Correction du TD n°5

Exercice 4 : Dialyse

1) D'après la loi de Fick, le vecteur densité de flux de particules et le flux de particules s'écrivent :

$$\vec{j} = -D\,\overrightarrow{\text{grad}}\,n = -D\,\frac{dn}{dx}\,\vec{u_x} \qquad \text{et} \qquad \phi = \iint_S \vec{j}\cdot(dS\,\vec{u_x}) = -S\,D\,\frac{dn}{dx}$$

En régime stationnaire et en l'absence de sources, le flux est conservatif donc :

$$\frac{dn}{dx} = -\frac{\phi}{S\,D} = cste \qquad \text{et} \qquad n(x) = A - \frac{\phi\,x}{S\,D}$$

Les conditions aux limites en $x = 0$ et $x = e$ s'écrivent :

$$n(x=0) = n_1 = A \qquad \text{et} \qquad n(x=e) = n_2 = A - \frac{\phi\,e}{S\,D}$$

On en déduit $\boxed{\phi = \dfrac{S\,D\,(n_1 - n_2)}{e}}$

2) Entre les instants t et $t + dt$, le nombre de particules qui traversent la membrane du récipient (1) vers le récipient (2) s'écrit :

$$\delta N_{1\to 2} = \phi\,dt = \frac{S\,D\,(n_1 - n_2)\,dt}{e}$$

Les bilans de particules pour chacun des récipients s'écrivent alors :

$$dN_1 = -\phi\,dt \quad \text{et} \quad dN_2 = +\phi\,dt \quad \text{d'où} \quad \frac{dN_2}{dt} = -\frac{dN_1}{dt} = \phi = \frac{S\,D\,(n_1 - n_2)}{e}$$

Les volumes des récipients valent V et $2V$ donc $n_1 = N_1/V$ et $n_2 = N_2/2V$. En éliminant n_1 et n_2 on obtient :

$$\frac{dN_2}{dt} = -\frac{dN_1}{dt} = \frac{S\,D\,(2N_1 - N_2)}{2e\,V} \qquad \text{soit} \qquad \boxed{\frac{dN_2}{dt} = -\frac{dN_1}{dt} = \frac{2N_1 - N_2}{\tau}}$$

avec $\boxed{\tau = \dfrac{2e\,V}{S\,D}}$

3) En sommant les deux équations, il vient :

$$\frac{dN_2}{dt} + \frac{dN_1}{dt} = 0 \qquad \text{soit} \qquad \boxed{N_1(t) + N_2(t) = cste = n_0\,V}$$

En éliminant $N_2 = n_0\,V - N_1$ dans l'équation pilotant l'évolution de N_1, il vient :

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{N_2 - 2N_1}{\tau} = \frac{n_0\,V - 3N_1}{\tau} \qquad \text{soit} \qquad \frac{\tau}{3}\,\frac{dN_1}{dt} + N_1 = \frac{n_0\,V}{3}$$

En sommant la solution particulière constante de l'équation complète et la solution de l'équation homogène, il vient :

$$N_1(t) = \frac{n_0\,V}{3} + A\,\exp\left(-\frac{3t}{\tau}\right)$$

La condition initiale permet de déterminer la constante d'intégration :

$$N_1(t=0) = \frac{n_0\,V}{3} + A = n_0\,V \quad \text{soit} \quad A = \frac{2n_0\,V}{3}$$

et finalement $\boxed{N_1(t) = \dfrac{n_0\,V}{3}\left(1 + 2\exp\left(-\dfrac{3t}{\tau}\right)\right)}$

À la date T où la concentration en urée a été divisée par deux, on a donc :

$$\frac{n_0\,V}{2} = \frac{n_0\,V}{3}\left(1 + 2\exp\left(-\frac{3T}{\tau}\right)\right) \quad \text{soit} \quad \frac{3}{2} = 1 + 2\exp\left(-\frac{3T}{\tau}\right)$$

puis $\exp\left(-\frac{3T}{\tau}\right) = \frac{1}{4}$, soit en passant aux logarithmes :

$$-\frac{3T}{\tau} = -\ln 4 \quad \text{puis} \quad \boxed{T = \frac{\tau\ln 4}{3}}$$

Exercice 5 : Taille critique d'une bactérie aérobie

1) Le flux de dioxygène à travers la sphère de rayon r vaut :

$$\phi(r) = 4\pi r^2\,j_N(r) \qquad \text{soit} \qquad \phi(r) = -4\pi\,D\,r^2\,\frac{dn}{dr}$$

en utilisant la loi de Fick. En régime stationnaire, le nombre de molécules de dioxygène contenu entre les sphères de rayons r_1 et r_2 est constant et il n'y a pas de création de particules, donc :

$$0 = dN = \phi(r_1)\,dt - \phi(r_2)\,dt \qquad \text{soit} \qquad \phi(r_1) = \phi(r_2)$$

de telle sorte que $\phi(r)$ est indépendant de r. Ceci permet d'exprimer :

$$\frac{dn}{dr} = -\frac{\phi}{4\pi D r^2} \quad \text{puis} \quad n(r) = \frac{\phi}{4\pi D r} + n_\infty \quad \text{avec} \quad n_\infty = \mathcal{N}_a c_\infty$$

soit $\boxed{n(r) = \dfrac{\phi}{4\pi D r} + \mathcal{N}_a c_\infty}$

2) **a)** Le nombre de molécules de dioxygène consommées par la bactérie pendant dt vaut par définition de $\mathcal{A}$:

$$\delta N_a = \mathcal{N}_a m \mathcal{A}\, dt = \frac{4\pi R^3 \mu \mathcal{A} \mathcal{N}_a}{3} dt$$

Le flux $\phi = \phi(R)$ est aussi le flux sortant de la bactérie. Le flux entrant dans la bactérie vaut donc $-\phi$, de telle sorte que le bilan de molécules de dioxygène pour la bactérie s'écrit :

$$0 = dN = \delta N_c + \delta N_e = -\delta N_a - \phi\, dt = -\frac{4\pi R^3 \mu \mathcal{A} \mathcal{N}_a}{3} dt - \phi\, dt$$

d'où $\boxed{\phi = -\dfrac{4\pi R^3 \mu \mathcal{A} \mathcal{N}_a}{3} < 0}$

Le dioxygène entre bien dans la bactérie, qui le consomme.

b) En remplaçant dans l'expression de $n(r)$ obtenue en **1** et en prenant $r = R$, il vient :

$$n(R) = \mathcal{N}_a c_\infty + \frac{\phi}{4\pi D R} \qquad \text{soit} \qquad \boxed{n(R) = \mathcal{N}_a c_\infty - \frac{R^2 \mu \mathcal{A} \mathcal{N}_a}{3D}}$$

La bactérie ne peut survivre que si $n(R)$ est positif, ce qui conduit à la contrainte :

$$\mathcal{N}_a c_\infty > \frac{R^2 \mu \mathcal{A} \mathcal{N}_a}{3D} \qquad \text{soit} \qquad \boxed{R < R_c = \sqrt{\frac{3 D c_\infty}{\mu \mathcal{A}}} = 8\ \mu\text{m}}$$

L'ordre de grandeur de R_c est satisfaisant sachant qu'on utilise un microscope pour voir ces bactéries. Par ailleurs, l'expression de R_c est homogène car :

$$[R_c^2] = \frac{[D]\,[c_\infty]}{[\mu]\,[\mathcal{A}]} = \frac{[\text{m}^2.\text{s}^{-1}][\text{mol.m}^{-3}]}{[\text{kg.m}^{-3}][\text{mol.kg}^{-1}.\text{s}^{-1}]} = [\text{m}^2]$$

Exercice 6 : Cas non stationnaire : diffusion d'un pic de concentration

1) On remplace la solution donnée $n(x,t) = \frac{K}{\sqrt{t}} e^{-\frac{ax^2}{t}}$ dans l'équation de diffusion. Pour cela, il faut calculer

$$\frac{\partial n}{\partial x} = -\frac{2aKx}{t^{3/2}} e^{-\dfrac{ax^2}{t}} \Rightarrow \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = -\frac{2aK}{t^{3/2}}\left(1 - \frac{2ax^2}{t}\right) e^{-\dfrac{ax^2}{t}}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{K}{2t^{3/2}}\left(1 - \frac{2ax^2}{t}\right) e^{-\dfrac{ax^2}{t}}$$

L'équation de diffusion $\frac{\partial n}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$ devant être vérifiée pour tout x et pour tout t, on en déduit que $\boxed{a = \frac{1}{4D}}$.

2) D'après l'énoncé :

- on néglige les effets de bords aux extrémités, donc $n(x = \pm\infty, t) = 0$ pour tout t,
- les particules sont concentrées en $x = 0$ à $t = 0$, donc $n(x \neq 0, t = 0) = 0$,
- le nombre initial de particules est N_0. Celui-ci devant se conserver, on doit avoir

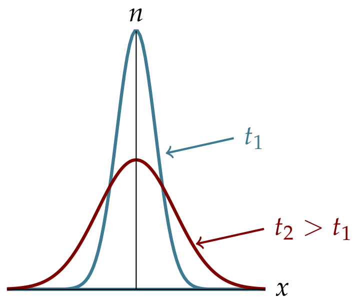
$$N_0 = \iiint dN = \iiint n(x,t)d\tau = \iiint n(x,t)dSdx = S\int_{x=-\infty}^{x=+\infty} \frac{K}{\sqrt{t}} e^{-\left(\dfrac{x^2}{4Dt}\right)} dx$$

Pour utiliser l'intégrale donnée dans l'énoncé, on change de variable en posant $u = \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$, soit $dx = 2\sqrt{Dt}du$, ce qui donne

$$N_0 = 2KS\sqrt{D}\int_{u=-\infty}^{u=+\infty} e^{-u^2} du = 2KS\sqrt{D}\sqrt{\pi}$$

On en déduit $\boxed{K = \dfrac{N_0}{2S\sqrt{\pi D}}}$.

Le tracé de $n(x,t)$ pour deux valeurs de t donne le graphe ci-contre. L'aire sous la courbe, correspondant au nombre total de particule, devant rester constante, **la courbe s'aplatie en s'élargissant lorsque le temps croît, au fur et à mesure que les particules diffusent de plus en plus loin de l'origine.**



3) La probabilité pour une molécule d'être à l'instant t dans la tranche en x d'épaisseur dx vaut

$$dP = \frac{\delta N}{N_0} = \frac{n(x,t)Sdx}{N_0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\left(\frac{x^2}{4Dt}\right)} dx = p(x,t)dx$$

On en déduit que $< x >= \int_{-\infty}^{+\infty} x\, p(x,t)dx = 0$, puisque l'on intègre une fonction impaire sur un intervalle symétrique. **Le barycentre des molécules qui diffusent reste en $x = 0$ car la distribution est symétrique par rapport à l'origine.**

La distance quadratique moyenne $x_m^2 = \sqrt{< x^2 >}$ est telle que

$$x_m^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\, p(x,t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\left(\frac{x^2}{4Dt}\right)} dx = \frac{(4Dt)^{3/2}}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 e^{-u^2} du$$

toujours en posant $u = \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$. L'intégrale sur u valant $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$, on en déduit $\boxed{x_m = \sqrt{2Dt}}$.

On retrouve le résultat général qui donne que **la distance parcourue par les particules croît comme la racine du temps, et donc que la diffusion est un phénomène lent.**

4) Avec $D = 2.10^{-9}$ m^2.s^{-1}, on calcule $t \approx 4$ min pour $x = 1$ mm et $t \approx 7$ h pour $x = 1$ cm, ce qui confirme la conclusion de la question précédente.