Transfert de masse et de quantité de mouvement

Par **Rabah Mehaddi et Anthony Collin**

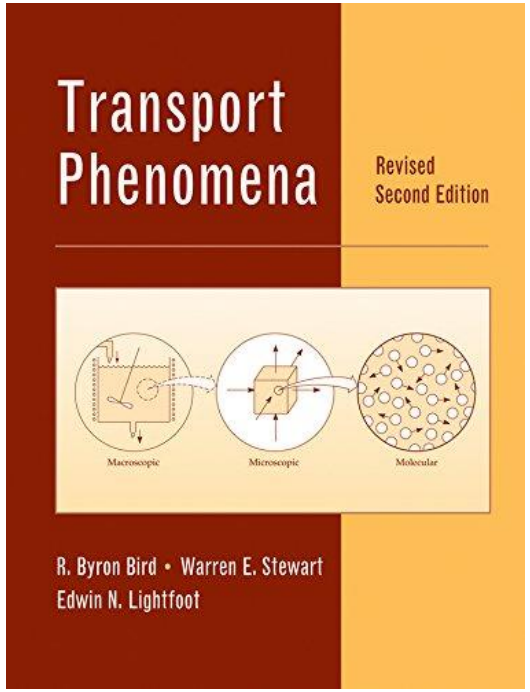
Phénomènes de transfert

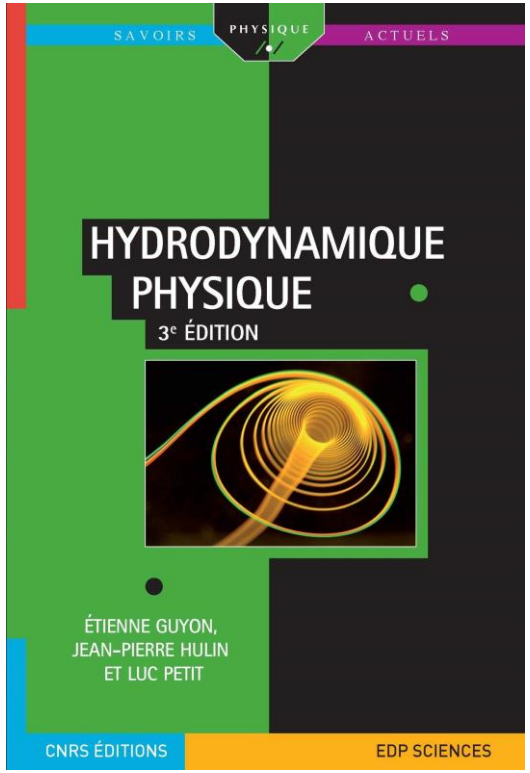
Structure du cours:

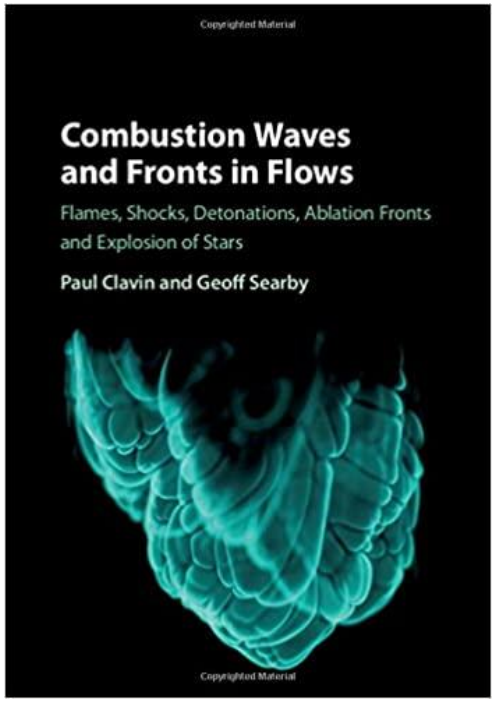
- **Transport de la chaleur** → Anthony
- **Transport de la quantité de mouvement**
- **Transport de la masse**

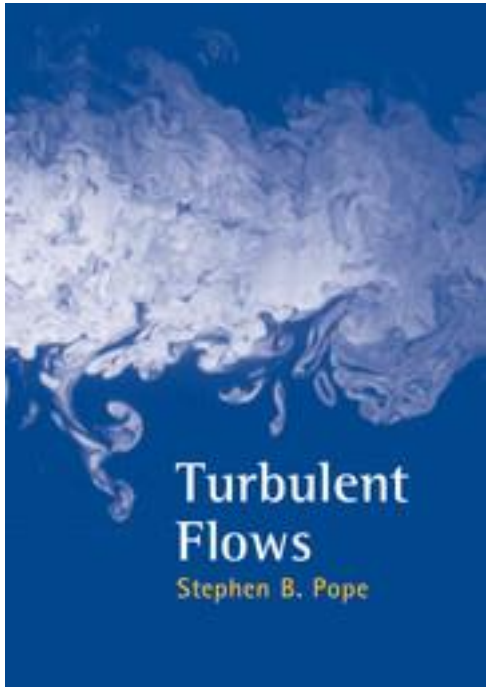
} → Rabah

Ouvrages


Transport Phenomena
Revised Second Edition
Macroscopic
Microscopic
Molecular
R. Byron Bird • Warren E. Stewart
Edwin N. Lightfoot


SAVOIRS PHYSIQUE ACTUELS
HYDRODYNAMIQUE PHYSIQUE
3e ÉDITION
ÉTIENNE GUYON,
JEAN-PIERRE HULIN
ET LUC PETIT
CNRS ÉDITIONS
EDP SCIENCES


Combustion Waves and Fronts in Flows
Flames, Shocks, Detonations, Ablation Fronts and Explosion of Stars
Paul Clavin and Geoff Searby


Turbulent Flows
Stephen B. Pope

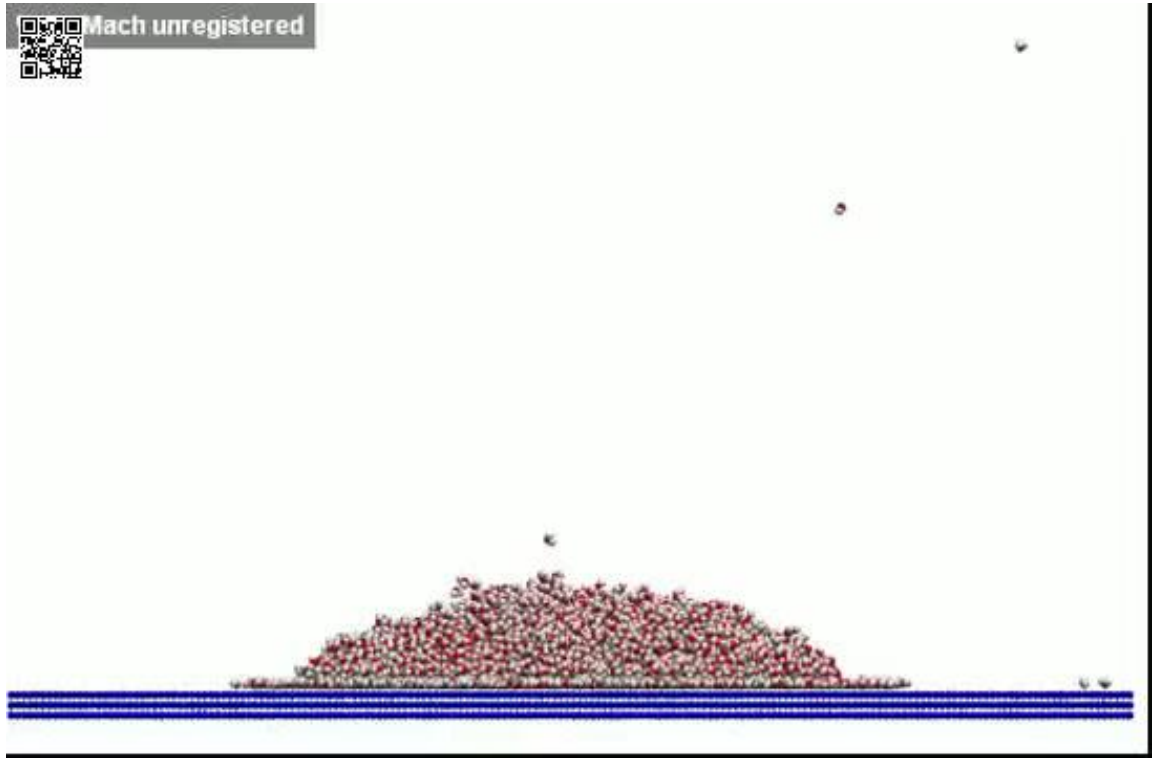
Objectifs

- Introduire les concepts fondamentaux qui régissent les phénomènes de transfert de masse et de quantité de mouvement.

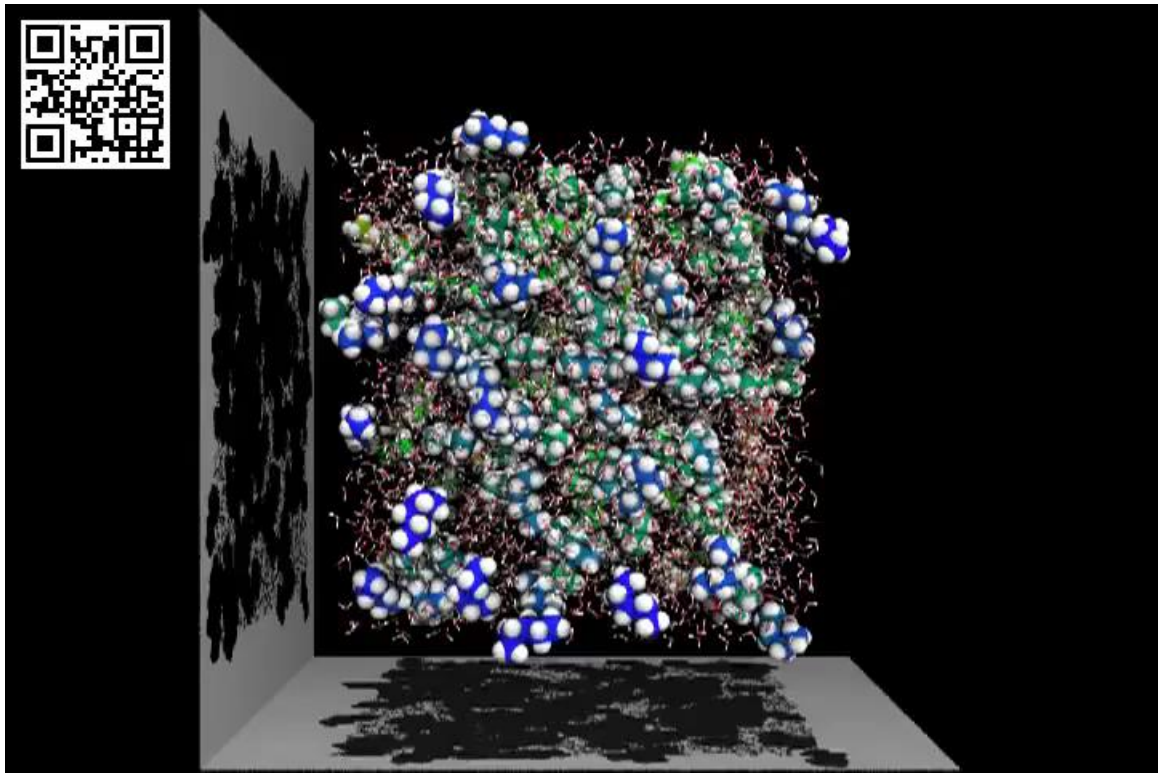
- Comprendre les équations de conservation permettant la résolution de problèmes incendies comprenant à la fois le transfert de masse, de chaleur et de quantité de mouvement.

Introduction

Quelques exemples de simulations en dynamique moléculaire



Simulation de l'évaporation d'une goutte



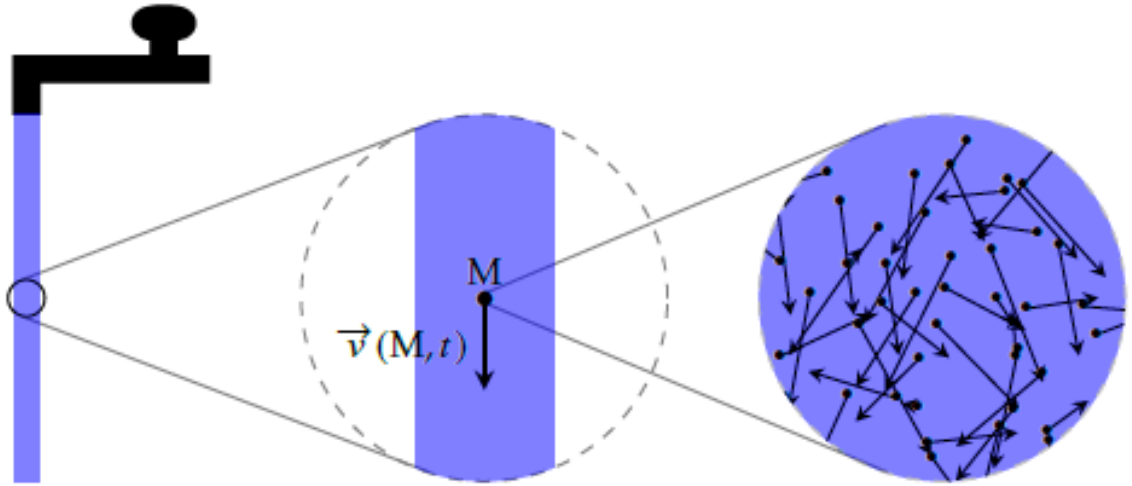
Simulation de la séparation de l'huile et l'eau.
Le temps est en picoseconde (10^{-12}s)

Passer des molécules aux fluides continus

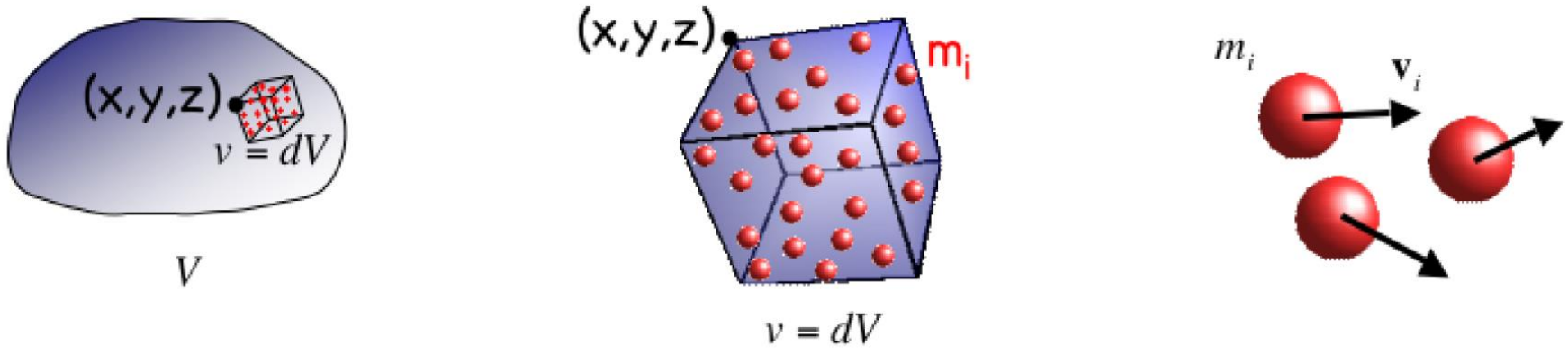
Un milieu peut être considéré continu si le libre parcours moyen des molécules ℓ est petit devant la taille caractéristique L du système étudié. On définit le nombre de Knudsen

$$K_n = \frac{\ell}{L}$$

Lorsque $K_n < 0.01$, le milieu est continu. Lorsque $K_n > 0.1$, le milieu est dit raréfié.
Par exemple, dans la haute atmosphère, à l'altitude de 100km, on a ℓ = 0,3m. Pour calculer l'écoulement autour d'un véhicule spatial à cette altitude, le modèle continu ne conviendra pas.



Passer des molécules aux fluides continus



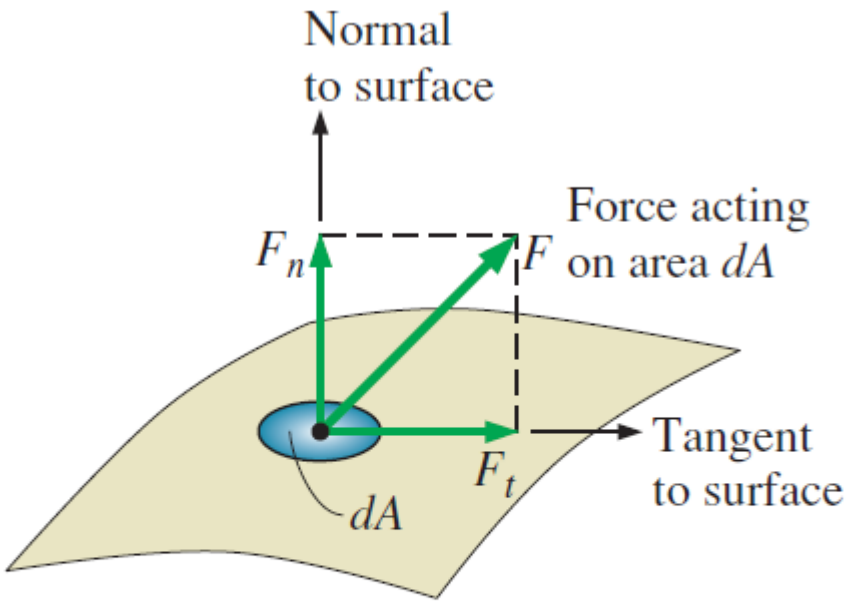
La masse volumique du fluide est définit localement par l'équation

$$\rho(x,y,z,t) = \frac{\sum_i m_i}{dV}$$

Où $\sum_i m_i$ est la somme des masses des molécules individuelles

Définitions

- **Contrainte:** force par unité de surface
- **Contrainte normale:** La composante normale contrainte
- **Contrainte de cisaillement:** La composante tangentielle de la contrainte

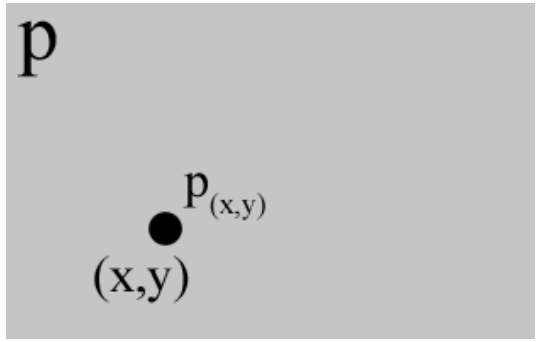


$$\text{Normal stress: } \sigma = \frac{F_n}{dA}$$

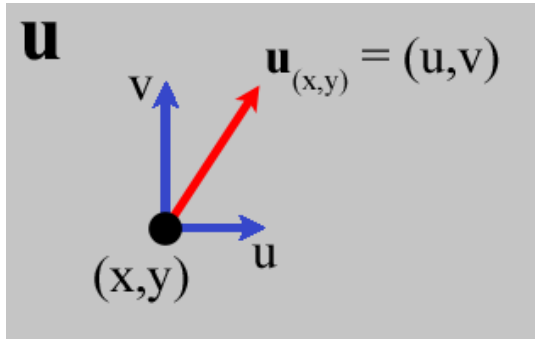
$$\text{Shear stress: } \tau = \frac{F_t}{dA}$$

Description mathématique

- La vitesse dans le fluide est représentée par un champ vectoriel noté **U** ou $\vec{U}$
- La pression P est un champ scalaire défini en chaque point de l'espace



- **Exemple: cas 2D**

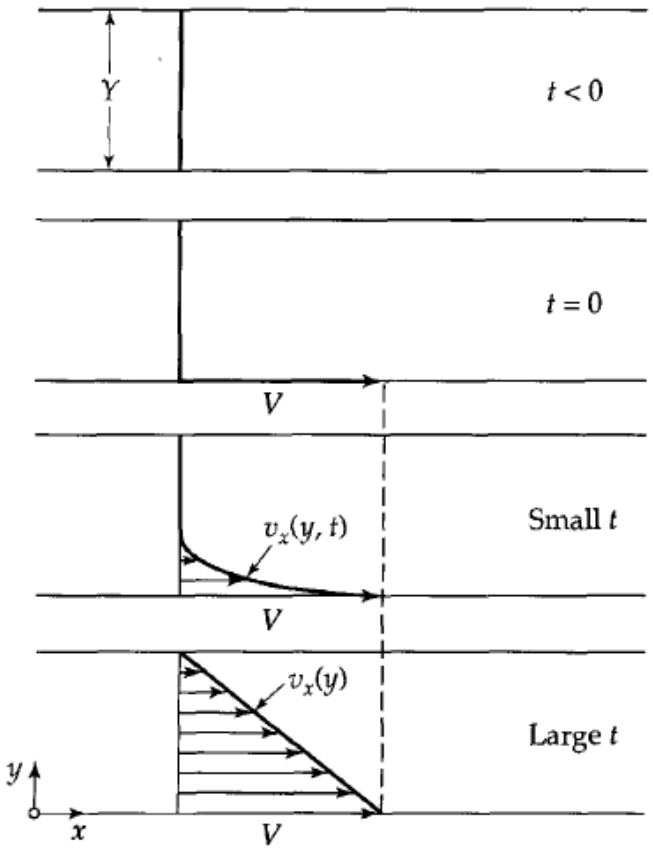


- le champ de vitesse $\vec{U}(u,v)$ possède deux composantes $u\ (x,y,t)$ et $v(x,y,t)$ suivant les deux directions de l'espace

- La pression est une fonction de l'espace et du temps P(x,y,t)

Transfert de quantité de mouvement

Transfert de quantité de mouvement



Fluide au repos

Une plaque est mise en mouvement

Transmission du mouvement

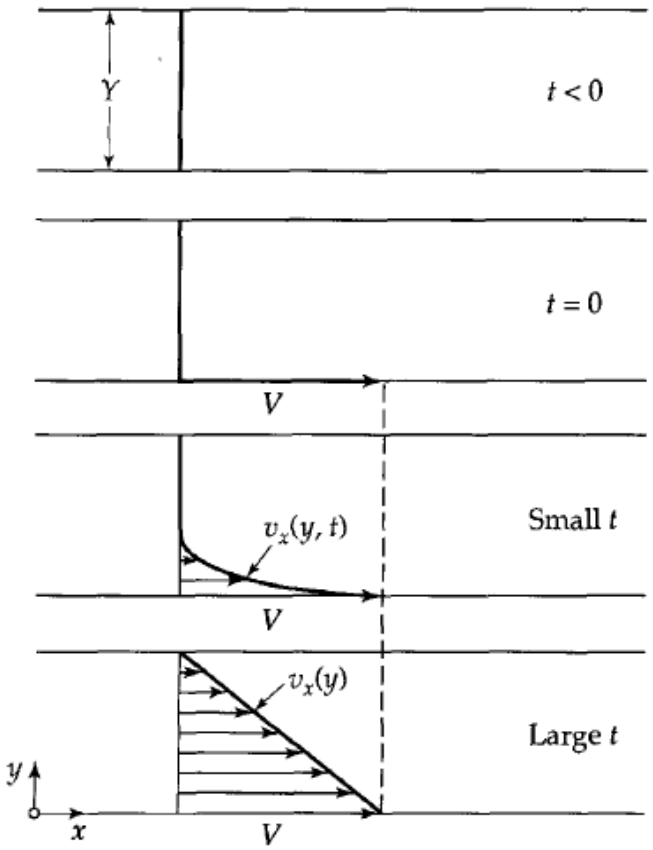
Régime permanent

Force de résistance:
Pour maintenir le mouvement, on doit appliquer une force:

$$\frac{F}{A} = \mu \frac{V}{Y}$$

F/A est la pression de cisaillement
V est la vitesse de la plaque
Y est la distance entre les deux plaques

Transfert de quantité de mouvement



Cette relation peut être généralisée comme suit:

$$\frac{F}{A} = -\mu \frac{V - 0}{0 - Y}$$

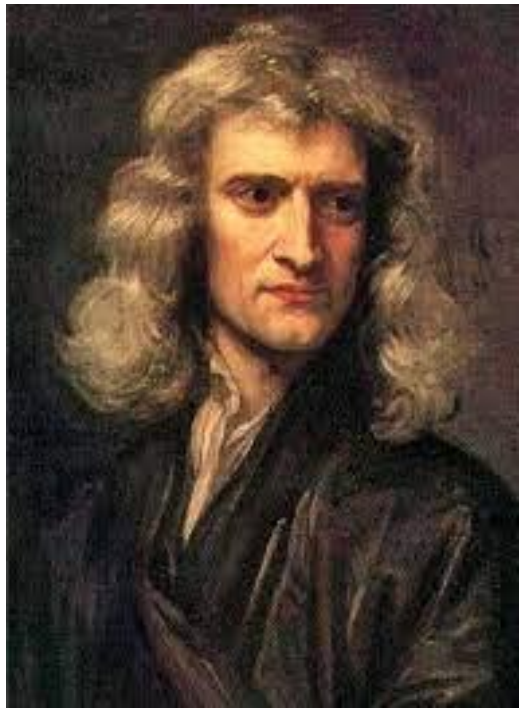
$$\tau_{xy} = -\mu \frac{dv_x}{dy}$$

Ou τ_{xy} est la contrainte de cisaillement

Transfert de quantité de mouvement

$$\tau_{xy} = -\mu \frac{dv_x}{dy}$$

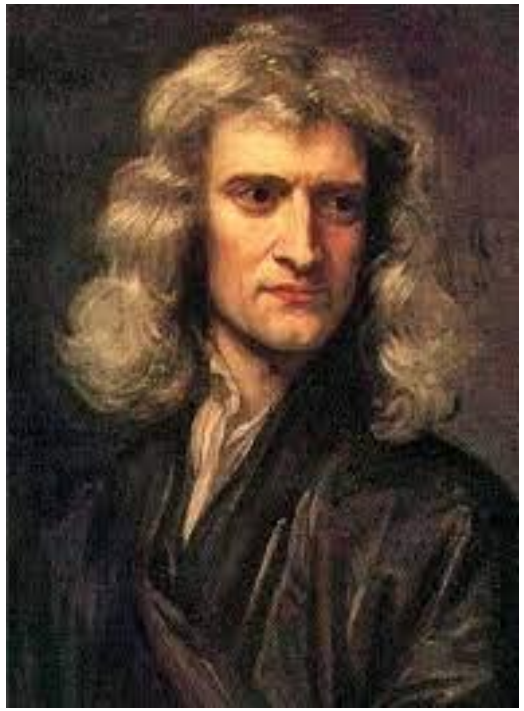
- La quantité de mouvement est transportée verticalement (dans la direction y) de la plaque en mouvement vers celle qui est immobile.
- Ce flux de quantité de mouvement (**le taux de cisaillement** τ_{xy}) est proportionnel au gradient de vitesse $\frac{dv_x}{dy}$.



Isaac Newton
1642-1727

Transfert de quantité de mouvement par diffusion

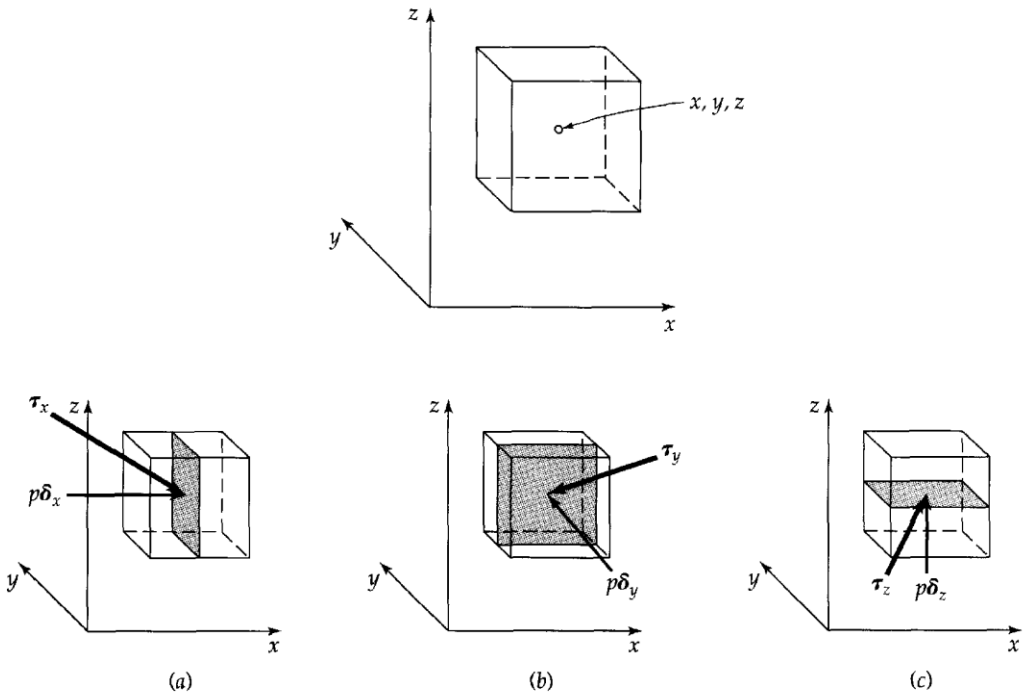
- Les fluides régis par cette loi sont dit **Newtonien**
- Il a été montré que tous les fluides **de masse moléculaire** inférieure ou égale à **5000** sont Newtoniens
- Les fluides qui ne suivent pas cette loi sont dit **non-Newtonien** comme les fluides polymères, dentifrice, suspensions d'amidon….
- On définit aussi la viscosité cinématique $\boldsymbol{\nu = \mu/\rho}$ ou ρ est la densité du fluide
- La viscosité varie sur des ordres de gradeur importants allant de $\mu = 1.8 \times 10^{-5}\ Pa.s$ pour l'air à $1\ Pa.s$ pour certaines huiles de silicone



Isaac Newton
1642-1727

Transfert de quantité de mouvement par diffusion

- Pour généraliser la loi de Newton, on se donne une particule fluide de vitesse $\boldsymbol{v}(v_x, v_y, v_z)$ où v_x, v_y, v_z sont des fonctions de x, y, z et t
- Le champ de pression est toujours perpendiculaire(normal) aux faces de l'élément fluide
- Les contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau_{ij}}$ apparaissent quand le fluide est mis en mouvement
- Les contraintes visqueuses sont représentées par un tenseur qui contient 9 éléments
- En observant la loi de Newton $(\boldsymbol{\tau_{xy}} = -\boldsymbol{\mu}\frac{\boldsymbol{dv_x}}{\boldsymbol{dy}})$, on peut faire l'hypothèse que pour un écoulement quelconque la contrainte de cisaillement est une combinaison linéaire de tous les gradients de vitesse

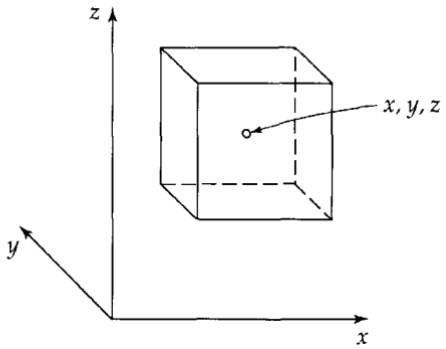


Transfert de quantité de mouvement

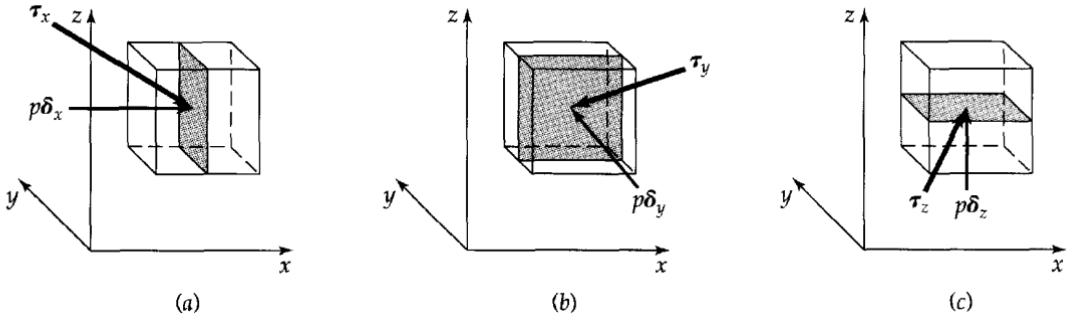
La généralisation de la loi de Newton s'écrit

- $\tau_{ij} = -\mu\left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j}\right) + \left(\frac{2}{3}\mu - \kappa\right)\left(\sum \frac{\partial v_k}{\partial x_k}\right)\delta_{ij}$

- $\boldsymbol{\tau} = -\mu\left(\boldsymbol{\nabla v} + (\boldsymbol{\nabla v})^{\boldsymbol{T}}\right) + \left(\frac{2}{3}\mu - \kappa\right)\ (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v})\boldsymbol{\delta}$



- $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur des contraintes visqueuses
- p est la pression,
- δ_{ij} est le symbole de Kronecker
- κ est la viscosité dilatationnelle



Transfert de quantité de mouvement par diffusion

On définit la contrainte moléculaire

❖ $\pi_{ij} = p\,\delta_{ij} + \tau_{ij}$

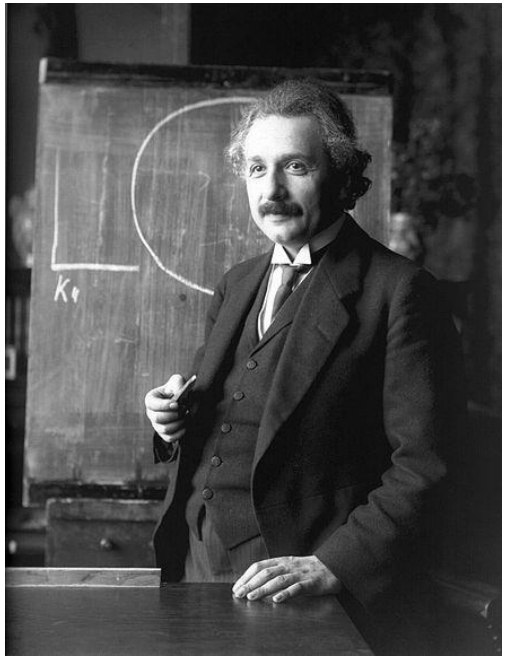
Direction	Contrainte vectorielle	Composante suivant x	Composante suivant y	Composante suivant z
X	$\boldsymbol{\pi_x} = p\,\boldsymbol{\delta_x} + \boldsymbol{\tau_x}$	$\pi_{xx} = p + \tau_{xx}$	$\pi_{xy} = \tau_{xy}$	$\pi_{xz} = \tau_{xz}$
Y	$\boldsymbol{\pi_y} = p\,\boldsymbol{\delta_y} + \boldsymbol{\tau_y}$	$\pi_{yx} = \tau_{yx}$	$\pi_{yy} = p + \tau_{yy}$	$\pi_{yz} = \tau_{yz}$
Z	$\boldsymbol{\pi_z} = p\,\boldsymbol{\delta_z} + \boldsymbol{\tau_z}$	$\pi_{zx} = \tau_{zx}$	$\pi_{zy} = \tau_{zy}$	$\pi_{zz} = p + \tau_{zz}$

Viscosité

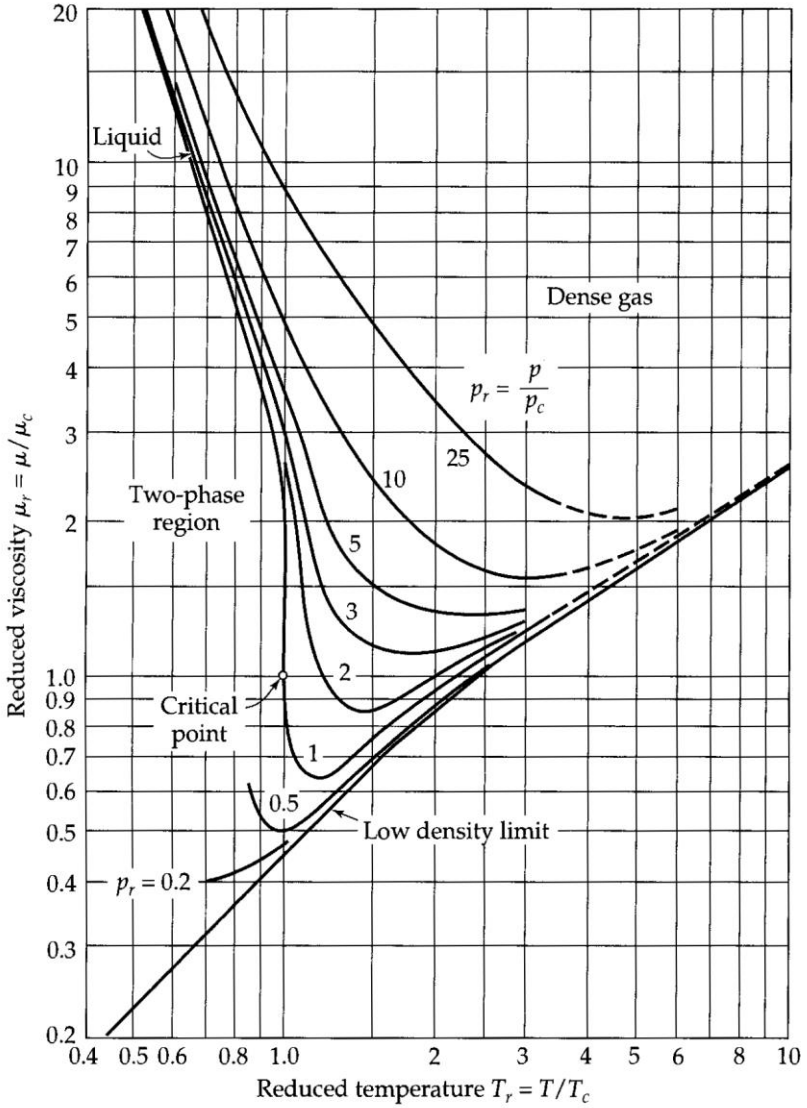
- La viscosité varie en fonction de la température et de la pression

- Pour une suspension, la viscosité varie en fonction de la fraction volumique Φ telle que:

$$\frac{\mu_{eff}}{\mu_0} = 1 + \frac{5}{2}\Phi$$

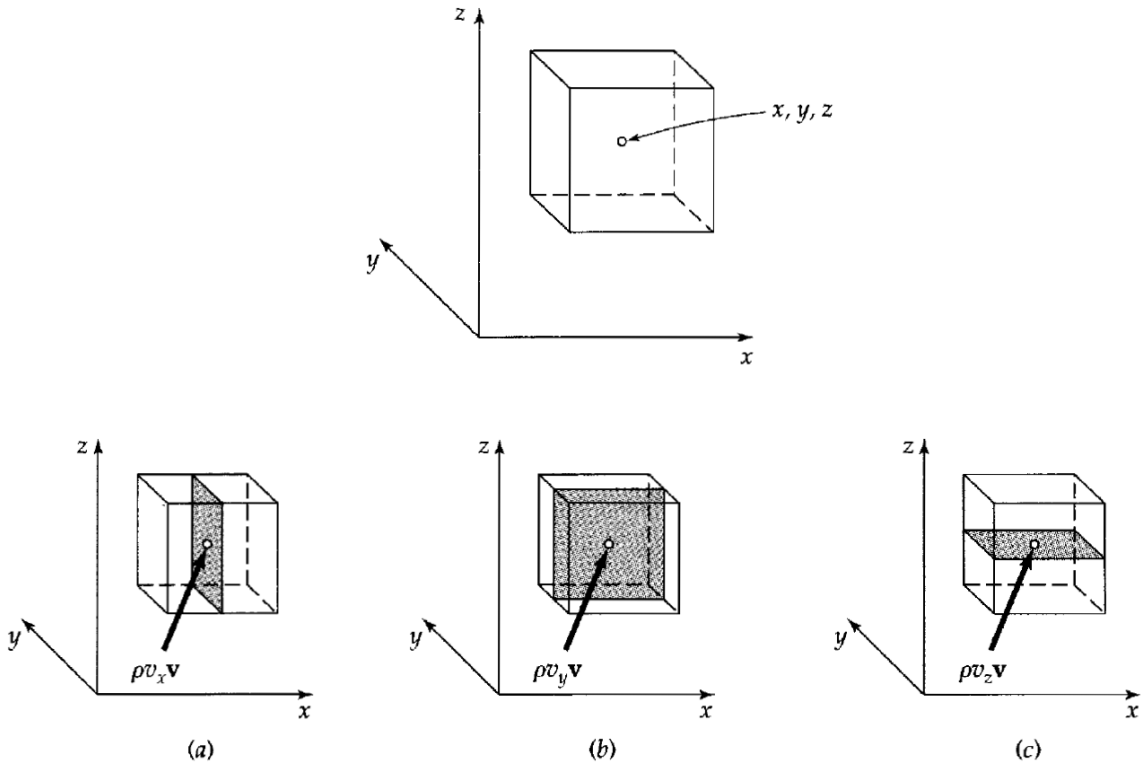


Albert Einstein
1879-1955



Transport de quantité de mouvement par advection

- En plus du transport par la viscosité, la quantité de mouvement peut être transportée par l'écoulement lui-même.
- La quantité transportée est la quantité de mouvement par unité de volume notée $\rho \boldsymbol{v}$.
- Ce type de transport est qualifié d'**advectif** et peut être quantifié par les éléments: $\rho \boldsymbol{v} v_x, \rho \boldsymbol{v} v_y$ et $\rho \boldsymbol{v} v_z$



Transport de quantité de mouvement par advection

Direction	Quantité de mouvement vectorielle	Composante suivant x	Composante suivant y	Composante suivant z
X	$\rho \boldsymbol{v} v_x$	$\rho v_x v_x$	$\rho v_y v_x$	$\rho v_z v_x$
Y	$\rho \boldsymbol{v} v_y$	$\rho v_x v_y$	$\rho v_y v_y$	$\rho v_z v_y$
Z	$\rho \boldsymbol{v} v_z$	$\rho v_x v_z$	$\rho v_y v_z$	$\rho v_z v_z$

Tenseur de transport de quantité de mouvement

En combinant les types de transport par diffusion et par advection, on définit le tenseur de transport global

$$\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\pi} + \rho \boldsymbol{v}\boldsymbol{v} = p\boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\tau} + \rho \boldsymbol{v}\boldsymbol{v}$$

Transport par diffusion

Transport par advection

Equations de conservation

Equations de conservation: conservation de la masse

$$[\,Taux\ de\ variation] = [\,ce\ qui\ rentre] - [\,ce\ qui\ sort]$$

En appliquant ce principe, on écrit:

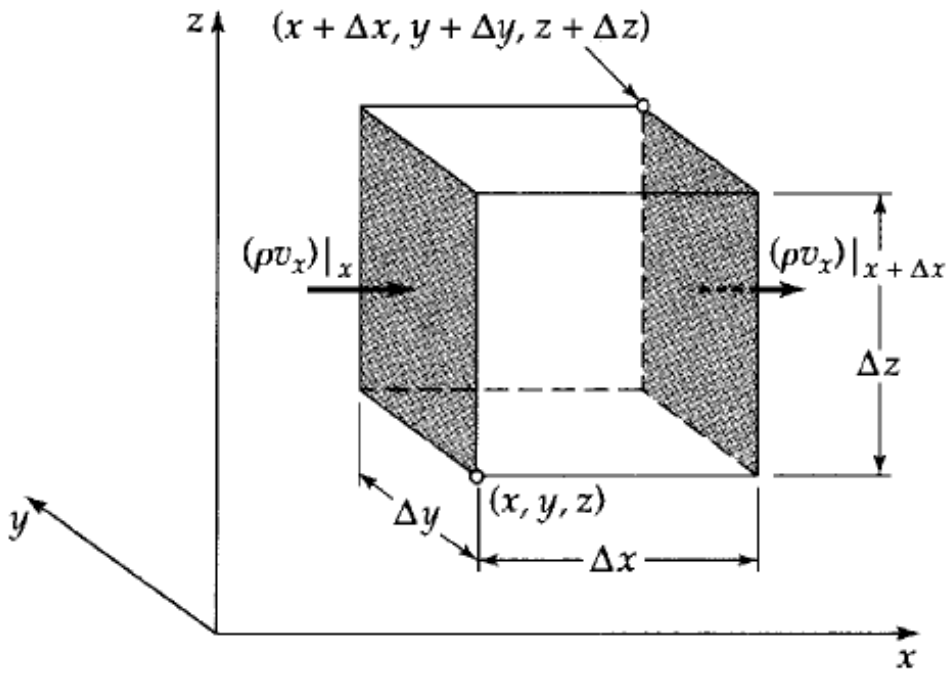
$$\Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial \rho}{\partial t} = \Delta y \Delta z \left[\rho v_x \Big|_x - \rho v_x \Big|_{x+\Delta x} \right] + \Delta x \Delta z \left[\rho v_y \Big|_y - \rho v_y \Big|_{y+\Delta y} \right] + \Delta y \Delta x \left[\rho v_z \Big|_z - \rho v_z \Big|_{z+\Delta z} \right]$$

On obtient

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

ou

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -[\boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \boldsymbol{v})]$$

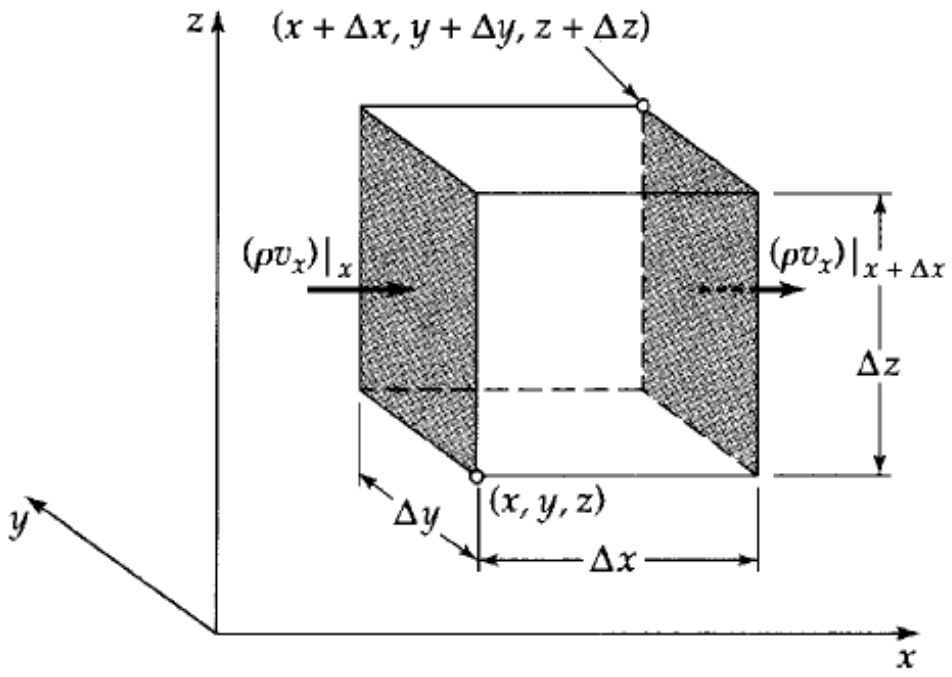


Equations de conservation: conservation de la masse

Pour un fluide incompressible, l'équation de continuité devient:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -[\boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \boldsymbol{v})]$$

$$(\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v}) = 0$$



Equations de conservation: conservation de la quantité de mouvement

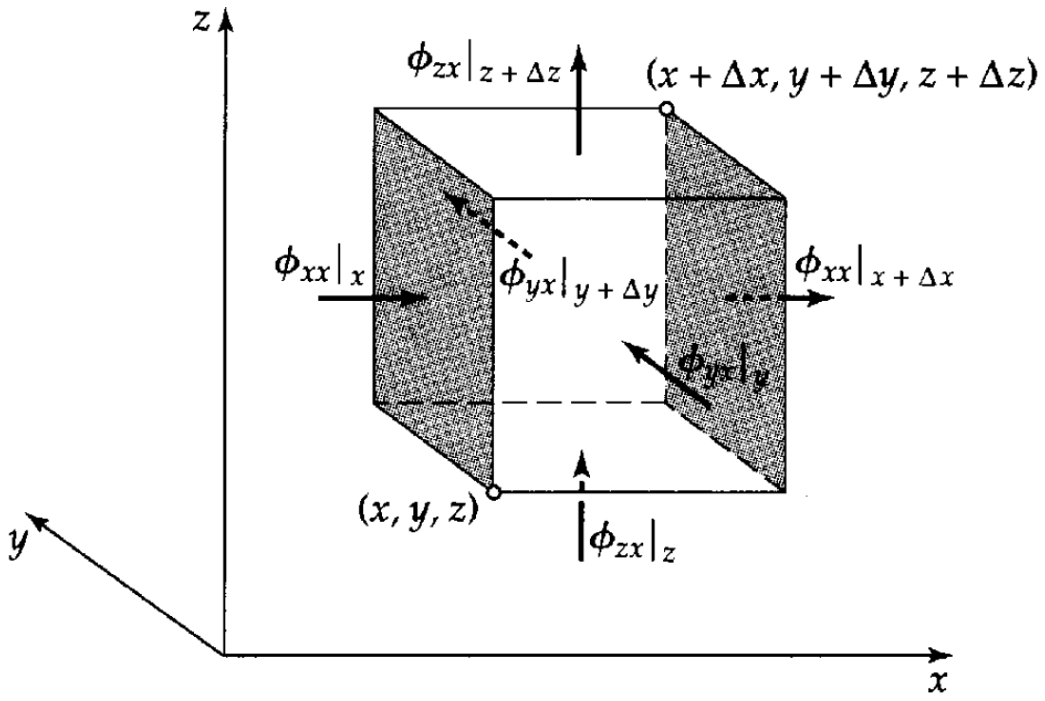
$$\begin{bmatrix} Taux\ de \\ variation \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ce\ qui \\ rentre \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} ce\ qui \\ sort \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} forces \\ exterieures \end{bmatrix}$$

Conservation de la quantité de mouvement dans la direction x

$$\Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial \rho v_x}{\partial t} = \Delta y \Delta z \left[\Phi_{xx}\Big|_x - \Phi_{xx}\Big|_{x+\Delta x} \right] + \Delta x \Delta z \left[\Phi_{yx}\Big|_y - \Phi_{yx}\Big|_{y+\Delta y} \right] + \Delta y \Delta x \left[\Phi_{zx}\Big|_z - \Phi_{zx}\Big|_{z+\Delta z} \right] + \Delta x \Delta y \Delta z\, \rho g_x$$

On obtient

$$\boxed{\frac{\partial \rho v_x}{\partial t} = -\left(\frac{\partial}{\partial x}\Phi_{xx} + \frac{\partial}{\partial y}\Phi_{yx} + \frac{\partial}{\partial z}\Phi_{zx} \right) + \rho g_x}$$



Equations de conservation: conservation de la quantité de mouvement

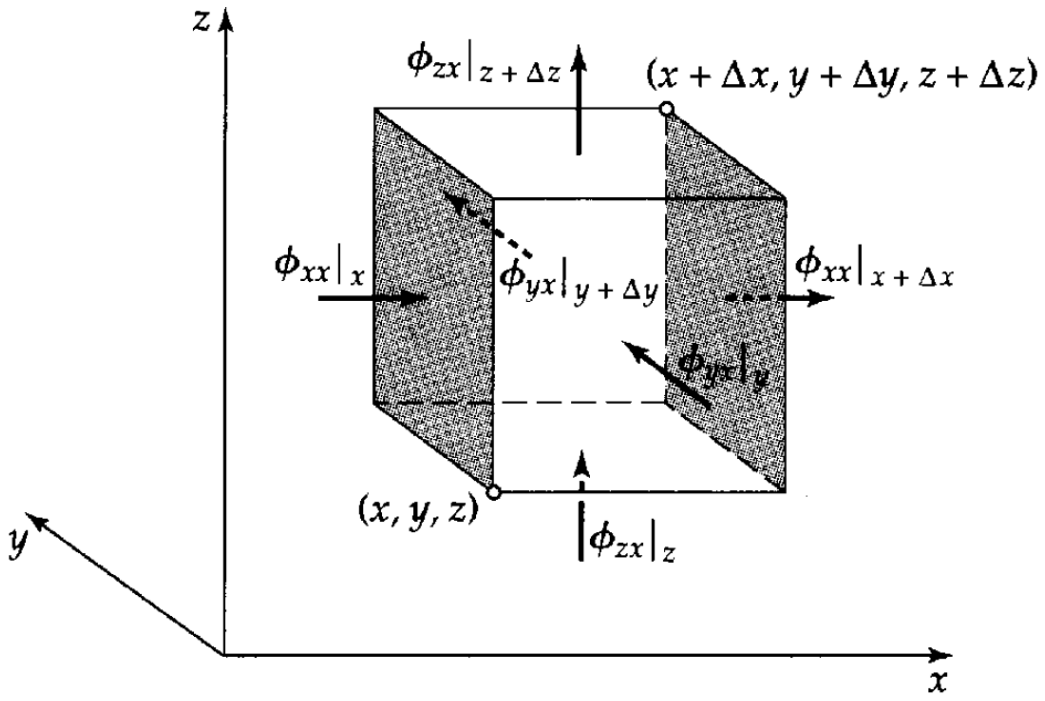
Dans les autres directions:

- $\frac{\partial \rho v_y}{\partial t} = -\left(\frac{\partial}{\partial x}\Phi_{xy} + \frac{\partial}{\partial y}\Phi_{yy} + \frac{\partial}{\partial z}\Phi_{zy}\right) + \rho g_y$
- $\frac{\partial \rho v_z}{\partial t} = -\left(\frac{\partial}{\partial x}\Phi_{xz} + \frac{\partial}{\partial y}\Phi_{yz} + \frac{\partial}{\partial z}\Phi_{zz}\right) + \rho g_z$

Ou sous forme vectorielle

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{v}}{\partial t} = -[\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\Phi}] + \rho \boldsymbol{g}$$

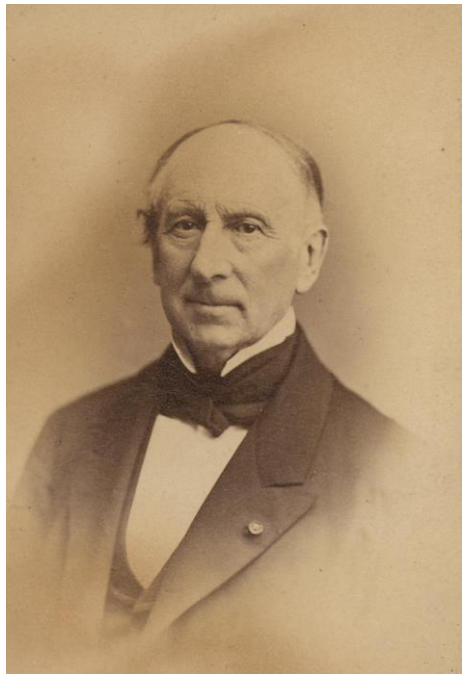
$$\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\pi} + \rho \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} = p\boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\tau} + \rho \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v}$$



Equations de conservation: conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{v}}{\partial t} = -[\boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \boldsymbol{v}\boldsymbol{v})] - \boldsymbol{\nabla} p - [\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}] + \rho \boldsymbol{g}$$

Taux de variation	**Transport par advection**	**Gradient de pression**	**Transport visqueux**	**Force extérieure**



Augustin-louis Cauchy
1789-1857

Equations de conservation

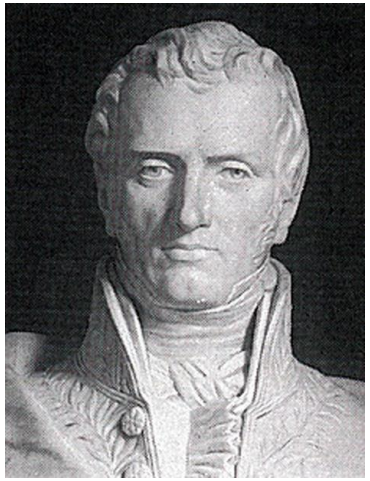
En définissant la dérivée particulaire:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} + v_z \frac{\partial}{\partial z} \qquad ou \qquad \frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla})$$

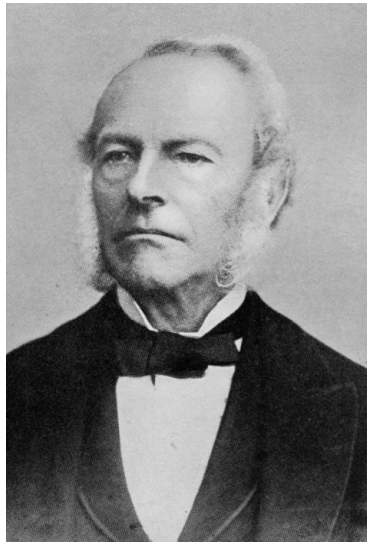
Les équations de conservation deviennent

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{D\rho}{Dt} &= -\rho \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v} \\ \rho \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} &= -\boldsymbol{\nabla} p + \mu \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{v} + \rho \boldsymbol{g} \end{aligned}}$$

❖ **Un des 7 problèmes du millénaire.**



Henri-Edouard Navier 1789-1857



George-Gabriel Stokes 1819-1903

Cas particuliers de l'équation de Navier-Stokes

$$\rho\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \rho(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v} = -\boldsymbol{\nabla}p + \mu\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{v} + \rho\boldsymbol{g}$$

→ Equation de Navier-Stokes

$$\rho\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \rho(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v} = -\boldsymbol{\nabla}p + \cancel{\mu\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{v}} + \rho\boldsymbol{g}$$

On néglige les effets visqueux →

$$\rho\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \rho(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v} = -\boldsymbol{\nabla}p + \rho\boldsymbol{g}$$

Equation d'Euler

$$\cancel{\rho\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t}} + \rho(\cancel{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}}) = -\boldsymbol{\nabla}p + \mu\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{v} + \rho\boldsymbol{g}$$

On néglige les effets convectifs →

$$-\boldsymbol{\nabla}p + \mu\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{v} + \rho\boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}$$

Equation de Stokes / écoulement rampant

Analyse dimensionnelle

$$\hat{x} = \frac{x}{\ell_0},\ \hat{y} = \frac{y}{\ell_0},\ \hat{z} = \frac{z}{\ell_0},\ \hat{t} = \frac{v_0 t}{\ell_0},\ \hat{\boldsymbol{v}} = \frac{\boldsymbol{v}}{v_0}$$

$\hat{p} = \frac{p-p_0}{\rho v_0^2}$ *(cas inertiel)* ou $\hat{\hat{p}} = \frac{p-p_0}{\mu v_0/\ell_0}$ *(cas visqueux)*

$$\hat{\boldsymbol{\nabla}} = \ell_0 \boldsymbol{\nabla},\ \widehat{\boldsymbol{\nabla}^2} = \ell_0 \boldsymbol{\nabla}^2,\ \frac{D}{D\hat{t}} = \frac{\ell_0}{v_0}\frac{D}{Dt}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v} = 0$$

$$\rho \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\boldsymbol{\nabla} p + \mu \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{v}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\boldsymbol{v}} = 0$$

$$\frac{D\hat{\boldsymbol{v}}}{Dt} = -\hat{\boldsymbol{\nabla}}\hat{p} + \left(\frac{\mu}{\rho \ell_0 v_0}\right) \widehat{\boldsymbol{\nabla}^2}\hat{\boldsymbol{v}}$$

$$\frac{D\hat{\boldsymbol{v}}}{Dt} = \left(\frac{\mu}{\rho \ell_0 v_0}\right) \left(-\hat{\boldsymbol{\nabla}}\hat{\hat{p}} + \widehat{\boldsymbol{\nabla}^2}\hat{\boldsymbol{v}}\right)$$

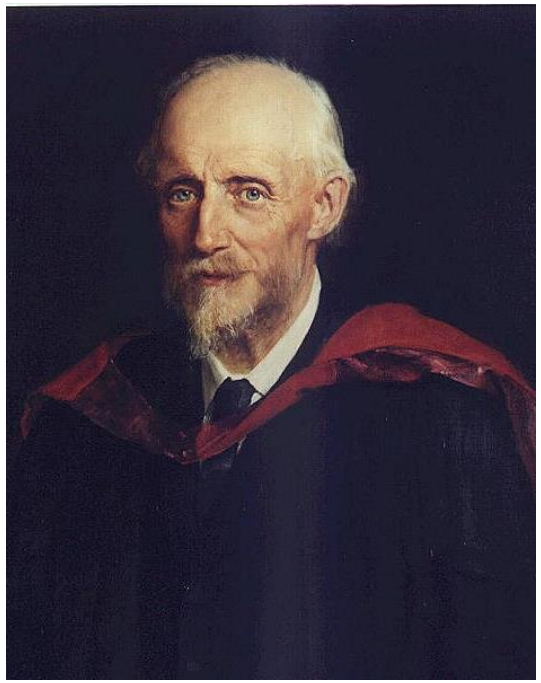
$$\mathbf{Re} = \frac{\boldsymbol{\rho \ell_0 v_0}}{\boldsymbol{\mu}}$$

Nombres sans dimensions

Nombre de Reynolds

$$\mathbf{Re} = \frac{\rho \ell_0 v_0}{\mu} \propto \frac{\textbf{effets inertiels}}{\textbf{effets visqueux}}$$

Expérience de Reynolds



Osborne Reynolds
1842-1912

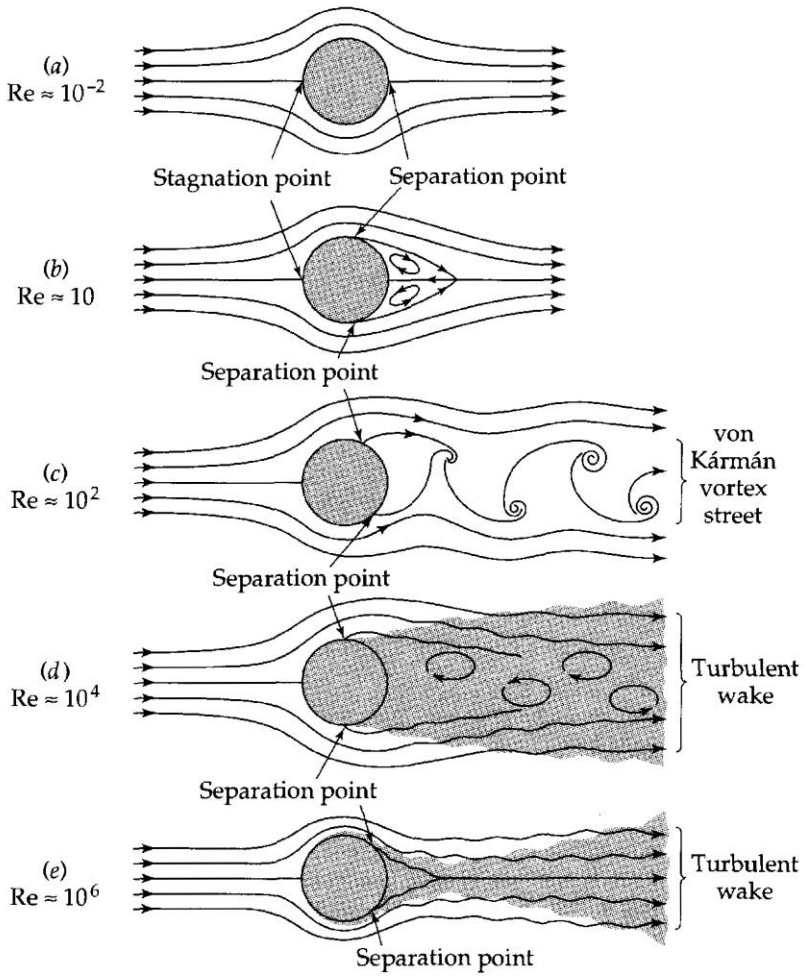
Nombre de Reynolds

Ecoulement autour d'un cylindre:

$$\mathbf{Re} = \frac{\boldsymbol{\rho} \mathbf{D} \mathbf{v}_\infty}{\boldsymbol{\mu}}$$

- On pose $\frac{\boldsymbol{\rho}\mathbf{D}}{\boldsymbol{\mu}} = \mathbf{Cste}$

- On fait varier $\mathbf{v}_\infty$



Nombres sans dimensions

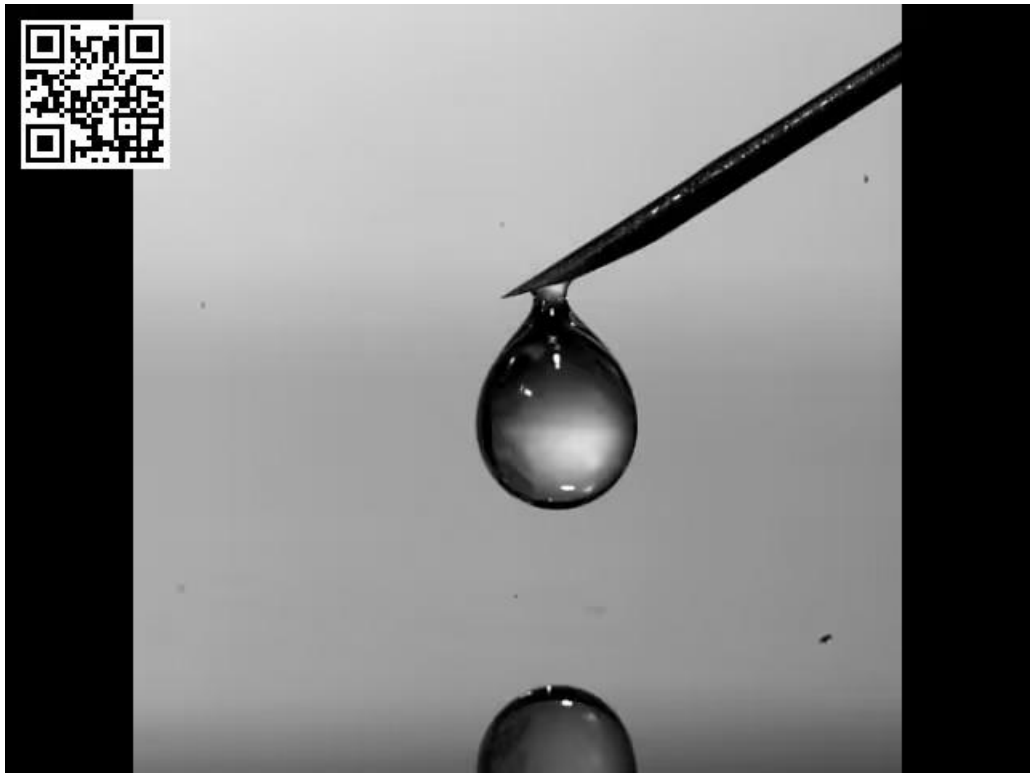
Nombre de Froude densimétrique

$$\mathbf{Fr} = \frac{\mathbf{v_0}}{\sqrt{\mathbf{g\ell_0 \Delta\rho/\rho_0}}} \propto \frac{\mathbf{effets\ d'inertie}}{\mathbf{effets\ de\ flottabilité}}$$

Craie et huile (rouge) vs huile (beige)
Effets de flottabilité induits par une bougie.

phénomènes de capillarité

Nombre de Weber $$\mathbf{We} = \frac{\rho v_0^2 \ell_0}{\sigma} \propto \frac{\textbf{effets de tensions de surface}}{\textbf{effets d'inertie}}$$



Gouttes rebondissantes sur une surface fluide

Exemple: écoulement autour d'une sphère

Bas nombre de Reynolds + écoulement incompressible

Les équations à résoudre

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}$$

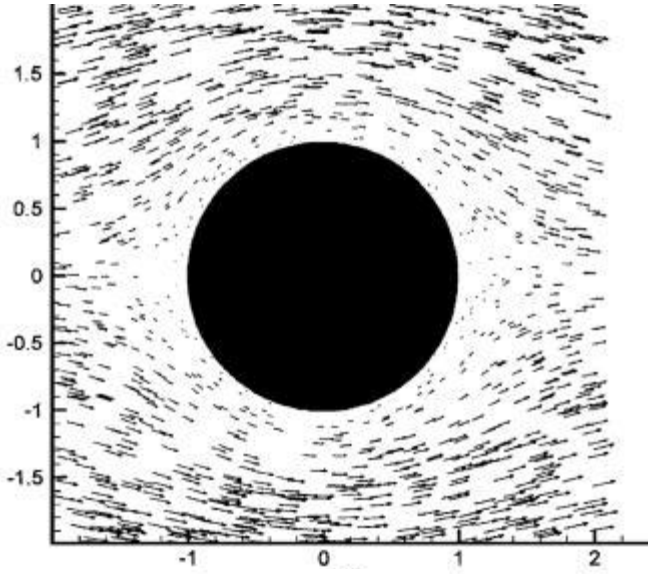
$$\rho \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\boldsymbol{\nabla} p + \mu \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{v} + \rho \boldsymbol{g}$$

simplifications

Objectif.
Inconnus.

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v} = 0$$

$$-\boldsymbol{\nabla} p + \mu \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$$



Les conditions aux limites:

- Sur la surface de la sphère, la vitesse est nulle
- Loin de la sphère, la vitesse est égale à la vitesse ambiante (non perturbée par la présence de la sphère)

Exemple: écoulement autour d'une sphère

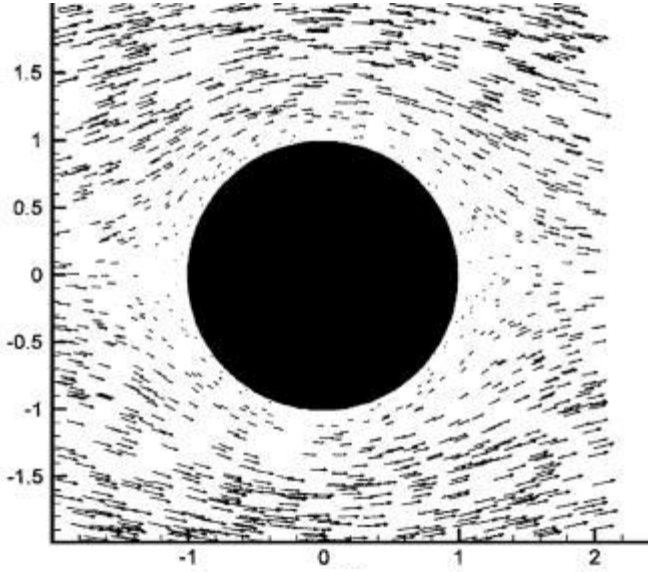
On utilise les coordonnées sphériques, on calcule les composantes de vitesse:

$$v_r = v_\infty\left[1 - \frac{3}{2}\left(\frac{R}{r}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{R}{r}\right)^3\right]\cos\theta$$

$$v_\theta = v_\infty\left[-1 + \frac{3}{4}\left(\frac{R}{r}\right) + \frac{1}{4}\left(\frac{R}{r}\right)^3\right]\sin\theta$$

$$v_\phi = 0$$

$$p = p_0 - \rho g z - \frac{3}{2}\frac{\mu v_\infty}{R}\left(\frac{R}{r}\right)^2\cos\theta$$



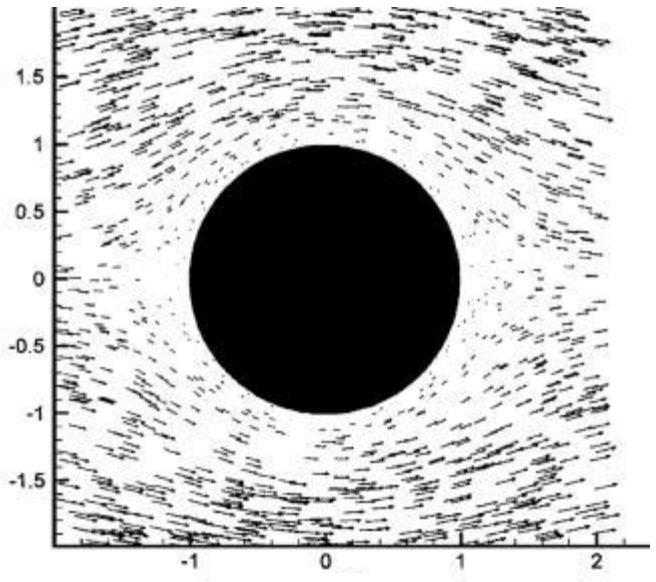
Exemple: écoulement autour d'une sphère

Pour obtenir la force de résistance, on calcule d'abord les contraintes

$$\tau_{rr} = -2\tau_{\theta\theta} = -2\tau_{\phi\phi} = \frac{3\mu v_\infty}{R}\left[-\left(\frac{R}{r}\right)^2 + \left(\frac{R}{r}\right)^4\right]\cos\theta$$

$$\tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} = \frac{3}{2}\frac{\mu v_\infty}{R}\left(\frac{R}{r}\right)^4 \sin\theta$$

$$p|_{r=R} = p_0 - \rho g R\cos\theta - \frac{3}{2}\frac{\mu v_\infty}{R}\cos\theta$$



La force possède deux composantes: normale et tangentielle

$$F^{(n)} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} (-(p + \tau_{rr})|_{r=R}\cos\theta)R^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

$$F^{(t)} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} (\tau_{r\theta}|_{r=R}\sin\theta)R^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

On obtient la force totale

$$F_R = F^{(n)} + F^{(t)} = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho g + 2\pi\mu v_\infty R + 4\pi\mu v_\infty R = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho g + 6\pi\mu v_\infty R$$

Force d'Archimède

Trainée

Exemple: écoulement autour d'une sphère

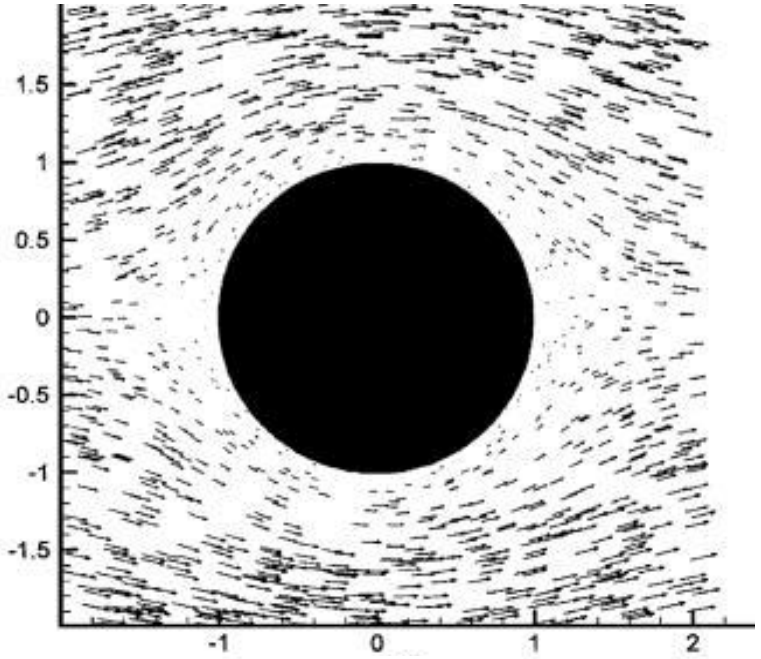
Force de résistance visqueuse

$$F_T = 6\pi\mu R v_\infty$$

Coefficient de trainée

$$C_D = \frac{F_T}{\frac{1}{2}\rho v_\infty^2 S} = \frac{6\pi\mu R v_\infty}{\frac{1}{2}\rho v_\infty^2 \pi R^2} = \frac{24}{Re}$$

Où $Re = \frac{\rho v_\infty (2R)}{\mu} = \frac{v_\infty D}{\nu}$



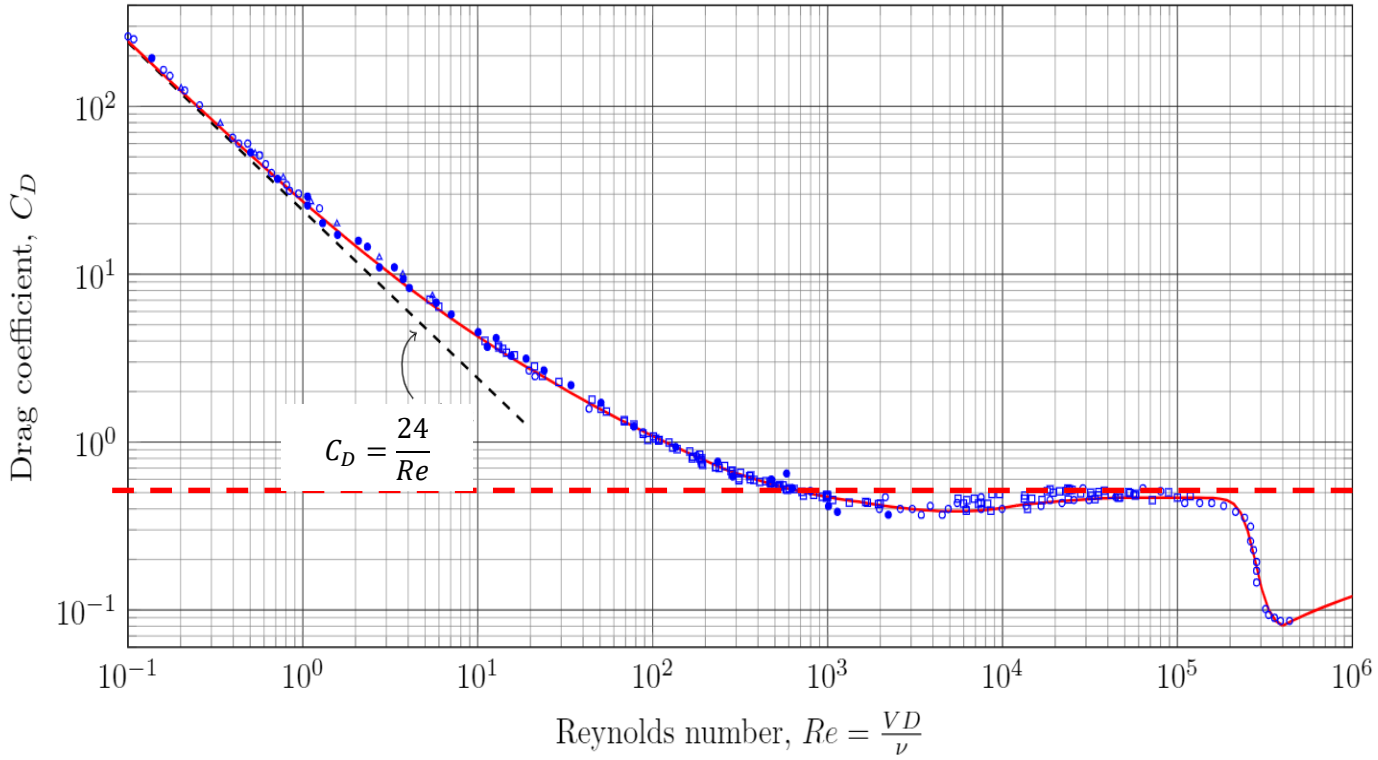
Exemple: écoulement autour d'une sphère

-1 : écoulement attaché (écoulement de Stokes) et écoulement séparé régulier,

-2 : écoulement instable séparé, ayant une couche limite d'écoulement laminaire en amont de la séparation, et produisant une allée tourbillonnaire,

-3 : écoulement instable séparé avec une couche limite laminaire en amont, avant la séparation de l'écoulement, avec en aval de la sphère un sillage turbulent chaotique,

-4 : écoulement séparé, avec une couche limite turbulente.



Transport Lagrangien

Le transport de particules discrètes comme des gouttes ou des particules de dimensions supérieures aux particules fluides nécessite un calcul individuel. Quand la particule est plongée dans un milieu infini de vitesse u_∞, l'équation du mouvement s'écrit

$$m_p \frac{d\mathbf{u}}{dt} = (m_p - m_f)\mathbf{g} + m_f \left.\frac{D\mathbf{u}_\infty}{Dt}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x_P}} + \frac{1}{2}\rho_f S C_D |\mathbf{u_p} - \mathbf{u}_\infty|(\mathbf{u_p} - \mathbf{u}_\infty) + \textbf{autres forces}$$

$$\frac{d\mathbf{x_p}}{dt} = \mathbf{u_p}$$

Turbulence

Décomposition de Reynolds

$v = \bar{v} + v'$

OÙ $\bar{v} = \frac{1}{t_0}\int_t^{t+t_0} v(\tau)d\tau$

On note aussi

$$\overline{v'} = 0$$

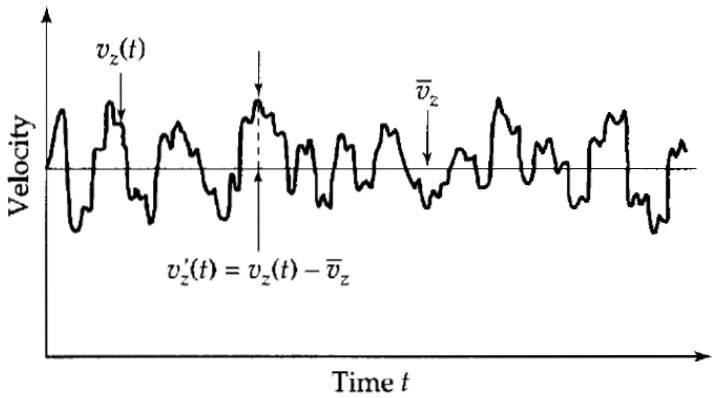
$$\bar{\bar{v}} = \bar{v}$$

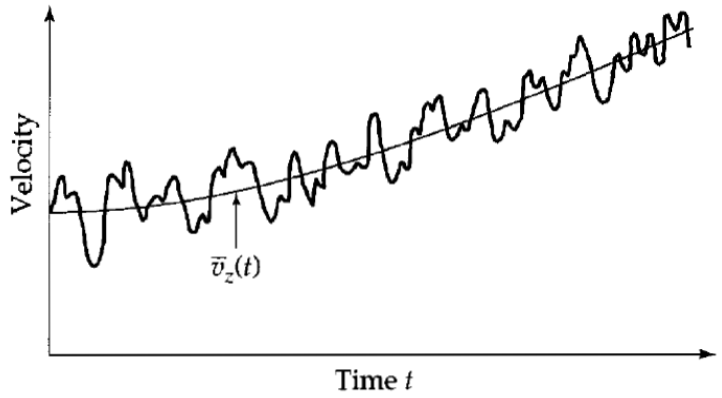
$$\overline{\bar{v}v'} = 0$$

$$\overline{\frac{\partial v}{\partial x}} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial x}$$

$$\overline{\frac{\partial v}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial t}$$

$$\overline{v'v'} \neq 0$$





Turbulence

On remplace dans les équations de continuité et de Navier-Stokes $\mathbf{v} = \mathbf{v}' + \bar{\mathbf{v}}$ et $p = p' + \bar{p}$

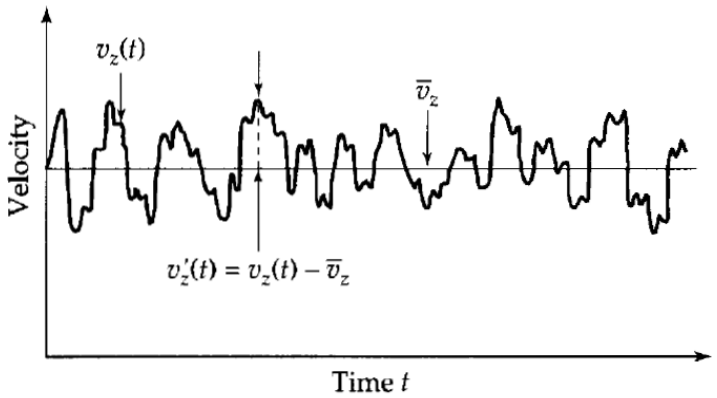
$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{v}_x + v_x') + \frac{\partial}{\partial y}(\bar{v}_y + v_y') + \frac{\partial}{\partial z}(\bar{v}_z + v_z') = 0$$

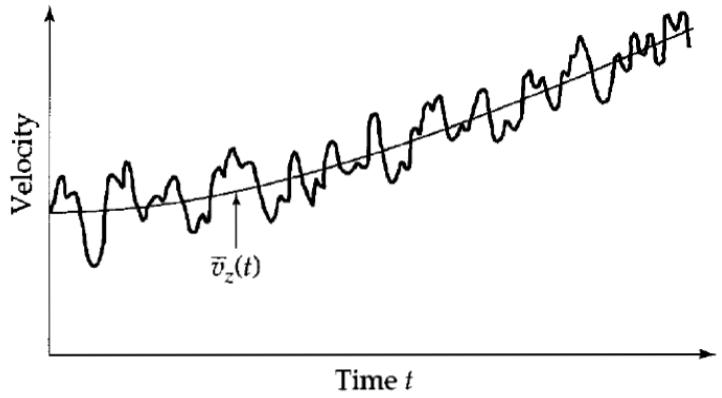
$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\bar{v}_x + v_x') = -\frac{\partial}{\partial x}(\bar{p} + p') - \left(\frac{\partial}{\partial x}\rho(\bar{v}_x + v_x')(\bar{v}_x + v_x') + \frac{\partial}{\partial y}\rho(\bar{v}_y + v_y')(\bar{v}_x + v_x') + \frac{\partial}{\partial z}\rho(\bar{v}_z + v_z')(\bar{v}_x + v_x')\right) + \mu\nabla^2(\bar{v}_x + v_x') + \rho g_x$$

On obtient après quelques manipulations

$$\frac{\partial}{\partial x}\bar{v}_x + \frac{\partial}{\partial y}\bar{v}_y + \frac{\partial}{\partial z}\bar{v}_z = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\bar{v}_x = -\frac{\partial}{\partial x}\bar{p} - \left(\frac{\partial}{\partial x}\rho\bar{v}_x\bar{v}_x + \frac{\partial}{\partial y}\rho\bar{v}_y\bar{v}_x + \frac{\partial}{\partial z}\rho\bar{v}_z\bar{v}_x\right) - \left(\frac{\partial}{\partial x}\rho\overline{v_x'v_x'} + \frac{\partial}{\partial y}\rho\overline{v_y'v_x'} + \frac{\partial}{\partial z}\rho\overline{v_z'v_x'}\right) + \mu\nabla^2\bar{v}_x + \rho g_x$$





Turbulence

On introduit les tensions de Reynolds de façon analogue aux tensions visqueuses

$$\overline{\tau_{xy}^{t}} = \rho\,\overline{v_x' v_y{}'} \qquad \overline{\tau_{xz}^{t}} = \rho\,\overline{v_x' v_z{}'} \qquad \overline{\tau_{xx}^{t}} = \rho\,\overline{v_x' v_x{}'}$$

On obtient ainsi une nouvelle forme pour les équations moyennes du mouvement

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}' = 0 \qquad \boldsymbol{\nabla}\cdot\bar{\mathbf{v}} = 0 \qquad \frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{\mathbf{v}}) = -\boldsymbol{\nabla}\,\bar{p} - [\boldsymbol{\nabla}\cdot\rho\bar{\mathbf{v}}\,\bar{\mathbf{v}}] - \left[\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\bar{\boldsymbol{\tau}}^{\mathbf{v}} + \bar{\boldsymbol{\tau}}^{\mathbf{t}}\right)\right] + \rho\mathbf{g}$$

Notons que la turbulence écrite sous cette forme semble jouer le rôle d'un agent qui transporte la quantité de mouvement par diffusion en moyenne.
Il y a donc un accroissement du transport de quantité de mouvement dans un écoulement turbulent, comparé à un écoulement visqueux.
Il faut cependant noter que ce terme de diffusion n'est pas uniforme puisque la viscosité turbulente dépend du temps et de la position.

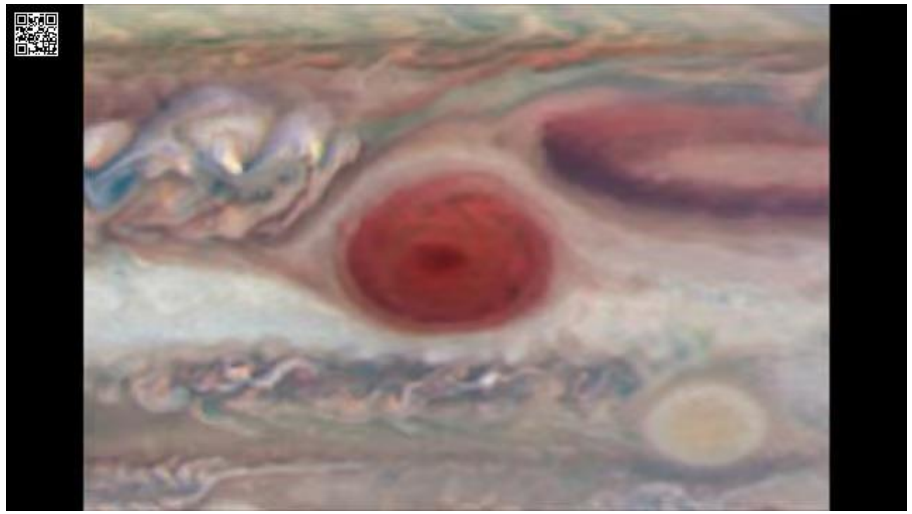
Turbulence

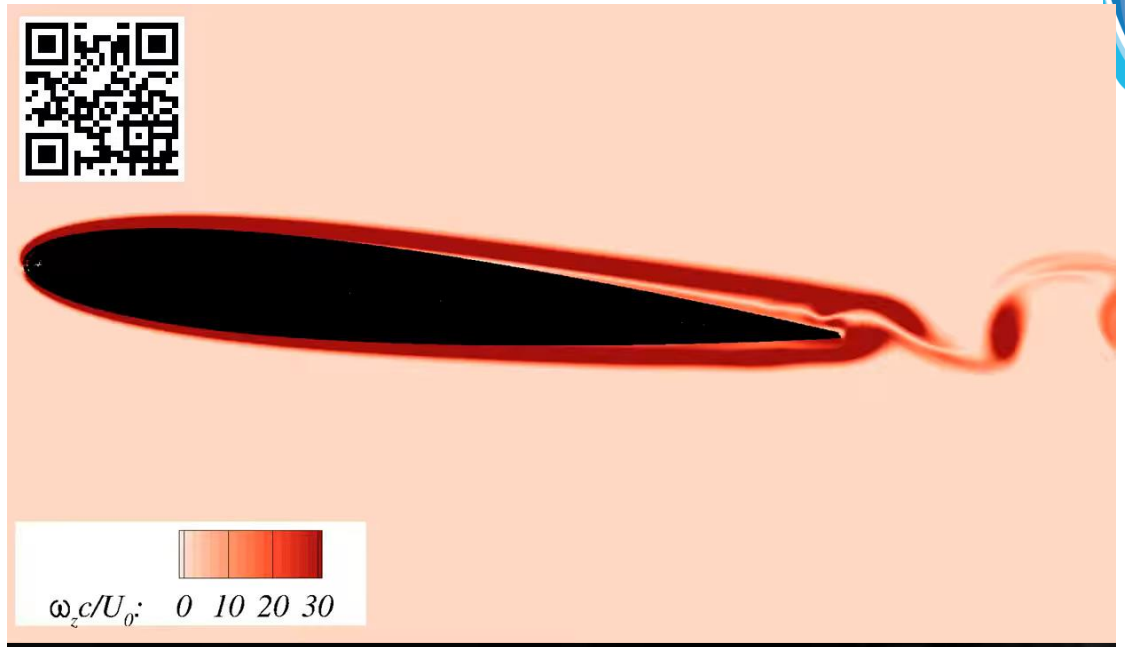
On a 6 inconnues:

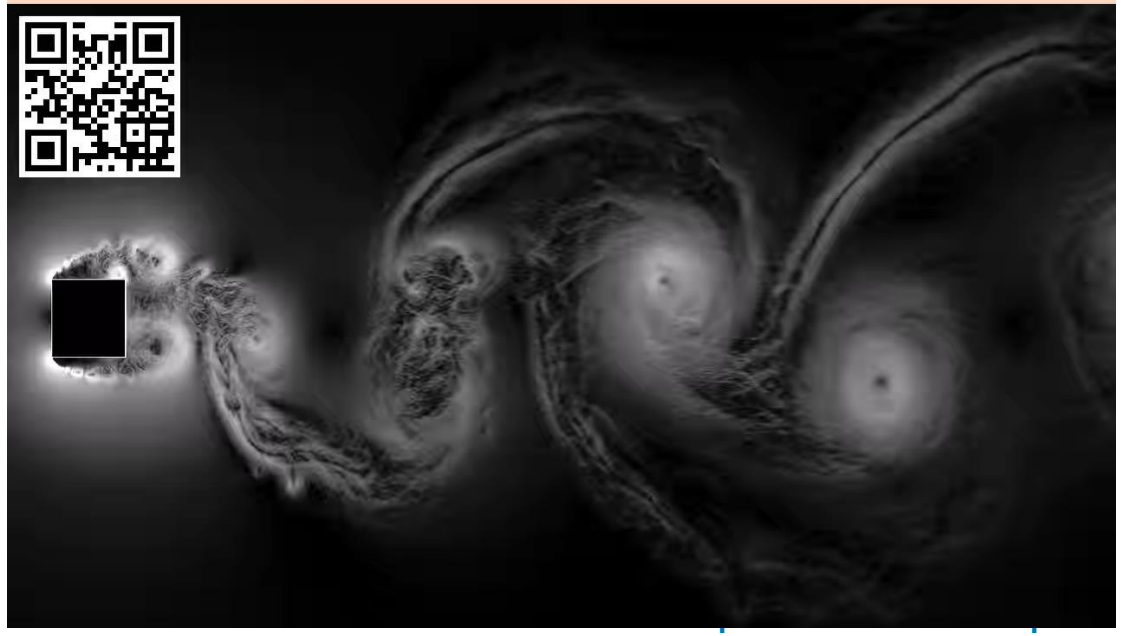
$$\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} \rho\,\overline{v_x' v_x{}'} & \rho\,\overline{v_x' v_y{}'} & \rho\,\overline{v_x' v_z{}'} \\ \rho\,\overline{v_y' v_x{}'} & \rho\,\overline{v_y' v_y{}'} & \rho\,\overline{v_y' v_z{}'} \\ \rho\,\overline{v_z' v_x{}'} & \rho\,\overline{v_z' v_y{}'} & \rho\,\overline{v_z' v_z{}'} \end{pmatrix}$$

Notons que le problème n'est pas encore fermé. Pour calculer $\overline{\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{t}}}$ il faut introduire un certain degré d'empirisme soit en corrélant ces tensions au champs moyen ou par d'autres techniques.

Echelles de turbulence







Grandes amplitudes des échelles balayées par les écoulements fluides.

Transport de masse

Définitions

Concentration moléculaire:

$$c_A = \frac{\rho_A}{M_A} = \frac{n_A}{V} = \frac{p_A}{RT}$$

Fraction molaire:

$$y_A = \frac{c_A}{c}$$

Fraction molaire pour un gaz:

$$y_A = \frac{p_A/RT}{P/RT} = \frac{p_A}{P}$$

Fraction massique:

$$\omega_A = \frac{\rho_A}{\rho}$$

Définitions

- **Vitesse:**

❑ Vitesse moyenne basée sur la masse

$$\mathbf{V} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \rho_i \mathrm{v}_i}{\sum_{i=1}^{n} \rho_i} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \rho_i \, \mathrm{v}_i}{\rho}$$

❑ Vitesse moyenne basée sur la concentration

$$\mathbf{V}^* = \frac{\sum_{i=1}^{n} c_i \mathrm{v}_i}{c}$$

Exemple: l'air atmosphérique

Dans l'air ambiant, $y_{O_2} = 0.21$ et $y_{N_2} = 0.79$.
Pour une mole d'air ($\mathrm{n} = 1\ mole$), $n_{O_2} = y_{O_2} n = 0.21$ mole d'oxygène et $n_{N_2} = 0.79$ mole d'azote.
La masse de l'oxygène est $m_{O_2} = n_{O_2} M_{O_2} = 0.21 \times 32 = 6.72\ g$

$$m_{N_2} = n_{N_2} M_{N_2} = 0.79 \times 28 = 22.12\ g$$

La masse de l'ensemble $m_T = m_{O_2} + m_{N_2} = 28.84\ g$
Il s'agit de la masse d'une mole d'air, alors $M_{air} = 28.84\ g/mole$ pour 25°C et P=1 atm=1.013 bars.

Les fractions massiques:

$$\omega_{O_2} = \frac{m_{O_2}}{m_T} = \frac{6.72}{28.84} = 0.233$$

$$\omega_{N_2} = \frac{m_{N_2}}{m_T} = 1 - \omega_{O_2} = 0.767$$

Exemple: l'air atmosphérique

Par la loi des gaz parfait, pour $n_{air} = 1\ mole$

$$V = \frac{n_{air}RT}{P} = \frac{1 \times 8.314 \times (15 + 273.15)}{1.013 \times 10^5} = 0.0236\ m^3 = 23.6\ litres$$

Ainsi la concentration

$$c_{O_2} = \frac{n_{O_2}}{V} = \frac{0.21}{0.0236} = 8.9\frac{mole}{m^3}$$

$$c_{N_2} = \frac{n_{N_2}}{V} = 33.5\frac{mole}{m^3}$$

Alors

$$c = \sum_i^n c_i = c_{O_2} + c_{N_2} = 42.4\ mole/m^3$$

La masse volumique

$$\rho = \frac{m_{\mathrm{T}}}{\mathrm{V}} = \frac{28.8 \times 10^{-3}}{0.0236} = 1.22\ \mathrm{kg/m^3}$$

Exemple: l'air atmosphérique

On peut également retrouver la masse molaire

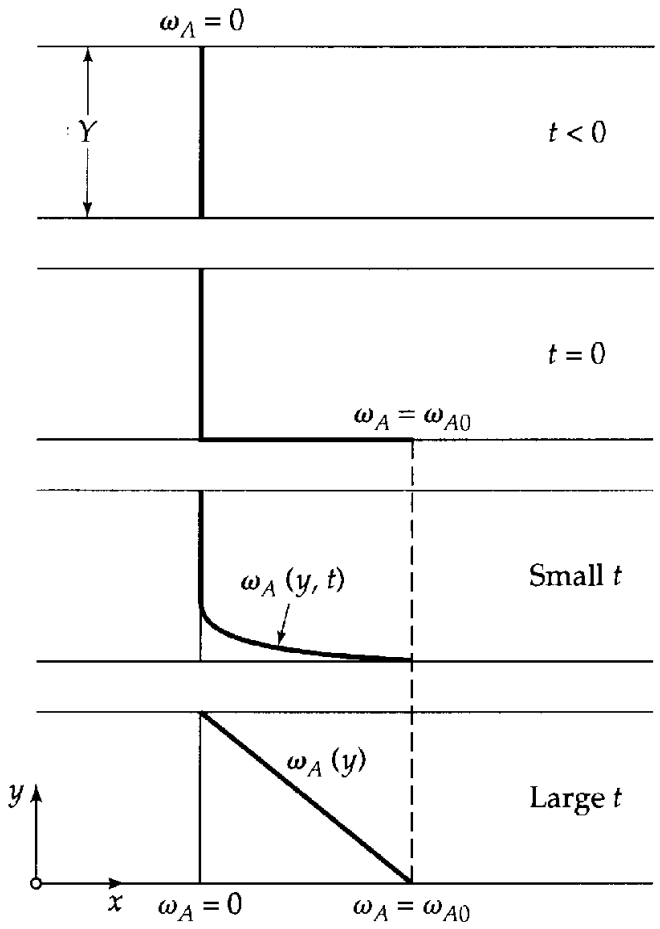
$$M_{air} = \frac{\rho}{c} = \frac{1.22}{42.4} = 0.0288 \frac{kg}{mole} = 28.8 \frac{g}{mole}$$

Pour les pressions partielles, notons que

$$P_{O_2} = P\, y_{O_2} = 1.013 \times 0.21 = 0.213\ bars$$

$$P_{N_2} = P\, y_{N_2} = 1.013 \times 0.79 = 0.8\ bars$$

Transport par diffusion: Loi de Fick



On suppose qu'au dessus d'une plaque en **verre de quartz (silice)**, se trouve un volume d'air infini tandis qu'en dessous, nous avons un volume d'hydrogène qui est soluble avec la plaque en verre. A cause des mouvements moléculaires, l'hydrogène se diffuse dans la plaque.

On note l'hydrogène, espèce A et le verre en quartz, espèce B. La fraction massique est égale respectivement à $\omega_A = \omega_{A0}$ (limitée par la solubilité de A dans B) en $y = 0$ et $\omega_A = 0$ en $y = Y$

Ainsi, on écrit: $$\frac{\dot{m}_A}{S} = \rho\, \mathfrak{D}_{AB} \frac{\omega_{A0} - 0}{Y - 0}$$

Où $\mathfrak{D}_{AB}$ est le coefficient de diffusion binaire.

Transport par diffusion: Loi de Fick

$$\frac{\dot{m}_A}{S} = -\rho\, \mathfrak{D}_{AB} \frac{\omega_{A0} - 0}{0 - Y}$$

$$J_{Ay} = -\rho\, \mathfrak{D}_{AB} \frac{d\omega_A}{dy}$$

Pour un élément dy infinitésimal

$$\mathbf{J}_A = -\rho\, \mathfrak{D}_{AB}\, \boldsymbol{\nabla}\omega_A \quad \text{et} \quad \mathbf{J}_B = -\rho\, \mathfrak{D}_{BA}\, \boldsymbol{\nabla}\omega_B$$

On note que $\mathfrak{D}_{BA} = \mathfrak{D}_{AB}$

Loi de Fick a été obtenue par analogie avec la conduction thermique

Adolf Eugen Fick
1829-1901

Transport par diffusion et advection

Dans cette définition, on néglige la vitesse de propagation du fluide. Dans ce cas, le flux de masse doit être calculer relativement au mouvement moyen du fluide comme suit

$$\boldsymbol{J}_A = \rho\omega_A(\boldsymbol{v_A} - \boldsymbol{v})$$

Où

$$\boldsymbol{v} = \omega_A\boldsymbol{v_A} + \omega_B\boldsymbol{v_B}$$

La loi de Fick peut être aussi écrite en fonction de la concentration comme suit

$$\boldsymbol{J_A^*} = -c\,\mathfrak{D}_{AB}\,\boldsymbol{\nabla} y_A = c\,y_A(\boldsymbol{v_A} - \boldsymbol{v}^*)$$

Où

$$c\boldsymbol{v}^* = c_A\boldsymbol{v_A} + c_B\boldsymbol{v_B}$$

Transport par diffusion et advection

$$\boldsymbol{J}_{\boldsymbol{A}}^{*} = -c\,\mathfrak{D}_{AB}\,\boldsymbol{\nabla} y_A = c\,y_A(\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{A}} - \boldsymbol{v}^{*})$$

$$c\,\boldsymbol{v}^{*} = c_A\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{A}} + c_B\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{B}}$$

$$c y_A\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{A}} = -\,c\,\mathfrak{D}_{AB}\,\boldsymbol{\nabla} y_A + y_A(c_A\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{A}} + c_B\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{B}})$$

$$c_A\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{A}} = -\,c\,\mathfrak{D}_{AB}\,\boldsymbol{\nabla} y_A + y_A\,(c_A\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{A}} + c_B\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{B}})$$

$$\boldsymbol{N}_{\boldsymbol{A}} = -\,c\,\mathfrak{D}_{AB}\,\boldsymbol{\nabla} y_A + y_A\,(\boldsymbol{N}_{\boldsymbol{A}} + \boldsymbol{N}_{\boldsymbol{B}})$$

On note que les flux molaires sont définis:

$$\boldsymbol{N}_{\boldsymbol{A}} = c_A\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{A}}$$
$$\boldsymbol{N}_{\boldsymbol{B}} = c_B\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{B}}$$

Transport par diffusion et advection

$$\boldsymbol{N_A} = -\, c\, \mathfrak{D}_{AB}\, \boldsymbol{\nabla} y_A + y_A\, (\boldsymbol{N_A} + \boldsymbol{N_B})$$

$$\boldsymbol{N_A} = -\, c\, \mathfrak{D}_{AB}\, \boldsymbol{\nabla} y_A + c\, y_A\, \boldsymbol{v}^*$$

$$\boldsymbol{N_A} = \boldsymbol{J_A^*} + c\, y_A\, \boldsymbol{v}^*$$

Transport diffusif

Transport advectif

$$\boldsymbol{N_A} = \boldsymbol{J_A^*} + c\, y_A\, \boldsymbol{v}^* \qquad \frac{mole}{m^2 s}$$

$$\boldsymbol{n_A} = \boldsymbol{J_A} + \rho_A \boldsymbol{v} \qquad \frac{kg}{m^2 s}$$

avec $\boldsymbol{n_A} = \rho_A \boldsymbol{v_A}$

Exemple

Diffusion d'un liquide dans un gaz stationnaire:

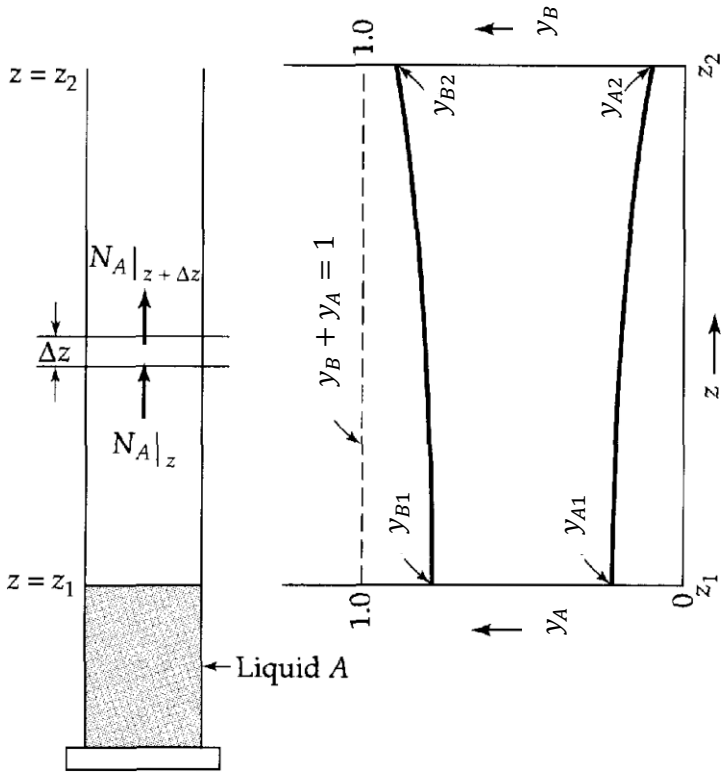
- Problème monodimensionnel
- On considère que le fluide B est stationnaire ($\boldsymbol{N_B} = 0$)

$$\boldsymbol{N_A} = -\, c\, \mathfrak{D}_{AB}\, \boldsymbol{\nabla} y_A + y_A\, (\boldsymbol{N_A} + \boldsymbol{N_B})$$

$$N_{Az} = -\frac{c\, \mathfrak{D}_{AB}}{1-y_A}\frac{dy_A}{dz} \quad \text{et} \quad -\frac{dN_{Az}}{dz} = 0$$

$$\frac{d}{dz}\left(\frac{c\mathfrak{D}_{AB}}{1-y_A}\frac{dy_A}{dz}\right) = 0 \;\; \text{et}\; y_A(z_1) = y_{A1}, y_A(z_2) = y_{A2}$$

$$\frac{1-y_A}{1-y_{A1}} = \left(\frac{1-y_{A2}}{1-y_{A1}}\right)^{\frac{z-z_1}{z_2-z_1}} \quad \text{OU} \quad \frac{y_B}{y_{B1}} = \left(\frac{y_{B2}}{y_{B1}}\right)^{\frac{z-z_1}{z_2-z_1}}$$



Coefficient de diffusion

- D'après la loi de Fick

$$\mathfrak{D}_{AB} = -\frac{\boldsymbol{J_A}}{\rho \boldsymbol{\nabla} \omega_A} \propto \frac{\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{s\,m^2}}}{\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{m^3}}\frac{1}{\mathrm{m}}} = \frac{\mathrm{m^2}}{\mathrm{s}}$$

Gas pair A–B	*Temperature* (K)	$\mathfrak{D}_{AB}$ (cm^2/s)
CO_2–N_2O	273.2	0.096
CO_2–CO	273.2	0.139
CO_2–N_2	273.2	0.144
	288.2	0.158
	298.2	0.165
N_2–C_2H_6	298.2	0.148
N_2–nC_4H_{10}	298.2	0.0960
N_2–O_2	273.2	0.181
H_2–SF_6	298.2	0.420
H_2–CH_4	298.2	0.726
H_2–N_2	273.2	0.674
NH_3–H_2[c]	263	0.58
NH_3–N_2[c]	298	0.233
H_2O–N_2[c]	308	0.259
H_2O–O_2[c]	352	0.357
C_3H_8–nC_4H_{10}[d]	378.2	0.0768
	437.7	0.107
C_3H_8–iC_4H_{10}[d]	298.0	0.0439
	378.2	0.0823
	437.8	0.112
C_3H_8–neo-C_5H_{12}[d]	298.1	0.0431
	378.2	0.0703
	437.7	0.0945
nC_4H_{10}–neo-C_5H_{12}[d]	298.0	0.0413
	378.2	0.0644
	437.8	0.0839
iC_4H_{10}–neo-C_5H_{12}[d]	298.1	0.0362
	378.2	0.0580
	437.7	0.0786

Transfert de masse par convection

- Transfert de masse entre une surface et un fluide en mouvement
- Convection forcée
- Convection naturelle
- Equation analogue à celle de Newton pour la chaleur

$$\boxed{N_A = h_m \Delta c_A}$$

Transfert de masse par convection

On définit un nombre sans dimension appelé nombre de Sherwood

$$Sh = \frac{h_m \ell}{\mathfrak{D}_{AB}}$$

Sh dépend du type d'écoulement considéré

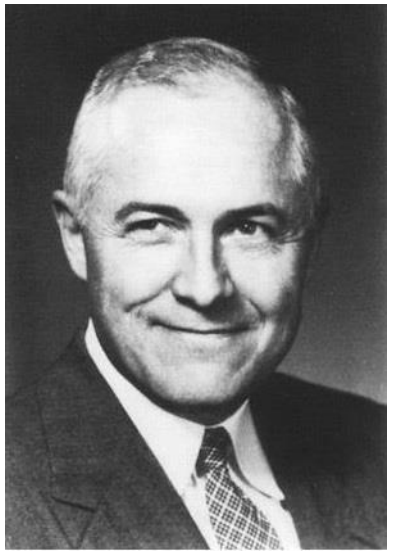
- Convection forcée
- Convection naturelle

Par exemple, pour une goutte (loi de Ranz et Marshall)

$$Sh = \frac{h_m (2R)}{\mathfrak{D}_{AB}} = 2 + 0.6\, Re^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\nu}{\mathfrak{D}_{AB}}\right)^{\frac{1}{3}}$$

Pour une goutte stationnaire (v=0)

$$h_m = \frac{\mathfrak{D}_{AB}}{R}$$



Thomas Kilgore Sherwood
1903-1976

Equations de conservation

$$\begin{bmatrix} Taux\ de \\ variation \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ce\ qui \\ rentre \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} ce\ qui \\ sort \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} réaction \\ chimique \end{bmatrix}$$

Taux de variation: $\left(\frac{\partial \rho_A}{\partial t}\right) \Delta x \Delta y \Delta z$

Flux molaire entrant dans la direction x $n_{Ax}\big|_x \Delta y \Delta z$

Flux molaire entrant dans la direction y $n_{Ay}\big|_y \Delta x \Delta z$

Flux molaire entrant dans la direction z $n_{Az}\big|_z \Delta y \Delta x$

Taux de réaction: $r_A \Delta x \Delta y \Delta z$

Flux molaire sortant dans la direction x $n_{Ax}\big|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z$

Flux molaire sortant dans la direction y $n_{Ay}\big|_{y+\Delta y} \Delta x \Delta z$

Flux molaire sortant dans la direction z $n_{Az}\big|_{z+\Delta z} \Delta y \Delta x$

Equations de conservation

$$\begin{bmatrix} Taux\ de \\ variation \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ce\ qui \\ rentre \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} ce\ qui \\ sort \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} réaction \\ chimique \end{bmatrix}$$

$$\left(\frac{\partial \rho_A}{\partial t}\right) \Delta x \Delta y \Delta z = \left(n_{Ax}\Big|_x - n_{Ax}\Big|_{x+\Delta x}\right) \Delta y \Delta z + \left(n_{Ay}\Big|_y - n_{Ay}\Big|_{y+\Delta y}\right) \Delta x \Delta z + \left(n_{Az}\Big|_z - n_{Az}\Big|_{z+\Delta z}\right) \Delta y \Delta x + r_A \Delta x \Delta y \Delta z = 0$$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = -\left(\frac{\partial n_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial n_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial n_{Az}}{\partial z}\right) + r_A = 0.$$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \left(\frac{\partial n_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial n_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial n_{Az}}{\partial z}\right) - r_A = 0.$$

Equations de conservation

L'équation de conservation de la masse de A s'écrit

$$\boxed{\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \left(\frac{\partial n_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial n_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial n_{Az}}{\partial z}\right) - r_A = 0.} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{n_A}) - r_A = 0.}$$

On rappel que $\boxed{\boldsymbol{n_A} = \boldsymbol{J_A} + \rho_A \boldsymbol{v}}$

On obtient finalement $$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho_A \boldsymbol{v}) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{J_A} - r_A = 0.$$

Equations de conservation

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho_A \boldsymbol{v}) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{J_A} - r_A = 0.$$

Taux d'accumulation

Flux massique transporté par advection

Flux massique transporté par diffusion

Flux massique apporté ou absorbé par la réaction chimique (kg/s/m^3)

Equations de conservation

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (c_A \boldsymbol{v}^*) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{J}_A^* - r_A^* = 0.$$

Taux d'accumulation	Flux massique transporté par advection	Flux massique transporté par diffusion	Flux massique apporté par la réaction chimique (mole/s/m^3)

Equations de conservation

Si on fait la somme de tous les constituants

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho_\alpha \boldsymbol{v}) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{J_\alpha} - r_\alpha = 0. \qquad \text{où} \qquad \alpha = A, B, C, \dots \dots$$

On note que

$$\sum_\alpha \rho_\alpha = \rho$$

$$\sum_\alpha r_\alpha = 0$$

$$\sum_\alpha \boldsymbol{J_\alpha} = \boldsymbol{0}$$

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

Equations de conservation

On rappel que $\rho_A = \rho\omega_A$ où ω_A est la fraction massique

En supposant que $\rho\,\mathfrak{D}_{\mathrm{AB}}$ est constant, alors

$$\frac{\partial \rho\omega_A}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot(\rho\omega_A\boldsymbol{v}) = \rho\mathfrak{D}_{\mathrm{AB}}\,\nabla^2\omega_A + r_A$$

Dans le cas où l'advection est négligeable et qu'il n'y a pas de réaction chimique, alors on obtient

$$\frac{\partial \omega_A}{\partial t} = \mathfrak{D}_{\mathrm{AB}}\nabla^2\omega_A \quad \text{ou} \quad \frac{\partial c_A}{\partial t} = \mathfrak{D}_{\mathrm{AB}}\nabla^2 c_A$$

Qui est appelée «**seconde loi de Fick**» ou «**équation de diffusion**»

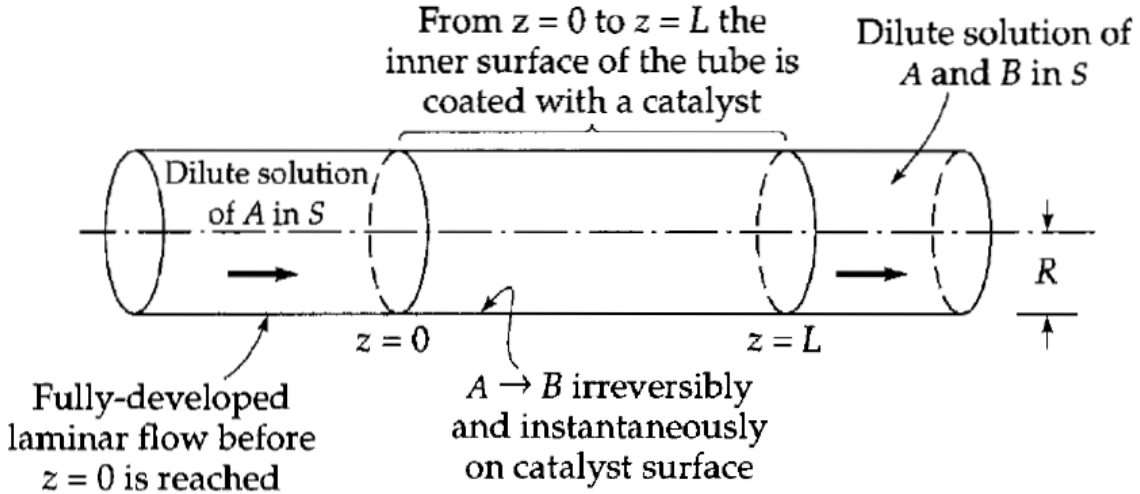
Exemple

Cas d'un écoulement laminaire dans une conduite qui transporte un composé A. Le composé A se diffuse dans un solvant S et se transforme en B au contact de la surface de la conduite qui joue le rôle de catalyseur.
Si on ignore la production de B, alors l'équation d'advection diffusion se réduit à

$$v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} = \mathfrak{D}_{\mathrm{AS}} \left[\frac{1}{\mathrm{r}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 c_A}{\partial^2 z} \right]$$

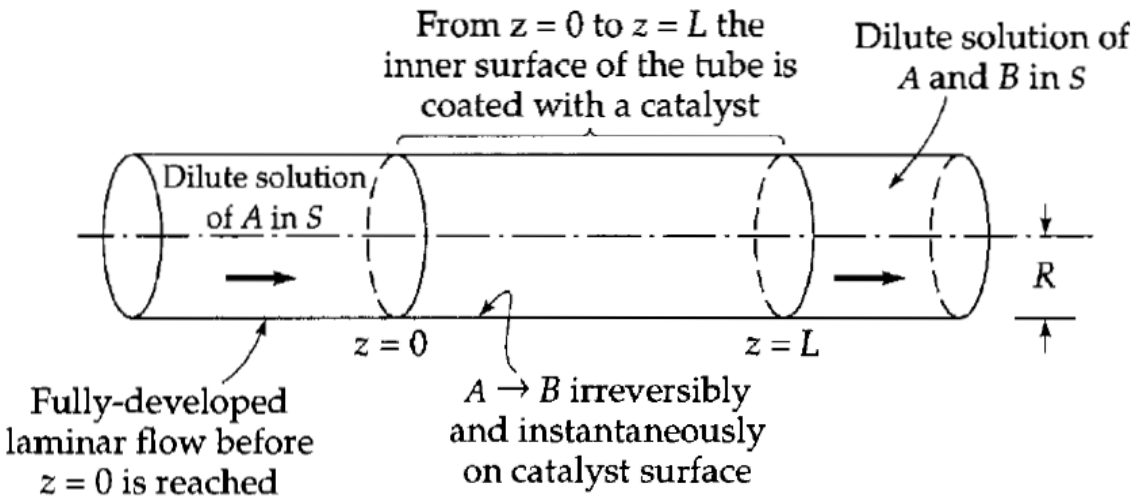
Notons que comme il n y'a pas couplage avec l'écoulement de fluide, alors

$$v_z = v_{max} \left(1 + \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right)$$



Exemple

$$v_{max}\left(1+\left(\frac{r}{R}\right)^2\right)\frac{\partial c_A}{\partial z}=\mathfrak{D}_{AS}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c_A}{\partial r}\right)$$



Les conditions aux limites

à $z = 0$: $c_A = c_{A0}$

à $r = R$: $c_A = 0$

à $r = 0$: c_A est fini

La solution s'écrit ainsi

$$\frac{c_A}{c_{A0}}=\frac{\int_0^{\eta}\exp(-\eta^3)\,d\eta}{\int_0^{\infty}\exp(-\eta^3)\,d\eta} \quad \text{où} \quad \eta=\left(\frac{R-r}{R}\right)\left(\frac{2v_{max}R^2}{9\mathfrak{D}_{AS}z}\right)^{1/3} \quad \text{et} \quad \int_0^{\infty}\exp(-\eta^3)\,d\eta=0.893$$

Couplage avec l'équation de Navier-Stokes

La variation de la composition chimique du fluide ou de sa température peuvent avoir un effet sur la masse

$$\rho(T,\omega_A) = \bar{\rho} + \left.\frac{\partial \rho}{\partial T}\right|_{\overline{\omega_A}} (T - \bar{T}) + \left.\frac{\partial \rho}{\partial \omega_A}\right|_{\bar{T}} (\omega_A - \overline{\omega_A})$$

Ainsi, l'équation de Navier Stokes devient

$$\rho \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\boldsymbol{\nabla} p + \mu \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{v} + \rho \boldsymbol{g}$$

$$\rho \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\boldsymbol{\nabla} p + \bar{\rho}\boldsymbol{g} + +\mu \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{v} + \alpha \boldsymbol{g}(T - \bar{T}) + \beta \boldsymbol{g}(\omega_A - \overline{\omega_A})$$

où $\alpha = \left.\frac{\partial \rho}{\partial T}\right|_{\overline{\omega_A}}$ et $\beta = \left.\frac{\partial \rho}{\partial \omega_A}\right|_{\bar{T}}$

La résolution de cette équation doit être couplée à

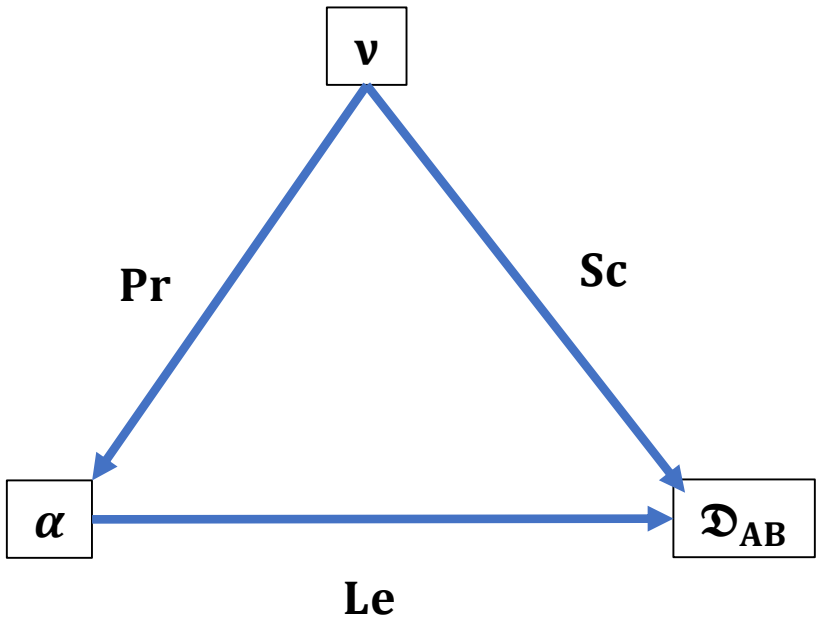
$$\frac{\partial \omega_A}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\omega_A \boldsymbol{v}) = \mathfrak{D}_{\mathrm{AB}} \nabla^2 \omega_A + r_A$$

Transferts couplés

Nombre de Prandtl: $\mathbf{Pr} = \frac{\boldsymbol{\nu}}{\boldsymbol{\alpha}} = \frac{C_p \boldsymbol{\mu}}{\boldsymbol{\lambda}}$

Nombre de Schmidt: $\mathbf{Sc} = \frac{\boldsymbol{\nu}}{\mathfrak{D}_{\mathbf{AB}}} = \frac{\boldsymbol{\mu}}{\boldsymbol{\rho}\mathfrak{D}_{\mathbf{AB}}}$

Nombre de Lewis: $\mathbf{Le} = \frac{\boldsymbol{\alpha}}{\mathfrak{D}_{\mathbf{AB}}} = \frac{\boldsymbol{\lambda}}{\boldsymbol{\rho}\mathbf{C_p}\mathfrak{D}_{\mathbf{AB}}}$



Transport de masse et turbulence

Pour établir comment un écoulement turbulent transporte la masse d'un composé A, on utilise une décomposition de Reynolds:

$$c_A = \overline{c_A} + c_A' \qquad v_x = \overline{v_x} + v_x' \qquad v_y = \overline{v_y} + v_y' \qquad v_z = \overline{v_z} + v_z'$$

On remplace dans l'équation d'advection-diffusion de A:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -\left(\frac{\partial}{\partial x} v_x c_A + \frac{\partial}{\partial y} v_y c_A + \frac{\partial}{\partial z} v_z c_A\right) + \mathcal{D}_{AB}\left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2}\right) - k_n''' c_A^n$$

$kn''' c_A^n$ est le taux de réaction et n est l'ordre de la réaction.

Transport de masse et turbulence

En prenant la moyenne, on obtient l'équation suivante

$$\frac{\partial \bar{c}_A}{\partial t} = -\left(\frac{\partial}{\partial x}\bar{v}_x\bar{c}_A + \frac{\partial}{\partial y}\bar{v}_y\bar{c}_A + \frac{\partial}{\partial z}\bar{v}_z\bar{c}_A\right) - \left(\frac{\partial}{\partial x}\overline{v'_x c'_A} + \frac{\partial}{\partial y}\overline{v'_y c'_A} + \frac{\partial}{\partial z}\overline{v'_z c'_A}\right)$$

$$+ \mathcal{D}_{AB}\left(\frac{\partial^2 \bar{c}_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}_A}{\partial z^2}\right) - \begin{cases} k_1'''\bar{c}_A & \text{or} \\ k_2'''(\bar{c}_A^2 + \overline{c_A'^2}) \end{cases}$$

Où n=1 ou 2. Sous une forme plus compacte, l'équation devient

$$\frac{D\bar{c}_A}{Dt} = -(\nabla \cdot (\bar{\mathbf{J}}_A^{(v)} + \bar{\mathbf{J}}_A^{(t)})) - \begin{cases} k_1'''\bar{c}_A & \text{or} \\ k_2'''(\bar{c}_A^2 + \overline{c_A'^2}) \end{cases}$$

Transport de masse et turbulence

$$\frac{D\bar{c}_A}{Dt} = -(\nabla \cdot (\bar{\mathbf{J}}_A^{(v)} + \bar{\mathbf{J}}_A^{(t)})) - \begin{cases} k_1'''\bar{c}_A & \text{or} \\ k_2'''(\bar{c}_A^2 + \overline{c_A'^2}) \end{cases}$$

- On observe que la turbulence accroit le flux de masse transportée.
- On observe que les réactions d'ordres supérieures créent aussi un flux de masse supplémentaire.

Un modèle de fermeture possible peut être construit par analogie au modèle de Fick pour le transport par diffusion en y introduisant un coefficient $\mathfrak{D}_{AB}^{(t)}$ qui n'est pas une constante mais varie en fonction du temps et de l'espace.

$$\bar{J}_{Ay}^{(t)} = -\mathfrak{D}_{AB}^{(t)} \frac{d\bar{c}_A}{dy}$$

Exemple

Une conduite circulaire dont la paroi contenant un composé A, soluble dans un liquide B s'écoulant à haut nombre de Reynolds et à vitesse constante. Le matériau A se dissout dans le liquide B et disparaît ensuite par une réaction de premier ordre.
Pour un écoulement turbulent en conduite cylindrique avec une réaction du premier ordre:

$$\bar{v}_z \frac{\partial \bar{c}_A}{\partial z} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r(\mathfrak{D}_{AB} + \mathfrak{D}_{AB}^{(t)})\frac{\partial \bar{c}_A}{\partial r}\right) - k_1'''\bar{c}_A$$

On cherche à déterminer un coefficient convectif de transport au voisinage de la surface de la conduite sous la forme suivante

$$h_m\left(c_{A0} - \overline{c_{A,axe}}\right) = \mathfrak{D}_{AB}\left.\frac{\partial \bar{c}_A}{\partial r}\right|_{r=R}$$

où c_{A0} est la concentration de A au niveau de la paroi et $\overline{c_{A,axe}}$ est la concentration moyenne dans l'axe de la conduite.

Exemple

On pose $\overline{c_{A,axe}} = 0$ et que $\bar{v}_z \frac{\partial c_A}{\partial z} = 0$.

On pose aussi $\mathrm{C} = \bar{c}_A / c_{A0}$

Les équations de conservation

$$\frac{1}{\mathrm{r}} \frac{\partial}{\partial \mathrm{r}} \left(\mathrm{r} \left(\mathfrak{D}_{\mathrm{AB}} + \mathfrak{D}_{\mathrm{AB}}^{(\mathrm{t})} \right) \frac{\partial \mathrm{C}}{\partial \mathrm{r}} \right) = \mathrm{k}_1''' \mathrm{C}$$

On intègre cette équation entre r et R, on obtient

$$\mathrm{h_m R} - \mathrm{r} \left(\mathfrak{D}_{\mathrm{AB}} + \mathfrak{D}_{\mathrm{AB}}^{(\mathrm{t})} \right) \frac{\partial \mathrm{C}}{\partial \mathrm{r}} = \mathrm{k}_1''' \int_r^R \eta C(\eta) d\eta$$

Notons que durant l'intégration nous avons utilisé le fait que

$$\mathfrak{D}_{AB} \left. \frac{\partial \bar{c}_A}{\partial r} \right|_{r=R} = h_m c_{A0}$$

$$C(r = R) = 1$$

Exemple

On introduit un premier changement de variable $y = R - r$

$$h_m R \int_0^R \frac{1}{(R-y)(\mathcal{D}_{AB} + \mathcal{D}_{AB}^{(t)})} dy - 1 = k_1''' \int_0^R \frac{1}{(R-y)(\mathcal{D}_{AB} + \mathcal{D}_{AB}^{(t)})} \left[\int_0^y (R - \bar{y}) C(\bar{y}) d\bar{y} \right] dy$$

Un deuxième changement de variable $\sigma = y/R$ et $\mathcal{D}_{\mathrm{AB}}^{(\mathrm{t})} = K\,\sigma^3$ (observations empiriques)

$$\frac{1}{2}\left(\frac{h_m D}{\mathcal{D}_{AB}}\right)\left(\frac{\mathcal{D}_{AB}}{\nu}\right) \int_0^1 \frac{1}{(\mathcal{D}_{AB}/\nu) + K\sigma^3} d\sigma - 1 = \left(\frac{k_1''' R^2}{\nu}\right) \int_0^1 \frac{1}{(\mathcal{D}_{AB}/\nu) + K\sigma^3} \left[\int_0^\sigma C(\bar{\sigma}) d\bar{\sigma} \right] d\sigma$$

$$\frac{1}{2}\frac{Sh}{Sc} I_0 - 1 = 2\frac{R_X}{Sh}(I_0 - I_1)$$

Où $I_0 = \int_0^1 \frac{1}{Sc^{-1} + K\,\sigma^3} d\sigma$ et $I_1 = \int_0^1 \frac{\exp\left(-Sh\frac{\sigma}{2}\right)}{Sc^{-1} + K\,\sigma^3} d\sigma$

Exemple

$$\frac{1}{2}\frac{Sh}{Sc}\,I_0 - 1 = 2\frac{R_X}{Sh}\,(I_0 - I_1)$$

Où $I_0 = \int_0^1 \frac{1}{Sc^{-1}+K\,\sigma^3}\,d\sigma$ et $I_1 = \int_0^1 \frac{\exp\left(-Sh\frac{\sigma}{2}\right)}{Sc^{-1}+K\,\sigma^3}\,d\sigma$

On rappel que

le nombre de Schmidt $Sc = \frac{\nu}{\mathfrak{D}_{\mathrm{AB}}}$

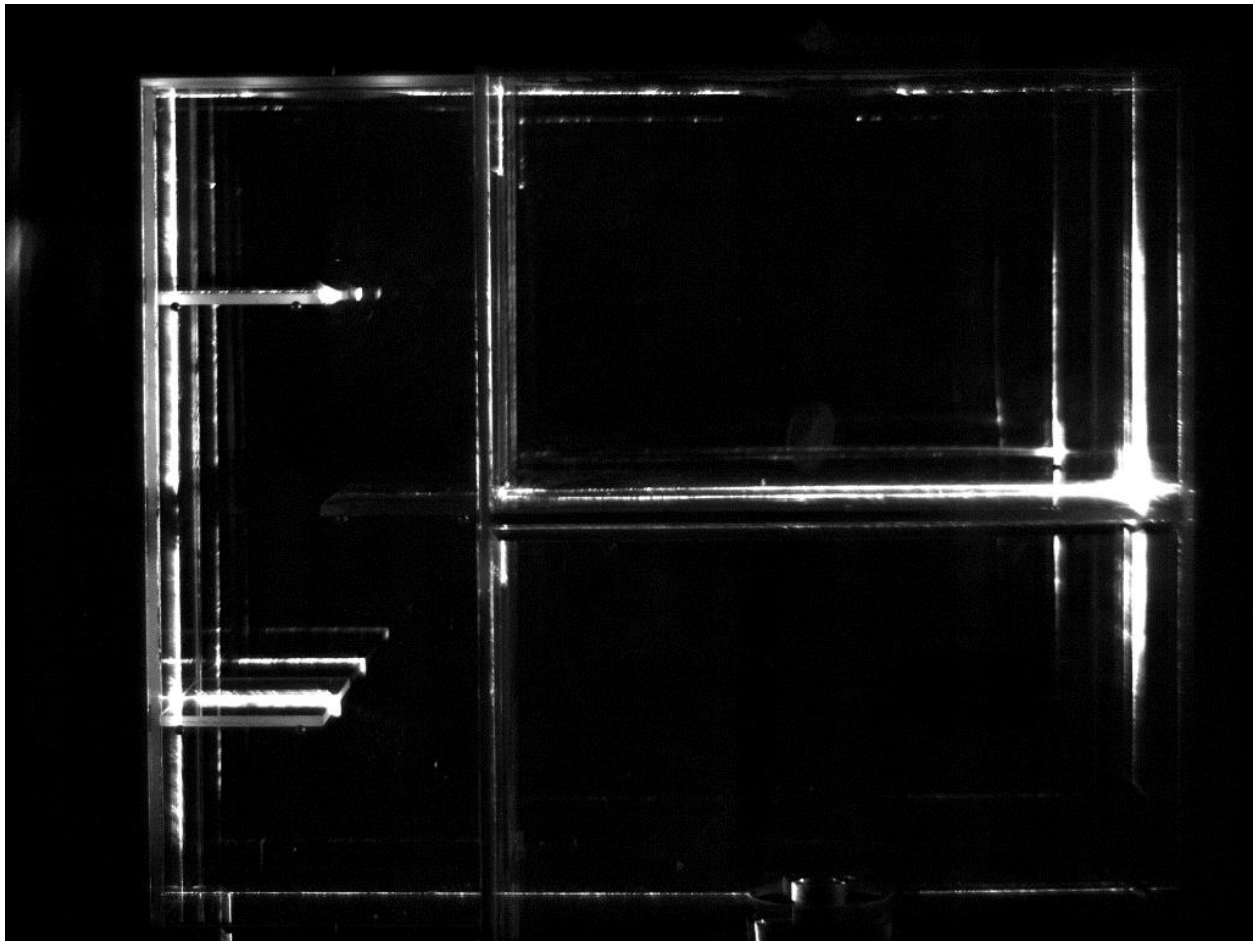
le nombre de Sherwood $\mathrm{Sh} = \frac{h_m\,2R}{\mathfrak{D}_{\mathrm{AB}}}$

le nombre de vitesse de réaction $\mathrm{Rx} = \frac{k_1'''R^2}{\nu}$

Conclusions

Dans l'incendie

- *En plus de la mécanique des fluides*
- *Equations de transport de masse*
- *Equations de transport de la chaleur*
- *Equations lagrangiennes pour le transport des particules solides et liquides*
- *Réactions de combustion*



Exemple

PHYSICAL REVIEW FLUIDS **4**, 053202 (2019)

Vortex-dynamical interpretation of anti-phase and in-phase flickering of dual buoyant diffusion flames

Tao Yang,[1] Xi Xia,[1,2] and Peng Zhang[1,*]
[1]*Department of Mechanical Engineering, The Hong Kong Polytechnic University, Hung Hom, Kowloon, Hong Kong*
[2]*School of Mechanical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Minhang, Shanghai, People's Republic of China*

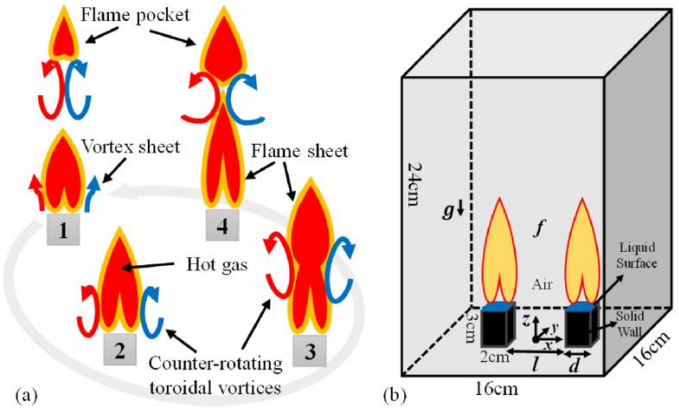


FIG. 1. (a) Illustration of the periodic flickering process of a single pool flame. (b) Schematic of the computational domain and definition of main parameters in the dual-flame system.

Exemple

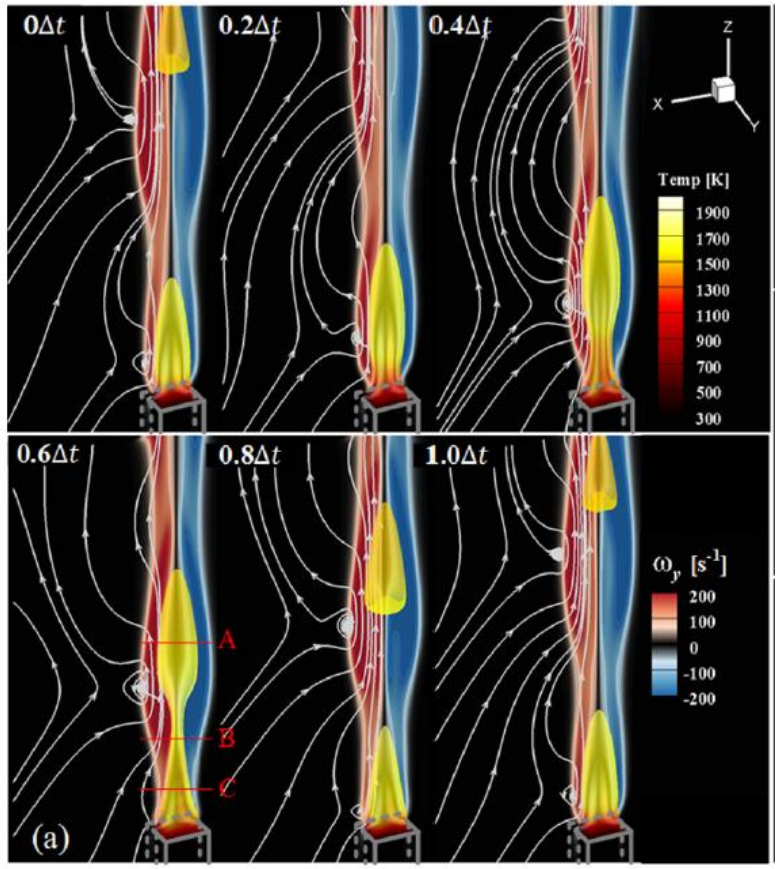
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = \dot{m}_F$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho Y_\alpha \boldsymbol{u}) = \nabla \cdot (\rho D_\alpha \nabla Y_\alpha) + \dot{m}_\alpha + \dot{m}_F$$

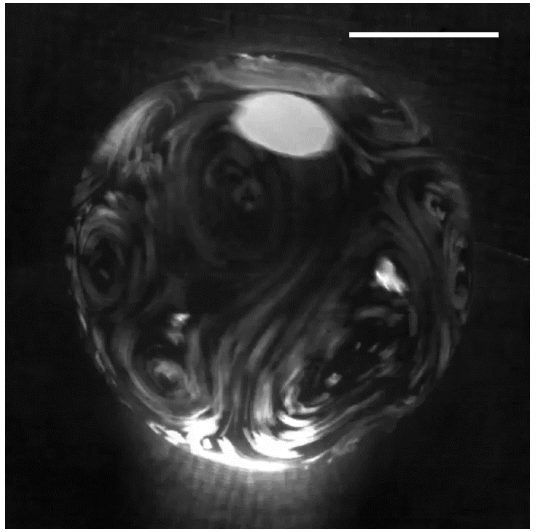
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \boldsymbol{u}) + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = -\nabla \tilde{p} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + (\rho - \rho_0)\boldsymbol{g}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_s) + \nabla \cdot (\rho h_s \boldsymbol{u}) = \frac{D\bar{p}}{Dt} + \dot{Q} - \nabla \cdot \dot{\boldsymbol{q}}$$

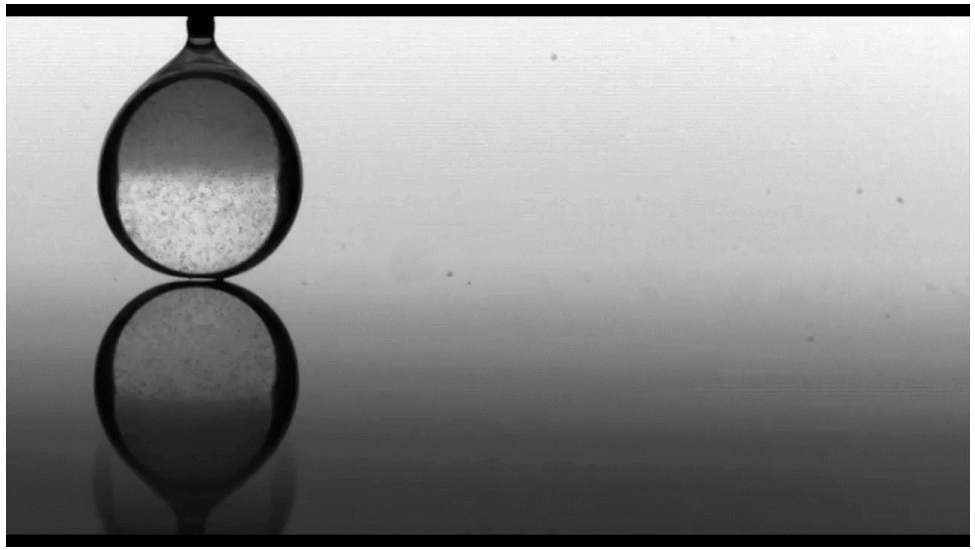
$$\rho = \frac{\bar{p}\bar{W}}{RT},$$



Complexité des phénomènes de transport



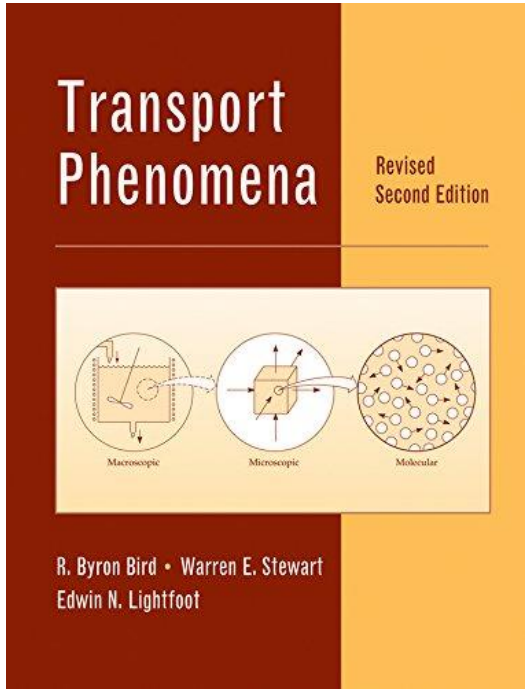
Gouttes sur une surface chaude

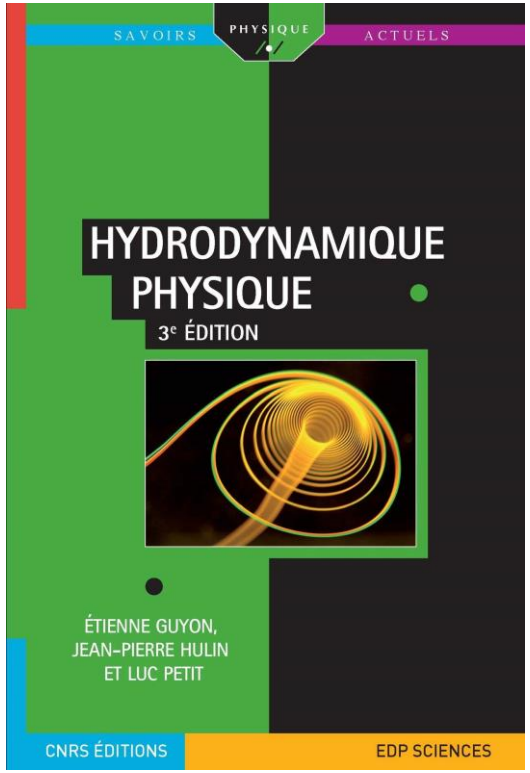


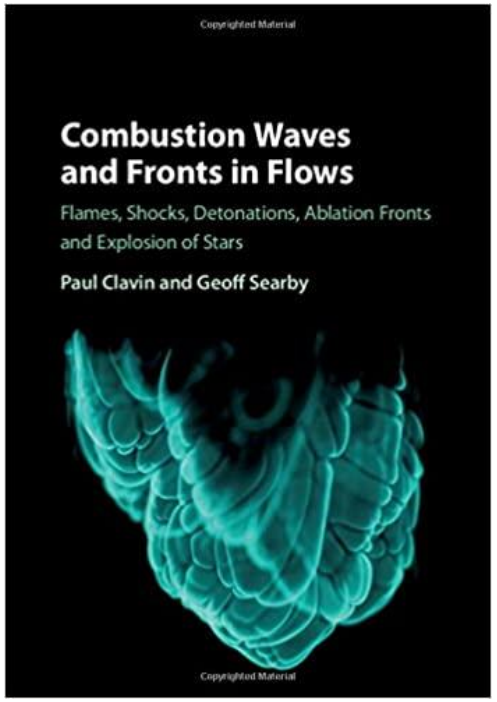
Détachement d'une goutte

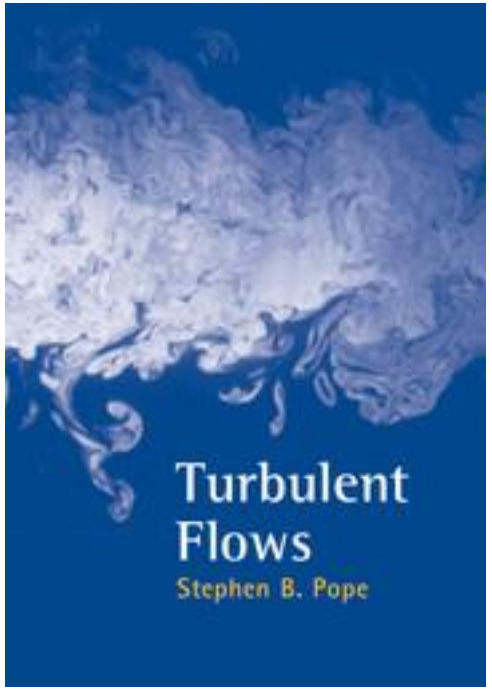
Effet Leidenfrost

Ouvrages


Transport Phenomena
Revised Second Edition
Macroscopic
Microscopic
Molecular
R. Byron Bird • Warren E. Stewart
Edwin N. Lightfoot


SAVOIRS
PHYSIQUE
ACTUELS
HYDRODYNAMIQUE PHYSIQUE
3e ÉDITION
ÉTIENNE GUYON,
JEAN-PIERRE HULIN
ET LUC PETIT
CNRS ÉDITIONS
EDP SCIENCES


Combustion Waves and Fronts in Flows
Flames, Shocks, Detonations, Ablation Fronts and Explosion of Stars
Paul Clavin and Geoff Searby


Turbulent Flows
Stephen B. Pope