



**HAL**  
open science

**Aérothermochimie des écoulements à deux phases.  
Chimie et Industrie, Génie Chimique, vol. 102, 5, sept  
1969, p. 657-667.**

Marcel Barrère, Roger Prud'Homme

► **To cite this version:**

Marcel Barrère, Roger Prud'Homme. Aérothermochimie des écoulements à deux phases. Chimie et Industrie, Génie Chimique, vol. 102, 5, sept 1969, p. 657-667.. Chimie et Industrie - Génie chimique, 1969. hal-02005036

**HAL Id: hal-02005036**

**<https://hal.science/hal-02005036>**

Submitted on 6 Apr 2020

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Aérothermochimie des écoulements à deux phases

Application aux réacteurs  
gaz-liquide et gaz-solide  
Application aux réacteurs  
avec évolution en « paquets »

par M. BARRERE et R. PRUD'HOMME  
ONERA\*

Cet article traite des évolutions des caractéristiques de milieux gazeux comprenant des individualités géométriquement définies telles que des particules solides ou liquides, des poches gazeuses sphériques. La fonction de distribution de ces individualités, suivant les différents paramètres, vérifie une équation du type de Boltzmann. Cette équation, appliquée aux différentes grandeurs, permet d'établir les relations de conservation de l'écoulement hétérogène en l'absence de collisions, de coalescence et de pulvérisation. Cette théorie est ensuite appliquée aux foyers avec injection de combustible liquide et à la combustion en paquets. Ces foyers étant des réacteurs particuliers, la présente méthode peut être étendue aux réacteurs chimiques.

*Aerothermochemistry of two-phase flow. This paper deals with the evolution of the characteristics of gaseous media comprising geometrically well defined individualities such as solid or liquid particles or spherical gaseous pockets. The distribution function of these individualities, according to the various parameters, is a solution of a Boltzmann type equation. This equation, when applied to the various quantities, allows to establish the conservation equations of the heterogeneous flow, without considering collisions, coalescence and pulverization. This theory is then applied to combustion chambers with liquid fuel injection and to the combustion of gas pockets. These chambers being nothing more than reactors of a particular type, the present method can be extended to chemical reactors.*

## 1. - Introduction

En Aérothermochimie l'hétérogénéité du processus peut être due à des causes diverses :

- tout d'abord à la turbulence de l'écoulement qui agit sur le transfert de masse et d'énergie et en définitive sur le taux chimique de production des espèces, cette turbulence ayant un caractère aléatoire,

- à la formation de remous et de tourbillons créant des individualités ayant une évolution propre au cours de leur progression dans l'écoulement,

- à la présence de phases condensées qui modifient la concentration des espèces en présence et conditionnent l'évolution chimique du mélange.

Dans ce qui suit nous allons étudier un écoulement possédant des individualités géométriquement

\* 29-30, av. de la Division Leclerc, 92-Chatillon s.-Ysageux.

bien définies (particules solides ou liquides, poches gazeuses sphériques) dont l'évolution géométrique est connue. Nous laissons de côté l'étude de l'hétérogénéité d'origine turbulente. Cette analyse a donné de bons résultats dans l'étude de la combustion dans les foyers, nous pensons qu'elle peut avoir une application plus étendue et peut servir à l'étude des réacteurs chimiques tubulaires comportant deux phases ou des poches gazeuses évoluant dans l'écoulement [1]. La formation de ces

paquets peut dépendre du mécanisme d'introduction de l'un des fluides, nous pouvons par exemple admettre une rapide vaporisation de l'une des substances introduites sous forme de gouttes.

La première partie de cet exposé est consacrée à l'analyse de la distribution de ces individualités dans le réacteur. Dans la deuxième, nous donnerons les équations fondamentales de l'écoulement et nous terminerons par des applications de cette technique.

## 2. - Fonction de distribution des particules ou des paquets [2] [3] [4]

Considérons un écoulement possédant des individualités (particules ou paquets), nous utiliserons par la suite la classe de composition chimique  $k$  se déplaçant dans un gaz. En chaque point de l'espace non occupé par les particules, l'état du gaz est défini par la valeur locale de la pression, de la température, de la masse volumique et des trois composantes de la vitesse. L'état de la particule est défini par les trois composantes de la vitesse et sa température, paramètres d'état différents de celui des gaz, dans un élément de volume toutes les particules ne vont pas forcément à la même vitesse et dans la même direction, c'est pourquoi nous définissons une fonction de distribution  $f_k(r, x, v, T, t)$  dépendant du rayon  $r$  de la particule, du volume  $x$  considéré, de la vitesse  $v$  et de la température  $T$  de la particule au temps  $t$ . De sorte que :

$$f_k(r, x, v, T, t) dr dx dv dT$$

représente le nombre probable de particules sphériques de composition chimique dont le rayon est compris entre  $r$  et  $r + dr$ , situées au point de vue spatial entre les volumes  $x$  et  $x + dx$ , dont la vitesse et la température sont comprises entre  $v, v + dv$  et  $T, T + dT$ .

Supposons d'abord que chaque particule d'espèce  $k$  est soumise à une force massique  $F_k \left( F_k = \left( \frac{dv}{dt} \right)_k \right)$ .

Par suite des réactions chimiques ayant lieu à la périphérie du paquet ou de la particule, la géométrie se trouve modifiée et la variation linéaire de la surface est définie par la fonction  $R_k = \epsilon \left( \frac{dr}{dt} \right)_k$ , le signe  $\epsilon$  doit être

précisé pour tenir compte d'une augmentation ou d'une diminution du rayon des particules. Entre la particule et le gaz la chaleur transférée est représentée par une fonction  $q_k$  ou encore [en divisant par la capacité calorifique de la particule ( $\mu_{pk} C_{pk}$  = masse de la particule  $\times$  chaleur spécifique de la particule)] par une température  $\theta_k = q_k / \mu_{pk} C_{pk}$ .

Les fonctions  $F_k, R_k, \theta$  dépendent des variables  $r, x, v, T, t$  et des propriétés locales du gaz.

Entre les particules, il peut y avoir coalescence ou rupture, ce qui a pour effet de changer le taux de la fonction de distribution  $f_k$ , ce phénomène est représenté par la fonction  $\Phi_k$ . Les collisions entre les particules modifient la fonction  $f_k$ , nous représenterons cet effet par la fonction  $\Psi_k$ .

Nous pouvons donc écrire une équation du type Boltzmann vérifiée par la fonction de distribution :

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} (R_k f_k) + \nabla_x \cdot (v f_k) + \nabla_v \cdot (F_k f_k) + \frac{\partial}{\partial T} (\theta_k f_k) = \Phi_k + \Psi_k \quad (1)$$

$\nabla_x$  se rapportant aux coordonnées d'espace et  $\nabla_v$  aux coordonnées de vitesse.

Cette équation nous permettra d'écrire pour les particules les équations de conservation; examinons auparavant deux applications nous permettant de définir la fonction de distribution.

2.1. Considérons un flux de particules entrant dans un réacteur tubulaire réagissant avec les gaz environnants. Nous admettons une loi de variation du rayon de la particule de la forme :

$$r^{(n_k+1)} = r_0^{(n_k+1)} - (n_k + 1) k t \quad (2)$$

Si la cinétique chimique est importante l'exposant  $n_k$  se rapproche de zéro et lorsque les processus de diffusion sont prépondérants l'exposant  $n_k$  se rapproche de l'unité.

D'après cette loi nous pouvons calculer la fonction  $R_k$  :

$$R_k = -k r^{-n_k} \quad (3)$$

avec le signe  $-$  puisqu'il s'agit d'une diminution du rayon.

Nous admettons que les phénomènes de coalescence, de pulvérisation sont peu importants ainsi que les collisions de particules, nous supposons également que la fonction  $f_k$  dépend peu de la vitesse et de la température  $f_k(r, x, t)$  et en régime permanent  $f_k(r, x)$ .

L'équation (1) devient :

$$\frac{\partial}{\partial r} R_k f_k + \nabla_x \cdot (v f_k) = 0 \quad (4)$$

Introduisons la concentration molaire  $C_k$  qui représente le nombre de particules de classe  $k$  par unité de volume et pour un rayon  $r$ , dans le cas général d'un réacteur tubulaire de section  $A(x)$ .

$$C_k(r, x) = f_k dv \quad (5)$$

$x$  étant l'abscisse,  $v$  la vitesse, nous pouvons définir une valeur moyenne pour  $R_k$  et  $v_k$  telle que :

$$\begin{aligned} R_k &= \int_0^{\infty} \frac{R_k f_k}{C_k} dv \\ v_k &= \int_0^{\infty} \frac{v f_k}{C_k} dv \end{aligned} \quad (6)$$

avec  $k = 1, \dots, P$

pour  $P$  catégories de particules.

L'équation (1) devient :

$$A \frac{\partial}{\partial r} (R_k C_k) + \frac{\partial}{\partial x} (A v_k C_k) = 0 \quad (7)$$

En faisant avec Williams le changement de fonction : [3].

$$G_k = A v_k C_k r^{-n_k} \quad (8)$$

et de variables indépendantes :

$$\begin{aligned} \xi_k^{(n_k+1)} &= r^{(n_k+1)} = (n_k + 1) \int_0^x \frac{1}{v_k} dx \\ \eta_k^{(n_k+1)} &= r^{(n_k+1)} + (n_k + 1) \int_0^x \frac{1}{v_k} dx \end{aligned} \quad (9)$$

L'équation (7) se simplifie et devient :

$$\frac{\partial G_k}{\partial \xi_k} = 0 \quad k \in 1, \dots, P \quad (10)$$

admettant la solution :

$$G_k(\xi_k, \eta_k) = G_k(\eta_k) \quad (11)$$

La fonction  $G_k$  possède la même valeur à l'abscisse  $x = 0$  et à l'abscisse  $x$ . A l'abscisse  $x = 0$ ,  $\eta_k = r$ , la distribution initiale se conserve :

$$G_{k,0} = G_k(r_k) \quad (12)$$

Nous connaissons donc par unité de volume le nombre  $C_k(r, x)$  de particules de classe  $k$  et de rayon  $r$  à l'abscisse  $x$  :

$$C_k(r, x) = \left( \frac{A(0) v_{k,0}}{A v_k} \right) \left( \frac{r}{r_k} \right)^{n_k} C_{k,0}(r) \quad (13)$$

si nous connaissons la distribution initiale  $C_{k,0}$ .

Le nombre  $N_k$  de particules de classe  $k$  est égal, par unité de volume à :

$$N_k = \int_0^{\infty} C_k dr \quad (14)$$

Pour chaque classe nous définissons un rayon moyen :

$$(r_k)_{av} = \frac{\int_0^{\infty} r dN_k}{N_k} \quad (15)$$

mais il existe d'autres définitions comme :

$$(r_k)_{av} = \frac{\int_0^{\infty} r^3 dN_k}{\int_0^{\infty} r^2 dN_k} \quad \text{ou diamètre moyen de Sauter,} \quad (16)$$

ou encore :

$$(r_k)_{av} = \left[ \frac{\int_0^{\infty} r^3 dN_k}{N_k} \right]^{1/3} \quad \text{utilisé par Ingebo} \quad (17)$$

et enfin :

$$(r_k)_{av} = \left[ \frac{\int_0^{\infty} r^3 dN_k}{\int_0^{\infty} r dN_k} \right]^{1/2} \quad (17')$$

La fonction de distribution  $G_{k,0}$  est en général de la forme (5) :

$$G_{k,0} = a_k r^{m_k} e^{-b_k r^2} \quad (18)$$

Les constantes  $a_k$  et  $b_k$  s'expriment en fonction du rayon moyen  $r_k$ .

A ce stade de l'analyse nous pouvons introduire la notion d'efficacité du réacteur hétérogène en se basant soit sur un bilan de masse, soit sur un bilan d'énergie.

On peut admettre dans le réacteur tubulaire que le temps mis pour consommer les particules représente le temps maximal dans l'évolution globale de sorte que l'efficacité en masse devient :

$$E_m = 1 - \frac{\sum_{k=1}^P A v_k \int_0^{\infty} C_k r^2 \rho_{pk} dr}{\sum_{k=1}^P A(0) v_{k,0} \int_0^{\infty} C_{k,0} r^2 \rho_{pk} dr} \quad (19)$$

dans cette expression  $\rho_{pk}$  est la masse volumique de la particule, la masse par unité de volume de l'espèce  $k$  étant égale à :

$$\rho_k = \int_0^{\infty} \frac{4}{3} \pi r^3 \rho_{pk} C_k dr, \quad (20)$$

le débit étant égal à  $\dot{m}_k = \rho_k v_k A$ .

Si  $\Delta h_k$  désigne l'énergie libérée par les produits gazeux issus de la particule, l'efficacité basée sur l'énergie est alors égale à :

$$E_e = 1 - \frac{\sum_{k=1}^P \Delta h_k A v_k \int_0^{\infty} C_k r^2 \rho_{pk} dr}{\sum_{k=1}^P \Delta h_k A(0) v_{k,0} \int_0^{\infty} C_{k,0} r^2 \rho_{pk} dr} \quad (21)$$

2.2. Considérons un écoulement formé de deux types de paquets, sensiblement sphériques, tout

d'abord des paquets constitués par un réactif A qui en diminuant de volume donne le produit B, réaction du type  $E \rightarrow A, B; [( - 1), 1]$  dite régressive; ensuite des paquets constitués par les produits de réaction B qui peuvent agir avec le réactif frais entourant le paquet, réaction dite progressive.

Nous envisageons des fonctions de distribution  $f$  des paquets des substances A et B dépendant uniquement du rayon  $r$  et de  $t$  de sorte que :

$$dN_A = f_A(r, t) dr \quad (22)$$

représente le nombre par unité de volume de paquets de la substance A dont le rayon au temps  $t$  est compris entre  $r$  et  $r + dr$ , de la même manière nous avons :

$$dN_B = f_B(r, t) dr \quad (23)$$

Si nous supposons de plus que les gradients liés aux coordonnées d'espace et de vitesse sont peu importants ainsi que les collisions, l'équation de Boltzmann (1) devient :

$$\begin{cases} \frac{\partial f_A}{\partial t} - |R_A| \frac{\partial f_A}{\partial r} - \Phi_A = 0 \\ \frac{\partial f_B}{\partial t} - |R_B| \frac{\partial f_B}{\partial r} - \Phi_B = 0 \end{cases} \quad (24)$$

nous prenons les valeurs absolues  $|R_A|$  et  $|R_B|$  pour définir la vitesse de regression ou d'expansion des paquets.

Désignons par  $g$  la probabilité de rupture des paquets,  $gdt$  représente la fraction de paquets qui ont éclaté en  $h$  parties pendant l'intervalle de temps  $dt$ , il en résulte que :

$$\begin{aligned} \Phi_A &= -g f_A + g h f_A(r h^{1/3}, t) \\ \Phi_B &= -g f_B + g h f_B(r h^{1/3}, t) \end{aligned} \quad (25)$$

La solution des équations (24) ne conduit pas à un résultat explicite mais une solution approchée peut être obtenue en utilisant le premier terme du développement de Taylor en posant  $\xi = \ln r$  :

$$f(\xi + \frac{1}{3} \ln h, t) = f(\xi, t) + \frac{1}{3} \ln h \frac{\partial f}{\partial \xi} + \dots \quad (26)$$

L'équation aux dérivées partielles à résoudre est alors de la forme :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (Re^{-\xi} - \frac{1}{3} g h \ln h) \frac{\partial f}{\partial \xi} = g(h - 1) f \quad (27)$$

conduisant à l'équation différentielle :

$$dt = - \frac{d\xi}{Re^{-\xi} - \frac{1}{3} g h \ln h} = \frac{df}{g(h - 1) f} \quad (28)$$

Les solutions s'écrivent sans difficulté :

$$f e^{-g(h-1)t} = k_1 \quad (29)$$

$$h^{3kt} \left( R - e^{\xi} \frac{1}{3} g h \ln h \right) = h^{3kt} \left[ R - \frac{r}{3} g h \ln h \right] = k_2$$

La solution générale de l'équation (27) est donc :

$$f e^{-g(h-1)t} = \varphi \left( h^{3kt} \left( R - \frac{r}{3} g h \ln h \right) \right) \quad (30)$$

la fonction  $\varphi$  étant déterminée par la distribution initiale des paquets.

Nous voyons apparaître deux cas limites :

a) si  $R \ll \frac{r}{3} g h \ln h$  nous obtenons la même fonction de distribution pour A et B

$$f_A = f_B \quad (31)$$

b) si  $R \gg \frac{r}{3} g h \ln h$ , le changement de géométrie étant dû principalement à B, l'équation aux dérivées partielles est égale à :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -R \frac{\partial f}{\partial r} \quad (32)$$

de sorte que :  $f(r, t) = \varphi(r - R t)$

et si  $f(r, 0) = a r e^{-br^2}$ ,

$$f(r, t) = a (r - R t) e^{-b(r-Rt)^2} \quad (33)$$

Nous voyons sur ces deux exemples qu'il est possible, connaissant la distribution initiale, de prévoir la distribution des particules dans tout le réacteur.

Lorsqu'il y a des collisions, le problème est plus complexe, ces collisions se produisent en général si les gradients dans l'écoulement sont importants, cette situation se rencontre peu souvent dans les réacteurs, (cas des chocs, tuyères).

### 3. - Équation de conservation en l'absence de collision, de coalescence et de pulvérisation ( $\Phi_k = \psi_k = 0$ )

#### 3.1. - Définitions

Nous voyons apparaître dans l'écoulement plusieurs masses volumiques : la première est la masse volumique  $\rho_{pk}$  de la substance  $k$  constituant les

particules de classe  $k$ , la masse de la particule  $\mu_{pk}$  est donc égale à :

$$\mu_{pk}(r) = \frac{1}{3} \pi r^3 \rho_{pk} \quad (34)$$

la deuxième est relative à la masse volumique du flux de particules  $\rho_p$  et correspondant au quotient de la masse des particules  $m_p$  par le volume  $V$  global, somme du volume des particules  $V_p$  et du volume du gaz  $V_g$  :

$$\rho_p = \frac{m_p}{V} = \sum_{k=1}^p \int_V \rho_{pk}(r) f_k d r d T d v \quad (35)$$

la troisième correspond à la masse volumique du gaz  $\rho_g = \frac{m_g}{V}$  pour l'écoulement global, une masse volumique du gaz seul peut être définie comme étant  $\rho_g = \frac{m_g}{V_g}$ .

La fraction de volume occupée par les particules  $\beta = \frac{V_p}{V}$  a donc pour expression :

$$\beta = \sum_{k=1}^p \int_V \frac{4}{3} \pi r^3 f_k d r d T d v \quad (36)$$

La fraction de volume de la phase gazeuse  $\varepsilon = 1 - \beta$  est égale à  $\varepsilon = \frac{\rho_g}{\rho_{gs}}$ . Nous définissons une masse volumique globale  $\rho = \frac{m_p + m_g}{V} = \frac{m}{V}$  donc :

$$\rho = \rho_g + \rho_p \quad (37)$$

En introduisant la masse volumique des particules  $\rho_{ps} = \frac{m_p}{V_p}$  nous avons de plus d'après la définition des volumes  $V = V_p + V_g$ ,

$$\frac{m}{\rho} = \frac{m_p}{\rho_{ps}} + \frac{m_g}{\rho_{gs}} \quad (38)$$

Dans la direction  $x_1$  nous définissons une vitesse moyenne des particules

$$v_{p1}(x_1, t) = \frac{1}{\rho_p} \sum_{k=1}^p \int_V \rho_{pk}(r) v_1 f_k d r d T d v \quad (39)$$

et une température moyenne :

$$T_p(x_1, t) = \frac{1}{\rho_p} \sum_{k=1}^p \int_V \rho_{pk}(r) T f_k d r d T d v \quad (40)$$

### 3.2. - Équations de continuité de l'écoulement hétérogène

Les équations de continuité de la masse s'établissent, pour les particules à partir de l'équation de Boltzmann dont chaque membre est multiplié par la masse de la particule  $U_k$ , et en sommant à toutes les particules, on obtient :

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho_p v_p) = \dot{W}_p \quad (41)$$

La masse ajoutée  $\dot{W}_p$  par unité de volume et unité de temps est donnée par la fonction  $R_k$  :

$$\dot{W}_p = \sum_{k=1}^p \int_V 4 \pi r^2 \rho_{pk} R_k f_k d r d T d v \quad (42)$$

et l'équation de continuité s'écrit :

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho_g u) = \dot{W}_g \quad (43)$$

$u$  étant la vitesse du gaz.

Si une fraction des espèces issues de la particule réagit avec d'autres espèces contenues dans le gaz, l'équation de continuité de l'espèce  $j$  s'écrit :

$$\rho_g \frac{\partial \gamma_j}{\partial t} + \nabla_x [\rho_g (u + U_j) \gamma_j] = \dot{W}_j + \dot{W}_{Dj} \quad (44)$$

$U_j$  est la vitesse de diffusion de l'espèce  $j$  dont la fraction massique dans le gaz est  $\gamma_j = m_j/m$ ,  $\dot{W}_j$  est, pour les réactions chimiques dans le gaz, le taux massique de production par unité de volume de l'espèce  $j$  et  $\dot{W}_{Dj}$  le taux massique de production de l'espèce  $j$  issue des particules par unité de volume :

$$\dot{W}_{Dj} = - \sum_{k=1}^p \int_V \rho_{pk} 4 \pi r^2 B_{jk} \beta_{j,k} f_k d r d T d v \quad (45)$$

$\beta_{j,k}$  représente la fraction du flux massique de l'espèce  $j$  venant de la particule de classe  $k$ .

### 3.3. - Équation du mouvement :

Pour établir l'équation du mouvement, il faut tenir compte de la force massique exercée par le gaz sur la particule :

$$F_k = \frac{3}{8} C_x \frac{\rho_g}{\rho_{pk}} (u - v) \cdot u - v \quad (46)$$

Le coefficient de traînée  $C_x$  est une fonction du nombre de Reynolds :

$$Re = \frac{\rho_g u \cdot D}{\mu_g} \quad (47)$$

La loi de Stokes donne par exemple pour coefficient de traînée la relation :

$$C_x = 24 Re^{-1} \quad (48)$$

Pour des particules on peut admettre les lois suivantes :

$$\begin{aligned} 0 < Re < 80 & C_x = 27 Re^{-0.64}, \\ 80 < Re < 10^4 & C_x = 0.271 Re^{-0.17}, \\ Re > 10^4 & C_x = 2 \end{aligned}$$

Lorsque la particule émet un gaz ( $B_k \neq 0$ ),  $C_x$  peut être modifié.

La résultante de ces forces  $F_k$  agissant sur l'ensemble des particules est donc égale à :

$$\bar{F} = \sum_{k=1}^p \int_V \rho_{pk}(r) F_k f_k d r d T d v \quad (49)$$

Il faut aussi tenir compte dans l'équation du mouvement de la quantité de mouvement du gaz issu de la particule :

$$\mathcal{G} = \sum_{k=1}^n \int \rho_{pk} 4 \pi r^2 R_k (v - u) f_k d r d T d \nu \quad (50)$$

L'équation du mouvement pour le gaz s'écrit en définitive :

$$\rho_k \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla_x u \right) = \nabla_x \cdot P - \mathcal{F} - \mathcal{G} \quad (51)$$

où  $P$  est le tenseur classique des pressions intervenant en aérodynamique et que l'on met sous la forme :

$$P = -p I + \Pi \quad (52)$$

$p$  est la pression hydrostatique,  $I$  la matrice unité et  $\Pi$  le tenseur des contraintes de viscosité.

L'équation du mouvement des particules s'établit à partir de l'équation de Boltzmann en multipliant par la quantité de mouvement  $\rho_k(r) v$  d'une particule et, en intégrant dans l'espace approprié, on obtient :

$$\rho_k \left[ \frac{\partial v_p}{\partial t} + v_p \cdot \nabla_x v_p \right] = -\nabla_x \cdot \Pi_p + \mathcal{F} + \mathcal{G} \quad (53)$$

Nous admettons que la dimension des particules est suffisamment grande ( $r > 10^{-2} \mu$ ) pour qu'il n'y ait pas de pression  $p$  due aux particules, la pression globale étant celle du gaz.

Le tenseur  $\Pi_p$  est donné par :

$$(\Pi_p)_{\alpha\beta} = \sum_{k=1}^n \int \rho_k(r) [v_{\alpha} - v_{\beta 0}] [v_{\beta} - v_{\alpha 0}] f_k d r d T d \nu \quad (54)$$

### 3.4. - Équations de l'énergie

Nous avons introduit au paragraphe 2 une fonction  $q_k(r, x, v, T, t)$  représentant la chaleur échangée entre la particule et le gaz. Le flux total de chaleur

transférée au gaz par le usage de particules dans un volume élémentaire devient :

$$\mathcal{Q}_k(x, t) = \sum_{k=1}^n \int q_k f_k d r d T d \nu \quad (55)$$

L'écoulement exerce sur la particule une force  $F_k$  où intervient la vitesse relative  $u - v$ , ce qui correspond à une puissance  $F_k(u - v)$  et en sommant à toutes les espèces, il vient :

$$\mathcal{F}_k = \sum_{k=1}^n \int (u - v) F_k f_k d r d T d \nu \quad (56)$$

Il faut tenir compte également de l'énergie apportée au gaz par les produits issus de la surface de la particule. Cette énergie due à la variation de la géométrie de la particule a pour expression :

$$\mathcal{J}_p = \sum_{k=1}^n \int \rho_{pk} 4 \pi r^2 R_k \left( h_k + \frac{v^2}{2} \right) f_k d r d T d \nu \quad (57)$$

$h_k$  est déterminé par le processus prenant place à la surface de la particule et défini comme l'enthalpie massique du gaz venant de la surface de la particule  $k$ .

L'équation de conservation de l'énergie pour le gaz en introduisant l'énergie interne  $e$  du gaz devient :

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla_x e = \rho \nabla_x \cdot u \Pi + \nabla_x \cdot q + \mathcal{Q}_p + T_p + \mathcal{J}_p \quad (58)$$

avec :

$$q = -\lambda \nabla_x T + \rho \sum_{j=1}^N y_j h_j U_j$$

$h_j$  étant l'enthalpie massique de l'espèce diffusant à la vitesse  $U_j$ .

L'équation de la conservation de l'énergie des particules s'obtient comme précédemment en multipliant l'équation de Boltzmann par  $\left( h_k + \frac{v^2}{2} \right)$  et en intégrant.

## 4. - Applications

Nous avons choisi deux applications faisant intervenir des phénomènes de combustion. La première se rapporte à un foyer tubulaire avec injection en amont d'un gaz comburant et d'un combustible liquide pulvérisé. La deuxième est relative à un réacteur tubulaire avec évolution en paquets.

### 4.1. - Foyer avec injection de combustible liquide

Soit un foyer tubulaire dans lequel nous injectons des gouttes de combustible ayant une certaine distribution représentée en régime permanent par

la fonction  $f(x, r, v)$ , nous introduisons la nouvelle fonction de distribution  $C = f T d v$ , la fonction  $C(r, x)$  nous permet de définir le nombre total de gouttes par unité de volume :

$$N(x) = \int_0^\infty C d r \quad (59)$$

et la masse volumique du flux de particules :

$$\rho_p = \int_0^\infty \rho_{pl} \frac{1}{3} \pi r^3 C d r \quad (60)$$

$\rho_{pl}$  étant la masse volumique du liquide injecté.

L'équation de continuité globale pour les particules est donc :

$$\frac{d}{dx} (\rho_p v) + \int_0^{\infty} \rho_p v \pi r^2 R C dr = 0 \quad (61)$$

et pour le gaz :

$$\frac{d}{dx} (\rho_g u) + \int_0^{\infty} \rho_p v \pi r^2 R C dr = 0 \quad (62)$$

L'intégrale correspond au débit vaporisé par unité de surface d'une section du foyer prise à l'abscisse  $x$ .

L'équation de continuité globale s'obtient en faisant la somme des deux équations précédentes et en intégrant :

$$\rho_p v + \rho_g u = \dot{m} \quad (63)$$

$\dot{m}$  est le débit unitaire dans le foyer.

Avec la présence dans le gaz de réactions chimiques nous avons, d'après le paragraphe 3, une équation de continuité de l'espèce  $j$  de la forme :

$$\frac{d}{dx} [\rho_g (u + U_j) Y_j] = \dot{W}_j + \mathcal{D}_j \frac{d}{dx} (\rho_p v) \quad (64)$$

L'équation du mouvement pour les particules s'écrit également à partir des équations générales :

$$\rho_p v \frac{dv}{dx} = \int_0^{\infty} \rho_p v \frac{1}{3} \pi r^2 F C dr = F_p \quad (65)$$

$F$  étant la force de traînée, cette équation définit donc la balistique des particules. Pour le gaz nous obtenons de même en négligeant les termes de viscosité.

$$\rho_g u \frac{du}{dx} + \frac{dP}{dx} = F_p \quad (66)$$

L'équation de l'énergie globale en tenant compte des simplifications précédentes devient :

$$\frac{d}{dx} \left[ \rho_g u \left( h_g + \frac{u^2}{2} \right) + \rho_p v \left( h_p + \frac{v^2}{2} \right) + q \right] = 0 \quad (67)$$

avec :

$$q = \lambda \frac{dT}{dx} + \sum_1^N h_j Y_j U_j$$

la réaction chimique s'effectuant uniquement en phase gazeuse.

La méthode d'intégration utilisée consiste à diviser le foyer en différentes sections distantes de  $\Delta x$ ,  $\Delta x$  définissant le pas d'intégration. Avant de donner quelques résultats obtenus avec cette théorie complète, nous allons discuter un cas simple en faisant intervenir un rayon moyen  $r$  des gouttes.

Un invariant de ce problème est le flux de gouttes défini par le produit du nombre de gouttes par unité de volume  $N = \int_0^{\infty} C dr$  par la vitesse de ces gouttes :

$$\dot{v} = N_0 v_0 = N v \quad (68)$$

$\dot{v}$  l'indice 0 caractérisant les conditions d'entrée dans le foyer.

La combustion autour de la goutte est régie par des phénomènes de diffusion, l'exposant  $n$  intervenant dans la loi représentée par l'équation (3) est égal à 1 de sorte que :

$$R = R_0 \frac{r_0}{r} = \frac{dr}{dt} = v \frac{dr}{dx} \quad (69)$$

L'équation de continuité globale en faisant intervenir le débit par unité de surface  $\dot{m}$  est donnée par (63).

Le débit unitaire relatif aux gouttes  $\dot{m}_p = \rho_p v$  est égal à :

$$\dot{m}_p = \rho_p v \frac{4}{3} \pi r_0^3 \quad (70)$$

et au départ :

$$\dot{m}_{p0} = \rho_{p0} \frac{4}{3} \pi r_0^3 v_0 N_0 \quad (71)$$

de sorte que :

$$\frac{\dot{m}_p}{\dot{m}_{p0}} = \frac{r_0^3}{r^3} = y^3 \quad (72)$$

Nous allons prendre comme paramètre caractérisant le débit unitaire :

$$z = \frac{\dot{m}_g}{\dot{m}} = \frac{\rho_g u}{\dot{m}} \quad (73)$$

de sorte que :

$$\frac{\dot{m}_p}{\dot{m}_{p0}} = \frac{1-z}{1-z_0}$$

Nous admettons que la traînée des gouttes suit la loi de Stokes de sorte que d'après (53) :

$$v \frac{dv}{dx} = \frac{9}{2} \frac{\mu_g}{\rho_p r_0} \frac{u-v}{r^2} \quad (74)$$

Nous admettons de plus que la pression est constante  $\left( \frac{dP}{dx} = 0 \right)$ , que la température des gaz  $T_g$  est égale à la température de fin de combustion, que la composition des gaz est celle des gaz brûlés de sorte que la masse volumique des gaz  $\rho_g$  est une constante.

Les paramètres  $z$ ,  $y$ ,  $v$ ,  $u$  sont déterminés en fonction de  $x$  par le système d'équations :

$$(75) \quad \begin{cases} u = z v \\ u_t = \text{vitesse de fin de combustion des gouttes} \\ 1 - z = y^3 (1 - z_0) \\ y^2 v \frac{dv}{dx} = \Lambda (u - v) & \Lambda = \frac{9}{2} \frac{\mu_g}{\rho_p r_0^2} \\ B y v \frac{dy}{dx} = 1 & B = r_0 N_0 \end{cases}$$

La vitesse des gouttes s'exprime en fonction de  $y$  :

$$v = v_t = \frac{AB u_t (1 - z_0)}{AB + z} y^2 + y^{2\Lambda} \left[ v_0 - u_t + \frac{AB u_t + (1 - z_0)}{AB + z} \right] \quad (76)$$

de même  $x = B \int_0^x v(y) dy$  donne la variation du diamètre des gouttes en fonction de l'abscisse.

$$x = B \left[ \frac{u_0}{2} (y^2 - 1) + \frac{AB u_0 (1 - z_0)}{5 (AB + z)} (y^5 - 1) + \frac{y^5 - z_0^5}{2} \frac{1}{AB} \left[ v_0 - u_0 + \frac{AB u_0 (1 - z_0)}{AB + z} \right] \right] \quad (77)$$

et la longueur du foyer est donnée par :

$$L = \frac{B}{2} \frac{AB}{AB + z} \left[ u_0 \frac{AB}{2} + (1 - z_0) u_0 \frac{AB}{5} + v_0 \right] \quad (78)$$

En passant aux grandeurs réelles puisque  $B_0 = 1 \text{ ra}^2$  nous obtenons :

$$L = \frac{r_0^2}{1 + \frac{1}{\rho_{pe}}} \left[ 2 v_0 \rho_{pe} + \frac{9}{2} \mu_k u_0 + \frac{9}{5} (1 - z_0) \mu_k u_0 \right] \quad (79)$$

La longueur du foyer est donc proportionnelle au carré du rayon initial de la goutte, les conditions d'injection jouent par conséquent un très grand rôle dans ce cas. Cette théorie simplifiée nous permet d'introduire un certain nombre de paramètres. Le temps de combustion d'une goutte est caractérisé par le paramètre  $\theta = r_0^2/\lambda$  puisque nous avons admis une loi d'évolution des gouttes de la forme  $r^2 = r_0^2$

$- 2t$  avec  $t = \frac{\lambda}{\rho_{pe} C_p} \ln(1 + B)$ ,  $\lambda$  est la conductibilité thermique du gaz,  $C_p$  sa chaleur spécifique à pression constante,  $B$  le coefficient de transfert de Spalding, quotient de la variation d'enthalpie dans le gaz près de la surface par la variation d'enthalpie dans le liquide  $B = \Delta h_g/\Delta h_l$ . En introduisant le nombre de Prandtl  $P_v = \frac{\mu_k C_p}{\lambda}$ , le groupe  $\frac{9}{2} \frac{\mu_k}{\rho_{pe}}$  s'écrit  $F = \frac{9}{2} \frac{P_v}{1 + B}$ , nous définissons

également la vitesse réduite  $\varphi = v_0/u_0$  et la longueur réduite du foyer  $X_L = L/9 u_0$  de sorte que la théorie précédente conduit à la relation :

$$X_L = \frac{\varphi + F \left( \frac{1}{2} - \frac{1 - z_0}{5} \right)}{2 + F} \quad (80)$$

Pour diminuer  $X_L$  il faut donc diminuer  $\varphi$  tout en assurant une bonne pulvérisation, l'effet de  $F$  dépend des conditions d'entrée dans le foyer.

On peut tenir compte de l'effet de la convection dans le transfert d'énergie entre gaz et goutte, au repos nous avons pour  $l$  la valeur  $l_0$  et dans un écoulement  $l$  est donné par la relation :

$$l = l_0 \frac{N_u}{2} \quad (81)$$

le nombre de Nusselt  $N_u$  dépend du nombre de Reynolds et du nombre de Prandtl :

$$N_u = 2 + 0,6 Re^{1/2} Pr^{1/4} \quad (82)$$

avec :

$$Re = \frac{\rho_k (u_0 - v_0) r_0}{\mu_k}$$

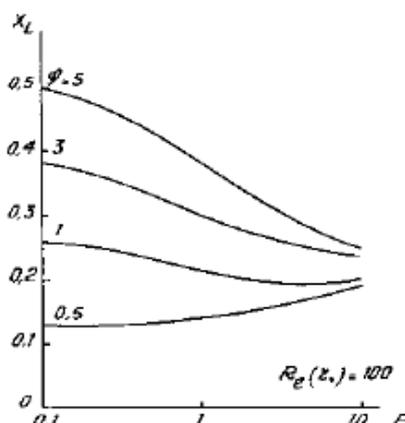


Fig. 1. — Variation de la longueur réduite  $X_L$  en fonction de  $F$

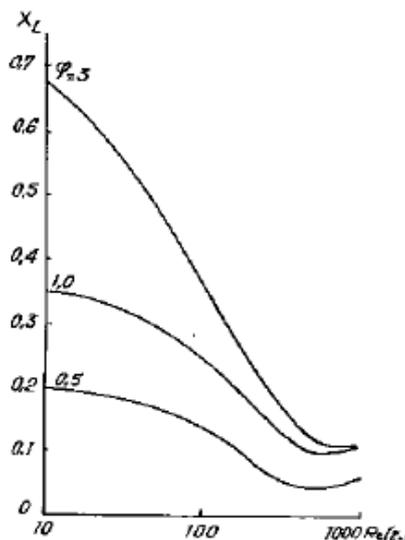


Fig. 2. — Variation de la longueur réduite en fonction du nombre de Reynolds.

Les figures 1 et 2 montrent l'influence sur  $X_L$  des paramètres  $\varphi$ ,  $F$  pour différentes valeurs du nombre de Reynolds initial  $Re(r_0) = \frac{\rho_k (u_0 - v_0) r_0}{\mu_k}$

Dans les conditions d'emploi dans un foyer,  $X_L$  diminue légèrement lorsque  $F$  décroît (pour un foyer de fusée  $F$  est de l'ordre de 0,5),  $X_L$  diminue lorsque le nombre de Reynolds  $Re(r_0)$  augmente, cette remarque est très intéressante car une augmen-

tation de la vitesse dans le foyer n'augmente pas nécessairement sa longueur, cet effet peut donc être utilisé dans les réacteurs chimiques. Généralement  $N_c$  augmente avec  $\varphi$ , cet effet s'atténue pour les valeurs élevées de  $F$  et du nombre de Reynolds.

La discussion du problème avec le système complet en admettant une loi de distribution des gouttes aboutit à des conclusions semblables. La compa-

raison entre la théorie et l'expérience est en général bonne. Cette comparaison s'effectue sur l'évolution de la vitesse des gaz le long du foyer. Suivant l'axe du foyer (figure 3) on ménage à la paroi une fente protégée par un voyant, on forme l'image de cette fente sur un film se déroulant perpendiculairement à l'orientation de la fente; par suite des gouttes en combustion présentes dans le foyer, on observe sur le film des traces dont l'angle avec le sens de déroulement du film détermine la vitesse des gouttes.

Nous pouvons ainsi tracer tout le long du foyer un domaine des vitesses observées, la vitesse la plus élevée correspondant sensiblement au gaz seul et la vitesse la plus faible aux plus grosses gouttes (diamètre de l'ordre de 200  $\mu$ ). En portant sur ce même graphique la vitesse du gaz  $U$  et la vitesse des gouttes les plus grosses, on recouvre le domaine expérimental (figure 4). La définition du rayon moyen  $r_{30}$ ,  $r_{31}$ ,  $r_{32}$  modifie sensiblement les courbes théoriques et d'après l'étude faite par Lambiris, Combs et Levine, il semble que la définition  $r_{32}$  donnant le diamètre moyen de Sauter soit la meilleure.

Cette technique développée pour l'étude de l'évolution de la combustion dans les foyers nous paraît applicable à l'étude des réacteurs hétérogènes. Prenons par exemple le cas d'un solide à géométrie sphérique réagissant avec un gaz pour donner des produits gazeux ou condensés, on obtient des lois de la forme :

$$1 - \frac{r}{r_0} = kt \quad (83)$$

ou des lois plus complexes comme :

$$1 - \left(1 - \frac{r}{r_0}\right)^3 = kt \quad (84)$$

Connaissant la distribution initiale, il est possible de calculer la longueur du réacteur conduisant à une réaction complète et également de déterminer la valeur des paramètres donnant le réacteur optimal (diamètre des particules, vitesse d'injection, vitesse des gaz à l'entrée...).

#### 4.2. - Combustion en paquets

Prenons des paquets de produits frais A entourés d'un continuum d'un gaz B ayant réagi, la masse volumique du flux de paquets  $\rho_p$  et du continuum  $\rho_c$  déterminent la masse globale de l'écoulement :

$$\rho = \rho_p + \rho_c \quad (85)$$

une fraction massique de l'espèce j dans le paquet est égale par définition à :

$$Y_{jA} = \frac{(F_j)_p}{\rho_p} \quad (86)$$

et dans le continuum :

$$Y_{jB} = \frac{(F_j)_c}{\rho_c} \quad (87)$$

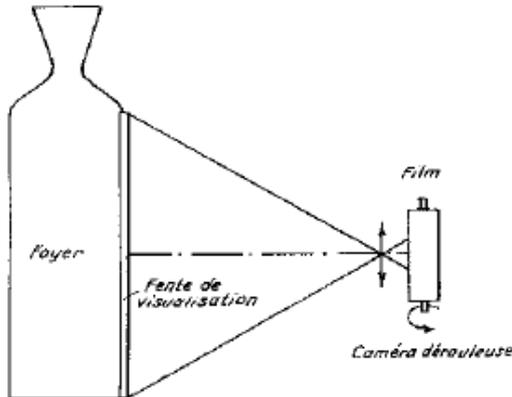


Fig. 3. — Détermination de la vitesse de l'écoulement dans le foyer

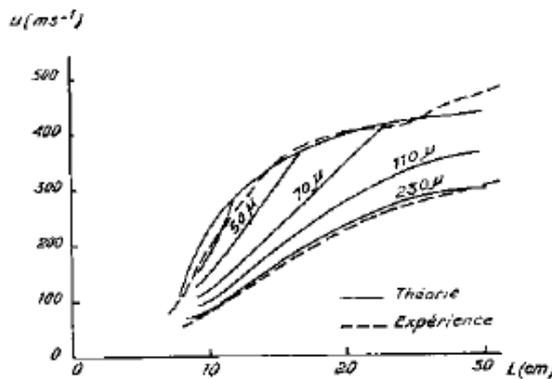


Fig. 4. — Evolution de la vitesse de combustion le long du foyer

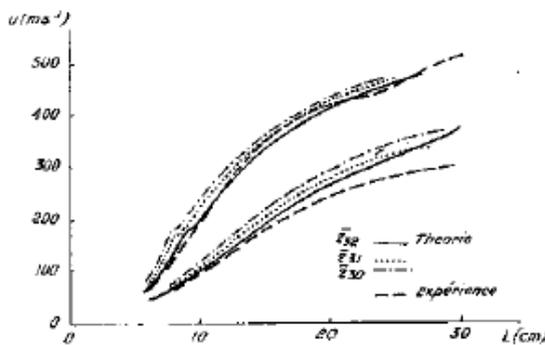


Fig. 5. — Influence du choix du diamètre moyen

Nous pouvons définir  $\rho_B$  d'après l'équation (35) :

$$\rho_B = \int_0^{\infty} \rho_A \frac{1}{3} \pi r^2 f_A dr \quad (88)$$

la fonction de distribution  $f_A$  étant celle de l'équation (22), de sorte que :

$$(\rho_A)_B = \gamma_{1A} \rho_A \int_0^{\infty} \frac{1}{3} \pi r^2 f_A dr \quad (89)$$

et :

$$(\gamma_{1B})_B = \gamma_{1B} \left[ \rho = \rho_A \int_0^{\infty} \frac{1}{3} \pi r^2 f_A dr \right] \quad (90)$$

l'espèce  $j$  se trouvant à la fois dans le paquet et le continuu, la fraction massique globale de l'espèce  $j$ ,  $\rho_j = (\rho_{1A})_B + (\rho_{2A})_B$  et  $\gamma_j = \rho_j / \rho$ .

Nous obtenons la relation donnant  $\gamma_j$  en fonction de  $f_A$  :

$$\frac{\gamma_j}{\gamma_{1A}} = \frac{\gamma_{1B}}{\gamma_{1B}} = \frac{\rho_A}{\rho} \int_0^{\infty} \frac{1}{3} \pi r^2 f_A dr \quad (91)$$

On aurait de même pour la situation inverse, c'est-à-dire pour des paquets constitués du produit B et d'un continuu de produit A :

$$\frac{\gamma_j}{\gamma_{1B}} = \frac{\gamma_{1A}}{\gamma_{1A}} = \frac{\rho_B}{\rho} \int_0^{\infty} \frac{1}{3} \pi r^2 f_B dr \quad (92)$$

Le taux de production de l'espèce  $j$  dans la première situation, puisque l'espèce qui apparaît en B disparaît en A, s'écrit :

$$\dot{W}_j = \rho_A |R_A| (\gamma_{1B} - \gamma_{1A}) \int_0^{\infty} \frac{1}{3} \pi r^2 f_A dr \quad (93)$$

et dans la situation inverse :

$$\dot{W}_j = -\rho_B |R_B| (\gamma_{1A} - \gamma_{1B}) \int_{r_c}^{\infty} \frac{1}{3} \pi r^2 f_B dr \quad (94)$$

le rayon critique  $r_c$  apparaissant à la borne inférieure de l'intégrale définit un paquet en deçà duquel la réaction chimique est figée.

Compte tenu de la définition de  $\gamma_j$  nous obtenons pour expression de  $\dot{W}_j$  :

$$\begin{aligned} \dot{W}_j &= \rho_A |R_A| (\gamma_{1B} - \gamma_{1A}) \int_0^{\infty} f_A r^2 dr \\ &= \frac{\dot{W}_j}{3 \rho |R_A| (\gamma_{1B} - \gamma_{1A})} \int_0^{\infty} f_A r^2 dr \quad (95) \\ \dot{W}_j &= -\rho_B |R_B| (\gamma_{1A} - \gamma_{1B}) \int_{r_c}^{\infty} f_B r^2 dr \\ &= \frac{\dot{W}_j}{3 \rho_B |R_B| (\gamma_{1A} - \gamma_{1B})} \int_{r_c}^{\infty} f_B r^2 dr \end{aligned}$$

puisque

$$\rho_B |R_B| \approx \rho_A |R_A|$$

En admettant l'hypothèse a du § 2.2.

$$R \ll \frac{r}{3} gh \ln h, f_A = f_B \text{ et } I(r,0) = a r e^{-\alpha \left(\frac{r}{h}\right)^2}$$

on obtient :

$$\begin{cases} \dot{W}_j r_0 / 2 \rho |R_A| (\gamma_{1B} - \gamma_{1A}) = h \frac{g h^2}{3} \\ \dot{W}_j \rho_B r_0 / 2 \rho_B |R_B| (\gamma_{1A} - \gamma_{1B}) = h \frac{g h^2}{3} \end{cases} \quad (96)$$

Cette relation a été appliquée à l'étude de l'évolution de la combustion turbulente dans un foyer alimenté avec un prémélange d'air et de propane. En prenant pour espèce  $W_j$  l'oxygène et en déterminant l'évolution au cours du temps des deux expressions  $\dot{W}_1 = \dot{W}_j r_0 / 2 \rho |R_A| (\gamma_{1B} - \gamma_{1A})$  et  $\dot{W}_2 = \dot{W}_j \rho_B r_0 / 2 \rho_B |R_B| (\gamma_{1A} - \gamma_{1B})$  par une analyse des produits consommés on constate que la loi précédente exprimant  $\dot{W}_1$  ou  $\dot{W}_2$  en fonction du temps est assez bien vérifiée puisque  $\log \dot{W}_1$  et  $\log \dot{W}_2$  sont proportionnels au temps d'après les conclusions de Howe et Shipman (figure 6) [6].

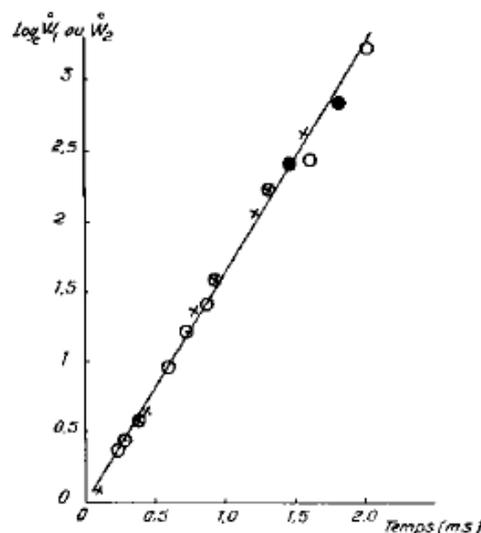


Fig. 6. — Combustion en paquets, v = 53.5 ms<sup>-1</sup> AIR - PROPANE

## Conclusion

En traitant ces deux exemples, nous avons voulu montrer comment il était possible d'aborder la chimie des écoulements hétérogènes. C'est un problème complexe qui conduit rarement à des solutions explicites mais qui peut être abordé par les techniques actuelles de résolution numérique.

Il est certain que par rapport aux réacteurs

classiques, le taux de réaction dans un foyer est beaucoup plus élevé et que l'écoulement joue un rôle plus important; nous pensons néanmoins que, si l'on se réfère à la littérature américaine sur ce sujet, l'analyse exposée ici peut conduire à une étude plus réaliste du fonctionnement des réacteurs tubulaires hétérogènes.

## RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] BARRÈRE M., MOUTET A., SAIGAT P., Évolution de la combustion dans une chambre de fusée à propergol liquide, *Revue générale des Sciences Appliquées*, tome III, n° IV, Bruxelles, 1957.
- [2] BARRÈRE M., PRUD'HOMME R., *Éléments d'Aérothermochimie* (à paraître) (Masson 1969).
- [3] WILLIAMS F.A., *Combustion Theory*, Addison, Wesley Publishing Company, 1965.
- [4] MARBLE F.E., Dynamic of a Gas Containing Small Solid Particles, *Combustion and Propulsion*, V° Agard Colloquium, Pergamon Press, 1963.
- [5] LAMBERTS J., COMBS L.P., LAYNE R.S., Stable Combustion Processes in Liquid Propellant Rocket Engine, *Combustion and Propulsion*, V° Agard Colloquium, Pergamon Press, 1963.
- [6] HOWE N.M., SHIPMAN C.W., A Tentative Model for Rates of Combustion in Confined Turbulent Flames, N° Symposium on Combustion - The Combustion Institute, 1961.

