

## Chapitre 2

## Rappel des équations de transport et des propriétés physiques

Le transport de chaleur et des espèces produites par les réactions chimiques est un aspect essentiel de la plupart des procédés de combustion. Ces procédés peuvent être décrits par les principes de la mécanique des milieux continus utilisés dans la mécanique des fluides et les transferts de chaleur. Pour tenir compte des effets des réactions chimiques, des termes additionnels seront ajoutés dans les équations de conservation de masse, quantité de mouvement et d'énergie.

### 2.1 Rappel sur le transfert de chaleurs et de masse :

#### 2.1.1 Transfert de la chaleur :

Dans les systèmes de combustion, la chaleur est transmise par conduction, convection et rayonnement.

##### **a) Conduction**

La conduction est le transfert moléculaire de l'énergie de la haute à la basse température. Les molécules à haute température ont beaucoup d'énergie et passent une partie de cette énergie aux autres à basse température. Le taux d'énergie transférée ( $J/s$  ou  $W$ ) peut être calculé par la loi de Fourier de la conduction de chaleur :

$$\vec{q}_{cond} = -A\lambda\vec{\nabla}T, \quad (2.1)$$

Avec  $\lambda$  est la conductivité thermique du matériau ( $\lambda \equiv \left[\frac{W}{mk}\right]$ ),  $A$  est la section et  $\vec{\nabla}T$  est le gradient de température. Cette loi implique que la quantité de chaleur transférée est proportionnelle au gradient de la température.

##### **b) Convection**

La convection est la combinaison de deux mécanismes de transport d'énergie. Le premier est dû à la collision moléculaire (conduction) et le deuxième est le transport de l'énergie du à l'écoulement global du fluide (advection).

Si on traite la convection comme l'effet de ces deux phénomènes, qui sont la conduction et l'écoulement global du fluide, on peut appliquer la loi de Fourier de la conduction :

$$\vec{q}_{conv} = -A\lambda\vec{\nabla}T(u) \quad (2.2)$$

Où le gradient de la température est fonction de la vitesse du fluide. A cause de la condition de non glissement à la surface solide, le fluide forme une couche limite (CL) dynamique et thermique.

Si on considère le cas 1D, le gradient de température peut s'écrire :

$$-\frac{dT}{dx} \simeq \frac{T_c - T_f}{\delta} \quad (2.3)$$

Avec  $\delta$  l'épaisseur de la CL thermique, on aura :

$$-A\lambda \frac{dT}{dx} \simeq A\lambda \frac{T_c - T_f}{\delta} = A\bar{h}(T_c - T_f) \quad (2.4)$$

Ici  $h \left[ \frac{W}{m^2K} \right]$  est le coefficient d'échange de chaleur convectif ( $\bar{h} = \frac{\lambda}{\delta}$ ). Ce coefficient peut être évalué par le calcul ou l'expérience, dans plusieurs configurations, il est donné par :

$$\bar{h} = c \frac{\lambda}{L} Re^a Pr^b \quad (2.5)$$

Avec  $Re$  le nombre de Reynolds,  $Pr$  le nombre de Prandtl du fluide,  $L$  une longueur caractéristique,  $a$  et  $b$  et  $c$  sont des constantes empiriques.

### c) Rayonnement

Le rayonnement est le transfert d'énergie à travers les ondes électromagnétiques qui ne nécessite aucun support, le flux radiatif est donné par :

$$\dot{q}_{rad} = F_{12}A\varepsilon\sigma_s(T^4 - T_\infty^4) \quad (2.6)$$

Ici  $T$  est la température de la substance rayonnante et  $T_\infty$  celle du milieu ambiant,  $\varepsilon$  est l'émissivité du corps ( $0 \leq \varepsilon \leq 1$ ),  $\sigma_s$  est la constante de Stefan-Boltzmann ( $5.67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2K^4}$ ),  $A$  la surface ( $m^2$ ) de la substance rayonnante et  $F_{12}$  est un facteur géométrique .

## 2.1.2 Transport de masse :

La masse est transportée par advection et diffusion. L'advection est le transport des espèces à travers le mouvement du fluide, il est décrit par :

$$\dot{m}''_{adv} = \rho_i u = \rho y_i u \quad (2.7)$$

L'exposant (") désigne un flux massique (à travers l'unité de surface)  $\left[\frac{kg}{m^2s}\right]$ ,  $\rho_i$  la densité de l'espèce  $i$  qui est donnée en fonction de celle du mélange  $\rho_i = \rho y_i$ .

La diffusion est le transport de la masse due au gradient dans la concentration des espèces. La diffusion est décrite par la loi de Fick .

$$\dot{m}''_{D,i} = -\rho D_i \frac{\partial y_i}{\partial x} \quad (2.8)$$

Ici  $D_i$  est la diffusion de l'espèce  $i$   $\left[\frac{m^2}{s}\right]$ .

Pour illustrer ce phénomène prenons un domaine infini 1D. Initialement, à gauche on a le fuel et à droite l'oxydant (voir figure 1). La diffusion entre le fuel et l'oxydant commence à l'interface, formant une couche de mélange contenant le fuel et l'oxydant. D'un point de vue moléculaire les molécules migrent aux régions de basse concentration.

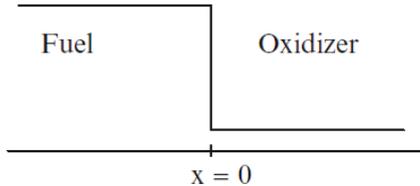


Figure 1 : Fuel et oxydant à l'état initial

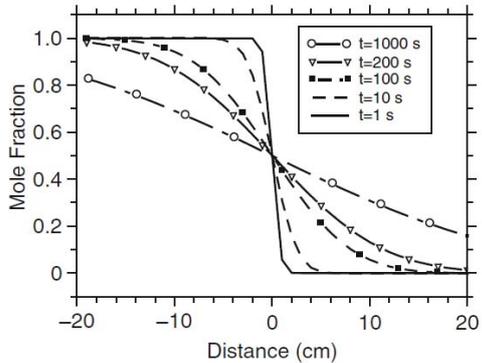
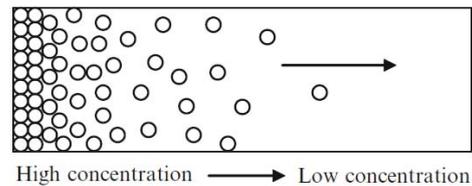


Figure 2 : Phénomène de diffusion (haut)  
Distribution de la fraction massique (bas)

Au cours du temps, la couche de mélange évolue et sa taille ( $\delta_D$ ) est proportionnelle à  $\sqrt{D_i t}$ . La diffusion est initiée premièrement par le gradient de concentration d'espèces et deuxièmement par celui de la température ainsi que le gradient de pression.

La masse de l'espèce  $i$ , peut être créée ou détruite par les réactions chimiques à un taux de :

$$\dot{m}_{i,gen}'' = \bar{r}_i M_i \left[ \frac{kg}{m^3 s} \right], \text{ avec } \bar{r}_i \left[ \frac{kmol}{m^3 s} \right] \text{ et } M_i \left[ \frac{kg}{kmol} \right] \quad (2.9)$$

$\bar{r}_i$  est le taux de production de l'espèce  $i$ .

## 2.2 Conservation de la masse et des espèces dans la combustion :

Puisque la combustion ne crée ou détruit la masse, l'équation de la conservation de la masse s'applique :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.10)$$

En 1D en coordonnée  $x$ , l'équation s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (2.11)$$

Contrairement à la conservation de la masse totale, la combustion crée et détruit les espèces. En plus des lois de conservation, la prédiction de la combustion nécessite des relations pour calculer chaque espèce chimique. Pour les combustibles gazeux, une équation simplifiée de conservation peut être trouvée en se basant sur les modèles d'advection, diffusion et génération due aux réactions chimiques.

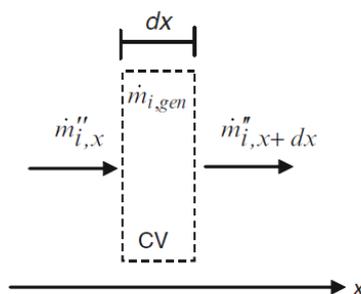


Figure 3 : Volume de contrôle 1D pour la conservation des espèces

Considérons un domaine unidimensionnel avec une épaisseur  $dx$  et section de surface unitaire (Figure 3). Le volume de ce volume de contrôle est  $V = dx.1 = dx$ . La conservation des espèces donne :

$$\frac{dm_{i,cv}}{dt} = m''_{i,x} - m''_{i,x+dx} + m'''_{i,gen} dx \quad (2.12)$$

Où le flux de masse du à la convection et la diffusion peut être exprimé par :

$$\dot{m}''_{i,x} = \dot{m}''_{adv} + \dot{m}''_{Di} = \rho u y_i - \rho D_i \frac{\partial y_i}{\partial x} \quad (2.13)$$

Et en développant en série de Taylor et en négligeant les termes d'ordre supérieur à 1

$$\dot{m}''_{i,x+dx} = \dot{m}''_{i,x} + \frac{\partial \dot{m}''_{i,x}}{\partial x} dx \quad (2.14)$$

En remplaçant (2.14) dans (2.12), on obtient

$$\frac{\partial m_{i,cv}}{\partial t} = - \frac{\partial \dot{m}''_{i,x}}{\partial x} dx + m'''_{i,gen} dx \quad (2.15)$$

La masse de l'espèce  $i$  dans le volume de contrôle est :

$$m_{i,cv} = \rho_i V = \rho y_i V \quad (2.16)$$

La substitution de (2.9), (2.13) et (2.16) dans (2.15) mène à :

$$\frac{\partial(\rho y_i)}{\partial t} dx = - \frac{\partial}{\partial x} (\rho u y_i) dx + \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_i \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) dx + \bar{r}_i M_i dx \quad (2.17)$$

Après élimination de  $dx$ , on obtient :

$$\frac{\partial(\rho y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u y_i)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_i \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) + \bar{r}_i M_i \quad (2.18)$$

En utilisant l'équation de continuité, la partie gauche se simplifie :

$$\rho \frac{\partial y_i}{\partial t} + \rho u \frac{\partial y_i}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_i \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) + \bar{r}_i M_i \quad (2.19)$$

Si  $\rho D_i$  est constante, l'équation se simplifie à :

$$\rho \frac{\partial y_i}{\partial t} + \rho u \frac{\partial y_i}{\partial x} = \rho D \frac{\partial^2 y_i}{\partial x^2} + \bar{r}_i M_i \quad (2.20)$$

### 2.3 Conservation de la quantité de mouvement :

Cette équation n'est pas affectée directement par la combustion, il n'y a pas de termes supplémentaires à ajouter, elle s'écrit donc :

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + u \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + X \quad (2.21)$$

Avec X, la force de volume.

### 2.4 Conservation d'énergie :

Le procédé de combustion fait intervenir multiples procédés chimiques incluant le transport des réactifs à travers l'écoulement de fluide, le transfert de chaleur et de masse et la cinétique chimique. Pour les combustibles gazeux, on va dériver une équation d'énergie en unidimensionnel (1<sup>ère</sup> loi de la thermodynamique).

#### 2.4.1 Termes dans l'équation de la conservation d'énergie :

a) **Conduction** : la loi Fourier de la conduction

$$\dot{q}''_{cond} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}, \quad k \text{ conductivité thermique en } \frac{W}{mk}$$

b) **Advection** :

$$\dot{q}''_{conv} = \rho u h, \quad h \text{ est l'enthalpie spécifique } u \text{ est la vitesse du fluide et } \rho \text{ la densité.}$$

c) **Pertes par radiation**

$$\dot{q}''_{rad} = \varepsilon \sigma_s (T^4 - T_\infty^4)$$

d) **Combustion** : traitée comme une génération d'énergie interne

$$\dot{q}''_{comb} = \bar{r}_{fuel} \bar{Q}_c V$$

e) **Diffusion de masse** : l'énergie transportée par la « diffusion » est :

$$\sum_{i=1}^k \rho V_i y_i h_i \quad \text{avec} \quad V_i = -\frac{D}{y_i} \frac{\partial y_i}{\partial x}$$

$V_i$  : est la vitesse de diffusion de l'espèce  $i$  dans le mélange, si on remplace :

$$\sum_{i=1}^k \rho V_i y_i h_i = -\sum_{i=1}^k \rho D \frac{\partial y_i}{\partial x} h_i$$

En utilisant la règle de différentiation en inverse :

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^k \rho V_i y_i h_i &= - \sum_{i=1}^k \rho D \frac{\partial y_i}{\partial x} h_i = - \sum_{i=1}^k \rho D \frac{\partial y_i h_i}{\partial x} + \sum_{i=1}^k \rho D \frac{\partial h_i}{\partial x} y_i \\ &= \rho D \frac{\partial h}{\partial x} + \rho D \sum_{i=1}^k \frac{\partial h_i}{\partial x} y_i\end{aligned}$$

Pour simplifier, on prend  $C_p = \text{cte}$ , on aura :

$$\frac{\partial h}{\partial x} = C_p \frac{\partial T}{\partial x}$$

Et

$$\sum_{i=1}^k \rho V_i y_i h_i = -\rho D \frac{\partial h}{\partial x} + \rho D \sum_{i=1}^k C_p \frac{\partial T}{\partial x} y_i = -\rho D C_p \frac{\partial T}{\partial x} + \rho D C_p \frac{\partial T}{\partial x} = 0$$

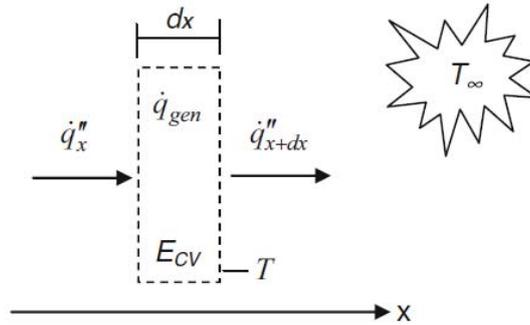


Figure 4 : Volume de contrôle 1D pour la conservation d'énergie

### 2.4.2 Dérivation de l'équation de conservation d'énergie en 1D :

soit un domaine avec une épaisseur  $dx$  et une section unitaire, le volume de contrôle est  $V = dx$ , la première loi de la thermodynamique donne :

$$\frac{dE_{cv}}{dt} = (\dot{q}''_x - \dot{q}''_{x+dx}) - A \varepsilon \sigma_s (T^4 - T_\infty^4) + \bar{f}_{fuel} \bar{Q}_c V \quad (2.22)$$

Avec  $E_{cv}$  est l'énergie interne dans le volume de contrôle,  $A$  est la section de la surface rayonnante, et

$$\dot{q}''_x = \rho u h - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad (2.23)$$

En utilisant les lois de la thermodynamique :

$$E_{cv} = m e = m(h - Pv) = mh - PV = \rho V h - PV \quad (2.24)$$

L'équation précédente devient :

$$\frac{\partial \rho V h}{\partial t} - \frac{\partial P V}{\partial t} = (\dot{q}_x'' - \dot{q}_{x+dx}'') - A \varepsilon \sigma_s (T^4 - T_\infty^4) + \bar{r}_{fuel} \bar{Q}_c V \quad (2.25)$$

En divisons par  $V$ , l'équation s'écrit :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} = \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{(\dot{q}_x'' - \dot{q}_{x+dx}'')}{dx} - \frac{A}{V} \varepsilon \sigma_s (T^4 - T_\infty^4) + \bar{r}_{fuel} \bar{Q}_c \quad (2.26)$$

Substituant

$$\dot{q}_x'' = \rho u h - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad (2.27)$$

Prenons la limite  $dx \rightarrow 0$ , et réarrangeant, on obtient :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u h}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{A}{V} \varepsilon \sigma_s (T^4 - T_\infty^4) + \bar{r}_{fuel} \bar{Q}_c \quad (2.28)$$

En utilisant l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (2.28)$$

L'équation d'énergie devient :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho u \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{A}{V} \varepsilon \sigma_s (T^4 - T_\infty^4) + \bar{r}_{fuel} \bar{Q}_c \quad (2.29)$$

L'enthalpie totale s'écrit :

$$h = h_f^0 + \int_{T_0}^T C_p dt \quad (2.30)$$

Pour simplifier, on suppose que  $C_p$  est constante, on aura :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = C_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad \text{et} \quad \frac{\partial h}{\partial x} = C_p \frac{\partial T}{\partial x} \quad (2.31)$$

Si  $\frac{\partial P}{\partial t} = 0$  et  $\lambda = cte$ , l'équation 1D simplifiée d'énergie en termes de température s'écrit :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p u \frac{\partial T}{\partial x} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{A}{V} \varepsilon \sigma_s (T^4 - T_\infty^4) + \bar{r}_{fuel} \bar{Q}_c \quad (2.32)$$

## 2.5 Propriétés physiques : Viscosité, conductivité et diffusivité

Pour connaître la dépendance des propriétés de transport de la température et de la pression on fait recours à la théorie cinétique des gaz, la théorie la plus simple traite les molécules comme des sphères rigides qui interagissent élastiquement ce qui donne les relations suivantes :

Viscosité :

$$\mu = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi M k_B T}}{\pi d^2} \alpha \sqrt{T} \left[ \frac{Kg}{ms} \right] \quad (2.33)$$

Conductivité :

$$\lambda = \frac{25}{32} \frac{c_v \sqrt{\pi M k_B T}}{\pi d^2 M} \alpha \sqrt{T} \left[ \frac{J}{mKs} \right] \quad (2.34)$$

Coefficient de diffusion :

$$D = \frac{3}{8} \frac{\sqrt{\pi M k_B T}}{\pi d^2} \frac{1}{\rho} \alpha \frac{T^{3/2}}{P} \left[ \frac{m^2}{s} \right] \quad (2.35)$$

Avec  $d$  est le diamètre des molécules,  $M$  la masse molaire,  $k_B$  la constante de Boltzmann,  $T$  température et  $\rho$  la densité.