

RÉPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

14/95

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

ÉCOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

Département de Génie Mécanique

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات  
BIBLIOTHEQUE — المكتبة  
Ecole Nationale Polytechnique

**PROJET**

*De Fin d'Etudes*

*Thème*

**MODELE MATHEMATIQUE  
DE CALCUL DES PERFORMANCES  
THERMODYNAMIQUES DE  
PROPULSANTS CHIMIQUES POUR  
MOTEURS DE FUSEE**

*Proposé et dirigé par :*  
**Mr B. BENKOUSSAS**

*Etudié par :*  
**Mr N. MOKRANI**

PROMOTION : SEPTEMBRE 1995

BMSI - T.O.

المدرسة الوطنية المتعددة التخصصات  
**ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE**

Ecole Nationale Polytechnique

Département de Génie Mécanique

*Projet de fin d'études*

Présenté par :  
**Mr. MOKRANI Nordine**

Sous la direction de :  
**Mr. B. BENKOUSSAS**

Pour l'obtention du diplôme  
d'Ingénieur d'Etat en Génie Mécanique

*Thème*

**MODELE MATHEMATIQUE  
DE CALCUL DES PERFORMANCES  
THERMODYNAMIQUES DE  
PROPULSANTS CHIMIQUES POUR  
MOTEURS DE FUSEE**

*Soutenu publiquement le 26 Septembre 1995,  
devant le jury composé de :*

<b>MM LARBI</b>	<i>(Président)</i>
<b>BENKOUSSAS</b>	<i>(Promoteur)</i>
<b>MEZAOUR</b>	<i>(Examineur)</i>
<b>BOUDJEMA</b>	<i>(Examineur)</i>

*A mes chers parents,*

*qui ont toujours su m'offrir le soutien  
qu'ils n'ont malheureusement pu recevoir.*

*N. MOKRANI*

## Remerciements :

*Je tiens à exprimer mes remerciements à tous ceux qui de près ou de loin, ont participé à la réalisation de ce travail.*

*Mes remerciements s'adressent particulièrement à Mr BENKOUSSAS pour la confiance qu'il a toujours su montrer à mon égard.*

---

R E S U M E D U S U J E T

---

Le présent travail consiste en l'élaboration d'un modèle mathématique, ainsi qu'une méthode de résolution qui permettront l'évaluation des performances thermodynamiques d'un quelconque propulsant chimique employé dans les moteurs de fusées.

---

A B S T R A C T

---

The object of this study consist in establishing a mathematic model and presenting a resolution process to evaluate the performance of chimical propulants for rocket engines.

**T A B L E D E S M A T I E R E S**

**INTRODUCTION** ..... 1

**CHAPITRE I - NOTIONS FONDAMENTALES** ..... 4

**I.1- Les équilibres chimiques** ..... 6

    I.1.1- Définition ..... 6

    I.1.2- Réactions équilibrées et constante d'équilibre.. 7

    I.1.3- Facteurs d'équilibre ..... 11

**I.2- Evolution de la combustion** ..... 15

    I.2.1- Bilan énergétique ..... 16

    I.2.2- Bilan massique ..... 18

    I.2.3- Bilan de pression ..... 19

**I.3- Définition des paramètres de performance** ..... 21

    I.3.1- La poussée..... 21

    I.3.2- La vitesse effective d'échappement ..... 22

    I.3.3- L'impulsion spécifique ..... 22

    I.3.4- L'impulsion totale..... 23

    I.3.5- La consommation spécifique ..... 23

    I.3.6- La vitesse caractéristique et  
   le coefficient de poussée ..... 24

**I.4- Calcul de l'impulsion spécifique optimale** ..... 25

---

## TABLE DES MATIERES

---

<b>CHAPITRE II</b>	<b>- MODELISATION ET RESOLUTION DU SYSTEME...</b>	<b>28</b>
II.1-	Hypothèses de calcul .....	30
II.2-	Calcul de la composition chimique d'un système complexe .....	31
II.2.1-	Modélisation .....	31
II.2.2-	Résolution du système d'équations .....	39
II.3-	Calcul de la température de flamme adiabatique ...	50
II.4-	Etude de la détente isentropique .....	53
<b>CHAPITRE III</b>	<b>-ALGORITHME DE PROGRAMMATION .....</b>	<b>57</b>
III.1-	Programme principal .....	59
III.1.1-	Algorithme de résolution .....	59
III.1.2-	Organigramme du programme principal .....	64
III.2-	Sous-programme de calcul des fractions molaires..	68
III.2.1-	Première approche .....	69
III.2.2-	Deuxième approche .....	72
<b>RESULTATS ET COMMENTAIRE...</b>		<b>74</b>
<b>CONCLUSIONS .....</b>		<b>95</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE</b>		
<b>ANNEXE :</b>	<b>Programme de résolution</b>	

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات  
BIBLIOTHEQUE — المكتبة  
Ecole Nationale Polytechnique

# ***INTRODUCTION :***

## INTRODUCTION

---

### INTRODUCTION ET DELIMITATION DU SUJET :

---

Plusieurs études, à la fois expérimentales et analytiques, ont été menées sur divers combinaisons de propulsants chimiques. Néanmoins, aucune d'entre elles n'a permis à ce jour, de sélectionner la combinaison parfaite. Aussi, le nombre de recherches orientées en ce sens ne cesse de croître en vue de satisfaire les besoins de la technologie.

En outre, les expérimentations menées en laboratoire d'une manière générale et plus particulièrement celles destinées à l'étude des propulsants, nécessitent d'énormes investissements en raison de la difficulté de reproduction des conditions réelles de fonctionnement des fusées sur banc d'essais.

Par conséquent, la majorité des recherches ont été orientées vers le domaine de la simulation, grâce à laquelle, plusieurs phénomènes physiques sont traités par l'outil informatique qui ne cesse de prendre de l'ampleur.

Ainsi sont, les raisons pour lesquelles notre choix s'est porté sur la présente dissertation qui a pour objectif, la présentation d'un outil de calcul des performances thermodynamiques de propulsants chimiques. En effet, nous nous sommes proposés d'élaborer un programme qui permettra d'évaluer les paramètres thermodynamiques de fonctionnement d'une fusée, à savoir, *la composition chimique et la température des produits* à la sortie de la chambre de combustion et à la sortie de la tuyère ainsi que *l'impulsion spécifique* du propulsant utilisé, et cela en fonction de la composition chimique de ce dernier.

## **INTRODUCTION**

---

Pour ce fait, nous avons opté pour la procédure classique relative à ce genre d'étude, qui comprend les étapes suivantes:

- 1- L'étude et la mise en équations du phénomène physique.
- 2- La résolution du système d'équations.
- 3- L'élaboration du programme de calcul.
- 4- La vérification des résultats obtenus.

# ***CHAPITRE I :***

## NOTIONS FONDAMENTALES

### I.1- Les équilibres chimiques

#### I.1.1- Définition

#### I.1.2- Réactions équilibrées et constante d'équilibre

#### I.1.3- Facteurs d'équilibre

### I.2- Evolution de la combustion

#### I.2.1- Bilan énergétique

#### I.2.2- Bilan massique

#### I.2.3- Bilan de pression

### I.3- Définition des paramètres de performance

#### I.3.1- La poussée

#### I.3.2- La vitesse effective d'échappement

#### I.3.3- L'impulsion spécifique

#### I.3.4- L'impulsion totale

#### I.3.5- La consommation spécifique

#### I.3.6- La vitesse caractéristique et

le coefficient de poussée

### I.4- Calcul de l'impulsion spécifique optimale

## I.1/-LES EQUILIBRES CHIMIQUES :

### 1.1/-DEFINITION :

On appelle *système en équilibre*, tout système isolé dont les propriétés macroscopiques ne varient pas.

Lorsqu'on met en contact des composants chimiques, trois observations sont possibles dans un système isolé :

a)-**Pas d'évolution** : La structure du mélange ne change pas et le système conserve les mêmes propriétés macroscopiques (pression, température, composition). On dit qu'il n'y a *pas de réaction*.

*Exemple*: mélange d'azote et oxygène dans les conditions normales.

b)-**Evolution** : Une activité chimique apparaît, mais ne résulte pas en la consommation complète des réactifs initiaux. Ainsi, la fin de l'évolution, c'est-à-dire la constance des propriétés macroscopiques, a lieu alors qu'il coexiste substances formées et substances de départ. On dit que la réaction est *incomplète*.

*Exemple*: réaction d'estérification à 25°C et 1 atmosphère.

c)-**Evolution jusqu'à disparition d'une ou plusieurs substances réagissantes** : La réaction est alors totale ou *complète*.

*Exemple*: action du chlore sur l'hydrogène en présence de lumière ultra-violette, dans les conditions normales.

Ces trois types d'observation conduisent à la conclusion suivante :

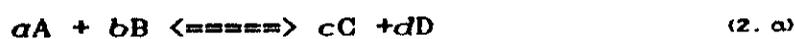
L'équilibre des systèmes chimiques se manifeste, selon les substances considérées,

- après une réaction totale;
- après une réaction incomplète;
- ou par l'absence de réaction.

## 1.2/-REACTIONS EQUILIBREES ET CONSTANTE D'EQUILIBRE :

a/-Loi de Guldberg & Waage :

Soit l'équilibre homogène :



où les lettres majuscules désignent les substances et les lettres minuscules les coefficients de la réaction.

Nous avons à l'équilibre, d'après la loi de Guldberg & Waage dit aussi loi des masses [ref.4]:

$$\frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} = K_c(T) \quad (2. 1)$$

où  $K_c(T)$  : est une constante dite *constante d'équilibre*, qui dépend de la température et de la nature des substances considérées;

et [A], [B], [C] et [D] les concentrations molaires des substances A, B, C et D.

Lorsque l'équilibre comporte des substances à l'état gazeux, il est commode de faire intervenir les pressions partielles des gaz.

Soit  $V$ , le volume et  $T$ , la température absolue du système.

Appelons :

$n_A, n_B, n_C$  et  $n_D$  les nombres de moles et  $P_A, P_B, P_C$  et  $P_D$  les pressions partielles, des substances A, B, C et D respectivement.

L'équation d'état des gaz parfaits, appliquée à A, s'écrit :

$$P_A V = n_A RT \quad (2.2)$$

soit

$$\frac{n_A}{V} = \frac{P_A}{RT} \quad (2.3)$$

La quantité  $\frac{n_A}{V}$  est, par définition, la concentration molaire [A].

$$\text{D'où :} \quad [A] = \frac{P_A}{RT} \quad (2.4)$$

De même, on aura :

$$[B] = \frac{P_B}{RT} \quad (2.5)$$

$$[C] = \frac{P_C}{RT} \quad (2.6)$$

$$[D] = \frac{P_D}{RT} \quad (2.7)$$

En remplaçant les concentrations dans la relation (2.1), on obtient :

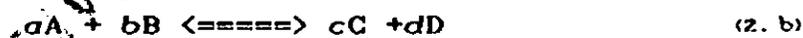
$$\frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} (RT)^{(a+b-c-d)} = K_c(T) \quad (2.8)$$

soit

$$\frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} = K_c(T) \times (RT)^{(c+d-a-b)} = K_p(T) \quad (2.9)$$

b/-Démonstration de la loi de Guldberg &amp; Waage :

Soit l'équilibre homogène: A, B, C, et D :



Nous allons exprimer l'enthalpie libre  $G$  d'un gaz parfait en fonction de sa pression  $P$  :

 $G$  est défini par :

$$G = H - TS \quad (2.10)$$

$$= U + PV - TS \quad (2.11)$$

A température constante :

$$dG = dU + PdV + VdP - TdS \quad (2.12)$$

Pour calculer les variations de fonctions d'état, on peut choisir les voies réversibles puisque ces variations sont indépendantes du chemin suivi.

Dans une variation infinitésimale réversible du gaz :

$$dU = dQ + dW = TdS - PdV \quad (2.13)$$

Par suite, en remplaçant dans  $dG$ , et compte tenu de la loi des gaz parfaits,

$$dG = VdP = n \frac{RT}{P} dP \quad (2.14)$$

pour  $n$  moles de gaz.

En intégrant entre la pression standard  $P_0$  et la pression  $P$ , on déduit :

$$G - G^0 = n RT (\ln P - \ln P_0) \quad (2.15)$$

soit :

$$G = G^0 + n RT \ln(P/P_0) \quad (2.16)$$

Ecrivons alors les enthalpies libres des deux membres de l'équilibre considéré :

$$\text{Premier membre : } G_1 = G_1^0 + n RT \left[ a \ln(P_A/P_0) + b \ln(P_B/P_0) \right] \quad (2.17)$$

$$\text{Second membre : } G_2 = G_2^0 + n RT \left[ c \ln(P_C/P_0) + d \ln(P_D/P_0) \right] \quad (2.18)$$

$T$  est la température de l'expérience.

Si  $G_1 \neq G_2$ , il se produit une évolution dans le sens de la plus faible enthalpie libre [ref.4].

A l'équilibre :

$$G_1 = G_2 \quad (2.19)$$

soit :

$$\begin{aligned} G_1^0 + n RT \left[ a \ln(P_A/P_0) + b \ln(P_B/P_0) \right] \\ = G_2^0 + n RT \left[ c \ln(P_C/P_0) + d \ln(P_D/P_0) \right] \end{aligned} \quad (2.20)$$

posant

$$\Delta G^0 = G_2^0 - G_1^0 \quad (2.21)$$

on a :

$$RT \ln \left[ \frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b} P_0^{(a+b-c-d)} \right] = - \Delta G^0 \quad (2.22)$$

soit

$$\frac{p_C^c p_D^d}{p_A^a p_B^b} p_0^{(a+b-c-d)} = \exp \left[ - \frac{\Delta G^\circ}{RT} \right] \quad (2. 23)$$

On démontre bien que la relation entre les pressions partielles est une constante qui ne dépend que de la température et qu'on a appelé précédemment constante d'équilibre  $K_p(T)$ .

$$K_p(T) = \exp \left[ - \frac{\Delta G^\circ}{RT} \right] \quad (2. 24)$$

ou

$$\Delta G^\circ = - RT \ln K_p(T) \quad (2. 25)$$

Cette relation permet le calcul de  $K_p(T)$  connaissant la variation d'enthalpie libre standard  $\Delta G^\circ$  d'une réaction. On peut donc prévoir à partir de  $\Delta G^\circ$ , la limite de la réaction.

### 1.3/-FACTEURS D'EQUILIBRE [ref.4] :

Etant donné un système en équilibre, il est possible de provoquer la modification de l'état d'équilibre, dans le sens de la réaction directe ou de la réaction inverse. L'état d'équilibre sera caractérisé par des concentrations nouvelles.

Cette évolution est appelée *déplacement de l'équilibre*.

Pour qu'un tel déplacement soit possible, il faut que les enthalpies libres  $G_1$  et  $G_2$  du premier membre et du second membre soient différentes. Il faut donc provoquer la variation

de ces deux quantités, ou de l'une d'entre elles, puis qu'elles sont égales à l'équilibre. Pour cela, on agit sur les grandeurs dont dépendent  $G_1$  et  $G_2$ , à savoir :

- la température  $T$ ;
- la pression totale  $P$ ;
- et - Les pressions partielles  $P_i$  (ou les concentrations)

Ces grandeurs susceptibles de déplacer l'équilibre, sont appelées *facteurs d'équilibre*.

Lorsque le déplacement de l'équilibre est tel que l'une des réactions soit totale (pratiquement), on dit qu'il y a *rupture d'équilibre*.

#### \*-Principe de LE CHATELIER et conséquences :

Le principe de LE CHATELIER permet de prévoir le sens du déplacement de l'équilibre lorsqu'on fait varier un facteur. Il s'exprime ainsi :

*Toute modification d'un facteur de l'équilibre entraîne un déplacement de cet équilibre dans le sens qui s'oppose à cette modification.*

C'est un principe général à partir duquel l'influence de chaque facteur d'équilibre peut être déduite.

#### a/- Influence de la température :

Les deux réactions, directe et inverse, de tout équilibre, ont des enthalpies opposées. L'une est endothermique; elle transforme de la chaleur en énergie interne, donc elle refroidit. L'autre, exothermique, dégage de la chaleur, donc réchauffe.

En conséquence, d'après le principe de LE CHATELIER, si on chauffe, il se produit un déplacement dans le sens de la réaction qui refroidit, c'est à dire la réaction endothermique. Si on refroidit, par contre, c'est la réaction exothermique qui a lieu.

Nous retiendrons la loi sous la forme abrégée :

*L'augmentation de la température déplace l'équilibre dans le sens endothermique.*

**b/-Influence de la pression totale :**

Considérons un système en équilibre comprenant des substances à l'état gazeux.

D'une façon générale, l'une des réactions (directe ou inverse), s'accompagne d'une diminution, l'autre d'une augmentation du nombre de moles gazeuses. Donc l'une abaisse, l'autre augmente la pression totale du système.

Il en résulte immédiatement l'application du principe de LE CHATELIER. Si on diminue la pression, le système se déplace suivant la réaction qui augmente le nombre de mole gazeuses du système.

Nous énoncerons la loi sous la forme abrégée :

*Une augmentation de la pression entraîne un déplacement de l'équilibre dans le sens qui diminue le nombre de moles gazeuses.*

**c/-Influence des concentrations (ou des pressions partielles):**

Si on augmente la concentration d'un constituant en équilibre, on observe un déplacement dans le sens qui diminue la concentration, c'est-à-dire, suivant la réaction qui fait disparaître le constituant. Inversement, si on diminue la concentration d'une substance, il se produit la réaction qui engendre la substance.

On peut énoncer :

*L'équilibre se déplace dans le sens de la disparition d'un constituant dont on augmente la concentration.*

## I.2/-EVOLUTION DE LA COMBUSTION :

L'étude des réactions chimiques, entre autres la combustion, se fait sous deux aspects:

- **L'aspect cinétique** : qui concerne l'étude de l'évolution au cours du temps;
- et - **l'aspect thermodynamique** : qui concerne les caractéristiques énergétiques de la réaction indépendamment de l'évolution dans le temps.

Or, la combustion des propulsants étant considérée comme instantanée, seul l'aspect thermodynamique sera pris en considération dans cette étude. En effet cette dernière, concernera essentiellement l'étude de l'effet thermique et l'équilibre chimique des produits de combustion.

La combustion est une évolution de la matière entre un état initial donné et un état final qui correspond à l'état d'équilibre à pression et température de fin de combustion. Ces états sont caractérisés par les paramètres suivants :

- **La température** : Dans notre cas, la température de l'état initial est connue alors que celle de l'état final reste à déterminer.
- **La pression** : La combustion des propulsants chimiques est une évolution à pression constante. Ainsi, la pression à l'intérieur de la chambre de combustion est supposée constante et connue.

**La quantité des substances :** La quantité des substances à l'état initial est connue et celle de l'état final est à déterminer.

La totalité de ces paramètres sont déterminés à partir des relations d'équilibre chimique détaillées dans le paragraphe précédent et des différentes relations issues des bilans suivant:

- le bilan énergétique;
- le bilan massique;
- le bilan de pression.

### 2.1/-Le bilan énergétique :

La chaleur échangée par un système chimique quelconque avec le milieu extérieur à pression constante, est déterminée en utilisant le premier principe de la thermodynamique.

En effet, soient  $W$  et  $Q$  le travail et la chaleur que le système échange avec le milieu extérieur au cours d'une réaction à pression constante.

La variation d'énergie interne  $U$ , entre l'état initial<sup>(1)</sup> et l'état final<sup>(2)</sup>, s'écrit d'après le premier principe, comme suite :

$$U_2 - U_1 = W + Q \quad (2.20)$$

L'énergie interne étant une variable d'état, la quantité  $(U_2 - U_1)$  ne dépend pas du chemin suivi; il nous est donc possible de choisir celui-ci comme étant réversible.

Le travail est alors donné par :

$$W = \int_{V_1}^{V_2} -P \, dv = PV_1 - PV_2 \quad (2.27)$$

où  $V_1$  et  $V_2$  sont respectivement les volumes initial et finale et  $P$  la pression constante de la réaction.

En remplaçant  $W$  dans l'équation (2.26), on obtient :

$$U_2 - U_1 = PV_1 - PV_2 + Q \quad (2.28)$$

soit :

$$Q = (PV_2 + U_2) - (PV_1 + U_1) \quad (2.29)$$

Autrement dit, la chaleur échangée  $Q$ , est la différence entre deux quantités dans lesquelles interviennent les mêmes fonctions d'états ( $U, P$ , et  $V$ ), et qui ne sont autres que les enthalpies finale et initiale du système :

$$H_2 = PV_2 + U_2 \quad (2.30)$$

$$\text{et } H_1 = PV_1 + U_1 \quad (2.31)$$

Ainsi :

$$Q = H_2 - H_1 \quad (2.32)$$

Or, dans notre cas, l'état initial(1) et l'état final(2) de l'évolution en question, correspondent respectivement à l'état des réactifs (les propulsants) et celui des produits de combustion à la sortie de la chambre. Nous trouverons donc

plus commode d'écrire la relation de conservation d'énergie (2.32), sous la forme suivante :

$$Q = \sum_p n_o h_o - \sum_r n_i h_i \quad (2.33)$$

où  $n_i$  et  $n_o$  : représentent les nombres de moles des constituants;  
 et  $h_i$  et  $h_o$  : les enthalpies molaires;  
 $p$  et  $r$  réfèrent respectivement aux produits et réactifs.

## 2.2/-Le bilan massique :

La masse de chaque élément du système demeure la même pendant la combustion. Donc pour écrire des équations chimiques et résoudre des problèmes en tenant compte des quantités des divers composants, il faut fondamentalement appliquer le principe de conservation de la masse à chaque élément.

Celui ci s'écrit pour un élément quelconque  $j$ , comme suite :

$$\text{Nombre de moles de l'élément } j = \sum_r a_{ji} n_i = \sum_p a_{jo} n_o$$

(2.34)

où  $n_i$  et  $n_o$  : représentent les nombres de moles des constituants;

$a_{ji}$  et  $a_{jo}$  : sont respectivement les nombres d'atomes de l'élément  $j$  dans les constituants  $i$  et  $o$ ;

$p$  et  $r$  réfèrent respectivement aux produits et réactifs.

## 2.3/-Le bilan de pression :

On démontre aisément, en utilisant le modèle de mélange de gaz dit modèle de DALTON [ref.5], que pendant une évolution de combustion, la pression totale du système P, est égale à la somme des pressions partielles des constituants de ce même système.

Cette modélisation consiste à considérer les variables de chaque constituant comme si chacun d'eux existait séparément dans le volume et à la température du mélange. Si de plus, le mélange et les constituants en question peuvent être considérés comme des gaz parfaits, l'application de l'équation d'état donnera;

Pour le mélange :

$$PV = n RT \quad (2. 35)$$

soit :

$$n = \frac{PV}{RT} \quad (2. 36)$$

Pour chaque constituant :

$$P_i V = n_i RT \quad (2. 37)$$

soit :

$$n_i = \frac{P_i V}{RT} \quad (2. 38)$$

Nous savons par ailleurs que :

$$n = \sum_i n_i \quad (2. 39)$$

En substituant les nombres de moles n et n<sub>i</sub>, on obtient :

$$\frac{PV}{RT} = \sum_i \frac{P_i V}{RT} \quad (2. 40)$$

### I.3/-LES PARAMETRES DE PERFORMANCES FONDAMENTAUX [ref.2 & 9]:

#### 3.1/-LA POUSSEE :

Les produits de combustion formés dans la chambre de combustion sont détendus adiabatiquement et isentropiquement à travers la tuyère. L'énergie cinétique des produits éjectés à des vitesses supersoniques dans la direction opposée à celle du mouvement de la fusée, est transformée en une force propulsive. On démontre, à partir de l'équation de conservation de la quantité du mouvement, que l'effort de propulsion (la poussée) fourni par un moteur de fusée, fonctionnant dans un milieu homogène, est donné par la relation suivante :

$$F = \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \alpha \right) \dot{W} u_e + (P_e - P_o) A_e \quad (2.49)$$

où :

$u_e$ ,  $P_e$  et  $A_e$  : sont respectivement la vitesse relative d'éjection, la pression absolue et l'aire de la section, à la sortie de la tuyère;

$\alpha$  : le demi-angle de divergence de la tuyère;

$\dot{W}$  : le débit massique de l'écoulement;

$P_o$  : la pression atmosphérique extérieure.

Le premier terme de l'équation précédente dit "momentum thrust", est le produit du débit massique de l'écoulement et de la vitesse relative des produits éjectés, par rapport au véhicule.

Le second terme représente le produit de l'aire de la section de sortie et la différence entre la pression de sortie et celle du milieu extérieur, et est appelé "pressure thrust".

**3.2/-LA VITESSE EFFECTIVE D'ÉCHAPPEMENT :**

La vitesse effective d'échappement est définie comme étant le quotient de la force propulsive au débit massique de l'écoulement :

$$C = F / \dot{W} \quad (2.44)$$

Soit, d'après l'équation (2.1) :

$$C = (1/2 + 1/2 \cos \alpha) u_e + (P_e - P_o) A_e / \dot{W} \quad (2.45)$$

**3.3/-IMPULSION SPECIFIQUE :**

Appelée aussi *poussée spécifique*, l'impulsion spécifique est un paramètre d'une importance majeure dans l'étude des performances de propulsants. Elle est définie comme étant la poussée que l'on peut obtenir d'un moteur par unité de poids de propulsant et unité de temps :

$$I_s = F / g \dot{W} \quad (2.46)$$

Soit :

$$I_s = (1/2 + 1/2 \cos \alpha) u_e / g + (P_e - P_o) A_e / g \dot{W} \quad (3.47)$$

$g$  étant l'accélération gravitationnelle.

On appelle, *impulsion spécifique optimale*, l'impulsion spécifique correspondant à une pression de sortie  $P_e$ , égale à la pression du milieu extérieur  $P_o$ , soit :

$$I_{opt} = u_e / g \quad (2.48)$$

## 3.4/-IMPULSION TOTALE :

L'impulsion totale est obtenue par intégration de la poussée  $F$ , par rapport au temps  $t$ , soit :

$$I_s = \int_0^t F dt = \int_0^t I_s \dot{W} dt \quad (3. 49)$$

Pour une poussée constante  $F=C^{te}$ , l'impulsion totale peut être exprimée comme suite :

$$I_t = I_s W = F t \quad (3. 50)$$

où :  $W$  represent le poids total du propulsant.

L'impulsion totale n'est généralement pas utilisée directement dans l'étude des performances de propulsants. Elle est plutôt utilisée pour calculer l'impulsion spécifique moyenne, lorsque le débit massique du propulsant n'est pas mesurable.

En effet, dans le cas des propulsants solides, il est pratiquement impossible d'évaluer le débit; La poussée  $F$ , ainsi que le poids  $W$ , du propulsant consommé pendant un intervalle de temps  $t$ , sont alors mesurés et l'impulsion spécifique moyenne est calculée en utilisant l'équation (3.50).

## 3.5/-CONSOMMATION SPECIFIQUE :

La consommation spécifique de propulsant est définie comme étant le débit massique de propulsant nécessaire à produire une poussée égale à l'unité. C'est aussi, l'inverse du produit de l'accélération gravitationnelle  $g$ , et l'impulsion spécifique  $I_s$ .

$$W_s = \dot{W}/F = 1/gI_s \quad (3. 51)$$

**3.6/-VITESSE CARACTERISTIQUE & COEFFICIENT DE POUSSEE :**

Pour l'étude expérimentale des propulsants, il est fort recommandé de séparer l'étude du processus de combustion et celle de la détente. La première étude permettra de déterminer la capacité du propulsant à produire de l'énergie cinétique, et la deuxième aura pour objectif, l'évaluation de la quantité de cette énergie susceptible d'être transformée en énergie propulsive.

Pour ce fait, deux paramètres ont été définis, à savoir :

\*-La vitesse caractéristique  $C^*$ , qui permet de quantifier l'efficacité du processus de combustion et est définie comme suite:

$$C^* = P_c A_t / \dot{W} \quad (2. 52)$$

\*-le coefficient de poussée  $C_f$ , qui caractérise l'efficacité du processus de détente et est défini par la relation suivante :

$$C_f = F / (P_c A_t) \quad (2. 53)$$

où :

$A_t$  : est l'aire de la section au col (section minimale de la tuyère);

et  $P_c$  : la pression à l'intérieur de la chambre de combustion.

Il est à noter que le produit de ces deux paramètres est égal à la vitesse effective d'échappement, soit :

$$C^* . C_f = F / \dot{W} = C \quad (2. 54)$$

I.4/- CALCUL DE L'IMPULSION SPECIFIQUE OPTIMALE :

Le calcul de l'impulsion spécifique optimale  $I_{opt}$ , revient à calculer la vitesse d'éjection des produits de combustion à la sortie de la tuyère.

La variation d'énergie interne d'un système ouvert, est donnée par le premier principe de la thermodynamique :

$$dU = dq + dw \quad (2. 55)$$

Or, le travail élémentaire reçu par le système s'écrit :

$$dw = - PdV \quad (2. 56)$$

soit :

$$dU = dq - PdV \quad (2. 57)$$

En outre, l'enthalpie du système a pour expression :

$$H = U + PV \quad (2. 58)$$

soit, après différenciation :

$$dH = dU + VdP + PdV \quad (2. 59)$$

En combinant les équations (2.57) et (2.59), on obtient :

$$dH = dq + VdP \quad (2. 60)$$

Par ailleurs, l'application de l'équation de Bernoulli donne :

$$P + \rho \frac{u^2}{2} = C^{te} \quad (2. 61)$$

soit, après différenciation :

$$dP = -\rho u du \quad (2.62)$$

où  $\rho$  et  $u$  sont respectivement la densité et la vitesse de l'écoulement.

En remplaçant  $dP$  dans l'équation d'énergie (2.60), on obtient :

$$dH = dq - V \rho u du \quad (2.63)$$

Or, la densité  $\rho$  a pour expression :

$$\rho = m/v \quad (2.64)$$

$m$  étant la masse.

soit :

$$dH = dq - mu du \quad (2.65)$$

Si l'on considère que l'écoulement à travers la tuyère est adiabatique,  $dq = 0$  et la variation d'enthalpie devient :

$$dH = - mu du \quad (2.66)$$

En intégrant l'équation précédente entre l'entrée et la sortie de la tuyère, pour une masse de propulsant  $m$ , égale à l'unité, on obtient :

$$u_e = \sqrt{2(h_c - h_e) + u_c^2} \quad (2.67)$$

où  $c$  et  $e$  réfèrent respectivement aux entrées et sorties de la tuyère

La vitesse  $u_c$ , à l'entrée de la tuyère, qui est aussi la vitesse de sortie de la chambre de combustion, est négligeable devant la vitesse de sortie  $u_e$ . Si cette première est considérée comme étant nulle, l'équation (2.67) se réduira à :

$$u_e = \sqrt{2(h_c - h_e)} \quad (2.68)$$

Finalement, l'impulsion spécifique optimale aura pour expression :

$$I_{opt} = \frac{u_e}{g} = \frac{1}{g} \sqrt{2(h_c - h_e)} \quad (2.69)$$

## ***CHAPITRE II :***

# MODELISATION ET RESOLUTION DU SYSTEME

II.1- Hypothèses de calcul

II.2- Calcul de la composition chimique

d'un système complexe:

II.2.1- Modélisation

II.2.2- Résolution du système d'équations

II.3- Calcul de la température de flamme adiabatique

II.4- Etude de la détente isentropique

II.1/-HYPOTHESES DE CALCUL :

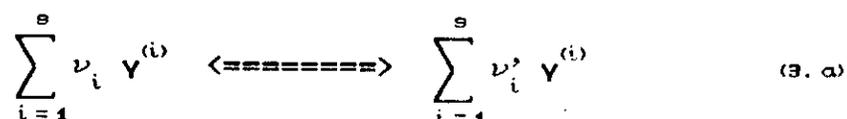
Le calcul théorique des performances de propulsants chimiques est fait en se basant sur les hypothèses suivantes :

- La combustion et la détente sont adiabatiques. Autrement dit, les pertes de chaleur à travers les parois de la chambre et la tuyère sont négligées.
- Les produits de combustion forment un mélange homogène qui obéit aux lois des gaz parfaits et dont la composition demeure invariante à travers la tuyère.
- L'équilibre chimique est complètement établi à la sortie de la chambre de combustion.
- Toutes les substances qui prennent part dans l'écoulement sont sous forme gazeuse. En d'autres termes, les pression partielle et volume de toute substance liquide ou solide sont considérés comme étant nuls.
- L'effet des frottements n'est pas pris en considération .
- L'écoulement des produits de combustion est considéré comme étant uniforme et permanent.
- La vitesse d'écoulement à la sortie de la chambre de combustion est nulle.
- L'écoulement dans la tuyère est isentropique et unidimensionnel.
- La direction de la vitesse des gaz d'échappement à la sortie de la tuyère est parallèle à l'axe de cette dernière.

II.2/-CALCUL DE LA COMPOSITION CHIMIQUE D'UN SYSTEME COMPLEXE :

2.1/-MODELISATION :

Toute réaction chimique peut être modélisée par une combinaison linéaire des s constituants qui prennent part dans la réaction [ref.6];



où :

$\nu_i$  et  $\nu'_i$  sont respectivement les nombres de moles des  $i^{\text{ème}}$ -réactif et produit.

$Y^{(i)} = (X_{ai1}^1, X_{ai2}^2, \dots, X_{aim}^m)$  caractérise la formule molaire du  $i^{\text{ème}}$  constituant;

$X^k$  symbolise le  $k^{\text{ème}}$  élément;

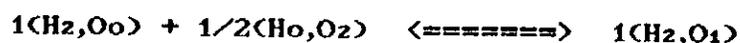
$a_{ik}$  est le coefficient correspondant au  $k^{\text{ème}}$  élément dans le  $i^{\text{ème}}$ -constituant;

*Exemple :*

Soit la réaction :



On distingue dans ce cas, deux éléments (H et O) et trois constituants (H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O). La modélisation sera donc :



soit

$$\begin{aligned} \chi^1 &= H & \text{et} & & \chi^2 &= 0; \\ a_{11} &= 2, & a_{12} &= 0, \\ a_{21} &= 0, & a_{22} &= 2, \\ a_{31} &= 2 & \text{et} & & a_{32} &= 1; \\ \nu_1 &= 1, & \nu_2 &= 1/2 & \text{et} & \nu_3 &= 0; \\ \nu'_1 &= 1, & \nu'_2 &= 1/2 & \text{et} & \nu'_3 &= 0. \end{aligned}$$

Ainsi pour un système fermé contenant  $s$  constituants en équilibre, à pression et température constantes, nous pouvons définir  $s$  vecteurs  $\mathcal{Y}_i(a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{im})$  qui constituent la matrice des coefficients de dimension  $(s, m)$ .

$$[a_{ik}] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{s1} & a_{s2} & \dots & a_{sm} \end{bmatrix} \quad (9.1)$$

$m$  étant le nombre total d'éléments dans le système.

Si  $c$  est le rang de cette matrice, nous distinguerons  $c$  vecteurs  $\mathcal{Y}_j$  linéairement indépendants et  $s-c$  vecteurs  $\mathcal{Y}_i$  linéairement dépendants qui peuvent être définis par une combinaison linéaire des  $c$  premiers vecteurs, soit :

$$y_i = \sum_{j=1}^c \nu_{ij} y_j \quad i = c+1, c+2, \dots, s \quad (3.2)$$

où :  $\nu_{ij}$  sont les éléments de la matrice du système des réactions de référence, définie par la relation suivante :

$$\boxed{[\nu_{ij}] = [a'_{ij}] \cdot [a''_{ij}]^{-1}} \quad (3.3)$$

Sachant que :

$[a'_{ij}]$  représente la matrice des coefficients des  $s-c$  vecteurs linéairement dépendants ;

et  $[a''_{ij}]^{-1}$  la matrice inverse de la matrice des coefficients des  $c$  vecteurs linéairement indépendants.

Ainsi donc, la composition chimique du système est complètement définie par les  $c$  constituants dits *composants du système*. Le choix de ces composants peut se faire parmi diverses combinaisons, mais il est fortement conseillé pour des raisons de convergence, de considérer les constituants dominants du système (ceux qui apparaissent plus).

La combinaison linéaire définie par la relation (3.2), correspond à un ensemble de réactions virtuelles de formation des constituants du système à partir de ses composants. Il est évident que le nombre de ces réactions pour un tel système, est équivalent au nombre de vecteurs linéairement dépendants, à savoir  $s-c$ .

On peut alors, définir pour chaque une des réactions, une

constante d'équilibre en fonction des pressions partielles des différents constituants comme suite :

$$Kp_i = \frac{P_i}{\prod_{k=1}^c (P_k)^{\nu_{ik}}} \quad \begin{matrix} i=c+1, c+2, \dots, s \\ (9.4) \end{matrix}$$

où :

$P_i$  et  $P_k$  sont respectivement les pressions partielles du  $i^{\text{ème}}$  constituant et  $k^{\text{ème}}$  composant.

**Exemple :**

Soit un système en équilibre constitué des produits suivants : H, O, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O et OH.

La matrice des coefficients sera :

$$[a_{ij}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 2 & 0 \\ 0 & 2 \\ 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Soit :

$$[ \text{H} \quad \text{O} \quad \text{H}_2 \quad \text{O}_2 \quad \text{H}_2\text{O} \quad \text{OH} ] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 2 & 0 \\ 0 & 2 \\ 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \text{H} \\ \text{O} \end{bmatrix}$$

Pour un tel système  $c=2$  et les composants peuvent être choisis parmi ces treize combinaisons :

(H<sub>2</sub>,O<sub>2</sub>) , (H<sub>2</sub>,H<sub>2</sub>O) , (H<sub>2</sub>,O) , (H<sub>2</sub>,OH)  
 (O<sub>2</sub>,H<sub>2</sub>O) , (O<sub>2</sub>,H) , (O<sub>2</sub>,OH) , (H<sub>2</sub>O,H)  
 (H<sub>2</sub>O,O) , (H<sub>2</sub>O,OH) , (H,O) , (H,OH)  
 (O,OH) .

Si l'on considère la combinaison (H<sub>2</sub>O,OH), on aura :

$$[a'_{ij}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

$$[a''_{ij}] = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \implies [a''_{ij}]^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

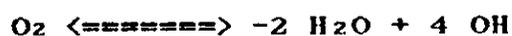
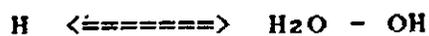
La matrice du système de réactions de référence sera :

$$[\nu_{ij}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \\ 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix}$$

La combinaison linéaire que l'on obtient est :

$$[ \text{H} \quad \text{O} \quad \text{H}_2 \quad \text{O}_2 ] = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \\ 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \text{H}_2\text{O} \\ \text{OH} \end{bmatrix}$$

Ainsi les réactions virtuelles seront :



Finalement les constantes d'équilibre correspondantes sont :

$$K_{p_{\text{H}}} = \frac{P_{\text{H}}}{P_{\text{H}_2\text{O}} P_{\text{OH}}^{-1}}$$

$$K_{p_{\text{O}}} = \frac{P_{\text{O}}}{P_{\text{H}_2\text{O}}^{-1} P_{\text{OH}}^2}$$

$$K_{p_{\text{H}_2}} = \frac{P_{\text{H}_2}}{P_{\text{H}_2\text{O}}^2 P_{\text{OH}}^{-2}}$$

$$K_{p_{\text{O}_2}} = \frac{P_{\text{O}_2}}{P_{\text{H}_2\text{O}}^{-2} P_{\text{OH}}^4}$$

Nous avons jusqu'à présent, établi s-c relations d'équilibre qui relient les pressions partielles des différents constituant du système étudié. Les autres relations nécessaires à la détermination de la composition chimique du système sont fournies par la loi de DALTON et la loi de conservation de la masse.

La loi de DALTON relie la pression totale du système P, aux pressions partielles des constituants  $P_i$ , elle s'écrit :

$$P = \sum_{i=1}^s P_i \quad (3.5)$$

La loi de conservation de la masse, appliquée au système étudié, s'écrit :

$$\sum_{i=1}^s a_{ik} n_i = \sigma_k \quad k=1,2,\dots,m \quad (3.6)$$

où :

$a_{ik}$  : est le coefficient du  $k^{\text{ème}}$  élément dans  $i^{\text{ème}}$  constituant;

$n_i$  : le nombre de moles du  $i^{\text{ème}}$  constituant;

et  $\sigma_k$  : le nombre total de moles du  $k^{\text{ème}}$  élément par unité de masse de propulsant.

Or, pour un système où tous les constituants sont en phase gazeuse, nous savons que :

$$\frac{P_i}{P} = \frac{n_i}{n} \quad (3.7)$$

soit :

$$n_i = n \frac{P_i}{P} = \frac{P_i}{A} \quad i=1,2,\dots,s \quad (3.8)$$

où :  $n$  : est le nombre total de moles du système;

et  $A = P/n$  (3.9)

L'équation de conservation de la masse peut donc s'écrire sous la forme suivante :

$$\sum_{i=1}^s a_{ik} P_i = A \sigma_k \quad k=1,2,\dots,m \quad (3.10)$$

Exemple :

Considérons l'exemple précédent. Les équations (3.5), (3.6) et (3.10) s'écrivent respectivement :

$$P = P_{H_2O} + P_{HO} + P_{H_2} + P_{O_2} + P_H + P_O$$

$$\begin{cases} 2 n_{H_2O} + n_{HO} + 2 n_{H_2} + n_H = \sigma_H \\ n_{H_2O} + n_{HO} + 2 n_{O_2} + n_O = \sigma_O \end{cases}$$

$$\begin{cases} 2 P_{H_2O} + P_{HO} + 2 P_{H_2} + P_H = A \sigma_H \\ P_{H_2O} + P_{HO} + 2 P_{O_2} + P_O = A \sigma_O \end{cases}$$

Les équations (3.4), (3.5) et (3.6) ou (3.10) constituent un système de  $(s-c+1+m)$  équations, à  $(s+1)$  inconnues. Or, pour un choix judicieux des composants du système, le rang  $c$ , de la matrice des coefficients correspond au nombre d'éléments  $m$ . Aussi, on obtient un système où le nombre d'équations est égal au nombre d'inconnues  $(s+1)$ .

La détermination de la composition chimique des produits de combustion consiste donc, à résoudre le système d'équations non linéaires, décrit ci-dessus. Nous nous sommes proposé, pour ce

fait, d'utiliser la méthode des approximations successives.

La simplicité de mise en oeuvre de cette méthode et son nombre d'opérations relativement faible font qu'elle s'adapte assez bien à ce genre de problèmes. En effet, le problème en question nécessite plusieurs itérations pour la détermination de la température d'équilibre. Autrement dit, la composition des produits est calculée plusieurs fois à des températures différentes. Par conséquent, un nombre d'opérations élevé engendrerait un temps d'exécution énorme.

## 2.2/-RESOLUTION DU SYSTEME D'EQUATION :

Reprenons les équations (3.4), (3.5) et (3.10) :

$$-\star- \quad Kp_i = \frac{P_i}{\prod_{k=1}^c (P_k)^{\nu_{ik}}} \quad \begin{array}{l} i=c+1, c+2, \dots, s \\ (3.4) \end{array}$$

$$-\star- \quad P = \sum_{i=1}^s P_i \quad (3.5)$$

$$-\star- \quad \sum_{i=1}^s a_{ik} P_i = A \sigma_k \quad \begin{array}{l} k=1, 2, \dots, m \\ (3.10) \end{array}$$

Sachant que :

$$[\nu_{ij}] = [a'_{ij}] \cdot [a''_{ij}]^{-1} \quad (3.3)$$

$$A = P/n \quad (3.9)$$

Pour des température et pression données, les inconnues du système sont les  $s$  pressions partielles  $P_i$  et le nombre total de moles  $n$  caractérisé par la variable  $A$ . La méthode des approximations successives consiste à écrire le système sous la forme suivante :

$$\begin{cases} P_i = \mathcal{F}_i(n, P_1, P_2, \dots, P_s) \\ n = \mathcal{F}_{s+1}(n, P_1, P_2, \dots, P_s) \end{cases} \quad \begin{matrix} i=1, 2, \dots, s \\ (3.11) \end{matrix}$$

Une valeur estimée  $(n, P_1, P_2, \dots, P_s)^{(0)}$  de la solution exacte est alors substituée à  $(n, P_1, P_2, \dots, P_s)$  dans les termes de droite du système (3.11). On obtient ainsi une nouvelle approximation  $(n, P_1, P_2, \dots, P_s)^{(1)}$ . L'opération est répétée jusqu'à ce que l'on obtienne, s'il y a convergence, une valeur  $(n, P_1, P_2, \dots, P_s)^r$  qui vérifie le système en question.

En raison de la difficulté de convergence, nous présentons ici, deux approches quelques peu différentes.

#### a/-Première approche :

Contrairement aux équations (3.5) et (3.10), les équations (3.4) ne sont pas linéaires. Toutefois, celles-ci peuvent l'être si elles sont écrites sous forme logarithmique :

$$\ln P_i - \sum_{j=1}^c \nu_{ij} \ln P_j = \ln K_{p_i} \quad \begin{matrix} i=c+1, c+2, \dots, s \\ (3.12) \end{matrix}$$

Le développement en séries de Taylor des relations (3.12), (3.5) et (3.10) donne [ref.2]:

$$-\star- \quad \Delta \ln P_i^{(r)} - \sum_{j=1}^c \nu_{ij} \Delta \ln P_j^{(r)} = \left[ \frac{d(\ln Kp_i)}{d \ln T} \right] \Delta \ln T^{(r)} \quad \begin{matrix} i=c+1, c+2, \dots, s \\ (3.13) \end{matrix}$$

$$-\star- \quad P^{(r)} \ln \left[ \frac{P}{P^{(r)}} \right] = \sum_{i=1}^s P_i^{(r)} \Delta \ln P_i^{(r)} \quad (3.14)$$

$$-\star- \quad \sum_{i=1}^s a_{ik} P_i^{(r)} \Delta \ln P_i^{(r)} - (A\sigma_k)^{(r)} \Delta \ln A^{(r)} = (A\sigma_k)^{(r)} \ln \left[ \frac{\sigma_k}{\sigma_k^{(r)}} \right] \quad \begin{matrix} k=1, 2, \dots, m \\ (3.15) \end{matrix}$$

où  $(r)$  caractérise la  $r^{\text{ème}}$  approximation.

Or, dans notre cas, le système est résolu à des températures données. Par conséquent, l'erreur  $\Delta \ln T$ , est nulle ( $\Delta \ln T = 0$ ). Le système d'équations s'écrit donc :

$$-\star- \quad \Delta \ln P_i^{(r)} - \sum_{j=1}^c \nu_{ij} \Delta \ln P_j^{(r)} = 0 \quad \begin{matrix} i=c+1, c+2, \dots, s \\ (3.13) \end{matrix}$$

$$-\star- \quad P^{(r)} \ln \left[ \frac{P}{P^{(r)}} \right] = \sum_{i=1}^s P_i^{(r)} \Delta \ln P_i^{(r)} \quad (3.14)$$

$$-\star- \quad \sum_{i=1}^s a_{ik} P_i^{(r)} \Delta \ln P_i^{(r)} - (A\sigma_k)^{(r)} \Delta \ln A^{(r)} = (A\sigma_k)^{(r)} \ln \left[ \frac{\sigma_k}{\sigma_k^{(r)}} \right] \quad \begin{matrix} k=1, 2, \dots, m \\ (3.15) \end{matrix}$$

Le système peut ainsi prendre la forme matricielle suivante :

$$\begin{array}{l}
 \text{eqs. (3.16)} \\
 \text{eqs. (3.15)} \\
 \text{eq. (3.14)} \rightarrow
 \end{array}
 \left\{ \begin{array}{c}
 \begin{array}{c}
 \Delta \ln P_{c+1} \quad \Delta \ln P_{c+2} \quad \dots \quad \Delta \ln P_s \\
 \left[ U_m \right]
 \end{array} \\
 \hline
 \begin{array}{c}
 \Delta \ln P_1 \quad \Delta \ln P_2 \quad \dots \quad \Delta \ln P_c \quad \Delta \ln A \quad C^{-les} \\
 \left[ \alpha 1 \right] \\
 \left[ \alpha 2 \right] \\
 \left[ \alpha 3 \right]
 \end{array}
 \end{array} \right. \quad (3.17)$$

où :

$$\left[ U_m \right] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

$$\left[ \alpha 1 \right] = \begin{bmatrix} \nu_{11} & \nu_{12} & \dots & \nu_{1c} & 0 & 0 \\ \nu_{21} & \nu_{22} & \dots & \nu_{2c} & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ \nu_{(s-c)1} & \nu_{(s-c)2} & \dots & \nu_{(s-c)c} & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

$$\left[ \alpha 2 \right] = \begin{bmatrix} a_{(c+1)1} & a_{(c+2)1} & \dots & a_{s1} \\ a_{(c+1)2} & a_{(c+2)2} & \dots & a_{s2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{(c+1)1} & a_{(c+2)1} & \dots & a_{s1} \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} P_{c+1}^{(r)} \\ P_{c+2}^{(r)} \\ \vdots \\ P_s^{(r)} \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

$$[\alpha_3] = \begin{bmatrix} a_{11} P_1^{(r)} & a_{21} P_2^{(r)} & \dots & a_{c1} P_c^{(r)} & -(\Lambda\sigma_1)^{(r)} & (\Lambda\sigma_1)^{(r)} \ln \left( \frac{\sigma_1}{\sigma_1^{(r)}} \right) \\ a_{12} P_1^{(r)} & a_{22} P_2^{(r)} & \dots & a_{c2} P_c^{(r)} & -(\Lambda\sigma_2)^{(r)} & (\Lambda\sigma_2)^{(r)} \ln \left( \frac{\sigma_1}{\sigma_1^{(r)}} \right) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{1m} P_1^{(r)} & a_{2m} P_2^{(r)} & \dots & a_{cm} P_c^{(r)} & -(\Lambda\sigma_m)^{(r)} & (\Lambda\sigma_m)^{(r)} \ln \left( \frac{\sigma_m}{\sigma_m^{(r)}} \right) \\ P_1 & P_2 & \dots & P_c & 0 & P^{(r)} \ln \left( \frac{P}{P^{(r)}} \right) \end{bmatrix}$$

(3.21)

Généralement, la dimension (s+1) du système (3.17) est assez importante, il est donc préférable d'adopter une résolution par bloc. Pour ce faire une matrice auxiliaire  $[\alpha_4]$  est calculée comme suite [ref.10]:

$$[\alpha_4] = [\alpha_3] - [\alpha_2][\alpha_1] \tag{3.22}$$

On obtient ainsi le système auxiliaire suivant :

$$\begin{bmatrix} \Delta \ln P_1 & \Delta \ln P_2 & \dots & \Delta \ln P_c & \Delta \ln A & C^{les} \\ [\alpha_4] = [\alpha_3] - [\alpha_2] \times [\alpha_1] \end{bmatrix} \tag{3.23}$$

La résolution de ce système auxiliaire, d'ordre (c+1), donne les corrections  $\Delta \ln P_1, \Delta \ln P_2, \dots, \Delta \ln P_c$  et  $\Delta \ln A$ . Les nouvelles valeurs des pressions partielles des composants du

ystème, ainsi que la nouvelle valeur de la variable (A) sont alors calculées à la (r+1)<sup>ème</sup> approximation, comme suite :

$$\ln P_i^{(r+1)} = \ln P_i^{(r)} + \Delta \ln P_i^{(r)} \quad i = 1, 2, \dots, c \quad (3.24)$$

$$\ln A^{(r+1)} = \ln A^{(r)} + \Delta \ln A^{(r)} \quad (3.25)$$

Les pressions partielles des (s-c) autres constituants, sont calculées à partir des relations (3.12).

Soit :

$$\ln P_i^{(r+1)} = \ln K_{p_i} + \sum_{j=1}^c \nu_{ij} \ln P_j^{(r+1)} \quad i=c+1, c+2, \dots, s \quad (3.26)$$

**Exemple :**

Considérons l'exemple précédant, contenant les constituants suivants : H, O, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O et OH.

Si l'on choisit les mêmes composants du système H<sub>2</sub>O et OH, les matrices [α<sub>1</sub>], [α<sub>2</sub>] et [α<sub>3</sub>] s'écrivent :

$$[\alpha_1] = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & -2 & 0 & 0 \\ -2 & 4 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$[\alpha_2] = \begin{bmatrix} P_H^{(r)} & 0 & 2P_{H_2}^{(r)} & 0 \\ 0 & P_O^{(r)} & 0 & 2P_{O_2}^{(r)} \\ P_H^{(r)} & P_O^{(r)} & P_{H_2}^{(r)} & P_{O_2}^{(r)} \end{bmatrix}$$

$$[\alpha 3] = \left[ \begin{array}{ccc|c} 2P_{H_2O}^{(r)} & P_{OH}^{(r)} & -(A\sigma_H)^{(r)} & (A\sigma_H)^{(r)} \ln \left( \frac{\sigma_H}{\sigma_H^{(r)}} \right) \\ P_{H_2O}^{(r)} & P_{OH}^{(r)} & -(A\sigma_O)^{(r)} & (A\sigma_O)^{(r)} \ln \left( \frac{\sigma_O}{\sigma_O^{(r)}} \right) \\ P_{H_2O}^{(r)} & P_{OH}^{(r)} & 0 & P^{(r)} \ln \left( \frac{P}{P^{(r)}} \right) \end{array} \right]$$

La matrice  $[\alpha 4]$  s'écrira donc :

$$[\alpha 4] = \left[ \begin{array}{ccc|c} \Delta \ln P_{H_2O}^{(r)} & \Delta \ln P_{OH}^{(r)} & \Delta \ln A^{(r)} & C^{les} \\ \hline -P_H^r - 4P_{H_2}^r + 2P_{H_2O}^r & P_H^r + 4P_{H_2}^r + P_{OH}^r & -(A\sigma_H)^{(r)} & (A\sigma_H)^{(r)} \ln \left( \frac{\sigma_H}{\sigma_H^{(r)}} \right) \\ \hline P_O^r + 4P_{O_2}^r + P_{H_2O}^r & -2P_O^r - 8P_{O_2}^r + P_{OH}^r & -(A\sigma_O)^{(r)} & (A\sigma_O)^{(r)} \ln \left( \frac{\sigma_O}{\sigma_O^{(r)}} \right) \\ \hline -P_H^r + P_O^r - 2P_{H_2}^r + 2P_{O_2}^r + P_{H_2O}^r & P_H^r - 2P_O^r + 2P_{H_2}^r - 4P_{O_2}^r + P_{OH}^r & 0 & P^{(r)} \ln \left( \frac{P}{P^{(r)}} \right) \end{array} \right]$$

Les équations (9.24) et (9.25) seront donc :

$$\ln P_{H_2O}^{(r+1)} = \ln P_{H_2O}^{(r)} + \Delta \ln P_{H_2O}^{(r)}$$

$$\ln P_{OH}^{(r+1)} = \ln P_{OH}^{(r)} + \Delta \ln P_{OH}^{(r)}$$

$$\ln A^{(r+1)} = \ln A^{(r)} + \Delta \ln A^{(r)}$$

Finalement les équations (3.26) s'écriront :

$$\ln P_H^{(r+1)} = \ln K_{p_H} + \ln P_{H_2O}^{(r+1)} - \ln P_{OH}^{(r+1)}$$

$$\ln P_O^{(r+1)} = \ln K_{p_O} - \ln P_{H_2O}^{(r+1)} + 2 \ln P_{OH}^{(r+1)}$$

$$\ln P_{H_2}^{(r+1)} = \ln K_{p_{H_2}} + 2 \ln P_{H_2O}^{(r+1)} - 2 \ln P_{OH}^{(r+1)}$$

$$\ln P_{O_2}^{(r+1)} = \ln K_{p_{O_2}} - 2 \ln P_{H_2O}^{(r+1)} + 4 \ln P_{OH}^{(r+1)}$$

b/-Deuxième approche :

L'approche précédente consiste à calculer à chaque itération, les erreurs  $\Delta \ln P_i$  et  $\Delta \ln A$ , à partir des valeurs approximées des pressions partielles  $P_i$  et de la variable  $A$ . Le principe de base pour cette deuxième approche est le même, mais les approximations seront directement effectuées sur les fractions molaire  $y_i$ , des constituants du système ainsi que le nombre totale de moles  $n$ .

Nous devons en premier lieu, pour ce fait, exprimer les équations (3.4) et (3.5) en fonction de ces variables.

Nous savons déjà que la relation liant les pressions partielles  $P_i$ , aux fractions molaires  $y_i$ , s'écrit :

$$y_i = \frac{P_i}{P} = \frac{n_i}{n} \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (3.27)$$

Soit :

$$P_i = y_i P \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (3.28)$$

En remplaçant les pressions partielles dans l'équation (3.4), on obtient :

$$Kp_i = \frac{y_i P}{\prod_{k=1}^c (y_k P)^{\nu_{ik}}} \quad i=c+1, c+2, \dots, s \quad (3.29)$$

Soit :

$$y_i = \left[ Kp_i P^{(\sum_{k=1}^c \nu_{ik} - 1)} \right] \times \prod_{k=1}^c (y_k)^{\nu_{ik}} \quad i=c+1, c+2, \dots, s \quad (3.30)$$

Idem pour l'équation (3.5), on obtient :

$$\sum_{i=1}^s y_i = 1 \quad (3.31)$$

Par ailleurs, nous pouvons écrire à partir de l'équation (3.27):

$$n_i = y_i n \quad i = 1, 2, \dots, s \quad (3.32)$$

En substituant cette valeur à  $n_i$  dans l'équation (3.6), on obtient :

$$\sum_{i=1}^s a_{ik} y_i = \frac{\sigma_k}{n} \quad k=1, 2, \dots, m \quad (3.33)$$

soit :

$$\sum_{i=1}^c a''_{ik} y_i + \sum_{i=c+1}^s a'_{ik} y_i = \frac{\sigma_k}{n} \quad k=1,2,\dots,m \quad (3.34)$$

Ecrit sous forme matricielle, l'équation (3.34) devient :

$$[y''_i] \cdot [a''_{ik}] + [y'_i] \cdot [a'_{ik}] = \left[ \frac{\sigma_k}{n} \right] \quad (3.35)$$

avec :

$$[y'_i] = [y_{c+1} \ y_{c+2} \ \dots \ y_s] \quad (3.36)$$

et  $[y''_i] = [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_c]$  (3.37)

D'où :

$$[y''_i] = \left[ \left[ \frac{\sigma_k}{n} \right] - [y'_i] \cdot [a'_{ik}] \right] \times [a''_{ik}]^{-1} \quad (3.38)$$

Soit :

$$y_i = \sum_{k=1}^m a''_{ki}^{-1} \times \left( \frac{\sigma_k}{n} + \sum_{j=c+1}^s a'_{jk} y_j \right) \quad i=1,2,\dots,c \quad (3.39)$$

Rappelons que:

$[a'_{ik}]$  représente la matrice des coefficients des  $s-c$  vecteurs linéairement dépendants;  
 et  $[a''_{ik}]^{-1}$  la matrice inverse de la matrice des coefficients des  $c$  vecteurs linéairement indépendants.

Nous pouvons à présent constituer le système de résolution à partir des équations (3.39),(3.31),(3.30) et (3.33).

$$-\star- y_i^{(r+1)} = \sum_{k=1}^m a_{ki}^{n-1} \times \left[ \frac{\sigma_k}{n} + \sum_{j=c+1}^s a'_{jk} y_j^{(r)} \right] \quad \begin{matrix} i=1,2,\dots,c-1 \\ (3.40) \end{matrix}$$

$$-\star- y_c^{(r+1)} = 1 - \sum_{i=1}^{c-1} y_i^{(r+1)} - \sum_{j=c+1}^s y_j^{(r)} \quad (3.41)$$

$$-\star- y_i^{(r+1)} = \left[ Kp_i \cdot P \left( \sum_{k=1}^c \nu_{ik}^{-1} \right) \right] \times \prod_{k=1}^c \left( y_k^{(r+1)} \right)^{\nu_{ik}} \quad \begin{matrix} i=c+1,c+2,\dots,s \\ (3.42) \end{matrix}$$

$$-\star- n^{(r+1)} = \frac{\sigma_c}{\sum_{i=1}^s a_{ik} y_i^{(r+1)}} \quad (3.43)$$

II.3/-CALCUL DE LA TEMPERATURE DE FLAMME ADIABATIQUE :

L'enthalpie  $H_0$ , des réactifs à l'état initial est donnée par la relation suivante :

$$H_0 = \sum_{i=1}^r n_i^{\circ} \left( H_{T_0}^{\circ} \right)_i \quad (3.44)$$

où :  $T_0$  : est la température initiale des réactifs;

$r$  : le nombre de substance à l'état initial;

$\left( H_{T_0}^{\circ} \right)_i$  : est l'enthalpie de formation molaire du  $i^{\text{ème}}$  réactif, à la température  $T_0$ ;

$n_i^{\circ}$  : le nombre de mole à l'état initial, du  $i^{\text{ème}}$  réactif;

De même l'enthalpie  $H_c$  des produits de combustion est donnée par :

$$H_c = \sum_{j=1}^s n_{c_j} \left( H_{T_c}^{\circ} \right)_j \quad (3.45)$$

où :

$T_c$  : est la température des produits à la sortie de la chambre

$s$  : le nombre de constituants à la sortie de la chambre;

$\left( H_{T_c}^{\circ} \right)_j$  : est l'enthalpie de formation molaire du  $j^{\text{ème}}$  produits à la température  $T_c$ ;

$n_{c_j}$  : le nombre de mole du  $j^{\text{ème}}$  réactif, à la sortie de la chambre

En outre, la température de flamme adiabatique est par définition, la température des produits d'une évolution de combustion qui se produit adiabatiquement, sans travail et sans changement d'énergies cinétique et potentielle. Pour une telle évolution l'équation de conservation de l'énergie entre l'entrée et la sortie de la chambre de combustion s'écrit :

$$\Delta H = H_c - H_o = 0 \quad (9.46)$$

Soit :

$$\sum_{j=1}^s n_{c_j} \left( H_{T_c}^{\circ} \right)_j - \sum_{i=1}^r n_i^{\circ} \left( H_{T_o}^{\circ} \right)_i = 0 \quad (9.47)$$

Ainsi, la température de flamme adiabatique d'une évolution de combustion à pression constante  $P_c$ , peut être évaluée en procédant comme suite :

- \*- On commence par initialiser la température de combustion  $T_c$ , à une valeur estimée  $T_c^0$ . Autrement dit, On pose  $T_c = T_c^0$ .
- \*- On calcule la composition chimique des produits de combustion correspondant à la température  $T_c = T_c^0$  et la pression  $P_c$ , en utilisant l'une des deux approches décrites dans le paragraphe précédent.
- \*- On calcule par la suite l'enthalpie de combustion :

$$\Delta H = \sum_{j=1}^s n_{c_j} \left( H_{T_c}^{\circ} \right)_j - \sum_{i=1}^r n_i^{\circ} \left( H_{T_o}^{\circ} \right)_i \quad (9.48)$$

\*- La température estimée est corrigée en fonction de la valeur de l'enthalpie obtenue et on réitère la procédure jusqu'à ce que l'on obtienne la température correspondant à une enthalpie de combustion nulle; autrement dit, la température vérifiant la relation (3.47) et qui est par définition la température de flamme adiabatique.

II.4/-ETUDE DE LA DETENTE ISENTROPIQUE [ref.1,2 et 9].

Après avoir déterminé la température de flamme adiabatique et la composition des produits de combustion, on calcule l'entropie à la sortie de la chambre de combustion en utilisant la relation suivante :

$$S_c = \sum_{j=1}^s n_{c_j} \left( S_{T_c}^{\circ} \right)_j - \frac{R}{M_c P_c} \sum_{i=1}^s P_{c_i} \ln P_{c_i} \quad (9.49)$$

où :  $\left( S_{T_c}^{\circ} \right)_j$  : est l'entropie absolue à la température  $T_c$  du  $j^{\text{ème}}$  produits;

$M_c$  : la masse molaire moyenne des produits de combustion;

$P_c$  : la pression totale de combustion;

$P_{c_i}$  : la pression partielle du  $i^{\text{ème}}$  produits à la sortie de la chambre de combustion;

$R$  : la constante des gaz parfaits.

De même, l'entropie des produits à la sortie de la tuyère est donnée par la relation suivante :

$$S_e = \sum_{j=1}^s n_{e_j} \left( S_{T_e}^{\circ} \right)_j - \frac{R}{M_e P_e} \sum_{i=1}^s P_{e_i} \ln P_{e_i} \quad (9.50)$$

où :

$\left[ S_{T_e}^\circ \right]_j$  : est l'entropie absolue à la température  $T_e$   
du  $j^{\text{ème}}$  produits;

$n_i$  : le nombre de moles du  $j^{\text{ème}}$  produits à la sortie  
de la tuyère;

$M_e$  : la masse molaire moyenne des produits d'échappement;

$P_e$  : la pression totale à la sortie de la tuyère;

$P_{e_i}$  : la pression partielle du  $i^{\text{ème}}$  produits à la sortie  
de la tuyère;

L'écoulement des produits de combustion à travers la tuyère est considéré comme étant isentropique. Ainsi, la température d'échappement est déterminée en supposant que la variation d'entropie entre l'entrée et la sortie de la tuyère est nulle. Soit :

$$\Delta S = S_e - S_c = 0 \quad (3.51)$$

La composition des produits varie tout le long de la tuyère. La prise en considération d'un tel phénomène compliquera énormément l'étude de l'écoulement. Ainsi, le calcul de la température à la sortie de la tuyère se fait par deux méthodes :

La première dit "frozen equilibrium" consiste à calculer les propriétés thermodynamiques en considérant que la composition des produits demeure invariante durant la détente. Par conséquent, les nombres de moles des constituants à la sortie

de la chambre de combustion sont utilisés pour le calcul de l'entropie à la sortie de la tuyère.

La deuxième méthode consiste à calculer la composition chimique des produits aux température et pression totale de sortie. Les nombres de moles obtenus sont alors, utilisés pour le calcul de l'entropie à la sortie de la tuyère. Cette méthode est appelée "shifting equilibrium".

La procédure classique de calcul de la température d'échappement est la suivante :

**a/-Frozen equilibrium :**

Après avoir calculé l'entropie à la sortie de la chambre de combustion à partir de la relation (3.49), on utilise la relation suivante pour calculer l'entropie des produits à la pression de sortie de la tuyère  $P_e$ , et à une température supputée  $T_e^0$  :

$$S_e = \sum_{j=1}^s n_{c_j} \left[ S_{T_e^0}^{\circ} \right]_j - \frac{R}{M_c P_e} \sum_{i=1}^s P_{e_i} \ln P_{e_i} \quad (3.52)$$

La température  $T_e^0$  est rectifiée après avoir comparé les deux entropies calculées. Si  $S_e > S_c$ , la température en question est trop élevée et si  $S_e < S_c$ , celle ci est trop basse.

Cette même procédure est réitérée jusqu'à ce que l'on obtienne la température  $T_e$ , pour laquelle les entropies  $S_e$  et  $S_c$  sont égales à une erreur près.

**b/-Shifting equilibrium :**

La procédure de calcul est la même que celle de la méthode précédente, sauf que les fractions molaires utilisées pour le calcul de l'entropie à la sortie de la tuyère, sont recalculées à chaque itération, aux température et pression totale de sortie  $T_e$  et  $P_e$ , en utilisant l'une des approches décrites dans le paragraphe (III.2). On remplacera donc, dans la procédure précédente, la relation (3.52) par la relation (3.50) pour calculer l'entropie  $S_e$ .

# ***CHAPITRE III :***

# ALGORITHME DE PROGRAMMATION

## III.1- Programme principale

### III.1.1- Algorithme de résolution

### III.1.2- Organigramme du programme principale

## III.2- Sous-programme de calcul des fractions molaire

### III.2.1- Première approche

### III.2.2- Deuxième approche

Après avoir illustré les différentes équations mathématiques utilisées dans notre étude, et après avoir proposé une méthode de résolution appropriée, nous présentons dans ce chapitre un algorithme de programmation qui permettra la récapitulation des différentes étapes à suivre et de mettre ainsi en évidence les axes principaux du programme de résolution.

## 1/-PROGRAMME PRINCIPAL :

### 1.1/-ALGORITHME DE RESOLUTION :

#### 1- Dimensionnement et lecture des données :

- \*- Lecture du nombre d'éléments constituant le système.
- \*- Lecture des données relatives aux substances initiales;  
à savoir:
  - La masse molaire de chaque élément;
  - la composition chimique des carburant et oxidant;
  - le rapport massique "oxidant/carburant";
  - la température d'entrée.
- \*- Lecture des données relatives aux substances en équilibre:
  - Le nombre de constituants;
  - la composition chimique de chaque constituant;
  - la matrice des coefficients;
  - la pression de combustion ainsi que celle du milieu extérieur.

2-Décomposition de la matrice des coefficients.

3-Inversion de la matrice des composants du système.

4-Calcul de la matrice du système des réactions de référence, par le biais de la relation (3.3).

5-Initialisation des fractions molaires à la sortie de la chambre de combustion.

6-calcul du nombre de moles initiales et l'enthalpie des réactifs correspondant à un kilogramme de propulsant:

-\*- Calcul des masses molaire de l'oxidant et du carburant.

-\*- Calcul des masses d'oxidant et carburant relatifs à un kilogramme de propulsant.

-\*- Calcul des nombres de moles d'oxidant et carburant relatifs à la quantité sus-mentionnée.

-\*- Calcul du nombre de moles relatif à la même quantité de propulsant pour chaque élément chimique du système, en utilisant la relation (3.6).

-\*- Calcul de l'enthalpie des réactifs à la température d'entrée.

7- Délimitation approximative de l'intervalle des températures à la sortie de la chambre de combustion (initialisation de la température de combustion à  $T_1$  et  $T_2$ ).

8-Calcul des fractions molaire et température de flamme adiabatique des produits à la sortie de la chambre de combustion:

-\*- Calcul des enthalpies et entropies des constituants en équilibre aux températures  $T_1$  et  $T_2$ .

-\*- Calcul des constantes d'équilibre aux températures  $T_1$  et  $T_2$ , en utilisant la relation (2.24).

-\*- Calcul des fractions molaire et nombre de moles des constituants à  $T_1$  et  $T_2$ .

-\*- Calcul des enthalpies de réactions  $H_{r1}$  et  $H_{r2}$  correspondant respectivement aux températures  $T_1$  et  $T_2$ .

-\*- Si  $H_{r1}=0$  (ou respectivement  $H_{r2}=0$ ) à une erreur près, alors la température de flamme adiabatique est égale à  $T_1$  (ou respectivement  $T_2$ ) et la composition chimique des produits à la sortie de la chambre de combustion correspond à celle calculée auparavant, à cette même température.

- Autrement la température correspondant à l'enthalpie de réaction la plus élevée est réctifiée par interpolation et l'étape (8) est réitérée.

9-Calcul de l'entropie  $S_c$  des produits à la sortie de la chambre de combustion.

10-Délimitation approximative de l'intervalle des températures à la sortie de la tuyère (initialisation de la température de sortie à  $T_{s1}$  et  $T_{s2}$ ).

11-Calcul des fractions molaire et température à la sortie de la tuyère:

**a/-Frozen equilibrium :**

*Nous rappelons que dans ce cas la composition chimique des produits est supposée invariante pendant la détente, aussi les fractions molaire et nombre de moles ne seront pas calculés.*

-\*- Calcul des entropies des constituants en équilibre aux températures  $T_{s1}$  et  $T_{s2}$ .

-\*- Calcul des entropies des produits  $S_{f1}$  et  $S_{f2}$  correspondant respectivement aux températures  $T_{s1}$  et  $T_{s2}$ .

-\*- Si  $S_{f1}=S_c$  (ou respectivement  $S_{f2}=S_c$ ) à une erreure près, alors la température de sortie de la tuyère est égale à  $T_{s1}$  (ou respectivement  $T_{s2}$ ).

- Autrement la température correspondant à l'entropie la plus proche de  $S_c$  est maintenue alors que la seconde est réctifiée par interpolation et l'étape (11a) est réitérée.

-\*- Réinitialisation des températures de sortie  $T_{s1}$  et  $T_{s2}$ .

-\*- Initialisation des fractions molaire à la sortie de la tuyère.

**b/-Shifting equilibrium :**

-\*- Calcul des enthalpies et entropies des constituants en équilibre aux températures  $T_{s1}$  et  $T_{s2}$ .

-\*- Calcul des constantes d'équilibre aux températures  $T_{s1}$  et  $T_{s2}$ , en utilisant la relation (2.24).

-\*- Calcul des fractions molaires et nombre de moles des constituants aux  $T_{s1}$  et  $T_{s2}$ .

-\*- Calcul des entropies  $S_{s1}$  et  $S_{s2}$ , des produits correspondant respectivement aux températures  $T_{s1}$  et  $T_{s2}$ .

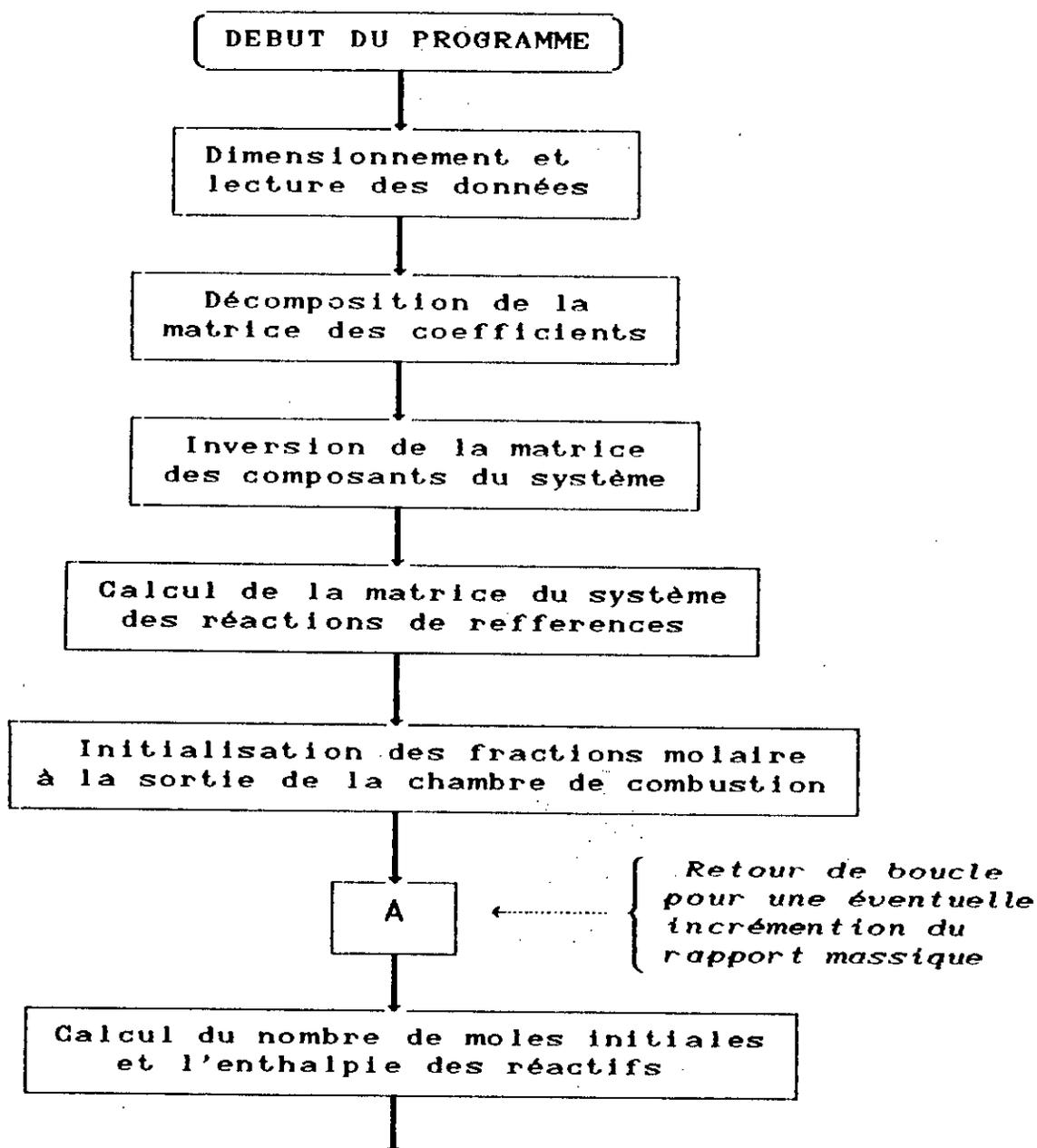
-\*- Si  $S_{s1} = S_c$  (ou respectivement  $S_{s2} = S_c$ ) à une erreur près, alors la température de sortie de la tuyère est égale à  $T_{s1}$  (ou respectivement  $T_{s2}$ ) et la composition chimique des produits correspond à celle calculée auparavant, à cette même température.

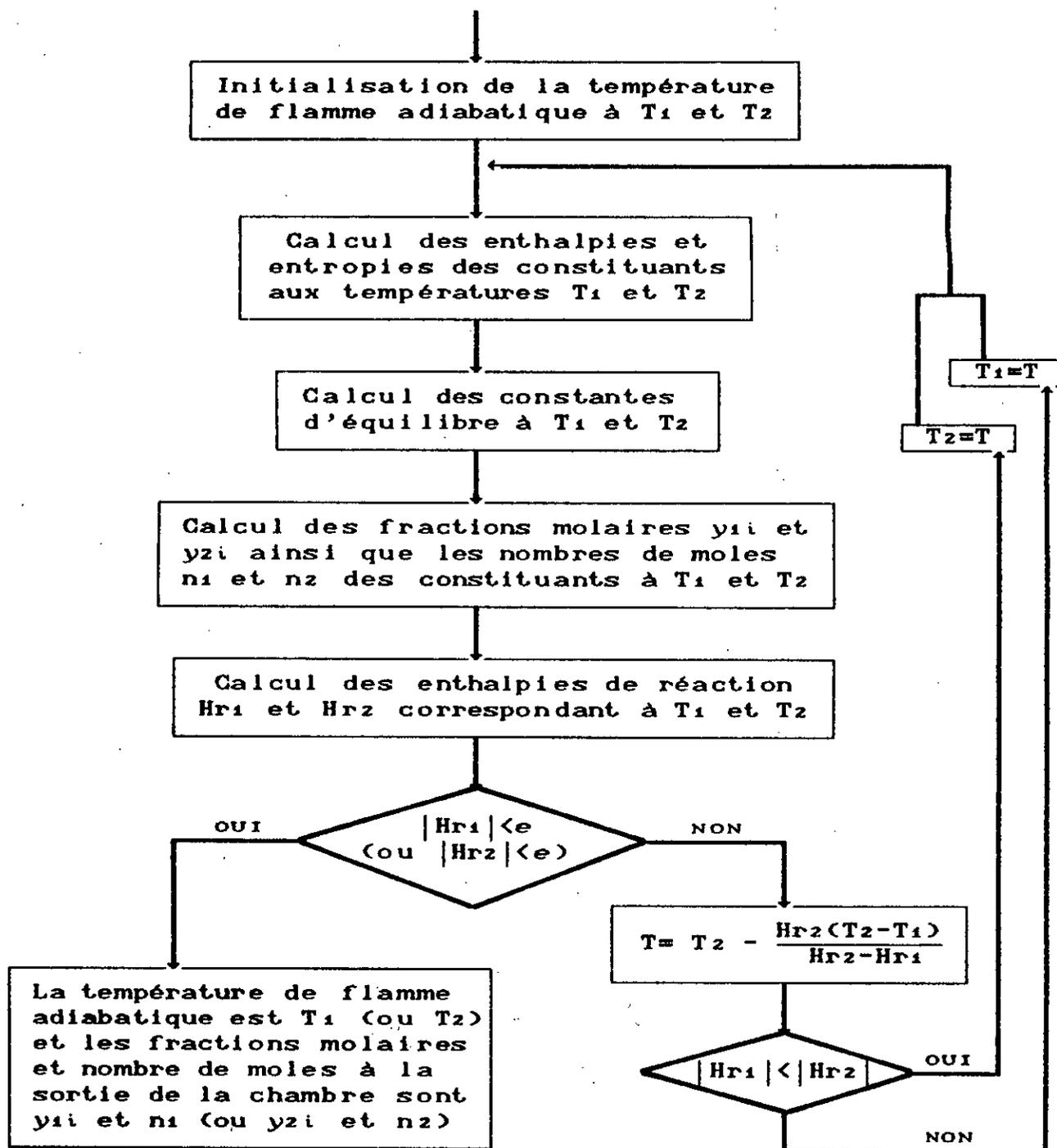
- Autrement la température correspondant à l'entropie la plus proche de  $S_c$  est maintenue alors que la seconde est révisée par interpolation et l'étape (11b) est réitérée.

12-Calcul de l'impulsion spécifique optimale :

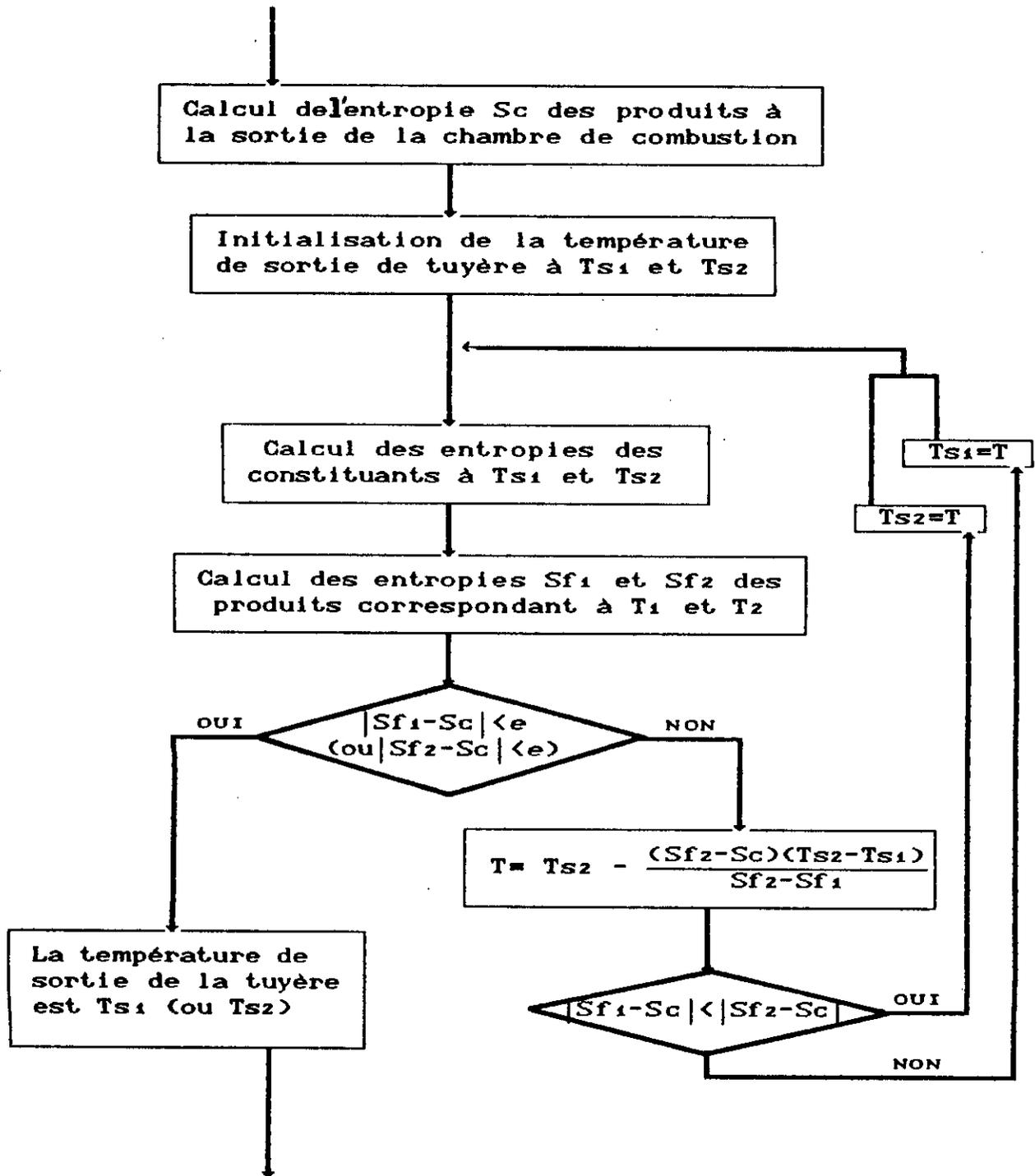
Après avoir calculé l'enthalpie des produits correspondant aux températures obtenues aux étapes 11a et 11b, l'impulsion spécifique optimale est évaluée dans les deux cas, en utilisant la relation (2.69).

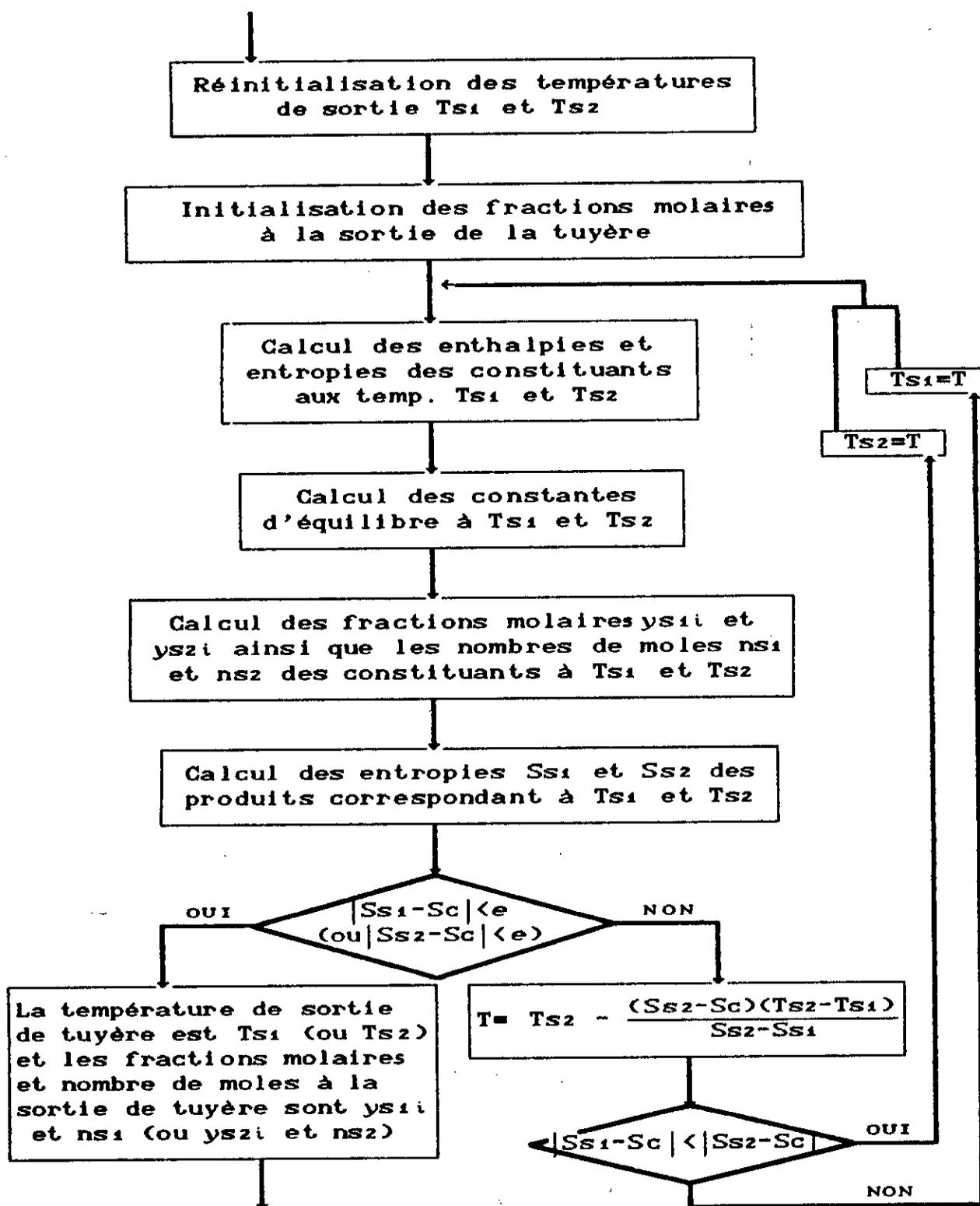
## 1.2/-ORGANIGRAMME DU PROGRAMME PRINCIPAL :

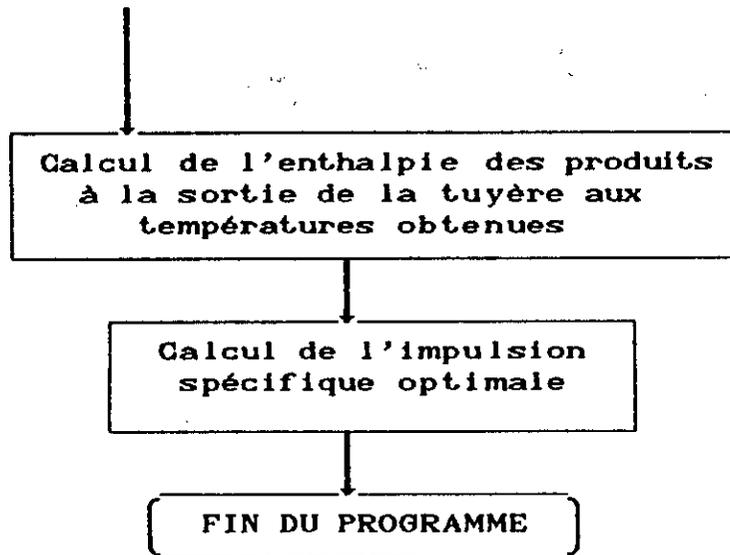




e : erreur tolérée.







## 2/-SOUS-PROGRAMME DE CALCUL DES FRACTIONS MOLAIRES :

Il est à noter que les données nécessaires à l'exécution du sous-programme de calcul des fractions molaires et nombre de moles que nous proposons, sont les suivantes :

- La matrice des coefficients du système;
- le nombre de moles de chaque élément;
- la matrice du système des réactions de référence;
- les constantes d'équilibre du système;
- la pression totale du système;
- une approximation des fractions molaires  $y_i$ .

L'approximation des fractions molaires correspond aux valeurs initialisées; alors que les autres données sont calculées avant l'appel de ce sous-programme, à l'exception de la matrice des coefficients et la pression totale du système, qui font partie des données du programme principal.

### 2.1/-ALGORITHME DE LA PREMIERE APPROCHE :

1-Dimensionnement des variables et affectation des données.

2-Calcul des pressions partielles  $P_i$ , en utilisant la relation (3.28).

3-Affectation des éléments des matrices  $[U_m]$  et  $[a_1]$ , définies respectivement par les relations (3.18) et (3.19).

4-Calcul des matrices  $[a_2]$  et  $[a_3]$ , en utilisant les relations (3.20) et (3.21).

5-Calcul de la matrice auxiliaire  $[a_4]$ , en utilisant la relation (3.22).

6-Détermination des erreurs  $\Delta \ln P_i$ , par la résolution du système auxiliaire (3.23) :

*Il s'agit d'un système d'équations linéaires qui peut être aisément résolu par l'une des méthodes directes que l'on retrouve dans les ouvrages classiques d'analyse numérique.*

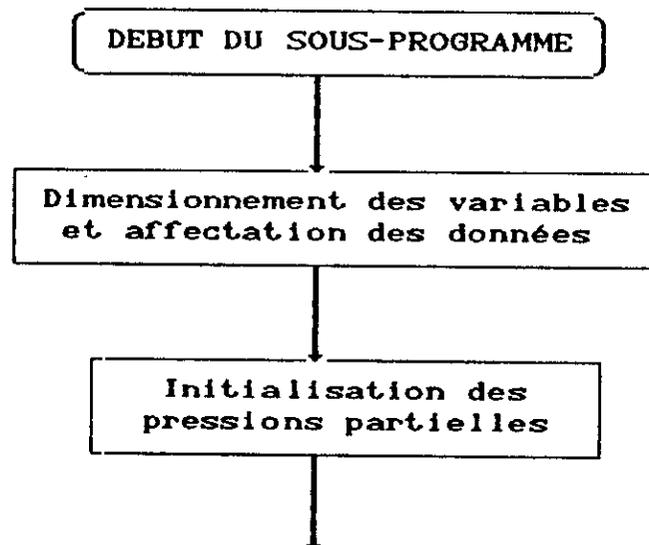
Suite aux diverse suggestions retrouvées dans les ouvrages spécialisés (entre autres, les références [2] et [9]), nous avons opté pour la méthode de Crout [réf.10]).

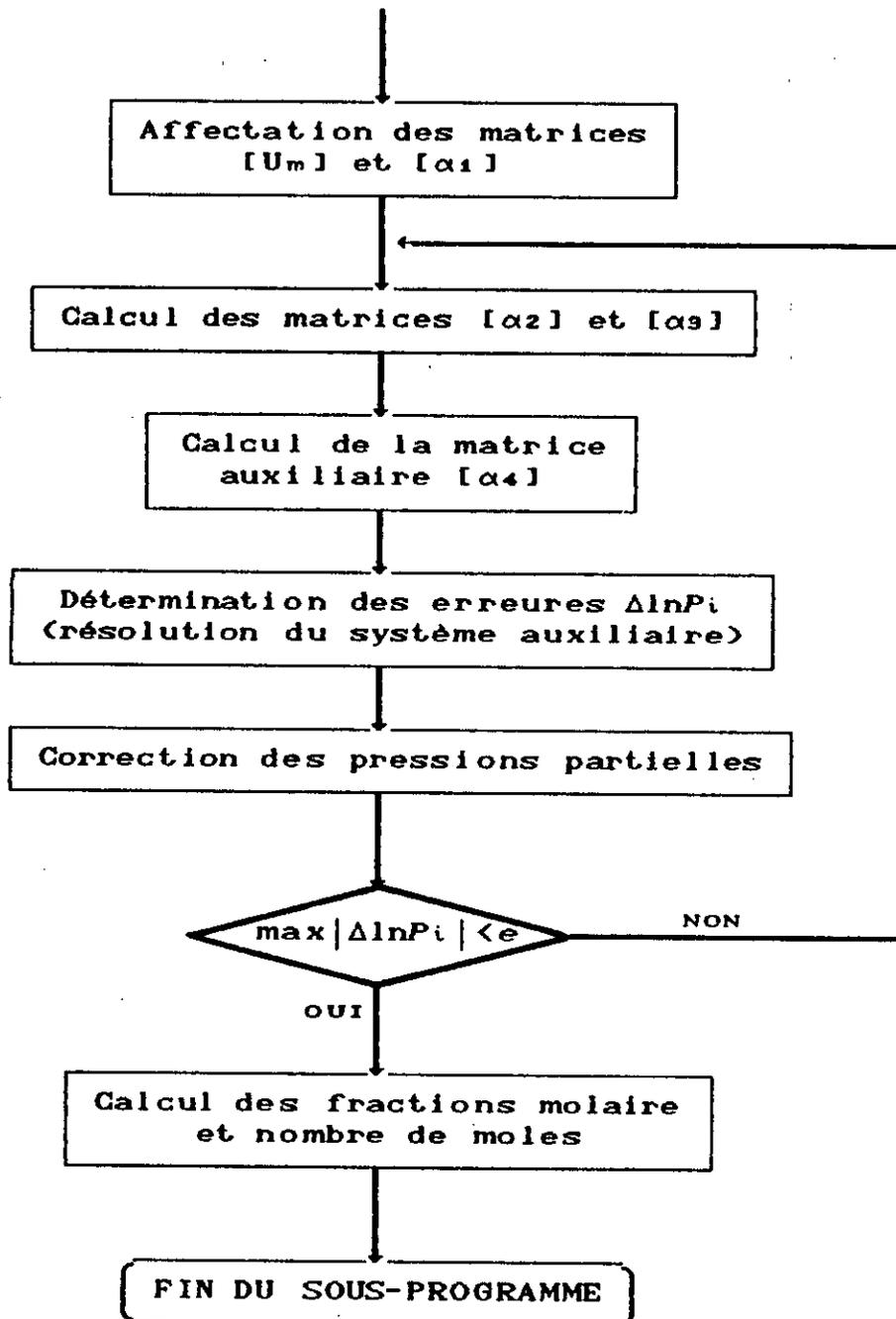
7-Correction des pressions partielles  $P_i$ , en utilisant les relations (3.24) et (3.26).

8-Si " $\max |\Delta \ln P_i| = 0$ ", à une erreure près, alors les pressions obtenues correspondent effectivement aux pressions partielles des constituants du système en équilibre. Les fractions molaires et le nombre de moles sont alors évalués par le biais des relations (3.27) et (3.9).

-Autrement, les étapes (4), (5), (6), (7) et (8) sont réitérées.

#-ORGANIGRAMME :





**2.3/-ALGORITHME DE LA DEUXIEME APPROCHE :**

1-Dimensionnement des variables et affectation des données.

2-Calcul du nombre de moles  $n' = \mathcal{F}_1(y_i)$ , en utilisant la relation (3.43).

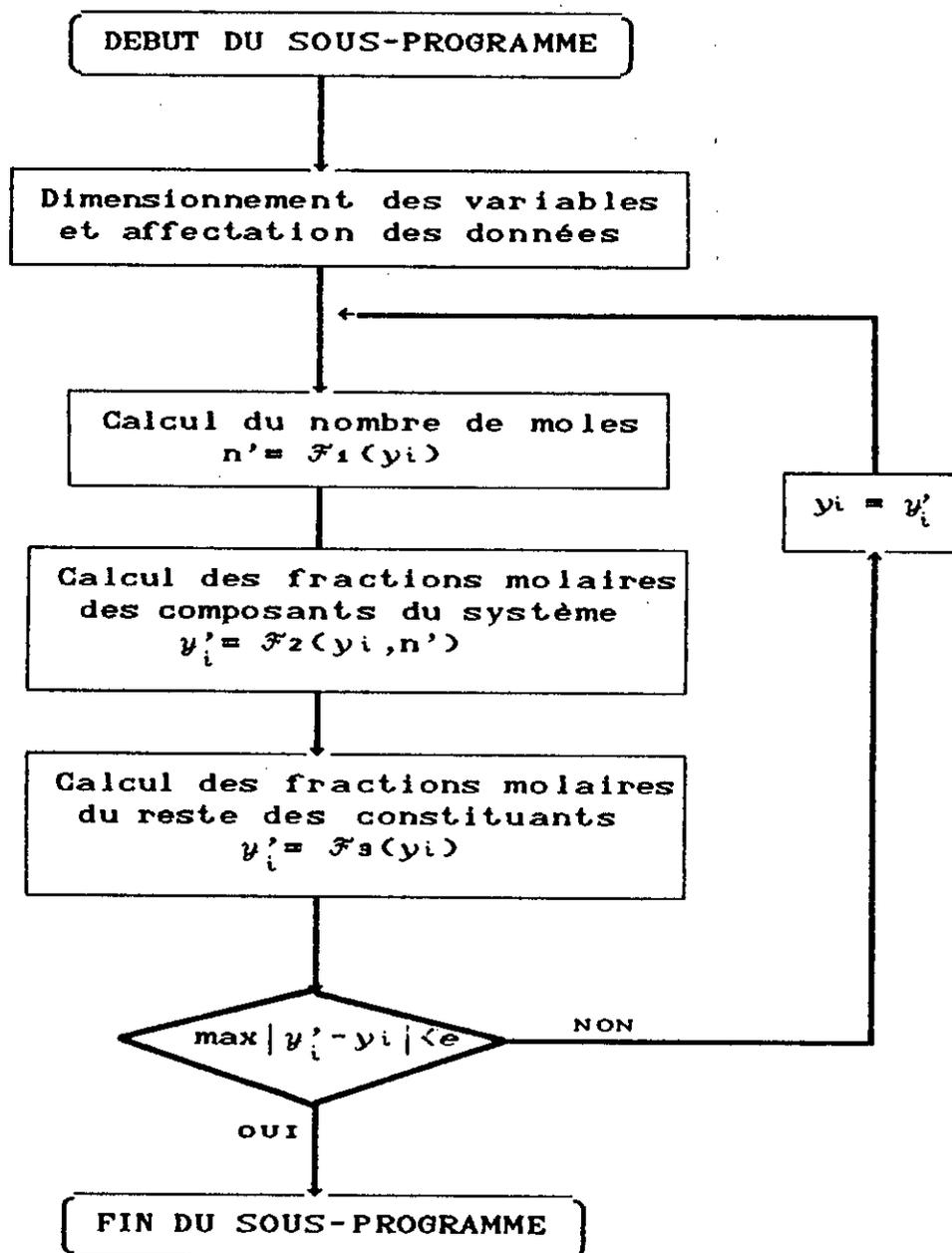
3-Calcul des fractions molaires  $y'_i = \mathcal{F}_2(y_i, n')$ , des constituants dominants (composants du système), par le biais des relations (3.40) et (3.41).

4-Calcul des fractions molaires  $y''_i = \mathcal{F}_3(y_i)$ , des constituants mineurs (non considérés comme composants du système), en utilisant la relation (3.43).

5-Si " $\max |y'_i - y_i| = 0$ " à une erreure près, alors les fractions molaires et nombre de moles du système correspondent à ceux obtenus.

-Autrement, les anciennes valeurs des fractions molaires  $y_i$ , sont remplacées par celles nouvellement obtenues, à savoir,  $y'_i$ ; et les étapes (2),(3),(4) et (5) sont réitérées.

## #-ORGANIGRAMME :



# ***RESULTATS :***

La présente partie constitue la dernière étape de notre étude, qui consiste, rappelons le, à valider la modélisation que nous venons de présenter et vérifier le bon fonctionnement de notre programme.

Nous exposons donc, dans ce qui suit, quelques résultats de l'étude comparative que nous avons entreprise. Cela, permettra, outre la vérification des résultats obtenus, de donner un aperçu des différentes possibilités qu'offre le programme que nous avons élaboré et présenté en annexe.

1/-REPRESENTATIONS GRAPHIQUES DES RESULTATS :

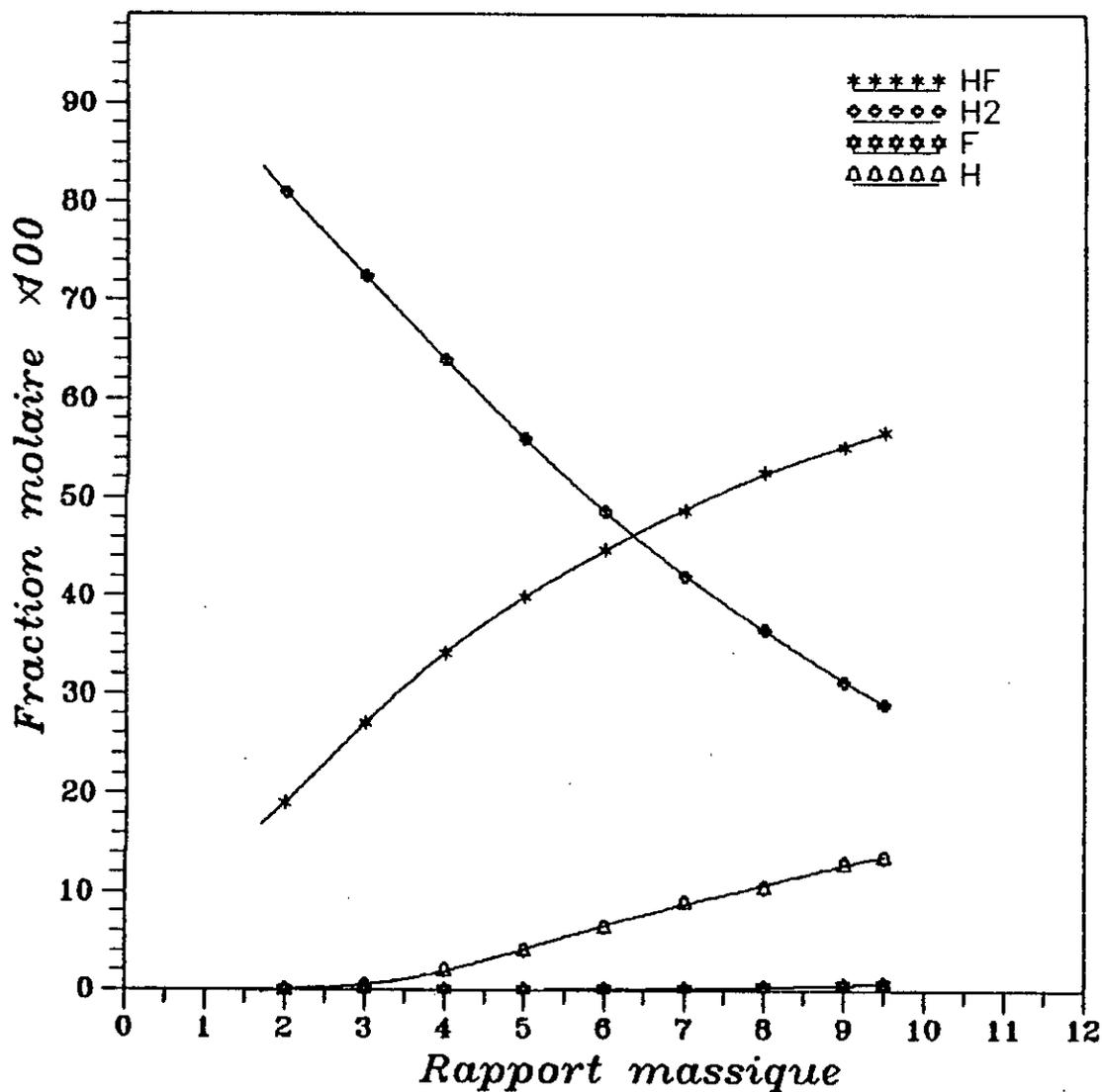


Fig.(1.1): Composition chimique des produits de combustion a la sortie de la chambre,du propulsant F<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>,en fonction du rapport massique oxidant/carburant,(Pc=500psi).

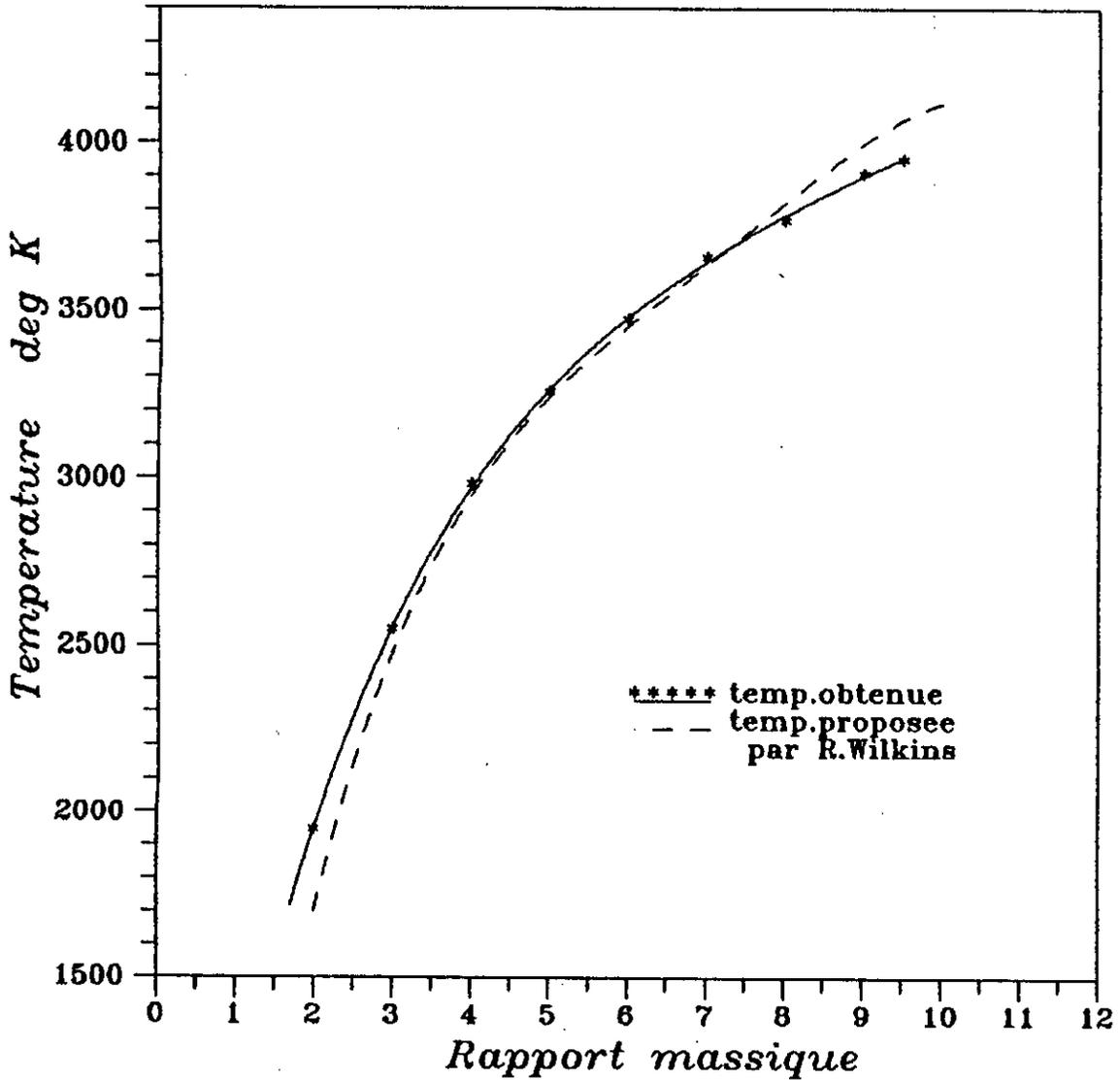


Fig.(1.2): Temperature de combustion du propulsant F2-H2 en fonction du rapport massique oxidant/carburant,(Pc=500psi).

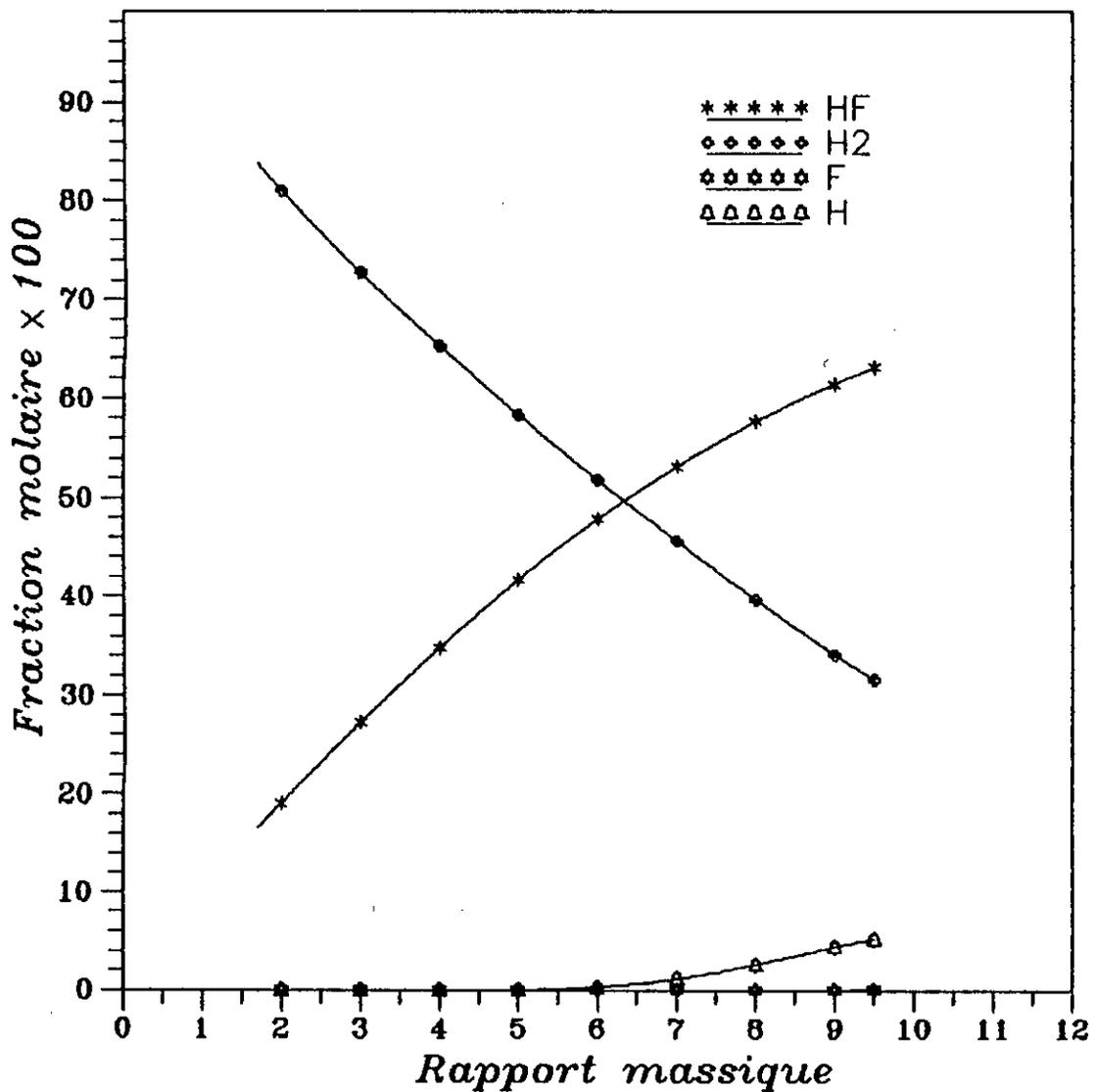


Fig.(1.3): Composition chimique des produits de combustion a la sortie de la tuyere, du propulsant F<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>, en fonction du rapport massique oxidant/carburant, (P<sub>c</sub>=500psi).

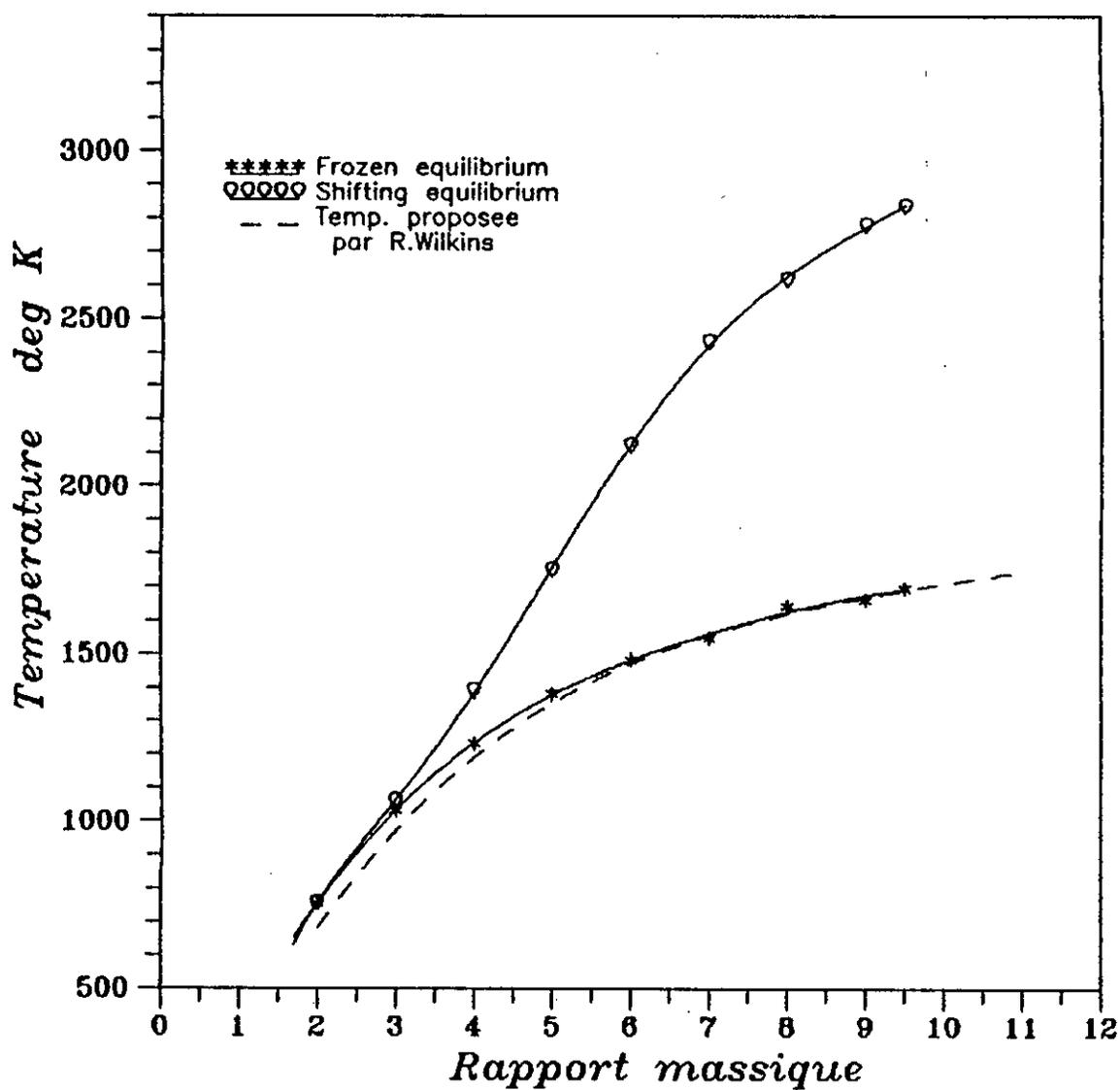


Fig.(1.4): Temperature de sortie de tuyere du propulsant F2-H2 en fonction du rapport massique oxidant/carburant,(Pc=500psi)

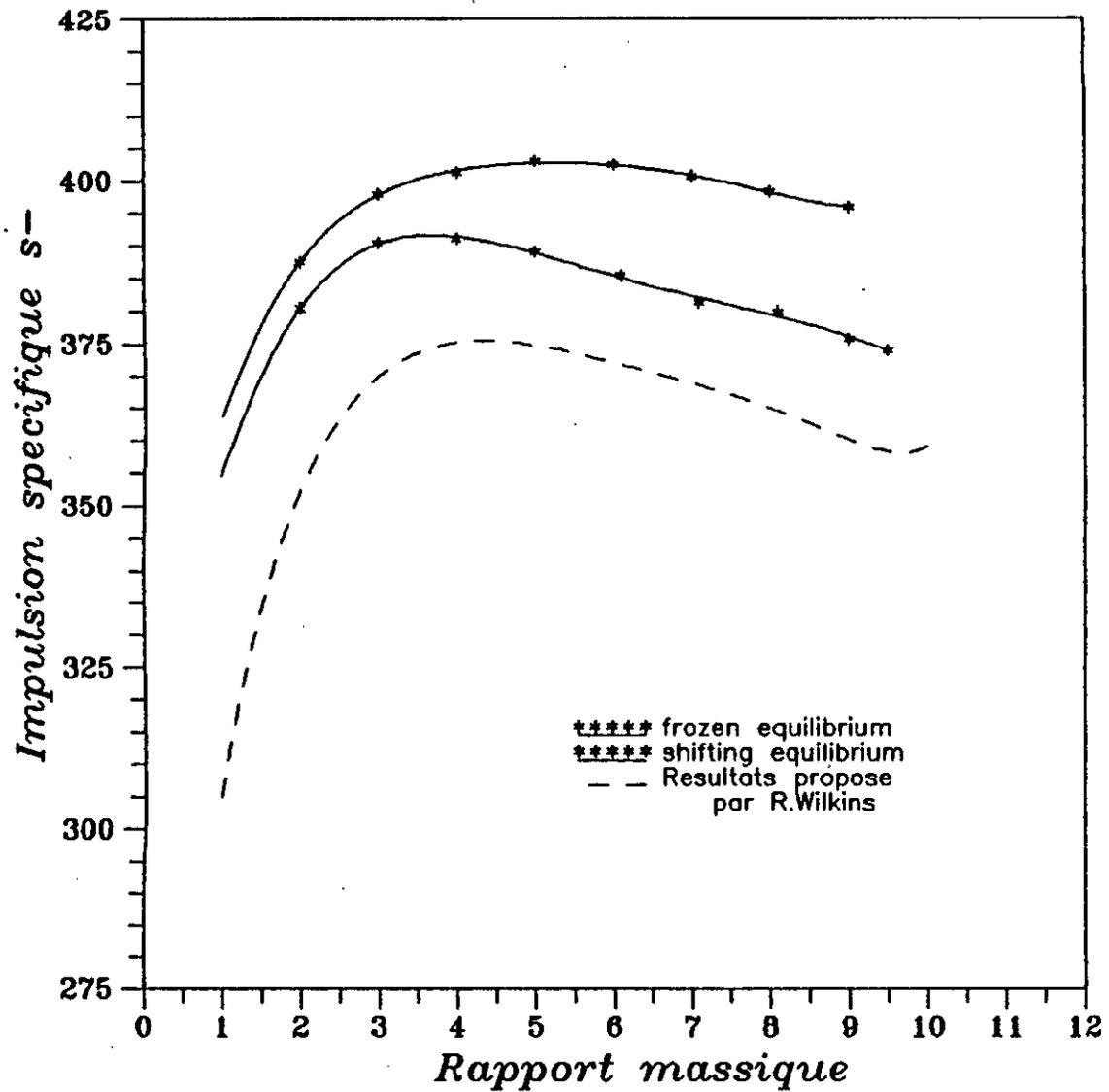


Fig.(1.5): Impulsion spécifique optimale du propulsant F2-H2, en fonction du rapport massique oxidant/carburant (Pc=500psi).

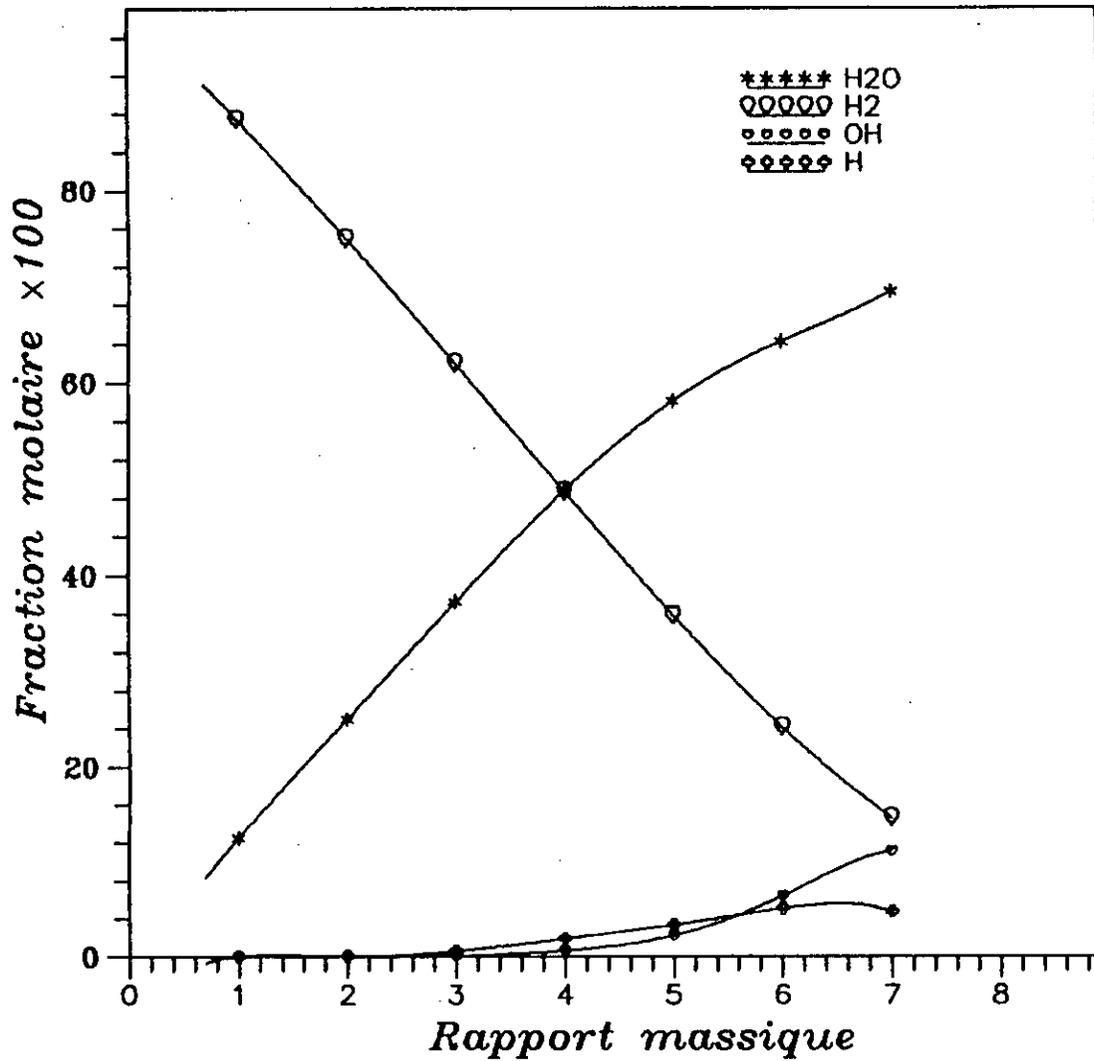


Fig. (2.1): Composition chimique des produits de combustion a la sortie de la chambre, du propulsant O<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>, en fonction du rapport massique oxidant/carburant, (P<sub>c</sub>=500psi).

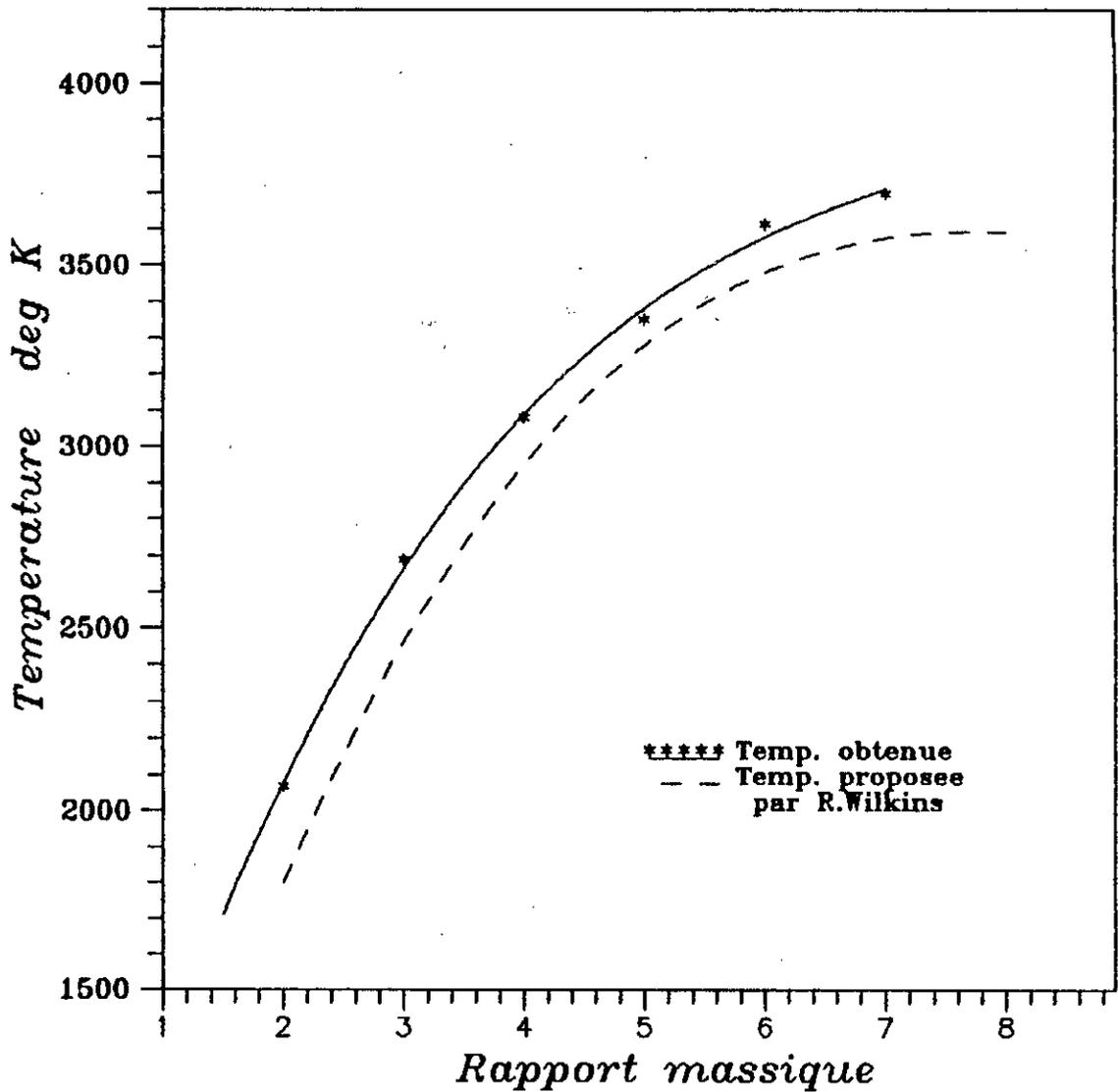


Fig.(2.2): Temperature de combustion du propulsant O<sub>2</sub>-H<sub>2</sub> en fonction du rapport massique oxidant/carburant (Pc=500psi).

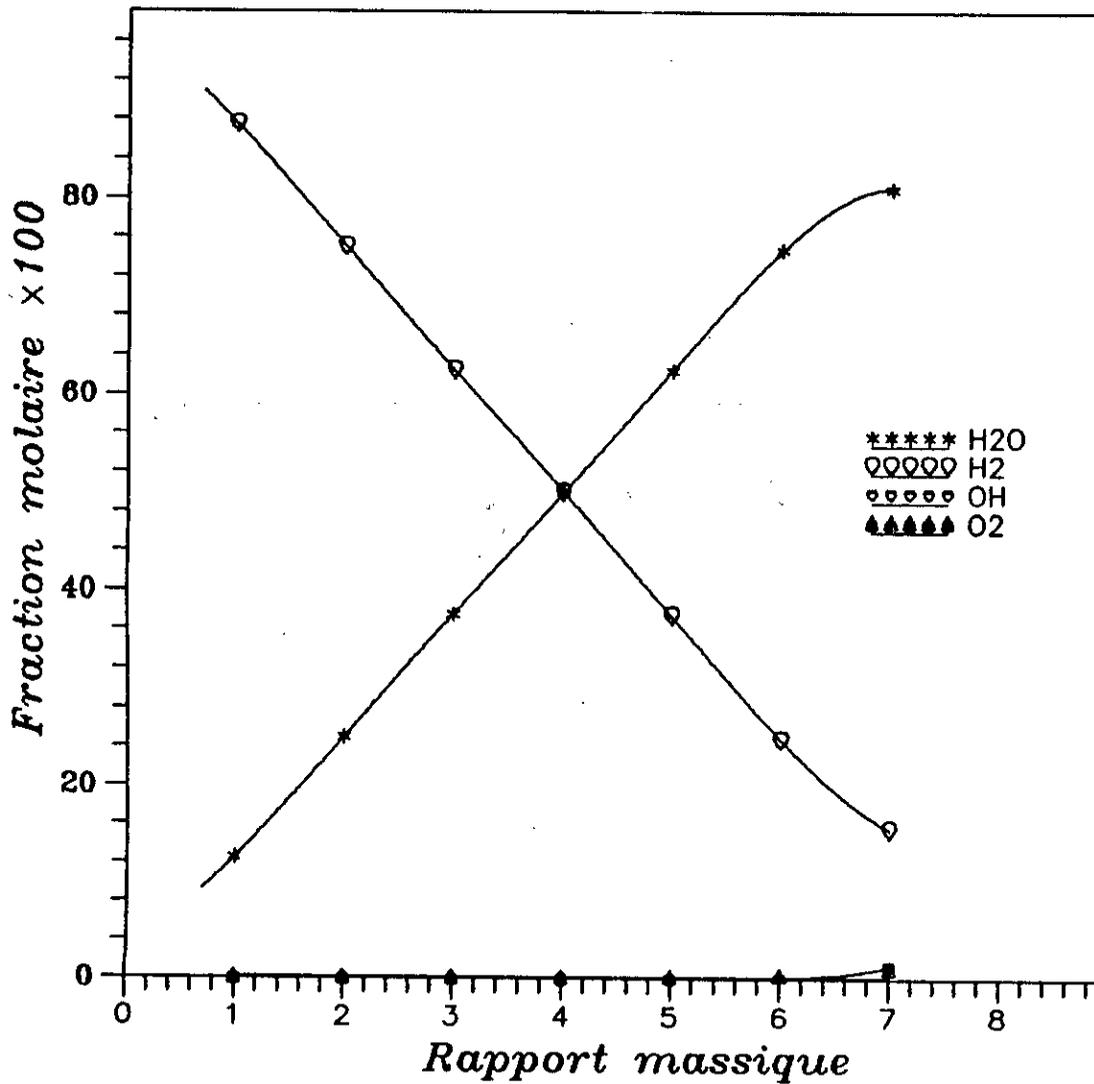


Fig. (2.3): Composition chimique des produits de combustion a la sortie de la tuyere, du propulsant O<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>, en fonction du rapport massique oxidant/carburant, (P<sub>c</sub>=500psi).

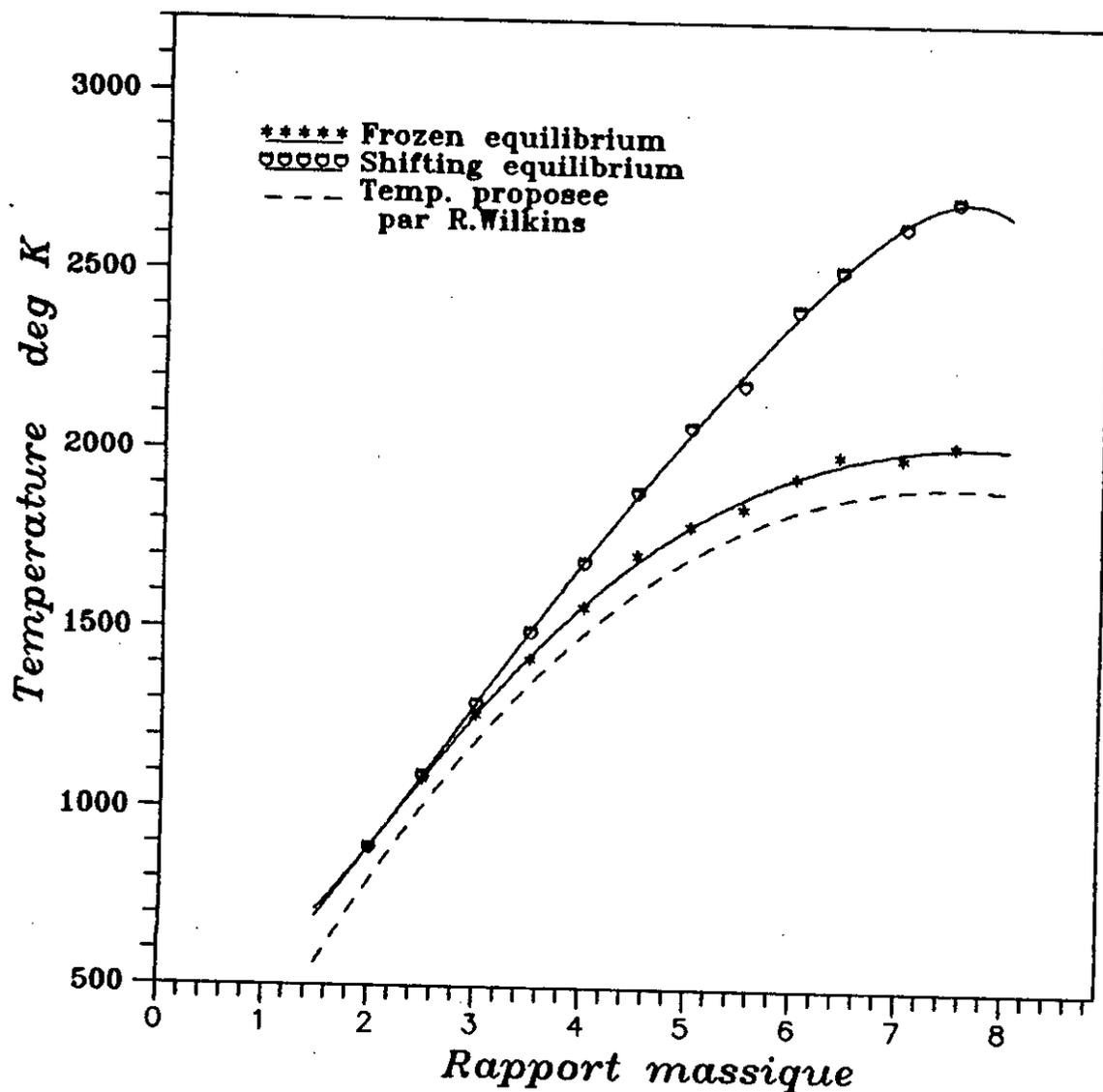


Fig.(2.4): Temperature de sortie de tuyere du propulsant O<sub>2</sub>-H<sub>2</sub> en fonction du rapport massique oxidant/carburant, (P<sub>c</sub>=500psi)

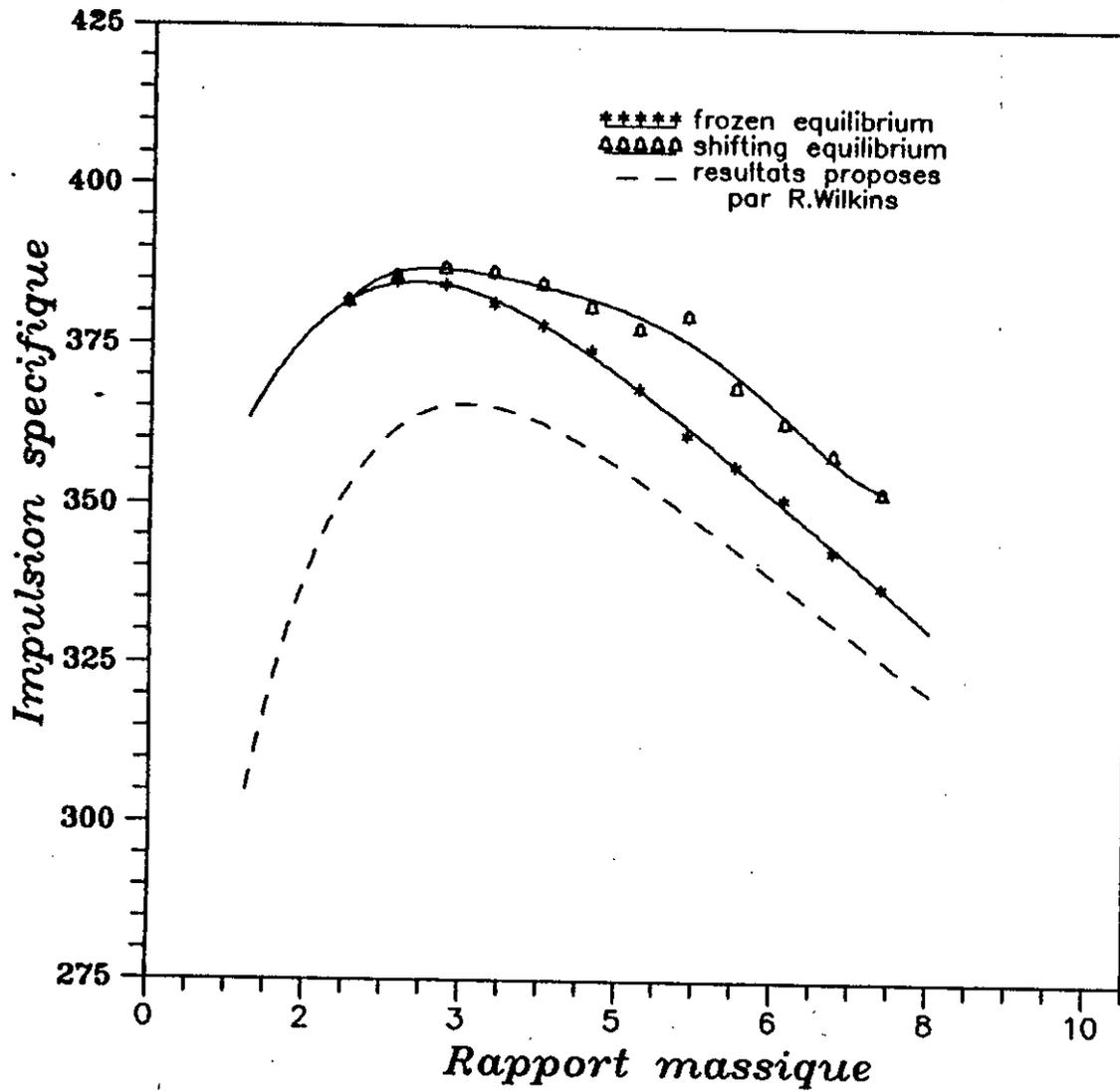


Fig.(2.5): Impulsion spécifique optimale du propulsant O<sub>2</sub>-F<sub>2</sub> en fonction du rapport massique oxidant/carburant (P<sub>c</sub>=500psi).

## RESULTATS ET COMMENTAIRES

#-Les résultats suivants ont été obtenus par interpolation polynomiale.

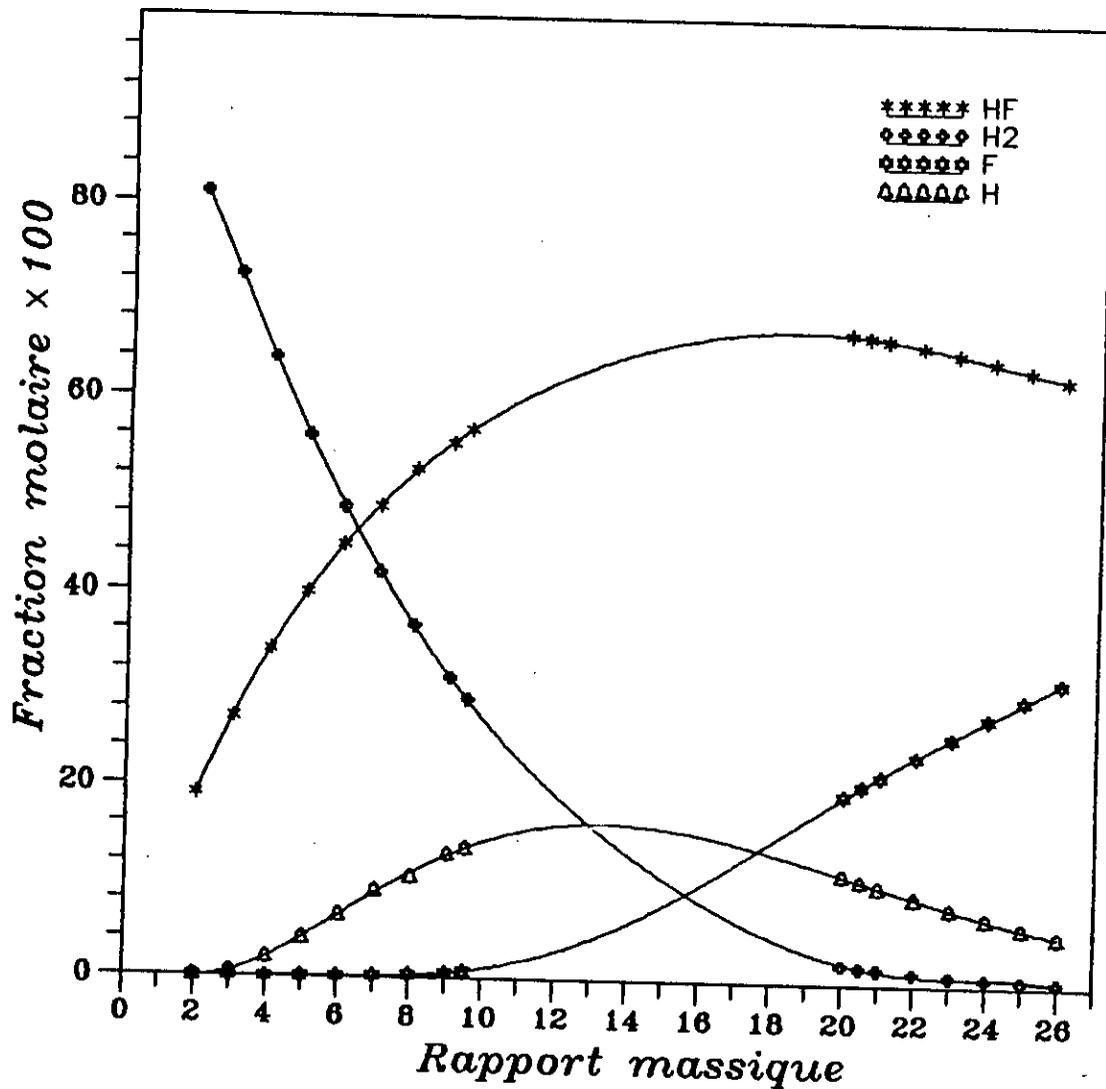


Fig.(3.1): Composition chimique des produits de combustion a la sortie de la chambre, du propulsant F<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>, en fonction du rapport massique oxidant/carburant, (P<sub>c</sub>=500psi).

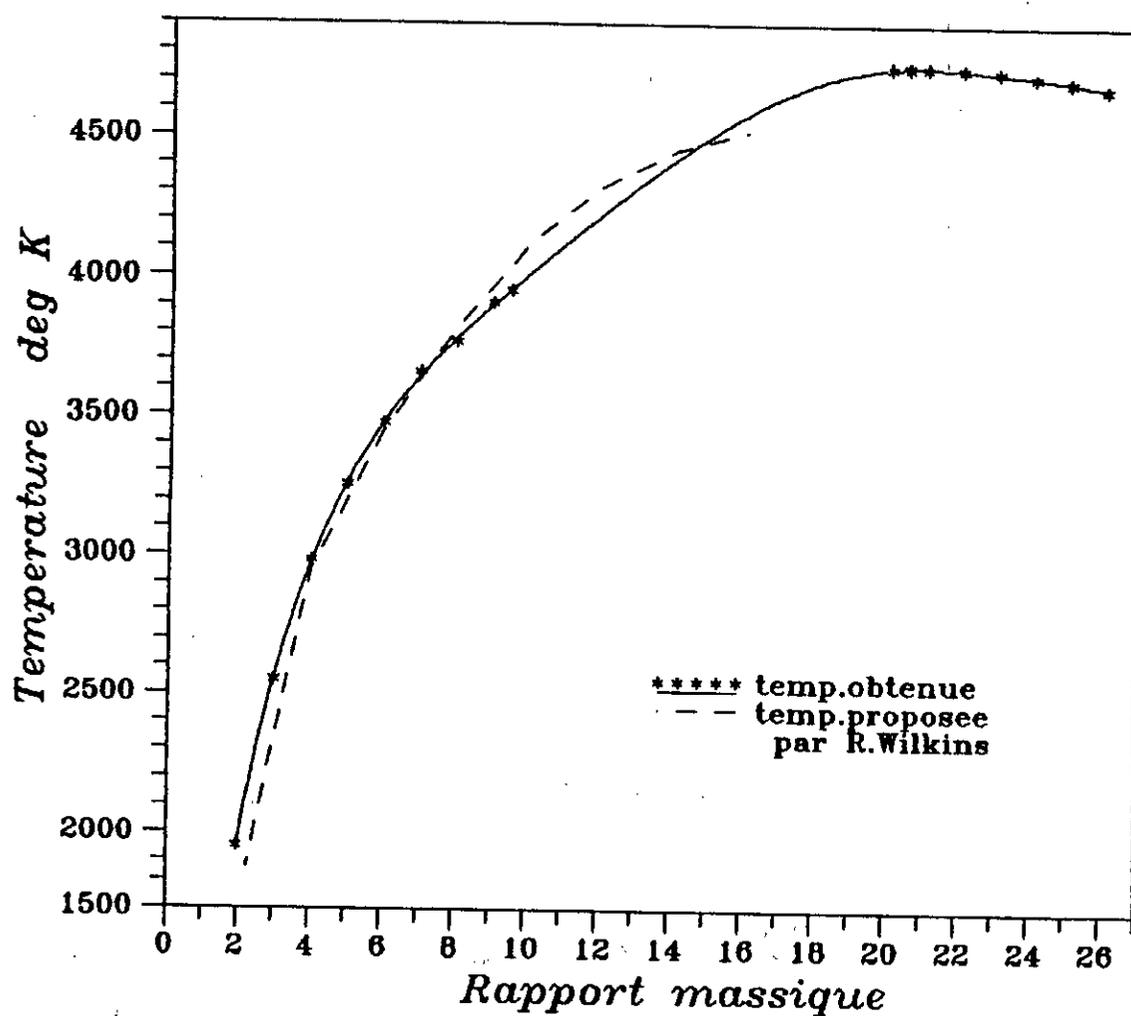


Fig.(3.2): Temperature de combustion du propulsant F2-H2 en fonction du rapport massique oxidant/carburant,(Pc=500psi).

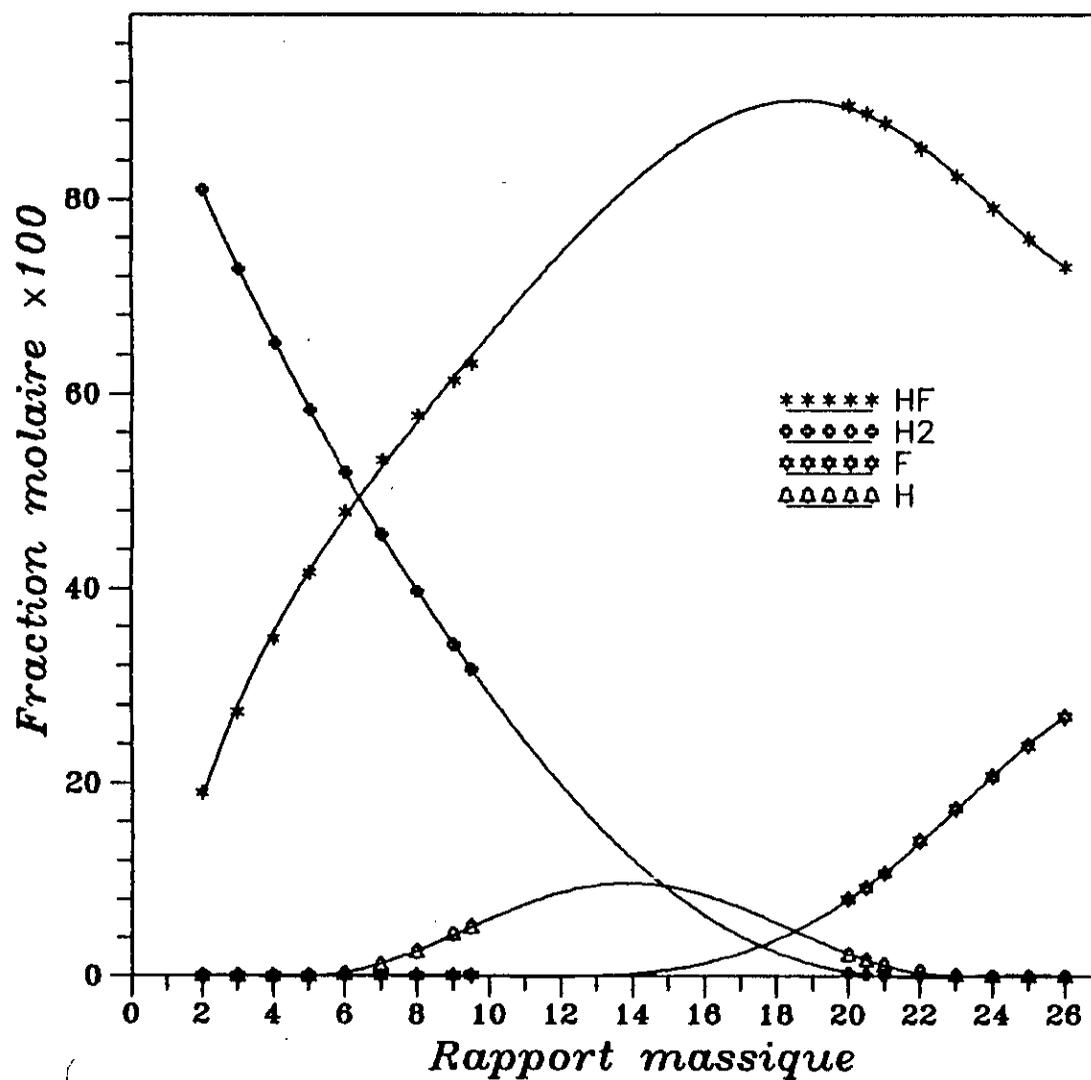


Fig. (3.3): Composition chimique des produits de combustion a la sortie de la tuyere, du propulsant F<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>, en fonction du rapport massique oxidant/carburant, (P<sub>c</sub>=500psi).

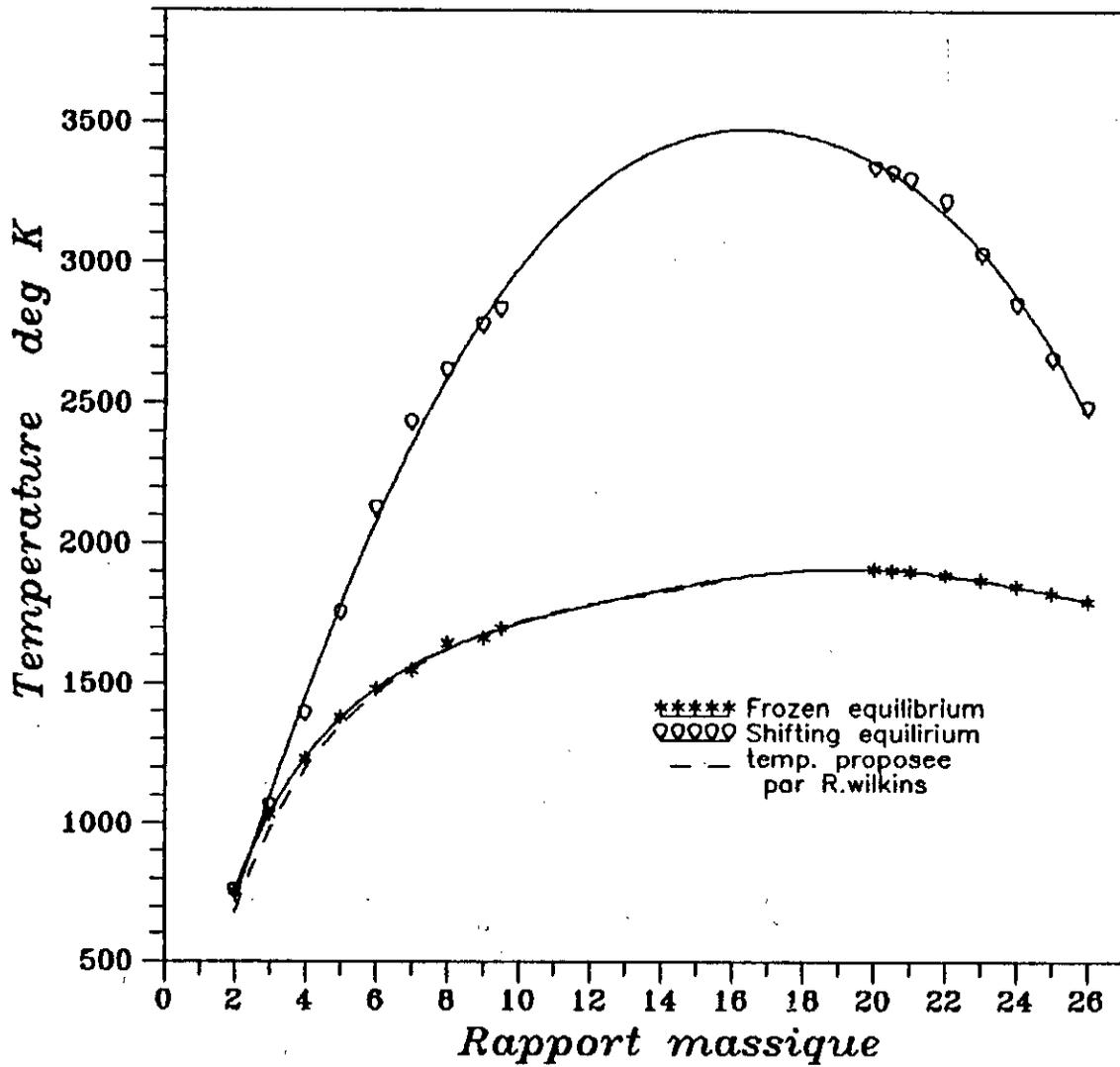


Fig.(3.4): Temperature de sortie de tuyere du propulsant F2-H2 en fonction du rapport massique oxidant/carburant,(Pc=500psi)

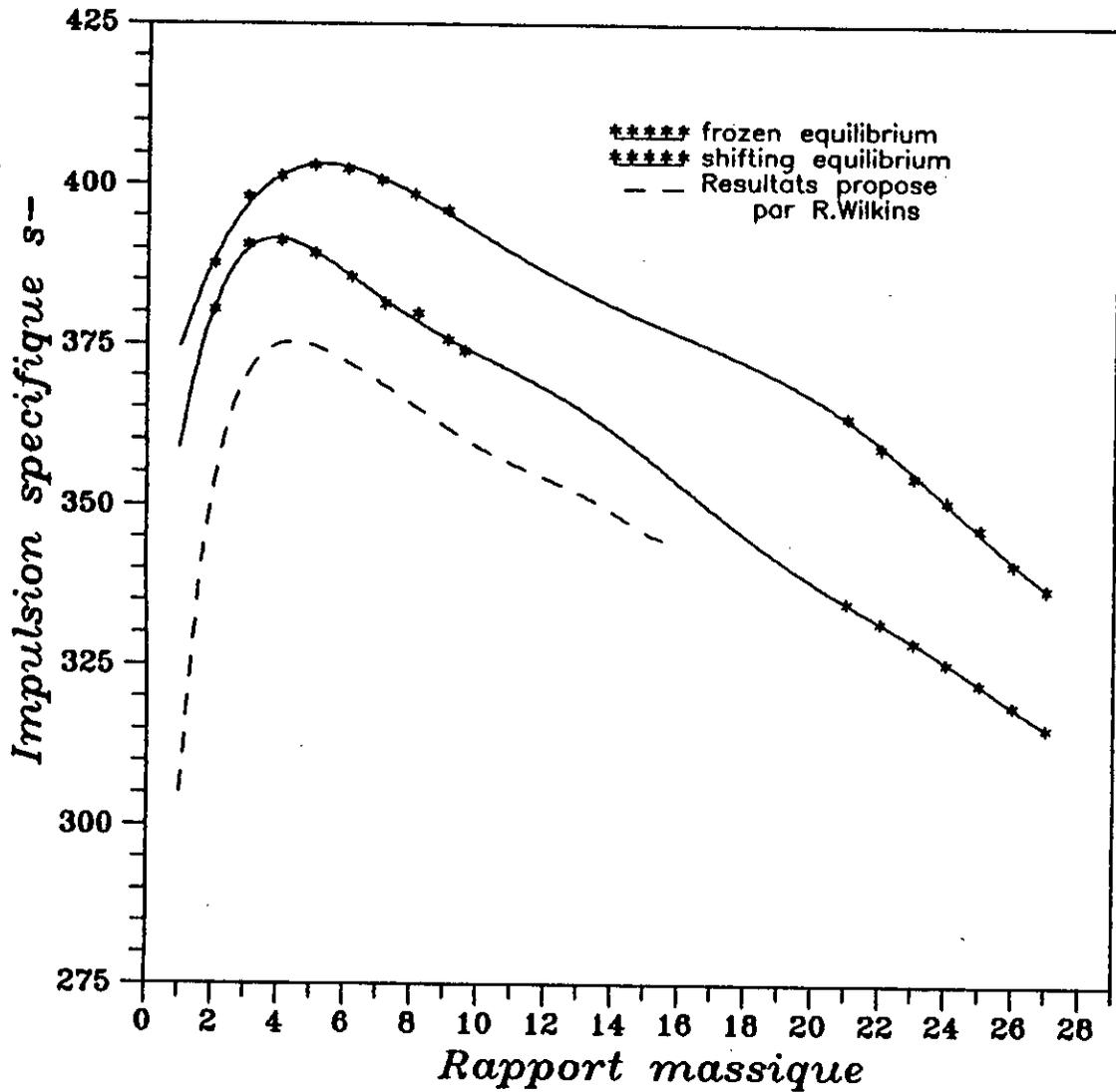


Fig.(3.5): Impulsion spécifique optimale du propulsant F2-H2, en fonction du rapport massique oxidant/carburant (Pc=500psi).

2/-INTERPRETATION DES RESULTATS :

Nous retrouvons, dans les dix (10) premières représentations graphiques, les performances des propulsants "F<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>" et "O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>", en fonction du rapport oxidant/carburant, évaluées à une pression de combustion P<sub>c</sub>=500psi.

Nous pouvons voir clairement que les propriétés à prévoir sont retrouvées sur la totalité des courbes obtenues. En effet, on remarque que les variations de la composition des produits ainsi que les températures obtenues sont tout à fait logiques.

On remarque également que les résultats obtenus sont très proches de ceux proposés par R. Wilkins [réf.2]. Une légère différence en excès est notée dans quelques cas. Celle-ci est due au fait que les constituants à très faible concentration n'ont pas été pris en considération. Aussi, la quantité de chaleur absorbée par ceux-ci n'est pas prise en compte, ce qui engendre une légère augmentation des températures.

Il est à noter, en outre, que le programme présenté dans cette étude permet de calculer, à n'importe quelles pressions, les performances thermodynamiques d'un quelconque propulsant chimique, de part et d'autre du rapport stoechiométrique. Cependant, les mélanges riches en oxidant ne sont pratiquement jamais utilisés dans les moteurs de fusées qui font l'objet de notre étude. Aussi, nous nous sommes limités dans les premières représentations, aux mélanges pauvres, caractérisés par un rapport oxidant/carburant inférieur au rapport stoechiométrique.

l'approximation, lors de l'initialisation des fractions molaires et températures et facilité ainsi, la convergence.

Toutefois, l'efficacité de cette technique reste limitée. Elle s'avère en effet, impraticable au voisinage très proche du rapport stoechiométrique. Nous proposons donc, pour une éventuelle étude de ce domaine, d'évaluer les performances par interpolation. Les graphes (3.1) à (3.5), présentés à titre d'exemple ont été obtenus par interpolation polynomiale d'ordre cinq (5) [réf.13].

#### 4/- COMPARAISON DES DEUX APPROCHES :

A défaut de convergence de l'une ou des deux approches proposées, celles ci aboutissent exactement aux mêmes résultats.

La première approche est beaucoup plus longue et nécessite un temps d'exécution plus important. Par ailleurs, elle fait intervenir la résolution du système d'équations linéaires à chaque itération. Aussi, les chances d'aboutir à une division par zéro sont plus importantes. Ce qui réduit les possibilités de convergence.

La deuxième approche quant à elle, offre une convergence plus rapide et il arrive parfois qu'elle aboutisse aux résultats recherchés, alors que la première bute sur une division par zéro.

## RESULTATS ET COMMENTAIRES

---

Néanmoins, la lenteur de convergence de la première méthode s'avère quelques fois être un avantage. En effet, dans le cas où le système de résolution diverge, celle-ci permet de repérer les variables divergentes et avoir ainsi une idée sur le choix des composants du système et une approche plus précise des variables à initialiser.

***CONCLUSIONS :***

---

## CONCLUSION

---

A l'issue de notre étude, qui consistait en l'élaboration d'un outil de calcul des performances de propulsants chimiques pour moteurs de fusées, nous estimons avoir atteint notre objectif. En effet, le présent travail, bien que modeste, a permis de présenter d'une manière assez détaillée, un modèle mathématique décrivant l'évolution de la combustion des propulsants chimiques et leur détente le long de la tuyère, ainsi qu'une méthode de résolution appropriée, pour aboutir en définitif, à un programme de résolution. Ce dernier permet d'évaluer la composition chimique des produits de combustion, les températures à l'intérieur de la chambre de combustion et à la sortie de la tuyère ainsi que l'impulsion spécifique optimale du propulsant utilisé.

Cette étude pourrait donc servir de base à une éventuelle étude qui aura pour objectif, l'étude des performances de propulsants chimiques ainsi que toute étude se rapportant à une évolution de combustion à pression constante (l'étude des chaudières, des chambres à combustion de réacteurs...).

En outre, il serait souhaitable de développer le programme élaboré, en collaboration avec le département de génie chimique, par une étude qui consistera à déterminer la nature des constituants en équilibre en fonction du propulsant utilisé. Cela permettrait en effet une certaine autonomie du programme.

# ***BIBLIOGRAPHIE :***

---

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [1] T.O. DOBINS - Thermodynamics of rockets propulsion and theoretical evaluation of some prototype propellant combinations.  
Project 3148,TR59-757,Wright Air Development Center,1959.
  
- [2] ROGER LAWRENCE WILKINS - Theoretical evaluation of chemical propellants.  
Prontice-Hall,1963.
  
- [3] ZUCROW - Aircraft and missile propulsion,tome 2.
  
- [4] R. OUAHES, B. DEVALLEZ - Chimie générale.  
Quatrième édition: O.P.U.-PPUBLISUD,1988.
  
- [5] G.J. VAN WYLEN, R.E. SONNTAG, P. DESROCHERS -  
Thermodynamique appliquée.  
Editions du Renouveau Pédagogique,1981.
  
- [6] EMILE ESPOSITO - Température et composition des gaz  
brulés.
  
- [7] M. OLSON - Essentials of engineering fluid mechanics.  
Third edition: International Textbook company,1973.
  
- [8] Mc. NAUGHTON, Mc. GRAW HILL -  
The chemical engeneering guide.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [9] GEORGE P. SUTTON - Rocket propulsion elements,  
an introduction to the engineering of rockets.  
Third edition: John Wiley & Sons,1965.
- [10] A. GOURDIN, M.BOUMAHRAT - Méthodes numériques appliquées.  
Second édition: O.P.U.
- [11] JEAN VIGNES - Algorithmes numériques,analyse et mise en  
oeuvre.  
Tome 1 : Arithmétique des ordinateurs.Système linéaires.  
Tome 2 : Equations et système non linéaires.  
Editions TECHNIP,1980.
- [12] ORTEGA - Iterative solution of nonlinear equations in  
several variables.  
Academic Press,1970.
- [13] S.DERRADJI - Analyse numérique.  
O.P.U.,1990.
- [14] FIGINI, LUMROSO, DEPEZAY - Thermodynamique & équilibres  
chimiques.  
Editions Hermann.