

# Chapitre I

## ANALYSE MACROSCOPIQUE DES TRANSFERTS

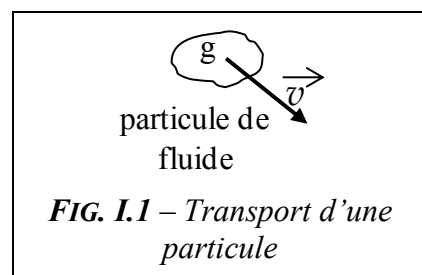
### 1. Présentation générale des phénomènes de transferts

Il est très fréquent que des grandeurs physiques (scalaires ou vectorielles) telles que matière, énergie, champ électromagnétique, quantité de mouvement, pression, etc. se déplacent dans l'espace. On constate alors que ces grandeurs sont soumises à deux grandes catégories de transferts :

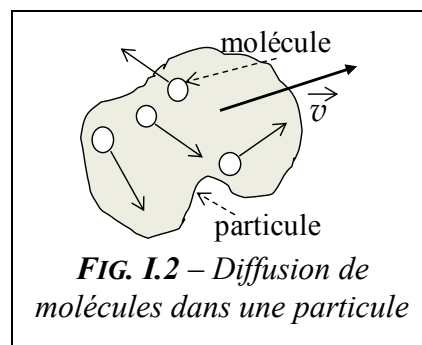
- soit des *transferts avec support matériel*. C'est le cas de la diffusion dans les solides ou dans les fluides, c'est aussi celui du transport par les fluides ainsi que celui du déplacement d'ondes dans des solides ou dans des fluides ;
- soit des *transferts sans support matériel*. C'est en particulier le cas des ondes électromagnétiques.

Pour le transport avec support matériel, on ne s'intéressera qu'au cas des fluides qui est le plus complexe puisqu'il y a souvent couplage entre de la diffusion et du transport, qui sont deux types de transferts à des échelles différentes (cf. par exemple Ch. VI.3, [16]).

1. Le *transport (ou advection)* d'une grandeur "g" correspond au déplacement de cette grandeur attachée à des particules de fluide en écoulement (Fig. I.1). Une particule ou parcelle de fluide est un ensemble de molécules de taille très supérieure au libre parcours moyen des molécules, dont l'échelle est microscopique, avec une hypothèse d'unicité de vitesse  $\vec{v}$  et des autres paramètres.



2. La *diffusion* d'une grandeur dans un fluide résulte du transport de la grandeur par la molécule dont le mouvement désordonné au hasard (agitation moléculaire, dite encore thermique pour un gaz, ou mouvement brownien dans un liquide) se superpose à celui de la particule (Fig. I.2). Il s'agit d'un transport d'une grandeur par rapport à la particule (mouvement relatif à l'échelle nanoscopique).



Ainsi, il y a quasiment toujours couplage entre transport et diffusion dans un fluide en mouvement.

Dans le cas d'un solide, la diffusion (conduction thermique dans le cas de la chaleur) résulte des mouvements de vibrations atomiques (phonons) et/ou électroniques.

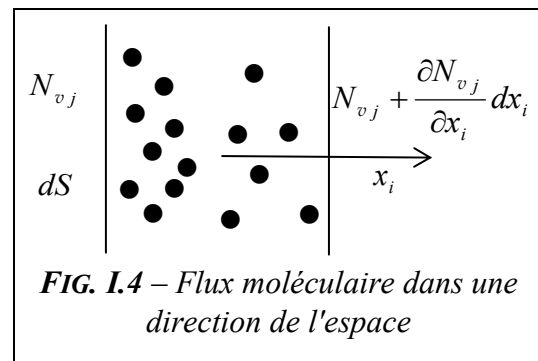
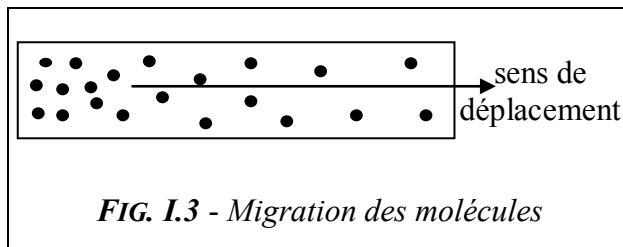
Afin de limiter le champ de l'étude, on ne s'intéresse dans cet ouvrage qu'aux transferts de masse, d'espèces, de quantité de mouvement et d'énergie.

## 2. Transferts par gradients ou diffusion

### 2.1. Transfert de masse ou d'espèces – Diffusion – Loi de Fick

La diffusion est un phénomène qui a lieu à l'échelle moléculaire (ou atomique dans le cas d'un solide). Pour l'étudier à l'échelle macroscopique, on considère un référentiel lié à la particule. Deux cas se présentent alors :

- si la population de molécules est uniforme dans la particule et son voisinage, le déplacement statistique est nul. Il n'y a aucun transfert résultant ;
- si la population volumique  $N_{vj}$  des moles de l'espèce  $j$  est non uniforme dans cet espace, il y a un gradient de population  $\frac{\partial N_{vj}}{\partial x_i}$  qui entraîne une migration globale dans le sens opposé au gradient (Fig. I.3).



Le flux molaire dans la direction  $x_i$  à travers l'élément de surface  $dS$  pendant le temps  $dt$  (Fig. I.4) est :

$$\left(\delta N_{vj}\right)_i = -D_j \frac{\partial N_{vj}}{\partial x_i} dS dt \quad (\text{I.1})$$

Dans cette expression,  $D_j$  est le *coefficient de diffusion de l'espèce  $j$* . C'est un coefficient qui tient compte de la facilité de migration d'une molécule à travers une population de molécules identiques ou différentes :

- si les molécules sont identiques, on a affaire à de la self diffusion ou autodiffusion,
- si les molécules sont d'espèces différentes, c'est de l'interdiffusion.

A partir de la relation (I.1), on peut définir la densité de flux molaire, c'est-à-dire le débit des moles du type  $j$  à travers une unité de surface  $dS$  normale au flux :

$$\vec{j}_{D_j} = -D_j \vec{\nabla} N_{v_j} \quad (I.2)$$

C'est la **loi de FICK**.

Si  $\bar{M}_j$  est la masse molaire, la densité de flux massique s'exprime par :

$$\vec{j}_{mD_j} = -D_j \overrightarrow{\text{grad}} N_{v_j} \bar{M}_j$$

ou :

$$\vec{j}_{mD_j} = -D_j \vec{\nabla} \rho y_j = -D_j \vec{\nabla} \rho_j \quad (I.3)$$

$\rho$  est la masse volumique du mélange,  $\rho_j$  celle du constituant  $j$  et  $y_j$  la fraction massique.

En effet, on a :

$$N_{v_j} \bar{M}_j = \frac{M_j}{V} = \rho_j = \frac{M_j}{M} \frac{M}{V} = y_j \rho$$

Si la masse volumique du mélange peut être supposée constante, on obtient :

$$\vec{j}_{mD_j} = -\rho D_j \vec{\nabla} y_j = -\rho_j D_j \vec{\nabla} \ln y_j \quad (I.4)$$

En pratique, la self diffusion ne présente que peu d'intérêt par rapport au cas où une espèce diffuse dans une phase constituée de molécules d'une autre espèce, voire dans un mélange. Ainsi, les valeurs des coefficients de diffusion sont extrêmement variées, même pour une seule espèce de molécules  $j$ . La généralisation de l'écriture du coefficient de diffusion sera  $D_{jk}$  qui doit être utilisé pour la diffusion de l'espèce  $j$  dans l'espèce ou le mélange  $k$ .

Dans le cas des gaz parfaits, la théorie cinétique des gaz (cf. Ch. II, § 2.2.4.) permet de fournir une expression de  $D_j$  en fonction de la température et de la pression (Eq. II.84). Pour la diffusion d'une espèce dans une autre, aux faibles masses volumiques, on peut utiliser la relation suivante pour le coefficient dit de diffusion mutuelle :

$$D_{jk} = D_{kj} = 1,858 \cdot 10^{-6} \frac{T^{3/2}}{P} \sqrt{\frac{\bar{M}_j + \bar{M}_k}{\bar{M}_j \bar{M}_k}} \frac{1}{d_{cjk}^2 \Omega_D}$$

où  $\bar{M}$  est en (g.mol<sup>-1</sup>),  $T$  en (K),  $P$  en (Pa) et  $d_{cjk}$  est le diamètre de collision effectif (en nm).  $\Omega_D$  est un paramètre adimensionnel tenant compte des interactions moléculaires, défini par l'équation suivante :

$$\Omega_D = \left( \frac{T}{T_{\epsilon jk}} \right)^{-0,145} + \left( \frac{T}{T_{\epsilon jk}} + 0,5 \right)^{-2}$$

avec :

$$d_{cjk} = \frac{1}{2} (d_{cj} + d_{ck}) \quad \text{et} \quad T_{\epsilon jk} = \sqrt{T_{\epsilon k} T_{\epsilon j}}$$

Les valeurs de la température caractéristique  $T_{\epsilon}$ , pour les forces potentielles et un gaz donné, et du diamètre de collision sont données, pour des gaz courants, dans le tableau VI.1 de l'annexe.

Cette expression montre que, aux pressions modérées, le coefficient de diffusion croît avec la température, ne dépend pas de la composition du mélange et est directement proportionnel à l'inverse de la pression.

Aux pressions élevées, cette relation n'est plus valable et, à température constante, le produit  $D_{jk}P$  décroît puis croît avec l'augmentation de la pression (Fig. I.5).

Par ailleurs, lorsqu'il s'agit d'un mélange, notamment en phase liquide, on peut considérer deux types de coefficients :

- le coefficient de diffusion mutuelle  $D_{jk}$  présenté ci-dessus
- et le coefficient de diffusion d'un constituant dans le mélange, supposé homogène  $D_{jm}$  appelé coefficient d'intra diffusion.

Dans une solution composée des espèces  $j$  et  $k$ , ces deux coefficients sont généralement fonction de la teneur de la solution en chacun de ses éléments. A titre d'exemple, la figure I.6 donne une représentation schématique de l'évolution de chacun des coefficients de diffusion à pression constante dans le cas d'un mélange n-octane, n-dodécane:

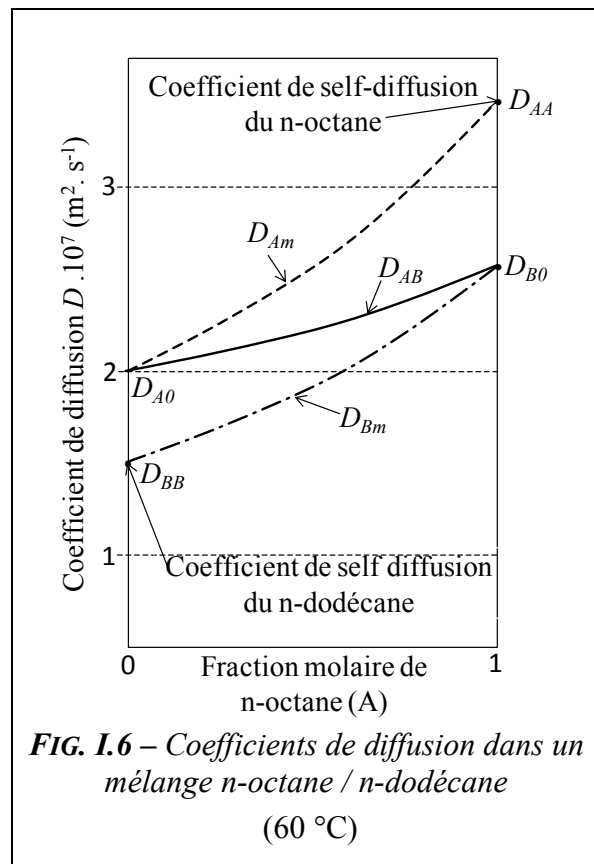
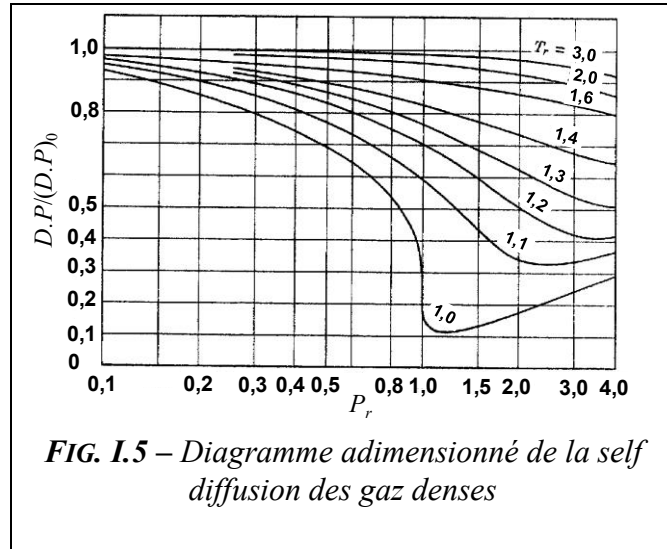
- $D_{Am}$  coefficient d'intra diffusion de l'espèce A (ici le n-octane) dans le mélange ;
- $D_{Bm}$  coefficient d'intra diffusion de l'espèce B (ici le n-dodécane) dans le mélange ;
- $D_{AB}$  coefficient de diffusion mutuelle de A dans B ou de B dans A.

Lorsque la teneur en composé A est de 100 %, le coefficient  $D_{Am}$  correspond à  $D_{AA}$ , coefficient de self diffusion de A. De même pour le composé B, lorsque la teneur en A est nulle,  $D_{A0}$  correspond à la diffusion de A dans l'espèce B seule.  $D_{B0}$  est le coefficient de diffusion de B dans le liquide A seul.

On donne, dans le tableau VI.2 de l'annexe, des valeurs de coefficients de diffusion mutuelle pour certains mélanges gaz-gaz, dans le tableau VI.3,

celles de coefficients de diffusion d'un liquide dans une solution très diluée et, dans le tableau VI.4, celles du coefficient de diffusion d'un gaz dans un liquide.

Des renseignements plus complets sur les déterminations et valeurs des coefficients de diffusion peuvent être obtenus dans la référence [5] (Ch. VI.3).



## 2.2. Transferts thermiques – Conduction – Loi de Fourier

Dans un solide, le transfert thermique conductif est dû généralement à deux phénomènes : la mobilité des électrons d'une part (matériaux conducteurs de l'électricité), la différence de vibration des atomes portés à des températures différentes (transfert par phonons). Dans un fluide, il correspond au transport d'énergie interne dû au mouvement désordonné et aléatoire des molécules (agitation thermique ou mouvement brownien) ayant des niveaux thermiques différents.

Pour exprimer le flux de chaleur correspondant, on considère, soit un élément de mur isotrope pour les solides, soit une lame de fluide en écoulement ou non, soumis à un gradient thermique (Fig. I.7). La quantité de chaleur qui traverse l'élément de surface  $dS$  pendant le temps  $dt$  dans la direction  $x_i$  s'écrit :

$$(\delta Q)_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} dS dt$$

où  $\lambda$  est la *conductivité thermique* du milieu.

En généralisant cette équation, on obtient la densité de flux de chaleur diffusif :

$$\vec{j}_{qd} = -\lambda \overrightarrow{\text{grad}} T \quad (I.5)$$

C'est la **loi de Fourier**.

On peut aussi écrire, en notant que :

$$h_v \text{ (enthalpie volumique)} = \rho c_p T$$

(valable pour un gaz parfait et un liquide) et si  $\rho c_p$  peut être supposé constant ( $c_p$  est la *capacité thermique* sous pression constante) :

$$\vec{j}_{qd} = -a \overrightarrow{\text{grad}} h_v \quad (I.6)$$

où  $a = \frac{\lambda}{\rho c_p}$  est la *diffusivité thermique* (ou diffusivité enthalpique).

Si  $c_p$  peut être supposé constant, on peut encore écrire l'équation (I.5) sous la forme :

$$\vec{j}_{qd} = -\rho a \overrightarrow{\text{grad}} c_p T = -\rho a \overrightarrow{\text{grad}} h \quad (I.7)$$

car  $c_p T = h$  (enthalpie massique).

Par ailleurs, comme  $u_v = \rho c_v T$ , on peut aussi écrire :

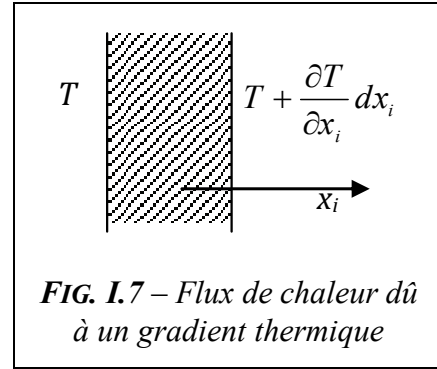
$$\vec{j}_{qd} = -a' \overrightarrow{\text{grad}} u_v = -\rho a' \overrightarrow{\text{grad}} u_m \quad (I.8)$$

Dans cette équation,  $u_v$  est l'énergie interne volumique,  $u_m$  l'énergie interne massique et

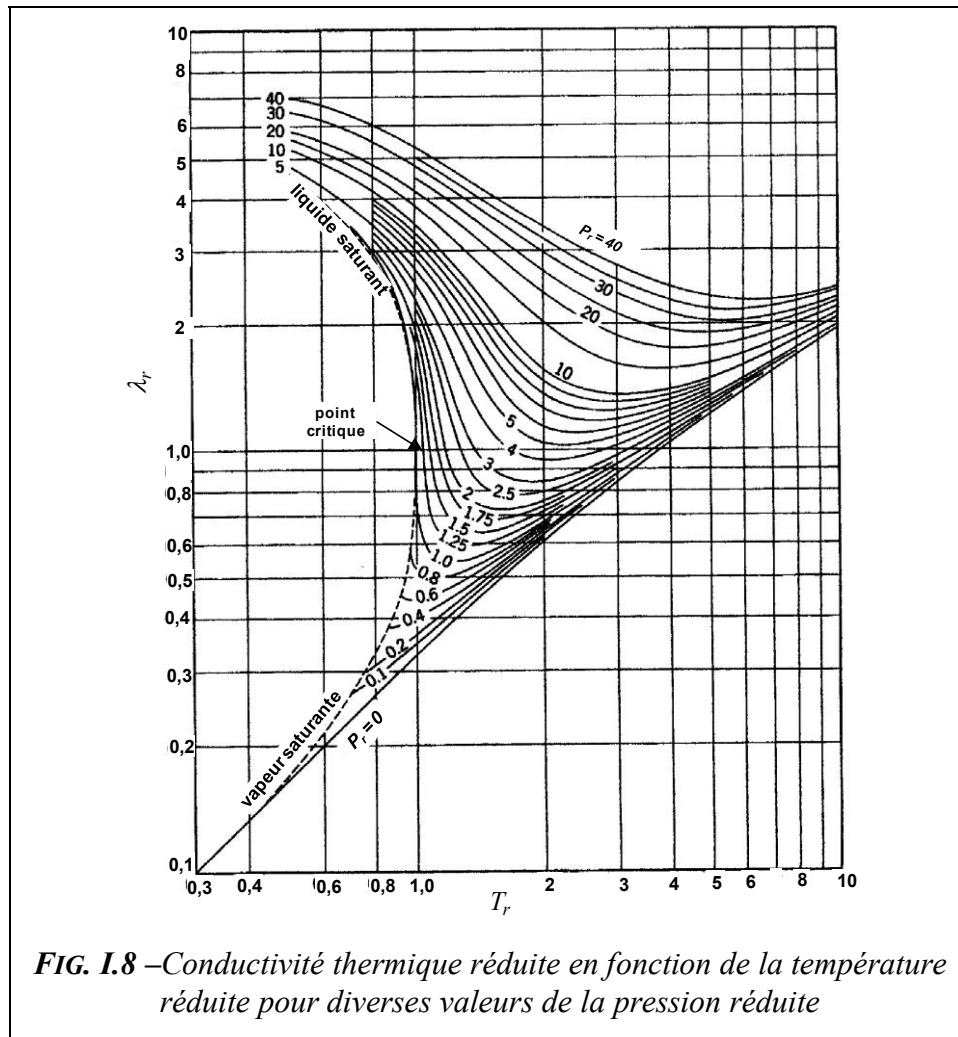
$a' = \frac{\lambda}{\rho c_v}$  la diffusivité d'énergie interne.

Pour les liquides et les gaz, la conductivité thermique  $\lambda$  est fonction de la température et de la pression. On peut en donner une évolution générale, c'est-à-dire quel que soit le fluide, en appliquant le principe thermodynamique des états correspondants, soit :

$$\lambda_r = \frac{\lambda}{\lambda_c} = f\left(\frac{T}{T_c}, \frac{P}{P_c}\right) = f(T_r, P_r)$$



où  $T_r, P_r$  et  $\lambda_r$  sont les température, pression et conductivité thermique réduites et  $T_c, P_c$  et  $\lambda_c$  les valeurs de ces variables au point critique du fluide considéré. Le diagramme correspondant fait l'objet de la figure I.8.



**FIG. I.8** – Conductivité thermique réduite en fonction de la température réduite pour diverses valeurs de la pression réduite

Pour les gaz, aux faibles pressions, la conductivité augmente avec la température, mais, aux pressions élevées, elle diminue avant d'augmenter. Pour les liquides, on note une diminution avec la température. Dans tous les cas, à température constante, la conductivité augmente avec la pression. On peut aussi noter que, lors d'un changement de phase gaz-liquide, la conductivité augmente fortement lorsque l'équilibre est loin du point critique.

Pour des fluides différents, le passage de ce diagramme à la détermination de la conductivité (obtenue à 10 à 20 % près) nécessite de connaître les paramètres critiques. Les valeurs correspondantes sont données pour quelques fluides courants dans le tableau VI.5 de l'annexe.

Pour l'eau et l'air, on donne directement les variations de la conductivité en fonction de la température et de la pression en annexe (Fig. VI.1 et VI.2). Sur la figure VI.3, sont représentées les évolutions de la conductivité de quelques gaz à la pression atmosphérique en fonction de la température. Pour plus de précision, le cas de l'air est particularisé dans le tableau VI.6 entre -50 et 2000 °C.

Des relations permettent de calculer directement les conductivités thermiques des fluides. Ainsi, pour les **gaz** parfaits, la théorie cinétique des gaz conduit à une expression simple (cf. Ch. II, § 2.2.3., Eq. II.79). D'autres expressions du type loi de puissance ou Sutherland donnent aussi de bons résultats dans le cas des gaz dilués, c'est-à-dire sous des pressions peu élevées ou à des températures élevées (zones où les conductivités des gaz sont croissantes avec la température). Ainsi, pour les lois en puissance, on a :

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} \approx \left(\frac{T}{T_0}\right)^n$$

où  $n$ ,  $T_0$ ,  $\lambda_0$  sont des constantes données pour certains gaz courants dans le tableau VI.7 de l'annexe.

L'équation de Sutherland est la suivante :

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} \approx \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \frac{T_0 + S}{T + S}$$

Dans cette relation, le paramètre  $S$  a la dimension d'une température. Sa valeur est donnée dans le tableau VI.7.

Pour les **liquides**, on peut utiliser des relations polynomiales de la forme :

$$\lambda = A + BT + CT^2$$

où  $A$ ,  $B$  et  $C$  sont donnés pour certains liquides dans le tableau VI.8 de l'annexe.

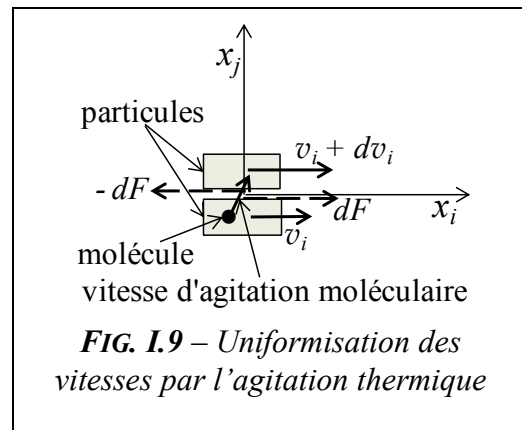
Dans le tableau VI.9 figurent la conductivité thermique pour quelques **solides isotropes**, ainsi que la diffusivité thermique et la capacité thermique. Il convient de noter que, pour certains solides, le transfert par conduction est non isotrope. C'est par exemple le cas du bois pour lequel, dans le sens des fibres, à 20 °C, la conductivité vaut 0,40 W.m<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup> alors qu'elle n'est que de 0,21 W.m<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup> dans le sens perpendiculaire.

### 2.3. Transfert de quantité de mouvement – Viscosité – Loi de Newton

Si dans un fluide en écoulement hydrodynamique toutes les particules vont en moyenne dans la même direction, le mouvement d'agitation moléculaire, qui se superpose au mouvement global, va tendre à uniformiser les vitesses des particules.

Considérons deux particules jointives s'écoulant dans la même direction  $x_i$  mais ayant des vitesses  $v_i$  différentes (Fig. I.9). Les molécules qui, par agitation thermique (ou mouvement brownien), passent d'une particule à l'autre transfèrent en même temps leur quantité de mouvement. Ceci a pour résultat de freiner la particule qui va le plus vite et d'accélérer la particule la plus lente. Tout se passe comme si des forces  $dF$ , dites de viscosité, agissaient entre les deux particules. Macroscopiquement, le transfert de quantité de mouvement,  $QM$ , s'exprime par :

$$(\delta QM)_{x_j} = -\mu \frac{\partial v_i}{\partial x_j} dS dt = -dF dt$$



Dans cette équation,  $\mu$  est la *viscosité dynamique*. On en déduit la densité de flux, dans la direction  $x_j$ , de la quantité de mouvement dans la direction  $x_i$  :

$$(j_{QMx_d})_{x_j} = -\mu \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = -\frac{dF}{dS} = -\tau = \text{contrainte visqueuse}$$

puis la densité de flux total de la quantité de mouvement dans la direction  $x_i$  :

$$\vec{j}_{QMx_d} = -\mu \vec{\nabla} v_i \quad (I.9)$$

C'est la **loi de NEWTON**. Les fluides obéissant à cette relation sont dits newtoniens.

Pour généraliser cette expression, on doit noter que, à la différence des grandeurs précédentes, la quantité de mouvement (*QM*) est une grandeur vectorielle. Ainsi, la densité de flux de quantité de mouvement globale n'est plus un vecteur, mais un tenseur. On a (cf. par exemple les références [21 ou 23], Ch. VI.3) :

$$\overline{\overline{-j_{QMd}}} = \overline{\overline{T}}_v = \overline{\overline{|T_{ij}|}}_v = 2\mu \overline{\overline{D}} + \eta \operatorname{div} \overline{\overline{vI}} \quad (I.10)$$

où  $\overline{\overline{I}}$  est le tenseur unité,  $\overline{\overline{T}}_v$  le tenseur des contraintes visqueuses et  $\overline{\overline{D}}$  le tenseur des vitesses de déformation, tel que :

$$\overline{\overline{D}} = \frac{1}{2} \left\| \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right\|$$

Dans les équations précédentes, la viscosité dynamique  $\mu$  peut être remplacée par  $\rho\nu$ ,  $\nu$  étant la *viscosité cinématique*.  $\eta$  est appelé 2<sup>ème</sup> coefficient de viscosité ou viscosité de dilatation. Cette seconde appellation pour  $\eta$  est justifiée par le fait qu'il n'intervient plus lorsque la divergence du vecteur vitesse est nulle. Or, cette divergence lorsqu'elle est non nulle correspond à une dilatation du fluide (cf. Eq. I.25). Avec l'hypothèse de Stokes, exacte pour un gaz parfait et admissible dans le cas d'un gaz quelconque, on a :

$$\eta = -\frac{2}{3}\mu$$

Dans le cas d'un liquide, ce coefficient n'intervient plus puisque la divergence du vecteur vitesse est nulle.

Pour les **fluides newtoniens**, le coefficient de viscosité dynamique  $\mu$  étant directement lié aux interactions moléculaires peut être considéré comme une propriété thermodynamique du fluide. Il varie avec la pression et la température. Comme dans le cas de la conductivité thermique, en appliquant le principe des états correspondants, il est possible de représenter sur un seul diagramme, quel que soit le fluide, l'évolution :

$$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_c} = f\left(\frac{T}{T_c}, \frac{P}{P_c}\right) = f(T_r, P_r)$$

où  $\mu_r$  est la viscosité réduite et  $\mu_c$  sa valeur au point critique. Ce diagramme fait l'objet de la figure I.10. On constate que, aux faibles pressions, la viscosité des gaz augmente avec la température, mais, qu'aux pressions élevées, elle diminue d'abord avant d'augmenter. Pour les liquides, on note une diminution avec la température.

Un tel diagramme donne des résultats corrects à mieux que  $\pm 20\%$ . Pour l'utiliser, il faut connaître les valeurs des caractéristiques au point critique. Ces données sont rassemblées dans le tableau VI.5 de l'annexe pour quelques fluides usuels.