

TRANSFERTS DE MASSE ET DE CHALEUR COUPLES

Equations de bilan

Hervé Lemonnier

DTN/SE2T, CEA/Grenoble, 38054 Grenoble Cedex 9

Tél. 04 38 78 45 40, *herve.lemonnier@cea.fr*

<http://herve.lemonnier.sci.free.fr/TMC/TMC.htm>

Phelma, 2010-2011

PARAMÈTRES DE COMPOSITION

Soit un volume V contenant une masse, m (kg), et une quantité de matière, n (mol).

Paramètres massiques		Paramètres molaires	
$\rho = \frac{m}{V} = cM$	masse volumique	$c = \frac{n}{V} = \frac{\rho}{M}$	concentration totale
$\rho_A = \frac{m_A}{V} = c_A M_A$	masse volumique de A	$c_A = \frac{n_A}{V} = \frac{\rho_A}{M_A}$	concentration espèce A
$\rho_B = \frac{m_B}{V} = c_B M_B$	masse volumique de B	$c_B = \frac{n_B}{V} = \frac{\rho_B}{M_B}$	concentration espèce B
$\omega_A = \frac{\rho_A}{\rho}$	fraction massique de A	$x_A = \frac{c_A}{c}$	fraction molaire de A
$\omega_B = \frac{\rho_B}{\rho}$	fraction massique de B	$x_B = \frac{c_B}{c}$	fraction molaire de B
$\omega_A = \frac{x_A M_A}{M} = \frac{x_A M_A}{x_A M_A + x_B M_B}$		$x_A = \frac{\omega_A / M_A}{1/M} = \frac{\omega_A / M_A}{\omega_A / M_A + \omega_B / M_B}$	
$\nabla \omega_A = \frac{M_A M_B}{M^2} \nabla x_A$		$\nabla x_A = \frac{M^2}{M_A M_B} \nabla \omega_A$	
$\omega_A / M_A + \omega_B / M_B = 1 / M$		$x_A M_A + x_B M_B = M$	
$\rho_A + \rho_B = \rho$		$c_A + c_B = c$	
$\omega_A + \omega_B = 1$		$x_A + x_B = 1$	

VITESSES ET FLUX

La vitesse de l'espèce A est \mathbf{v}_A .

Paramètres massiques		Paramètres molaires	
$\mathbf{v} = \omega_A \mathbf{v}_A + \omega_B \mathbf{v}_B$	vitesse moyenne	$\mathbf{V} = x_B \mathbf{v}_A + x_B \mathbf{v}_B$	vitesse moyenne
$\mathbf{v}_A - \mathbf{v}$	vitesse de diffusion	$\mathbf{v}_A - \mathbf{V}$	vitesse de diffusion
$\mathbf{j}_A = \rho_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{v})$	flux de diffusion	$\mathbf{J}_A = c_A (\mathbf{v}_A - \mathbf{V})$	flux de diffusion
$\mathbf{j}_A = -\rho D_{AB} \nabla \omega_A$	loi de Fick	$\mathbf{J}_A = -c D_{AB} \nabla x_A$	loi de Fick
$\mathbf{n}_A = \rho_A \mathbf{v}_A$	flux total	$\mathbf{N}_A = c_A \mathbf{v}_A$	flux total
$\mathbf{n}_A = -\rho D_{AB} \nabla \omega_A + \omega_A (\mathbf{n}_A + \mathbf{n}_B)$		$\mathbf{N}_A = -c D_{AB} \nabla x_A + x_A (\mathbf{N}_A + \mathbf{N}_B)$	

Les deux énoncés de la loi de Fick sont **équivalents**

EQUIVALENCE DES ÉNONCÉS DE LA LOI DE FICK

Pour deux constituants A et B

$$\mathbf{v}_A = \frac{\mathbf{n}_A}{\rho\omega_A} = \mathbf{v} + \frac{\mathbf{j}_A}{\rho\omega_A} \quad \mathbf{v}_A = \frac{\mathbf{N}_A}{cx_A} = \mathbf{V} + \frac{\mathbf{J}_A}{cx_A}$$

$$\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B = \frac{\mathbf{j}_A}{\rho\omega_A\omega_B} \quad \mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B = \frac{\mathbf{J}_A}{cx_Ax_B}$$

$$\frac{\mathbf{j}_A}{\rho\omega_A\omega_B} = \frac{\mathbf{J}_A}{cx_Ax_B}, \quad \frac{x_A}{\omega_A} = \frac{c_A}{c} \frac{\rho}{\rho_A} = \frac{M}{M_A}, \quad \frac{cx_Ax_B}{\rho\omega_A\omega_B} = \frac{M}{M_A M_B}$$

$$\mathbf{J}_A = \frac{cx_Ax_B}{\rho\omega_A\omega_B} \mathbf{j}_A = \frac{M}{M_A M_B} \mathbf{j}_A = -\frac{\rho D_{AB}}{M} \frac{M^2}{M_A M_B} \nabla\omega_A = -cD_{AB} \nabla x_A$$

Pour un **mélange binaire**, on a toujours : $\mathbf{j}_A + \mathbf{j}_B = 0$ et $D_{AB} = D_{BA}$

$$\boxed{\mathbf{j}_A \propto \mathbf{J}_A \propto \nabla x_A \propto \nabla\omega_A \propto \mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B}$$

MÉLANGES MULTICONSTITUANTS

Théorie cinétique des gaz, D_{AB} de Hirschfelder Bird et Spotz, cas particulier des équations de Fick généralisées

$$\nabla x_\alpha = - \sum_{\beta=1}^N \frac{x_\alpha x_\beta}{D_{\alpha\beta}} (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta) = - \sum_{\beta=1}^N \frac{1}{cD_{\alpha\beta}} (x_\beta \mathbf{N}_\alpha - x_\alpha \mathbf{N}_\beta), \quad \alpha = 1, \dots, N$$

Equations de Maxwell-Stefan, Hirschfelder et Curtiss.

Conséquences : \mathbf{j}_A et ∇x_A non nécessairement alignés

- Diffusion inverse (contre gradient) : $\mathbf{j}_A \propto +\nabla x_A$
- Diffusion osmotique : $\mathbf{j}_A \neq 0$ quand $\nabla x_A = 0$
- Barrière de diffusion : $\mathbf{j}_A = 0$ quand $\nabla x_A \neq 0$

Pour $N = 2$, on retrouve : $\nabla x_A = -\frac{x_A x_B}{D_{AB}} (\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B)$

BILAN (DE MASSE) DES ESPECES

- La variation de la masse du composant α contenue dans V (quelconque) égale (i) le débit masse de α entrant à travers S et (ii) la production dans le volume V ($\forall V$).

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_\alpha dV = - \int_S \rho_\alpha (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_S) \cdot \mathbf{n} dS + \int_V r_\alpha dV.$$

- Règle de Leibniz, théorème de Gauss, équation locale,

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_A \mathbf{v}_A - r_A = 0.$$

- Equation du mélange, on somme sur α .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = \sum_\alpha r_\alpha = 0.$$

- Pas de création nette de masse, redistribution sur les composants.

BILAN DE L'ESPÈCE A

Bilan local de l'espèce A

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_A \mathbf{v}_A = r_A$$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{n}_A = r_A$$

Rappel, \mathbf{n}_A est le flux total de A,

$$\mathbf{n}_A = \rho_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}) + \rho_A \mathbf{v} = \mathbf{j}_A + \rho_A \mathbf{v}$$

Bilan local, vitesse du mélange,

$$\boxed{\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_A \mathbf{v} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_A + r_A}$$

VARIABLES MOLAIRE

En variables molaires, $\rho_A = c_A M_A$ et $r_A = M_A R_A$,

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot c_A \mathbf{v}_A = R_A$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_A = R_A$$

Rappel : $\mathbf{N}_A = c_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{V}) + c_A \mathbf{V} = \mathbf{J}_A + c_A \mathbf{V}$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot c_A \mathbf{V} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_A + R_A$$

Pour le mélange :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot c \mathbf{V} = \sum_{\alpha=1}^N R_{\alpha}$$

Dans une réaction chimique le nombre de moles n'est pas forcément conservé.

FORMES CONVECTIVE MASSIQUE

Bilan de l'espèce A, combinée au bilan du mélange, $\rho_A = \rho\omega_A$,
et l'identité $\nabla \cdot a\mathbf{b} = a\nabla \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b} \cdot \nabla a$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_A \mathbf{v} = \rho \frac{\partial \omega_A}{\partial t} + \underbrace{\omega_A \frac{\partial \rho}{\partial t} + \omega_A \nabla \cdot \rho \mathbf{v} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \omega_A}_{\omega_A (\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v}) = 0}$$

$$\rho \left(\frac{\partial \omega_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \omega_A \right) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_A + r_A$$

FORMES CONVECTIVE MOLAIRE

Bilan molaire de l'espèce A, combinée au bilan molaire du mélange, $c_A = cx_A$,

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot c_\alpha \mathbf{V} = c \frac{\partial x_\alpha}{\partial t} + \underbrace{x_\alpha \frac{\partial c}{\partial t} + x_\alpha \nabla \cdot c \mathbf{V}}_{x_\alpha \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot c \mathbf{V} \right) = x_\alpha \sum R_\beta} + c \mathbf{V} \cdot \nabla x_\alpha$$

$$c \left(\frac{\partial x_\alpha}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla x_\alpha \right) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha + R_\alpha - x_\alpha \sum_{\beta=1}^N R_\beta$$

EXPRESSION POUR LES MÉLANGES BINAIRES (1/2)

On ferme l'équation de bilan par la loi de Fick d'un mélange binaire,

$$\rho \left(\frac{\partial \omega_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \omega_A \right) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_A + r_A = \nabla \cdot (\rho D_{AB} \nabla \omega_A) + r_A$$

Quand ρD_{AB} est constant comme les solutions diluées à T et p constants

$$\rho \left(\frac{\partial \omega_A}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \omega_A \right) = \rho D_{AB} \nabla^2 \omega_A + r_A$$

Analogie directe avec l'équation des transferts de chaleur,

$$\rho C_P \left(\frac{dT}{dt} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = k \nabla^2 T + q.$$

EXPRESSION POUR LES MÉLANGES BINAIRES (2/2)

On ferme l'équation de bilan par la loi de Fick d'un mélange binaire,

$$c \left(\frac{\partial x_A}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla x_A \right) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_A + (x_B R_A - x_A R_B) = +\nabla \cdot (c D_{AB} \nabla x_A) + (x_B R_A - x_A R_B)$$

Quand $c D_{AB}$ est constant comme les gaz à basse pression et T et P constants

$$c \left(\frac{\partial x_A}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla x_A \right) = -c D_{AB} \nabla^2 x_A + (x_B R_A - x_A R_B)$$

Pour les systèmes au repos : $\mathbf{v} = 0$ et $\rho = \text{cste}$, ou $\mathbf{V} = 0$, et $c = \text{cste}$, sans réaction chimique

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = D_{AB} \nabla^2 c_A$$

Seconde loi de Fick ou équation de diffusion. Analogue à la conduction dans les solides.

Applications : solides, liquides au repos, diffusion equi-molaire ($\mathbf{V} = 0$)

Conséquences : Carslaw and Jager, *Conduction of heat in solids*

CONDITIONS AUX LIMITES (1/2)

Complètent les conditions initiales pour la résolution d'un problème donné

Analogues aux CL des transferts de chaleur : 4 types

I) Condition de Dirichlet : concentration donnée à la limite, c_{AS} , ρ_{AS} , p_{AS} , x_{AS} ou y_{AS}

- Interface entre A (liq) et A-B (gaz) : Eq. thermo. $\rightarrow p_{AS} = x_A p_{\text{sat-A}}(T_i)$
- Interface entre A (sol) et A-B (liq), c_A^* : limite de solubilité de A dans B $\rightarrow c_{AS} = c_A^*$
- Mélange binaire dans le liquide et le gaz : équilibre thermodynamique : T et p donnés
 x_A et y_A donnés (x_B et y_B aussi !)
 - Diagrammes isobares $y_A(T)$, $x_A(T)$ à p cste (Fig. 1)
 - Diagrammes $y-x$ à p cste. (paramétré en T) (Fig. 2)
 - Diagrammes isothermes $p_A(x_A)$, $p_B(x_A)$ à T (Fig. 3)
 - Modèles de coefficients de partage $K \triangleq y_\alpha/x_\alpha$. $K(T, P, \dots)$, basés ou non sur l'équation d'état du mélange (Perry & Green, 1984),
cas limites : lois de Raoult et de Henry

DIAGRAMMES D'ÉQUILIBRE BINAIRES

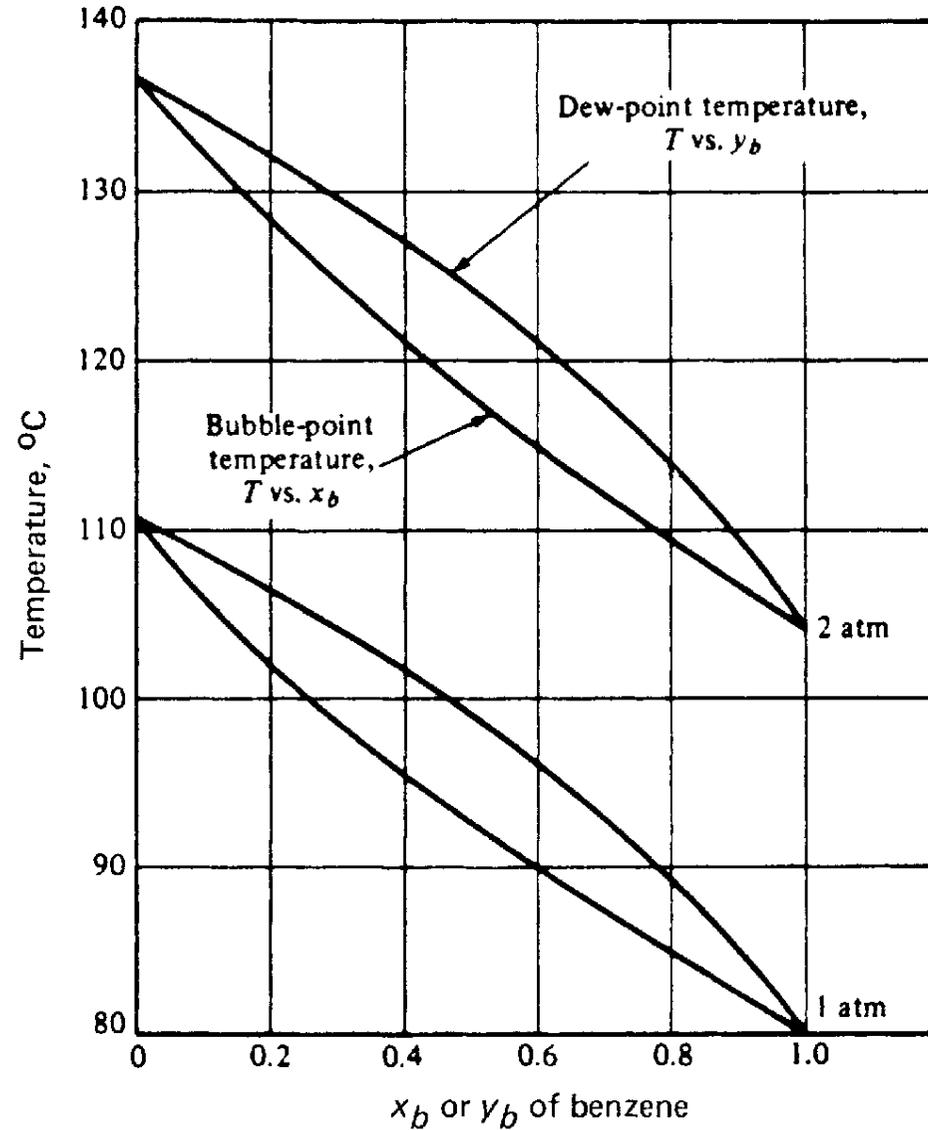


Figure 1: Diagramme isobare toluène-benzène

DIAGRAMMES D'ÉQUILIBRE BINAIRES

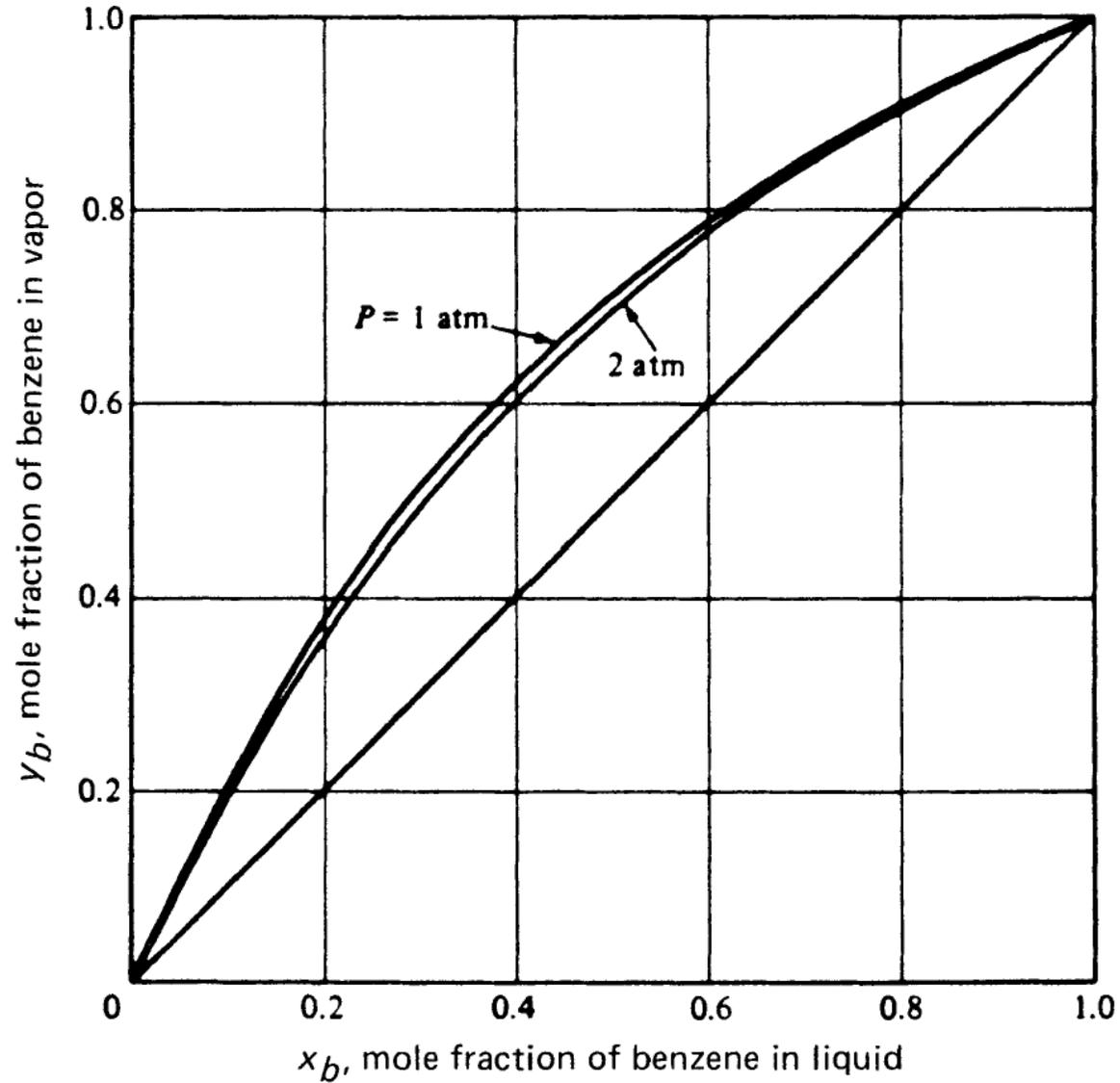


Figure 2: Diagramme $y - x$ toluène-benzène

DIAGRAMMES D'ÉQUILIBRE BINAIRES

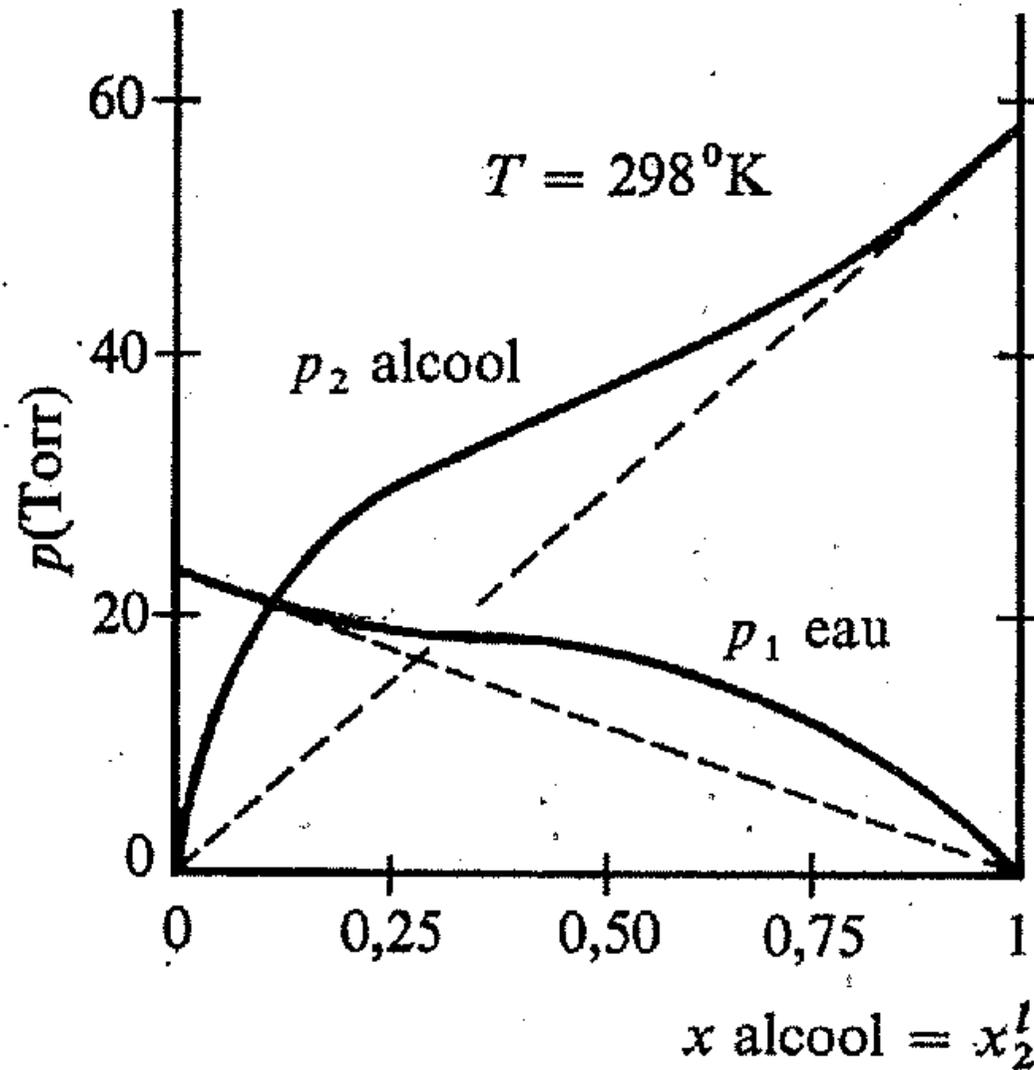
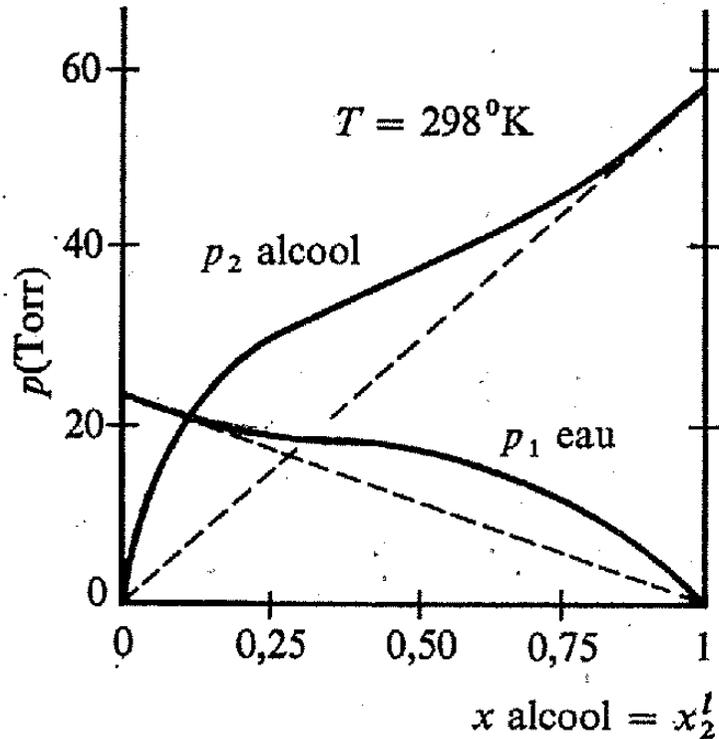


Figure 3: Diagramme en pression partielles, eau-alcool

LOI DE RAOULT

Equilibre approché des vapeurs de mélanges binaires



Perry's Table 2-256, ethanol :

$$P_{\text{sat-B}}(298 \text{ K}) = 0,080 \text{ bar} = 60,2 \text{ Torr (1 mm de Hg)}$$

Perry's Table 2-344, eau :

$$P_{\text{sat-A}}(25^{\circ}\text{C}) = 0,031 \text{ bar} = 23,3 \text{ Torr}$$

Pointillées : $p_A = P_{\text{sat-A}}(T)x_A$, $p_B = P_{\text{sat-B}}(T)x_B$

Loi de Raoult valable $x_A \rightarrow 1$ ou $x_B \rightarrow 1$.

Pas trop faux ailleurs ...

A utiliser absolument pour la condensation avec incondensables.

LOI DE HENRY

Gaz dissous dans les liquides. Gaz supercritique

$$p_A = x_A H_A$$

H_A est la constante de Henry (bar, atmosphères etc.)

H est lié à la solubilité du gaz dans le liquide. La solubilité est souvent exprimée par en masse de A dissous dans une masse donnée du solvant B (kg/kg)

m_A/m_B en % à P et T donnés

$$n_A = \frac{m_A}{M_A}, \quad n_B = \frac{m_B}{M_B}, \quad x_A = \frac{n_A}{n_A + n_B} \rightarrow H_A = \frac{P}{x_A}$$

Voir l'exercice sur la dynamique des bulles de champagne.

CONDITIONS AUX LIMITES (2/2)

II) Surface siège d'une réaction chimique

- A-B diffusent vers la surface : $A+2B \rightarrow C$.
Bilan stoechiométrique : $N_{AS}/1 = N_{BS}/2 = -N_{CS}/1$
- Cinétique du premier ordre : $N_{AS} = -k_S c_{AS}$, ($k'' \equiv k_S$, en m/s)
- Réaction "rapide", $c_{AS} = 0$

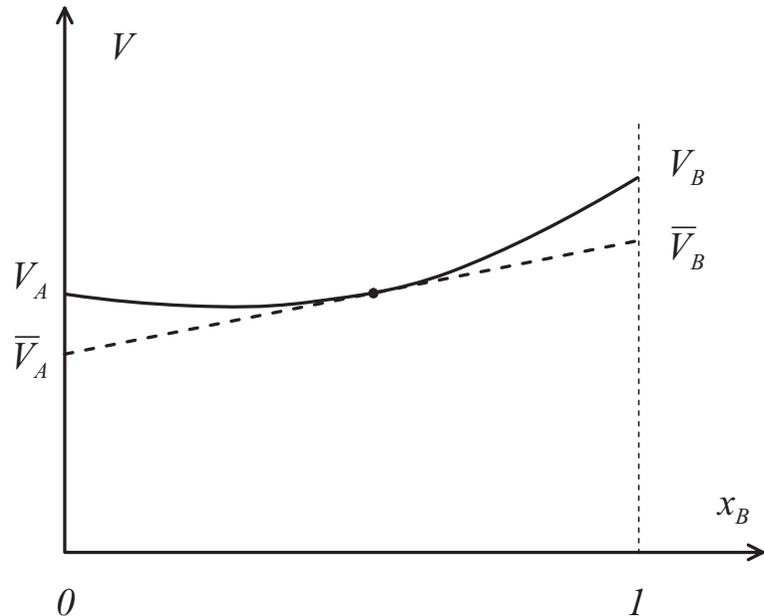
III) Flux donné à la surface (Neumann)

- Frontière imperméable à A : $N_{AS} = -D_{AB} \left(\frac{dc_A}{dz} \right)_S = 0$, $\left(\frac{dc_A}{dz} \right)_S = 0$

IV) Transfert convectif donné (mixte, Robin)

- $N_{AS} = k_c (c_{AS} - c_{A\infty})$

QUANTITÉS MOLAIRES



Volume molaire : $V = \frac{M}{\rho} = \frac{1}{c} = V(p, T, n_A, n_B)$

Variable extensive : $V(\lambda n_A, \lambda n_B) = \lambda V(n_A, n_B)$

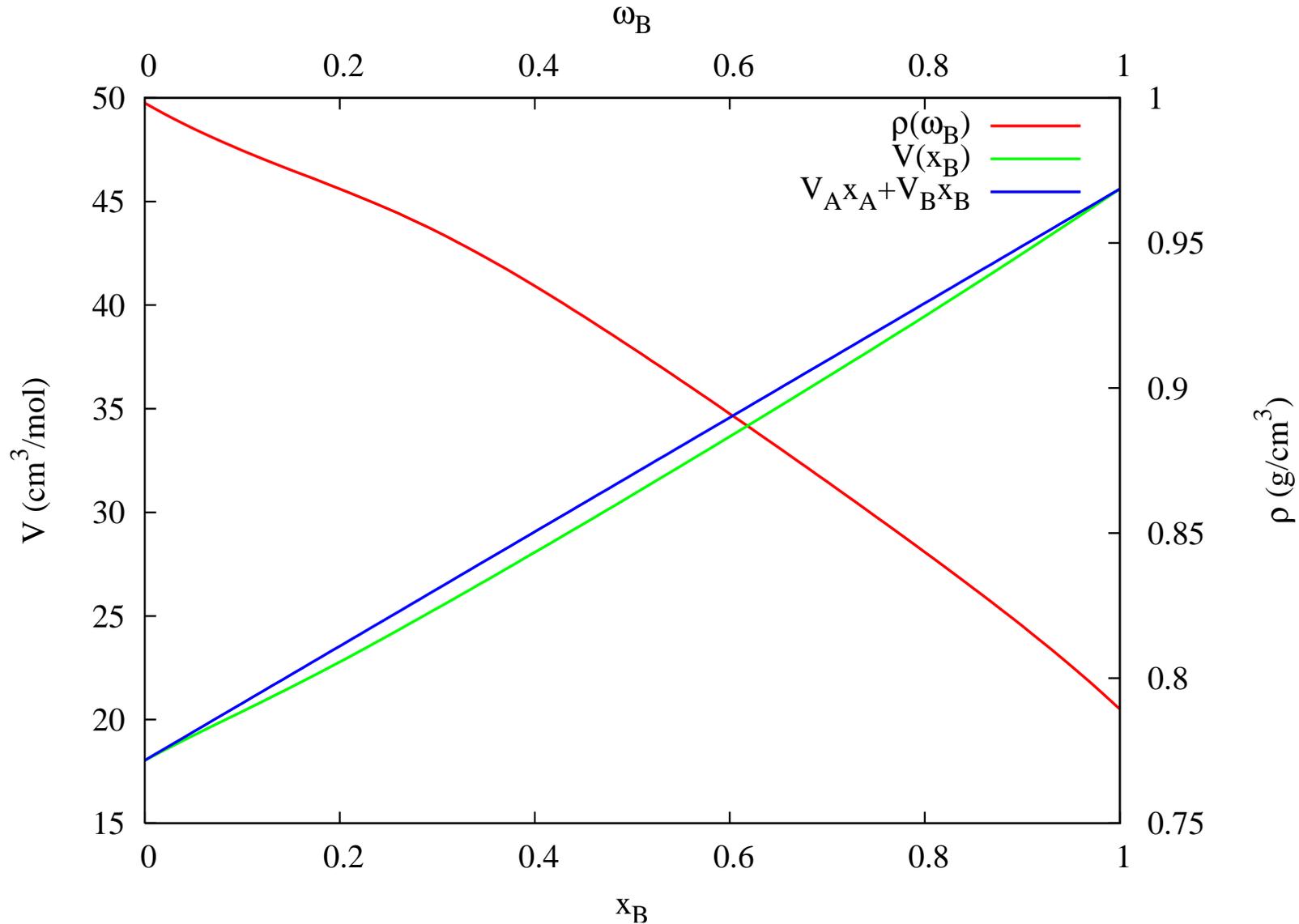
Théorème d'Euler : $\frac{dV}{d\lambda} = \frac{\partial V}{\partial n_A} n_A + \frac{\partial V}{\partial n_B} n_B = v(n_A, n_B)$

Volume molaire partiel : $\bar{V}_A = \left(\frac{\partial V}{\partial n_A} \right)_{p, T, n_B}$

En général : $V = n_A \bar{V}_A + n_B \bar{V}_B \neq n_A V_A + n_B V_B$

Mélange parfait, loi de Dalton et gaz parfaits : $\bar{V}_A = V_A$

VOLUME MOLAIRE EAU-ALCOOL



A : eau, B : éthanol, contraction du mélange, 20°C

(Perry & Green, 1984, tableau 3-110)

BILANS DE QDM ET D'ÉNERGIE

Formes conservatives

- $\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} = \nabla \cdot \mathbb{T} + \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{g}_{\alpha}$
- $\frac{\partial \rho u_t}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} u_t = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot (\mathbb{T} \cdot \mathbf{v}) + \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \cdot \mathbf{g}_{\alpha}$

$\mathbb{T} = -p\mathbb{I} + \mathbf{V}$, tenseur des contraintes, $\mathbf{V} = \frac{1}{2}\mu(\nabla \mathbf{v} + \mathbf{v} \nabla)$, \mathbf{g} : forces de volume,
 $u_t = u + \frac{1}{2}v^2$: énergie interne totale

Formes non conservative, combinées au bilan de masse

- $\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot \mathbb{T} + \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{g}_{\alpha}$
- $\rho \frac{Du_t}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial u_t}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla u_t \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot (\mathbb{T} \cdot \mathbf{v}) + \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \cdot \mathbf{g}_{\alpha}$

$u_t = u + \frac{1}{2}v^2$: énergie interne totale par unité de masse, \mathbf{q} flux de chaleur.

EQUATIONS SECONDAIRES, DE TEMPÉRATURE

Bilan d'énergie cinétique :

$$\rho \frac{D}{Dt} \frac{1}{2} v^2 = \mathbf{v} \cdot (\nabla \cdot \mathbb{T}) + \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathbf{v} \cdot \mathbf{g}_{\alpha}$$

Bilan d'énergie interne, soustraire du bilan d'énergie totale :

$$\rho \frac{D}{Dt} u = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbb{T} : \nabla \mathbf{v} + \sum_{\alpha} \mathbf{j}_{\alpha} \cdot \mathbf{g}_{\alpha}$$

Introduire l'enthalpie, $h \triangleq u + \frac{p}{\rho}$,

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbb{V} : \nabla \mathbf{v} + \frac{Dp}{Dt} + \sum_{\alpha} \mathbf{j}_{\alpha} \cdot \mathbf{g}_{\alpha}$$

A ce point les flux diffusifs ne sont pas spécifiés.

Identités thermodynamiques : H enthalpie, h enthalpie par unité de masse

$$H(m_1, m_2, \dots, m_N) = mh(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{N-1}) \text{ à } T \text{ et } p \text{ cst, } \omega_{\alpha} = m_{\alpha}/m$$

EQUATION DE TEMPÉRATURE

On dérive,

$$\left(\frac{\partial H}{\partial m_\alpha}\right)_{m_\gamma} = h + \sum_{\beta=1}^{N-1} \left(\frac{\partial h}{\partial \omega_\beta}\right)_{\omega_\gamma} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{m_\beta}{m}\right), \quad (\alpha \neq N)$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial m_N}\right)_{m_\gamma} = h + \sum_{\beta=1}^{N-1} \left(\frac{\partial h}{\partial \omega_\beta}\right)_{\omega_\gamma} \left(-\frac{m_\beta}{m}\right), \quad (\alpha = N)$$

On soustrait,

$$\left(\frac{\partial H}{\partial m_\alpha}\right)_{m_\gamma} - \left(\frac{\partial H}{\partial m_N}\right)_{m_\gamma} = \left(\frac{\partial h}{\partial \omega_\alpha}\right)_{\omega_\gamma}$$

Par définition des qtés molaires

$$\left(\frac{\partial H}{\partial n_\alpha}\right)_{p,T,n_\gamma} = \bar{H}_\alpha, \quad \left(\frac{\partial H}{\partial m_\alpha}\right)_{p,T,m_\gamma} = \frac{\bar{H}_\alpha}{M_\alpha}$$

EQUATION DE TEMPÉRATURE

Equation d'état : $p(\rho, T)$ ou $f(\rho, T)$, chgt de plan $\rightarrow (p, T)$

$$\left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{\rho} + \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p, \quad \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p = c_p$$

Dérivée de l'enthalpie :

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_{T, \omega_\gamma} \frac{Dp}{Dt} + \rho \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_{p, \omega_\gamma} \frac{DT}{Dt} + \rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left(\frac{\partial h}{\partial \omega_\alpha}\right)_{p, T, \omega_\gamma} \frac{D\omega_\alpha}{Dt}$$

Bilans de l'espèce α

$$\rho \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left(\frac{\partial h}{\partial \omega_\alpha}\right)_{p, T, \omega_\gamma} \frac{D\omega_\alpha}{Dt} = \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left(\frac{\bar{H}_\alpha}{M_\alpha} - \frac{\bar{H}_N}{M_N}\right) (-\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha + r_\alpha) =$$

$$\sum_{\alpha=1}^N \left(\frac{\bar{H}_\alpha}{M_\alpha} - \frac{\bar{H}_N}{M_N}\right) (-\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha + r_\alpha) = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\bar{H}_\alpha}{M_\alpha} (-\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha + r_\alpha)$$

EQUATION DE TEMPÉRATURE

Résultat final :

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbb{V} : \nabla \mathbf{v} - \frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \omega_\alpha} \frac{Dp}{Dt} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{\bar{H}_\alpha}{M_\alpha} (\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha - r_\alpha) + \sum_{\alpha} \mathbf{j}_\alpha \cdot \mathbf{g}_\alpha$$

Avec pour un mélange

$$\mathbf{q} = -k \nabla T + \sum_{\alpha=1}^N \frac{\bar{H}_\alpha}{M_\alpha} \mathbf{j}_\alpha + \dots$$

Justification par la thermo. des phénomènes irréversibles ([Bird et al. , 2007](#)).

Pour un mélange parfait :

$$\bar{H}_\alpha = H_\alpha = H_\alpha^0 + \int_{T_0}^T c_{p\alpha} dT$$

H_α^0 : enthalpie de formation, $\int_{T_0}^T c_{p\alpha} dT$: chaleur sensible

Voir l'exercice sur la détente d'un gaz réactif

REFERENCES

- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. 2007. *Transport phenomena*. Revised second edition edn. John Wiley & Sons.
- Perry, R. H., & Green, D. W. (eds). 1984. *Perry's chemical engineers' handbook*. 6th edn. McGraw-Hill.