CHAPITRE I :

Rappels et généralités

I.1 Définition d'un système

L'étude d'un phénomène physique nécessite de définir le système étudié. Il peut s'agir d'un système matériel et/ou d'une portion d'Univers.

On convient donc généralement d'une limite (frontière) qui définit ce qui intérieur et extérieur à ce système.

On distingue principalement deux types de systèmes :

- **systèmes fermés :** définis à partir de quantités de matière fixes et pour lesquels seuls les échanges d'énergie, d'information, etc avec le reste de l'Univers sont permis. Les échanges de matière ne sont pas possibles ;
- **systèmes ouverts :** permettant tous les échanges y compris de matière.

Exemple : cas d'un fluide s'écoulant dans un tuyau.

Ce système peut être considéré de deux manières en fonction de ce que l'on désire étudier :

On s'intéresse à ce qui circule à travers une portion bien définie par les sections S_1 et S_2 du tuyau. ***Il s'agit d'un système … ouvert***

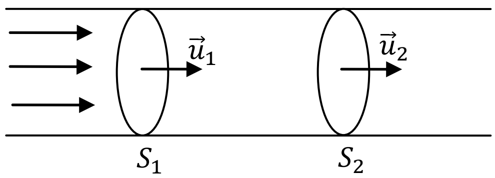

Figure I. 1 : système ouvert

On peut aussi s'intéresser à la matière comprise entre deux sections du tuyau à l'instant t et à son évolution à l'instant $t + \Delta t$:

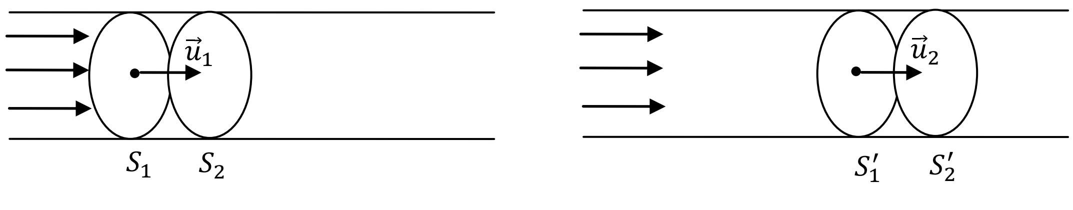

Figure I.2 : système fermé

I.2 Procédé et variables de procédé

Un procédé de transformation permet d'obtenir, à partir d'une matière première, un produit fonctionnel. Le courant de matière, qui est souvent un mélange de plusieurs substances, peut subir une ou plusieurs opérations de transformation (physiques et/ou chimiques).

I.2.1 L'unité au sein d'un procédé

Par unité on désigne l'appareil (ou l'équipement) où se déroule une opération de transformation parmi les nombreuses opérations constituants le procédé.

I.2.2 Schéma de circulation d'un procédé (PFD)

C'est un diagramme dans lequel sont représentées les unités du procédé, reliées entre elles par des courants de procédé.

I.2.3 Courants de procédé

Ce sont des lignes orientés indiquant le sens de l'écoulement des courants de matière (et d'énergie) entre les unités au sein du procédé (figure I.3). On suppose qu'il n'y a pas de réaction et que la quantité de matière est négligeable dans ces lignes. Ce sont donc des images ***idéales*** des canalisations qui relient les éléments réels constitutifs du procédé. Si des réactions parasites se déroulent dans ces canalisations, ou que la quantité de matière n'y est pas négligeable, on les représentera par des unités complémentaires reliées par des lignes idéales. On s'arrangera pour qu'une unité ne possède qu'une seule ligne d'alimentation en rassemblant en amont les diverses lignes d'arrivée à un nœud de mélange (figure I.1).

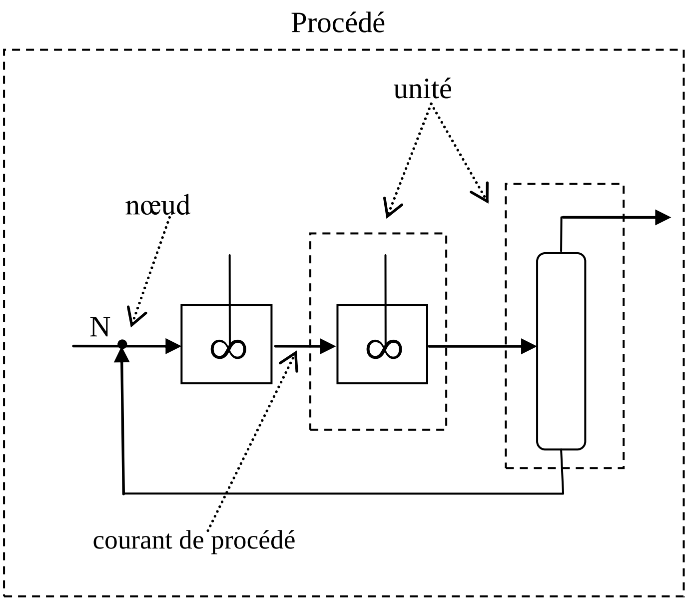

Figure I.3 : schéma de circulation d'un procédé

I.2.4 variables de procédé (ou variables de bilan)

Dans un procédé, les courants de matière sont caractérisés par des variables de différentes natures (débits volumiques, températures, pression, compositions, pH, conductivité électrique, etc.). Il est primordial de savoir exprimer, à partir des ces données de base (primaires), les variables intervenant dans les bilans et que l'on appelle **variables de bilans**.

Les bilans de matière sont souvent établis en masse/mole (quantité extensive) ou en masse par unité de temps/moles par unité de temps (quantité intensive). Dans ce dernier cas, on divise la masse/le nombre de moles par la durée de l'intervalle de temps considéré ; il s'agit d'un débit massique moyen/ débit molaire moyen. Lorsque l'intervalle de temps est très court, c'est un débit instantané.

Dans les bilans d'énergie, les débits d'énergie véhiculés par les courants de matière sont obtenus par le produit du débit massique/molaire moyen ou instantané et l'énergie de l'unité de masse/d'une mole (l'enthalpie spécifique/molaire) du courant de matière. Lorsque le courant est un mélange de plusieurs constituants, on fait intervenir en plus, les fractions massiques/molaires des constituants.

Nous résumons dans le tableau I.1, les différentes variables de bilan avec leurs symboles et unités en S.I.

Tableau I.1 : les différentes variables de bilan

en masse						
quantité	masse	débit massique	fraction massique	enthalpie spécifique	chaleur, travail	débit de chaleur
symbole	$\boldsymbol{m}$	$\boldsymbol{\dot{m}}$	$\boldsymbol{w}$	$\boldsymbol{\widehat{H}}$	$\boldsymbol{Q}$	$\boldsymbol{\dot{Q}}$
unité	kg	$kg \cdot s^{-1}$	-	$J \cdot kg^{-1}$	J	W
en mole						
quantité	nombre de moles	débit molaire	fraction molaire	enthalpie molaire	chaleur, travail	débit de chaleur
symbole	$\boldsymbol{n}$	$\boldsymbol{\dot{n}}$	$\boldsymbol{x}$	$\boldsymbol{\overline{H}}$	$\boldsymbol{Q}$	$\boldsymbol{\dot{Q}}$
unité	$kmole$	$kmole \cdot s^{-1}$	-	$J \cdot kmol^{-1}$	J	W

Remarque :

Dans le cas du bilan d'énergie, en plus de la cohérence du système d'unité, il est nécessaire d'utiliser le même système de référence pour l'enthalpie, et particulièrement pour les systèmes réactionnels.

Le passage des variables primaires aux variables de bilans est une étape essentielle avant l'écriture des équations de bilans. Par exemple des grandeurs de composition autres que les fractions massiques/molaires sont considérées comme des variables primaires qu'il faut savoir convertir en fractions. Nous donnons dans le tableau I.2 quelques relations entres ces différentes grandeurs. Mais commençons d'abords par ces définitions et notation.

A_k : le constituant de rang k du mélange, de masse molaire M_k
m : la masse totale du mélange $[kg]$, m_k la masse du constituant A_k dans le mélange $[kg]$.
n : le nombre de moles total du mélange, n_k le nombre de moles de A_k dans le mélange.
V : le volume du mélange $[m^3]$, ρ sa masse volumique $[kg \cdot m^{-3}]$, avec $m = \rho\, V$

on a par définition :

fraction massique de A_k : $w_k = \frac{m_k}{m}\ [-]$, fraction molaire de A_k : $x_k = \frac{n_k}{n}\ [-]$

avec $\sum_k w_k = \sum_k x_k = 1$
masse volumique partielle de A_k : $\rho_k = \frac{m_k}{V}$ $[kg \cdot m^{-3}]$
concentration molaire volumique de A_k : $c_k = \frac{n_k}{V}$ $[kmol \cdot m^{-3}]$

Tableau I.2 : relations entre différentes grandeurs de composition

	en fonction de			
	w_k	x_k	ρ_k	c_k
$w_k =$	w_k	$\frac{M_k x_k}{\sum_h M_h x_h}$	$\frac{\rho_k}{\rho}$	$\frac{M_k c_k}{\rho}$
$x_k =$	$\frac{w_k}{M_k \sum_h w_h M_h^{-1}}$	x_k	$\frac{\rho_k}{M_k \sum_h \rho_h M_h^{-1}}$	$\frac{c_k}{\sum_h c_h}$
$\rho_k =$	ρw_k	$\frac{M_k x_k}{\sum_h M_h x_h}\ \rho$	ρ_k	$M_k c_k$
$c_k =$	$\frac{w_k}{M_k}\ \rho$	$\frac{\rho x_k}{\sum_h M_h x_h}$	$\frac{\rho_k}{M_k}$	c_k

Avec :

$\sum_h M_h x_h = \bar{M}\ \left(= \frac{1}{\sum_h \frac{w_h}{M_h}}\right)$: la masse molaire moyenne du mélange $[kg \cdot kmol^{-1}]$

$\sum_h c_k = \frac{\rho}{\bar{M}} = \frac{n}{V}$: la concentration molaire volumique du mélange $[kmol \cdot m^{-3}]$

I.3 Introduction aux bilans

Le génie des procédés est régi par des principes dits de "conservation" ou encore de "bilan". Un bilan décrit les variations temporelles d'une grandeur au sein d'un système, que l'on considérera ouvert (au sens de la thermodynamique), c'est-a-dire que la grandeur peut entrer ou sortir du système.

Prenons un exemple simple et essayons de poser intuitivement le bilan :

La grandeur est le nombre d’étudiants G et le système est notre faculté. On désir connaitre le nombre d’étudiants instantané à l’intérieur de la faculté $G(t)$.

Intéressons nous à ce qui se passe entre deux instants t_1 et t_2 à la faculté par rapport au mouvement des étudiants :

Le nombre d'étudiants présents à l'intérieur de la faculté à l'instant t_1 est G_1
Le nombre d'étudiants présents à l'intérieur de la faculté à l'instant t_2 est $G_2 (\neq G_1)$
Posons-nous la question : pourquoi G_2 est différent de G_1 ?
La réponse : le nombre d'étudiants qui entre à la faculté entre t_1 et t_2 est différent du nombre d'étudiants qui sort de la faculté entre t_1 et t_2.
Comment peut-on écrire cette conclusion dans une formule ?

$$\begin{bmatrix}\text{Le nombre}\\ \text{d'étudiants à}\\ \text{l'intérieur de}\\ \text{la faculté à}\\ \text{l'instant } t_2\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Le nombre}\\ \text{d'étudiants à}\\ \text{l'intérieur de la}\\ \text{faculté à}\\ \text{l'instant } t_1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Le nombre}\\ \text{d'étudiants qui}\\ \text{sont entrés à la}\\ \text{faculté entre } t_1\\ \text{et } t_2\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Le nombre}\\ \text{d'étudiants qui}\\ \text{sont sortis de la}\\ \text{faculté entre } t_1\\ \text{et } t_2\end{bmatrix} \quad \text{(I.1)}$$

Pour formaliser (I.1), notons :
$G(t)$ le nombre d'étudiants instantané à l'intérieur de la faculté
$\phi_e(t)$ le nombre d'étudiants qui entre à la faculté par unité de temps
$\phi_s(t)$ le nombre d'étudiants qui sort de la faculté par unité de temps
Prenons t_1 et t_2 infiniment proches soit $t_1 = t$ et $t_2 = t + dt$. Le bilan s'écrit :

$$G(t+dt) - G(t) = \phi_e(t)dt - \phi_s(t)dt$$

Soit :

$$G(t) + \frac{dG}{dt}dt - G(t) = \phi_e(t)dt - \phi_s(t)dt$$

Ce qui donne :

$$\frac{dG}{dt} = \phi_e(t) - \phi_s(t) \qquad \text{(I.2)}$$

Le membre de gauche est une variation (positive ou négative) qu'on appellera **terme d'accumulation** et les termes de droite sont des **termes de flux**, respectivement entrant et sortant. Les trois grandeurs s'expriment par exemple en nombre d'étudiants par heure.

Dans cet exemple, il y a une quantité qui se conserve : le nombre d'étudiants. C'est-a-dire qu'ils ne peuvent ni disparaitre ni apparaitre, ils ne font que s'accumuler dans le système ou entrer / sortir du système. En physique c'est le cas de **l'énergie** et de **la masse**.

Prenons un autre exemple : le système est un pays, avec ses frontières, la grandeur est le nombre de personnes instantané $G(t)$ dans ce pays. Ses variations peuvent provenir de 3 causes :

- des personnes entrent ou sortent du pays en traversant ses frontières ;
- des personnes naissent ;
- des personnes meurent.

On voit que les deux dernières causes n'existaient pas dans l'exemple précédent. Ici il peut y avoir création ou destruction de la grandeur étudiée. Le bilan s'écrit alors, en reprenant les mêmes notations pour les flux entrant et sortant, et en notant respectivement $R^+(t)$ et $R^-(t)$ les nombres de naissances et de décès par unité de temps :

$$\frac{dG}{dt} = \phi_e(t) - \phi_s(t) + R^+(t) - R^-(t) \qquad \text{(I.3)}$$

Les termes R^+ et R^- sont classiquement appelés **terme source** et **terme puits**.

En physique, des grandeurs telles que G peuvent être par exemple un nombre de moles , une masse, l'énergie, la quantité de mouvement.

I.4 Transport diffusif et convectif

Nous avons vu qu'un volume peut se vider ou se remplir par ses frontières d'une grandeur extensive G : d'argent (flux financier), de personnes (flux migratoire) . . . Dans un fluide, les grandeurs extensives sont la masse, la quantité de mouvement ou l'énergie (cinétique, interne). Lorsque ces grandeurs traversent la frontière du volume, on parle de **transport**.

De façon générale, il convient de bien distinguer deux types de transport :

- le transport diffusif intervient même en l'absence de mouvement visible à l'échelle macroscopique ;
- le transport convectif lié directement au mouvement macroscopique du fluide.

I.4.1 Qu'est ce qu'un flux ?

Il convient tout d'abord de mesurer la "vitesse" à laquelle le volume se remplit ou bien se vide. Par exemple pour un flux migratoire on pourra parler de nombre de personnes qui entrent ou qui sortent du pays par année, ou par toute autre unité de temps. Pour un fluide on cherchera par exemple à connaitre la quantité d'eau qui coule d'un robinet par unité de temps. Ce type de grandeur s'appelle un flux. Il est homogène à l'unité de la grandeur G par unité de temps : des $\boldsymbol{kg \cdot s^{-1}}$ pour un flux massique, des $\boldsymbol{Joule \cdot s^{-1}}$ $(ou\ Watt)$ pour un flux d'énergie etc. C'est un vecteur puisque le transport va d'un point vers un autre.

En général la grandeur G ne rentre (ou sort) pas partout à la même vitesse du volume V. Pour cela il est intéressant de ramener le flux à une unité de surface. On parle alors de densité de flux (qui est aussi un vecteur).

I.4.2 Transport diffusif (parenthèse)

Ce type de transport est provoqué par le déséquilibre d'une grandeur au sein du milieu, le système tentant de revenir à l'équilibre. Tout le monde sait par exemple que lorsqu'il existe un point chaud et un point froid dans un corps, la chaleur est transportée du point chaud vers le point froid pour tenter d'homogénéiser les températures : il s'agit d'un flux d'énergie, et l'on parle de diffusion thermique. Ce flux d'énergie n'est pas transporté par un mouvement global de fluide, mais dû aux mouvements à l'échelle microscopique. La densité de flux énergétique correspondante est donnée par la loi de Fourier (cf. cours de transfert de chaleur) :

$$\phi = -\lambda\, \overrightarrow{grad} T \qquad \text{(I.4)}$$

Le paramètre λ est appelé conductivité thermique et son unité S.I. est le $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$.

De même, si l'on verse du lait dans du café très lentement pour éviter tout mouvement, on constate que les deux finissent par se mélanger parfaitement : dans un mélange de deux espèces A et B, l'espèce A diffuse des régions où elle est la plus concentrée vers celles où elle l'est le moins. Ici encore, ce flux de matière n'est pas transporté par un mouvement global de fluide, mais est lié uniquement aux collisions entre les différentes molécules à l'échelle microscopique. La densité de flux massique de l'espèce A est fournie par la loi de Fick (cf. cours de transfert de matière) :

$$\phi = -\mathcal{D}_{AB}\, \rho\, \overrightarrow{grad}\, w_A \qquad \text{(I.5)}$$

où w_A est la fraction massique de A, et $\mathcal{D}_{AB}$ est appelé diffusivité moléculaire de A

dans B (en $m^{-2} \cdot s^{-1}$).

La quantité de mouvement dans un fluide en mouvement diffuse également, à cause du frottement des couches fluides les unes sur les autres, phénomène appelé viscosité.

I.4.3 Flux convectif

Le flux convectif (du latin cum = avec, vectare = transporter) est lié au transport d'une quantité par le mouvement du fluide. Tout le monde a un jour ou l'autre remué l'eau dans une baignoire pour transporter l'eau chaude coulant du robinet vers l'autre bout de la baignoire. L'agent de transport est dans ce cas le fluide lui même et est bien plus rapide que le flux diffusif. C'est pour la même raison que l'on remue son café pour mélanger le sucre ou le lait, sa soupe ou une sauce dans une casserole pour la refroidir, que l'on agite les réacteurs chimiques. Rappelez-vous également combien il est difficile de mélanger deux peintures de couleurs différentes : s'il fallait attendre qu'elles se mélangent par diffusion, il faudrait attendre des années, c'est pourquoi il faut remuer le mélange.

Le but de cette section est de quantifier ce flux convectif pour n'importe quelle grandeur traversant la surface frontière S d'un volume V **eulérien**, **c'est-a-dire fixe dans l'espace**.

I.5 Bilan d'une grandeur volumique dans un milieu continu

I.5.1 Ecriture générale

Il suffit maintenant d'introduire ce terme de flux dans le bilan (I.3) :

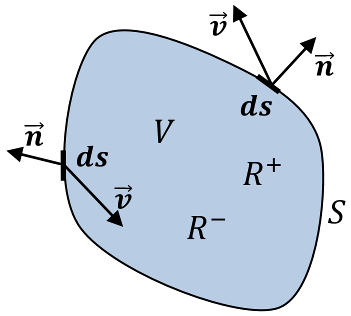

Figure I.7 : bilan d'une grandeur $\boldsymbol{g}$ sur un volume $\boldsymbol{V}$

$$\frac{dG}{dt} = \underbrace{\frac{1}{dt}\iiint_V g\, dV}_{\text{Accumulation de G}} = \underbrace{-\iint_s (g\,\vec{v}\,ds\cdot\vec{n})}_{\text{Flux convectif de G entrant-sortant}} + \underbrace{R^+(t)}_{\text{Production de G (source)}} - \underbrace{R^-(t)}_{\text{Destruction de G (puits)}} \qquad \text{(I.8)}$$

Rappelons que cette formule est liée à l'orientation du vecteur normal à la frontière vers l'extérieur. Si le vecteur normal était pris vers l'intérieur nous aurons un signe + devant l'intégrale de surface.

I.5.2 Cas de volume V à géométrie simple : la conduite cylindrique

- Considérons d'abord le cas du tube de courant qui est un tube fictif dont les parois latérales $\boldsymbol{S_{lat}}$ sont en tout point tangentes au vecteur vitesse, et comportant une section d'entrée $\boldsymbol{S_e}$ et une section de sortie $\boldsymbol{S_s}$, toutes deux droites (figure I. ?). Il peut s'agir par exemple d'un tube réel car la condition d'étanchéité impose que la composante normale de la vitesse sur une paroi solide (immobile) soit nulle.

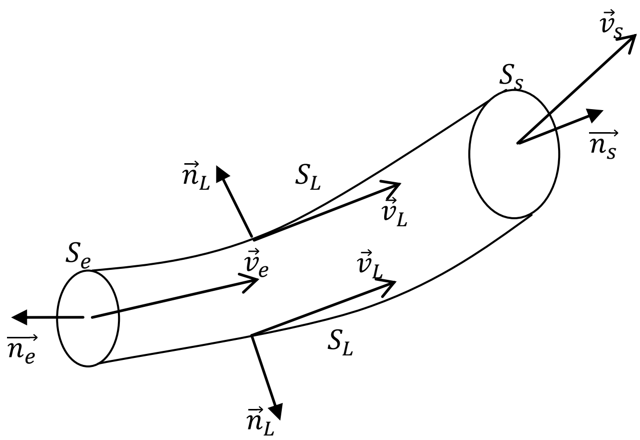

Figure I.8 : tube de courant

Dans ces conditions l'intégrale de surface se limite aux sections d'entrée et de sortie, car $\vec{v} \cdot \vec{n}$ est nul partout sur la surface latérale S_L, et le bilan d'une grandeur g s'écrit, en décomposant la surface S en $S_e + S_s + S_L$:

$$\frac{dG}{dt} = -\left[\iint_{S_E} (\underbrace{g\,\vec{v}_e \cdot}_{<0} \vec{n}_e ds) + \iint_{S_L} (\underbrace{g\,\vec{v}_L \cdot}_{=0} \vec{n}_L ds) + \iint_{S_s} (\underbrace{g\,\vec{v}_s \cdot}_{>0} \vec{n}_s ds)\right] + R^+(t) - R^-(t)$$

Ou encore :

$$\frac{dG}{dt} = -\left[\iint_{S_E} (g\,\vec{v}_e \cdot \vec{n}_e ds) + \iint_{S_s} (g\,\vec{v}_s \cdot \vec{n}_s ds)\right] + R^+(t) - R^-(t) \quad (I.9)$$

Un cas particulier très fréquent est le régime permanent où les propriétés de l'écoulement ne dépendent plus du temps. C'est le cas de nombreuses installations industrielles. Dans le cas du tube de courant on obtient une expression particulièrement simple du bilan :

$$\underbrace{-\iint_{S_E} (g\,\vec{v}_e \cdot \vec{n}_e ds)}_{\dot{G}_e > 0} - \underbrace{\iint_{S_s} (g\,\vec{v}_s \cdot \vec{n}_s ds)}_{\dot{G}_s > 0} + R^+(t) - R^-(t) = 0 \quad (I.10)$$

- Considérons maintenant la conduite cylindrique. Si la quantité g est uniforme dans la section. On peut alors écrire:

$$-\iint_{S_E} (g\,\vec{v}_e \cdot \vec{n}_e ds) \approx -g_e \iint_{S_E} (\vec{v}_e \cdot \vec{n}_e ds)$$

$$\iint_{S_s} (g\,\vec{v}_s \cdot \vec{n}_s ds) \approx g_s \iint_{S_s} (\vec{v}_s \cdot \vec{n}_s ds)$$

Et l'équation (I.10) devient :

$$-g_e \iint_{S_E} (\vec{v}_e \cdot \vec{n}_e ds) - g_s \iint_{S_s} (\vec{v}_s \cdot \vec{n}_s ds) + R^+(t) - R^-(t) = 0 \quad (I.11)$$

Si en plus, on introduit les vitesses moyennes sur les sections :

$$\overline{v_e} = -\frac{1}{S_e} \iint_{S_E} (\vec{v}_e \cdot \vec{n}_e ds)$$

$$\overline{v_s} = \frac{1}{S_s} \iint_{S_E} (\vec{v}_s \cdot \vec{n}_s ds)$$

L'équation (I.11) devient :

$$\underbrace{g_e\,\overline{v_e}\,S_e}_{\dot{G}_e} - \underbrace{g_s \overline{v_s}\,S_s}_{\dot{G}_s} + R^+(t) - R^-(t) = 0 \quad (I.12)$$

. On obtient :

$$\frac{dG}{dt} = \underbrace{g_e\,\overline{v_e}\,S_e}_{\dot{G}_e} - \underbrace{g_s \overline{v_s}\,S_s}_{\dot{G}_s} + R^+(t) - R^-(t) \quad (I.13)$$