

Écoulement d'air ionisé en hors équilibre chimique derrière une onde de choc droite

Rachid Allouche & Rabah Haoui*

Université de blida. Algérie

* université des sciences et de la technologie. Alger. Algérie

* haoui_rabah@yahoo.fr

Résumé

Dans ce travail on présente un écoulement réactif derrière un choc fort détaché en tenant compte des phénomènes physico-chimiques comme la vibration, la dissociation des molécules et l'ionisation des atomes formés. L'écoulement après le choc est en déséquilibre et les paramètres s'évaluent en fonction du temps dans une zone de relaxation jusqu'à atteindre l'état d'équilibre. On s'intéresse en particulier à l'effet de la température sur l'ionisation des atomes et des molécules.

La simulation numérique des écoulements régis par les équations d'Euler complétées par les équations de la cinétique chimique modélisant le phénomène de dissociation et d'ionisation est basée sur la technique des différences finies. Le milieu est supposé continu.

Abstract

In this work we study the phenomena of Nonequilibrium in a one-dimensional hypersonic reactive flow downstream of a detached strong shock by taking the physicochemical phenomena into account, such as vibration, dissociation of the molecules and the ionization of the formed atom. The latter takes place downstream of the shock and evolves with time in a relaxation range until an equilibrium state is reached. We are interested in particular by the effect of the temperature on ionization of the atoms and the molecules. The simulation of the flows is performed by solving Euler equations associated to equations modelling mechanisms related to dissociation and ionization. The numerical method is based on the technique of the finite differences.

Mots-clefs :

Onde de choc; ionisation; hors équilibre

1 Introduction

Dans les calculs de l'énergie interne, il faut tenir compte de tous les modes d'énergies. Ainsi, l'écoulement de fluide autour des véhicules spatiaux au cours de leur rentrée peut être le siège de tels phénomènes. Tous ces phénomènes se déroulent sur des échelles de temps différentes car ils requièrent un certain nombre de collisions dont la probabilité augmente avec l'élévation de température. Du fait des vitesses atteintes et de l'altitude, la densité du fluide est généralement faible et il en résulte que les temps caractéristiques de ces processus physico-chimiques peuvent être du même ordre de grandeur que le temps caractéristique de l'écoulement ou temps de transit des molécules, l'écoulement peut être en déséquilibre thermo-chimique.

Le présent travail a pour but la simulation numérique d'un écoulement hypersonique monodimensionnel réactif, non visqueux et hors équilibre chimique en aval d'un choc fort. Les

méthodes de calcul proposées sont basées sur la technique de différences finis du premier ordre dans l'espace.

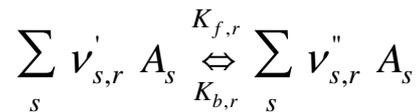
2 Mise en équations

Les équations de conservation et les équations de relaxation sont donc présentées en donnant une importance particulière à l'expression des termes source.

Derrière l'onde de choc, les espèces précédentes se dissocient et s'ionisent en formant de nouvelles espèces. A cause de faibles densités régnant dans ces régimes d'écoulement, les molécules de plus de deux atomes ont une faible probabilité de se former, ainsi, onze espèces sont supposées être présentes dans le mélange gazeux : O , N , NO , O_2 , N_2 , O^+ , N^+ , NO^+ , O_2^+ , N_2^+ et e^- , indicées de 1 à 11 dans cet ordre.

Ces espèces réagissent entre elles, et suivent un modèle cinétique à 47 réactions proposé par Chul Park (1989) où on distingue quatre types de réactions. Il s'agit des 3×11 premières équations de dissociation des molécules derrière le choc. Les réactions d'échanges, de R_{34} à R_{42} . Les réactions d'ionisation associative, de R_{43} à R_{45} . Les réactions d'ionisation, qui sont les réactions R_{46} et R_{47} . Dès que les électrons sont produits à partir des réactions d'ionisation associative, ils catalysent l'ionisation des atomes avec production d'autres électrons libres. Ce processus augmente de façon exponentielle la densité numérique des électrons dans le mélange gazeux.

La forme générale des réactions induite par l'ensemble des espèces chimiques s'écrit:



Le taux de production massique d'une espèce chimique, s , s'écrit :

$$w_s = M_s \sum_r (\nu''_s - \nu'_s) J_r$$

Avec,

$$J_r = K_{f,r} \prod_s \frac{\rho_s}{M_s}^{\nu'_s} - K_{b,r} \prod_s \frac{\rho_s}{M_s}^{\nu''_s}$$

Dans l'expression de J_r , k_{fr} et k_{br} représentent la constante de vitesse directe et inverse de la réaction r . La constante de vitesse directe est donnée par la loi de Arrhenius Brun (1988) et (1989) :

$$K_f(T) = C T^n \exp\left(-\frac{\theta_d}{T}\right)$$

La constante de vitesse inverse est déterminée par:

$$K_b(T) = \frac{K_f(T)}{K_{eq}(T)}$$

La constante d'équilibre $K_{eq}(T)$ est déterminée par les fonctions de partition des espèces dont les constantes sont données par les tables de Janaf.

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

les coefficients C_0 , C_1 , C_2 , C_3 et C_4 sont pour différentes réactions.

L'équation de relaxation des espèces chimiques s'écrit :

$$\frac{d(\rho_s u)}{dx} = \omega_{cs} \quad \text{avec} \quad \rho_s = \rho Y_s$$

Où l'indice s signifie l'espèce chimique, $s=1$ à 11. Y_s est la fraction massique de l'espèce s et le terme w_s représente le taux de production de l'espèce s .

Les équations de conservations de l'écoulement sont:

$$\frac{d(\rho u_s)}{dx} = 0 \quad , \quad \frac{d}{dx}(\rho u^2 + P) = 0 \quad , \quad \frac{d(P + \rho E)u}{dx} = 0$$

avec,

$$E = \sum_s Y_s \cdot C_{v.t.r,s} \cdot T + \sum_{\text{diatom}} Y_s \cdot E_{v_s} + \sum_{\text{atom+ions}} Y_s \cdot h_{f,s}^0 + \frac{1}{2} \cdot V^2$$

Toutes les équations différentielles précédentes peuvent être discrétisées entre le point i et le point $i+1$ dans la zone de relaxation comme suit, figure 1.

$$\rho(i) u(i) = \rho(i+1) u(i+1)$$

$$p(i) + \rho(i) \cdot u^2(i) = p(i+1) + \rho(i+1) \cdot u^2(i+1)$$

$$cp_m(i) \cdot T(i) + \frac{1}{2} (u(i))^2 + \sum_s Y_s(i) \cdot h_{f,s}^0 + \sum_s Y_s(i) \cdot e_{v,s}(i) =$$

$$cp_m(i+1) \cdot T(i+1) + \frac{1}{2} (u(i+1))^2 + \sum_s Y_s(i+1) \cdot h_{f,s}^0 + \sum_s Y_s(i+1) \cdot e_{v,s}(i+1)$$

Pour les bilans des espèces chimiques pour calculer les concentrations Y_s , on aura :

$$Y_s(i+1) = \frac{\Delta x}{\rho u} \omega_{cs} + Y_s(i)$$

Le point de départ est connu et correspond à $i=1$ juste après le choc. Le calcul s'arrête lorsque la condition suivante est vérifiée :

$$\left| \frac{\rho(i+1) - \rho(i)}{\rho(i)} \right| \leq \varepsilon$$

on a supposé les énergies de vibration sont à l'équilibre thermodynamique.

$$E_{v_s} = \frac{R \theta_{vib_s}}{\exp\left(\frac{\theta_{vib_s}}{T}\right) - 1}$$

Les températures caractéristiques de vibration des espèces diatomiques d'oxygène moléculaire O_2 , d'azote N_2 et de monoxyde d'azote NO sont:

$$\theta_{vO_2} = 2239K, \quad \theta_{vN_2} = 3390K, \quad \theta_{vNO} = 2817K$$

Le système d'équation est fermé par l'équation d'état reliant les variables précédentes entre elles. Le fluide étant supposé être composé d'un mélange de gaz parfaits:

$$P = \sum_{s \neq e} \frac{\rho_s}{M_s} RT + \frac{\rho_e}{M_e} RT_e$$

T et T_e sont respectivement la température de translation et électronique.

3 Résultats et interprétations

Le programme de calcul a été utilisé pour la résolution des équations non linéaires géométrant un écoulement de fluide compressible en déséquilibre chimique par la technique des différences finies.

Le pas de calcul utilisé dans notre programme est de l'ordre de 1 micron alors que le temps d'exécution varie de une à deux heures de calcul. Le calcul s'arrête lorsque la température de l'écoulement après le choc garde une valeur constante. Les termes de production deviennent nuls. On présente alors les résultats numériques est graphiques permettant d'analyser le phénomène de dissociation et l'ionisation derrière l'onde de choc en tenant compte de l'altitude et le nombre de Mach. On peut faire également une comparaison avec d'autres auteurs.

On a pris comme exemple deux cas extrêmes, le premier est pour un nombre de Mach de vol $M=30$ et le deuxième pour $M=41$, l'altitude est la même pour les deux cas, soit $H=79.1$ Km. Dans la figure 2 la température translation-rotation de l'air dissocié et ionisé derrière l'onde de choc chute de la valeur 43000K à presque 8000K dans une plage de relaxation équivalente à 4 cm. La figure 3 montre donc l'évolution de chaque espèce entre le choc et le point d'équilibre. On observe premièrement la diminution des concentrations de l'oxygène O_2 et de l'azote N_2 de la valeur initiale (21%, 79%) à la valeur d'équilibre (0.1%, 50%). Entre autre on a la formation de l'oxygène et de l'azote monoatomiques, presque 20% pour les deux. La concentration de NO est de 5%. L'ionisation elle est présentée par 0.1 % d'électron, .07% de NO^+ , 7.10^{-5} de N^+ , 3.10^{-5} de N_2^+ , 1.10^{-5} de O^+ et 2.10^{-6} de O_2^+ . On observe que le O_2^+ prend une valeur maximale de 10^{-5} de concentration à 0.4 cm du front de l'onde puis elle diminue progressivement. Augmentons maintenant le nombre de Mach de vol à la valeur $M=41$ et essayons de voir la différence. La température atteint les 76000 Kelvin puis elle diminue rapidement pour atteindre finalement la valeur 7500K à l'équilibre figure 4. Cette grande chute de température donne une idée sur la formation des ions et d'électron. Effectivement, la figure 5 donne une concentration molaire des électrons égale à 3% qui est beaucoup supérieure à la valeur du premier cas (0.1%). Par contre on observe pratiquement la disparition de O_2^+ . On observe une diminution supplémentaire des concentrations de l'oxygène O_2 et de l'azote N_2 de la valeur initiale (21%, 79%) à la valeur d'équilibre (négligeable, 18%). Pour le reste des espèces on a 20% et 76% de l'oxygène et de l'azote monoatomique progressivement, 0.5% de NO, 5.10^{-4} de NO^+ , moins de 3% de N^+ , 6.10^{-5} de N_2^+ , 10^{-3} de O^+ . Pour la validation de ces résultats, la figure 6 obtenue avec 31 réactions montre une bonne concordance avec les résultats de Park (1989), figure 7, sauf une petite déviation pour l'allure de l'espèce ionisée N_2^+ , et cela due à la différence des constantes des réactions. Nous donnons sur la figure 8 la variation de M dans la zone de relaxation.

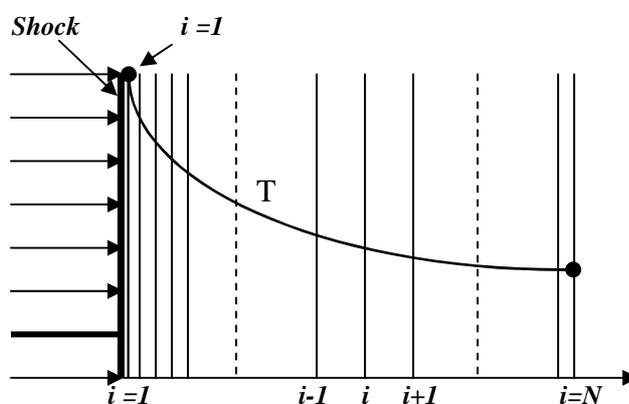


FIG. 1 – Zone de relaxation et de discrétisation.

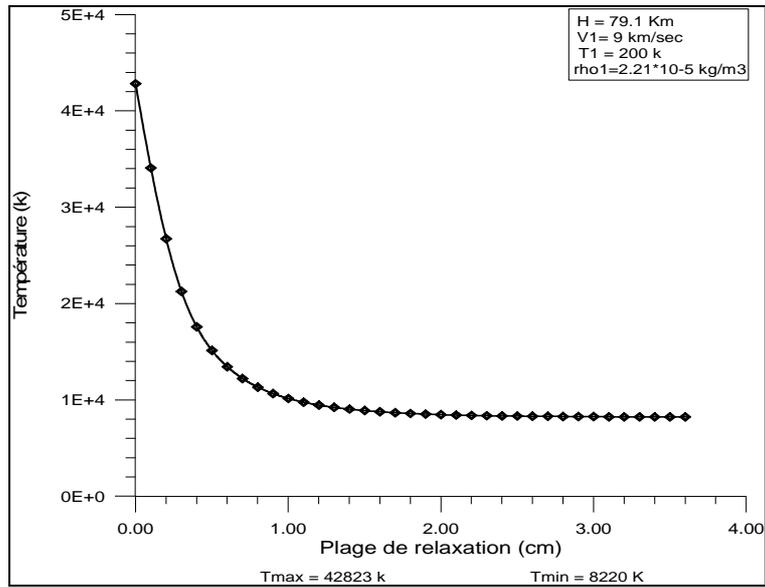


FIG. 2 - Evolution de T la dans la zone de relaxation pour une vitesse de 9 Km/sec à une altitude H =79.1 Km.

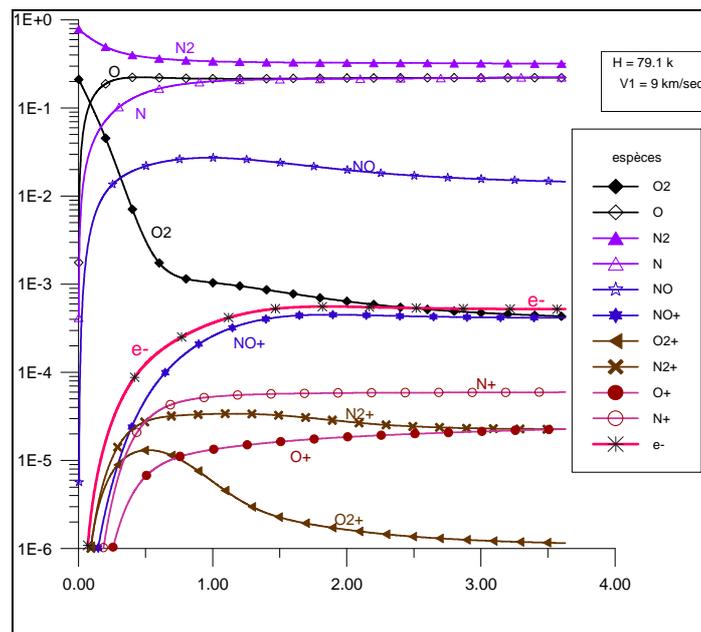


FIG. 3 - Evolution des fractions molaire dans la zone de relaxation pour une vitesse de 9Km/sec à une altitude H = 79.1 Km.

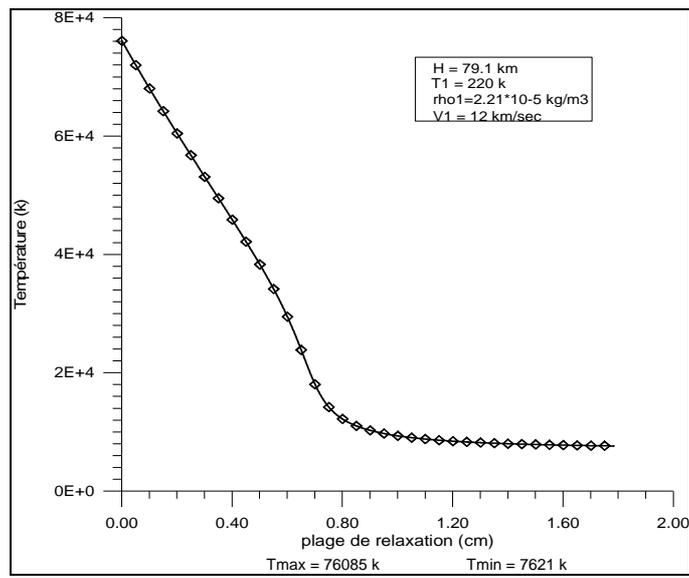


FIG. 4 - Evolution de T la dans la zone de relaxation pour une vitesse de 12 Km/sec à une altitude H = 79.1 Km.

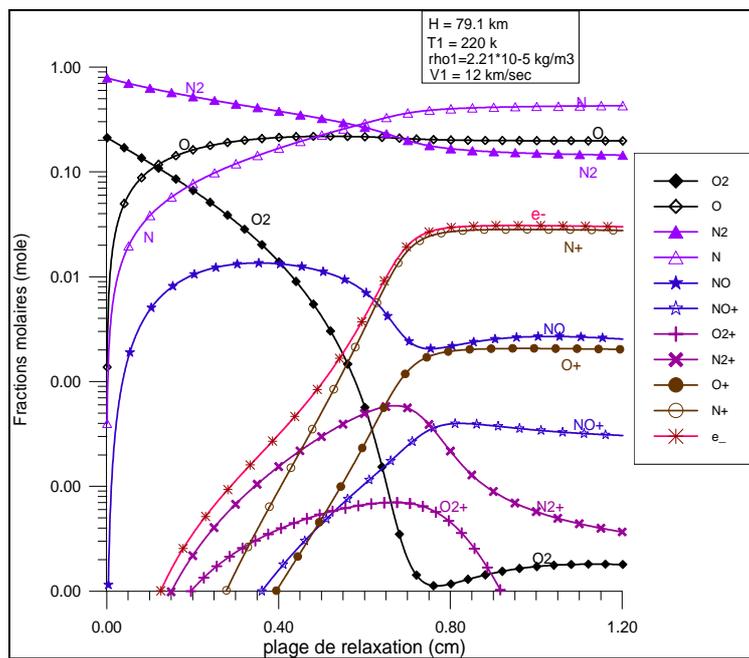


FIG.5 - Evolution des fractions molaires dans la zone de relaxation pour une vitesse de 12Km/sec à une altitude H =79.1 Km.

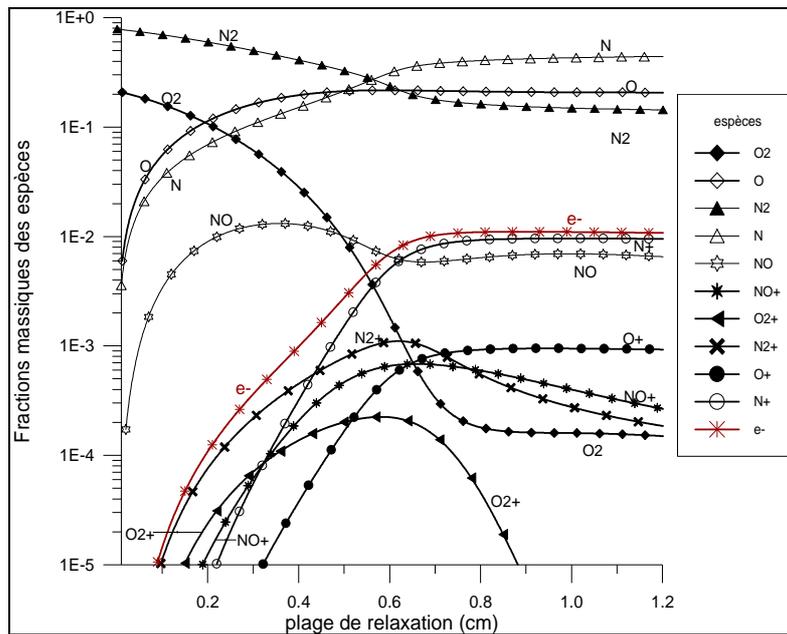


FIG. 6 - Evolution des fractions molaires obtenus par notre programme pour le cas de 31 réactions.

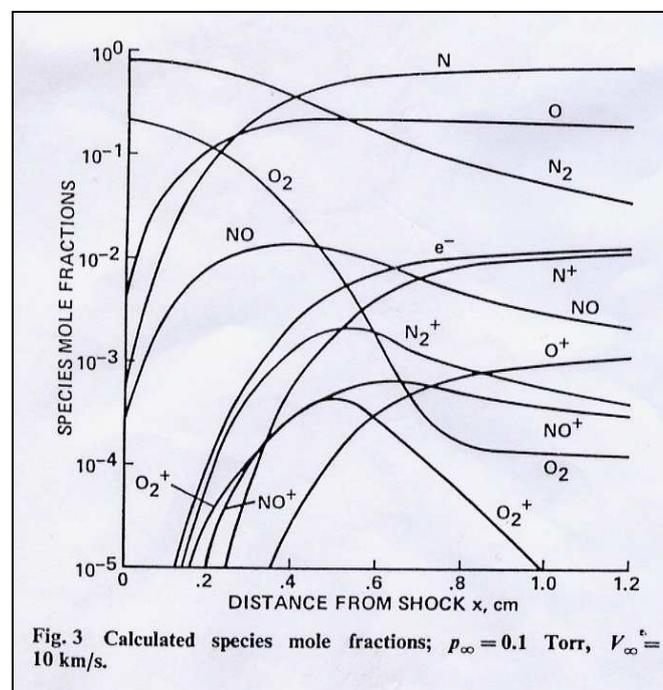


Fig.3 Calculated species mole fractions; $p_{\infty} = 0.1$ Torr, $V_{\infty} = 10$ km/s.

FIG.7 - Résultats donner par C. PARK.

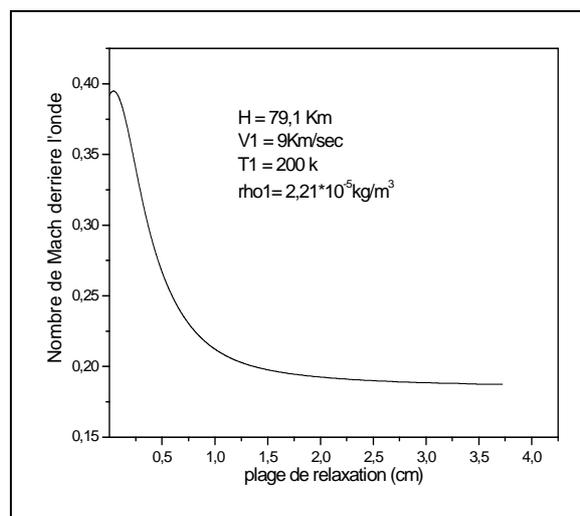


FIG. 8 – Evolution du nombre de Mach derrière le choc.

4 Conclusion

Le programme de calcul à été testé pour plusieurs altitudes et plusieurs vitesses d'entrée. Les résultats trouvés sont intéressants et sont comparés avec d'autres auteurs. Il a été remarqué que plus la vitesse de l'engin est grande plus le degré d'ionisation est grand et donc la température d'équilibre est moins. La température du mélange gazeux dans la plage de relaxation est fortement décroissante au début car les vitesses de réaction sont rapides, une grande partie de l'énergie thermique est utilisée pour provoquer la dissociation et l'ionisation, après, et vu que la température diminue, les vitesses de réaction sont moins rapides et par conséquent on tend vers un état d'équilibre.

Références

Thivet, F & Laboudigue, B. 1991 Introduction à la Modélisation des Ecoulements Hypersoniques. Ecole de Printemps de Mécanique des Fluides Numérique, Aussois.

Chul Park*. JULY 1989 Assessment of Two- Temperature Kinetic Model for Ionizing Air. NASA Ames Research Center, Moffett Field, California.

Endwell, O. Daso, Isaiah M. Blankson, Dale K. Ota, S. Ramakrishnan, V. 2001 Aerothermal Analysis of Hypersonic Flows Using Generalized Thermo-Fluid Dynamic Equations. 35th AIAA Thermophysics Conference 11-14 June, / Anaheim, CA, AIAA 2001-2902

Brun, R. 1989 « Processus Physico-Chimiques dans les écoulements hypersoniques. 9^{ème} Congrès Français de Mécanique, metz, France, Septembre.

Brun, R. 1988 Transport Properties in Reactive Gaz Flows ». AIAA Paper, (88-2655).

Haoui, R & all. 2001 Ecoulement hors d'équilibre chimique et vibrationnel dans une tuyère hypersonique axisymétrique. **IJTS**, article 8, volume 40, pp.787-795.