



HAL
open science

Modèle d'évolution thermique d'un matériau de forte porosité en présence d'une réaction de décomposition

J.-P. Caltagirone, Roger Prud'Homme

► **To cite this version:**

J.-P. Caltagirone, Roger Prud'Homme. Modèle d'évolution thermique d'un matériau de forte porosité en présence d'une réaction de décomposition. Comptes rendus hebdomadaires des séances de l'Académie des sciences. Série B, Sciences physiques, 1977. hal-02005074

HAL Id: hal-02005074

<https://hal.science/hal-02005074>

Submitted on 4 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.

AÉROTHERMIQUE. — *Modèle d'évolution thermique d'un matériau de forte porosité en présence d'une réaction de décomposition.* Note (*) de Jean-Paul Caltagirone et Roger Prud'homme, présentée par M. Edmond-A. Brun.

On étudie la propagation d'une zone de réaction exothermique dans un milieu poreux. Le champ des températures et celui des concentrations y sont déterminés aux instants successifs. On constate la progression d'un front thermique qui s'accroît jusqu'à la consommation quasi complète des réactants puis décroît jusqu'à un profil de conduction pure.

The propagation of an exothermal reaction zone in a porous medium is studied. Temperature and concentration fields are determined at successive times. The progression of a thermal front is observed which grows until quasi-complete consumption of reactants and then decreases and tends to a pure conduction profile.

La propagation d'une zone de réaction exothermique dans un milieu poreux s'accompagne généralement de la progression d'un front thermique (1). Dans le cas étudié ici, il est tenu compte simultanément des effets de conduction thermique et de diffusion.

Le milieu hétérogène considéré est constitué d'une part de la phase solide inerte S, de masse volumique partielle ρ_s , servant de support à une seconde phase condensée réactive R de masse volumique partielle ρ_R . Cet ensemble, de porosité élevée, comprend d'autre part les produits de décomposition \mathcal{E}_j de la phase solide réactive que nous supposons gazeux. Bien que les phases condensées soient les plus denses et immobiles, on peut cependant décrire le milieu à l'aide de quantités moyennes telles que la masse volumique totale et la vitesse barycentrique définie par

$$(1) \quad \rho v = \sum_j \rho_j^0 v_j^0.$$

Le grand écart de densité entre les phases se traduit par $\rho_j^0/\rho \ll 1$, de sorte que la vitesse barycentrique est négligeable.

Le mouvement des produits gazeux de la réaction peut donc être considéré comme un processus de diffusion des gaz à travers les phases condensées.

La configuration que nous étudions correspond à un problème unidimensionnel instationnaire : une couche du matériau hétérogène ci-dessus défini, est disposée entre deux plans parallèles le long desquels les conditions aux limites sont à préciser selon les lois d'échange utilisées.

La réaction chimique d'ordre α s'écrit symboliquement :



C étant la concentration de la phase condensée réactive (nombre de moles par unité de volume total), l'équation du bilan des espèces chimiques s'écrit (2) :

$$(3) \quad \frac{\partial C}{\partial t} - \mathcal{D} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = -BT^\sigma e^{-E_a/RT} C^\alpha,$$

avec \mathcal{D} , coefficient de diffusion supposé constant, B et σ constants; BT^σ , coefficient d'Arrhénius, E_a , énergie d'activation de la réaction; R, constante universelle des gaz.

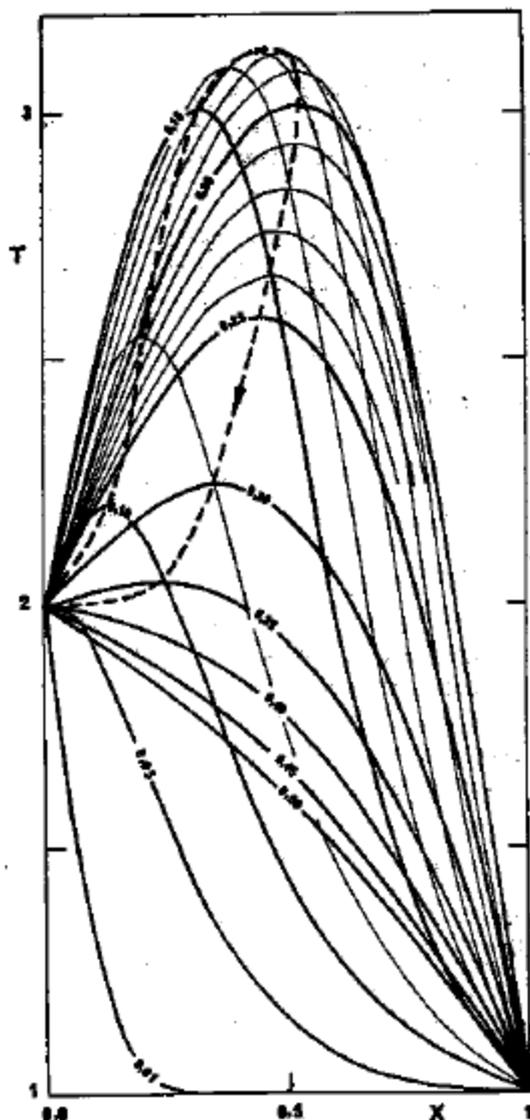


Fig. 1. — Champ de température $T(x)$. Les courbes sont graduées en temps réduit. En pointillés, lieu du maximum de la température. $Bi = 1\,000$, $\gamma = 15$, $\varphi = 0,01$, $\beta = 2$.

En utilisant l'équation (3) l'équation de l'énergie s'écrit :

$$(4) \quad (\rho c)^* \frac{\partial T}{\partial t} - \lambda^* \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = -\Delta h B T^{\varphi} e^{-E_a/RT} C^{\gamma},$$

avec $\Delta h = \sum_j a_j^* h_j^* - h_R$, énergie libérée par la réaction; λ^* , coefficient de conduction thermique supposé constant; $(\rho c)^*$ chaleur volumique moyenne.

Notons que dans le second membre de l'équation (4) nous avons négligé le terme $-\mathcal{D} (\partial \Delta h / \partial x) (\partial C / \partial x)$ qui ne fait intervenir que le produit de deux gradients.

Les conditions aux limites adoptées correspondent aux lois d'échange classiques :

$$(5) \quad \begin{cases} \text{pour } x=0, & \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \text{ (ou } \mathcal{J} = 0) & \text{et } T = T_2(t); \\ \text{pour } x=l, & \frac{\partial C}{\partial x} = 0 & \text{et } -q = \lambda^* \frac{\partial T}{\partial x} = b(T - T_0); \end{cases}$$

T_0 désigne la température du milieu ambiant, supposée constante et T_2 une température pariétale imposée qui peut être, elle aussi, constante.

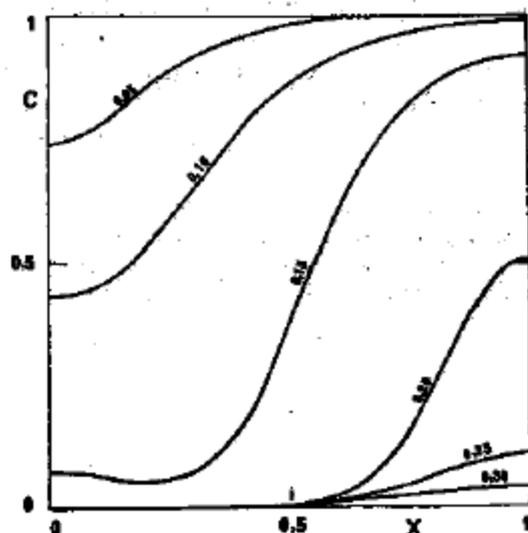


Fig. 2. — Champ de concentrations $C(x)$. Les courbes sont graduées en temps réduit, $Bi = 1000$, $\gamma = 15$, $\varphi = 0,01$, $\beta = 2$.

Les équations (3) et (4) ainsi que les conditions aux limites (5) sont rendues adimensionnelles, à l'aide des grandeurs de référence suivantes⁽³⁾ : $x, = l$, épaisseur de la couche; $t_r = (\rho c)^* l^2 / \lambda^*$; $C_r = C_0$, concentration de référence; $T_r = T_0$, température atmosphérique.

Quatre nombres sans dimensions apparaissent dans les équations : le nombre de Lewis Le ,

$$\varphi^2 = \frac{Bl^2}{\mathcal{D}} \exp\left(-\frac{E_a}{RT_0}\right), \quad \beta = \frac{-\Delta h \mathcal{D} C_0}{\lambda^* T_0}, \quad \gamma = \frac{E_a}{RT_0}.$$

On obtient alors les équations sans dimensions suivantes :

$$(6) \quad \begin{cases} Le \frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = -\varphi^2 C \exp\left[\gamma\left(1 - \frac{1}{T}\right)\right], \\ \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \varphi^2 \beta C \exp\left[\gamma\left(1 - \frac{1}{T}\right)\right]; \end{cases}$$

$$(7) \quad \begin{cases} \text{pour } x=0, & \frac{\partial C}{\partial x} = 0 & \text{et } T = T_2, \\ \text{pour } x=1, & \frac{\partial C}{\partial x} = 0 & \text{et } \frac{\partial T}{\partial x} = Bi(T-1) \end{cases}$$

($Bi = bl/\lambda^*$, nombre de Biot).

Le système d'équations obtenu est résolu par la méthode des différences finies suivant le schéma de Crank-Nicolson ^(*), en prenant pour conditions initiales ($t = 0$) :

$$T(x, 0) = T_2 \quad \text{et} \quad C(x, 0) = 1, \quad \text{pour } x = 0; \quad T(x, 0) = 1, \quad C(x, 0) = 1 \quad \text{pour } x > 0,$$

Pour faciliter le démarrage de l'intégration, la condition initiale de température est remplacée par

$$T = \operatorname{erfc}(u) \quad \text{avec} \quad u = x/2\sqrt{t}.$$

Les figures 1 et 2 montrent l'évolution du champ de température et du champ de concentration en fonction du temps. On constate, pour les valeurs choisies des paramètres, la progression d'un extremum de température, qui augmente puis s'atténue au cours de la décomposition de l'espèce réactive.

(*) Séance du 9 mai 1977.

(1) J.-J. BERNARD, *Entropie*, n° 65, 1965.

(2) M. BARRERE et R. PRUD'HOMME, *Mémorial des Sciences Physiques*, fasc. 68, Gauthier-Villars, 1970.

(3) B. A. FINALAYSON, *Method of Weighted Residuals*, Academic Press, 1971.

(4) A. RALSTON et H. S. WILF, *Mathematical Methods for Digital Computers*, John Wiley and Sons, 1961.

Laboratoire d'Aérothermique
du C.N.R.S.,
4 ter, route des Gardes,
92190 Meudon.