

# **Combustion et concepts numériques**

Septembre 2023-24

Cours de 4<sup>ème</sup> Année  
Maîtrise des Risques Industriels  
Enseignement d'Approfondissement Génie des Procédés

**Isabelle SOCHET**

# Sommaire

<b>Première partie : Cours.....</b>	<b>3</b>
Chapitre 1 : Transfert de masse.....	4
Chapitre 2 : Rappels de thermodynamique .....	13
Chapitre 3 : Considérations numériques générales .....	19
Chapitre 4 : Equations de conservation.....	22
Chapitre 5 : Processus physiques et schémas numériques .....	29
Chapitre 6 : Couplage des processus physiques dans les écoulements réactifs .....	35
<b>Deuxième partie : Applications.....</b>	<b>39</b>
Application 1 : Transfert de masse.....	40
Application 2 : Rappels de thermodynamique – Ecoulement à réacteur piston.....	42
Application 3 : Equations de conservation – Le problème de Stefan .....	44
Application 4 : Equations de conservation – Formulation de Shvab-Zeldovich dans les problèmes de couche limite .....	46
Application 5 : Equations de conservation – Déflagration en phase gazeuse .....	47
<b>Troisième partie : Annexes .....</b>	<b>50</b>

# **Première partie**

## **Cours**

# Chapitre 1 : Transfert de masse

## 1. Transfert de chaleur et loi de Fourier

La loi de Fourier lie la vitesse de transfert de chaleur (i.e. flux d'énergie) via la conduction au gradient de température dans un milieu. Cette loi a la forme suivante :

$$q^{\bullet} = -\lambda \cdot \frac{dT}{dy} = -\alpha_T \cdot \rho \cdot c_p \frac{dT}{dy} \quad (0.1)$$

où  $q^{\bullet}$  est le flux de chaleur par unité de surface ( $\text{W.m}^{-2}$ ),  $\lambda$  est la conductivité du milieu ( $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ),  $\alpha_T$ , la diffusivité thermique ( $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ ),  $\rho$  la densité et  $c_p$  la chaleur spécifique à pression constante.

De façon similaire, si un écoulement de fluide froid  $T_{cf}$  (K) se produit sur une surface chaude maintenue à une température  $T_w$  (K), le transfert de chaleur via la convection par unité de surface est définie par :

$$q^{\bullet} = h_H (T_w - T_{cf}) \quad (0.2)$$

avec  $h_H$  le coefficient de transfert de chaleur par convection ( $\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ ).

## 2. Transfert de masse et loi de Fick

### 2.1 Loi de Fick

La loi de Fick est une règle de transfert de masse similaire à la loi de Fourier. Elle a la forme suivante :

$$j_k^{\bullet} = -\rho \times D_{k\ell} \times \frac{dY_k}{dy} \quad (1.1)$$

où  $j_k^{\bullet}$  représente la vitesse de transfert de masse des espèces k par unité de surface ( $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ),  $Y_k$  la fraction massique des espèces k,  $D_{k\ell}$  le coefficient de diffusion binaire des espèces k dans les espèces  $\ell$  ( $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ ), et  $\rho$  la masse volumique du mélange à travers des espèces diffusantes.

Cette relation peut encore s'exprimer en termes de diffusion molaire :

$$N_{k,diff}^{\bullet} = -c \times D_{k\ell} \times \frac{dX_k}{dy} \quad (1.2)$$

où  $N_{k,diff}^{\bullet}$  représente flux molaire des espèces k par unité de surface ( $\text{mol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ),  $X_k$  la fraction molaire des espèces k,  $D_{k\ell}$  le coefficient de diffusion binaire des espèces k dans les espèces  $\ell$ , et c la concentration molaire du mélange à travers des espèces diffusantes.

## 2.2 Définitions

### 2.2.1 Concentration massique

La concentration massique  $\rho_k$  des espèces  $k$  représente la masse des espèces par unité de volume du mélange, c'est la masse volumique des espèces (*density* en anglais). Pour un gaz parfait :

$$\rho_k = \frac{p_k}{R_k \times T} \text{ en kg espèces } k / \text{m}^3 \text{ où } R_k = \frac{\bar{R}}{Mw_k} \text{ et } \bar{R} = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \quad (1.3)$$

où  $p_k$  désigne la pression partielle des espèces  $k$  dans le mélange.

### 2.2.2 Concentration molaire

La concentration molaire  $c_k$  des espèces  $k$  représente le nombre de moles des espèces par unité de volume du mélange :

$$c_k = \frac{\rho_k}{Mw_k} \text{ en kmol espèces } k / \text{m}^3 \quad (1.4)$$

et pour un gaz parfait :

$$c_k = \frac{p_k}{R \times T} \quad (1.5)$$

### 2.2.3 Fraction molaire

La fraction molaire est définie en termes de concentration molaire par :

$$X_k = \frac{c_k}{c} \text{ où } c = \sum c_k \quad (1.6)$$

où  $c$  est la densité molaire.

Pour un gaz parfait, la fraction molaire s'écrit :

$$X_k = \frac{p_k}{P} \text{ où } c = \frac{P}{R \times T} \quad (1.7)$$

### 2.2.4 Fraction massique

La fraction massique est définie par le rapport de la masse des espèces  $k$  par la masse totale  $m$  dans un volume élémentaire contenant le mélange, soit :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} = \frac{\rho_k}{\rho} = \frac{c_k \times Mw_k}{\sum c_k \times Mw_k} \quad (1.8)$$

et en divisant le numérateur et dénominateur par  $c$ , il en découle :

$$Y_k = \frac{X_k \times Mw_k}{Mw_{\text{mél}}} \text{ où } Mw_{\text{mél}} = \sum X_k \times Mw_k \quad (1.9)$$

avec  $Mw_{\text{mél}}$ , la masse molaire du mélange.

De façon analogue, la fraction molaire peut s'écrire :

$$X_k = \frac{Y_k / Mw_k}{1 / Mw_{\text{mél}}} \quad (1.10)$$

## 2.2.5 Masse volumique d'un mélange

Pour un gaz parfait :

$$\rho = \frac{P}{R \times T} \text{ et } R = \frac{\bar{R}}{Mw_{\text{mél}}} \quad (1.11)$$

Il vient à partir de l'équation (1.6) et (1.7) :

$$\sum X_k = \frac{\sum p_k}{P} = \frac{P}{P} = 1 \quad (1.12)$$

$$\text{et } \sum Y_k = \frac{\sum \rho_k}{\rho} = \frac{\rho}{\rho} = 1 \quad (1.13)$$

puisque la masse volumique du mélange (dite encore « densité » massique, ou « densité » du mélange) est telle que :

$$\rho = \sum \rho_k \quad (1.14)$$

## 2.2.6 Vitesse de Stefan

Chaque espèce dans un mélange multi-composant se déplace avec sa propre vitesse appelée vitesse absolue  $v_k$ .

La vitesse moyenne massique  $v$ , dite aussi vitesse de Stefan, à chaque section d'un écoulement est défini par :

$$\rho \times v = \sum \rho_k \times v_k \text{ ou } v = \frac{\sum \rho_k \times v_k}{\rho} = \sum Y_k \times v_k \quad (1.15)$$

la vitesse  $v_k$  peut être positive ou négative.

Une vitesse moyenne molaire peut être définie de manière analogue :

$$\bar{v} = \sum X_k \times v_k \quad (1.16)$$

cette vitesse est différente de la vitesse moyenne massique.

La vitesse  $v_k$  est une vitesse absolue des espèces  $k$  par rapport à un observateur fixe. La vitesse moyenne massique  $v$  est la vitesse qui est mesurée en utilisant un tube de Pitot ou un anémomètre à fil chaud. La vitesse moyenne massique  $v$  peut également être obtenue à partir des équations de conservation.

La différence entre la vitesse absolue,  $v_k$ , des espèces  $k$  et la vitesse moyenne massique  $v$  est la vitesse de diffusion massique :

$$V_k = v_k - v \text{ soit } v_k = V_k + v \quad (1.17)$$

de façon similaire, la vitesse de diffusion molaire est donnée par :

$$\bar{V}_k = v_k - \bar{v} \text{ soit } v_k = \bar{V}_k + \bar{v} \quad (1.18)$$

La plupart des équations de conservation sont formulées en utilisant la vitesse moyenne massique. La vitesse de diffusion peut être déterminée en utilisant les relations impliquant les gradients massiques. Considérant uniquement le transport de diffusion massique des espèces  $k$  :

$$\dot{j}_k'' = \rho_k \times V_k = \rho_k \times (v_k - v) \quad (1.19)$$

En utilisant la loi de Fick (1.1) :  $\dot{j}_k'' = -\rho \cdot D_{k\ell} \frac{dY_k}{dy}$  dans l'équation (1.19) :

$$V_k = \frac{\dot{j}_k''}{\rho_k} = -D_{k\ell} \times \left( \frac{1}{Y_k} \right) \times \left( \frac{dY_k}{dy} \right) = -D_{k\ell} \times \left( \frac{d \ln Y_k}{dy} \right) \quad (1.20)$$

$V_k > 0$  si  $Y_k$  diminue avec l'accroissement de  $y$  et  $V_k < 0$  si  $Y_k$  augmente avec l'accroissement de  $y$ . Pour un problème 3-D, la loi de Fick est généralisée par :

$$\nabla Y_k = -\frac{V_k \times Y_k}{D_{k\ell}} \quad (1.21)$$

Plus généralement, dans le cas de plusieurs constituants, la relation est donnée par :

$$\nabla Y_k = -\sum_{\ell} \frac{(V_k \times V_{\ell}) \times Y_k \times Y_{\ell}}{D_{k\ell}} \quad (1.22)$$

Le débit massique de l'écoulement des espèces  $k$  est donné par :

$$m_k^{\bullet} = \rho_k \times v_k = \rho_k \times (v + V_k)$$

$m_k^{\bullet}$  = débit massique de  $k$  dans l'écoulement d'ensemble + diffusion de  $k$  dans l'écoulement

$$m_k^{\bullet} = \rho_k \times \left[ v - D_{k\ell} \times \frac{d(\ln Y_k)}{dy} \right] \quad (1.23)$$

Le rapport entre le débit massique des espèces  $k$ ,  $m_k^{\bullet}$ , au débit massique total de l'écoulement  $m^{\bullet}$  est appelé rapport de flux des espèces  $\varepsilon_k$  :

$$\varepsilon_k = \frac{m_k^{\bullet}}{m^{\bullet}} = \frac{\rho_k \times v_k}{\rho \times v} = \frac{\rho_k \times (v + V_k)}{\rho \times v} = Y_k - \frac{D}{v} \times \frac{dY_k}{dy} \quad (1.24)$$

### 3. Théorie moléculaire

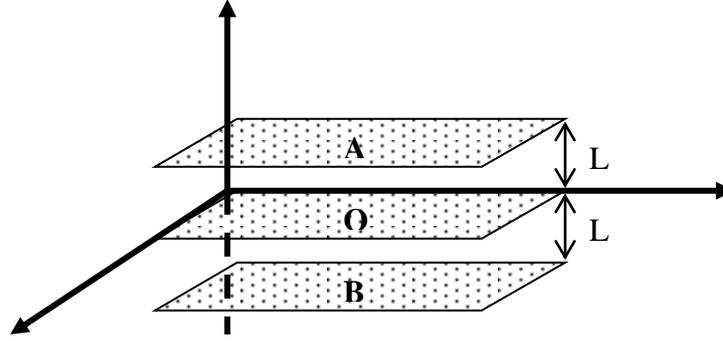
Quand les molécules d'une région fluide possèdent un excédent d'énergie, de concentration, de quantité de mouvement, tel que des gradients de ces propriétés existent avec la région voisine, le système tendra à restaurer l'uniformité spatiale par transport de la propriété en jeu dans la région déficitaire. Ce transport se produit même en l'absence de mouvement d'ensemble du fluide. Les phénomènes que nous avons décrits sont connus sous la forme de conduction thermique, de diffusion massique, de déplacement induit par la viscosité. L'existence et l'intensité du transport convectif sont décrites par la dynamique des fluides du système. En fonction de la direction du mouvement, la convection peut être soit retardée soit facilitée par le transport diffusif qui est toujours présent dans les écoulements où des non-uniformités existent.

La théorie cinétique des gaz dilués conduit à une description statistique du gaz qui n'est pas en équilibre en termes de distribution spatiale aussi bien en ce qui concerne sa concentration, que sa quantité de mouvement, que sa température. Le lien entre les collisions dynamiques prises à l'échelle moléculaire et le phénomène de diffusion massique conduit à une description explicite des taux de transfert diffusif.

#### 3.1 Analyse

L'objectif ici est d'exprimer le taux de transport d'une propriété  $\psi$  d'un gaz par la théorie des collisions moléculaires. Le gaz est suffisamment dilué pour que seules les collisions binaires soient considérées comme importantes. Les deux molécules entrant en collisions ont des masses  $m_k, m_l$  et des diamètres  $\sigma_k, \sigma_l$  respectivement. Il est de plus supposé que le transport se produit dans la direction  $+z$ . Ainsi, les valeurs de la propriété  $\psi$  au plan A situé en  $(+L)$  et au plan B situé en  $(-L)$  peuvent relatives à la valeur  $\psi_0$  au plan O, telles que :

$$\Psi(+L) = \Psi_0 + L \times \left( \frac{d\Psi}{dz} \right)_0 \quad \text{et} \quad \Psi(-L) = \Psi_0 - L \times \left( \frac{d\Psi}{dz} \right)_0 \quad (1.25)$$



L est une distance petite le long de z. En utilisant l'équation (1.25), le flux net de la propriété  $\psi$  à travers le plan O est :

$$F_{\Psi} = -\bar{V}_{k,\ell} \times [\Psi(+L) - \Psi(-L)] \approx -2 \times \bar{V}_{k,\ell} \times L \times \left( \frac{d\Psi}{dz} \right)_0 \quad (1.26)$$

où  $\bar{V}_{k,\ell}$  est vitesse (moyenne) caractéristique de collision dans la direction +z entre les plans A et B donnée par la fonction de distribution de Maxwell :

$$\bar{V}_{k,\ell} = \left( \frac{8 \times k_B \times T}{\pi \times m_{k,\ell}} \right)^{1/2} \quad \text{avec} \quad m_{k,\ell} = \frac{m_k \times m_\ell}{m_k + m_\ell} \quad (1.27)$$

et le signe (-) indique que la direction de transport est opposée à celle du gradient de la propriété  $\psi$ .

Si on suppose un échange complet et que l'égalisation des propriétés entre les molécules se produit en une collision, alors L peut être identifiée comme le libre parcours moyen donné par :

$$L = \frac{1}{n \times \pi \times \sigma_{k,\ell}^2} \quad (1.28)$$

où n est le nombre total de molécules et  $\sigma_{k,\ell} = \frac{1}{2} \times (\sigma_k + \sigma_\ell)$

En substituant (1.27) et (1.28) dans (1.26), il en résulte :

$$F_{\Psi} = -2 \times \left( \frac{8 \times k_B \times T}{\pi \times m_{k,\ell}} \right)^{1/2} \times \left( \frac{1}{n \times \pi \times \sigma_{k,\ell}^2} \right) \times \left( \frac{d\Psi}{dz} \right) \quad (1.29)$$

*NB : l'indice 0 est omis en raison de la référence arbitraire du plan*

L'application de la propriété  $\psi$  de (1.29) au transport des espèces, de la quantité de mouvement, et de la température conduit à :

$$F_{\text{espèces}} = -D_{k,\ell} \times \frac{d\rho_k}{dz} \quad ; \quad F_{\text{quantité mouvement}} = -\mu_{k,\ell} \times \frac{dv_y}{dz} \quad ; \quad F_{\text{énergie}} = -\lambda_{k,\ell} \times \frac{dT}{dz} \quad (1.30)$$

$$D_{k,\ell} = 2 \times \left( \frac{8 \times m_{k,\ell} \times k_B \times T}{\pi} \right)^{1/2} \times \left( \frac{1}{\rho \times \pi \times \sigma_{k,\ell}^2} \right) \quad (1.31)$$

$$\mu_{k,\ell} = 2 \times \left( \frac{8 \times m_{k,\ell} \times k_B \times T}{\pi} \right)^{1/2} \times \left( \frac{1}{\pi \times \sigma_{k,\ell}^2} \right) \quad (1.32)$$

$$\lambda_{k,\ell} = 2 \times \left( \frac{8 \times m_{k,\ell} \times k_B \times T}{\pi} \right)^{1/2} \times \left( \frac{c_v}{\pi \times \sigma_{k,\ell}^2} \right) \quad (1.33)$$

Les équations (1.30) peuvent être généralisées par la forme vectorielle, en substituant (d/dz) par l'opérateur gradient  $\nabla$ . Ces équations sont appelées respectivement loi de Fick (loi de diffusion massique), loi de Newton (loi de viscosité), loi de Fourier (loi de conduction de la chaleur).

Il est important de noter que  $\mu$  et  $\lambda$  sont indépendants de la densité massique  $\rho$  du gaz, et que les coefficients  $D$ ,  $\mu$ ,  $\lambda$  sont indépendants de la pression et dépendent de la température par le facteur  $T^{1/2}$ .

### 3.2 Caractéristiques de diffusion et nombres adimensionnels

A chaque processus de diffusion est associée la vitesse caractéristique, s'exprimant en longueur<sup>2</sup>/seconde.

Pour la diffusion massique, la vitesse caractéristique est le coefficient de diffusion  $D_{kl}$ . Pour la viscosité, c'est la viscosité cinématique :

$$v = \frac{\mu}{\rho} \quad (1.34)$$

tandis que pour la conduction thermique, il s'agit de la diffusivité thermique :

$$\alpha_{th} = \frac{\lambda}{\rho \times c_p} \quad (1.35).$$

Les coefficients  $D_{kl}$ ,  $v$  et  $\alpha_{th}$  sont fonction de  $\rho^{-1}$ . A partir du rapport de ces caractéristiques, il est possible de définir :

- le nombre de Schmidt : mesure de l'influence relative de la viscosité à la diffusion massique

$$Sc_{k\ell} = \frac{v}{D_{k\ell}} = \frac{\mu}{\rho \times D_{k\ell}} \quad (1.36)$$

- le nombre de Prandtl : mesure de l'influence relative de la viscosité à la diffusion thermique

$$Pr = \frac{v}{\alpha_{th}} = \frac{\mu \times c_p}{\lambda} \quad (1.37)$$

- le nombre de Lewis : mesure de l'influence relative de la diffusion thermique à la diffusion massique

$$Le_{k\ell} = \frac{\alpha_{th}}{D_{k\ell}} = \frac{Sc_{k\ell}}{Pr} = \frac{\lambda}{c_p \times \rho \times D_{k\ell}} \quad (1.38)$$

Ces mesures ont des valeurs voisines de l'unité, et sont souvent constantes et peu sensibles à la température. Quand ces valeurs sont égales à l'unité, les équations de conservation décrivant le transport de la chaleur, de masse et de quantité de mouvement ont une grande similitude, conduisant à l'existence des quantités conservatives.

### 3.3 Effets Dufour et Soret

Il est observé, tout comme le prédit la théorie cinétique des gaz, que la diffusion de la chaleur peut se produire en présence d'un gradient de concentration tandis que la diffusion massique peut se produire en présence d'un gradient de température. Ces processus de second ordre sont appelés effets Dufour et Soret respectivement.

L'existence de ces effets peut être appréciée en reconnaissant que la présence d'un gradient de température dans un mélange de concentration uniforme a pour effet de rendre la vitesse de molécules situées plus aléatoire que les molécules dans la zone de température plus faible. Un flux diffusif en résulte : le mélange essaye d'atteindre un équilibre avec la migration des molécules légères vers la région chaude ce qui augmente l'énergie cinétique aléatoire, tandis que les molécules lourdes migrent vers la région froide pour réduire cette énergie.

### 3.4 Résultats utiles de la théorie cinétique des gaz : coefficients de transport

#### 3.4.1 Cas des constituants uniques

Une théorie moléculaire simplifiée est présentée ici pour déterminer les propriétés de transport : viscosité absolue  $\mu$ , coefficient de diffusion  $D$ , conductivité thermique  $\lambda$ . Connaissant l'intégrale de collision, les différents coefficients de transport peuvent être calculés.

##### 3.4.1.1 Viscosité absolue

Pour un système à un seul composant, la formulation rigoureuse conduit à :

$$\mu = 2.6693 \times 10^{-6} \times M_w^{1/2} \times T^{1/2} / (\sigma^2 \times \Omega) \quad (3.1)$$

où la viscosité absolue est exprimée en  $(\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$ ,  $\Omega$  est appelé intégrale de collision pour la viscosité, la température  $T$  est en Kelvin, et  $\sigma$  la constante de Stefan-Boltzmann en  $\text{A}^\circ$ . Une expression de  $\Omega$  en fonction de  $\varepsilon / (k_B \times T)$  est :

$$\Omega = -0.104 \times \varepsilon / (k_B \times T)^2 + 0.9663 \times \varepsilon / (k_B \times T) + 0.7273 \text{ pour } 0 < \varepsilon / (k_B \times T) < 3.5 \quad (3.2)$$

avec un coefficient de corrélation de 0.9996. Le rapport  $\varepsilon / (k_B \times T)$  et la collision intégrale  $\Omega$  pour différentes substances sont tabulés. La viscosité absolue  $\mu$  est indépendante de la pression et de la densité massique du gaz mais dépend de la température telle que  $\mu \propto T^{1/2}$ .

##### 3.4.1.2 Conductivité thermique

###### 3.4.1.2.1 Cas des gaz monoatomiques

Dans le cas d'un gaz monoatomique :

$$\lambda = \lambda' = \frac{15}{4} \times R \times \mu \quad (3.3)$$

avec  $\lambda$  en  $(\text{kW} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$ ,  $R$  la constante des gaz parfait en  $(\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$  et  $\mu$  la viscosité absolue est exprimée en  $(\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$ .

### 3.4.1.2.2 Cas des gaz polyatomiques

Pour un gaz polyatomique :

$$\lambda = \lambda' + \lambda'' \quad (3.4)$$

$$\lambda'' = 0.88 \times \lambda' \times \left[ 0.4 \times \left( \frac{c_p}{R} \right) - 1 \right] \quad (3.5)$$

Formules de Eucken sont

$$\frac{\lambda}{\mu \times R} = \frac{c_p}{R} + \frac{5}{4} = \frac{c_v}{R} + \frac{9}{4} \quad (3.6)$$

$$\frac{\lambda}{\lambda'} = \left( \frac{4}{15} \right) \times \left( \frac{c_p}{R} \right) + \frac{5}{15} = \left( \frac{4}{15} \right) \times \left( \frac{c_v}{R} \right) + \frac{3}{5} \text{ pour un gaz parfait} \quad (3.7)$$

En utilisant la relation (3.3) pour  $\lambda'$ , on en déduit :

$$\frac{\lambda}{\mu \times c_v} = \frac{9 \times \gamma - 5}{4} \quad (3.8)$$

La valeur  $\frac{\lambda}{\mu \times c_v}$  vaut 0.4 pour un gaz monoatomique, est inférieur à 0.5 pour un gaz diatomique et de 0.57 pour un gaz triatomique.

Pour les gaz polyatomiques, il en découle la formule de Eucken :

$$\lambda = \lambda' \times \left[ \frac{3}{5} + \frac{4}{15 \times (\gamma - 1)} \right] \quad (3.9)$$

Une expression alternative pour  $\lambda$  est la formule de Hirschfelder :

$$\lambda = \lambda' \times \left[ 0.115 + 0.354 \times \frac{\gamma}{(\gamma - 1)} \right] \quad (3.10)$$

qui semble plus précise sur un domaine plus étendu de température T et pour un certain nombre de fonctions potentiels plus réalistes.

En utilisant la formule de Eucken, il vient aussi :

$$Pr = \frac{4 \times \gamma}{9 \times \gamma - 5} \quad (3.11)$$

Pour un gaz monoatomique  $\gamma = 5/3$ ,  $Pr = 2/3$  et pour un gaz diatomique  $\gamma = 7/5$ ,  $Pr = 0.74$ .

### 3.4.2 Cas de mélanges

Pour des mélanges la viscosité et la conductivité thermique sont données par :

$$\mu_{\text{mél}} = \frac{\sum_k X_k \times \mu_k}{\sum_l X_l \times \Phi_{kl}} \quad (3.12)$$

$$\lambda_{\text{mél}} = \frac{\sum_k X_k \times \lambda_k}{\sum_l X_l \times \Phi_{kl}} \quad (3.13)$$

$$\text{avec } \Phi_{kl} = \frac{1}{\sqrt{8}} \times \left[ 1 + \frac{Mw_k}{Mw_l} \right]^{-1/2} \times \left[ 1 + \left( \frac{\mu_k}{\mu_l} \right)^{1/2} \times \left( \frac{Mw_l}{Mw_k} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (3.14)$$

La relation de Bird (1960) permet de calculer la diffusion binaire entre les espèces k et l :

$$D_{k\ell} = 1.8583 \times 10^{-7} \times \sqrt{\frac{T^3 \times (Mw_k + Mw_\ell)}{Mw_k \times Mw_\ell}} \times \frac{1}{P \times \sigma_{k\ell}^2 \times \Omega_{k\ell}} \quad \text{en m}^2 \cdot \text{s}^{-1} \quad (3.15)$$

où P est la pression exprimé en atmosphères, Mw en g.mol<sup>-1</sup>, T en K et σ en Å

La diffusion d'une espèce k dans un mélange d'espèces est donnée par :

$$D_{k,\text{mélange}} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{\ell \neq k} \frac{Y_\ell}{D_{k\ell}}} \quad (3.16)$$

# Chapitre 2 : Rappels de thermodynamique

## 1. Loi d'état et variables d'état

### 1.1 Premier principe de la thermodynamique

On considère un système S qui évolue entre deux instants t et t + Δt. On suppose que cette évolution est suffisamment lente de sorte que le système reste en équilibre.

Soit δQ l'énergie thermique ou quantité de chaleur échangée par S avec le milieu extérieur et soit δW l'énergie mécanique ou quantité de travail échangée par S avec le milieu extérieur.

La convention veut qu'une quantité reçue par le système S soit affectée d'un signe positif.

Le premier principe de la thermodynamique fournit une relation entre la variation d'énergie interne e du fluide par unité de masse et les quantités δW et δQ :

$$de = \delta Q + \delta W$$

L'énergie interne e est donnée par une équation d'état dite équation calorifique :

$$e = e(\rho, T)$$

On introduit aussi l'enthalpie h définie par  $h = e + \frac{P}{\rho}$ , écrit généralement sous les formes:

$$h = h(\rho, P) = h(\rho, T)$$

$$dh = \delta Q + \delta W + d\left(\frac{P}{\rho}\right)$$

Les deux différentielles de et dh constituent des formes équivalentes du premier principe, elles s'écrivent :

$$de = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho \times dT + \left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_T \times d\rho$$

$$dh = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P \times dT + \left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_T \times dP$$

On définit les chaleurs spécifiques à volume et pression constante  $c_v$  et  $c_p$  par :

$$c_v = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho \quad (1.1)$$

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P \quad (1.2)$$

### 1.2 Second principe de la thermodynamique

Selon le second principe de la thermodynamique, il existe une variable d'état s qui pour une processus réversible, s'exprime par :

$$dS = \frac{\delta Q}{T}$$

S est l'entropie massique du fluide. Par conséquent, pour un processus réversible, on peut écrire :

$$TdS = de - \delta W = dh - \delta W - d\left(\frac{P}{\rho}\right)$$

Dans le cas d'un travail irréversible, on a l'inégalité suivante :

$$dS > \frac{\delta Q}{T}$$

## 2. Gaz parfaits

Selon la théorie cinétique des gaz, on définit le gaz parfait par la loi d'état suivante :

$$P = \rho \times \frac{R \times T}{M_w} \quad (2.1)$$

où  $M_w$  représente la masse molaire du gaz.

Dans le cas d'un mélange de gaz, la pression du mélange suit la loi de Dalton :

$$P = \sum_k p_k = \sum_k \frac{\rho_k}{M_{w_k}} \times R \times T$$

Soit  $n_k$  le nombre de molécules de l'espèce  $k$  par unité de volume, on définit la fraction molaire  $X_k$  par :

$$X_k = \frac{n_k}{\sum_k n_k}$$

Ainsi la masse molaire du mélange est :

$$M_w = \sum_k X_k \times M_{w_k} \quad (2.2)$$

La masse volumique  $\rho_k$  est donnée par la relation :

$$\rho_k = \frac{p_k}{R_k \times T} \text{ en kg espèces } k / m^3 \text{ où } R_k = \frac{R}{M_{w_k}}$$

On a aussi :

$$Y_k = \frac{X_k \times M_{w_k}}{M_w}$$

## 3. Gaz réels

La loi d'état des gaz parfaits utilisée pour des écoulements à température et pression ambiantes s'avère insuffisante pour traiter certains d'écoulements. A titre d'exemple, on peut citer les écoulements hypersoniques ou les écoulements réactifs.

En effet, lorsque l'on rencontre des températures très élevées, des réactions chimiques ont lieu et changent la masse molaire moyenne du mélange. De plus, lorsque les pressions deviennent importantes entre molécules il s'ensuit que la relation liant la pression à la masse volumique ne suit plus une loi linéaire comme c'est le cas dans les gaz parfaits.

Les corrections à apporter peuvent se calculer théoriquement à partir d'une théorie basée sur la mécanique statistique.

Posons :

$$\hat{v} = \frac{M_w}{\rho}$$

avec  $M_w$  la masse molaire du mélange gazeux.

### 3.1 Loi de Van de Walls

Cette loi s'écrit :

$$\left(P + \frac{a}{\widehat{V}^2}\right)(\widehat{V} - b) = R T \quad (3.1)$$

avec  $a = \frac{27 R^2 T_c^2}{64 P_c}$  et  $b = \frac{1 R T_c}{8 P_c}$

où l'indice c indique la valeur point critique.

### 3.2 Loi de Dieterici

Cette loi s'écrit :

$$P \times e^{\frac{a_2}{\widehat{V} \times R \times T}} \times \left(\frac{1}{\widehat{V}} - b_2\right) = R \times T \quad (3.2)$$

avec  $a_2 = 2 \times \widehat{V}_c \times T_c$  et  $b_2 = \frac{\widehat{V}_c}{2}$

La loi de Van de Walls, beaucoup simple est en revanche moins réaliste.

Pour un mélange constitué de N<sub>2</sub> et de O<sub>2</sub>, on peut utiliser les valeurs suivantes pour les constantes a et b :

Espèce	T <sub>c</sub> (K)	$\widehat{V}_c$ (m <sup>3</sup> )	P <sub>c</sub> (Pa)	a <sub>1</sub>	b <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	b <sub>2</sub>
N <sub>2</sub>	126.1	90.1 × 10 <sup>-6</sup>	33.5 × 10 <sup>5</sup>	0.08159	30.033 × 10 <sup>-6</sup>	0.2272	45.05 × 10 <sup>-6</sup>
O <sub>2</sub>	154.4	74.4 × 10 <sup>-6</sup>	49.7 × 10 <sup>5</sup>	0.08253	24.8 × 10 <sup>-6</sup>	0.2297	37.2 × 10 <sup>-6</sup>

### 3.3 Loi de Redlich-Kwong

Cette équation d'état est utilisée pour caractériser les propriétés des substances en phase vapeur uniquement et pour des P et P critiques inférieures à la moitié du rapport de T et de la T critique.

$$P = \frac{R T}{V - b} - \frac{a}{\sqrt{T} V (V + b)}$$

avec  $a = \frac{0.42748 R^2 T_c^{2.5}}{P_c}$  et  $b = \frac{0.08664 R T_c}{P_c}$

V : volume molaire

### 3.4 Loi de Soave- Redlich-Kwong

Cette équation d'état est utilisée pour caractériser le comportement des substances en phase liquide et vapeur.

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha}{V(V+b)}$$

$$\text{avec } a = \frac{0.42748 R^2 T_c^{2.5}}{P_c} \text{ et } b = \frac{0.08664 RT_c}{P_c}$$

$$\alpha = \left[ 1 + \left( 0.48508 + 1.5517 \omega - 0.15613 \omega^2 \right) \left( 1 - T_r^{0.5} \right) \right]^2 \text{ où } T_r = \frac{T}{T_c}$$

$$\omega : \text{facteur acentrique exprimé par } \omega = -\log_{10} \left( P_r^{\text{sat}} \right) - 1 \text{ où } P_r = \frac{P}{P_c}$$

### 3.5 Loi de Peng-Robinson

Cette équation d'état est utilisée pour caractériser le comportement des substances en phase liquide et vapeur. Elle donne une meilleure prédiction que loi de Soave- Redlich-Kwong pour les densités en phase liquide.

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha}{V^2 + 2abV - b^2}$$

$$\text{avec } a = \frac{0.45714 R^2 T_c^{2.5}}{P_c} \quad b = \frac{0.07780 RT_c}{P_c}$$

$$\alpha = \left[ 1 + \left( 0.37464 + 1.5422 \omega - 0.26992 \omega^2 \right) \left( 1 - T_r^{0.5} \right) \right]^2 \text{ où } T_r = \frac{T}{T_c}$$

$$\omega : \text{facteur acentrique exprimé par } \omega = -\log_{10} \left( P_r^{\text{sat}} \right) - 1 \text{ où } P_r = \frac{P}{P_c}$$

### 3.6 Equation d'état de Jones-Wilkins-Lee

Cette équation d'état utilisée pour caractériser les substances explosives gazeux et condensées. Elle est souvent appelée JWL. Elle contient paramètres décrivant le rapport entre le volume, l'énergie et la pression des produits de détonation.

$$P = C_1 \left( 1 - \frac{\omega}{R_1 v} \right) e^{-R_1 v} + C_2 \left( 1 - \frac{\omega}{R_2 v} \right) e^{-R_2 v} + \frac{\omega E}{v}$$

Avec :

P la pression dans les produits de détonation (Pa),

E l'énergie interne des produits de détonation (J.kg<sup>-1</sup>)

C<sub>1</sub>, C<sub>2</sub>, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, w les constantes déterminées expérimentalement

Et v le volume spécifique occupé par les gaz

### 3.7 Equation Stiffened gas

Cette équation est utilisée pour modéliser la phase liquide. Elle s'exprime par :

$$P + P_{\infty} = \frac{\gamma - 1}{\gamma} c_p \rho T$$

où L'indice  $\infty$  désigne des constantes de l'équation qui permettent de prendre en compte l'attraction moléculaire entre les molécules composant le matériau considéré.

## 4. Energie interne d'un gaz

On peut définir l'énergie interne, l'enthalpie et l'entropie d'un gaz parfait par les relations :

$$e = \int c_v(T) \times dT + \text{cste}$$

$$h = \int c_p(T) \times dT + \text{cste}$$

$$S = \int \frac{c_p(T)}{T} \times dT + \frac{R}{Mw \times \ln(P)} + \text{cste}$$

Dans le cas particulier des gaz mono-atomiques en l'absence de phénomène d'ionisation  $c_p$  et  $c_v$  ne dépendent pas de la température T et de ce fait sont constantes. Un tel gaz parfait à chaleurs spécifiques constantes est nommé aussi gaz polytropique de rapport  $\gamma$ , avec  $\gamma = c_p / c_v$ , les rapport des chaleurs spécifiques. Dans un tel gaz on a :

$$e = c_v \times T + e_0$$

$$h = c_p \times T + h_0 \quad (3.1)$$

$$S = c_p \times \ln(T) + \frac{R}{Mw \times \ln(P)} + \text{cste} = c_v \times \ln\left(\frac{P}{\rho^\gamma}\right) + \text{cste} + \text{cste}$$

Cette dernière relation met en évidence qu'une relation isentropique se traduit par la relation  $P/\rho^\gamma = \text{cste}$ . Notons que :

$$h = e + \frac{P}{\rho} \quad \text{avec} \quad \frac{P}{\rho} = (c_p - c_v) \times T$$

par conséquent, on peut écrire l'énergie interne e sous la forme :

$$e = c_v \times T + h_0 \quad (3.2)$$

où  $h_0$  est l'enthalpie de formation du gaz.

Le cas des gaz poly-atomiques est un plus complexe et nécessite quelques explications.

### 4.1 Modes de stockage d'énergie d'une particule

Une molécule mono ou poly-atomiques peut stocker de l'énergie de différentes manières (nous nous limiterons au cas des molécules diatomiques).

Le premier mode de stockage, commun à toutes les molécules, est le mode correspondant à l'énergie de translation. La molécule peut également tourner autour de son centre de masse, ce mouvement donne l'Energie de rotation. Ce mode de stockage n'existe pas pour les molécules mono-atomiques. La molécule peut aussi vibrer, dans ce cas la distance entre les atomes formant la molécule varie. Enfin la molécule peut être électroniquement excitée.

Ces différents mode d'énergie sont déterminés par l'analyse statistique.

Dans le cas d'un gaz monoatomique à faible température seule l'énergie de translation est présente :

$$e_{tr}^k = \frac{3}{2} \times \frac{R}{Mw_k} \times T_{tr} \quad (3.3)$$

Pour un gaz poly-atomique, il convient en plus d'ajouter l'énergie de rotation qui peut s'écrire pour un gaz diatomique :

$$e_{rot}^k = \frac{R}{Mw_k} \times T_{rot} \quad (3.4)$$

Pour les très hautes températures, il convient de prendre en compte l'énergie de vibration. L'énergie du mélange de gaz éventuellement hors équilibre thermodynamique s'écrit (on néglige l'énergie due à l'activation électronique) :

$$e^k = c_v^{k,tr} \times T_{tr} + (n_k - 1) \times \left( c_v^{k,rot} \times T_{rot} + e^{k,vib} \right) + h_0^k \quad (3.5)$$

où  $n_k$  représente l'atomicité de l'espèce  $k$ . Pour une espèce mono-atomique,  $n = 1$  et  $n = 2$  pour une espèce diatomique.

L'énergie interne du mélange de gaz est alors définie par :

$$e = \sum_k Y_k \times e^k \quad (3.6)$$

En l'absence de réactions chimiques et pour des températures suffisamment faibles (l'équilibre thermodynamique est alors atteint), le mélange de gaz parfaits polytropiques est un gaz parfait polytropique de rapport  $\gamma$  tel que

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad \text{avec } c_p = c_v + \frac{R}{Mw} \quad \text{et } c_v = \left( \frac{\partial e}{\partial T} \right)$$

## 5. Déséquilibre chimique – Cinétique chimique

Lorsque les grandeurs thermodynamiques varient, le système des réactions chimiques doit s'adapter aux nouvelles conditions. Soit  $\tau_t$  le temps nécessaire au fluide pour traverser une distance caractéristique  $L$  :

$$\tau = \frac{L}{V}$$

où  $V$  est la vitesse caractéristique du système associé, tandis que  $\tau_c$  est le temps mis par le système pour atteindre son état d'équilibre.

La comparaison de ces temps caractéristiques met en évidence trois zones de comportement du système couplé chimie-aérodynamique. Pour cela, on introduit le nombre de Damköhler :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}$$

Si  $Da \gg 1$ , la chimie est très rapide en comparaison avec le taux de mélange du fluide, régime des flammes minces

Si  $Da \ll 1$  la chimie est très lente, régime des flammes épaisses

## 6. Déséquilibre thermique – Relaxation vibrationnelle

Pour des températures plus élevées, l'atteinte d'un état d'équilibre nécessite un plus grand nombre de collisions (supérieur à 20). Le phénomène régissant le retour à l'équilibre constitue la relaxation vibrationnelle. Notons  $\tau_{vib}$ , le temps caractéristique de cette relaxation, la comparaison de ce temps avec le temps  $\tau_t$  fait apparaître trois zones de fonctionnement :

Si  $\tau_{\text{vib}} \ll \tau_t$  l'énergie de vibration s'équilibre avec les grandeurs du fluide.

Si  $\tau_{\text{vib}} \sim \tau_t$  l'énergie de vibration n'a pas le temps de s'équilibrer.

Si  $\tau_{\text{vib}} \gg \tau_t$ , l'écoulement est figé vibrationnellement.

# Chapitre 3 :

## Considérations numériques générales

### 1. Description Lagrangienne

On peut, isoler une partie restreinte du fluide appelée particule fluide et la "suivre" au cours du temps c'est à dire connaître à chaque instant sa position.

Soit  $M(t)$  la position de la particule à l'instant  $t$ , de coordonnées  $\{x_m(t), y_m(t), z_m(t)\}$ , la

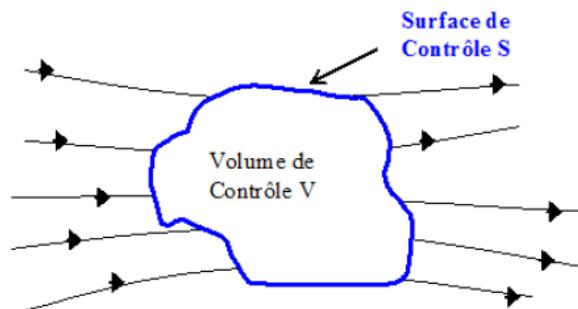
vitesse de la particule aura pour composantes:  $u_M = \frac{dx_m}{dt}$ ,  $v_M = \frac{dy_m}{dt}$ ,  $w_M = \frac{dz_m}{dt}$

Au cours du temps, la particule sera en différents points  $M$ , l'ensemble des points  $M$  constitue la trajectoire de la particule.

Pour un fluide continu, la réponse est de construire soit un modèle de volume fini de contrôle, soit un modèle d'élément fluide infinitésimal.

#### 1.1 Volume de contrôle

Considérons un champ d'écoulement général représenté par les lignes de courant. On imagine un volume fermé dans une région finie de l'écoulement. Ce volume définit un volume de contrôle  $V$  et une surface de contrôle  $S$ , laquelle définit une surface fermée qui limite le volume.



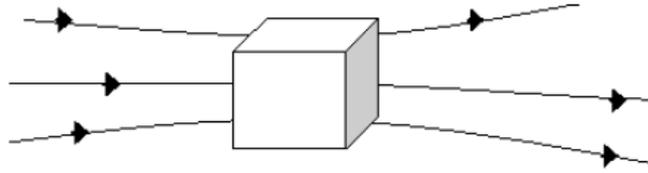
Volume de contrôle se déplaçant avec le fluide : les mêmes particules de fluide sont toujours à l'intérieur du volume de contrôle.

Dans le cas du volume de contrôle se déplaçant avec le fluide, les mêmes particules de fluide sont toujours à l'intérieur du volume de contrôle.

Les équations obtenues à partir du volume de contrôle se déplaçant avec le fluide, soit sous forme intégrale soit sous forme de différentielle partielle sont appelées forme non conservative des équations pilotes.

#### 1.2 Élément fluide infinitésimal

Imaginons maintenant un petit élément fluide infinitésimal dans l'écoulement avec un volume différentiel  $dV$ . L'élément fluide est infinitésimal au sens du calcul différentiel mais a toutefois une taille suffisante pour contenir un grand nombre de molécules et être considéré comme un milieu continu. Considérons l'élément fluide se déplaçant le long d'une ligne de courant (forme non conservative des équations).



Elément fluide se déplaçant le long d'une ligne de courant suivant un vecteur vitesse égal à la vitesse de l'écoulement à chaque point

Cette façon de faire est appelée méthode de **Lagrange**, les variables introduites sont appelées variables de Lagrange.

## 2. Description Eulérienne

Cette méthode d'Euler consiste à connaître la vitesse des particules au cours du temps  $t$  à un endroit donné déterminé par ses coordonnées, par exemple cartésiennes  $(x, y, z)$ .

On choisit un petit élément de volume  $(dx dy dz)$ , dont la position  $(x, y, z)$  est fixe dans le référentiel de l'observateur, et on détermine la vitesse des particules fluides qui traversent cet élément de volume. La vitesse  $\vec{U}$  mesurée dépend évidemment du temps  $t$  et du point de mesure  $(x, y, z)$  :  $\vec{U} = \{u(x, y, z, t); v(x, y, z, t); w(x, y, z, t)\}$ .

De façon générale, les propriétés du fluide mesurées par la méthode d'Euler dépendent donc du point  $(x, y, z)$  et du temps  $t$ .

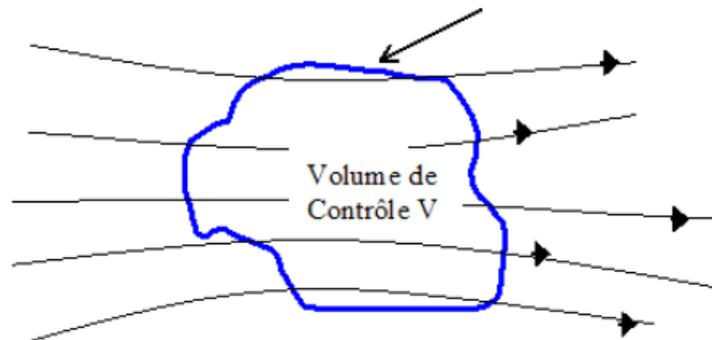
Si l'on compare les fluides avec les solides, la première remarque qui s'impose concerne l'isotropie (les propriétés sont les mêmes dans toutes les directions spatiales) des fluides usuels qui est toujours réalisée (si on n'agit pas sur le fluide en tout cas !).

En particulier, en un point quelconque d'un fluide, la pression est indépendante de la direction de la normale à la surface élémentaire sur laquelle elle s'exerce (théorème de Pascal).

Il est toujours possible de donner une représentation Eulérienne avec un volume de contrôle ou un élément fluide

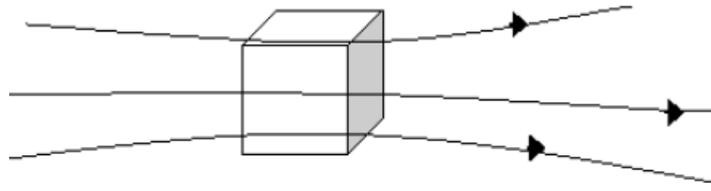
### 2.1 Volume de contrôle

Les équations obtenues à partir du volume de contrôle fixé en espace, soit sous forme intégrale soit sous forme de différentielle partielle sont appelées forme conservative des équations pilotes.



Volume de contrôle fixé en espace avec le fluide circulant à travers

## 2.2 Élément fluide infinitésimal

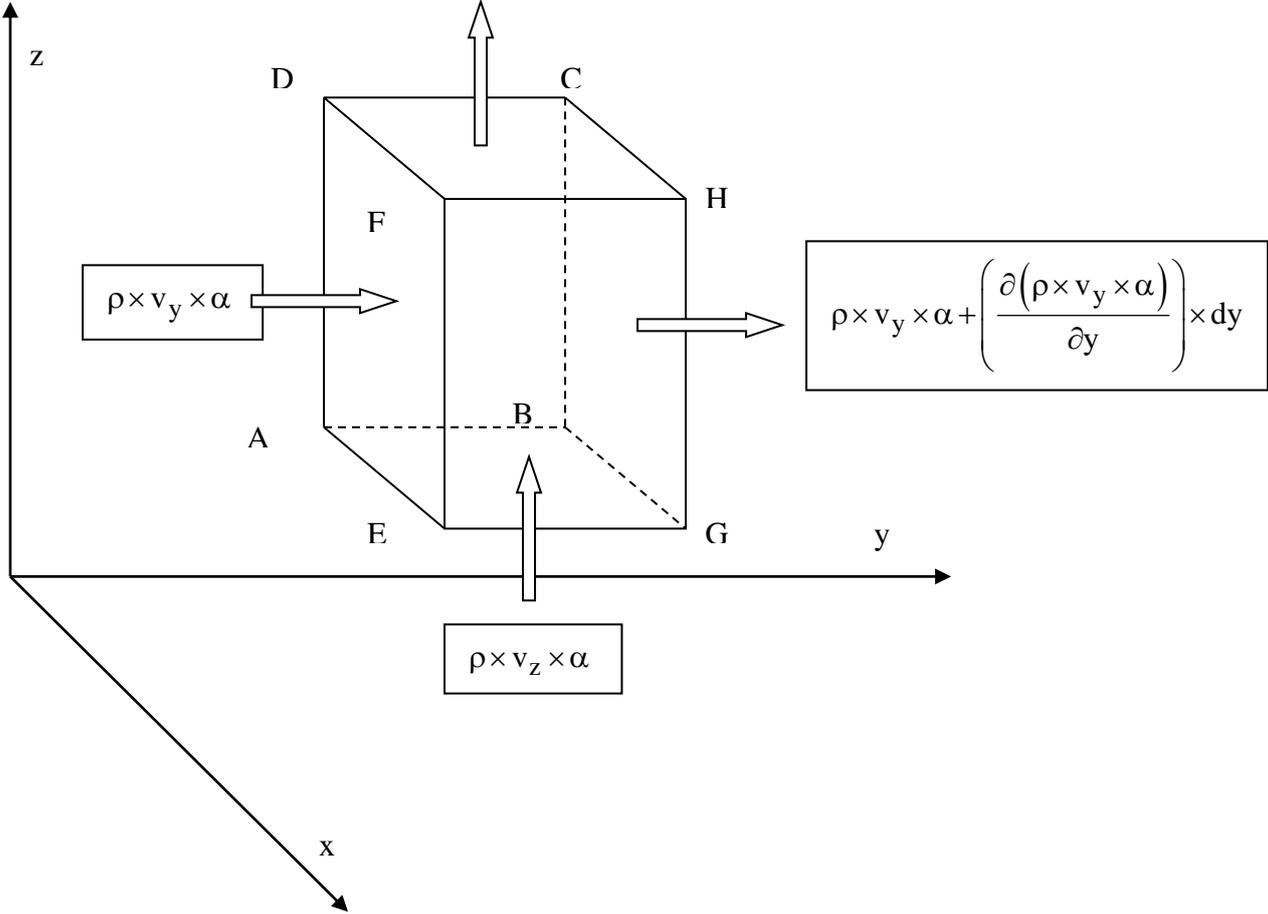


Élément fluide fixé en espace avec le fluide circulant à travers.

Les équations obtenues à partir du volume de contrôle fixé en espace sont appelées forme conservative des équations pilotes.

# Chapitre 4 : Equations de conservation

$\alpha = 1, Y_k, h, Z_k, f$   
 $v = v_k$  pour les espèces  
 $\rho \times v_z \times \alpha + \left( \frac{\partial(\rho \times v_z \times \alpha)}{\partial z} \right) \times dz$



## 1. Conservation de la masse

La conservation de la masse s'exprime par le principe physique suivant:

$$\text{masse accumulée} + \text{masse sortante} - \text{masse entrante} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v_y)}{\partial y} = 0 \quad (3.7)$$

La forme vectorielle correspondante à cette équation est :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.8)$$

L'équation de conservation de la masse est encore appelée équation de continuité.

## 2. Conservation des espèces

En se basant sur le principe physique:

$$\text{espèce accumulée} + \text{espèce sortante} - \text{espèce entrante} = \text{espèce produite}$$

il en résulte :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_k v_{kx})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho_k v_{ky})}{\partial y} + \frac{\partial (\rho_k v_{kz})}{\partial z} = w_k^{\bullet} \quad (3.9)$$

Sous la forme vectorielle, l'équation s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k \vec{v}_k) = w_k^{\bullet} \quad (3.10)$$

où la vitesse absolue des espèces k est :

$$\vec{v}_k = \vec{v} + \vec{V}_k \quad (3.11)$$

qui est la somme de la vitesse moyenne sur l'ensemble des masses  $\vec{v}$  (i.e. vitesse du mélange) et la vitesse de diffusion de l'espèce k,  $\vec{V}_k$ .

En utilisant la relation  $\rho_k = \rho \times Y_k$  et en appliquant la loi de conservation de la masse, l'équation (3.9), on peut réécrire l'équation (3.10) :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \vec{\nabla} Y_k = - \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_k^{\bullet} + w_k^{\bullet} \quad (3.12)$$

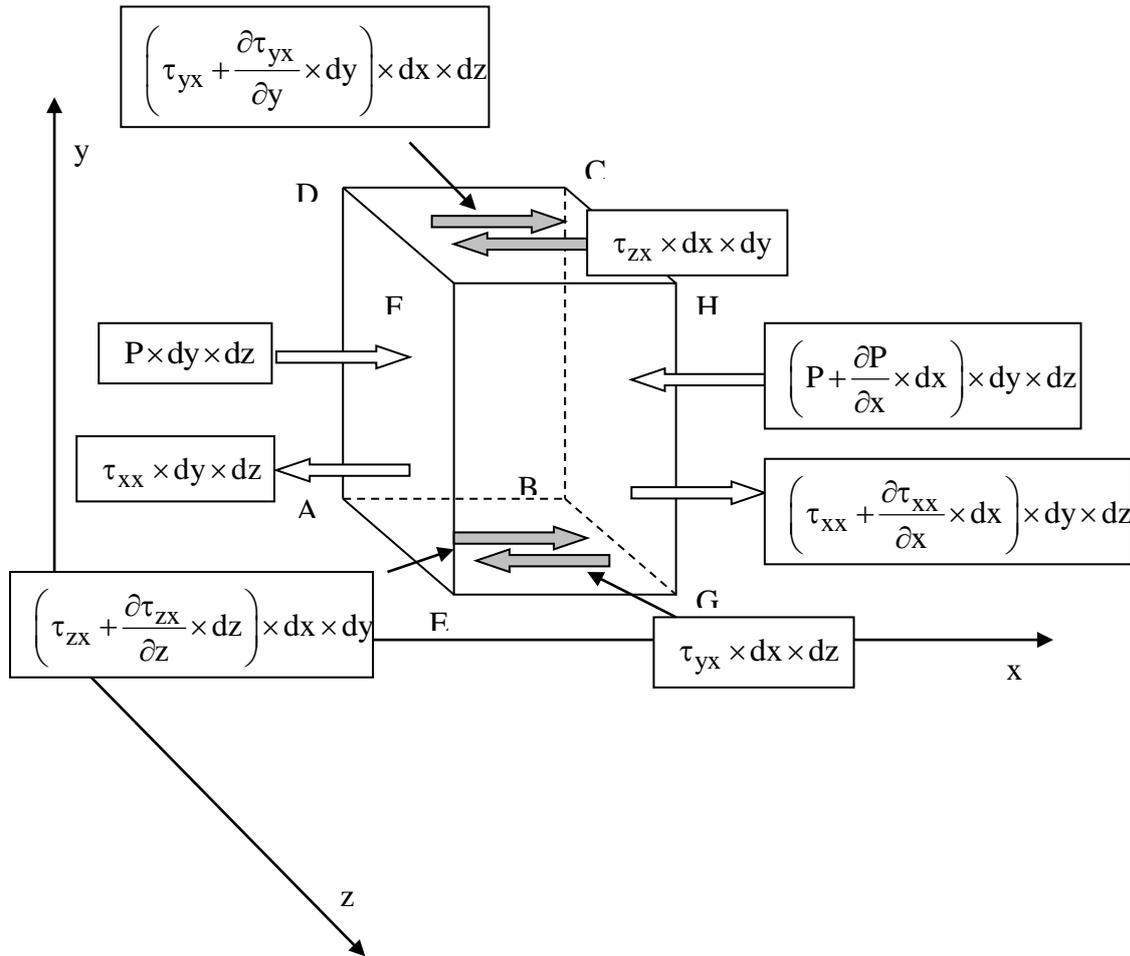
$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \vec{\nabla} Y_k = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + w_k^{\bullet} \quad (3.13)$$

Cette équation représente : l'accumulation des espèces k + transport convectif ou l'advection des espèces dans le volume de contrôle = (transport des espèces k par diffusion plus la production des espèces k) dans le volume de contrôle.

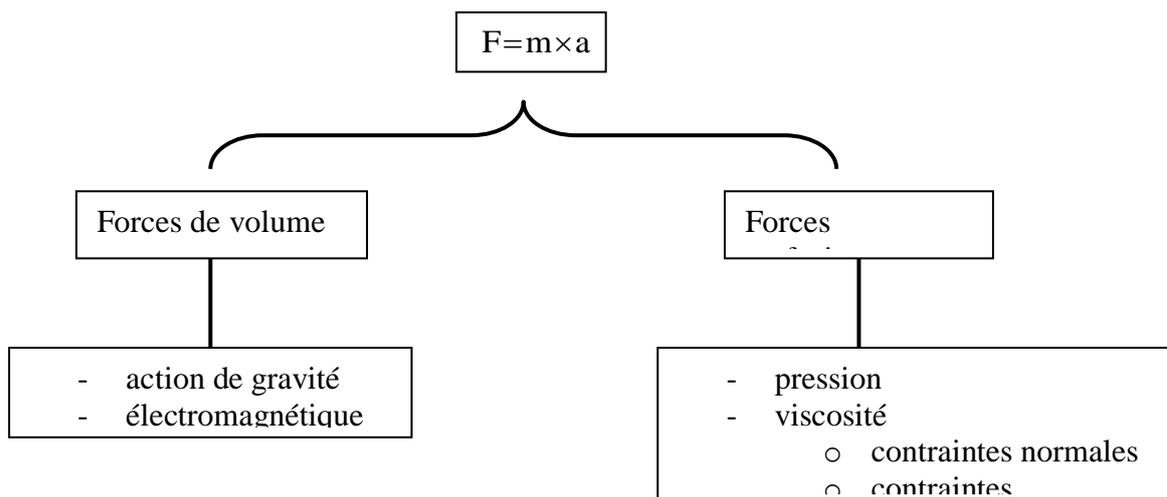
### 3. Conservation de la quantité de mouvement

Le principe physique appliqué ici est celui de la seconde loi de Newton, à savoir :

$$\vec{F} = m \times \vec{a}$$



La seconde loi de Newton appliquée à un élément fluide en mouvement exprime que la force totale sur cet élément fluide est égale à sa masse multipliée par son accélération. Cette loi peut être représentée par le diagramme ci-dessous :



Les composantes x, y et z, sous forme conservative, s'écrivent comme suit:

$$\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho v_x \bar{V}) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial(\rho v_y)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho v_y \bar{V}) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial(\rho v_z)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho v_z \bar{V}) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \quad (4.3)$$

Dans le cas de fluide Newtonien ,

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \lambda \times (\bar{\nabla} \times \bar{V}) + 2 \times \mu \times \frac{\partial v_x}{\partial x}; & \tau_{yy} &= \lambda \times (\bar{\nabla} \times \bar{V}) + 2 \times \mu \times \frac{\partial v_y}{\partial y}; & \tau_{zz} &= \lambda \times (\bar{\nabla} \times \bar{V}) + 2 \times \mu \times \frac{\partial v_z}{\partial z} \\ \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \times \left[ \frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right]; & \tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \times \left[ \frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right]; & \tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \times \left[ \frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right] \end{aligned} \quad (4.4)$$

L'écriture de l'équation (4.4) peut se généraliser sous la forme suivante :

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_i v_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i \quad (4.5)$$

soit encore en utilisant les opérateurs :

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \nabla (\rho v_i v_j) = -\bar{\nabla} P + \nabla \tau_{ij} + \rho \bar{f}_i$$

avec  $\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \text{div}(\rho v_i v_j) = -\overline{\text{grad}} P + \text{div} \bar{\pi} + \rho \bar{f}_i$  où  $\bar{\pi}$  est le tenseur des contraintes visqueuses.

$$\text{Pour un fluide réactif : } \rho \left( \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial v_j} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i}$$

#### 4. Conservation de l'énergie

Les différents effets qui contribuent au flux de chaleur d'un système multi-espèces sont :

- la loi de Fourier de la conduction de la chaleur ,
- le flux d'enthalpie d'ensemble porté par toutes les espèces chimiques par unité de temps s'écoulant par rapport au mouvement massique moyen du mélange

$$\text{est (processus d'interdiffusion) : } \rho \times \sum_{k=1}^N h_k \times Y_k \times \bar{V}_k ,$$

- l'effet de diffusion thermique, dit effet Soret
- et l'effet réciproque, l'effet Dufour

Pour établir l'équation de conservation de l'énergie, il faut exprimer l'énergie stockée par unité de masse  $e_t$ , définie par :

$$e_t = e + \frac{v_i \times v_i}{2} \quad (4.6)$$

où  $v_i$  est la composante de la vitesse dans la direction  $i$  et  $e$  est l'énergie interne spécifique définie par :

$$e = h - \frac{P}{\rho} = \sum_{k=1}^N h_k \times Y_k - \frac{P}{\rho} \quad (4.7)$$

$$\text{où } h_k = h_{f,k}^\circ + \int_{T^\circ}^T c_{p,k}(T) \times dT \quad (4.8)$$

L'équation d'énergie pour le fluide contenu dans le volume de contrôle s'exprime par l'équation d'équilibre suivante :

- Taux d'accumulation d'énergie interne et cinétique dans le volume de contrôle (I) =  
 Taux d'énergie interne et cinétique entrant par convection (II)  
 + Taux de chaleur additionnelle due au flux de chaleur  $q$  (III)  
 + Taux de chaleur apportée par la source (IV)  
 + Taux de travail fourni sur l'élément fluide par l'environnement (V)

$$\underbrace{\rho \times \frac{De}{Dt}}_{\text{augmentation de l'énergie interne}} = \underbrace{-\frac{\partial q_i}{\partial x_i}}_{\text{flux entrant : conduction, diffusion, effet Dufour}} - \underbrace{P \frac{\partial v_j}{\partial x_j}}_{\text{Travail de l'écoulement}} + \underbrace{-\frac{2}{3} \times \mu \times \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right)^2 + 2 \times \mu \times e_{ij} \times e_{ij}}_{\phi \text{ Dissipation par contraintes visqueuses}} + \underbrace{Q^\square}_{\text{Chaleur entrante}} + \underbrace{\rho \sum_{k=1}^N Y_k \times f_k \times V_k}_{\text{Forces de volume}} \quad (4.9)$$

soit sous forme vectorielle l'expression de l'énergie interne est :

$$\rho \frac{De}{Dt} + P \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q} + Q^\square + \Phi + \rho \sum_{k=1}^N Y_k \vec{f}_k \cdot \vec{V}_k \quad (4.10)$$

où  $\phi$  représente la dissipation par contraintes visqueuses.

L'écriture sous forme indicée est :

$$\rho \frac{De}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + Q^\bullet + \tau_{ji} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - P \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i} \quad (4.11)$$

L'enthalpie se détermine à partir de  $h = e + \frac{P}{\rho}$  et de l'équation de continuité, l'équation (4.10) devient :

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{DP}{Dt} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ji} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + Q^\bullet + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i} \quad (5.12)$$

L'expression en termes de température s'en déduit :

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = w_T^{\bullet\bullet\bullet} + \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ji} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + Q^{\bullet} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i} - \left( \rho \sum_{k=1}^N C_{p,k} Y_k V_{k,i} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (5.13)$$

Avec

$$w_T^{\bullet\bullet\bullet} = - \sum_{k=1}^N h_{s,k} w_k^{\bullet\bullet\bullet} - \sum_{k=1}^N h_{f,k}^0 w_k^{\bullet\bullet\bullet}$$

## 5. Expression de la diffusion d'un système à multi-composants

Récapitulons les équations de conservation :

- conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla} \rho \bar{v} = 0$$

- conservation des espèces

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \bar{v} \bar{\nabla} Y_k = \bar{\nabla} (\rho D \bar{\nabla} Y_k) + w_k^{\bullet\bullet\bullet}$$

- conservation de la quantité de mouvement

$$\rho \left( \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial v_j} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} + \rho f_i$$

- conservation de l'énergie totale

$$\frac{\partial (\rho e_t)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_i e_t)}{\partial x_i} = - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + Q^{\bullet} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ji} v_i) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i P) + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (v_i + V_{k,i})$$

Pour résoudre les équations de conservation d'un système multi-constituants les vitesses de diffusion apparaissant dans ces équations doivent être déterminées par :

$$\begin{aligned} \nabla X_k = & \sum_{\ell=1}^N \left( \frac{X_k \times X_{\ell}}{D_{k,\ell}} \right) \times (\bar{V}_{\ell} - \bar{V}_k) + (Y_k - X_{\ell}) \times \left( \frac{\bar{\nabla} P}{P} \right) + \left( \frac{\rho}{P} \right) \sum_{\ell=1}^N Y_k \times Y_{\ell} \times (\bar{f}_k - \bar{f}_{\ell}) \\ & + \sum_{\ell=1}^N \left[ \left( \frac{X_k \times X_{\ell}}{\rho \times D_{k,\ell}} \right) \times \left( \frac{\alpha_{\ell}}{Y_{\ell}} - \frac{\alpha_k}{Y_k} \right) \right] \times \left( \frac{\bar{\nabla} T}{T} \right) \quad \text{et } k = 1, \dots, N \end{aligned}$$

$$\Gamma_k = \sum_{\ell=1}^N \mu_{k\ell} \times Z_{k\ell} \times (\bar{V}_{\ell} - \bar{V}_k) + \sum_{\ell=1}^N \rho \times Y_k \times Y_{\ell} \times \bar{f}_k \quad \text{avec } k=1, \dots, N \quad (5.1)$$

Physiquement, cette équation considère que les gradients de concentration peuvent être dus aux vitesses de diffusion, aux gradients de pression, aux différences dans la force de volume par unité de masse sur les molécules des différentes espèces, et les effets de diffusion thermique.

## 6. Expression du flux de chaleur

On souhaite définir ici l'expression du flux de chaleur présent dans l'équation de conservation de l'énergie :

$$q = -\lambda \times \nabla T + \rho \sum_{k=1}^N h_k \times Y_k \times V_k + R \times T \times \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \left( \frac{X_\ell \times \alpha_k}{Mw_k \times D_{k\ell}} \right) \times (\bar{V}_k - \bar{V}_\ell) + q_R \quad (6.1)$$

avec :

$-\lambda \times \nabla T$  est l'expression de la loi de Fourier de la conductivité thermique de toutes les espèces  $k$

$\rho \sum_{k=1}^N h_k \times Y_k \times V_k$  représente l'enthalpie totale de toutes les espèces  $k$ ,

$R \times T \times \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \left( \frac{X_\ell \times \alpha_k}{Mw_k \times D_{k\ell}} \right) \times (\bar{V}_k - \bar{V}_\ell)$  est l'effet Dufour représente la diffusion thermique

du au gradient de fraction massique

et  $q_R$  est le flux de chaleur rayonné.

## 7. Expression du taux de réaction chimique

Le terme  $w_k^{\bullet}$  dans chaque équation de conservation des espèces (éq. (3.13)) est déterminé

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla Y_k = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_k) + w_k^{\bullet} \quad (3.13)$$

par l'expression phénoménologique du taux de réaction chimique suivante :

$$\omega_k^{\square} = Mw_k \sum_{r=1}^M (v_{k,r}'' - v_{k,r}') \times B_r \times T^{\alpha_r} \times \exp\left(-\frac{E_{a,r}}{R \times T}\right) \times \prod_{\ell=1}^N c_\ell^{v_{\ell,r}'} \quad k = 1, \dots, N \quad (7.1)$$

représentant le taux de variation de la masse de l'espèce  $k$  par unité de temps et de volume du aux différents processus chimiques.

avec  $v_{k,r}'$  et  $v_{k,r}''$  sont les coefficients stœchiométriques des réactifs et produits respectivement

pour la réaction «  $r$  »,  $B_r \times T^{\alpha_r}$  est le préfacteur d'Arrhénius de la réaction «  $r$  » (représentant la fréquence de collision),  $E_{a,r}$  est l'énergie d'activation,  $c_\ell$  est la concentration de l'espèce  $l$

qui peut également s'écrire sous la forme :

$$c_\ell = \frac{X_\ell \times P}{R \times T} = \frac{Y_\ell \times \rho}{Mw_\ell} = \frac{\rho_\ell}{Mw_\ell}$$

# Chapitre 5 : Processus physiques et schémas numériques

## 1. Classement des propriétés physiques

Nous allons analyser les méthodes aux différences finies les plus simples pour la simulation des quatre principaux processus physiques des écoulements réactifs : réactions chimiques, diffusion, convection, mouvement d'onde.

Equation	Processus physique
$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \times \rho + S$	Processus local : Source – Couplage – Réaction chimique
$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$	Processus de diffusion : Diffusion moléculaire – Conduction thermique – Diffusion thermique Rayonnement
$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial(\rho \times v)}{\partial x}$	Processus convectif : Advection – Compression – Rotation - Rayonnement
$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = v_w^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$	Ondes et oscillations : Ondes sonores – Ondes de gravité – Autres oscillations

## 2. Processus local et Réaction chimique

Considérons l'équation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \times \rho + S \quad (8.1)$$

où  $\rho$  est une variables du fluide telle que la masse volumique,  $S$  représente des processus locaux qui peuvent être fonction du temps et de l'espace  $S(x,t)$ ,  $\gamma$  est un coefficient de variation positif ou négatif des phénomènes pouvant également être fonction du temps et de l'espace  $\gamma(x,t)$ . Ainsi, l'équation peut être telle que :  $\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = \gamma(x,t) \times \rho(x,t) + S(x,t)$ .

Simplifions l'approche en considérant  $S$  et  $\gamma$  constants.

L'équation (8.1) possède une solution analytique :

$$\rho(t) = \left( \rho(0) + \frac{S}{\gamma} \right) e^{\gamma t} - \frac{S}{\gamma} \quad (8.2)$$

Si  $\gamma$  est positif la solution croît exponentiellement à partir de la valeur  $\rho(0)$  même si initialement il y a une diminution et changement de signe. Quand  $\gamma$  est négatif, la solution se relaxe exponentiellement vers une valeur asymptotique  $-S/\gamma$ .

### 2.1 Solutions explicites et implicites

On peut approximer l'équation (8.1) par une formulation simple aux différences finies :

$$\frac{\rho^n - \rho^{n-1}}{\Delta t} = S + \gamma \left[ \theta \times \rho^n + (1-\theta) \times \rho^{n-1} \right] \quad (8.3)$$

où  $\theta$  est un paramètre variant de 0 à 1. Si  $\theta=1$ , la solution est totalement implicite, et si  $\theta=0$  la solution est totalement explicite.

L'équation aux différences finies (8.3) peut être résolue pour  $\rho^n$  en termes de densité initiale  $\rho(0)$ . La solution formelle est alors :

$$\rho^n = \left( \rho(0) + \frac{S}{\gamma} \right) E(\gamma \times t) - \frac{S}{\gamma} \quad (8.4)$$

et est similaire à (8.2) et où  $E(\gamma \times t)$  l'approximation par différences finies de la fonction exponentielle  $e^{\gamma \times t}$ .

Pour l'équation particulière (8.3), on a :

$$E(\gamma \times t) \equiv \frac{1 + (1 - \theta) \times \gamma \times \Delta t}{1 - \theta \times \gamma \times \Delta t} \quad (8.5)$$

Les résultats obtenus par les méthodes aux différences finies sont comparés avec la solution exacte sur la base du facteur d'amplification est défini par le rapport :

$$A(k) = \frac{\rho^n(k)}{\rho^{n-1}(k)} \quad (8.6)$$

où  $k$  est le nombre d'onde et  $\rho^n(k)$  représente le rapport de la  $k$ -ième harmonique de Fourier au pas de temps  $n$  à sa valeur au pas de temps précédent.

Les solutions des systèmes couplés pour des problèmes réels ne tolèrent généralement pas la stabilité mathématique mais ont des comportements physiques bizarres.

La règle importante à retenir est que le pas de temps numérique doit toujours être choisi avec un facteur 2 fois plus petit la condition mathématique la plus stricte.

En pratique la condition d'un pas de temps stable par une méthode explicite a une condition de précision plus efficace que la méthode implicite.

## 2.2 Solutions asymptotiques

Pour définir une approximation asymptotique de l'équation (8.1)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \times \rho + S$$

le membre de droite est posé égal à zéro et la dérivée  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  est calculée de façon itérative en utilisant l'approximation précédente.

Par exemple, considérons l'équation (8.1) au temps  $n$  :

$$\gamma^n \times \rho^n = -S^n + \frac{\partial \rho}{\partial t} \Big)^n \quad (2.7)$$

La solution asymptotique au 1<sup>er</sup> ordre est :

$$\rho^n \approx -\frac{S^n}{\gamma^n}$$

en supposant  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  négligeable comparé aux autres termes. En incluant la dérivée par rapport au temps de  $\rho$  dans l'expression de  $\rho^n$  on obtient l'approximation suivante. Cette dérivée peut être approximée en utilisant la solution d'ordre plus faible :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)^n &\approx -\frac{1}{\Delta t} \times \left(\frac{S^n}{\gamma^n} - \frac{S^{n-1}}{\gamma^{n-1}}\right) \\ &\approx -\frac{1}{\Delta t} \times \left(\frac{S^n}{\gamma^n} - \rho^{n-1}\right) \end{aligned}$$

Ainsi, l'ordre suivant peut être écrit :

$$\rho^n \approx \frac{S^n}{\gamma^n} - \frac{\left(\frac{S^n}{\gamma^n} - \frac{S^{n-1}}{\gamma^{n-1}}\right)}{\gamma^n \times \Delta t}$$

Les principaux gains en vitesse et précision de la solution sont obtenus avec des méthodes hybrides. En particulier, considérer la combinaison d'une méthode asymptotique quand les équations sont raides et sur des temps extrêmement courts (ondes de détonation) sera nécessaire avec une méthode de second ordre pour obtenir une précision plus élevée quand les équations ne sont pas raides.

### 3. Equation de diffusion

L'équation générale de diffusion multidimensionnelle est :

$$\frac{\partial \bar{\rho}(\bar{x}, t)}{\partial t} = \nabla \bar{D}(\bar{x}, t, \bar{\rho}) \nabla \bar{\rho}(\bar{x}, t) \quad (9.1)$$

$\bar{\rho}$  et  $\bar{x}$  sont des vecteurs.

Cette équation est simplifiée ici sous forme mono-dimensionnelle et avec un coefficient de diffusion constant :

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \quad (9.2)$$

#### 3.1 Solution analytique

Le problème idéalisé défini par l'équation (9.2) permet de comparer les résultats obtenus par les algorithmes aux différences finies avec les résultats « exacts ».

On suppose ici que  $\rho$  a initialement une variation spatiale sinusoïdale telle que :

$$\rho(x, t) = \rho_0 \times (\cos(k \times x) + i \sin(k \times x)) \quad (9.3)$$

Les résultats « exacts » sont calculés par une solution analytique :

$$\rho(x, t) = \rho_0 \times e^{-D \times k^2 \times t} \times e^{-i \times k \times x} \quad (9.4)$$

Celle-ci montre une décroissance exponentielle en temps par les variations spatiales des sinus et cosinus. Le coefficient  $e^{-D \times k^2 \times t}$  est réel, la phase de chaque harmonique n'est pas affectée par l'opérateur de diffusion. Les composantes des sinus et cosinus restent séparées. Pour chaque harmonique, le profil décroît de telle manière que le taux total de  $\rho$  soit conservé. L'intégrale de conservation est :

$$\frac{d}{dt} \left\{ \int_0^{2\pi/k} \rho(x,t) \times dx \right\} = 0 \quad (9.5)$$

où la fonction  $\rho(x,t)$  est intégrée sur une seule longueur d'onde. Cette contrainte d'intégrale de conservation signifie qu'une solution initialement réelle partout  $\rho(x,0)=\rho(0)$  reste réelle.

Tout algorithme de l'équation de diffusion produira les propriétés fondamentales qualitatives suivantes :

- l'intégrale de  $\rho(x,t)$  sera conservée
- l'amplitude  $|\rho(t)|$  diminuera de façon monotone
- il n'y aura pas d'erreurs de phase introduite
- la positivité de la solution sera préservée.

### 3.2 Solutions explicites et implicites

L'équation (9.2) peut s'écrire sous forme de différences finies comme suit :

$$\frac{\rho_i^n - \rho_i^{n-1}}{\Delta t} = \frac{D \times \theta}{(\Delta x)^2} \times [\rho_{i+1}^n - 2 \times \rho_i^n + \rho_{i-1}^n] + \frac{D \times (1-\theta)}{(\Delta x)^2} \times [\rho_{i+1}^{n-1} - 2 \times \rho_i^{n-1} + \rho_{i-1}^{n-1}] \quad (9.6)$$

Quand  $\theta=0$ , le schéma est explicite et l'algorithme est moins coûteux car les nouvelles

valeurs de  $\rho$  dépendent uniquement des valeurs précédentes. Pour  $\theta = \frac{1}{2}$  l'algorithme résultant

est dit centré et l'ordre de précision mathématiques est plus élevé, tandis que  $\theta=1$  correspond à un schéma implicite qui est le plus stable.

Comme précédemment, on suppose ici que  $\rho$  a initialement une variation spatiale sinusoïdale . pour chaque mode séparé, l'équation (9.6) conduit à :

$$\frac{\rho^n(k) - \rho^{n-1}(k)}{\Delta t} = -\frac{2 \times D \times \theta}{(\Delta x)^2} \times (1 - \cos(k \times \Delta x)) \times \rho^n(k) - \frac{2 \times D \times (1-\theta)}{(\Delta x)^2} \times (1 - \cos(k \times \Delta x)) \times \rho^{n-1}(k) \quad (9.7)$$

Le facteur d'amplification pour la solution aux différences finies est :

$$A(k) = \frac{\left[ 1 - \frac{2 \times D \times \Delta t}{(\Delta x)^2} \times (1-\theta) \times (1 - \cos(k \times \Delta x)) \right]}{\left[ 1 + \frac{2 \times D \times \Delta t}{(\Delta x)^2} \times \theta \times (1 - \cos(k \times \Delta x)) \right]} \quad (9.8)$$

Le facteur d'amplification pour la solution analytique est :

$$A(k) = \frac{\rho^n(k)}{\rho^{n-1}(k)} = e^{-D \times k^2 \times \Delta t} \quad (9.9)$$

Nous pouvons maintenant déterminer les domaines de valeurs du nombre d'onde  $k$  et les pas de temps sur lesquels les algorithmes travaillent bien. Deux paramètres adimensionnels sont utiles :

$$\beta \equiv \frac{2 \times D \times \Delta t}{(\Delta x)^2} \quad \text{et} \quad k \times \Delta x$$

$\beta$  est une mesure du pas de temps par rapport au gradient de diffusion sur la taille d'une cellule  $\Delta x$  et est le nombre d'onde de l'harmonique.

La meilleure méthode pour résoudre l'équation de diffusion dépend du coefficient de diffusion.

#### 4. Processus convectif

Dans le cas idéal mono-dimensionnel, l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = - \frac{\partial}{\partial x} (\rho(x, t) \times v(x, t)) \quad (10.1)$$

décrit la convection d'une quantité  $\rho(x, t)$  par un écoulement de vitesse  $v(x, t)$

La limitation du problème au cas mono-dimensionnel exclut les rotations mais permet l'ensemble advection-compression.

Une application usuelle permet de tester les méthodes numériques pour l'équation de continuité. Celle-ci consiste à simuler le transport d'un nuage. Un nuage matériel est injecté dans un gaz et dérive avec lui. En mono-dimensionnel, la densité du nuage peut être modélisée par une onde carrée si :

- le nuage est initialement déposé sur une région finie
- l'écoulement est incompressible, tel que la densité des deux matériaux est presque constante
- et si la diffusion n'est pas présente de telle sorte qu'il n'y a pas d'interpénétration entre les deux matériaux.

Quand  $\frac{\partial v}{\partial x} = 0$ , l'équation se réduit à une équation d'advection mono-dimensionnelle :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = - v \times \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) \quad (10.2)$$

l'algorithme numérique s'écrit :

$$\frac{\rho_i^n - \rho_i^{n-1}}{\Delta t} = - v \times \left[ \theta \times \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_{i-1}^n}{2 \times \Delta x} + (1 - \theta) \times \frac{\rho_{i+1}^{n-1} - \rho_{i-1}^{n-1}}{2 \times \Delta x} \right] \quad (10.3)$$

où  $\theta$  est le paramètre d'implicité ( $\theta=0$  : schéma explicite,  $\theta=\frac{1}{2}$  : schéma centré,  $\theta=1$  : schéma implicite).

Et en utilisant le paramètre adimensionnel :

$$\varepsilon \equiv v \times \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

l'équation (10.3) devient :

$$\rho_i^n + \frac{\theta \times \varepsilon}{2} (\rho_{i+1}^n - \rho_{i-1}^n) = - \rho_i^{n-1} - \frac{(1-\theta)}{2} \times \varepsilon \times (\rho_{i+1}^{n-1} - \rho_{i-1}^{n-1}) \quad (10.4)$$

L'algorithme de la cellule donneuse permet d'écrire :

$$\rho_i^n = \rho_i^{n-1} \times (1 - \varepsilon) + \varepsilon \times \rho_{i-1}^{n-1} \quad (10.5)$$

L'algorithme de Lax-Wendroff permet d'écrire :

$$\rho_i^n = \rho_i^{n-1} - \frac{\varepsilon}{2} (\rho_{i+1}^{n-1} - \rho_{i-1}^{n-1}) + \frac{\varepsilon^2}{2} (\rho_{i+1}^{n-1} - 2 \times \rho_i^{n-1} + \rho_{i-1}^{n-1}) \quad (10.6)$$

#### 5. Ondes et oscillations

En mono dimensionnel, une onde linéaire par sa variable scalaire  $\rho$  est pilotée par l'équation d'onde au second ordre :

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = v_w^2 \times \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (11.1)$$

où  $v_w$  est la vitesse de phase de l'onde c'est-à-dire la vitesse à laquelle le profil d'onde se déplace.

L'équation (11.1) n'apparaît pas explicitement dans les équations de conservation d'écoulements réactifs mais peut être apportée par l'interaction des deux équations au premier ordre par un terme de couplage, tel qu'un gradient de pression ou la gravité. Si  $v(x, t)$  représente la vitesse de fluide, un jeu possible d'équations de premier ordre qui génère une équation d'onde est :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\rho_0 \times \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= -\frac{v_w^2}{\rho_0} \times \frac{\partial \rho}{\partial x} \end{aligned} \quad (11.2)$$

Deux algorithmes sont proposés

- algorithme explicite « saute-mouton »

$$\begin{aligned} \frac{\rho_i^n - \rho_i^{n-1}}{\Delta t} &= -v_w \times \left( \frac{v_{i+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} - v_{i-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right) \\ \left( \frac{v_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - v_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right) &= -v_w \times \frac{\rho_i^n - \rho_{i-1}^n}{\Delta x} \end{aligned} \quad (11.3)$$

La variable  $\rho$  est définie à l'ancien et nouveau temps et au centre des cellules. La variable vitesse  $v$  est définie aux interfaces des cellules et aux temps intermédiaires qui sont entre deux pas de temps. Ce sont des grilles étagées.

- algorithme implicite

$$\begin{aligned} \frac{\rho_i^n - \rho_i^{n-1}}{\Delta t} &= -\frac{v_w}{2} \times \left( \frac{v_{i+\frac{1}{2}}^n - v_{i-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} + \frac{v_{i+\frac{1}{2}}^{n-1} - v_{i-\frac{1}{2}}^{n-1}}{\Delta x} \right) \\ \left( \frac{v_{i+\frac{1}{2}}^n - v_{i+\frac{1}{2}}^{n-1}}{\Delta t} \right) &= -\frac{v_w}{2} \times \left( \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_i^n}{\Delta x} + \frac{\rho_{i+1}^{n-1} - \rho_i^{n-1}}{\Delta x} \right) \end{aligned} \quad (11.4)$$

## Chapitre 6 : Couplage des processus physiques dans les écoulements réactifs

Le programme d'un écoulement réactif devrait être un assemblage de modules numériques relativement indépendants où chacun représente un processus physique ou chimique particulier dans les équations de conservation. Ces modules devraient être séparés de telle sorte qu'ils puissent être reconstruits ou changés indépendamment par l'utilisateur. Cette approche modulaire de construction de programmes de calculs complexes crée une flexibilité et une robustesse dans les algorithmes et techniques.

Une conséquence de cette approche modulaire est que les erreurs numériques pour un processus peuvent être isolées et ainsi ne pas affecter de façon désastreuse la solution des autres processus.

La philosophie générale pour éviter les inévitables imprécisions locales dans la solution est de « protéger » chaque partie d'un calcul à partir de l'entrée qu'il reçoit des autres modules du processus.

Le cas le plus simple de modélisation d'un écoulement réactif décrit un écoulement gazeux compressible avec des réactions. Un tel programme résout les équations différentielles partielles couplées pour la convection, la diffusion, la quantité de mouvement, l'énergie, la masse, les espèces et un jeu d'équations différentielles ordinaires représentant les réactions chimiques des espèces.

La procédure modulaire commence par une première étape d'initialisation des variables puis exécute une série de sous étapes distinctes permettant

1. d'établir ou modifier le maillage
2. sélectionner le pas de temps de l'ensemble
3. calculer les termes d'énergie, de masse ou autres termes source
4. évaluer la convection
5. intégrer les réactions d'espèces
6. intégrer les processus de diffusion

Les processus (2) à (4) pourraient être désignés par  $G_i$  dans l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = G_1 + G_2 + G_3 + \dots + G_M$$
 où représente les processus (termes de cinétique chimique, diffusion, conduction thermique...).

Les résultats partiels sont alors couplés et les variables physiques sont mises à jour quand une nouvelle information est générée par les sous-étapes séparées.

Initialiser les variables
* Démarrer le pas de temps
1. Etablir la grille de calculs appropriée
2. Sélectionner le pas de temps global $\Delta t_g$
3. Déposition de l'énergie externe ( $G_1$ ) <ul style="list-style-type: none"> <li>- Problème dépendant du temps par exemple</li> <li>- <math>T^0 \rightarrow T^1, P^0 \rightarrow P^1, Y^0 \rightarrow Y^1, \text{etc}</math></li> <li>- les variables sont maintenant labellisées avec l'indice (1)</li> </ul>
4. Transport convectif ( $G_2$ ) <ul style="list-style-type: none"> <li>- variables convectées (1) de <math>t</math> à <math>t + \Delta t_g</math></li> <li>- <math>\rho^1 \rightarrow \rho^2, (\rho \times v)^1 \rightarrow (\rho \times v)^2, E^1 \rightarrow E^2</math></li> <li>- Calculer <math>v^2</math> à partir de <math>(\rho \times v)^2 / \rho^2</math></li> <li>- Calculer l'énergie interne <math>\varepsilon^2</math> à partir de <math>E^2, (\rho \times v)^2</math>, et <math>\rho^2</math></li> <li>- Utiliser l'équation d'état pour trouver <math>T^2, P^2</math>, et <math>\gamma^2</math></li> <li>- les variables sont maintenant labellisées avec l'indice (2)</li> </ul>
5. Cinétiques chimiques (possibilité de sous-cycles avec un pas de temps plus court) ( $G_3$ ) <ul style="list-style-type: none"> <li>- Evaluer les espèces à partir des réactions de <math>t</math> à <math>t + \Delta t_g</math></li> <li>- <math>Y^2 \rightarrow Y^3</math> et <math>T^2 \rightarrow T^3</math> quand il y a résolution de l'équation pour T</li> <li>- Utiliser l'équation d'état pour trouver <math>\varepsilon^3, T^3, P^3</math>, et <math>\gamma^3</math></li> <li>- les variables sont maintenant labellisées avec l'indice (3)</li> </ul>
6. Processus de diffusion (moléculaire, conduction thermique et viscosité) ( $G_4$ ) <ul style="list-style-type: none"> <li>- Evaluer les espèces à partir des réactions de <math>t</math> à <math>t + \Delta t_g</math></li> <li>- <math>Y^3 \rightarrow Y^4</math> et <math>T^3 \rightarrow T^4</math> quand il y a résolution de l'équation pour T</li> <li>- Utiliser l'équation d'état pour trouver <math>\varepsilon^4, T^4, P^4</math>, et <math>\gamma^4</math></li> <li>- les variables sont maintenant labellisées avec l'indice (4)</li> </ul>
7. Mettre à jour les variables et préparer le pas de temps suivant $\rho^0 = \rho^4, (\rho \times v)^0 = (\rho \times v)^4, E^0 = E^4$ $T^0 = T^4, P^0 = P^4, Y^0 = Y^4, \gamma^0 = \gamma^4$
Démarrer un nouveau pas de temps (aller à *) avec les nouvelles variables labellisées (0)

Table 1 - Programme d'écoulement réactif : Temps global – Explicite – Convection - Réactions chimiques des espèces – Diffusion

## 1. Contrôle du pas de temps

La première étape dans la sélection du pas de temps global  $\Delta t_g$  est d'estimer les pas de temps individuels nécessaires pour les différents algorithmes utilisés pour résoudre les processus contribuant au phénomène à simuler.

Considérons le programme décrit dans la table 1. Si chaque terme est évalué par un algorithme explicite, nous définissons :

$$\Delta t_g = \min(\Delta t_{\text{conv}}, \Delta t_{\text{visc}}, \Delta t_{\text{cond}}, \Delta t_{\text{moldif}}) \quad (14.1)$$

et en utilisant les algorithmes explicites pour ces processus :

$$\Delta t_{\text{conv}} = C_{\text{conv}} \times \min\left(\frac{\Delta}{|v| + c_s}\right) \quad (14.2)$$

$$\Delta t_{\text{cond}} = C_{\text{cond}} \times \min\left(\frac{\Delta^2}{(2 \times \lambda) / (\rho \times c_p)}\right) \quad (14.3)$$

$$\Delta t_{\text{visc}} = C_{\text{visc}} \times \min\left(\frac{\Delta^2}{(2 \times \mu) / \rho}\right) \quad (14.4)$$

$$\Delta t_{\text{moldif}} = C_{\text{moldif}} \times \min\left(\frac{\Delta^2}{2 \times D}\right) \quad (14.5)$$

où  $\Delta$  est la taille de la cellule.

Le coefficient  $C_{\text{conv}}$  est le nombre CFL pour l'algorithme particulier de la convection, les autres coefficients  $C$  représentent un nombre équivalent pour les autres algorithmes.

Même s'il existe des méthodes d'estimation de pas de temps approprié pour chaque processus pris individuellement, généralement basé sur la limite de stabilité de l'algorithme utilisé, il n'y a pas de méthode pour déterminer le pas de temps adéquat pour l'ensemble du système quand plusieurs processus interagissent.

En fonction de la nature de l'interaction entre les processus, des sous cycles peuvent être utilisés.

Dans le cas particulier des ondes de chocs fortes ou des chocs couplés à un dégagement d'énergie, il est souvent nécessaire de réduire le pas de temps. Une correction habituelle du pas de temps est, à chaque nouveau pas de temps, de multiplier la vitesse du son utilisée pour évaluer le pas de temps par un facteur qui tient compte des conditions de saut du choc :

$$N_{\text{CFL}} = c_s \times \frac{P_{\text{max}}}{P} \times \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (14.6)$$

Où  $N_{\text{CFL}}$  est le nombre de CFL. Une autre approche habituelle pour simuler les détonations consiste à utiliser une autre critère en coordination avec la condition CFL, se sont les deux nombres suivants :

$$N_{\text{CFL}} = \frac{\Delta t}{\Delta x} \times c_s^{\text{max}} \quad \text{et} \quad N_{\text{rr}} = \frac{\Delta x}{c_s^{\text{max}}} \times W^{\text{max}} \quad (14.7)$$

où est la vitesse de réaction maximale telle que est une caractéristique de temps de réaction. Un critère raisonnable semble être d'avoir et dans ce cas l'énergie libérée va dans au moins 5 cellules en 10 ou plus pas de temps.

## **2. Problème multidimensionnel**

Dans le cas d'écoulement multidimensionnel une méthode consiste à séparer les directions et à les considérer comme des processus séparés, chaque variable de l'écoulement est alors mise à jour dans chaque direction.

Cette méthode produit quelques dissymétries dans les calculs. Très souvent, des directions alternées durant chaque pas de temps global est suffisant.

# **Deuxième partie**

## **Applications**

# Application 1 : Transfert de masse

## Partie 1

Considérons une goutte d'eau qui a un diamètre initial  $d (= 2a)$  placé dans l'air calme et sec. La goutte s'évapore et la vapeur d'eau est transportée dans l'air ambiant.

1. Obtenir une expression du taux de transfert de masse  $\dot{j}_k$  où  $k$  désigne l'eau. Le profil massique radial autour de la goutte s'évaporant est représenté par la relation :

$$\frac{Y_k - Y_{k\infty}}{Y_{kw} - Y_{k\infty}} = \frac{a}{r} \text{ pour } r \geq a$$

où les indices  $w$  et  $\infty$  se réfèrent à la surface de la goutte et au champ lointain respectivement.

2. Supposant que  $V_k \gg v$ , développer une expression pour  $m_k^*(r)$ .
3. Développer une expression pour  $m_k^*(r)$ . Que devient cette expression pour  $r = a$  ?
4. Par analogie avec le transfert de chaleur, si  $m_k^*(r)$  est exprimé par  $h_m \times (Y_{kw} - Y_{k\infty})$  où  $h_m$  représente le coefficient de convection, obtenir l'expression pour le nombre de Sherwood  $Sh = \frac{h_m \times d}{\rho \times D_{kl}}$  en  $r = a$ .

5. Application : Déterminer le transport de masse de l'eau dans l'air par unité d'aire d'une goutte sphérique de rayon  $50\mu\text{m}$  à une pression totale de  $100\text{kPa}$  en  $r = a$ . La température de la goutte est  $T_w = 80^\circ\text{C}$ . A l'équilibre de phase, la pression partielle de la vapeur d'eau  $p_{kw}$  est la même que la pression saturante à la surface de la goutte :

$$p_{kw} = p_k^{\text{sat}} = 1.8 \times 10^8 \times \exp(-5319/T_w) \text{ en kPa}$$

$$\text{Supposer } D_{kl} = 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

6. Pour  $r = a$ , calculer les vitesses  $v_k, v$  et  $V_k$ . Discuter.
7. La surface de la goutte régresse en fonction du temps. Montrer que l'expression de  $d^2$  par rapport au temps en termes de taux d'évaporation constante  $\alpha_e$  est donnée par la loi dite en  $d^2$  :

$$d^2 = d_0^2 - \alpha_e \times t \text{ avec } \alpha_e = 4 \times Sh \times \rho \times D \times (Y_{kw} - Y_{k\infty}) \times \frac{1}{\rho_1}$$

où  $\rho_1$  désigne la masse volumique de l'eau liquide ( $1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ )

8. Déterminer la valeur de  $\alpha_e$  et le temps d'évaporation.

## **Partie 2**

Un des éléments qu'on trouve dans le charbon est le Soufre, qui avec l'humidité de l'air se combine pour donner l'acide sulfurique (une des causes des pluies acides). Le charbon de Wyoming (Etats-Unis) est réputé pour contenir très peu de Soufre.

Considérons ici un élément de charbon extrait d'une mine du Wyoming. Celui-ci a la composition massique suivante : 10% d'humidité, 5% de cendres et 85% de combustibles. Le diamètre de cet élément est de 80  $\mu\text{m}$ .

Le pouvoir calorifique supérieur est de 26.54  $\text{MJ.kg}^{-1}$ .

La densité de la particule est 1300  $\text{kg.m}^{-3}$ .

Supposons que l'eau est dispersée à travers la particule telle que la densité apparente de l'eau est égale au produit de la teneur en humidité par la densité de la particule. La particule s'échauffe et se vaporise à  $T_p$ . La vapeur est transportée loin de la particule par transport

massique piloté par le nombre de Sherwood :  $\text{Sh} = \frac{h_{m,kl} \times d}{\rho \times D_{kl}}$  où  $d = 2a$ . Supposer que

$\rho \times D_{kl} = \rho \times D$  a une valeur constante égale à  $8 \times 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ .

La température de la particule est  $T_w = 80^\circ\text{C}$ . La pression saturante est donnée par :

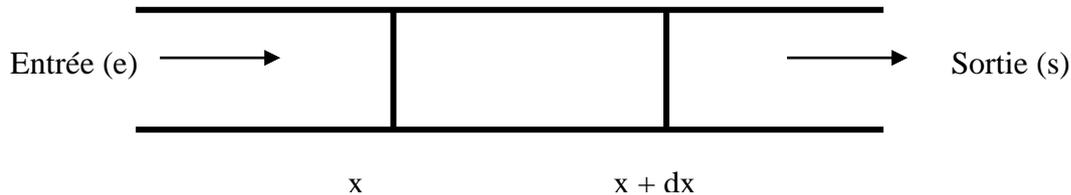
$p_{kw} = p_k^{\text{sat}} = 1.8 \times 10^8 \times \exp(-5319/T_w)$  en kPa.

1. Estimer le temps de séchage. Utiliser la relation de Ranz-Marshall  $\text{Sh} = 2 + 0.6\text{Re}^{1/2} \text{Sc}^{1/3}$  avec  $\text{Re} = 4$  et  $\text{Sc} = 1$ .
2. Estimer le coefficient de diffusion de l'eau dans l'air en considérant la fraction massique de l'eau trouvée dans la partie 1.

## Application 2 : Réacteur à écoulement piston

On s'intéresse ici au principe du réacteur à écoulement piston, appelé encore Plug Flow Reactor (PFR).

Un réacteur à écoulement piston est un réacteur dans lequel il n'y a pas de variation radiale des propriétés du système.



$Q^{\bullet}$  Energie apportée par unité de temps et de surface ( $J.m^{-2}.s^{-1}$ )

$C$  circonférence (m)

$N_{k,chem}^{\bullet}$  débit molaire des espèces  $k$  dû à la réaction chimique ( $mol.m^{-3}.s^{-1}$ )

$A$  surface ( $m^2$ )

Le principe du réacteur à écoulement piston est de créer un écoulement où le mélange progresse sans échange de matière entre les couches parallèles. Le temps de séjour dans le réacteur est fixé. Le principal avantage de ce type de réacteur réside dans le fait qu'il y a peu de variation dans la qualité d'un produit sur une longue période de temps et dans sa haute performance. Toutefois, ce type de réacteur nécessite un contrôle parfait des flux entrée et sortie.

On ne considère pas le réacteur dans sa totalité mais on le divise en sections.

Les hypothèses liées au modèle du réacteur piston adiabatique sont les suivantes :

- Le mélange radial est considéré comme parfait
- L'écoulement est de type piston
- La densité est constante
- Il n'y a pas de mélange axial.
- Les forces de volume et de pression sont négligées

Le réacteur est considéré à l'état stationnaire mais possède un profil de température et de concentration en fonction de son axe.

1. A partir de la conservation de la masse des espèces, montrer que :

$$\frac{dm_k^{\bullet}}{dx} = w_{km}^{\bullet}$$

avec

$m_k^{\bullet}$  débit massique pour l'espèce  $k$  par unité de surface

$w_{km}^{\bullet}$  taux massique de réaction pour l'espèce  $k$  par unité de volume

Exprimer cette même équation en termes molaires.

2. A partir de la conservation de l'énergie, déduire l'expression suivante en supposant l'énergie cinétique et l'énergie potentielle négligeables ainsi que les forces de volume et de surface:

$$0 = Q'' \frac{C}{A} - \sum_k w_k''' \bar{h}_k - \sum_k N_k'' c_{P,k} \frac{dT}{dx}$$

avec

$w_k'''$  taux de réaction pour l'espèce k par unité de surface

$\bar{h}_k$  enthalpie de l'espèce k

$N_k''$  flux molaire pour l'espèce k par unité de surface

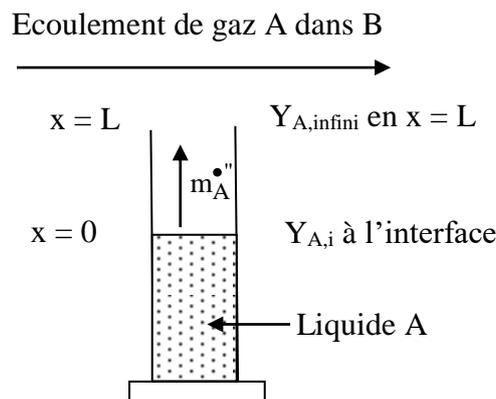
$c_{P,k}$  chaleur spécifique à pression constante pour l'espèce k

3. Appliquer ce concept avec une réaction unique :  $\text{CO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2$

## Application 3 : Equations de conservation Le problème de Stefan

### Première partie : Mise en équations

Considérons un liquide A maintenu à une hauteur fixée dans un cylindre de verre comme illustré sur la figure.



Un mélange de gaz A et de gaz B s'écoule au sommet du cylindre. Si la concentration de A dans le gaz s'écoulant est inférieure à la concentration de A au niveau de l'interface liquide-vapeur, une force permettant le transfert de masse existe et les espèces A diffuseront de l'interface liquide-gaz à l'extrémité ouverte du tube.

Si on suppose qu'un état stationnaire existe (i.e. le liquide est rempli à une vitesse telle que le niveau de liquide reste constant, ou l'interface régresse si lentement que son mouvement peut être négligé), et de plus, on suppose que B est insoluble dans le liquide A, il n'y aura pas de transport net de B dans le tube.

1. Exprimer la conservation globale de masse du système et le débit massique de l'écoulement des espèces A.
2. En appliquant la loi de Fick, exprimer le débit massique de A en fonction des fractions massiques de A en x et à l'interface
3. En déduire l'expression suivante de la distribution de la fraction massique de A dans le tube :

$$Y_A(x) = 1 - (1 - Y_{A,i}) \exp\left(-\frac{m_A''}{\rho D_{AB}} x\right)$$

## Deuxième partie : Application

Du benzène liquide ( $C_6H_6$ ) à 298 K est contenu dans un tube de 1cm de diamètre et maintenu à une hauteur de 10 cm en dessous de l'extrémité du tube qui est ouverte à l'atmosphère.

Les propriétés du benzène sont :

Température d'ébullition  $T_b = 353$  K à  $P_0 = 1$  atm

Enthalpie de formation du benzène à l'état gazeux  $h_{f,Bg} = 393$  kJ.kg<sup>-1</sup> à  $T_b$

Masse moléculaire du benzène 78.108 g.mol<sup>-1</sup>

Densité du benzène liquide 879 kg.m<sup>-3</sup>

Coefficient de diffusion du benzène dans l'air  $0.88 \times 10^{-5}$  m<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup> à 298 K

Masse moléculaire de l'air 28.85 g.mol<sup>-1</sup>

$$P_{\text{sat}} = P_0 \exp \left[ - \frac{h_{f,Bg}}{R} \left( \frac{1}{T_{\text{Psat}}} - \frac{1}{T_b} \right) \right]$$

- 1- Calculer la fraction molaire du benzène à l'interface
- 2- Calculer la fraction massique du benzène à l'interface
- 3- Calculer la densité moyenne de gaz dans le tube
- 4- Calculer le débit d'évaporation (kg.s<sup>-1</sup>) du benzène
- 5- Quel est le temps nécessaire pour évaporer 1cm<sup>3</sup> de benzène ?

## Application 4 : Equations de conservation Formulation de Shvab-Zeldovich dans les problèmes de couche limite

La formulation de Shvab-Zeldovich élimine les termes sources typiquement associés aux réactions chimiques globales et réduit à une forme similaire l'équation de conservation d'enthalpie et des espèces. Tandis que l'équation de conservation des espèces peut être appliquée à des réactions à plusieurs étapes, cette formulation est très usuelle pour des réactions à une ou deux étapes.

- Pour les espèces k, l'équation de conservation des espèces s'écrit :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla Y_k = -\nabla \cdot \vec{j}_k + w_k$$

soit encore :  $\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho v_x \frac{\partial Y_k}{\partial x} + \rho v_y \frac{\partial Y_k}{\partial y} = -\frac{\partial j_k}{\partial x} - \frac{\partial j_k}{\partial y} + w_k$

Dans le cas d'une couche limite laminaire stationnaire, cette équation se réduit à :

$$\rho v_x \frac{\partial Y_k}{\partial x} + \rho v_y \frac{\partial Y_k}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho D \frac{\partial Y_k}{\partial y} \right) + w_k \quad (1.1)$$

- L'enthalpie thermique s'écrit :

$$\rho \frac{\partial h_t}{\partial t} + \rho v_x \frac{\partial h_t}{\partial x} + \rho v_y \frac{\partial h_t}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h_t}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h_t}{\partial y} \right) + \sum w_{fk} h_c$$

qui se simplifie dans l'étude de la couche limite par :

$$\rho v_x \frac{\partial h_t}{\partial x} + \rho v_y \frac{\partial h_t}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h_t}{\partial y} \right) - w_F h_c \quad (1.2)$$

Les termes de source chimique dans les équations (1.1) et (1.2) peuvent être éliminés en combinant les deux relations. Ceci est la base des relations de Shvab-Zeldovich.

### Application :

La fenêtre d'un avion est faite en Plexiglass. Le Plexiglass se décompose à environ 600K et produit des monomères qui peuvent être représentés par la formule chimique  $C_5H_8O_2$ . les monomères se mélangent avec l'air et brûlent.

Convertir les équations de conservation pilotes en formulation de Shvab-Zeldovich en supposant la réaction chimique globale stœchiométrique à une étape. On pourra considérer dans ce cas la réaction dans l'oxygène.

## Application 5 : Equations de conservation Déflagration en phase gazeuse

1. On considère un milieu gazeux parfait, homogène et réactif constitué d'un mélange d'air (composition  $O_2 + 4 N_2$ ) et de méthane ( $CH_4$ ). On désigne par :

A l'oxydant  $O_2$

B le combustible  $CH_4$

P les produits de combustion ( $CO_2, H_2O$ )

N les gaz inertes ( $N_2$ )

On considère les fractions massiques  $Y_A, Y_B, Y_P$  et  $Y_N$ .

- 1.1. Ecrire la réaction stœchiométrique

- 1.2. Etablir la relation existant entre  $Q_B, Q_R, Y_B^i, Y_B^f$  et la masse molaire du combustible  $M_{WB}$  si  $Q_B$  désigne la chaleur de combustion standard à la température initiale du mélange  $T_i = T_0$  ( $T_0$  température standard) exprimée en Joule par mole de combustible B, si  $Q_R$  désigne cette même chaleur de réaction exprimée en Joule par unité de masse du mélange et si  $Y_B^i$  et  $Y_B^f$  désignent les fractions massiques avant et après la réaction de combustion,

- 1.3. Application numérique : déterminer  $Q_R$  dans le cas du mélange air-méthane avec un excès d'air de 2. On considère la réaction complète (consommation totale de  $CH_4$ ).

$$H_{f,CH_4}^* = -74.873 \text{ kJ.mol}^{-1} ; H_{f,CO_2}^* = -393.521 \text{ kJ.mol}^{-1} ; H_{f,H_2O}^* = -241.827 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

2. Une onde combustion plane (déflagration) se propage dans ce milieu dans la direction  $\overline{Oy}$  avec une vitesse  $\overline{v}_y$  : vitesse normale de propagation de la flamme par rapport au gaz au repos dirigée vers les gaz frais.

Pour simplifier les calculs, on suppose le groupe d'hypothèses (A) suivant :

- régime permanent (température de concentration en chaque point de flamme ne dépendant pas du temps)
- phénomène unidimensionnel (les paramètres varient dans une direction normale à l'onde de déflagration : direction  $Oy$ )

- 2.1. Ecrire l'équation de conservation de la masse pour chaque espèces (k)

- 2.2. On définit :

- une variable réduite d'espace  $\xi$  telle que :  $\frac{d\xi}{\xi} = \frac{v_y}{D} dy$

- une fraction massique réduite  $\alpha_k = \frac{Y_k - Y_k^i}{Y_k^f - Y_k^i}$

Réduire l'équation locale de conservation de la masse pour chacune des espèces (k).

3. Si le nombre de Lewis est égal à l'unité, l'équation locale d'énergie par unité de masse s'écrit :

$$\rho \frac{D}{Dt} \left( \sum_k Y_k \int_{T_i}^T c_{P_k} dT \right) = \text{div} \left( \frac{\lambda}{c_P} \overrightarrow{\text{grad}} \left( \sum_k Y_k \int_{T_i}^T c_{P_k} dT \right) \right) - \sum_k (h_c)_k w_k \dot{\bullet} + \sum_k F_k \overrightarrow{J_{Dk}} + \Phi + \frac{DP}{Dt}$$

3.1. Réduire l'expression de cette équation dans le cas :

- de la combustion adiabatique (toute l'énergie libérée par la combustion sert à chauffer les produits de combustion)
- d'un mélange idéal de gaz parfaits
- des échanges de chaleur uniquement par conduction
- le nombre de Lewis est égal à l'unité,

en appliquant les hypothèses (A) et en négligeant :

- les variations de pression
- les forces extérieures
- les termes du premier ordre en  $\overrightarrow{V_{Dk}}$
- la viscosité (fluide idéal)

On utilisera une température réduite :

$$\beta = \frac{\sum_k Y_k \int_{T_i}^T c_{P_k} dT}{Q_R^i}$$

et la variable réduite  $\xi$  définie précédemment.

3.2. Montrer que :  $\beta = \frac{T - T_i}{T_f - T_i}$

4. Comparaison des équations réduites de conservation de masse et de l'énergie.

4.1. Montrer à l'aide des deux équations réduites que :  $\beta = \alpha_B + a\xi + b$  où a et b sont des constantes

4.2. Après avoir explicité les conditions aux limites pour  $y \rightarrow \pm \infty$ , montrer que :

$$\frac{T - T_i}{T_f - T_i} = \frac{Y_B - Y_B^i}{Y_B^f - Y_B^i}$$

5. Calcul de la vitesse fondamentale de propagation  $V_f$  (méthode de Zeldovich). Si on stabilise le front de flamme dans un plan  $y = 0$ , en faisant écouler le mélange gazeux dans le sens des  $y$  négatifs à la vitesse  $v_y$ , on voit que l'on peut diviser l'espace en deux régions par un plan  $y = 0$  correspondant à une température  $T = T_0$ , choisie de telle façon que :

- pour  $T < T_0$  ( $y > 0$ ) on peut négliger le terme de réaction chimique (zone de préchauffage)
- pour  $T_0$  proche de  $T_f$  on peut négliger la variation de température (zone de réaction chimique)

5.1. Intégrer l'équation de l'énergie dans la zone de préchauffage dans le cas où  $c_p = \text{cste}$  et démontrer que :

$$\lambda \left( \frac{dT}{dy} \right)_0 = \rho c_p v_y (T_0 - T_i)$$

5.2. Intégrer l'équation de l'énergie dans la zone de réaction et démontrer que :

$$\lambda \left( \frac{dT}{dy} \right)_{O'} = - \sqrt{\int_{T_f}^{T_{O'}} 2\lambda \sum_k (h_c)_k w_k \cdot dT}$$

5.3. En déduire une expression de  $v_y$

# **Troisième partie**

## **Annexes**

# Annexes

## Tables des constantes thermochimiques

TABLE B-2  
FUNCTIONS FOR PREDICTION OF TRANSPORT PROPERTIES OF GASES AT  
LOW DENSITIES<sup>a</sup>

$\kappa T/\epsilon$ or $\kappa T/\epsilon_{AB}$	$\Omega_{\mu} = \Omega_{\kappa}$ (For viscosity and thermal conductivity)	$\Omega_{\mathcal{D},AB}$ (For mass diffusivity)	$\kappa T/\epsilon$ or $\kappa T/\epsilon_{AB}$	$\Omega_{\mu} = \Omega_{\kappa}$ (For viscosity and thermal conductivity)	$\Omega_{\mathcal{D},AB}$ (For mass diffusivity)
0.30	2.785	2.662	2.50	1.093	0.9996
0.35	2.628	2.476	2.60	1.081	0.9878
0.40	2.492	2.318	2.70	1.069	0.9770
0.45	2.368	2.184	2.80	1.058	0.9672
0.50	2.257	2.066	2.90	1.048	0.9576
0.55	2.156	1.966	3.00	1.039	0.9490
0.60	2.065	1.877	3.10	1.030	0.9406
0.65	1.982	1.798	3.20	1.022	0.9328
0.70	1.908	1.729	3.30	1.014	0.9256
0.75	1.841	1.667	3.40	1.007	0.9186
0.80	1.780	1.612	3.50	0.9999	0.9120
0.85	1.725	1.562	3.60	0.9932	0.9058
0.90	1.675	1.517	3.70	0.9870	0.8998
0.95	1.629	1.476	3.80	0.9811	0.8942
1.00	1.587	1.439	3.90	0.9755	0.8888
1.05	1.549	1.406	4.00	0.9700	0.8836
1.10	1.514	1.375	4.10	0.9649	0.8788
1.15	1.482	1.346	4.20	0.9600	0.8740
1.20	1.452	1.320	4.30	0.9553	0.8694
1.25	1.424	1.296	4.40	0.9507	0.8652
1.30	1.399	1.273	4.50	0.9464	0.8610
1.35	1.375	1.253	4.60	0.9422	0.8568
1.40	1.353	1.233	4.70	0.9382	0.8530
1.45	1.333	1.215	4.80	0.9343	0.8492
1.50	1.314	1.198	4.90	0.9305	0.8456
1.55	1.296	1.182	5.0	0.9269	0.8422
1.60	1.279	1.167	6.0	0.8963	0.8124
1.65	1.264	1.153	7.0	0.8727	0.7896
1.70	1.248	1.140	8.0	0.8538	0.7712
1.75	1.234	1.128	9.0	0.8379	0.7556
1.80	1.221	1.116	10.0	0.8242	0.7424
1.85	1.209	1.105	20.0	0.7432	0.6640
1.90	1.197	1.094	30.0	0.7005	0.6232
1.95	1.186	1.084	40.0	0.6718	0.5960
2.00	1.175	1.075	50.0	0.6504	0.5756
2.10	1.156	1.057	60.0	0.6335	0.5596
2.20	1.138	1.041	70.0	0.6194	0.5464
2.30	1.122	1.026	80.0	0.6076	0.5352
2.40	1.107	1.012	90.0	0.5973	0.5256
			100.0	0.5882	0.5170

<sup>a</sup> Taken from J. O. Hirschfelder, R. B. Bird, and E. L. Spotz, *Chem. Revs.*, **44**, 205 (1949).

Table A.3 Lennard-Jones Parameters

Species	Molecular Weight	$\epsilon/k_B, K$	$\sigma, nm$	$\epsilon/k_B, K$	$\sigma, nm$	$b_{\sigma}, m^3/kmol \times 10^3$
Al	26.98	2750	0.2655			
Air	28.96	78.6	0.3711	99.2	0.3522	55.11
Ar	39.95	93.3	0.3542	119.8	0.3405	49.80
B	10.81	93.3	0.2265			
BO	26.81	3331	0.2944			
B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	69.62	596	0.4158			
Br	79.92	236.6	0.3672			
Br <sub>2</sub>	159.83	507.9	0.4296	520	0.427	
C	12.01	2092	0.3385			
CCl <sub>4</sub>	153.84	327	0.5881			
CF <sub>4</sub>	88.01	137	0.3882			
CH	13.009	68.6	0.3370			
CH-CH	26.018	185	0.4221			
CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub>	28.06	205	0.4232			
CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	84.94	406	0.4759			
CH <sub>3</sub> Cl	50.49	855	0.3375			
CH <sub>3</sub> OH	32.05	481.8	0.3626			
CH <sub>4</sub>	16.043	148.6	0.3758	148.2	0.3817	70.16
CHCl <sub>3</sub>	119.39	327	0.543			
CN	26.02	75.0	0.3856			
CO	28.01	91.7	0.3690	100.2	0.3763	67.22
CO <sub>2</sub>	44.01	195.2	0.3941	189.0	0.4486	113.9
COS	60.08	335	0.413			
CS <sub>2</sub>	76.14	488	0.4438			
<i>i</i> -C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	58.14	313	0.5341			
<i>n</i> -C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	58.14	410	0.4997			
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	26.038	231.8	0.4033			
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	28.054	224.7	0.4163	199.2	0.4523	116.7
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	30.07	230	0.4418		0.422	
C <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	52.04	339	0.438			
<i>n</i> -C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH	60.1	576.7	0.455			
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	44.09	254	0.5061			
<i>i</i> -C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	58.12	330.1	0.528			
C <sub>4</sub> H <sub>10-n</sub>	58.12	531.4	0.469			
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	72.15	345	0.5769			
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	78.11	412.3	0.5349			
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	78.11	440	0.5270			
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	84.16	297.1	0.618			
<i>c</i> -C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	84.16	324	0.6093			
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	86.17	413	0.5909			
C <sub>6</sub> H <sub>18</sub>	114.22	320	0.7451			
Cl	35.45	130.8	0.3613			

... (CONTINUED)

Species	Molecular Weight	$\epsilon/k_b, K$	$\sigma, nm$	$\epsilon/k_b, K$	$\sigma, nm$	$b_{02}, m^3/kmol \times 10^3$
Cl <sub>2</sub>	70.91	316.0	0.4217			
F	18.99	112.6	0.2986			
F <sub>2</sub>	37.99	112.6	0.3357			
H	1.008	37.0	0.2708			
HBr	80.92	449.0	0.3353			
H <sub>2</sub>	2.016	59.7	0.2827	29.2	0.287	29.76
H <sub>2</sub> O	18.016	809.1	0.2644			
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	34.016	389.3	0.420			
HCl	36.47	344.7	0.3339			
HCN	27.03	569.1	0.3630			
He	4.00	10.22	0.2551	10.22	0.2556	21.07
HF	20.01	330.0	0.3148			
I <sub>2</sub>	253.82	550	0.4982			
Kr	83.80	190	0.361			
N	14.007	71.4	0.3298			
NH	15.015	65.3	0.3312			
NH <sub>3</sub>	17.031	558.3	0.2900			
NO	30.008	116.7	0.3492	131.0	0.317	40.0
N <sub>2</sub>	28.013	71.4	0.3798	95.05	0.3698	63.78
N <sub>2</sub> O	44.02	232.4	0.3828	189.0	0.459	122.0
Ne	20.18	32.8	0.2820	35.60	0.2749	26.21
O	16.000	106.7	0.3050			
OH	17.008	79.8	0.3147			
O <sub>2</sub>	31.999	106.7	0.3467	117.5	0.358	57.75
S	32.07	847	0.384			
SF <sub>6</sub>	146.7	200.9	0.551			
SO	48.07	301	0.399			
SO <sub>2</sub>	64.07	335.4	0.411			
SO <sub>2</sub>	64.07	252	0.4290			
Xe	131.3	229	0.4055			

Note: If data are not found, use the approximate formulae:  $\epsilon/k_b = 0.77 T_b + 1.15 T_{mp} + 1.9 T_{bp}$ , where  $T_b$  is the boiling point in K;  $T_{mp}$ , melting point in K;  $\sigma$  (nm) =  $0.841 \bar{v}_c^{1/3}$  ( $m^3/kmol$ ),  $1.166 \bar{v}_b^{1/3}$ ,  $1.122 \bar{v}_m^{1/3}$ .  $\bar{v}_c$ ,  $\bar{v}_b$ ,  $\bar{v}_m$  are specific volumes—critical, boiling, and melting, respectively. The first set (columns 3 and 4) is from viscosity data and the second (columns 5 and 6) from second virial coefficient data.  $b_{02} = (2/3) \pi \sigma^3 N_{av} \times 10^{-27} m^3/kmol$ , where  $\sigma$  is in nm. It is suggested that the viscosity data be used exclusively for transport coefficient calculations and that the second virial coefficient be used exclusively for equation of state calculations.

Source: Data taken from Svehla, R.A., NASA Technical Report R-132, Lewis Research Center, Cleveland, OH, 1962. Part of data and tables taken from Hirshfelder, J.O., Curtis, C.F., and Bird, R.B., *Molecular Theory of Gases and Liquids*, John Wiley & Sons, New York, 1954. (With permission); also see Reid, R.C., Prausnitz, J.M., and Poling, B.E., *The Properties of Gases and Liquids*, 4th ed., McGraw-Hill, New York, 1987.

# Récapitulatif des équations de conservation

## Conservation de la masse

### Forme non conservative

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} \rho + \rho \text{div } \vec{v} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + v_y \frac{\partial \rho}{\partial y} + v_z \frac{\partial \rho}{\partial z} + \rho \left( \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = 0$$

### Forme conservative

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} = 0$$

### Forme intégrale

$$\iiint_{V(t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \iint_{\partial V(t)} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS = 0$$

Ou encore :

$$\iiint_{V(t)} \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) \right] dV = 0$$

## Conservation des espèces

### Forme non conservative

$$\frac{D\rho_k}{Dt} + \rho_k \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_k = 0$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \vec{v}_k \cdot \vec{\text{grad}} \rho_k + \rho_k \text{div} \vec{v}_k = w_k^{\bullet}$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + v_{kx} \frac{\partial \rho_k}{\partial x} + v_{ky} \frac{\partial \rho_k}{\partial y} + v_{kz} \frac{\partial \rho_k}{\partial z} + \rho_k \left( \frac{\partial v_{kx}}{\partial x} + \frac{\partial v_{ky}}{\partial y} + \frac{\partial v_{kz}}{\partial z} \right) = w_k^{\bullet}$$

Ou encore

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \vec{\nabla} Y_k = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_k^{\bullet} + w_k^{\bullet}$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \vec{\nabla} Y_k = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + w_k^{\bullet}$$

### Forme conservative

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_k \vec{v}_k) = w_k^{\bullet}$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_k v_{kx}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho_k v_{ky}) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_k v_{kz}) = w_k^{\bullet}$$

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho (\vec{v} + \vec{V}_k) Y_k) = w_k^{\bullet}$$

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (v_i + V_{ki}) Y_k) = w_k^{\bullet}$$

## Conservation de la quantité de mouvement

### Forme non conservative

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\vec{\nabla}P + \vec{\nabla}\cdot\vec{\tau} + \rho \times \vec{f}$$

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho \vec{v} \operatorname{div} \vec{v} = -\overline{\operatorname{grad}} P + \overline{\operatorname{div}} \vec{\tau} + \rho \vec{f}$$

$$\rho \left( \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial v_j} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} + \rho f_i$$

$$\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho v_x \vec{V}) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x$$

$$\frac{\partial(\rho v_y)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho v_y \vec{V}) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y$$

$$\frac{\partial(\rho v_z)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho v_z \vec{V}) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z$$

ou pour un fluide réactif : 
$$\rho \left( \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial v_j} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i}$$

### Forme conservative

$$\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = -\overline{\operatorname{grad}} P + \overline{\operatorname{div}} \vec{\tau} + \rho \vec{f}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_i v_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x^2) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_x v_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_x v_z) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_y) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_y) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y^2) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_y v_z) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_z) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x v_z) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y v_z) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z^2) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z$$

ou pour un fluide réactif : 
$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_i v_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i}$$

### Forme intégrale

$$\iiint_{V(t)} \frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} dV + \iint_{\partial V(t)} (\rho \vec{v}) \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \iint_{\partial V(t)} \sigma \cdot \vec{n} dS + \iiint_{V(t)} \vec{f}_v dV$$

Soit

$$\iiint_{V(t)} \left[ \frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho \vec{v} \vec{v}) - \rho \vec{f} - \vec{\nabla} \vec{\sigma} \right] dV = 0$$

Ou encore :

$$\iiint_{V(t)} \frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} dV + \iint_{\partial V(t)} (\rho \vec{v}) \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \iint_{\partial V(t)} P \delta n dS - \iint_{\partial V(t)} \vec{\tau} \cdot \vec{n} dS + \iiint_{V(t)} \rho \vec{g} dV$$

soit

$$\iiint_{V(t)} \frac{\partial}{\partial t} \rho v_i dV + \iint_{\partial V(t)} \rho v_i v_j n_j dS = \iint_{\partial V(t)} P \delta_{ij} n_j dS - \iint_{\partial V(t)} \tau_{ij} n_j dS + \iiint_{V(t)} \rho g_i dV$$

## Conservation de l'énergie – Forme non conservative

### Energie totale

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = -\bar{\nabla} q_i + \mathbf{Q}^\bullet + \bar{\nabla}(\tau \bar{v}) - \bar{\nabla}(\bar{v} P) + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_k (\bar{v} + \bar{V}_k)$$

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \mathbf{Q}^\bullet + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ji} v_i) - \frac{\partial}{\partial x_i}(v_i P) + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (v_i + V_{k,i})$$

### Energie interne

$$\rho \frac{De}{Dt} + P \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = -\bar{\nabla} q + \mathbf{Q}^\square + \Phi + \rho \sum_{k=1}^N Y_k \bar{f}_k \bar{V}_k$$

$$\rho \frac{De}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \mathbf{Q}^\bullet + \tau_{ji} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - P \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i}$$

### Enthalpie

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{DP}{Dt} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ji} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \mathbf{Q}^\bullet + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i}$$

### Température

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = w_T^{\bullet\bullet\bullet} + \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ji} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \mathbf{Q}^\bullet + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i} - \left( \rho \sum_{k=1}^N C_{p,k} Y_k V_{k,i} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

$$\text{Avec } w_T^{\bullet\bullet\bullet} = -\sum_{k=1}^N h_{s,k} w_k^{\bullet\bullet\bullet} - \sum_{k=1}^N h_{f,k}^0 w_k^{\bullet\bullet\bullet}$$

## Conservation de l'énergie – Forme conservative

### Energie totale

$$\frac{\partial(\rho e_t)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i e_t)}{\partial x_i} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \mathbf{Q}^\bullet + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ji} v_i) - \frac{\partial}{\partial x_i}(v_i P) + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (v_i + V_{k,i})$$

### Energie interne

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i e) - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \mathbf{Q}^\square - P \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) = -\frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x e) - \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y e) - \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z e) - \frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} + \mathbf{Q}^\square$$

$$-P \left( \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) + \left[ \tau_{xx} \frac{\partial v_x}{\partial x} + \tau_{yx} \frac{\partial v_x}{\partial y} + \tau_{zx} \frac{\partial v_x}{\partial z} \right] + \left[ \tau_{xy} \frac{\partial v_y}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v_y}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial v_y}{\partial z} \right]$$

$$+ \left[ \tau_{xz} \frac{\partial v_z}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial v_z}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,x} V_{k,x} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,y} V_{k,y} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,z} V_{k,z}$$

### Enthalpie

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i h) + \frac{\partial P}{\partial t} + v_i \frac{\partial P}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \mathbf{Q}^\bullet + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i}$$

### Température

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i T) \right) = w_T^{\bullet\bullet\bullet} + \frac{\partial P}{\partial t} + v_i \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ji} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \mathbf{Q}^\bullet$$

$$+ \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i} - \left( \rho \sum_{k=1}^N C_{p,k} Y_k V_{k,i} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

$$\text{Avec } w_T^{\bullet\bullet\bullet} = -\sum_{k=1}^N h_{s,k} w_k^{\bullet\bullet\bullet} - \sum_{k=1}^N h_{f,k}^0 w_k^{\bullet\bullet\bullet}$$

## Conservation de l'énergie – Forme intégrale

$$\iiint_{V(t)} \frac{\partial(\rho e_t)}{\partial t} dV + \iint_{\partial V(t)} (\rho e_t) \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \iint_{\partial V(t)} (\sigma \cdot \vec{v}) \cdot \vec{n} dS + \iiint_{V(t)} \vec{f}_v \cdot \vec{v} dV - \iint_{\partial V(t)} \vec{q} \cdot \vec{n} dS + \iiint_{V(t)} \vec{Q}^\square \cdot \vec{v} dV$$

Soit :

$$\iiint_{V(t)} \frac{\partial(\rho e_t)}{\partial t} dV + \iint_{\partial V(t)} \rho e_t v_i n_i dS = \iiint_{V(t)} \left[ -\frac{\partial}{\partial x_i} (P v_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau_{ij} v_i) \right] dV + \iiint_{V(t)} \rho g_i v_i dV - \iiint_{V(t)} \frac{\partial q_i}{\partial x_i} dV$$