} e^{\frac{-a\rho}{RT}} \quad (1.19)$$

$$a = P_c V_c^2 e^2 \quad , \quad b = \frac{V_c}{2} \quad , \quad R = \frac{P_c e^2 V_c}{2T_c}$$

1.6.7. Equation de Wohl :

$$\text{S'exprime par: } P(T, v) = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{T_v(v-b)} + \frac{c}{T^2 v^3} \quad (1.20)$$

$$P(T, \rho) = \frac{\rho RT}{(1-\rho b)} - \frac{a\rho^2}{T(1-\rho b)} + \frac{c\rho^3}{T^2} \quad (1.21)$$

$$a = 6P_c T_c V_c^2, \quad b = \frac{V_c}{4}, \quad \text{et} \quad c = 4P_c V_c^3 T_c^2$$

1.6.8. Equation de Berthelot Modifiée :

L'équation finale de la pression en fonction de la température et de la masse volumique sous la forme :

$$P(T, \rho) = \frac{\rho RT}{\left[1 - \left[\left(\frac{9\rho RT_c}{128P_c} \right) \left(1 - \frac{6T_c^2}{T^2} \right) \right] \right]} \quad (1.22)$$

1.7. Les coordonnées du point critique- équations réduites :

- Pour $T > T_c$, $P \downarrow$ quand $V \uparrow$. Pour une valeur de P , correspond une seule valeur de v qui est le volume réellement occupé par le gaz à cette température et à cette pression.
- Pour $T < T_c$, les isothermes présentent un minimum E et un maximum F
- A une valeur de P , peuvent correspondre 3 valeurs de volumes (3 racines)

A mesure de l'accroissement de la température, les 3 racines se confondent fournissant un point d'inflexion sur l'isotherme correspondante où la tangente est parallèle à l'axe des abscisses. Ce point est caractérisé par une pression critique P_c , une température critique T_c et un volume critique V_c .

Physiquement seules les branches BG et AH représentent des états stables du fluide.

$$\text{BG} \rightarrow \text{état gazeux} \quad \text{AH} \rightarrow \text{état liquide}$$

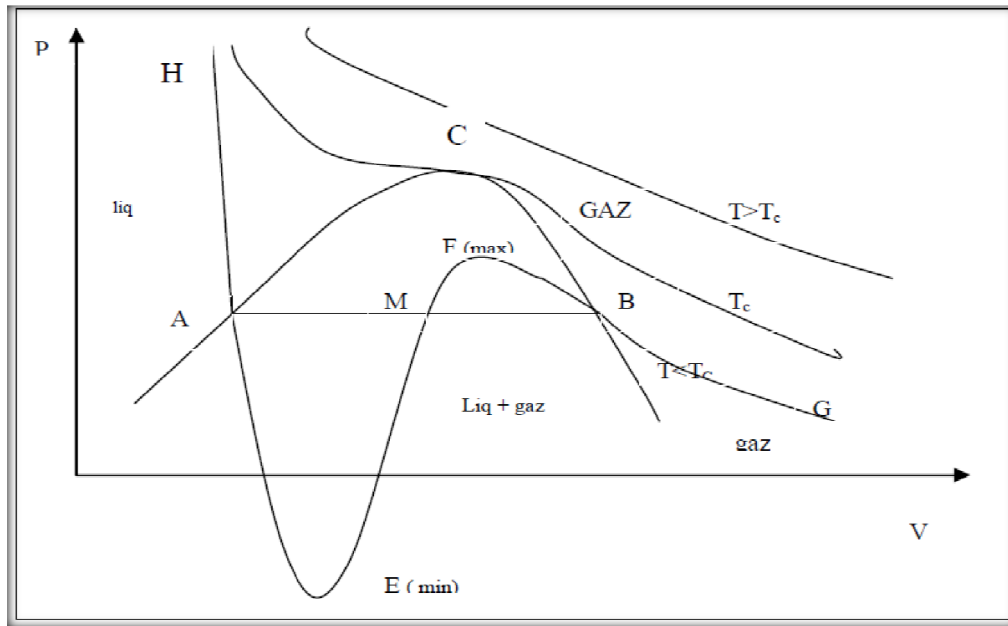


Figure 1. 6 : représentation graphique de l'état du fluide pour le cas d'un gaz réel

Les états d'équilibres du fluide représentés par des portions AE et BF de l'isotherme sont des états d'équilibre métastables.

AE : correspond au retard de la vaporisation.

BF : correspond au retard de la condensation.

La portion d'isotherme EMF n'est pas observable car elle est relative à des états instables. P et V évoluent dans le même sens.

1.7.a. application pour l'équation de Berthelot :

Elle s'écrit :

$$\left(P + \frac{a}{T v^2}\right)(v - b) = RT$$

Ou bien :

$$P(T, v) = \frac{RT}{(v - b)} - \frac{a}{v^2 T}$$

Calculons les coordonnées du point critique C (PC, VC, TC) en fonction de (a, b et r).

L'équation caractéristique: $P(T, v) = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{T v^2}$

En point critique C : $P_c = \frac{RT_c}{(v_c-b)} - \frac{a}{T_c v_c^2}$ (1.23)

Tangente horizontale en C : $\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_{T_c} = 0 \rightarrow \frac{RT_c}{(v_c-b)^2} = \frac{2a}{T_c v_c^3}$ (1.24)

Point inflexion en C : $\left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_{T_c} = 0 \rightarrow \frac{RT_c}{(v_c-b)^3} = \frac{3a}{T_c v_c^4}$ (1.25)

Divisons l'équation (2.32) par l'équation (2.33), on obtient:

$$(V_c - b) = \frac{2}{3} V_c \rightarrow V_c = 3 b \quad (1.26)$$

Remplaçons l'équation (1.26) dans l'équation (1.25), on obtient :

$$T_c = \frac{8}{27} \frac{a}{Rb} \quad (1.27)$$

Remplaçons les équations (1.26) et (1.27) dans l'équation (1.8), on obtient:

$$P_c = \frac{a}{27b^2} \quad (1.28)$$

1.7.b. Calcul des constants a, b et R:

$$\text{En C, on a : } \begin{cases} V_c = 3b \\ T_c = \frac{8}{27} \frac{a}{Rb} \\ P_c = \frac{a}{27b^2} \end{cases}$$

Ici nous avons trois équations à trois inconnues, la solution de ce système donne :

$$\begin{cases} a = 3 P_c V_c^2 T_c \\ b = \frac{V_c}{3} \\ R = \frac{8 P_c V_c}{3 T_c} \end{cases} \quad (1.29)$$

Les caractéristiques critiques de l'air sont : $T_c=132,6$ K, $P_c=37,7$ 105Pa, $V_c=0.1173$ L.

7.c. Equation réduite :

En remplaçant les constantes a, b et R dans l'équation de BERTHLOT :

On obtient :

$$\left(P + \frac{3 P_c V_c^2 T_c}{T V^2}\right) \left(v - \frac{V_c}{3}\right) = \frac{8}{3} P_c V_c \frac{T}{T_c} \quad (1.30)$$

Divisons par P_c et V_c , ça donne :

$$\left(\frac{P}{P_c} + 3 \frac{V_c^2 T_c}{V^2 T}\right) \left(\frac{V}{V_c} - \frac{1}{3}\right) = \frac{8}{3} \frac{T}{T_c} \quad (1.31)$$

L'équation réduite de BERTHELOT sous la forme :

$$\left(\omega + 3 \frac{1}{\theta \varphi^2}\right) \left(\varphi - \frac{1}{3}\right) = \frac{8}{3} \theta \quad (1.32)$$

Cependant, à la suite d'expériences, BERTHELOT a trouvé une meilleure représentation des résultats expérimentaux pour les gaz réels en dehors du point critique, par l'équation modifiée suivante :

$$\left(\omega + \frac{16}{3} \frac{1}{\theta \varphi^2}\right) \left(\varphi - \frac{1}{4}\right) = \frac{32}{9} \theta \quad (1.33)$$

L'équation (1.33) s'appelle Équation réduite modifiée de BERTHELOT, Avec cette équation, les constantes a , b et R , auront pour valeurs dans l'équation de BERTHELOT :

$$\left\{ \begin{array}{l} a = \frac{16}{3} P_c V_c^2 T_c \\ b = \frac{V_c}{4} \\ R = \frac{32}{9} \frac{P_c V_c}{T_c} \end{array} \right.$$

Il est à rappeler que l'équation réduite modifiée de BERTHELOT, à l'encontre de celle de VAN DER WAALS, n'est pas applicable au point critique et en son voisinage. Par ailleurs, l'équation réduite de BERTHELOT est plus précise que celle de VAN DER WAALS. Elles servira en particulier pour les calculs des correction à apporter aux grandeurs thermodynamiques des gaz parfaits.

1.8. Equations de VIRIEL:

L'équation d'état relative à une mole de gaz réel peut être représentée par un développement du produit $P.V/RT$:

• Soit en fonction du volume v du gaz :

$$\frac{PV}{rT} = 1 + \frac{A}{V} + \frac{B}{V^2} + \frac{C}{V^3} + \dots \dots \dots (1.34)$$

• Soit en fonction de la pression P du gaz :

$$\frac{PV}{rT} = 1 + \bar{A}P + \bar{B}P^2 + \bar{C}P^3 + \dots \quad (1.35)$$

Ces deux équations $\frac{PV}{rT} = f\left(\frac{1}{V}\right)$ et $\frac{PV}{rT} = f(P)$ portent le nom d'équations de VIRIEL.

Généralement s'en limitera aux trois premiers termes du développement. Il est à noter que les coefficients $A, \bar{A}, B, \bar{B}, C, \bar{C}$ sont fonction de la température.

1.9. Facteur de compressibilité:

L'équation d'état des gaz réels peut également être utilisée sous la forme très générale $P \cdot V = Z \cdot R \cdot T$. Z est appelé coefficient ou facteur de compressibilité.

$$\text{L'équation de Berthelot : } \left(P + \frac{a}{TV^2}\right)(v - b) = RT$$

$$\left(P + \frac{a}{TV^2}\right)(V - b) = RT \rightarrow PV - Pb + \frac{a}{TV} - \frac{ab}{TV^2} = RT \quad (1.36)$$

Finalemment :

$$z = 1 + \frac{Pb}{RT} - \frac{a}{RT^2V} + \frac{ab}{RT^2V^2} \quad (1.37)$$

1.10. Choix de l'équation d'état :

Les différentes lois d'état ont été exposées. Il convient maintenant de choisir laquelle nous allons utiliser dans notre modèle.

Le tableau 1. 2. représente une comparaison entre les valeurs expérimentales de l'air et les résultats numériques obtenu par des séries de testes pour chaque équation du gaz réel. Si on accepte une erreur inférieure à 5 %, ce qui est le cas généralement pour les applications aérodynamiques, on peut étudier un écoulement supersonique en utilisant les d'un gaz réels, si la température T et la pression P bien déterminées. Les conditions nécessaires pour obtenir une erreur inférieure à 5 % présentées dans le tableau suivant :

Tableau 1. 2 : comparaison entre les valeurs expérimentales de l'air et les résultats numériques pour chaque équation du gaz réel.

	1 Bar	10 Bar	100 Bar
Van der waals	√	T > 132.5K	T > 300K
berthelot	√	√	√
Dieterici	T > 170K	T > 230K	T > 440K
Redilchkwong	√	T > 170K	T > 270K
Beattie- Bridgeman	√	T > 170K	T > 298K
Clausius	T > 201K	T > 489K	Toujours > 15%
Wohl	√	T > 186K	T > 300K
Berthelot modifiée	√	T > 166K	T > 274k

L'équation du Viriel, tronquée au deuxième ou troisième coefficient, ne traduit pas suffisamment les effets observés à haute pression, elle n'est donc pas adaptée à notre étude .

Les équations empiriques et semi-empiriques dites non analytiques sont généralement plus précises mais nécessitent de connaître un grand nombre de constantes qui peuvent être difficiles à obtenir dans la littérature.

Ainsi, notre choix se porte sur l'équation d'état analytique de Berthelot requière un nombre de paramètres limité et peuvent être résolue de manière analytique tout en conduisant à une bonne estimation du comportement des gaz.

L'équation d'état de Berthelot ne nécessite que deux coefficients, a et b , disponibles dans la littérature.

1.11. Validation du choix de l'équation de Berthelot :

Nous venons de choisir la loi d'état de Berthelot pour son faible nombre de coefficient et sa simplicité. Il convient donc de s'assurer de la validité des résultats que donne cette loi, et aussi de vérifier les différences par rapport à la loi des gaz parfaits pour le gaz retenu pour cette validation qui est dans notre étude l'air. On compare, sur le Tableau , la masse volumique de l'air calculée avec la loi des gaz parfaits et la loi de Berthelot, aux valeurs expérimentales d'une base de données , sur le Tableau . On remarque que pour ces températures et ces pressions, les gaz ne se comportent pas du tout comme des gaz parfait, et que la loi de Berthelot donne des valeurs plus correctes de la masse volumique, l'analyse de ces résultats sera bien détailler dans le quatrième chapitre. La loi de Berthelot est donc utilisable et justifiée

Tableau 1. 3 : Valeurs numériques de la masse volumique ρ par le modèle de Berthelot pour des différentes pressions.

	P=1(atm)			P=10(atm)			P=100(atm)		
T(K)	$\rho(g/cm^3)$ GP	$\rho(g/cm^3)$ Berthelot	Erreur %	$\rho(g/cm^3)$ GP	$\rho(g/cm^3)$ Berthelot	Erreur %	$\rho(g/cm^3)$ GP	$\rho(g/cm^3)$ Berthelot	Erreur %
298.15	1.18413	1.18262	0.127	11.84131	11.69331	1.250	118.41314	105.10024	11.243
500	0.70609	0.70554	0.078	7.06097	7.00792	0.751	70.60975	65.64144	7.036
1000	0.35304	0.35291	0.039	3.53048	3.517114	0.378	35.30487	34.01631	3.650
1500	0.23536	0.23530	0.025	2.35365	2.34772	0.252	23.53658	22.95672	2.464
2000	0.17652	0.17644	0.042	1.76524	1.76190	0.189	17.65243	17.32422	1.859
2500	0.14121	0.14114	0.049	1.41219	1.41004	0.152	14.12195	13.91110	1.493
3000	0.11768	0.11764	0.028	1.17682	1.17532	0.128	11.76829	11.62150	1.247

Tableau 1.4 : Valeurs expérimentales de la masse volumique ρ pour des différentes pressions et températures

La pression P (bar)	La température T(K)	masse volumique ρ (g/cm^3)
1	500	0.696
1	1000	0.348
10	200	17.835
10	300	11.643
10	500	6.944
10	1000	3.471
100	200	213.950
100	300	116.945
100	500	66.934
100	1000	33.613

1.12. Conclusion:

Dans le but de développer les relations des rapports thermodynamiques et géométriques nécessaires, et d'étudier l'écoulement supersonique isentropique pour un gaz réel (cas de l'air) en utilisant l'équation de Berthelot qui introduit les effets de taille moléculaire et de la force intermoléculaire. Cette équation, plutôt que les autres équations d'états, est utilisée pour que des évaluations légèrement meilleures des effets de force intermoléculaire puissent être obtenues. Cette dernière sera utilisé pour développer un nouveau modèle mathématique pour déterminer les relations thermodynamiques et géométriques dans le chapitre suivant.

Chapitre 2 :
Enthalpie et les écoulements supersonique

2.1. Introduction:

Une large variété de problèmes dans l'écoulement compressible a été résolue sur l'hypothèse que l'air se comporte comme gaz parfait. Cette hypothèse est justifiée, fourni la pression et la température ambiante d'intérêt est petit et proche atmosphérique. Cependant, que quand de l'air est soumis aux changements de l'état aux pressions et aux températures loin enlevé d'atmosphérique, il cesse de se conformer à la loi simple de gaz et présente d'autres propriétés non caractéristiques d'un gaz parfait. En conséquence, des procédés d'écoulement dans lequel aèrent sous réserve de ces conditions extrêmes peut être prévu s'écarter du comportement de gaz parfait. il est connu que qu'un tel écoulement sera produit dans des souffleries hypersoniques et par le vol d'avions aux vitesses anémométriques supersoniques élevées, par conséquent, la nature et l'ampleur de ce lièvre de départ deviennent des considérations importantes en aérodynamique.

Les théories et les expériences classiques ont prouvé que des trois propriétés de gaz réel, d'abord il pour montrer des caractéristiques à la différence de ceux d'un gaz parfait. Ces propriétés peuvent être classifiées en tant qu'imperfections thermiques et caloriques. Les imperfections thermiques sous forme de forces intermoléculaires et de taille moléculaire sont sensiblement manifestes à de basses températures et à pressions. Les changements des capacités de chaleur deviennent une imperfection calorique importante relativement à températures élevées. Des circonstances dans lesquelles les effets de la dissociation moléculaire ou de l'excitation électronique deviennent importants (les températures sensiblement au-dessus de 3550 K) peuvent être négligées pour le présent. Pour autant que des gaz en équilibre soient concernés, il est habituellement suffisant d'expliquer la force intermoléculaire et les effets de taille moléculaires avec des limites additionnelles dans l'équation d'état. De même, des changements des capacités de chaleur des molécules peuvent être expliqués avec une fonction de la température dans les expressions dans les chaleurs spécifiques.

Dans ce chapitre, des équations d'écoulement sont obtenues à l'aide de l'équation d'état de Berthelot. Cette équation, plutôt que Van der Waals', est utilisée pour que des évaluations légèrement meilleures des effets de force intermoléculaire puissent être obtenues. On le suppose que des imperfections caloriques peuvent être expliquées dans les expressions des chaleurs spécifiques.

2.2. Hypothèses de base :

L'air se comporte comme un gaz diatomique qui a :

- une constante universelle du gaz $R=8.3145 \text{ J}/(\text{mol.K})$.
- une température caractéristique de vibration $\theta =3056 \text{ K}$.
- une masse molaire $m=28.96 \text{ g/mol}$.

Les paramètres de stagnation (pression et température génératrices) obéissent à la loi des gaz réels, en exploitant l'équation de Berthelot qui introduit les effets de taille moléculaire (covolume) et de la force intermoléculaire.

La combustion et l'écoulement des gaz dans les différentes stations sont adiabatiques, c'est-à-dire qu'il n'y a pas de perte de chaleur due à l'environnement.

Les conditions d'un état stable existent au cours des opérations thermiques. Ceci veut dire que les conditions ou procédés qui surviennent ne changent pas avec le temps (pour des conditions géométriques données) durant la combustion (régime stationnaire).

L'expansion (la détente) de l'air a lieu de manière uniforme sans choc ni discontinuités.

L'écoulement à travers la tuyère est unidimensionnel et isentropique.

La vitesse, la pression, la température et la densité de l'écoulement est uniforme à travers n'importe quel coupe perpendiculaire à l'axe de la tuyère.

La force de frottement dû à l'écoulement des produits d'échappement est négligeable mais la force d'attraction intermoléculaire de Berthelot existe.

Les effets de transfert thermique par conduction, convection ou rayonnement sont négligeables.

Le fluide (air) est thermiquement et calorifiquement imparfait.

L'effet de joule Thomson est présent dans ce travail.

Toute hypothèse supplémentaire sera dictée -si c'est nécessaire-durant les prochaines analyses. Bien qu'il semble avoir eu beaucoup de suppositions simplificatrices, celles-ci sont toutes raisonnables et on peut s'attendre qu'elles reflètent le véritable comportement de notre domaine d'étude assez précisément.

2.3. Configuration des équations :

Dans le but de développer les relations des rapports thermodynamiques et géométriques nécessaires, et d'étudier l'écoulement supersonique isentropique pour un gaz réel (cas de l'air) en utilisant l'équation de Berthelot qui introduit les effets de taille moléculaire et de la force intermoléculaire.

L'équation de Berthelot elle s'écrit:

$$\left(P + \frac{a}{Tv^2}\right)(v - b) = RT \quad (2.1)$$

Ou bien :

$$P(T, v) = \frac{RT}{(v - b)} - \frac{a}{Tv^2} \quad (2.2)$$

Connaissons: $v = \frac{1}{\rho}$

$$P(T, \rho) = \frac{\rho RT}{(1 - \rho b)} - \frac{a\rho^2}{T} \quad (2.3)$$

Avec: $a = 3P_c V_c^2$ et $b = \frac{V_c}{3}$

Avec : b est la constante de taille moléculaire.

a est la constante des forces intermoléculaire.

P_c, V_c : sont la pression et le volume critique.

2.3.1. L'équation de la conservation d'énergie :

L'équation d'énergie pour un écoulement adiabatique est [16] :

$$dH + VdV = 0 \quad (2.4)$$

$$D'autre part: dH = C_p dT + (h + v)dP \quad (2.5)$$

$$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P dT + \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T dP \quad (2.6)$$

Avec:

$$\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T = h + V \quad (2.7)$$

$$h = -T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P \quad (2.8)$$

$$\text{Alors : } \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T = V - T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P \quad (2.9)$$

$$\text{On a : } \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v \cdot \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial v}\right)_P = -1 \Rightarrow \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v = \frac{-1}{\left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial v}\right)_P} \quad (2.10)$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v = - \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T \quad (2.11)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P = - \frac{\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v}{\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T} \quad (2.12)$$

$$\text{L'équation de Berthelot : } P = \frac{RT}{(v-b)} - \frac{a}{Tv^2}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v = \frac{R}{(v-b)} - \frac{a}{T^2 v^2}, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_T = \frac{-RT}{(v-b)^2} + \frac{2a}{Tv^3},$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P = - \frac{-RT^2 v^3 (v-b) + av(v-b)^2}{2aT(v-b)^2 - RT^3 v^3} \quad (2.13)$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T = v - T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P = v \cdot \left(\frac{3a(v-b)^2 - RT^2 v^2 b}{2a(v-b)^2 - RT^2 v^3}\right) \quad (2.14)$$

$$\text{Posons : } C = \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T \Rightarrow C = v \cdot \left(\frac{3a(v-b)^2 - RT^2 v^2 b}{2a(v-b)^2 - RT^2 v^3}\right) \quad (2.15)$$

$$\text{Connaissons : } v = \frac{1}{\rho} \quad (2.16)$$

Remplaçons l'équation (2.16) dans l'équation (2.15) on obtient:

$$C = \left(\frac{3ab^2 \rho^2 - 6ab\rho - RT^2 b + 3a}{2ab^2 \rho^3 - 4ab\rho^2 + 2a\rho - RT^2}\right) \quad (2.17)$$

. Détermination la différentielle dP en fonction de dp lorsque la température T sera constante :

La relation (2.6) s'écrit : $dH = C_p dT + C dp$ (2.18)

Avec : $C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P$, et $C = \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T$

$$P = \frac{\rho RT}{(1 - \rho b)} - \frac{a\rho^2}{T}$$

La différentielle dP en fonction de dp lorsque la température T est constante donne :

$$dP = d\left(\frac{\rho RT}{(1-\rho b)} - \frac{a\rho^2}{T}\right)_{T=cte} = \frac{\partial}{\partial \rho}\left(\frac{\rho RT}{(1-\rho b)} - \frac{a\rho^2}{T}\right)_{T=cte} d\rho$$

$$dP = \left(\frac{RT^2 - 2a\rho(1-\rho b)^2}{T(1-\rho b)^2}\right) d\rho \quad (2.19)$$

Remplaçons l'équation (2.19) dans l'équation (2.18), on obtient:

$$dH = C_p dT + C dP = C_p dT + \underbrace{\left(C \cdot \left(\frac{RT^2 - 2a\rho(1-\rho b)^2}{T(1-\rho b)^2}\right)\right)}_{C_T} d\rho$$

Alors:

$$C_T(T, \rho) = C \cdot \left(\frac{RT^2 - 2a\rho(1-\rho b)^2}{T(1-\rho b)^2}\right) = \left(\frac{3ab^2\rho^2 - 6ab\rho - RT^2b + 3a}{2T\rho b - Tb^2\rho^2 - T}\right) \quad (2.20)$$

Donc:

$$dH = C_p(T, \rho)dT + C_T(T, \rho)d\rho \quad (2.21)$$

L'identification entre les relations (2.4) et (2.21) donne:

$$VdV = -dH = -C_p(T, \rho)dT - C_T(T, \rho)d\rho \quad (2.22)$$

2.3.3. Détermination la différentielle dp/ρ :

L'équation de Bernoulli donne :

$$VdV + \frac{dP}{\rho} = 0 \quad (2.23)$$

Par la multiplication et la division par dp, on trouve :

$$VdV + \left(\frac{dP}{d\rho}\right)_{S=cte} \cdot \frac{d\rho}{\rho} = 0 \quad (2.24)$$

$$\text{Connaissons que la célérité du son : } C_S^2 = \left(\frac{dP}{d\rho}\right)_{S=cte} \quad (2.25)$$

La relation (2.24) devient :

$$VdV + C_S^2 \frac{d\rho}{\rho} = 0 \quad (2.26)$$

Remplaçons l'équation (2.22) dans l'équation (2.26), on obtient:

$$[-C_p(T, \rho)dT - C_T(T, \rho)d\rho] + C_S^2 \frac{d\rho}{\rho} = 0 \quad (2.27)$$

Alors:

$$\frac{d\rho}{\rho} = \frac{c_P(T,\rho)}{c_S^2} dT + \frac{c_T(T,\rho)}{c_S^2} d\rho \quad (2.28)$$

2.3.4. Détermination les paramètres thermodynamique pour les gaz réels :

L'écoulement isentropique d'un gaz caractérisé par l'équation de Berthelot peut être étudié à l'aide de la différentielle de l'équation d'expansion isentropique :

$$du + dw = 0 \quad (2.29)$$

$$\text{Sachant que: } du = \left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T dv + \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_v dT \quad (2.30)$$

$$\text{On a : } v = \frac{1}{\rho} \Rightarrow dv = -\frac{1}{\rho^2} d\rho \quad (2.31)$$

Remplaçons l'équation (2.31) dans l'équation (2.30), on obtient:

$$du = \left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T d\left(\frac{1}{\rho}\right) + \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_v dT \quad (2.32)$$

$$dw = Pdv = pd\left(\frac{1}{\rho}\right) \quad (2.33)$$

Remplaçons les équations (2.32) et (2.33) dans l'équation (2.29), on obtient:

$$du + dw = \left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T \cdot d\left(\frac{1}{\rho}\right) + \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_v dT + pd\left(\frac{1}{\rho}\right) \quad (2.34)$$

Avec:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_v = C_v \quad (2.35)$$

L'effet de Joule-Thomson est donné par :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho - P = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho - \frac{\rho RT}{1 - b\rho} + \frac{a\rho^2}{T} \quad (2.36)$$

La différentielle de la pression est calculée à partir de l'équation (2.3) :

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho = \frac{R\rho}{1 - b\rho} + \frac{a\rho^2}{T^2} \quad (2.37)$$

L'équation (2.36) devient:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_T = \frac{2a\rho^2}{T} \quad (2.38)$$

Combinant les équations (2.35), (2.31) et (2.38) et substituant la valeur de p de l'équation de Berthelot dans l'équation (2.34), on trouve :

$$c_v dT - \frac{a}{T} d\rho - \frac{RT}{\rho(1-b\rho)} d\rho = 0 \quad (2.39)$$

Maintenant l'expression de la différentielle de c_v est donnée par :

$$\left(\frac{\partial c_v}{\partial v}\right)_T = T \left(\frac{\partial p^2}{\partial T^2}\right)_\rho \quad (2.40)$$

La deuxième dérivée de la pression par rapport à la température à masse volumique constante est calculée en exploitant l'équation de Berthelot, donc :

$$\left(\frac{\partial p^2}{\partial T^2}\right)_\rho = -2 \frac{a\rho^2}{T^3}$$

, donc

$$T \left(\frac{\partial p^2}{\partial T^2}\right)_\rho = -2 \frac{a\rho^2}{T^2} \quad (2.41)$$

Alors l'équation (2.40) s'écrit : $\left(\frac{\partial c_v}{\partial v}\right)_T = -2 \frac{a\rho^2}{T^2} \quad (2.42)$

L'intégration de l'équation (2.42) en utilisant la pression de l'équation d'état de Berthelot nous donne :

$$\int \left(\frac{\partial c_v}{\partial v}\right)_T = \int -\frac{2a}{T^2 v^2} \quad (2.43)$$

$$\text{Donc : } c_v = \int \left(-\frac{2a}{T^2 v^2}\right) \partial v \quad (2.44)$$

Avec

$$v^2 = \frac{1}{\rho^2}$$

$$c_v = c_v^0 + \frac{2a\rho^2}{T} \quad (2.45)$$

Où c_v^0 est la fonction qui décrit la variation de c_v en fonction de la température, et le deuxième terme représente l'effet de l'imperfection du gaz sur c_v .

La fonction choisie pour c_v^0 est déterminée sous la considération de la structure moléculaire et la gamme de température où l'effet sur c_v existe.

Pour un gaz diatomique la gamme de température est important à partir de la température de liquéfaction jusqu'à quelque mille de degré Kelvin, dans ce cas (gaz diatomique) le nombre de degré de liberté translationnel et rotationnel est constant alors que c_v^0 est varié en fonction de la température vibrationnelle. Pour ce fait la fonction de c_v^0 peut-être s'écrit comme suite :

$$c_v^0 = c_{v_{gp}} \left\{ 1 + (\gamma_{gp} - 1) \left(\frac{\theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\left(\frac{\theta}{T} \right)}}{\left(1 - e^{\left(\frac{\theta}{T} \right)} \right)^2} \right\} \quad (2.46)$$

Le deuxième terme dans les parenthèses, essentiellement le terme de Planck, explique la contribution vibratoire de la chaleur spécifique à volume constant.

La supposition est que les molécules du gaz se comportent comme les oscillateurs harmoniques linéaires pour autant que les degrés de liberté vibrationnels soient concernés.

2.3.4.1. L'état générateur :

Ça représente l'état dans la chambre de combustion où la vitesse de l'écoulement est considérée comme étant nulle [13] et [14] ($V_0 = 0 \Rightarrow M = 0$), et les propriétés de stagnation (T_0, ρ_0, P_0) sont des paramètres générateurs. En d'autres mots, T_0 est la température de combustion, P_0 est la pression de la chambre et ρ_0 est la densité de combustion sous les conditions de la chambre.

T_0 et P_0 sont des paramètres liés à la conception de la chambre de combustion. la détermination de ρ_0 sera obtenue par l'application de la méthode de dichotomie [9] sur l'équation de Berthelot.

2.3.4.2. La forme intégrale de l'équation d'énergie pour l'équation de Berthelot :

Une expression qui gouverne l'expansion isentropique d'un gaz réel diatomique peut s'obtenir maintenant par la substitution des équations (2.45) et (2.46) dans l'équation (2.39) et on intègre de l'état génératrice à un état statique donné on trouve:

$$c_v dT - \frac{a}{T} d\rho - \frac{RT}{\rho(1-b\rho)} d\rho = 0 \quad (2.47)$$

Devisant cette équation par "T" on obtient :

$$c_v \frac{dT}{T} - \frac{a}{T^2} d\rho - \frac{R}{\rho(1-b\rho)} d\rho = 0 \quad (2.48)$$

On intègre l'équation (2.48) de l'état génératrice à un état statique donné on trouve:

$$\int_{T_0}^T c_v \frac{dT}{T} - \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{a}{T^2} d\rho - \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{R}{\rho(1-b\rho)} d\rho = 0 \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \int_{T_0}^T c_v \frac{dT}{T} &= \int_{T_0}^T \left(c_{v_{gp}} \left\{ 1 + (\gamma_{gp} - 1) \left(\frac{\theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\theta}{T}}}{\left(1 - e^{\frac{\theta}{T}} \right)^2} \right\} + \frac{2a\rho}{T^2} \right) \frac{dT}{T} \\ &= \int_{T_0}^T (c_{v_{gp}}) \frac{dT}{T} + \int_{T_0}^T \left(\left\{ (\gamma_{gp} - 1) \left(\frac{\theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\theta}{T}}}{\left(1 - e^{\frac{\theta}{T}} \right)^2} \right\} \right) \frac{dT}{T} + \int_{T_0}^T \left(\frac{2a\rho}{T^2} \right) \frac{dT}{T} \end{aligned}$$

$$= C_{V_{gp}} \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) + R \ln \left(\frac{e^{\frac{\theta}{T_0}-1}}{e^{\frac{\theta}{T}-1}} \right) + R \left(\frac{\theta}{T} \frac{e^{\frac{\theta}{T}}}{e^{\frac{\theta}{T}-1}} - \frac{\theta}{T_0} \frac{e^{\frac{\theta}{T_0}}}{e^{\frac{\theta}{T_0}-1}} \right) - a \left(\frac{\rho}{T^2} - \frac{\rho_0}{T_0^2} \right) \quad (2.50)$$

Maintenant :

$$- \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{a}{T^2} d\rho = -a \left(\frac{\rho}{T^2} - \frac{\rho_0}{T_0^2} \right) \quad (2.51)$$

Et :

$$- \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{R}{\rho(1-b\rho)} d\rho = R \ln \frac{\rho_0(1-b\rho)}{\rho(1-b\rho_0)} \quad (2.52)$$

La substitution des équations (2.50), (2.51) et (2.52) dans l'équation (2.49) nous permettons d'obtenir l'équation importante suivante :

$$C_{V_i} \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) + R \ln \frac{\rho_0(1-b\rho)}{\rho(1-b\rho_0)} - 2a \left(\frac{\rho}{T^2} - \frac{\rho_0}{T_0^2} \right) + R \ln \frac{\left(e^{\left(\frac{\theta}{T_0} \right)} - 1 \right)}{\left(e^{\left(\frac{\theta}{T} \right)} - 1 \right)} + R \left(\frac{\theta}{T} \frac{e^{\left(\frac{\theta}{T} \right)}}{\left(e^{\left(\frac{\theta}{T} \right)} - 1 \right)} - \frac{\theta}{T_0} \frac{e^{\left(\frac{\theta}{T_0} \right)}}{\left(e^{\left(\frac{\theta}{T_0} \right)} - 1 \right)} \right) = 0 \quad (2.53)$$

La relation (2.53) représente la forme intégrale de l'équation d'énergie d'une détente isentropique caractérisé par l'équation de Berthelot on prend en considération le comportement vibratoire des molécules.

2.3.5 Détermination du nombre de Mach :

Dans le but de déterminer la fonction du nombre de Mach il est nécessaire de trouver la vitesse de l'écoulement ainsi la célérité du son. Ces deux quantités peuvent être trouvées en utilisant l'équation d'énergie pour un écoulement adiabatique [16] :

$$du + d(pv) + VdV = \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_T d \left(\frac{1}{\rho} \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_V dT + d \left(\frac{p}{\rho} \right) + VdV = 0 \quad (2.54)$$

2.3.5.1. Calcul de la vitesse :

Substituant les équations de Berthelot, (2.38), (2.45) et (2.46) dans l'équation (2.54) et on intègre de l'état génératrice à un état statique (température et la masse volumique donné on trouve:

$$VdV = - \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_T d \left(\frac{1}{\rho} \right) - \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_V dT - d \left(\frac{p}{\rho} \right)$$

(2.55)

Avec :

$$d\left(\frac{1}{\rho}\right) = -\left(\frac{d\rho}{\rho^2}\right)$$

$$\int VdV = \int_{\rho_0, T_0}^{\rho, T} \frac{2a}{T} d\rho - \int_{\rho_0, T_0}^{\rho, T} c_v dT - \int_{p_0, T_0}^{p, T} d\left(\frac{p}{\rho}\right)$$

(2.56)

Finalement la fonction de vitesse sera :

$$V^2(T, \rho) = 2 \left\{ c_{v_{gp}}(T_0 - T) + R\theta \left(\frac{1}{\left(1 - e^{\left(\frac{\theta}{T}\right)}\right)} - \frac{1}{\left(1 - e^{\left(\frac{\theta}{T_0}\right)}\right)} \right) + 4a \left(\frac{\rho}{T} - \frac{\rho_0}{T_0} \right) + \left(\frac{p_0}{\rho_0} - \frac{p}{\rho} \right) \right\} \quad (2.57)$$

Ou bien :

D'après l'équation (2.22), on a :

$$VdV = -dH = -C_P(T, \rho)dT - C_T(T, \rho)d\rho$$

Substituant l'équation (2.22) entre l'état génératrice (0) à un état statique quelconque (1) donné par $(T_1, P_1, \rho_1$ et $V_1)$, on trouve:

$$\int_0^{V_1} VdV = - \int_{T_0}^{T_1} C_P(T, \rho)|_{\rho=\rho_1} dT - \int_{\rho_0}^{\rho_1} C_T(T, \rho)|_{T=T_1} d\rho \quad (2.58)$$

Donc :

$$V^2 = -2 \int_{T_0}^{T_1} C_P(T, \rho)|_{\rho=\rho_1} dT - 2 \int_{\rho_0}^{\rho_1} C_T(T, \rho)|_{T=T_1} d\rho \quad (2.59)$$

Alors, on peut calculer la vitesse par deux méthodes, la première méthode est une méthode explicite et simple présentée par l'équation (2.57), ou bien par la méthode intégrale présentée par l'équation (2.59), le test numérique montre que les deux méthodes donnent exactement les mêmes résultats.

2.3.5.2. Détermination de la célérité du son :

La célérité du son correspondante est déterminée par la substitution des équations de Berthelot, (2.45), (2.46) et (2.47) dans l'équation générale suivante :

$$a^2 = d\left(\frac{p}{\rho}\right) = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho \frac{dT}{d\rho} \tag{2.60}$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T = \frac{RT}{(1-b\rho)^2} - \frac{2a\rho}{T} \tag{2.61}$$

D'après l'équation (2.48), on a :

$$\frac{dT}{d\rho} = \frac{1}{c_v} \left(\frac{a}{T} + \frac{RT}{\rho(1-b\rho)} \right) \tag{2.62}$$

L'expression résultante de la célérité du son est :

$$a^2(T, \rho) = \frac{RT}{(1-b\rho)^2} - \frac{2a\rho}{T} + \frac{\rho^2 T \left(\frac{a}{T^2} + \frac{R}{\rho(1-b\rho)} \right)^2}{c_{vgp} \left[1 + (\gamma_{gp} - 1) \left\{ \left(\frac{\theta}{T} \right)^2 \frac{e\left(\frac{\theta}{T}\right)}{\left(1 - e\left(\frac{\theta}{T}\right)\right)^2} + \frac{2a\rho}{RT^2} \right\} \right]} \tag{2.63}$$

2.3.5.3. Le nombre de Mach :

Combinant (2.57) et (2.63) on trouve l'équation du nombre du Mach suivante :

$$M^2(T, \rho) = 2 \left(\frac{\frac{1}{(\gamma_i - 1)} \left(\frac{T_0}{T} - 1 \right) + \left(\frac{\theta}{T} \right) \left(\frac{1}{1 - e\left(\frac{\theta}{T}\right)} - \frac{1}{1 - e\left(\frac{\theta}{T_0}\right)} \right) + \frac{1}{RT} \left(4a \left(\frac{\rho}{T} - \frac{\rho_0}{T_0} \right) + \left(\frac{p_0}{\rho_0} - \frac{p}{\rho} \right) \right)}{\frac{(\gamma_i - 1) \left(\frac{1}{1 - b\rho} + \frac{a\rho}{RT^2} \right)^2}{\left(1 + (\gamma_i - 1) \left(\left(\frac{\theta}{T} \right)^2 \frac{e\left(\frac{\theta}{T}\right)}{\left(1 - e\left(\frac{\theta}{T}\right)\right)^2} + \frac{2a\rho}{RT^2} \right) \right)} + \frac{1}{(1-b\rho)^2} \frac{2a\rho}{RT^2}} \right) \dots \tag{2.64}$$

Si on considère que θ , b , et a sont nuls ; on obtient l'équation suivante :

$$M^2 = 2 \left(\left(\frac{T_0}{T} - 1 \right) \left(\frac{1}{\gamma_{gp} - 1} \right) \right) \tag{2.65}$$

Dans ce cas, le rapport des températures devient :

$$\frac{T}{T_0} = \left(1 + \frac{\gamma_{gp}-1}{2} M^2\right)^{-1} \quad (2.66)$$

Ces relations (2.65) et (2.66) sont les équations qui caractérisent exactement le nombre de mach (cas de détente), et le rapport des températures pour un gaz parfait [13] et [15].

Donc l'équation (2.64) pour un gaz réel, représente la forme générale du nombre de Mach (calorifiquement et thermiquement imparfait).

2.3.6. La chaleur spécifique à volume constant $c_v(T, \rho)$:

La chaleur spécifique à volume constante est obtenue en substituant les équations (2.46) dans l'équation (2.45), pour qu'on trouve la relation suivante :

$$c_v(T, \rho) = c_{v_{gp}} \left\{ 1 + (\gamma_{gp} - 1) \left(\left(\frac{\theta}{T}\right)^2 \frac{e^{\frac{\theta}{T}}}{\left(1 - e^{\frac{\theta}{T}}\right)^2} + \frac{2a\rho}{RT^2}\right) \right\} \quad (2.67)$$

On remarque clairement que la chaleur spécifique à volume constant est indépendante de l'effet de covolume b , et que les paramètres qui l'influent sont seulement les forces d'attraction intermoléculaires et le comportement vibratoire.

Si c'est deux paramètres sont nulles il est aussi clair qu'en revenant à l'état d'un gaz thermiquement et calorifiquement parfait c'est-à-dire

$$c_v(T, \rho) = c_{v(gp)}$$

Si les forces d'attraction intermoléculaires sont nulles ($a=0$) ça va nous revenir au cas d'un gaz thermiquement parfait mais calorifiquement imparfait où la chaleur spécifique à volume constante ne dépend que de la température et le paramètre de comportement vibratoire θ [36] et [37](ce qu'on appelle le modèle HT ou bien gaz parfait à haute température) :

$$c_v(T, \rho) = c_{v(gp)} \left\{ 1 + (\gamma_{(gp)} - 1) \left(\frac{\theta}{T}\right)^2 \frac{e^{\frac{\theta}{T}}}{\left(1 - e^{\frac{\theta}{T}}\right)^2} \right\} \quad (2.68)$$

2.3.7. La chaleur spécifique à pression constante $c_p(T, \rho)$:

La chaleur spécifique à pression constante est par définition donnée par la relation suivante [8]:

$$c_p(T, \rho) = c_v(T, \rho) - \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho^2}{\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T}$$

(2.69)

On rappelle l'équation de Berthelot en termes de volume :

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{\dot{a}}{Tv^2}$$

D'où :

$$\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T = -\frac{RT}{(v-b)^2} + \frac{2\dot{a}}{Tv^3} = -\frac{RT\rho^2}{(1-b\rho)^2} + \frac{2\dot{a}\rho^3}{T} \quad (2.70)$$

L'expression résultante de $c_p(T, \rho)$ sera donc obtenue en substituant les équations (2.68),(2.70) et(2.37) dans l'équation(2.69)

$$c_p(T, \rho) = c_{p(gp)} \left[1 + \frac{\gamma_{(gp)} - 1}{\gamma_{(gp)}} \left\{ \left(\frac{\theta}{T^2}\right) \frac{e^{\frac{\theta}{T}}}{\left(1 - e^{\frac{\theta}{T}}\right)^2} + \frac{2\dot{a}\rho}{RT^2} \left[1 + \frac{\left(\frac{2-b\rho}{1-b\rho} + \frac{\dot{a}\rho}{2RT^2}\right)}{\frac{1}{(1-b\rho)^2} \frac{2\dot{a}\rho}{RT^2}} \right] \right\} \right] \quad (2.71)$$

Si on considère que θ , b , et \dot{a} sont nuls ; en revenant à l'état d'un gaz thermiquement et calorifiquement parfait :

$$c_p(T, \rho) = c_{p(gp)}$$

Si on néglige l'effet de l'imperfection des gaz réel (b et \dot{a} nuls) on obtient une relation qui représente le cas d'un gaz thermiquement parfait mais calorifiquement imparfait:

$$c_p(T, \rho) = c_{p(gp)} \left(1 + \frac{\gamma_{(gp)} - 1}{\gamma_{(gp)}} \left(\left(\frac{\theta}{T^2}\right) \frac{e^{\frac{\theta}{T}}}{\left(1 - e^{\frac{\theta}{T}}\right)^2} \right) \right) \quad (2.72)$$

Où la chaleur spécifique à pression constante ne dépend que de la température et le paramètre de comportement vibratoire θ [36](modèle gaz parfait à haute température).

2.3.8 Rapport des chaleurs spécifiques:

Notre domaine d'étude est limité dans le régime supersonique pour un nombre de Mach $M \in [1.0, 6.0]$. Le rapport des chaleurs spécifiques donne la relation suivante:

$$\gamma(T, \rho) = \frac{c_p(T, \rho)}{c_v(T, \rho)} \quad (2.73)$$

Ce rapport des chaleurs spécifique est obtenu en divisant l'équation (2.71) par l'équation (2.67) :

$$\gamma(T, \rho) = \gamma_{(gp)} \left[\frac{1 + \frac{\gamma_{(gp)} - 1}{\gamma_{(gp)}} \left\{ \left(\frac{\theta}{T^2} \right) \frac{e^{\frac{\theta}{T}}}{(1 - e^{\frac{\theta}{T}})^2} + \frac{2\dot{a}\rho}{RT^2} \left[1 + \frac{(2 - b\rho + \dot{a}\rho)}{(1 - b\rho + \frac{\dot{a}\rho}{2RT^2})} \right] \right\}}{1 + (\gamma_{(gp)} - 1) \left(\frac{\theta}{T^2} \right) \frac{e^{\frac{\theta}{T}}}{(1 - e^{\frac{\theta}{T}})^2} + \frac{2\dot{a}\rho}{RT^2}} \right] \quad (2.74)$$

Cas de l'air : $\gamma_i = 1.402$, $R = 287.0 [J/KgK]$, $C_{V_i} = \frac{R}{\gamma_i - 1}$,

$a = 117.2666 [Pas.m^6]$, $b = 1.07334.10^{-3} [m^3]$, $\theta = 3056K$

2.4. Enthalpie :

$$dH = C_p(T, \rho)dT + C_T(T, \rho)d\rho \quad (2.21)$$

L'identification entre les relations (2.4) et (2.21) donne:

$$VdV = -dH = -C_p(T, \rho)dT - C_T(T, \rho)d\rho \quad (2.22)$$

En intégrant l'équation (2.21) entre l'état (1) donné par (T_1, P_1, ρ_1, V_1) , et l'état (2) donné par (T_2, P_2, ρ_2, V_2) , on trouve :

$$\int_1^2 dH = \int_{T_1}^{T_2} C_p(T, \rho)|_{\rho=\rho_2} dT + \int_{\rho_1}^{\rho_2} C_T(T, \rho)|_{T=T_2} d\rho \quad (2.75)$$

Alors:

$$\Delta H = \int_{T_1}^{T_2} C_p(T, \rho)|_{\rho=\rho_2} dT + \int_{\rho_1}^{\rho_2} C_T(T, \rho)|_{T=T_2} d\rho \quad (2.76)$$

Chapitre 3 :

Modèle Mathématique

3.1. Introduction :

L'analyse numérique est une discipline des mathématiques. Elle s'intéresse tant aux fondements théoriques qu'à la mise en pratique des méthodes permettant de résoudre, par des calculs purement numériques, des problèmes d'analyse mathématique. Cela signifie qu'elle s'occupe principalement de répondre numériquement à des questions à variable réelle ou complexe comme l'algèbre linéaire numérique sur les champs réels ou complexes, la recherche de solution numérique d'équations différentielles et d'autres problèmes liés survenant dans les sciences physiques et l'ingénierie.

Certains problèmes de mathématiques peuvent être résolus numériquement (c-à-d., sur ordinateur) de façon exacte par un algorithme en un nombre fini d'opérations. Ces algorithmes sont parfois appelés méthodes directes ou qualifiés de finis. Des exemples sont l'élimination de Gauss-Jordan pour la résolution d'un système d'équations linéaires.

Cependant, aucune méthode directe n'est connue pour résoudre d'équation $f(x) = 0$; si f est non linéaire. Ce problème concernait déjà les mathématiciens de l'antiquité puisque les babyloniens et les grecs s'intéressaient déjà aux racines des polynômes de degré 2. Plus tard, c'est en s'intéressant aux racines des polynômes de degré 2 et 3 que les mathématiciens italiens du sixième siècle, Cardan et Bombelli découvrirent les nombres complexes. On sait aujourd'hui qu'il n'existe pas de formule générale exacte pour calculer les racines des polynômes de degré supérieur ou égal à cinq. Cette situation fait appel à introduire une méthode itérative pour tenter de déterminer une approximation de la solution. Une telle méthode démarre depuis une valeur devinée ou estimée grossièrement et trouve des approximations successives qui devraient converger vers la solution sous certaines conditions. Même quand une méthode directe existe, une méthode itérative peut être préférable car elle est souvent plus efficace et même souvent plus stable (notamment elle permet le plus souvent de corriger des erreurs mineures dans les calculs intermédiaires).

3.2. L'analyse numérique :

Le domaine de l'analyse numérique est une branche qui regroupe deux grands domaines de la science de l'ingénieur : mathématique et informatique.

L'aspect mathématique de l'analyse numérique consiste à modéliser une solution à un problème à travers des opérateurs de l'analyse mathématique (∂ ; \int ; π ; etc.) ainsi que l'étude des caractéristiques analytiques de ce procédé (convergence, unicité de solution ...etc.).

L'aspect algorithmique de l'analyse numérique consiste à approximer le modèle mathématique par un autre numérique défini seulement au moyen des opérateurs arithmétiques (+, -, /, *, \sum , testes, répétitions ... etc.), qui peut être facilement implémenté par la suite sur un ordinateur à travers un langage de programmation.

En bref, l'objectif de l'analyse numérique consiste à trouver des algorithmes informatiques implémentant ou approximant un modèle analytique résolvant un problème scientifique donné.

3.3 .Résolution d'une équation non linéaire :

3.3.1.Méthode de dichotomie :

La méthode de dichotomie ou méthode de la bisection repose sur le théorème des valeurs intermédiaires, ou elle consiste à répéter des partages d'un intervalle en deux parties puis à choisir le sous-intervalle dans lequel existe un zéro de la fonction.

T_0 et P_0 sont des paramètres liés à la conception de la chambre de combustion. la détermination de ρ_0 sera obtenue par l'application de la méthode de dichotomie [9] sur l'équation de Berthelot.

Exemple :

Entrée : un tableau trié tab, un intervalle [min; max] avec $0 \leq \min \leq \max < \text{taille}$ et un élément e.
Sortie : i tel que $\text{tab}[i] = e$ ou NonTrouvé (ex : -1).
si $\min = \max$ alors
si $\text{tab}[\min] = e$ alors retourner min
sinon retourner NonTrouvé
 $\text{mid} \leftarrow (\min + \max) / 2$
si $\text{tab}[\text{mid}] < e$ alors
retourner RechDichoRec(tab, mid+1, max, e)
sinon retourner RechDichoRec(tab, min, mid, e)

3.4 .Calcul numérique des rapports thermodynamique :

Pour calculer les rapports il faut d'abord trouver les paramètres thermodynamiques d'état dans une section donnée (T, P, ρ) , et les diviser par les paramètres générateurs (T_0, ρ_0, P_0) respectivement. La détermination des paramètres (T, P, ρ) sera possible en résolvant le système d'équation algébrique non linéaire formé par les équations (2.3), (2.53) et (2.64) :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{V_i} \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) + R \ln \frac{\rho_0(1-b\rho)}{\rho(1-b\rho_0)} - 2\dot{\lambda} \left(\frac{\rho}{T^2} - \frac{\rho_0}{T_0^2} \right) + R \ln \left(\frac{e^{\frac{\theta}{T_0}} - 1}{e^{\frac{\theta}{T}} - 1} \right) + R \left(\frac{\theta}{T} \frac{e^{\frac{\theta}{T}}}{e^{\frac{\theta}{T}} - 1} - \frac{\theta}{T_0} \frac{e^{\frac{\theta}{T_0}}}{e^{\frac{\theta}{T_0}} - 1} \right) = 0 \\ \\ M^2 = 2 \frac{\left(\frac{1}{(\gamma_{sp} - 1)} \left(\frac{T_0}{T} - 1 \right) + \left(\frac{\theta}{T} \right) \left(\frac{1}{1 - e^{\frac{\theta}{T}}} - \frac{1}{1 - e^{\frac{\theta}{T_0}}} \right) + \frac{1}{RT} \left(4\dot{\lambda} \left(\frac{\rho}{T} - \frac{\rho_0}{T_0} \right) + \left(\frac{p_0}{\rho_0} - \frac{p}{\rho} \right) \right) \right)}{\left(\gamma_{sp} - 1 \right) \left(\frac{1}{1 - b\rho} + \frac{\dot{\lambda}\rho}{RT^2} \right)^2} + \frac{1}{(1 - b\rho)^2} - \frac{2\dot{\lambda}\rho}{RT^2} \\ \\ p = \frac{\rho RT}{(1 - b\rho)} - \frac{\dot{\lambda}\rho^2}{T} \end{array} \right.$$

(2.75)

Ces trois équations composent un système d'équation fortement non linéaire où la solution analytique est impossible à trouver. Les phénomènes non linéaires sont extrêmement courants en pratique. Ils sont sans doute plus fréquents que les phénomènes linéaires. Dans ce cas, nous examinons les systèmes non linéaires et nous montrons comment les résoudre à l'aide d'une suite de problèmes linéaires, auxquels on peut appliquer diverses techniques.

Le problème consiste à trouver le vecteur $[T, \rho, P]$ vérifiant les 3 équations non linéaires suivantes:

$$\begin{cases} f_E(T, \rho, P) = 0 \\ f_M(T, \rho, P) = 0 \\ f_B(T, \rho, P) = 0 \end{cases} \quad (2.76)$$

Où f_E, f_M et f_B sont des fonctions de trois variables que nous supposons différentiables et réfèrent respectivement aux équations (2.3) et (2.53), (2.64).

Contrairement aux systèmes linéaires, il n'y a pas de condition simple associée aux systèmes non linéaires qui permette d'assurer l'existence et l'unicité de la solution. Le plus souvent, il existe plusieurs solutions possibles et seul le contexte indique laquelle est la bonne [9].

Les méthodes de résolution des systèmes non linéaires sont nombreuses. Notamment, nous ne présentons que la méthode la plus importante et la plus utilisée en pratique, soit la méthode de Newton [9] et

[35].

3.5. Résolution d'un système d'équation non linéaire

3.5.1 Méthode de Newton :

La méthode de Newton-Raphson est beaucoup plus évoluée que les autres méthodes: elle utilise les variations de la fonction dont on cherche le zéro. En partant d'un point, on trace la tangente à la courbe que l'on suit jusqu'à intercepter l'axe des abscisses. Le nouveau point obtenu est ainsi plus proche du zéro de la fonction, et on recommence l'opération jusqu'à la précision souhaitée.

Les méthodes de résolution des systèmes non linéaires sont nombreuses. Notamment, nous ne présentons que la méthode la plus importante et la plus utilisée en pratique, soit la méthode de Newton [9] et [35].

L'application de cette méthode à un système de deux équations non linéaires est suffisante pour illustrer le cas général [35].

Considérons donc le système:

$$\begin{cases} f_E(T, \rho) = 0 \\ f_M(T, \rho) = 0 \end{cases}$$

Soit $[T_i, \rho_i]$, une approximation initiale de la solution de ce système.

Cette approximation initiale, est cruciale et doit toujours être choisie avec soin. Le but de ce qui suit est de déterminer les pas $[dT, d\rho]$ à $[T_i, \rho_i]$ de telle sorte que:

$$\begin{cases} f_E(T_i + dT, \rho_i + d\rho) = 0 \\ f_M(T_i + dT, \rho_i + d\rho) = 0 \end{cases} \quad (2.77)$$

Pour déterminer $[dT, d\rho]$ il suffit maintenant de faire un développement de Taylor en deux variables pour chacune des deux fonctions [35]:

$$\begin{cases} 0 = f_E(T_i, \rho_i) + \frac{\partial f_E}{\partial T}(T_i, \rho_i)dT + \frac{\partial f_E}{\partial \rho}(T_i, \rho_i)d\rho + \dots \\ 0 = f_M(T_i, \rho_i) + \frac{\partial f_M}{\partial T}(T_i, \rho_i)dT + \frac{\partial f_M}{\partial \rho}(T_i, \rho_i)d\rho + \dots \end{cases} \quad (2.78)$$

Dans les relations précédentes, les pointillés désignent des termes d'ordre supérieur ou égal à deux et faisant intervenir les dérivées partielles d'ordre correspondant. Pour déterminer $[dT, d\rho]$ il suffit de négliger les termes d'ordre supérieur et d'écrire:

$$\begin{cases} \frac{\partial f_E}{\partial T}(T_i, \rho_i)dT + \frac{\partial f_E}{\partial \rho}(T_i, \rho_i)d\rho = -f_E(T_i, \rho_i) \\ \frac{\partial f_M}{\partial T}(T_i, \rho_i)dT + \frac{\partial f_M}{\partial \rho}(T_i, \rho_i)d\rho = -f_M(T_i, \rho_i) \end{cases} \quad (2.79)$$

Où encore sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_E}{\partial T}(T_i, \rho_i) & \frac{\partial f_E}{\partial \rho}(T_i, \rho_i) \\ \frac{\partial f_M}{\partial T}(T_i, \rho_i) & \frac{\partial f_M}{\partial \rho}(T_i, \rho_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dT \\ d\rho \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_E(T_i, \rho_i) \\ f_M(T_i, \rho_i) \end{pmatrix} \quad (2.80)$$

Ce système linéaire s'écrit, également sous une forme plus compacte[9] et [35]:

$$J(T_i, \rho_i)\Delta\vec{k} = -\vec{R}(T_i, \rho_i) \quad (2.81)$$

Où $J(T_i, \rho_i)$ désigne la matrice des dérivées partielles ou matrice jacobienne évaluée au point (T_i, ρ_i) , où $\Delta\vec{k}$ est le vecteur des corrections relatives à chaque variable ($\Delta\vec{k} =$

$[\Delta T, \Delta \rho]$) et où $-\overset{1}{R}(T_i, \rho_i)$ est le vecteur résidu évalué en (T_i, ρ_i) . Le déterminant de la matrice jacobienne est appelé le jacobien.

Le jacobien doit bien entendu être différent de 0 pour que la matrice jacobienne soit

inversible. On pose ensuite:
$$\begin{cases} T_{i+1} = T_i + \Delta T \\ \rho_{i+1} = \rho_i + \Delta \rho \end{cases} \quad (2.82)$$

Qui est la nouvelle approximation de la solution du système non linéaire. On cherchera par la suite à corriger (T_{i+1}, ρ_{i+1}) d'une nouvelle quantité $\Delta \overset{1}{k}$, et ce jusqu'à la convergence. Pour en arriver à l'algorithme général suivant :

3.5.2. Algorithme de la méthode de Newton appliquée aux systèmes :

1. Étant donné ε , un critère d'arrêt.
2. Étant donné N, le nombre maximal d'itérations.
3. Étant donné $\overset{1}{k} = [T_i, \rho_i]$ une approximation initiale de la solution du système
4. Résoudre le système linéaire: $J(T_i, \rho_i)\Delta \overset{1}{k} = -\overset{1}{R}[T_i, \rho_i]$ et poser:

$$\begin{cases} T_{i+1} = T_i + \Delta T \\ \rho_{i+1} = \rho_i + \Delta \rho \end{cases}$$

5. Si $\|T_i - T_{i+1}\| + \|\rho_i - \rho_{i+1}\| < \varepsilon$ et $\|\overset{1}{R}[T_i, \rho_i]\| \leq \varepsilon$

- convergence atteinte
- écrire la solution
- arrêt

6. i reçois $i+1$ et retour à l'étape 4

7. Si le nombre maximal d'itérations N est atteint:

- convergence non atteinte en N itérations.
- Arrêt.

3.5.3. Le choix de la solution initial :

La convergence de la méthode de Newton dépend directement de l'approximation initial (T_i, ρ_i) de la solution [35], un mauvais choix de (T_i, ρ_i) causera une divergence, pour cela on va initialiser la solution en utilisant les paramètres thermodynamiques d'un gaz parfait par la suite on verra si ce choix est justifié.

- Notre étude est focalisé sur la détente isentropique unidimensionnelle, l'écoulement dans ce cas est considéré comme supersonique ($1 < M < 6$). On va varier le nombre de mach définie dans l'équation f_M dans ce domaine est pour chaque valeur de M on calcule les paramètres initiaux (celles du gaz parfait) on appliquant les lois suivantes [13] et [25]:

$$\frac{T_i}{T_0} = \left[1 + \frac{\gamma_{gp} - 1}{2} M^2 \right]^{-1}, \frac{\rho_i}{\rho_0} = \left[1 + \frac{\gamma_{gp} - 1}{2} M^2 \right]^{\frac{-1}{\gamma_{gp} - 1}}, \frac{P_i}{P_0} = \left[1 + \frac{\gamma_{gp} - 1}{2} M^2 \right]^{\frac{-\gamma_{gp}}{\gamma_{gp} - 1}} \quad (2.83)$$

3.6. Détermination des paramètres critiques :

Les paramètres critiques $[T_*, \rho_*, P_*]$ représentent les propriétés thermodynamiques au niveau du col ($M=1$). Pour les déterminer il suffit de résoudre le système (I) par la méthode de Newton prenant en compte le nombre du mach critique ($M=1$).

3.7. L'intégration numérique :

3.7.1. Méthode de Gauss-Legendre :

Dans le domaine mathématique de l'analyse numérique, les méthodes de quadrature sont des approximations de la valeur numérique d'une intégrale. En général, on remplace le calcul de l'intégrale par une somme pondérée prise en un certain nombre de points du domaine d'intégration (voir calcul numérique d'une intégrale pour plus d'informations).

La méthode de quadrature de Gauss, du nom de Carl Friedrich Gauss¹, est une méthode de quadrature exacte pour un polynôme de degré $2n - 1$ avec n points pris sur le domaine d'intégration.

Il est souvent nécessaire de connaître les fonctions thermodynamiques telles que l'enthalpie à des températures et des pressions autres que celles disponibles à partir de données tabulées. Heureusement, la nouvelle forme d'enthalpie emploie les deux en même temps avec une

méthode simple. L'état statique (1) présenté dans la relation (20) est toujours donné par $T_1=298,15$ K et $P_1=1$ bar, $\rho_1= \rho_1 (T_1, P_1)$ et $V_1= V_1 (T_1, P_1)$. Dans ces conditions on obtient l'enthalpie de formation. Pour les réactions chimiques, l'enthalpie à différentes températures et pressions peut être calculée à partir des enthalpies des produits et des réactions comme suit [23] :

$$\bar{h}_i^f = \bar{h}_{RP} = h_f - h_i = \sum_P \Delta H_P - \sum_R \Delta H_R \quad (22)$$

A partir de la relation (17) nous pouvons vérifier l'efficacité de l'enthalpie par la comparaison de la vitesse d'écoulement. Dans ce cas on trouve :

$$V^2 = -2\Delta H = -2 \int_{T_1}^{T_2} C_P(T, \rho)|_{\rho=\rho_2} dT - 2 \int_{\rho_1}^{\rho_2} C_T(T, \rho)|_{T=T_2} d\rho \quad (23)$$

Une intégration numérique est requise pour la variation d'enthalpie donnée par la relation (21) des deux fonctions $C_P (T, \rho)$ et $C_T (T, \rho)$ dans les intervalles $[T_1, T_2]$ et $[\rho_1, \rho_2]$ respectivement.

Afin de réduire le temps nécessaire aux calculs avec une grande précision, nous avons utilisé la quadrature de Gauss Legendre [24], cet algorithme est meilleur que la méthode de Simpson [25], qui est une méthode de quadrature exacte pour un polynôme de degré $(2n-1)$ à n points pris sur le domaine d'intégration. Si la fonction qui permet de calculer sur un intervalle fini $[a, b]$, l'intégrale définie $\int_a^b f(x)dx$ d'une fonction continue donnée f [26].

La méthode est de la forme :

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \quad (24)$$

Où $f(x_i)$ est la fonction de pondération, qui peut assurer l'intégrabilité de f . les coefficients w_i de sont appelés coefficients de quadrature (ou pondérations quadrature).

Les points x_i ou nœuds, sont réels, distincts, uniques et sont les racines des polynômes du produit scalaire.

Les coefficients w_i de la quadrature ainsi que les abscisses pour notre intégration d'ordre 64 sont présentés dans le tableau 1 ci-dessous.

Tableau 3.1 : Abscisses et coefficients associés de la quadrature d'intégration du 64e Gauss Legendre .

i	$\pm x_i$	w_i
1	.006368073	0.003509312
2	.0071942277	0.0091372115
3	0.0276188818	0.0156959771
4	0.0325469453	0.0171370005
5	0.0518394344	0.0234179378
6	0.0653161897	0.0254990642
7	0.1227581033	0.0283420289
8	0.1539089403	0.0329111118
9	0.1984778666	0.0371728923
10	0.2361421214	0.0390969435
11	0.2665500455	0.0416559573
12	0.2993243619	0.0438260415
13	0.3640656989	0.0455869341
14	0.3803563189	0.0469221942
15	0.4577640192	0.0478193546
16	0.4758461672	0.0482700387
17	0.5541538328	0.0482700387
18	0.5722359808	0.0478193546
19	0.6496436811	0.0469221942
20	0.6659343011	0.0455869341
21	0.7406756381	0.0438260415
22	0.7534499545	0.0426559573

23	0.8038578786	0.0390969435
24	0.8315221334	0.0361728923
25	0.8860910597	0.0349111118
26	0.8972418967	0.0303420289
27	0.9346838103	0.0274990642
28	0.9481605656	0.0234179378
29	0.9774530547	0.0191370005
30	0.9823811182	0.0156959771
31	0.9828057723	0.0091372115
32	0.9986319268	0.0015093120

3.8. Calcul des erreurs

Pour faire une comparaison entre ce modèle et les modèles du gaz parfait ou haute température, on rappelle les relations thermodynamiques isentropiques d'un gaz parfait ou bien les relations thermodynamiques correspond le modèle haute température, le tableau 3.2 illustre ces relations.

Tableau 3.2 : les équations thermodynamiques des modèles GP et HT

Rapports	Gaz thermiquement et Caloriquement Parfait GP $\gamma = 1.402$ M : variable Principale	Gaz thermiquement parfait et caloriquement Imparfait HT $\gamma =$ variable T : variable Principale
Température $\frac{T}{T_0}$	$\left[1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right]^{-1}$	Résolution de l'équation / T : $M^2(T) \cdot a^2(T) - 2H(T) = 0$
Masse Volumique $\frac{\rho}{\rho_0}$	$\left[1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right]^{\frac{-1}{\gamma_{sp} - 1}}$	$e^{\int_{T_0}^T \left\{ \frac{C_p(T)}{\gamma(T) \cdot r \cdot T} \right\} dT}$
Pression $\frac{P}{P_0}$	$\left[1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right]^{\frac{-\gamma}{\gamma - 1}}$	$\frac{\rho}{\rho_0} \cdot \frac{T}{T_0}$
Section $\frac{A}{A_*}$	$\frac{1}{M} \left[\frac{2}{\gamma - 1} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \right]^{\frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}}$	$e^{\int_{T_*}^T \left\{ \frac{C_p(T)}{\gamma(T) \cdot r \cdot T - 2H(T)} \right\} dT}$
Débit $\frac{\dot{m}}{A_* \rho_0 a_0}$	$\left[\frac{\gamma + 1}{2} \right]^{\frac{\gamma + 1}{2(\gamma - 1)}}$	$\frac{\rho}{\rho_0} \cdot \frac{a}{a_0} \cdot M \cdot \frac{A}{A_*}$
Vitesse du son a	$\sqrt{\gamma \cdot r \cdot T}$	$\sqrt{\gamma(T) \cdot r \cdot T}$
Enthalpie H	$C_p(T - T_0)$	$\int_{T_0}^T C_p(T - T_0)$
Nombre de Mach M	Variable principale	$\frac{\sqrt{2 \cdot H(T)}}{a(T)}$
Vitesse $\frac{V}{a_0}$	$M \sqrt{\frac{T}{T_0}}$	$M \sqrt{\frac{\gamma(T) \cdot T}{\gamma(T_0) \cdot T_0}}$

Pour les gaz parfaits GP:

$$\gamma = 1.402$$

$$C_P = 1001.28932 \text{ J/(Kg K)}$$

Pour les gaz a haute température HT:

Pour l'air :

$$C_p(T) = a_1 + T(a_2 + T(a_3 + T(a_4 + T(a_5 + T(a_6 + T(a_7 + T(a_8 + T(a_9 + T(a_{10})))))))))) \quad (2.110)$$

Les coefficients a_i ($i=1, 2 \dots 10$) sont présentées dans le tableau suivant:

Tableau 3.3 : Les coefficients polynômiaux du C_p

i	a_i	i	a_i
1	1001.1058	6	$3.067736 \cdot 10^{-12}$
2	$4.0661289 \cdot 10^{-2}$	7	$-1.3509355 \cdot 10^{-15}$
3	$-6.3376997 \cdot 10^{-4}$	8	$3.472262 \cdot 10^{-19}$
4	$2.7474759 \cdot 10^{-6}$	9	$-4.8467531 \cdot 10^{-23}$
5	$-4.0338459 \cdot 10^{-9}$	10	$2.8411878 \cdot 10^{-27}$

Pour H₂:

$$C_{P_{HT}}(T) = 13.46 + 4.6 \left(\frac{T}{1000}\right) - 6.85 \left(\frac{T}{1000}\right)^2 + 3.79 \left(\frac{T}{1000}\right)^3 \quad (25)$$

La variation d'enthalpie pour le modèle HT est :

$$\Delta H = \int C_p(T) dT \quad (26)$$

$$\gamma(T) = \frac{C_p(T)}{C_p(T) - r} \quad (2.111)$$

3.8.1. Erreur du modèle gaz parfait :

Le modèle mathématique d'un gaz parfait est développé sur la base de CP la chaleur spécifique et le rapport γ constantes, ce qui donne des résultats acceptables pour des faibles températures et pressions. Selon cette étude, nous pouvons remarquer une différence sur les résultats donnés entre le modèle du gaz parfait et notre modèle. L'erreur donnée par le modèle PG par rapport à notre modèle RG (gaz réel) peut être calculé pour chaque paramètre. Donc, pour chaque valeur (P_0, T_0, M), l'erreur de ε peut être évaluée par la relation suivante:

$$\varepsilon_{Parameter}(\%) = \left| 1 - \frac{Parameter_{PG}(P_0, T_0, M)}{Parameter_{RG}(P_0, T_0, M)} \right| \times 100 \quad (2.112)$$

pour l'application aérodynamique, l'erreur doit être inférieure à 5%.

3.8.2. Erreur du modèle haute température :

Les résultats obtenus par le modèle a haute température HT, sont valables à sous l'hypothèse de l'imperfection calorique du gaz, c.-à-d., les chaleurs spécifiques C_p et C_v varient avec la température, et qui donne une erreur considérable à haute pression, par contre, notre modèle RG basé sur les hypothèses de un gaz thermiquement et calorifiquement imparfait, donc, des nouvelles expressions d'un gaz réel sont développées, variée avec la température et la masse volumique, corrigent le modèle HT, surtout à haute pression et donne une erreur considérable à haute pression. Alors, pour chaque valeur (P_0, T_0, M), l'erreur de ε peut être évaluée par la relation suivante:

$$\varepsilon_{Parameter}(\%) = \left| 1 - \frac{Parameter_{HT}(P_0, T_0, M)}{Parameter_{RG}(P_0, T_0, M)} \right| \times 100 \quad (2.113)$$

Chapitre 4 :

Résultat et commentaires

4.1.Introduction :

Dans ce chapitre on va discuter les résultats des simulations des équations de troisième chapitre et faire une conclusion générale sur les résultats obtenus.

4.2.Résultats pour les caractéristiques d'un gaz réel :

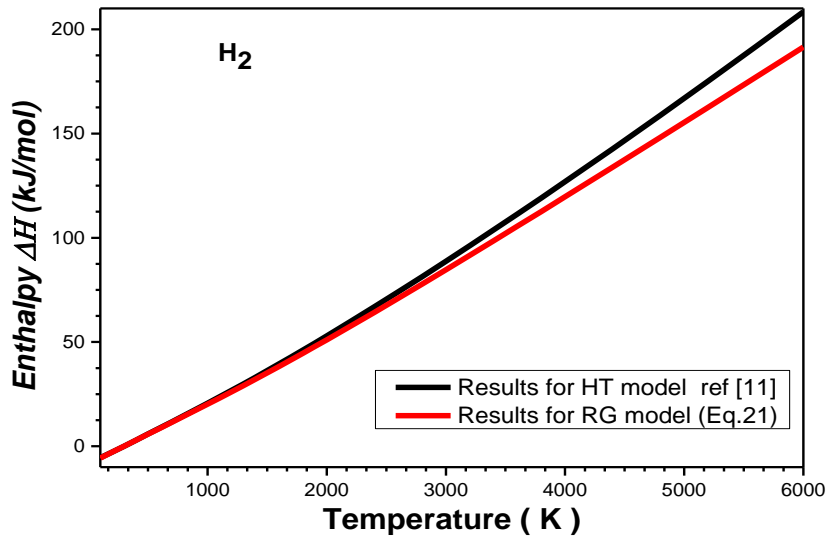


Figure 4.1: variation d'enthalpie en fonction de température

La figure 4.1 représente la variation de l'enthalpie ΔH en fonction de la température jusqu'à 6000 K, pour le gaz H_2 , et pour les modèles HT et RG. . A basse température on remarque que les deux modèles HT et RG suivent la même allure de croissance, sauf les valeurs de notre modèle RG elles sont toujours inférieures de ces obtenus par le modèle HT, par exemple à $T=1000$ K, on trouve $\Delta H = 20,66$ kJ/ mole pour le modèle HT, et des valeurs engendrées par 20,20 et 20,kJ/ mole pour le modèle RG qui correspondent plusieurs pressions, on remarque aussi que les deux courbes sont confondues jusqu'à une température 2500 K, et s'éloignent lorsque la valeur de la température génératrice T augmente, cet éloignement devient considérable à haute température, ce qui montre les effets de l'imperfections thermique et calorifique. Cette différence va influencer sur le comportement thermodynamique et thermique de l'écoulement.

d'où, la nécessité d'utiliser le modèle RG pour corriger les résultats,

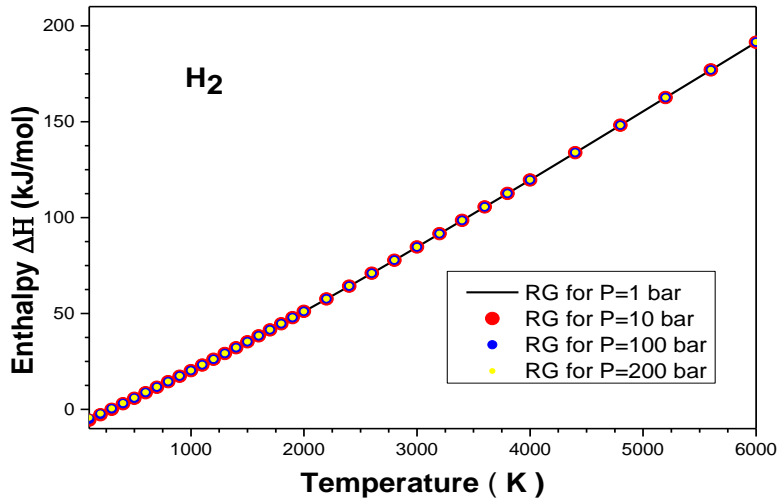


Figure 4. 2: variation d’enthalpie d’un gas reel en fonction de temperature

La figure 4.2 représente la variation de l’enthalpie ΔH dépend le modèle RG en fonction de la température T jusqu’à 6000 K , pour quelque valeur de la pression P . Pour voir une idée sur la variation de ce paramètre, il faut l’analyser précieusement. On remarque que l’augmentation de la température entraîne une augmentation de l’enthalpie ΔH , mais influence de la pression sur l’enthalpie ΔH reste faible et modeste par rapport aux autres effets. Où nous constatons que toutes les courbes sont identiques avec une légère différence a basse température.

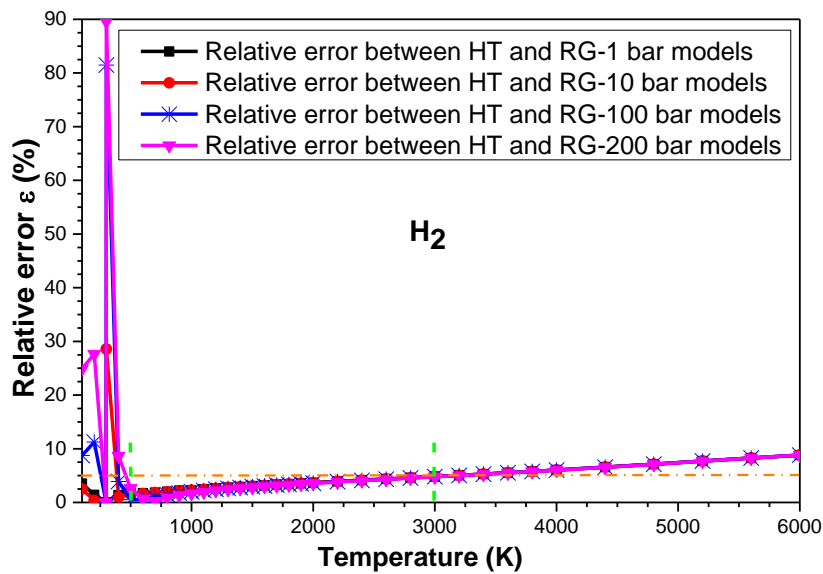


Figure 4.3: Variation d’erreur relative donnée par la variation d’enthalpie en fonction de temperature

La figure 4.3 représente la variation de l’erreur relative en pourcentage des enthalpies ΔH données respectivement par les pressions $P=1\text{ Bar}$, 10 Bar , 100 Bar et 200 Bar , en fonction de la température, du modèle HT comparé au modèle RG.

Résultat et commentaires

On remarque clairement que l'erreur dépend des valeurs de la pression P_{et} de la température T , elle augmente si T et P augmentent, Par exemple si $T=300\text{ K}$, l'utilisation du modèle HT va nous donner une erreur relative égale à $\varepsilon=0,04\%$ pour une pression $P = 1\text{ Bar}$, $\varepsilon=28\%$ pour une pression génératrice $P= 10\text{ Bar}$, $\varepsilon=80\%$ pour une pression génératrice $P = 100\text{ Bar}$, et $\varepsilon=90\%$ pour une pression génératrice $P = 200\text{ Bar}$, qui donne une différence de $2 \cdot 10^{-5}\text{ kJ/mole}$, 0.02 kJ/mole , 0.22 kJ/mole , 0.43 kJ/mole entre les valeurs des ΔH des deux modèles.

Il est clair que si on opte une erreur par exemple inférieure à 5% , le modèle HT peut être utilisé, si P soit inférieure au égale à 1 Bar pour n'importe quelle valeur de la température. Si un auteur accepte une erreur supérieure à 5% , il peut utiliser le modèle HT dans un intervalle de P et T modéré.

On peut remarquer qu'à faible valeur de P , l'erreur ε est faible. Sur cette figure se trouve au-dessous de l'erreur 5% . Cette position est interprétée par la possibilité d'utilisation le modèle HT pour une température engendrée par 500 et 3000 K pour les applications aéronautiques, surtout à base pression P , si on accepte une erreur inférieure à 5% . Mais si la pression P_{est} élevée, l'erreur augmente au fur et à mesure, et dans ce cas, on peut utiliser le modèle HT indépendamment à la pression P , si la température inclus dans l'intervalle spécifié précédemment avec une erreur de 8.90% environ. Et Le tableau 1 ci-dessous indique les valeurs des enthalpies ΔH pour les deux modèles HT et RG à différentes températures et pressions.

Tableau 4.1: Enthalpy variation of hydrogen (H_2) for HT and RG models

Enthalpy variation of hydrogen (H_2) (kJ/mol)					
Temperature K	HT model	1 bar	10 bar	100 bar	200 bar
100	-5,47	-5,67	-5,61	-5,03	-4,38
200	-2,77	-2,81	-2,78	-2,49	-2,17
298.15	0	0	0	0	0
300	0,05	0,05	0,07	0,27	0,48
400	2,96	2,92	2,93	3,08	3,24
500	5,88	5,78	5,79	5,91	6,04
600	8,80	8,65	8,66	8,75	8,86
700	11,73	11,52	11,52	11,61	11,70

Résultat et commentaires

800	14,68	14,39	14,40	14,47	14,55
900	17,66	17,28	17,29	17,36	17,43
1000	20,66	20,20	20,20	20,26	20,32
1100	23,70	23,13	23,14	23,19	23,25
1200	26,79	26,10	26,11	26,15	26,21
1300	29,91	29,10	29,11	29,15	29,20
1400	33,07	32,14	32,14	32,18	32,23
1500	36,28	35,21	35,21	35,25	35,29
1600	39,53	38,31	38,32	38,35	38,39
1700	42,83	41,45	41,46	41,49	41,53
1800	46,16	44,63	44,63	44,66	44,70
1900	49,53	47,83	47,83	47,86	47,90
2000	52,94	51,06	51,07	51,10	51,13
2200	59,87	57,61	57,61	57,64	57,67
2400	66,92	64,26	64,26	64,28	64,31
2600	74,08	70,98	70,99	71,01	71,03
2800	81,36	77,78	77,79	77,81	77,83
3000	88,73	84,65	84,65	84,67	84,69
3200	96,19	91,56	91,57	91,58	91,60
3400	103,74	98,53	98,53	98,55	98,56
3600	111,37	105,53	105,53	105,55	105,57
3800	119,08	112,57	112,57	112,59	112,60
4000	126,86	119,64	119,64	119,65	119,67
4400	142,66	133,86	133,86	133,87	133,89
4800	158,73	148,16	148,16	148,17	148,19
5200	175,06	162,53	162,53	162,54	162,56
5600	191,61	176,96	176,96	176,97	176,98
6000	208,33	191,43	191,43	191,44	191,45

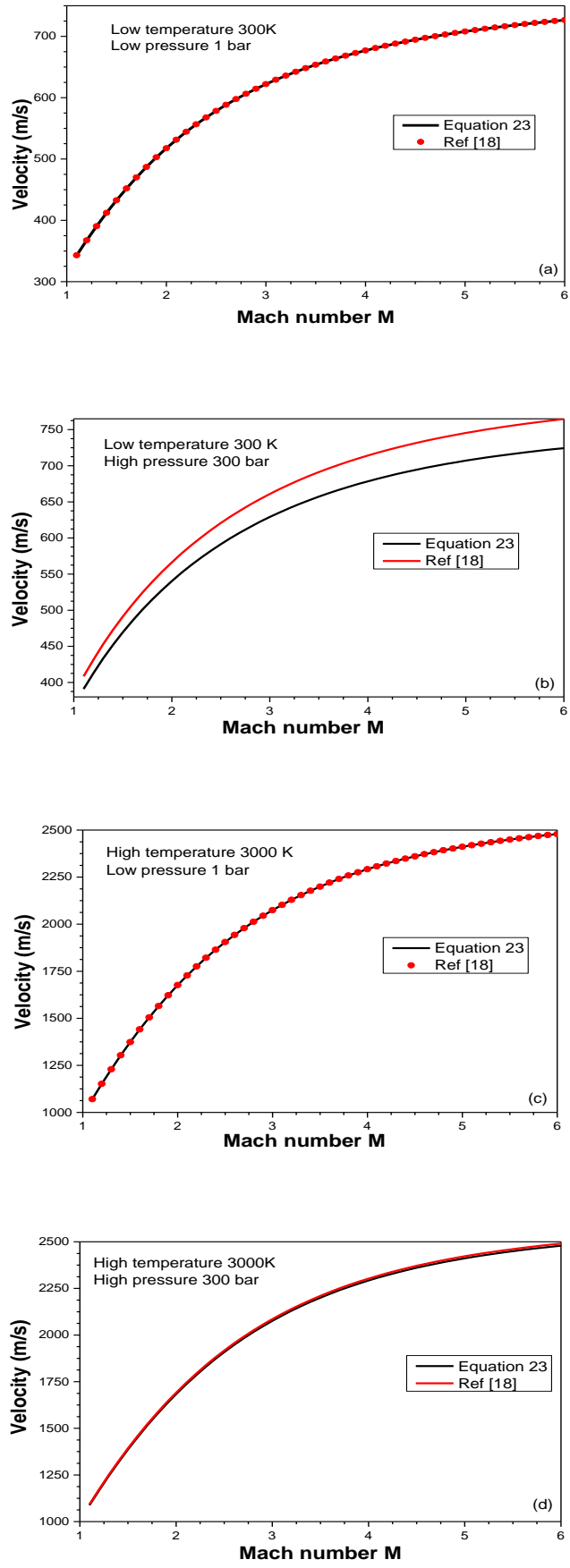


Figure 4.4: Variation de la vitesse en fonction du nombre de Mach en amont

Résultat et commentaires

La figure 4.4 représente la variation de la vitesse donnée respectivement par les combinaisons températures-pressions :300 K/ 1 Bar (fig. 4.a), 300K/300 Bar (fig. 4.b), 3000 K/1 Bar (fig. 4.c) et 3000 K/300 Bar (fig. 4.d), en fonction du nombre de Mach jusqu'à $M=6.0$, pour les deux méthodes présentées par les équations eq. 18 et eq. 23. On remarque clairement que l'augmentation du nombre de Mach entraîne une augmentation de la vitesse pour les deux méthodes. On remarque aussi que le changement des combinaisons températures-pressions, influent sur la vitesse, les résultats des deux méthodes sont identiques surtout dans la fig. a, b et c, ce qui montre et prouve que la nouvelle forme de l'enthalpie est correcte et donne des bons résultats et aussi l'efficacité du calcul de la vitesse à partir de la nouvelle forme de l'enthalpie.

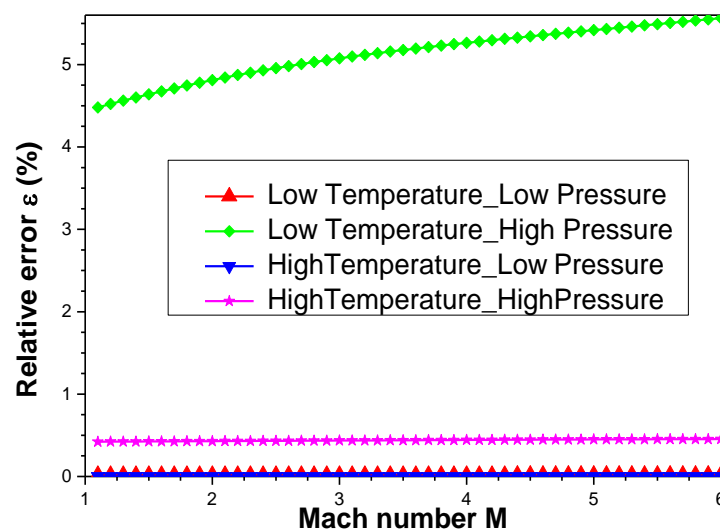


Figure 4.5 . Variation de l'erreur relative donnée par la vitesse du gaz réel en fonction de la température

Pour cette dernière courbe fig. 4.5 , cela s'explique par le calcul des erreurs qui apparaît dans la fig. 5, où nous constatons que l'erreur accompagnant la courbe est de l'ordre de 5 %, quant aux autres courbes, elles ne dépassent pas 1 %.

Il est clair que si on opte une erreur admissible par exemple au voisinage de 5 %, la nouvelle forme de l'enthalpie peut être utilisé pour les calculs et surtout dans le domaine du dynamique des gaz sans conditions.

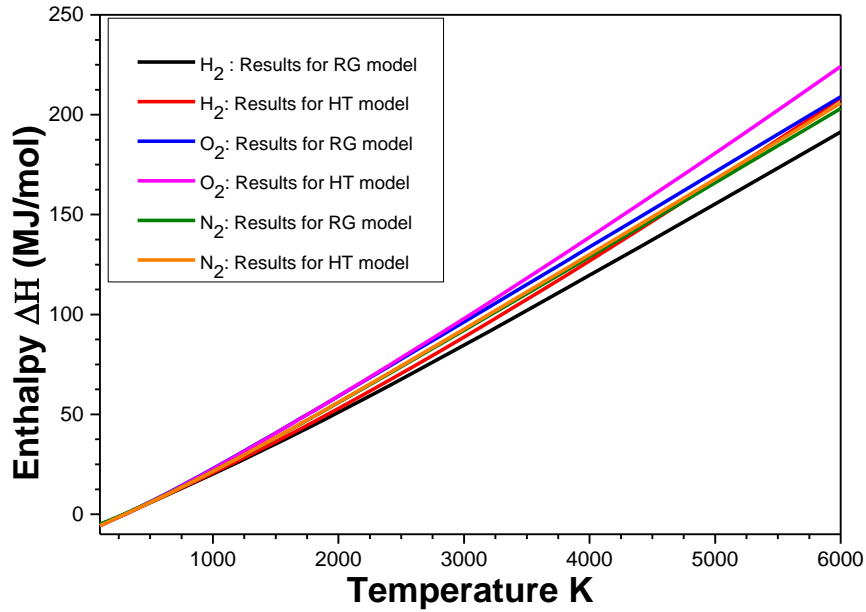


Figure 4.6 Variation de l'enthalpie pour les gaz H₂, O₂ et N₂ en fonction de la température

La figure 4.6 représente la variation d'enthalpie pour les gaz H₂, O₂, N₂ en fonction de la température, on observe globalement une augmentation de la valeur d'enthalpie à chaque fois la température est élevée pour les modèles RG et HT pour tous les gaz H₂, O₂ et N₂.

Aussi, notamment, les courbes des gaz O₂, H₂ et N₂ pour le modèle HT sont toujours supérieures aux celles des modèles RG donc leurs enthalpies sont supérieures.

CONCLUSION GENERALE

D'après le résultat de notre étude, il est possible de conclure que la nouvelle forme d'enthalpie est très encourageante, nous avons présenté deux domaines de recherche, la thermodynamique et la dynamique du gaz (débit compressible). Les preuves de cette étude suggèrent qu'il est possible d'utiliser la nouvelle forme d'enthalpie pour tout domaine de recherche ou dans toute condition de température et de pression.

Cette étude a mis en évidence l'importance des imperfections thermiques et caloriques et des effets de température et de pression. Nous avons trouvé une solution de pointe pour l'enthalpie sous divers effets, car les résultats ont obtenu des résultats précis, satisfaisants et complets prouvant l'efficacité de la nouvelle forme.

L'air et l'hydrogène ont été utilisés comme fluides dans cette étude; Les résultats du présent travail suggèrent qu'une extension à d'autres fluides est nécessaire à l'avenir pour approfondir la robustesse de la méthode. Cependant, il serait également nécessaire de déterminer la force intermoléculaire A , la taille moléculaire B et la constante d'énergie vibrationnelle moléculaire θ .

Les équations du modèle HT peuvent être obtenues à partir du modèle de gaz réel, en annulant la force intermoléculaire A , la taille moléculaire b . À ce moment, si la constante d'énergie vibrationnelle moléculaire θ est également annulée, le modèle devient le modèle de gaz parfait GP.

La possibilité d'utiliser le modèle HT dans toute étude à condition que la température se situe entre 500 K et 3000K, en dehors de cet intervalle de températures, l'erreur du modèle HT devient supérieure à 5%, ce qui est la valeur de l'erreur acceptable dans la dynamique des gaz et le calcul thermodynamique.

La force de cette étude réside dans les valeurs de correction de l'enthalpie, en particulier dans des circonstances particulières. Pour cela, cet article fournit le cadre pour encourager les chercheurs à plonger sur ce domaine ou à travailler sur l'enthalpie sans limites. À ce moment, nous pouvons dire que ce travail a résolu un point sur la thermodynamique et la dynamique du gaz, et nous a donné une contribution élevée pour de nombreux domaines ou sujets toujours en cours.

Les résultats actuels indiquent qu'une extension à l'utilisation de cette forme correspond aux conditions de vol supersonique, en particulier à haute altitude serait intéressant. Nous pouvons fortement recommander de l'utiliser pour des séparateurs à froid et à haute pression, pour la recherche en soufflerie.

REFERENCES

- [1] Howard, I. K. H Is for Enthalpy, *J. Chem. Educ.* 2003, 80 ,486.
- [2] Howard, I. K. **H Is for Enthalpy, Thanks to Heike Kamerlingh Onnes and Alfred W. Porter**, *J. Chem. Educ.* 2002, 79, 697–698.
- [3] Maurizio Masi , FUNDAMENTALS OF CHEMISTRY – Vol. I - Thermodynamic Systems and State Functions - Encyclopedia of Life Support Systems (EOLSS), 2009, EOLSS Publications, Paris, France.
- [4] J. M. Smith, H. C. Van Ness and M. M. Abbott, Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 7th ed., Boston: McGraw-Hill, 2005.
- [5] Price G. (1998). Thermodynamics of Chemical Processes. Oxford, UK: Oxford University Press. pp. 86
- [6] Changjun Lia,b, Wenlong Jia a,* , Xia Wua,b, Application of Lee-Kesler equation of state to calculating compressibility factors of high pressure condensate gas, *Energy Procedia* 14 (2012) 115 – 120.
- [7] Thermodynamics, by Gilbert Newton Lewis (Author), Merle Randall (Author), Kenneth S. Pitzer (Author), Leo Brewer (Author), Dover Publications; Reprint edition (September 16, 2020), new york, USA.
- [8] Price G. (1998). Thermodynamics of Chemical Processes. Oxford, UK: Oxford University Press. pp. 86.
- [9] BYUNG IK LEE and MICHAEL G. KESLER, A Generalized Thermodynamic Correlation Based on Three-Parameter Corresponding States, *AIChE Journal* (Vol. 21, No. 3) 1975. Pp 510-527.
- [10] Zebbiche, T., Youbi, Z. Effect of Stagnation Temperature on the Supersonic Flow Parameters with Application for Air in Nozzles, *The Aeronautical Journal.*, 2007, 111, 1115, 31-40. <https://doi.org/10.1017/S0001924000001731>.
- [11] Claus Borgnakke, Richard E. Sonntag, Fundamentals of Thermodynamics, 2013, John Wiley & Sons, Inc, Hoboken, NJ, USA.
- [12] by Gilbert Newton Lewis (Author), Merle Randall (Author), Kenneth S. Pitzer (Author), Leo Brewer (Author), Thermodynamics, Dover Publications; Reprint edition (September 16, 2020), new york, USA.
- [13] Manuel João S. Monte or Monte M.J.S. (1999) Measurements of Enthalpies of Sublimation: The Importance of Correlating Thermodynamic Data Obtained from Indirect Methods, Energetics of Stable Molecules and Reactive Intermediates. NATO Science Series (Series C: Mathematical and Physical Sciences), vol 535. Springer, Dordrecht PP 203-214, DOI https://doi.org/10.1007/978-94-011-4671-5_9, Springer, Dordrecht
- [14] **G. Z. A. WU and L. 1. STIEL** , A Generalized Equation of State for the Thermodynamic Properties of Polar Fluids, **AIChE Journal (Vol. 31, No. 10), 1985, pp 1632-1644.**
- [15] M.Salhi and M. Roudane, Numerical Investigation of the Thermal Caloric Imperfections on entropy Enhancement across Normal Shock Waves, *High Temperatures High pressures Journal*, [48\(4\) \(2019\)](https://doi.org/10.1080/0013792X.2019.1644444) 285-308.
- [16] **Thermodynamics: Fundamental Principles and Applications by Antonio Saggion (Author), Rossella Faraldo (Author), Matteo Pierno (Author), Springer; 1st ed. 2019 edition (October 24, 2019)); Springer nature Switzerland.**
- [17] **Nag P. K.**, “Engineering Thermodynamics,” 4th Edition, McGraw-Hill, New Delhi, INDIA, 2008.
- [18] M. Salhi, T. Zebbiche and A. Mehalem, Stagnation pressure effect on the supersonic flow parameters with application for air in nozzles, *The Aeronautical Journal*, 120(1224) (2016) 313-354.

- [19] **Salhi Merouane, Zebbiche Toufik and Mehalem Abderrahmane**, “Stagnation Pressure Effect on Prandtl Meyer Function for Air,” *Proceedings of the Institute of Mechanical Engineering, Part G: Journal of Aerospace Engineering*, [Vol 231, Issue 2, 2017](#).
- [20] Gedde, Ulf Wiel; *Essential Classical Thermodynamics*, Springer; 1st ed. 2020 edition (February 5, 2020); Springer nature Switzerland
- [21] **Annamalai K. Ishwar K. P. and Milind A. J.**, “Advanced Thermodynamics engineering,” 2nd edition, CRC press, Taylor and Francis Group, USA, 2011.
- [22] M. Salhi and T.Zebbiche, A New General Form of Prandtl Meyer Function, Application on Air, 8th AIAA Theoretical Fluid Mechanics Conference, paper N° AIAA 2017- 2621484, Denver, Colorado, USA, (2017).
- [23] **Price G. (1998). Thermodynamics of Chemical Processes. Oxford, UK: Oxford University Press.**
- [24] I. Bogaert, *Iteration-free computation of Gauss–Legendre quadrature nodes and weights*, SIAM J. Sci. Comput., 36 (2014), C1008–C1026.
- [25] **Demidovitch B. et I. Maron I.**, “Eléments de calcul numérique,” 1987, Edition MIR, Moscou, Russia.
- [26] **Raltson, A. and Rabinowitz, A.**, “A First Course in Numerical Analysis,” McGraw Hill Book Company, 1985.