

# Contribution à la modélisation numérique de la détente d'un jet d'azote sous haute pression et basse température

P. DUBS<sup>a</sup>, M. KHALIJ<sup>a</sup>, R. BENELMIR<sup>b</sup>, A. TAZIBT<sup>c</sup>

a. LEMTA UMR 7563 CNRS Nancy Université, ESSTIN, 2, Rue Jean Lamour, 54500 Vandoeuvre les Nancy

b. LERMAB, Nancy Université, Campus Victor Grignard, 54506 Vandoeuvre-Les-Nancy

c. CRITT TJF&U, 8, Parc Bradfer, 55000 Bar-le-duc

email : patrice.dubs@esstin.uhp-nancy.fr

## Résumé :

*L'impact d'un jet d'azote supercritique sur une surface solide pour son traitement (opérations de décapage ou de découpe) est un procédé nouveau et très peu de travaux concernant cette technologie existent à ce jour. L'objectif de ce travail est d'étudier, par le biais de simulations numériques, l'écoulement axisymétrique, compressible et turbulent, d'azote sous haute pression et basse température, injecté au travers d'une buse et impactant sur une paroi. L'étude est effectuée à l'aide du code de calculs commercial aux volumes finis Fluent<sup>®</sup>. Une équation d'état spécifique aux fluides réels et basée sur une formulation explicite de l'énergie libre de Helmholtz est utilisée afin de prendre en compte les fortes variations des propriétés thermo-physiques de l'azote lors de la détente. Les résultats numériques obtenus, représentant les contours du nombre de Mach, ainsi que la pression statique et la température sur l'axe du jet, sont présentés afin de caractériser la structure de l'écoulement. Ils sont comparés à ceux obtenus lorsque le fluide est considéré comme parfait.*

## Abstract :

*Supercritical nitrogen injection (under high pressure and low temperature injection conditions) through a small nozzle (into quiescent air) and its impinging upon a solid surface is a new process (cleaning or cutting operations). This study aims to contribute to the understanding of the physical mechanisms involved in the rapid expansion of the fluid at the nozzle exit and to determine the thermo-mechanical characteristics of the resulting jet thanks to numerical modelling. Numerical simulation of this axi-symmetrical, compressible, and turbulent, supercritical nitrogen jet and its impingement upon a flat solid surface is achieved with the commercial, general purpose, finite volume code FLUENT<sup>®</sup>. A real gas equation of state, based upon an explicit formulation of the Helmholtz free energy is used to take into account the variations of the thermophysical properties of the fluid during the expansion. Numerical results are shown in terms of Mach number contours, temperature and static pressure variations upon jet axis, in order to understand the flow structure. The results are compared with those obtained when assuming the fluid as a perfect gas.*

**Mots clefs :** Jet sous détendu, supersonique, fluide réel, modélisation numérique

## 1 Introduction

Dans le cadre du développement durable des éco-technologies, un procédé propre de traitement de surface alternatif aux techniques classiques (notamment à base de jet d'eau) est développé. Il repose sur l'injection d'azote supercritique, sous très haute pression et basse température. L'objectif de ce travail est d'étudier, par modélisation numérique, les caractéristiques dynamiques et thermiques du jet d'azote afin de mieux appréhender les phénomènes physiques mis en jeu. L'état de l'art de la phénoménologie de ce type de jet reste encore très ouvert à ce jour.

Ksibi *et al.* [1] ont étudié, par simulation numérique, le jet résultant de la détente de CO<sub>2</sub> supercritique sous une pression de  $2.36 \cdot 10^7$  Pa et une température de 388 K au travers d'une buse cylindrique dans une chambre remplie de CO<sub>2</sub> au repos ( $1.114 \cdot 10^5$  Pa, 353 K). Afin de modéliser l'écoulement axisymétrique, instationnaire, compressible, et non visqueux, les équations d'Euler sont résolues à l'aide d'un solveur de

Riemann adapté à une équation d'état prenant en compte les effets de fluide réel. Les auteurs [1] montrent que l'écoulement est fortement accéléré dès la sortie de la buse jusqu'à une vitesse supersonique du fait de la chute importante de pression pouvant être inférieure à la pression dans la chambre. Le fluide, se re-comprime ensuite, au travers d'une onde de choc forte, le disque de Mach, de façon à s'aligner à la pression de la chambre, sa vitesse passe brutalement de supersonique à subsonique. Suivant les conditions d'injections, différentes structures de chocs peuvent apparaître ensuite au travers desquelles l'écoulement est successivement détendu et accéléré puis comprimé et ralenti. En périphérie radiale de ce cœur potentiel du jet, la couche de cisaillement, qui naît au niveau de l'orifice de sortie de la buse, croît et augmente le mélange entre le fluide au repos dans la chambre et le fluide injecté. Les auteurs soupçonnent une forte influence de la turbulence sur la structure de l'écoulement dans cette couche de mélange. Mais celle-ci n'a pas été prise en compte lors de la modélisation. De plus, l'écoulement modélisé est supposé monophasique, aucun changement de phase n'est pris en compte lors de la détente.

L'injection d'éthylène supercritique dans l'azote (conditions sous critiques dans la chambre de détente) est observée par Wu *et al.* [2], et simulée numériquement par Star et Edwards [3]. Ils montrent que le jet résultant de la détente du fluide est sensible aux conditions d'injection. A pression d'injection constante, et en faisant varier la température d'injection, ils constatent que l'on passe d'un jet monophasique comportant une structure d'ondes de chocs, comme celle de Ksibi *et al.* [1], à un jet multiphasique où une phase liquide apparaît. Les auteurs [2], [3] supposent que suivant les conditions d'entrée, à l'issue de la perte de pression, la phase liquide du fluide peut apparaître dans la buse.

La structure d'écoulement, obtenue dans ces cas, rappelle celle des jets supersoniques sous détendus pour lesquels un gaz sous pression est injecté dans une atmosphère au repos. Parmi les premières études de ce type d'écoulement, on distingue l'étude expérimentale et théorique de Ashkenas [4], puis celle de Zapryagaev [5]. Plus récemment, Lehnasch [6] a modélisé numériquement des jets supersoniques sous détendus de gaz parfaits pour différents rapports de pression  $NPR$ . Le rapport  $NPR$  étant le rapport entre la pression statique du fluide dans la section de sortie du jet et la pression statique du milieu dans lequel le fluide est injecté. D'après ces auteurs [6], ce rapport a une forte influence sur la structure du jet.

Dans notre cas, la principale différence par rapport au jet supersonique sous-détendu de gaz parfait, réside dans la nature du fluide injecté. Dans le cas des jets sous détendus de gaz, les effets de fluide réel ne sont pas pris en compte.

## 2 Modélisation numérique

### 2.1 Problème numérique

Nous supposons l'écoulement à deux dimensions d'espace, axisymétrique suivant l'axe du jet. De plus, on ne considère qu'une seule espèce chimique présente dans le domaine d'étude, à savoir l'azote ( $N_2$ ). Il s'agit alors d'étudier la détente, que subit l'azote, en passant d'un état amont très dense, sous haute pression et basse température (conditions de pression et de température respectivement :  $P_{inj}$ ,  $T_{inj}$ ), aux conditions ambiantes ( $P_a$ ,  $T_a$ ). Cet écoulement est considéré compressible, monophasique, turbulent et stationnaire en moyenne.

### 2.2 Schéma numérique

Les simulations sont effectuées à l'aide du code de calculs Fluent<sup>®</sup> (version 6.3.26). Les équations de Navier-Stokes moyennées (modèle RANS), couplées à l'équation de l'énergie, sont résolues. On adjoint à ce système d'équations couplées, le modèle de fermeture de Spalart-Allmaras [7] afin de prendre en compte la turbulence. D'un point de vue pratique les équations sont discrétisées à l'aide d'une approche aux volumes finis centrés aux mailles (cell-centred). Les flux convectifs sont traités à l'aide du schéma TVD décentré du second ordre et à découpage de différence des flux de Roe (Roe-FDS) [8]. Les flux diffusifs sont traités à l'aide d'un schéma centré. L'intégration temporelle est obtenue à l'aide d'un schéma explicite avec un nombre CFL égal à 0,8, afin de prendre en compte toutes les vitesses caractéristiques intervenant dans le système. Celle-ci est facilitée par le pré-conditionnement du système d'équations couplées [9].

### 2.3 Géométrie, maillage et conditions aux limites

La géométrie du domaine d'étude est spécifiée en *Figure 1*. Le maillage de ce domaine s'effectue par

blocs à l'aide d'éléments quadrilatéraux. Les dimensions des blocs et de leur maillage sont reportées dans le *Tableau 1* et font intervenir des paramètres géométriques : la longueur de la buse  $l_{buse}$ , son diamètre  $d_{buse}$ , et la distance de projection  $l_{tir}$ .

A l'entrée du domaine, sont imposées les conditions d'injection en termes de pression ( $P_{inj}$ ), de température ( $T_{inj}$ ). A la sortie, sont imposées les conditions atmosphériques de pression et de température (respectivement  $P_a$  et  $T_a$ ). Sur les parois solides (hachurées sur la *Figure 1*), la vitesse est imposée nulle. De plus, ces parois sont supposées adiabatiques. Enfin, toutes les variables d'écoulement sont axisymétriques.

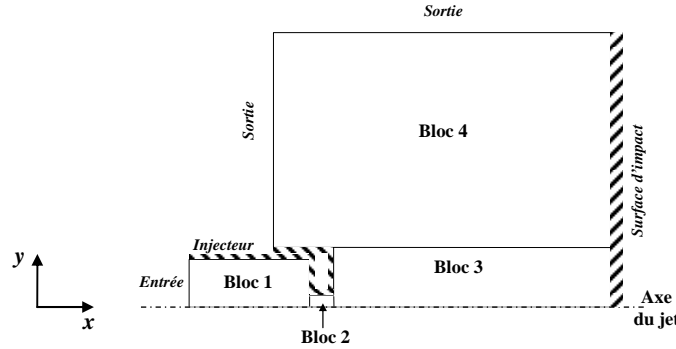


FIG. 1 – Domaine d'étude

	Bloc 1	Bloc 2	Bloc 3	Bloc 4
Dimension (mm x mm)	10 x 1.6	$l_{buse} \times d_{buse}$	$l_{tir} \times 5$	$(l_{tir} + 5) \times 50$
Nombre de nœuds (-)	80 x 80	$(l_{buse} \times 15000) \times 40$	$(l_{tir} \times 15000) \times 80$	$((l_{tir} \times 1000) + 10) \times 60$

TAB. 1 – Dimensions de la géométrie et du maillage

## 2.4 Propriétés du fluide et équation d'état

Le modèle numérique présenté est complété avec une loi d'état qui permet de fournir les variations des propriétés thermophysiques du fluide en fonction de la masse volumique et de la température. Deux cas distincts sont présentés.

Dans le premier cas, la prise en compte rigoureuse des variations des propriétés thermophysiques du fluide est obtenue à l'aide d'une loi d'état de fluide réel. Dans notre cas, afin de s'affranchir du possible changement de phase du fluide, dans le domaine de coexistence des phases liquide et gazeuse du fluide, seules les propriétés de la phase gazeuse sont considérées. En rappelant que l'isotherme critique correspond à la température critique  $T_C = 126,19\text{K}$  [10], le fluide est supercritique à l'injection et dans les conditions ambiantes. Dans ce cas, la loi d'état du fluide réel, s'écrit :

$$\begin{cases} P(\rho, T) = \rho_{SG}^2 \left( \frac{\partial F(\rho, T)}{\partial \rho} \right)_T \Big|_{(\rho_{SG}, T)} & \text{si } T < T_C \text{ et } \rho_{SG}(T) \leq \rho \leq \rho_{SL}(T) \\ P(\rho, T) = \rho^2 \left( \frac{\partial F(\rho, T)}{\partial \rho} \right)_T & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (1)$$

Où  $\rho_{SG}(T)$  et  $\rho_{SL}(T)$  sont, respectivement, la masse volumique de la phase gazeuse saturée du fluide, et la masse volumique de la phase liquide saturée du fluide, en fonction de la température. L'énergie libre de Helmholtz  $F$  est calculée à l'aide des relations explicites proposées par Span *et al.* [10], et Xiang *et al.* [11] et qui sont valable dans tout le domaine de masse volumique et de température parcouru dans notre cas. L'enthalpie du fluide réel s'exprime également en fonction de l'énergie libre de Helmholtz :

$$H(\rho, T) = F(\rho, T) - T \cdot \left( \frac{\partial F(\rho, T)}{\partial T} \right)_P + \rho \left( \frac{\partial F(\rho, T)}{\partial \rho} \right)_T \quad (2)$$

Dans le second cas, la loi d'état des gaz parfaits a été utilisée :

$$P(\rho, T) = \rho r T \quad (3)$$

Où  $r = 0,297 \text{ JK}^{-1}\text{g}^{-1}$  est la constante des gaz parfaits.

L'enthalpie  $H$  du gaz parfait vaut :

$$H(\rho, T) = C_p \cdot T \quad (4)$$

Où  $C_p = 1006,43 \text{ JK}^{-1}\text{kg}^{-1}$  est la capacité calorifique constante du fluide.

Dans les deux cas, la viscosité et conductivité thermique du fluide sont obtenues à l'aide des travaux menés par Lemmon et Jacobsen [12].

### 3 Résultats et discussion

L'azote est injecté dans les conditions  $P_{inj}=500 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ ,  $T_{inj}=130 \text{ K}$ , dans une chambre à pression  $P_a=1,01325 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ , et à température  $T_a=300 \text{ K}$ . Les paramètres géométriques de la buse sont fixés à une longueur de  $l_{buse}=1 \text{ mm}$ , et un diamètre  $d_{buse}=0,2 \text{ mm}$ . La distance de projection vaut  $l_{tir}=10 \text{ mm}$ , ce qui équivaut à l'abscisse adimensionnelle :  $x/d_{buse}=50$ . On montre la structure du jet obtenue en termes de nombre de Mach et de profil de pression sur l'axe du jet, d'une part dans le cas du gaz parfait (*Figure 2*) et d'autre part dans le cas gaz réel (*Figure 3*). La *Figure 4* montre la variation de température sur l'axe du jet obtenue dans le cas du gaz parfait (*4a*) et dans le cas du fluide réel (*4b*).

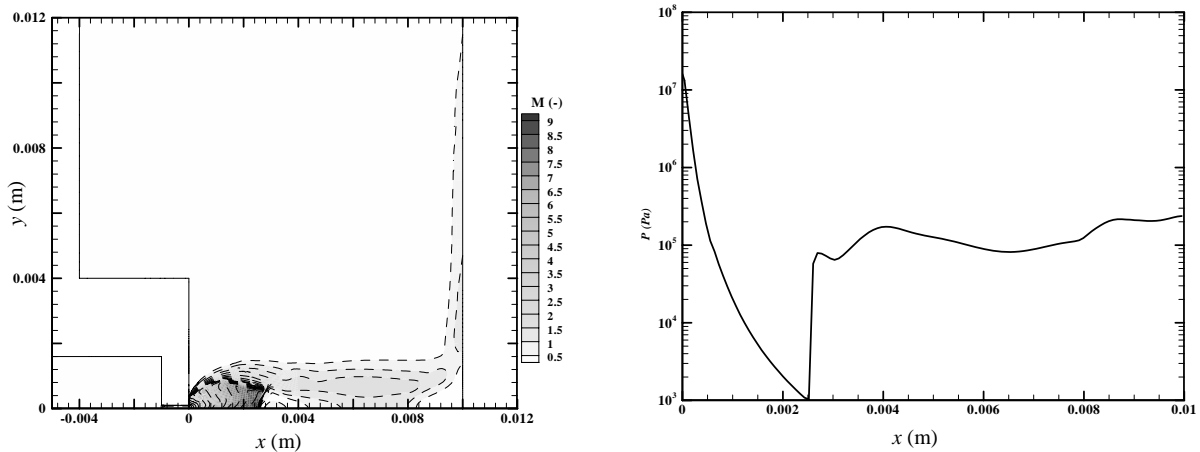


FIG. 2 - Cas du gaz parfait : champ du nombre de Mach pour un jet d'azote  $P_{inj}=500 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ ,  $T_{inj}=130 \text{ K}$  et profil de pression statique sur l'axe du jet pour une distance de projection de  $l_{tir}=10 \text{ mm}$

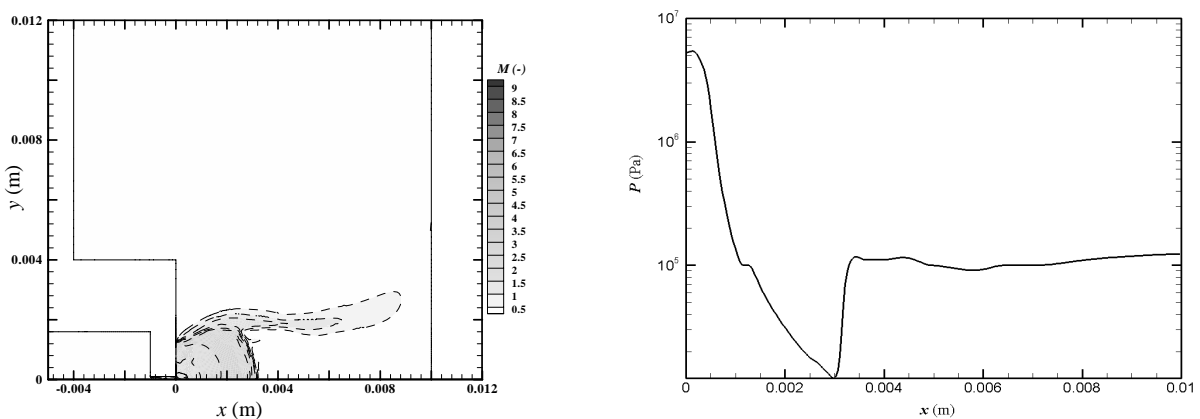


FIG. 3 - Cas du fluide réel : champ du nombre de Mach pour un jet d'azote  $P_{inj}=500 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ ,  $T_{inj}=130 \text{ K}$  et profil de pression statique sur l'axe du jet pour une distance de projection de  $l_{tir}=10 \text{ mm}$

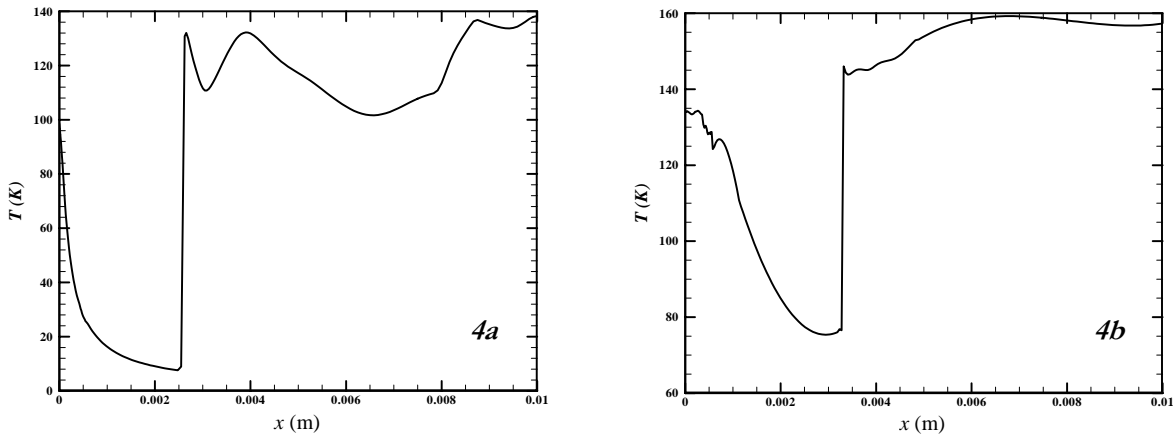


FIG. 4 –Température sur l’axe du jet pour  $P_{inj}=500.10^5$  Pa,  $T_{inj}=130$  K,  $l_{ir}=10$ mm  
4a : cas du gaz parfait et 4b : cas du fluide réel

Dans le cas de l’injection de gaz parfait, le code de calcul converge sans difficulté vers une solution dont la structure obtenue est celle d’un jet supersonique sous détendu, dont le rapport de pression vaut  $NPR = 160$  et le nombre de Mach sur la section de sortie vaut  $M_e = 1,37$ , impactant sur la surface normale. L’écoulement est fortement accéléré en sortie de buse jusqu’à une vitesse supersonique (jusqu’à  $M = 9$ ) tandis que la pression et la température chutent fortement pour atteindre des valeurs inférieures aux conditions ambiantes. Le disque de Mach de diamètre  $D_{DM}$  valant  $D_{DM}/d_{buse} = 5,69$ , apparaît alors à une abscisse  $x_{DM}/d_{buse} = 12,85$ , au travers duquel l’écoulement redevient subsonique. Cette structure est en bon accord avec la littérature [7]. Obtenir une comparaison quantitative est difficile, puisque la base de données dans la littérature s’étant rarement à un rapport  $NPR$  aussi important et pour un impact relativement proche. Toutefois, en comparant avec les corrélations obtenues par la méthode des caractéristiques ([13]) pour un jet sonique libre (sans impact) d’air, qui donnent  $x_{DM}/d_{buse} = 0,8736(NPR)^{0,52069}$  et  $D_{DM}/d_{buse} = 0,273(NPR)^{0,6769741}$ , soit  $x_{DM}/d_{buse} = 12,27$  et  $D_{DM}/d_{buse} = 8,48$ , on obtient un écart de 5% sur l’abscisse du disque de Mach et de 49% sur son diamètre.

Dans le cas du fluide réel, la solution obtenue est qualitativement semblable à la précédente (structure de jet supersonique sous détendu), mais le disque de Mach apparaît à une abscisse plus importante avec un diamètre plus important à savoir :  $x_{DM}/d_{buse} = 15,85$  et  $D_{DM}/d_{buse} = 8,67$ . De plus, le rapport de pression  $NPR = 56,11$  est moins important que précédemment alors que le nombre de Mach à la sortie de la buse est plus élevé  $M_e = 1,61$ . En outre, la chute de température en sortie de buse est plus prononcée pour un gaz parfait que dans le cas du fluide réel. L’utilisation de la loi d’état des gaz parfait surestime cette chute de température.

De ce fait, la modélisation des propriétés réelles du fluide est cruciale dans le cadre de l’application de traitement de surface. En effet, la position et le diamètre du disque de Mach, conditionnant les niveaux de température et de pression dans le jet, ont une influence sur l’efficacité de décapage.

Dans les deux cas, on constate une très forte chute de température et de pression dès la sortie de la buse. Selon les propriétés thermophysiques de l’azote [10], le domaine de coexistence de la phase liquide et gazeuse serait atteint. Difficilement prédictible *a priori* ([1], [2], [3]), ce changement de phase peut être modélisé *a posteriori*, ceci doit faire l’objet d’une étude approfondie ultérieure.

## 4 Conclusion

1. Des simulations numériques d’un jet d’azote supercritique injecté sous haute pression et basse température dans une atmosphère d’azote au repos, ont pu être menées grâce à un premier modèle numérique d’écoulement monophasique axisymétrique compressible et turbulent. Des champs moyens de nombre de Mach, ainsi que des profils de pression statique et de température sur l’axe du jet ont ainsi pu être obtenus. Deux équations d’état ont été utilisées, pour l’une, le fluide est considéré comme parfait, tandis que pour l’autre, les effets de fluide réel sont pris en compte. Les résultats montrent une structure de jet supersonique sous détendu qui a été comparée aux résultats de la littérature. Ils montrent clairement l’influence de

l'équation d'état, et *a fortiori* des effets de fluide réel, sur les caractéristiques du jet.

2. Les simulations numériques ont montré que l'écoulement pourrait passer par un régime multiphasique local (supposant l'apparition d'azote liquide dans le jet). Ce régime est localisé dans la zone supersonique qui se trouve dès la sortie de la buse et dans laquelle la pression et la température chutent très fortement. Si ce changement de phase est avéré, alors l'hypothèse d'un écoulement monophasique ne sera plus valable. La prise en compte plus fine des phénomènes physiques mis en jeu dans l'écoulement, et notamment ce possible changement de phase, doit faire l'objet d'une étude numérique plus approfondie.

## Références

- [1] H. Ksibi, C. Tenaud, P. Subra and Y. Garrabos - Numerical simulation of rapid expansion of supercritical fluid. In : *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, Vol.15 (1996), No. 4.
- [2] P-K Wu, T. H. Chen and C.D. Carter - Injection of supercritical Ethylene in Nitrogen. In: *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 2 (1996), No. 4.
- [3] A M Star, J R Edwards, K-C Lin, S Cox-Stouffer, and T A Jackson – Numerical Simulation of Injection of Supercritical Ethylene into Nitrogen, 33<sup>rd</sup> AIAA Fluid Dynamics conference (Orlando, FL, 21-24 june 2003), AIAA paper No 4267.
- [4] H. Ashkenas and F.S. Sherman - Structure and utilization of supersonic free jets in low density wind tunnel. In: *Rarefied Gas Dynamics*, Academic, New York, 1966
- [5] V.I. Zapryagaev and N.G. Bobrikov - Investigation of the streamwise vortices in a shear layer of the initial region of the supersonic underexpanded jet. In : *EUROMECH Colloquium 403*, 1999
- [6] G. Lehnasch - Contribution à l'étude numérique des jets supersoniques sous-détendus. *Thèse de doctorat de l'Université de Poitiers*, 2005
- [7] P. Spalart and S. Allmaras - A one-equation turbulence model for aerodynamic flows. In : *Technical Report AIAA-92-0439* (1992), *American Institute of Aeronautics and Astronautics*.
- [8] P. L. Roe - Characteristic based schemes for the Euler equations. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 18 (1986), pp337-365.
- [9] J. M. Weiss and W. A. Smith - Preconditioning Applied to Variable and Constant Density Flows. In: *AIAA Journal*, 33(11) (1995) pp2050-2057.
- [10] R. Span, E W Lemmon, R T Jacobsen, W Wagner, A Yokozeki - A reference Equation of State for the Thermodynamic Properties of Nitrogen for Temperatures from 63.151 to 1000K and Pressures to 2200MPa. In: *J. Phys. Chem. Ref. Data*, Vol. 29 (2000), No 6.
- [11] H. W. Xiang, U. K. Deiters - A new generalized corresponding-states equation of state for the extension of the Lee-Kesler equation to fluids consisting of polar and larger nonpolar molecules. In: *Chemical Engineering Science*, 63 (2008), pp1490-1496.
- [12] E. W. Lemmon, and R. T. Jacobsen - Viscosity and Thermal Conductivity Equations for Nitrogen, Oxygen, Argon, and Air. In: *International Journal of Thermophysics*, Vol. 25 (2004), No. 1.
- [13] J. Palmer, and R. Hanson – Application of method of characteristics to underexpanded, freejet flows with vibrational nonequilibrium. In: *AIAA Journal*, Vol. 36,2 (1998), pp193-200.

## Remerciements

Ce travail fait partie d'une thèse qui entre dans le cadre d'un projet ANR PRECODD 2007. Les auteurs tiennent à remercier l'ANR, les collectivités locales (Conseil Régional de Lorraine, Le GIP Meuse, le Conseil Général de Meurthe et Moselle) et l'Europe (FEDER), pour leur financement.