Équations de la mécanique des fluides

Cours et supports provenant de :

"Mécanique des fluides". F. Moisy, Université Paris-Saclay
"Mécanique des fluides". J. Roussel, femto-st

Autres références utiles :
Poinsot, T & Veynante, D. Theoretical and Numerical Combustion. Edwards.
Candel, S. Mécanique des fluides. Dunod.

Fabien Thiesset
CNRS, CORIA, UMR 6614, Univ. Rouen, INSA Rouen

Objectifs du cours (2 heures)

1. Comprendre le formalisme **de la mécanique des fluides**
2. Apprendre à établir les équations fondamentales :
   a. Conservation de la **masse**
   b. Conservation de la **quantité de mouvement**
   c. Conservation des **espèces chimiques**
   d. Conservation de l'**énergie**
3. Savoir **manipuler** les opérateurs différentiels
4. Comprendre les **hypothèses** sous-jacentes

Exercice

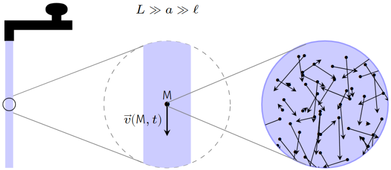
Parce qu'on append en faisant ...

Solution

... surtout lorsqu'il s'agit de manipuler les opérateurs différentiels !

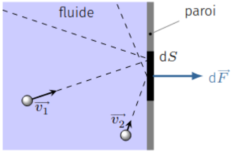
Plan du cours

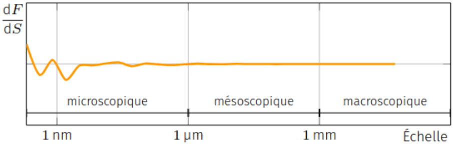
Notion de "particule fluide"



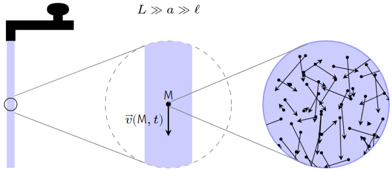
- ℓ libre parcours moyen
- a échelle d'observation
- L taille du système

Nombre de Knudsen $\quad \mathrm{Kn} = \dfrac{\ell}{a}$



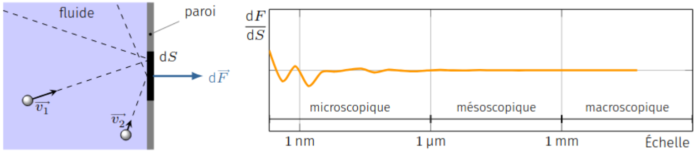


Notion de "particule fluide"



- ℓ libre parcours moyen
- a échelle d'observation
- L taille du système

Nombre de Knudsen $\quad \mathrm{Kn} = \dfrac{\ell}{a}$



Degré de vide	Pression (bar)	Molécules/cm^3	Libre parcours moyen
Pression ambiante	1,013	$2{,}7 \times 10^{19}$ –	68 nm
Vide relatif	0,300 – 0,001	$10^{19} - 10^{16}$	0,32 – 95 μm
Vide	0,001 – 10^{-6}	$10^{16} - 10^{13}$	0,095 – 95 mm
Vide poussé	$10^{-6} - 10^{-10}$	$10^{13} - 10^{9}$	9,5 cm – 0,95 km
Vide très poussé	$10^{-10} - 10^{-15}$	$10^{9} - 10^{4}$	0,95 km – $9{,}5 \times 10^4$ km
Vide extrême	$< 10^{-15}$	$< 10^{4}$	$> 9{,}5 \times 10^4$ km

Notion de "particule fluide"

Nombre de Knudsen $\mathrm{Kn} = \frac{\ell}{a}$

- ℓ libre parcours moyen
- a échelle caractéristique des inhomogénéités de l'écoulement

Domaine	Kn	**Interprétation physique**	**Modèle adapté**
Régime continu	$\mathrm{Kn} < 0.01$	Mécanique des **milieux continus** : notion de particule fluide valable	Équations de continuité + Équations de **Navier–Stokes**
Régime de glissement	$0.01 < \mathrm{Kn} < 0.1$	Apparition d'un **glissement du fluide à la paroi**	Navier–Stokes avec **corrections** (e.g. de Maxwell).
Régime de transition	$0.1 < \mathrm{Kn} < 10$	**Intermédiaire** entre continu et raréfié.	**Modèles hybrides** (cinétiques + continus, ex. Monte-Carlo + Navier–Stokes).
Régime raréfié	$\mathrm{Kn} > 10$	Effets **microscopiques** importants	Équation de **Boltzmann** ou méthodes de **simulation moléculaire**.

Table: Domaines de validité de la mécanique des milieux continus selon le nombre de Knudsen.

Description Eulerienne-Lagrangienne

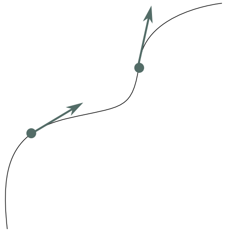
En mécanique du point

On suit la position d'un objet au cours du temps :

$$\underline{\boldsymbol{x}}(t)$$

On "étiquete" chaque particule fluide
Chaque quantité q est étudiée le long des trajectoires

→ C'est la description **Lagrangienne**



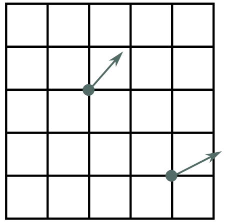
En mécanique des fluides

On peut aussi fixer le repère et regarder :

$$q(\underline{\boldsymbol{x}}, t)$$

On voit des particules fluide passées en $\underline{\boldsymbol{x}}$ avec une quantité q
Chaque quantité q est étudiée en une position donnée

→ C'est la description **Eulerienne**



Lien entre description Eulérienne et Lagrangienne

Exercice

En partant de

la définition de la vitesse $$\frac{d\underline{\boldsymbol{x}}}{dt} = \underline{\boldsymbol{u}}(\underline{\boldsymbol{x}}, t) = \{u_x, u_y, u_z\}$$

et de la différentielle totale $$dq(\underline{\boldsymbol{x}}, t) = \frac{\partial q}{\partial t}dt + \frac{\partial q}{\partial x}dx + \frac{\partial q}{\partial y}dy + \frac{\partial q}{\partial z}dz$$

prouver que $$\boxed{\underbrace{\frac{dq}{dt}}_{\text{Dérivée Lagrangienne}} = \underbrace{\frac{\partial q}{\partial t}}_{\text{Dérivée temporelle}} + \underbrace{\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} q}_{\text{Dérivée convective}}} \quad (= \partial_t q + u_j \partial_j q)$$

Lien entre description Eulérienne et Lagrangienne

Exercice

En partant de

la définition de la vitesse $$\frac{d\underline{\boldsymbol{x}}}{dt} = \underline{\boldsymbol{u}}(\underline{\boldsymbol{x}}, t) = \{u_x, u_y, u_z\}$$

et de la différentielle totale $$dq(\underline{\boldsymbol{x}}, t) = \frac{\partial q}{\partial t}dt + \frac{\partial q}{\partial x}dx + \frac{\partial q}{\partial y}dy + \frac{\partial q}{\partial z}dz$$

prouver que $$\boxed{\underbrace{\frac{dq}{dt}}_{\text{Dérivée Lagrangienne}} = \underbrace{\frac{\partial q}{\partial t}}_{\text{Dérivée temporelle}} + \underbrace{\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} q}_{\text{Dérivée convective}}} \quad (= \partial_t q + u_j \partial_j q)$$

Solution

On divide par dt $$\rightarrow \quad \frac{dq}{dt} = \frac{\partial q}{\partial t} + \underbrace{u_x \frac{\partial q}{\partial x} + u_y \frac{\partial q}{\partial y} + u_z \frac{\partial q}{\partial z}}_{\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} q}$$

Exemple : Variation de température T lors d'un voyage Lille-Marseille

- à pied $\underline{\boldsymbol{u}} \approx 0$, $\frac{dT}{dt} \approx \frac{\partial T}{\partial t}$, i.e. la température augmente entre le matin et l'après-midi
- en TGV $\frac{dT}{dt} \approx \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} T$, i.e. la température augmente entre le nord et le sud

Pour une quantité vectorielle

Pour la composante selon x $\rightarrow$ $\dfrac{dq_x}{dt} = \dfrac{\partial q_x}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} q_x$

Pour la composante selon y $\rightarrow$ $\dfrac{dq_y}{dt} = \dfrac{\partial q_y}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} q_y$

Pour la composante selon z $\rightarrow$ $\dfrac{dq_z}{dt} = \dfrac{\partial q_z}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} q_z$

$$\boxed{\frac{d\underline{\boldsymbol{q}}}{dt} = \frac{\partial \underline{\boldsymbol{q}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}})\underline{\boldsymbol{q}}} \qquad (= \partial_t q_i + u_j \partial_j q_i)$$

attention, l'ordre des opérations compte

Champs Eulériens de la mécanique des fluides

- **Scalaire** : la pression p, la densité ρ, la température T, la concentration c.
- **Vectoriel** : la vitesse $\underline{\boldsymbol{u}}$, la quantité de mouvement $\rho \underline{\boldsymbol{u}}$
- **Tensoriel** : Gradient d'un champ vectoriel $\underline{\boldsymbol{\nabla}}\ \underline{\boldsymbol{u}} = \partial_j u_i$

Le mouvement d'un fluide est souvent décrit par

- **la vitesse** : $\underline{\boldsymbol{u}}$
- **pression** P et la **densité** ρ

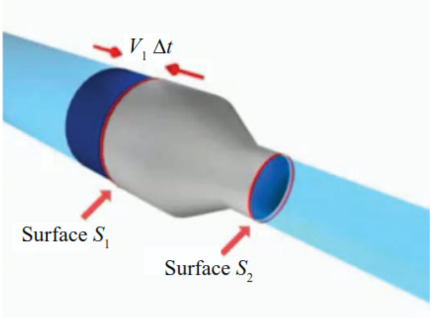
  $\rightarrow$ la température est obtenue avec l'équation d'état

Volume de contrôle

Point de vue Eulerien

Volume de contrôle (VC) **fixe**

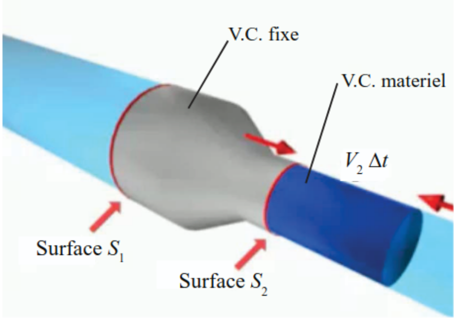
- La surface de contrôle (SC) est perméable
- La SC a une vitesse nulle $\underline{\boldsymbol{w}} = 0$
- Les quantités entrent et sortent



Point de vue Lagragien

Volume de contrôle (VC) **matériel**

- La surface de contrôle (SC) est imperméable
- La SC a une vitesse $\underline{\boldsymbol{w}} = \underline{\boldsymbol{u}}$
- les quantités sont conservées



Théorème de Reynolds et Green-Ostrogradski

Variable Extensive-Intensive

$$\underbrace{Q(t)}_{\text{Extensive}} = \int_{VC} \underbrace{q(\underline{\boldsymbol{x}}, t)}_{\text{Intensive}} \, dV$$

Les variables **extensives** sont **proportionnelles** à la taille du système (e.g. la masse, le volume)
Contrairement aux variables **intensives** (données par unité de masse ou volume)

Théorème de Reynolds et Green-Ostrogradski

Variable Extensive-Intensive

$$\underbrace{Q(t)}_{\text{Extensive}} = \int_{VC} \underbrace{q(\underline{\boldsymbol{x}}, t)}_{\text{Intensive}} \, dV$$

Les variables **extensives** sont **proportionnelles** à la taille du système (e.g. la masse, le volume)
Contrairement aux variables **intensives** (données par unité de masse ou volume)

Théorèmes

Théorème de **Reynolds** pour VC arbitraire

$$\frac{dQ}{dt} = \int_{VC} \frac{\partial q(\underline{\boldsymbol{x}}, t)}{\partial t} dV + \int_{SC} q(\underline{\boldsymbol{x}}, t) \; \underline{\boldsymbol{w}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} \; dS$$

Cas d'un VC matériel ($\underline{\boldsymbol{w}} = \underline{\boldsymbol{u}}$)

$$\frac{dQ}{dt} = \int_{VC} \frac{\partial q(\underline{\boldsymbol{x}}, t)}{\partial t} dV + \int_{SC} q(\underline{\boldsymbol{x}}, t) \; \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} \; dS$$

Théorème de **Green-Ostrogradski**

$$\boxed{\frac{dQ}{dt} = \int_{VC} \left(\frac{\partial q}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\underline{\boldsymbol{u}} q) \right) \; dV} \qquad \left(= \int_{V} (\partial_t q + \partial_j u_j q) \; dV \right)$$

Théorèmes de Reynolds et Green-Ostrogradski

Exercice

Généraliser le théorème de transport pour des quantités vectorielles

tip : associer à $\{Q, q\}$ chaque composante $\{Q_i, q_i\}$ du vecteur $\{\underline{\boldsymbol{Q}}, \underline{\boldsymbol{q}}\}$

Théorèmes de Reynolds et Green-Ostrogradski

Exercice

Généraliser le théorème de transport pour des quantités vectorielles

tip : associer à $\{Q, q\}$ chaque composante $\{Q_i, q_i\}$ du vecteur $\{\underline{\boldsymbol{Q}}, \underline{\boldsymbol{q}}\}$

Solution

Pour chaque composante i

$$\frac{dQ_i}{dt} = \int_{VC} \frac{\partial q_i}{\partial t} dV + \int_{SC} q_i(\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}})\ dS$$

Pour le vecteur $\underline{\boldsymbol{Q}}$

$$\frac{d\underline{\boldsymbol{Q}}}{dt} = \int_{VC} \frac{\partial \underline{\boldsymbol{q}}}{\partial t} dV + \int_{SC} \underline{\boldsymbol{q}}(\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}})\ dS$$

Green-Ostrogradski

$$\boxed{\frac{d\underline{\boldsymbol{Q}}}{dt} = \int_{VC} \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{q}}}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \left(\underline{\boldsymbol{u}}\underline{\boldsymbol{q}}\right)\right)\ dV} \qquad \left(= \int_V \left(\partial_t q_i + \partial_j u_j q_i\right)\ dV\right)$$

Conservation de la masse

Equation de conservation de la masse ($Q := M$, $q := \rho$)

$$\frac{dM}{dt} = \int_{VC} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\underline{\boldsymbol{u}}\rho) \right) \, dV$$

- Volume matériel : rien n'entre ni ne sort : $dM/dt = \mathbf{0}$
- À l'échelle du volume d'une particule fluide $VC \to 0$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\underline{\boldsymbol{u}}\rho) = 0} \qquad (= \partial_t \rho + \partial_j u_j \rho)$$

Conservation de la masse

Equation de conservation de la masse ($Q := M$, $q := \rho$)

$$\frac{dM}{dt} = \int_{VC} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\underline{\boldsymbol{u}}\rho) \right) \, dV$$

- Volume matériel : rien n'entre ni ne sort : $dM/dt = \mathbf{0}$
- À l'échelle du volume d'une particule fluide $VC \to 0$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\underline{\boldsymbol{u}}\rho) = 0} \qquad (= \partial_t \rho + \partial_j u_j \rho)$$

Exercice

- Exprimer la conservation de la masse sous forme Lagrangienne
- Exprimer la conservation de la masse pour un champ à iso-densité $\rho = cte$

Conservation de la masse

Equation de conservation de la masse ($Q := M$, $q := \rho$)

$$\frac{dM}{dt} = \int_{VC} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\underline{\boldsymbol{u}}\rho) \right) \, dV$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\underline{\boldsymbol{u}}\rho) = 0} \qquad (= \partial_t \rho + \partial_j u_j \rho)$$

- Volume matériel : rien n'entre ni ne sort : $dM/dt = \mathbf{0}$
- À l'échelle du volume d'une particule fluide $VC \to 0$

Exercice

- Exprimer la conservation de la masse sous forme Lagrangienne
- Exprimer la conservation de la masse pour un champ à iso-densité $\rho = cte$

Solution

pour rappel :

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial q}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} q$$

$$\underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\underline{\boldsymbol{u}} q) = \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} q + q \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\boldsymbol{u}}$$

Lagrangienne : $\boxed{\frac{d\rho}{dt} + \rho \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\boldsymbol{u}} = 0}$ $\left(\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\boldsymbol{u}} \right)$

Densité constante : $\boxed{\underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\boldsymbol{u}} = 0}$ $(\partial_j u_j = 0)$

Conservation de la masse

Cas où $\rho \neq cte$

- Écoulements **compressibles** $Ma = |\underline{\boldsymbol{u}}|/c_s > 0.3$

$$\text{Vitesse du son (GP)} \qquad c_s = \sqrt{\gamma R T} = \sqrt{\gamma \frac{P}{\rho}}$$

- Écoulements à **densité variable** $Ma \ll 1$ mais $\rho'/\overline{\rho} > 0.1$

$$\text{Helium } (\rho_{\mathbf{He}} = 0.16) - \text{Azote } (\rho_{\mathbf{N_2}} \sim 1.16) \qquad \frac{\rho'}{\overline{\rho}} \sim 1.$$

- Cas particulier des écoulements de **fluides non-miscibles** $Ma \ll 1$

$$\text{Air } (\rho = 1.2) - \text{Eau } (\rho = 1000) \qquad \frac{\rho'}{\overline{\rho}} \sim 1.$$

$$\text{Mais } \rho = cte \text{ par phase} \qquad \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\boldsymbol{u}} = 0$$

Conservation de la quantité de mouvement (2nd loi de Newton)

Principe Fondamental de la Dynamique - 2nd loi de Newton

le PFD $\boxed{\frac{d\underline{\boldsymbol{P}}}{dt} = \sum \underline{\boldsymbol{F}}^{\text{ext}}}$ où la **quantité de mouvement** : $\underline{\boldsymbol{P}} = \int_{VC} \rho \underline{\boldsymbol{u}} \, dV$

Conservation de la quantité de mouvement (2nd loi de Newton)

Principe Fondamental de la Dynamique - 2nd loi de Newton

le PFD $\boxed{\frac{d\underline{\boldsymbol{P}}}{dt} = \sum \underline{\boldsymbol{F}}^{\text{ext}}}$ où la **quantité de mouvement** : $\underline{\boldsymbol{P}} = \int_{VC} \rho \underline{\boldsymbol{u}} \, dV$

Exercice

Appliquer le théorème de transport pour $\underline{\boldsymbol{P}}$

Conservation de la quantité de mouvement (2nd loi de Newton)

Principe Fondamental de la Dynamique - 2nd loi de Newton

le PFD $\boxed{\frac{d\underline{\boldsymbol{P}}}{dt} = \sum \underline{\boldsymbol{F}}^{\text{ext}}}$ où la **quantité de mouvement** : $\underline{\boldsymbol{P}} = \int_{VC} \rho \underline{\boldsymbol{u}} \, dV$

Exercice

Appliquer le théorème de transport pour $\underline{\boldsymbol{P}}$

Solution

application du théorème de transport $$\frac{d\underline{\boldsymbol{P}}}{dt} = \int_{VC} \frac{\partial \rho \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} \, dV + \int_{SC} (\rho \underline{\boldsymbol{u}})(\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}}) \, dS = \sum \underline{\boldsymbol{F}}^{\text{ext}}$$

application de Green-Ostrogradski $$\frac{d\underline{\boldsymbol{P}}}{dt} = \int_{VC} \left(\frac{\partial \rho \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho \underline{\boldsymbol{u}} \; \underline{\boldsymbol{u}} \right) \, dV = \sum \underline{\boldsymbol{F}}^{\text{ext}}$$

Conservation de la quantité de mouvement (2nd loi de Newton)

Exercice

Utiliser la conservation de la masse : $$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho \underline{\boldsymbol{u}}$$

pour obtenir $$\int_{VC} \left(\frac{\partial \rho \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho \underline{\boldsymbol{u}}\ \underline{\boldsymbol{u}} \right) dV = \int_{VC} \rho \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} \right) dV = \boxed{\int_{VC} \rho \frac{d \underline{\boldsymbol{u}}}{dt} dV = \sum \underline{\boldsymbol{F}}^{\text{ext}}}$$

Conservation de la quantité de mouvement (2nd loi de Newton)

Exercice

Utiliser la conservation de la masse : $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho \underline{\boldsymbol{u}}$

pour obtenir $\int_{VC} \left(\frac{\partial \rho \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho \underline{\boldsymbol{u}}\ \underline{\boldsymbol{u}} \right) dV = \int_{VC} \rho \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} \right) dV = \boxed{\int_{VC} \rho \frac{d\underline{\boldsymbol{u}}}{dt} dV = \sum \underline{\boldsymbol{F}}^{\text{ext}}}$

Solution

Developper la dérivée temporelle $\frac{\partial \rho \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} = \rho \frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{u}} \frac{\partial \rho}{\partial t}$

Developper la divergence $\underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho \underline{\boldsymbol{u}}\ \underline{\boldsymbol{u}} = (\rho \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} + \underline{\boldsymbol{u}}\ \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\rho \underline{\boldsymbol{u}})$

Sommer $\frac{\partial \rho \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho \underline{\boldsymbol{u}}\ \underline{\boldsymbol{u}} = \underbrace{\rho \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} \right)}_{\frac{d\underline{\boldsymbol{u}}}{dt}} + \underbrace{\underline{\boldsymbol{u}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\underline{\boldsymbol{u}} \rho) \right)}_{=0}$

Conservation de la quantité de mouvement (Forces extérieures)

Nature des forces extérieures

$$\boxed{\underline{\boldsymbol{F}}^{\text{ext}} = \underline{\boldsymbol{F}}^{\text{VC}} + \underline{\boldsymbol{F}}^{\text{SC}}}$$

- Forces de **volume** $\underline{\boldsymbol{F}}^{\text{VC}}$

de gravité $\quad \int_{\text{VC}} \rho \underline{\boldsymbol{g}} \; dV$

de Lorentz, etc $\quad \int_{\text{VC}} \rho \underline{\boldsymbol{f}} \; dV$

- Forces de **surface** $\underline{\boldsymbol{F}}^{\text{SC}}$

normales (pression) $\quad \int_{\text{SC}} (-P) \underline{\boldsymbol{n}} \; dS \quad \left(= \int_{\text{SC}} (-P) \delta_{ij} n_j \; dS \right)$

tangentielles (visqueuses) $\quad \int_{\text{SC}} \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} \; dS \quad \left(= \int_{\text{SC}} t_{ij} n_j \; dS \right)$

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides parfaits)

Exercice

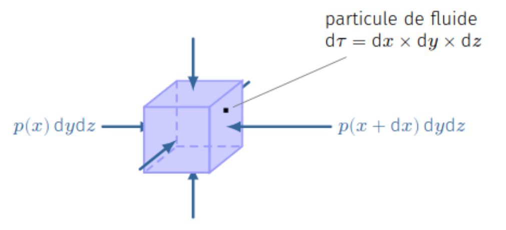
Prouver que pour un fluide non visqueux $$\underline{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{SC}} = \int_{\mathrm{SC}} (-P)\underline{\boldsymbol{n}}\, dS = \int_{\mathrm{VC}} (-\underline{\boldsymbol{\nabla}} P)\, dV$$

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides parfaits)

Exercice

Prouver que pour un fluide non visqueux $\underline{\boldsymbol{F}}^{SC} = \int_{SC} (-P)\underline{\boldsymbol{n}}\, dS = \int_{VC} (-\underline{\boldsymbol{\nabla}} P)\, dV$

Solution



selon x $\quad dF_x^{SC} = P(x)dydz - P(x + dx)dydz$

or $\quad P(x + dx) = P(x) + dx\dfrac{\partial P}{\partial x}$

donc $\quad dF_x^{SC} = \dfrac{\partial P}{\partial x}dxdydz$

vecteur force $\quad d\underline{\boldsymbol{F}}^{SC} = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P\; dV$

Ainsi, on obtient que pour un **fluide sans viscosité** les forces de surfaces sont :

$$\underline{\boldsymbol{F}}^{SC} = \int_{VC} (-\underline{\boldsymbol{\nabla}} P)\; dV$$

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides parfaits)

PFD pour un fluide parfait (= non visqueux)

$$\int_{\mathrm{VC}} \rho \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} \right) \, dV = \int_{\mathrm{VC}} (-\underline{\boldsymbol{\nabla}} P + \rho \underline{\boldsymbol{g}}) \, dV$$

Lorsque $VC \to 0$, on obtient l'**équation d'Euler** $\boxed{\rho \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} \right) = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P + \rho \underline{\boldsymbol{g}}}$

Dans un cas iso-densité ρ_0 $\quad \frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P' + \underline{\boldsymbol{g}} \qquad (P' = P/\rho_0)$

Exercice

Retrouver la loi de l'hydro-statique $P + \rho g z = cte$

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides parfaits)

PFD pour un fluide parfait (= non visqueux)

$$\int_{VC} \rho \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}})\underline{\boldsymbol{u}} \right) \, dV = \int_{VC} (-\underline{\boldsymbol{\nabla}} P + \rho \underline{\boldsymbol{g}}) \, dV$$

Lorsque $VC \to 0$, on obtient l'**équation d'Euler** $\boxed{\rho \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}})\underline{\boldsymbol{u}} \right) = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P + \rho \underline{\boldsymbol{g}}}$

Dans un cas iso-densité ρ_0 $\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}})\underline{\boldsymbol{u}} = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P' + \underline{\boldsymbol{g}}$ $(P' = P/\rho_0)$

Exercice

Retrouver la loi de l'hydro-statique $P + \rho g z = cte$

Solution

intégrer selon z $\frac{\partial P}{\partial z} = \rho g$

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides visqueux)

Fluide visqueux

Tout la difficulté est de définir la relation entre la **contrainte** $\left(\int_{SC} \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} dS\right)$ et la **déformation/compression**

On appelle cette relation une **"équation constitutive"** (idem résistance des matériaux)

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides visqueux)

Fluide visqueux

Tout la difficulté est de définir la relation entre la **contrainte** $\left(\int_{SC} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{n} dS\right)$ et la **déformation/compression**

On appelle cette relation une **"équation constitutive"** (idem résistance des matériaux)

Cas des fluides **incompressibles** **Newtoniens**

L'équation constitutive est linéaire :

$$\boxed{\underline{\underline{t}} = 2\mu \underline{\underline{d}}} \qquad \text{avec le tenseur de deformation} \qquad \underline{\underline{d}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\nabla}\ \underline{u} + (\underline{\nabla}\ \underline{u})^T\right) \qquad \left(= \frac{1}{2}\left(\partial_i u_j + \partial_j u_i\right)\right)$$

- μ est la **viscosité dynamique** : mesure la resistance du fluide au cisaillement

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides visqueux)

Fluide visqueux

Tout la difficulté est de définir la relation entre la **contrainte** $\left(\int_{SC} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{n} dS\right)$ et la **déformation/compression**

On appelle cette relation une **"équation constitutive"** (idem résistance des matériaux)

Cas des fluides **incompressibles** Newtoniens

L'équation constitutive est linéaire :

$$\boxed{\underline{\underline{t}} = 2\mu \underline{\underline{d}}} \qquad \text{avec le tenseur de deformation} \qquad \underline{\underline{d}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\boldsymbol{\nabla}}\ \underline{u} + (\underline{\boldsymbol{\nabla}}\ \underline{u})^T\right) \qquad \left(= \frac{1}{2}\left(\partial_i u_j + \partial_j u_i\right)\right)$$

- μ est la **viscosité dynamique** : mesure la resistance du fluide au cisaillement

Cas des fluides **compressibles** Newtoniens

$$\boxed{\underline{\underline{t}} = 2\mu \underline{\underline{d}} + \lambda(\underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{u})\underline{\underline{I}}} \qquad \left(= \mu\left(\partial_i u_j + \partial_j u_i\right) + \lambda\left(\partial_j u_j\right)\delta_{ij}\right)$$

- λ est la **viscosité volumique** : mesure la resistance du fluide à la compression-dilatation

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides visqueux)

Fluide visqueux

Tout la difficulté est de définir la relation entre la **contrainte** $\left(\int_{SC} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{n} dS\right)$ et la **déformation/compression**

On appelle cette relation une **"équation constitutive"** (idem résistance des matériaux)

Cas des fluides **incompressibles** **Newtoniens**

L'équation constitutive est linéaire :

$$\boxed{\underline{\underline{t}} = 2\mu \underline{\underline{d}}} \quad \text{avec le tenseur de deformation} \quad \underline{\underline{d}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{\nabla}}\, \underline{u} + (\underline{\underline{\nabla}}\, \underline{u})^T\right) \qquad \left(= \frac{1}{2}\left(\partial_i u_j + \partial_j u_i\right)\right)$$

- μ est la **viscosité dynamique** : mesure la resistance du fluide au cisaillement

Cas des fluides **compressibles** **Newtoniens**

$$\boxed{\underline{\underline{t}} = 2\mu \underline{\underline{d}} + \lambda(\underline{\underline{\nabla}} \cdot \underline{u})\underline{\underline{I}}} \qquad \left(= \mu\left(\partial_i u_j + \partial_j u_i\right) + \lambda\left(\partial_j u_j\right)\delta_{ij}\right)$$

- λ est la **viscosité volumique** : mesure la resistance du fluide à la compression-dilatation

$$\text{Hypothèse de Stokes } (\lambda = -\frac{2}{3}\mu) \quad \rightarrow \quad \boxed{\underline{\underline{t}} = \mu\left(2\underline{\underline{d}} - \frac{2}{3}\theta \underline{\underline{I}}\right)} \qquad (\theta = \underline{\underline{\nabla}} \cdot \underline{u})$$

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides visqueux)

PFD pour un fluide visqueux

$$\int_{SC} \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} \, dS = \int_{VC} \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} \, dV \quad \rightarrow \quad \text{Equation de } \textbf{Navier-Stokes} \quad \boxed{\rho \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} \right) = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} + \rho \underline{\boldsymbol{g}}}$$

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides visqueux)

PFD pour un fluide visqueux

$$\int_{SC} \underline{\underline{t}} \cdot \underline{n}\, dS = \int_{VC} \underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{t}}\, dV \quad \rightarrow \quad \text{Equation de Navier-Stokes} \quad \boxed{\rho \left(\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \underline{\nabla}) \underline{u} \right) = -\underline{\nabla} P + \underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{t}} + \rho \underline{g}}$$

Exercice

Simplifier cette équation pour un fluide newtonien à densité et viscosité constante.

Pour rappel $\quad \underline{\underline{t}} = 2\mu \underline{\underline{d}}$

Conservation de la quantité de mouvement (Fluides visqueux)

PFD pour un fluide visqueux

$$\int_{SC} \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}} \, dS = \int_{VC} \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} \, dV$$ $\rightarrow$ Equation de **Navier-Stokes** $$\boxed{\rho \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} \right) = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} + \rho \underline{\boldsymbol{g}}}$$

Exercice

Simplifier cette équation pour un fluide newtonien à densité et viscosité constante.

Pour rappel $\underline{\underline{\boldsymbol{t}}} = 2\mu \underline{\underline{\boldsymbol{d}}}$

Solution

$$\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P' + 2\nu \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{d}}} + \underline{\boldsymbol{g}}$$ ($\nu = \mu/\rho_0$ est la viscosité cinématique et $P' = P/\rho_0$)

On peut aussi montrer $2\underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{d}}} = \Delta \underline{\boldsymbol{u}}$ $(= \partial_j \partial_j u_i)$ $\rightarrow$ $$\boxed{\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P' + \nu \Delta \underline{\boldsymbol{u}} + \underline{\boldsymbol{g}}}$$

Résumé

Bilan	Cas compressible	Cas incompressible ($\rho = \rho_0$)
masse	$\dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\rho \underline{\boldsymbol{u}}) = 0$	$\underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\boldsymbol{u}} = 0$
quantité de mouvement	$\rho \left(\dfrac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} \right) = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} + \rho \underline{\boldsymbol{g}}$	$\dfrac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}) \underline{\boldsymbol{u}} = -\underline{\boldsymbol{\nabla}} P' + \nu \Delta \underline{\boldsymbol{u}} + \underline{\boldsymbol{g}}$

Résumé

Bilan	Cas compressible	Cas incompressible ($\rho = \rho_0$)
masse	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\rho \underline{\boldsymbol{u}}) = 0$	$\underline{\nabla} \cdot \underline{\boldsymbol{u}} = 0$
quantité de mouvement	$\rho \left(\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\nabla}) \underline{\boldsymbol{u}} \right) = -\underline{\nabla} P + \underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} + \rho \underline{\boldsymbol{g}}$	$\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\nabla}) \underline{\boldsymbol{u}} = -\underline{\nabla} P' + \nu \Delta \underline{\boldsymbol{u}} + \underline{\boldsymbol{g}}$

Cas intermédiaire

Hypothèse de **Boussinesq** : petites variations de ρ, i.e. $\rho = \rho_0 + \rho'$ avec $|\rho'| \ll \rho_0$

Bilan de masse $\boxed{\underline{\nabla} \cdot \underline{\boldsymbol{u}} = 0 \ \text{ donc } \ \frac{d\rho'}{dt} = 0}$ la densité est seulement transportée par l'écoulement

Les fluctuations de ρ n'apparaissent que dans le terme de gravité de NS :

Bilan de QdM $$\boxed{\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + (\underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\nabla}) \underline{\boldsymbol{u}} = -\underline{\nabla} P' + \nu \Delta \underline{\boldsymbol{u}} + \frac{\rho_0 + \rho'}{\rho_0} \underline{\boldsymbol{g}}} \qquad (P' = P/\rho_0)$$

en gros valable jusque $|\rho'|/\rho_0 \sim 0.1$. Exemple : mélange Azote-Air.

Conservation de la quantité de mouvement

Adimensionnement des équations

Échelle caractéristique d'espace $\mathcal{L}$ et de vitesse $\mathcal{U}$:

$$\underline{\boldsymbol{x}}^* = \underline{\boldsymbol{x}}/\mathcal{L} \qquad t^* = t/(\mathcal{U}/\mathcal{L})$$
$$\underline{\boldsymbol{u}}^* = \underline{\boldsymbol{u}}/\mathcal{U} \qquad P^* = P'/\mathcal{U}^2$$

L'équation de **Navier-Stokes** se réécrit alors sous forme adimensionnelle :

$$\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}^*}{\partial t^*} + (\underline{\boldsymbol{u}}^* \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}^*)\underline{\boldsymbol{u}}^* = -\underline{\boldsymbol{\nabla}}^* P^* + \frac{1}{Re}\Delta^* \underline{\boldsymbol{u}}^* + \frac{\underline{\boldsymbol{g}}^*}{Fr^2}$$

Conservation de la quantité de mouvement

Adimensionnement des équations

Échelle caractéristique d'espace $\mathcal{L}$ et de vitesse $\mathcal{U}$:

$$\underline{\boldsymbol{x}}^* = \underline{\boldsymbol{x}}/\mathcal{L} \qquad t^* = t/(\mathcal{U}/\mathcal{L})$$

$$\underline{\boldsymbol{u}}^* = \underline{\boldsymbol{u}}/\mathcal{U} \qquad P^* = P'/\mathcal{U}^2$$

L'équation de **Navier-Stokes** se réécrit alors sous forme adimensionnelle :

$$\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}^*}{\partial t^*} + (\underline{\boldsymbol{u}}^* \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}^*)\underline{\boldsymbol{u}}^* = -\underline{\boldsymbol{\nabla}}^* P^* + \frac{1}{Re}\Delta^* \underline{\boldsymbol{u}}^* + \frac{\underline{\boldsymbol{g}}^*}{Fr^2}$$

Le nombre de Reynolds $\quad Re = \dfrac{\mathcal{U}\mathcal{L}}{\nu} \quad$ Ratio inertie/viscosité

Le nombre de Froude $\quad Fr = \dfrac{\mathcal{U}}{\sqrt{gL}} \quad$ Ratio inertie/gravité

Conservation de la quantité de mouvement

Adimensionnement des équations

Échelle caractéristique d'espace $\mathcal{L}$ et de vitesse $\mathcal{U}$:

$$\underline{\boldsymbol{x}}^* = \underline{\boldsymbol{x}}/\mathcal{L} \qquad t^* = t/(\mathcal{U}/\mathcal{L})$$
$$\underline{\boldsymbol{u}}^* = \underline{\boldsymbol{u}}/\mathcal{U} \qquad P^* = P'/\mathcal{U}^2$$

L'équation de **Navier-Stokes** se réécrit alors sous forme adimensionnelle :

$$\frac{\partial \underline{\boldsymbol{u}}^*}{\partial t^*} + (\underline{\boldsymbol{u}}^* \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}}^*)\underline{\boldsymbol{u}}^* = -\underline{\boldsymbol{\nabla}}^* P^* + \frac{1}{Re}\Delta^* \underline{\boldsymbol{u}}^* + \frac{\underline{\boldsymbol{g}}^*}{Fr^2}$$

Le nombre de Reynolds $\qquad Re = \dfrac{\mathcal{U}\mathcal{L}}{\nu} \qquad$ Ratio inertie/viscosité

Le nombre de Froude $\qquad Fr = \dfrac{\mathcal{U}}{\sqrt{gL}} \qquad$ Ratio inertie/gravité

$Re \to 0$	$Re \sim 1$	$Re \gg 1$	$Re \to \infty$
Eq. de Stokes	NS-Laminaire	NS-Turbulent	Eq. Euler

Guide pratique

Les bonnes questions

1. Quel est le nombre de **Knudsen** ?
   $\rightarrow$ Si faible, milieu continu

2. Si milieu continu, quelle formulation des bilans utiliser ?
   a. Quel est le nombre de **Mach** ?
   b. Quel est le **rapport** $\rho'/\overline{\rho}$?

   $\rightarrow$ Si faibles, formulations iso-densité

3. Quelles sont les **forces de volume** agissant sur le système ?
   $\rightarrow$ gravité (nombre de Froud, Richardson, etc), lorentz (fluides conducteurs), etc...

4. Le fluide est-il **Newtonien** ?
   $\rightarrow$ si non, équations constitutives plus complexes

5. Quel est le nombre de **Reynolds** ?
   $\rightarrow$ très faible : équation de Stokes
   $\rightarrow$ faible : équation de Navier-Stokes, écoulement laminaire
   $\rightarrow$ fort, équation de Navier-Stokes, écoulement turbulent (L. Danaila)
   $\rightarrow$ gigantesque, équation d'Euler

Transport d'espèces chimiques

Variables extensive et intensive

Variable **extensive** $M_k = \int_{VC} \rho_k dV$

- M_k est la **masse partielle**
- $M = \sum_k M_k$, la **masse totale** est conservée

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho \underline{\boldsymbol{u}} = 0}$$

Variable **intensive** $\rho_k = \rho Y_k$

- $\sum_k Y_k = 1$, est la **fraction massique**
- $\rho_k = \rho Y_k$ est la **densité partielle**

$$\boxed{\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho_k \underline{\boldsymbol{u}} \neq 0 \text{ !!!!}} \quad \text{car} \quad \frac{dM_k}{dt} \neq 0$$

Transport d'espèces chimiques

Variables extensive et intensive

Variable **extensive** $M_k = \int_{VC} \rho_k dV$

- M_k est la **masse partielle**
- $M = \sum_k M_k$, la **masse totale** est conservée

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho \underline{\boldsymbol{u}} = 0}$$

Variable **intensive** $\rho_k = \rho Y_k$

- $\sum_k Y_k = 1$, est la **fraction massique**
- $\rho_k = \rho Y_k$ est la **densité partielle**

$$\boxed{\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho_k \underline{\boldsymbol{u}} \neq 0 \text{ !!!!}} \quad \text{car} \quad \frac{dM_k}{dt} \neq 0$$

Exercice

Écrire le théorème de transport pour ρ_k

Transport d'espèces chimiques

Variables extensive et intensive

Variable **extensive** $M_k = \int_{VC} \rho_k dV$

- M_k est la **masse partielle**
- $M = \sum_k M_k$, la **masse totale** est conservée

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho \underline{\boldsymbol{u}} = 0}$$

Variable **intensive** $\rho_k = \rho Y_k$

- $\sum_k Y_k = 1$, est la **fraction massique**
- $\rho_k = \rho Y_k$ est la **densité partielle**

$$\boxed{\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho_k \underline{\boldsymbol{u}} \neq 0 \text{ !!!!}} \quad \text{car} \quad \frac{dM_k}{dt} \neq 0$$

Exercice

Écrire le théorème de transport pour ρ_k

Solution

$$\left.\begin{aligned} \frac{dM_k}{dt} &= \int_{VC} \frac{\partial \rho_k}{\partial t}\, dV + \int_{SC} \rho_k \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{n}}\, dS \\ \frac{dM_k}{dt} &= \underbrace{\int_{VC} \dot{\omega}_k\, dV}_{\text{Source/puit}} + \underbrace{\int_{SC} \underline{\boldsymbol{J}}_k \cdot \underline{\boldsymbol{n}}\, dS}_{\text{Flux de matière}} \end{aligned}\right\} \quad \boxed{\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \rho_k \underline{\boldsymbol{u}} = \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\boldsymbol{J}}_k + \dot{\omega}_k}$$

Diffusion des espèces $\underline{\nabla} \cdot \underline{J}_k$

Cas binaire, i.e. $k \to$ VC

Loi de **Fick** :

$$\underline{J}_k = \rho D_k \underline{\nabla} Y_k$$

où D_k est le coefficient de diffusion de k dans le milieu.

Diffusion des espèces $\underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\boldsymbol{J}}_k$

Cas binaire, i.e. $k \rightarrow$ VC

Loi de **Fick** :

$$\underline{\boldsymbol{J}}_k = \rho D_k \underline{\boldsymbol{\nabla}} Y_k$$

où D_k est le coefficient de diffusion de k dans le milieu.

Cas multi-espèces

Modèle généralisé à N espèces (**Hirschfelder and Curtiss**):

$$\underline{\boldsymbol{J}}_k = \rho \sum_j D_{kj} \underline{\boldsymbol{\nabla}} Y_j \quad + \quad \text{Autres termes compliqués}$$

où D_{kj} est le coefficient de diffusion croisée (différentielle), i.e. comment l'espèce j influence le flux de k

Diffusion des espèces $\underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\boldsymbol{J}}_k$

Cas binaire, i.e. $k \rightarrow$ VC

Loi de **Fick** :

$$\underline{\boldsymbol{J}}_k = \rho D_k \underline{\boldsymbol{\nabla}} Y_k$$

où D_k est le coefficient de diffusion de k dans le milieu.

Cas multi-espèces

Modèle généralisé à N espèces (**Hirschfelder and Curtiss**):

$$\underline{\boldsymbol{J}}_k = \rho \sum_j D_{kj} \underline{\boldsymbol{\nabla}} Y_j \quad + \quad \text{Autres termes compliqués}$$

où D_{kj} est le coefficient de diffusion croisée (différentielle), i.e. comment l'espèce j influence le flux de k

Diffusion dans le mélange

Simplification : **espèce** $k \rightarrow$ **mélange** :

$$\underline{\boldsymbol{J}}_k = \rho D_{km} \underline{\boldsymbol{\nabla}} Y_k \quad + \quad \text{corrections pour avoir} \quad \sum_k \underline{\boldsymbol{J}}_k = 0 \rightarrow M = cte$$

où D_{km} est le coefficient de diffusion de k dans le mélange m

Terme puits/source $\dot{\omega}_k$

"On est tous le chimiste de quelqu'un"

N espèces - M réactions : $\boxed{\underbrace{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}^{P}\, \mathrm{S}_k}_{\text{Produits}} \rightleftarrows \underbrace{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}^{R}\, \mathrm{S}_k}_{\text{Réactifs}}}$ pour $j = 1 \rightarrow M$

- S_k : symbole de l'espèce k, e.g. CO_2
- ν_{kj}^{P}, ν_{kj}^{R} : coefficients stœchiométriques des réactifs et produits de l'espèce k dans la réaction j
- $\nu_{kj} = \nu_{kj}^{P} - \nu_{kj}^{R}$ **coefficients stœchiométriques nets**

Terme puits/source $\dot{\omega}_k$

"On est tous le chimiste de quelqu'un"

N espèces - M réactions : $\boxed{\underbrace{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}^{P}\, \mathrm{S}_k}_{\text{Produits}} \rightleftarrows \underbrace{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}^{R}\, \mathrm{S}_k}_{\text{Réactifs}}}$ pour $j = 1 \to M$

- S_k : symbole de l'espèce k, e.g. CO_2
- ν_{kj}^P, ν_{kj}^R : coefficients stœchiométriques des réactifs et produits de l'espèce k dans la réaction j
- $\nu_{kj} = \nu_{kj}^P - \nu_{kj}^R$ **coefficients stœchiométriques nets**

Exercice

Trouver les valeurs de ν_{kj}^P, ν_{kj}^R, ν_{kj} pour la réaction

$$\nu_{\mathbf{H_2}}^P\ \mathrm{H_2} + \nu_{\mathbf{O_2}}^P\ \mathrm{O_2} \to \nu_{\mathbf{H_2O}}^R\ \mathrm{H_2O}$$

On a donc :

- $N = 3$ espèces : $\mathrm{H_2},\ \mathrm{O_2},\ \mathrm{H_2}O$
- $M = 1$ réaction

Terme puits/source $\dot{\omega}_k$

"On est tous le chimiste de quelqu'un"

N espèces - M réactions : $$\boxed{\underbrace{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}^{P}\ \mathrm{S}_k}_{\text{Produits}} \rightleftarrows \underbrace{\sum_{k=1}^{N} \nu_{kj}^{R}\ \mathrm{S}_k}_{\text{Réactifs}}} \quad \text{pour } j = 1 \rightarrow M$$

- S_k : symbole de l'espèce k, e.g. CO_2
- ν_{kj}^{P}, ν_{kj}^{R} : coefficients stœchiométriques des réactifs et produits de l'espèce k dans la réaction j
- $\nu_{kj} = \nu_{kj}^{P} - \nu_{kj}^{R}$ **coefficients stœchiométriques nets**

Exercice

Trouver les valeurs de ν_{kj}^{P}, ν_{kj}^{R}, ν_{kj} pour la réaction

$$\nu_{\mathrm{H_2}}^{P}\ \mathrm{H_2} + \nu_{\mathrm{O_2}}^{P}\ \mathrm{O_2} \rightarrow \nu_{\mathrm{H_2O}}^{R}\ \mathrm{H_2O}$$

On a donc :

- $N = 3$ espèces : $\mathrm{H_2},\ \mathrm{O_2},\ \mathrm{H_2}O$
- $M = 1$ réaction

Solution

S_k	ν_k^R	ν_k^P	ν_k	
H_2	2	0	-2	consommé
O_2	1	0	-1	consommé
H_2O	0	2	$+2$	produit

Terme puits/source $\dot{\omega}_k$

Taux de production/consommation

$$\boxed{\underbrace{\dot{\omega}_k}_{\mathbf{kg.m^{-3}.s^{-1}}} = \underbrace{W_k}_{\mathbf{kg/mol}} \sum_{j=1}^{M} \underbrace{\nu_{kj}\mathcal{Q}_j}_{\mathbf{mol.m^{-3}.s^{-1}}}}$$

- W_k : masse molaire de l'espèce k
- $\mathcal{Q}_j$: **vitesse de réaction** de la réaction chimique j
- $\nu_{kj}\mathcal{Q}_j$: quantité de k produite/consommée à chaque réaction j

Exercice

Prouver que

$$\sum_k \dot{\omega}_k = 0$$

pour la réaction $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$

Terme puits/source $\dot{\omega}_k$

Taux de production/consommation

$$\boxed{\underbrace{\dot{\omega}_k}_{\mathbf{kg.m^{-3}.s^{-1}}} = \underbrace{W_k}_{\mathbf{kg/mol}} \sum_{j=1}^{M} \underbrace{\nu_{kj}\mathcal{Q}_j}_{\mathbf{mol.m^{-3}.s^{-1}}}}$$

- W_k : masse molaire de l'espèce k
- $\mathcal{Q}_j$: **vitesse de réaction** de la réaction chimique j
- $\nu_{kj}\mathcal{Q}_j$: quantité de k produite/consommée à chaque réaction j

Exercice

Prouver que

$$\sum_k \dot{\omega}_k = 0$$

pour la réaction $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$

Solution

$$\sum_k \dot{\omega}_k = \sum_k W_k \nu_k \mathcal{Q}$$

$$= \underbrace{[2 \times (-2) \ + \ 32 \times (-1) \ + \ 18 \times (+2)]}_{=0} \mathcal{Q}$$

En fait, la conservation de la masse impose :

$$\sum_k W_k \nu_{kj} = 0$$

$$\text{et} \quad \sum_k \dot{\omega}_k = 0$$

$\Rightarrow$ **Reste à savoir ce qu'est $\mathcal{Q}$?**

Terme puits/source $\dot{\omega}_k$

Réactions reversibles

$$\boxed{\mathcal{Q}_j = K_j^F \prod_{k=1}^{N} X_k^{\nu_{kj}^P} - K_j^B \prod_{k=1}^{N} X_k^{\nu_{kj}^R}}$$

- K_j^F, K_j^B : **constantes de réaction** *"Forward" & "Backward"*
- $X_k = \rho_k / W_k$ concentration molaire
- $X_k^{\nu_{kj}^P}$ **probabilité** que ν_{kj}^P quantité de k soit présentes dans les produits
- $X_k^{\nu_{kj}^R}$ **probabilité** que ν_{kj}^R quantité de k soit présentes dans les réactifs

Terme puits/source $\dot{\omega}_k$

Réactions reversibles

$$\boxed{\mathcal{Q}_j = K_j^F \prod_{k=1}^{N} X_k^{\nu_{kj}^P} - K_j^B \prod_{k=1}^{N} X_k^{\nu_{kj}^R}}$$

- K_j^F, K_j^B : **constantes de réaction** *"Forward" & "Backward"*
- $X_k = \rho_k / W_k$ concentration molaire
- $X_k^{\nu_{kj}^P}$ **probabilité** que ν_{kj}^P quantité de k soit présentes dans les produits
- $X_k^{\nu_{kj}^R}$ **probabilité** que ν_{kj}^R quantité de k soit présentes dans les réactifs

Exemple pour $2H_2 + O_2 \rightleftarrows 2H_2O$

Dans la direction **forward** :

- Il faut 2 quantités de H_2 et 1 quantité de O_2
- La probabilité s'écrit $[X_{H_2}]^2 \times [X_{O_2}]^1$
- Dans cette situation, $\mathcal{Q}_j^F = [X_{H_2}]^2 [X_{O_2}]^1 K_j^F$

Dans la direction **backward** :

- Il faut 2 quantités de H_20
- La probabilité s'écrit $[X_{H_2O}]^2$
- Dans cette situation, $\mathcal{Q}_j^B = [X_{H_2O}]^2 K_j^B$

$$Q_j = [X_{H_2}]^2 [X_{O_2}]^1 K_j^F - [X_{H_2O}]^2 K_j^B$$

Terme puits/source $\dot{\omega}_k$

Loi d'Arrhénius

$$\boxed{K_j^F = A_j^F \, T^{\beta_j^F} \exp\left(-\frac{{E_a}_j^F}{RT}\right)}$$

- A_j^F : facteur pré-exponentiel
- β_j^F : exposant de température
- ${E_a}_j^F$: l'énergie d'activation

Terme puits/source $\dot{\omega}_k$

Loi d'Arrhénius

$$\boxed{K_j^F = A_j^F \, T^{\beta_j^F} \exp\left(-\frac{{E_a}_j^F}{RT}\right)}$$

- A_j^F : facteur pré-exponentiel
- β_j^F : exposant de température
- ${E_a}_j^F$: l'énergie d'activation

```
ELEMENTS
 H   O    N
END
SPECIES
H2 O2 OH O H H2O HO2 H2O2 N2
END
REACTIONS
H2+O2=OH+OH                           1.700E13    0.0     47780.
H2+OH=H2O+H                           1.170E09    1.30     3626.
H+O2=OH+O                             5.130E16   -0.816   16507.
O+H2=OH+H                             1.800E10    1.0      8826.
H+O2+M=HO2+M                          2.100E18   -1.0         0.
  H2/3.3/ O2/0./ N2/0./  H2O/21.0/
H+O2+O2=HO2+O2                        6.700E19   -1.42        0.
H+O2+N2=HO2+N2                        6.700E19   -1.42        0.
OH+HO2=H2O+O2                         5.000E13    0.0      1000.
H+HO2=OH+OH                           2.500E14    0.0      1900.
O+HO2=O2+OH                           4.800E13    0.0      1000.
OH+OH=O+H2O                           6.000E08    1.3         0.
H2+M=H+H+M                            2.230E12    0.5     92600.
  H2/3./ H/2./  H2O/6.0/
O2+M=O+O+M                            1.850E11    0.5     95560.
H+OH+M=H2O+M                          7.500E23   -2.6         0.
  H2O/20.0/
HO2+H=H2+O2                           2.500E13    0.0       700.
HO2+HO2=H2O2+O2                       2.000E12    0.0         0.
H2O2+M=OH+OH+M                        1.300E17    0.0     45500.
H2O2+H=H2+HO2                         1.600E12    0.0      3800.
H2O2+OH=H2O+HO2                       1.000E13    0.0      1800.
END
```

Terme puits/source $\dot{\omega}_k$

Loi d'Arrhénius

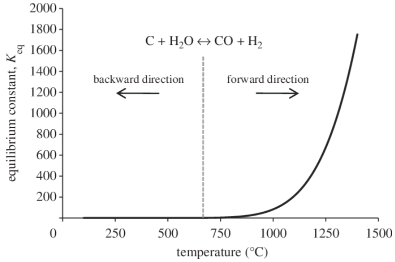
$$\boxed{K_j^F = A_j^F \, T^{\beta_j^F} \exp\left(-\frac{{E_a}_j^F}{RT}\right)}$$

- A_j^F : facteur pré-exponentiel
- β_j^F : exposant de température
- ${E_a}_j^F$: l'énergie d'activation

$$\boxed{K_j^B = \frac{K_j^F}{C_{eq,j}(T)}}$$

cte. d'éq. thermo. (NASA polyn.)

```
ELEMENTS
 H   O    N
END
SPECIES
H2 O2 OH O H H2O HO2 H2O2 N2
END
REACTIONS
H2+O2=OH+OH                                 1.700E13    0.0     47780.
H2+OH=H2O+H                                 1.170E09    1.30     3626.
H+O2=OH+O                                   5.130E16   -0.816   16507.
O+H2=OH+H                                   1.800E10    1.0      8826.
H+O2+M=HO2+M                                2.100E18   -1.0         0.
  H2/3.3/ O2/0./ N2/0./  H2O/21.0/
H+O2+O2=HO2+O2                              6.700E19   -1.42        0.
H+O2+N2=HO2+N2                              6.700E19   -1.42        0.
OH+HO2=H2O+O2                               5.000E13    0.0      1000.
H+HO2=OH+OH                                 2.500E14    0.0      1900.
O+HO2=O2+OH                                 4.800E13    0.0      1000.
OH+OH=O+H2O                                 6.000E08    1.3         0.
H2+M=H+H+M                                  2.230E12    0.5     92600.
  H2/3./ H/2./  H2O/6.0/
O2+M=O+O+M                                  1.850E11    0.5     95560.
H+OH+M=H2O+M                                7.500E23   -2.6         0.
  H2O/20.0/
HO2+H=H2+O2                                 2.500E13    0.0       700.
HO2+HO2=H2O2+O2                             2.000E12    0.0         0.
H2O2+M=OH+OH+M                              1.300E17    0.0     45500.
H2O2+H=H2+HO2                               1.600E12    0.0      3800.
H2O2+OH=H2O+HO2                             1.000E13    0.0      1800.
END
```



Conservation de l'énergie

Énergie cinétique

$$\frac{\partial \rho |\underline{\boldsymbol{u}}|^2}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \left(\rho \underline{\boldsymbol{u}} |\underline{\boldsymbol{u}}|^2\right) = \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \left(-\underline{\boldsymbol{\nabla}} P + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} + \rho \underline{\boldsymbol{g}}\right) + \text{Termes dûs aux réactions chimiques}$$

Enthalpie

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot (\rho \underline{\boldsymbol{u}} h) = \frac{\partial P}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} P + (\underline{\boldsymbol{\nabla}}\ \underline{\boldsymbol{u}}) : \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \lambda \underline{\boldsymbol{\nabla}} T + \text{Termes dûs aux réactions chimiques}$$

Temperature

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{\boldsymbol{u}} \cdot \underline{\boldsymbol{\nabla}} T = \frac{1}{\rho C_p} \left(\frac{DP}{Dt} + (\underline{\boldsymbol{\nabla}}\ \underline{\boldsymbol{u}}) : \underline{\underline{\boldsymbol{t}}} + \underline{\boldsymbol{\nabla}} \cdot \lambda \underline{\boldsymbol{\nabla}} T + \text{Termes dûs aux réactions chimiques}\right)$$

Formes complètes détaillées dans le livre Poinsot & Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, Edwards.