TDT2 : Diffusion de particules

Savoirs

• Flux de particules ϕ_N, vecteur densité de flux $\overrightarrow{j_N}$, particules échangées. Bilan global. Bilan local 1D cartésien, et 3D, éventuellement avec source.
• Loi de Fick, ODG de D. Équation de diffusion 1D et 3D. Connaître $L \simeq \sqrt{D\tau}$.
• Approche microscopique. Connaître $D \simeq \ell_{moy} v$. Principe de la marche au hasard.
• Expressions des opérateurs div, $\overrightarrow{\text{grad}}$, Δ en coordonnées cartésiennes.

Savoir-faire

• Analyser une équation de diffusion en ordre de grandeur pour relier des échelles caractéristiques spatiale et temporelle. *Exos 1, 3.*
• Relier nombre de particules traversant une section à $\overrightarrow{j_N}$ et ϕ_N.
• Utiliser la conservation du flux pour un bilan global en régime stationnaire.
Exo 4.
• En géométrie 1D (cartésienne, cylindrique ou sphérique), établir l'équation de bilan local.
• Établir l'équation de diffusion, éventuellement avec source. *Exo 8.*
• Utiliser l'équation de bilan local et l'équation de diffusion en régime permanent. *Exos 1, 2, 4.*
• Utiliser les expressions fournies de div, $\overrightarrow{\text{grad}}$, Δ en géométrie quelconque. *Exo 4.*
• Mettre en place un modèle probabiliste discret à une dimension de la diffusion (marche au hasard) et évaluer le coefficient de diffusion associé en fonction du libre parcours moyen et de la vitesse quadratique moyenne. *Exo 5.*
• À l'aide d'un langage de programmation, simuler la marche au hasard d'un grand nombre de particules à partir d'un centre et caractériser l'étalement spatial au cours du temps.

Interro de cours

1. Donner les unités de la densité volumique de particules n, de la densité de courant de particules j_N et du flux de particules ϕ_N.
2. Donner le lien entre ϕ_N et $\overrightarrow{j_N}$.
3. Considérons une géométrie quelconque et le vecteur densité de courant $\overrightarrow{j_N}$. Donner l'équation de conservation des particules.
4. Que devient cette équation dans le cas unidimensionnel cartésien où $\overrightarrow{j_N} = j_N \overrightarrow{u_x}$? La réponse ne devra plus contenir de vecteurs.
5. Soit un champ vectoriel $\overrightarrow{B} = (B_x, B_y, B_z)$ en base cartésienne. Donner l'expression de div$(\overrightarrow{B})$ en coordonnées cartésiennes.
6. Donner le loi de Fick dans le cas général. Interpréter le signe. Comment se simplifie cette loi en géométrie cartésienne unidimensionnelle selon x ?
7. Soit un champ scalaire $V(x, y, z, t)$. Donner l'expression de $\overrightarrow{\text{grad}}(V)$ en base cartésienne.
8. Donner l'équation de diffusion de particules dans le cas général. Comment se simplifie cette loi en géométrie cartésienne unidimensionnelle selon x ?
9. À partir de l'équation de diffusion, démontrer l'unité de D.
10. ODG de D dans un gaz dans les conditions usuelles.
11. Soit un champ scalaire $V(x, y, z, t)$. Donner l'expression de ΔV en base cartésienne où Δ est le laplacien.

1 Applications directes

1. La différence de concentration en oxygène de part et d'autre d'une membrane cellulaire vaut 10^{16} part.cm^{-3}. La membrane a une épaisseur de 1 μm. $D = 10^{-10}$ m^2.s^{-1} pour l'oxygène. Calculer la densité de flux d'oxygène.
2. Évaluer l'ordre de grandeur du temps nécessaire pour qu'un peu de sucre déposé au fond d'un verre d'eau en son centre diffuse dans l'ensemble du verre (en négligeant la convection). Le coefficient de diffusion du sucre dans l'eau vaut $D = 5.10^{-10}$ m^2.s^{-1}.

3. Un pétrolier peu respectueux libère du pétrole. On suppose que la marée noire qui en résulte s'étale en suivant une équation de diffusion. Au bout d'une heure, la tache de pétrole a un rayon de 50 m. Combien de temps après cet instant aura-t-elle doublé de surface ?

2 Diffusion du CO_2 dans l'air

On souhaite déterminer le coefficient de diffusion du dioxyde de carbone dans l'air. On observe la diffusion unidirectionnelle du dioxyde de carbone dans l'air, en régime stationnaire, à l'intérieur d'un tube de longueur $L = 0,25$ m et de section d'aire $S = 15$ cm^2, d'axe Ox.

La densité du courant de dioxyde de carbone vaut $j = 5,1.10^{17}$ m^{-2}s^{-1}. La densité particulaire du dioxyde de carbone est imposée aux deux extrémités : $n(0) = 1,4.10^{22}$m^{-3}. et $n(L) = 8,6.10^{21}$ m^{-3}.

1. Rappeler la loi de Fick et simplifier son expression dans le cas particulier étudié.
2. Justifier qu'on ne précise pas l'abscisse correspondant à la valeur de la densité de courant de particule fournie dans l'énoncé.
3. Déterminer le coefficient de diffusion D du dioxyde de carbone dans l'air.
4. Calculer le nombre de molécules de dioxyde de carbone traversant une section du tube en une minute.

3 Mesure du coefficient de diffusion d'une encre

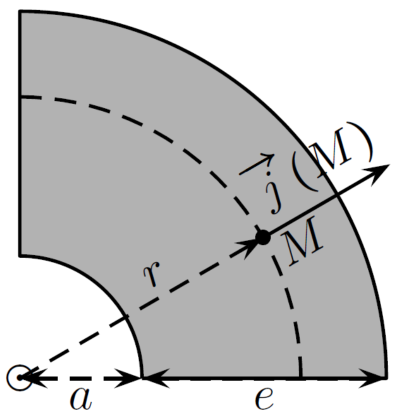
Une tache d'encre est déposée dans un cristallisoir rempli de glycérol et on mesure son expansion d (la largeur de la tache) au cours du temps t.

```
L_t = [10,20,30,50,90]     # liste des temps écoulés en s
L_d = [9,16,20,27,37]      # liste des largeurs de la tâche d'encre en cm
```

1. Rappeler le lien en ordre de grandeur entre d, t et D. En déduire une représentation graphique à partir des données qui donnerait une droite si ce modèle était vérifié.
2. La tracer (avec calculatrice, ou Regressi, ou Python,...) et en déduire D.

4 Diffusion radiale

On considère un tuyau d'arrosage pour une serre. L'eau contenue dans ce tuyau diffuse au travers d'une paroi poreuse pour ressortir sous forme de gouttelettes au niveau de sa paroi externe. On note a le rayon intérieur du tuyau et e l'épaisseur de la paroi poreuse. L'eau s'échappant immédiatement de la paroi externe, on peut considérer la densité volumique des particules d'eau nulle au niveau de cette paroi. On la considère $n(a) = n_0$. Le régime est stationnaire. On a, en un point M décrit par ses coordonnées cylindriques (r, θ, z), un vecteur densité de flux $\overrightarrow{j} = j(r) \cdot \overrightarrow{e_r}$.



1. À partir d'un bilan global de matière pour un volume bien choisi, montrer que $j(r) = A/r$ avec $A =$ cte.
2. En effectuant un bilan sur un volume élémentaire $dV = dr \cdot rd\theta \cdot dz$, démontrer que $\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial(rj)}{\partial r} + \dfrac{\partial n}{\partial t} = 0$. Cette formule est-elle cohérente avec l'expression de la divergence en cylindrique : $\mathrm{div}(\overrightarrow{a}) = \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial(ra_r)}{\partial r} + \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial a_\theta}{\partial \theta} + \dfrac{\partial a_z}{\partial z}$? En déduire de nouveau que $j(r) = A/r$ en régime permanent.

3. Exprimer A en fonction de D, a, e et n_0. On donne l'opérateur gradient en cylindrique : $\overrightarrow{\text{grad}}(f) = \dfrac{\partial f}{\partial r}\overrightarrow{e_r} + \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial f}{\partial \theta}\overrightarrow{e_\theta} + \dfrac{\partial f}{\partial z}\overrightarrow{e_z}$.
4. En déduire $n(r)$ en tout point à l'intérieur de la paroi.

5 Approche probabiliste

Une particule se déplace suivant Ox avec ℓ son libre parcours moyen, et v sa vitesse. À chaque pas de temps $\tau = \ell/v$, sous l'effet des collisions, elle se déplace : soit de $+\ell$ avec probabilité 1/2, soit de $-\ell$ avec probabilité 1/2. Initialement, $x(t = 0) = 0$.

1. Exprimer la probabilité $p(x, t + \tau)$ en fonction des probabilité à t en $x \pm \ell$.
2. Dans l'approximation des milieux continus, effectuer des développement limités pour en déduire finalement que $D \simeq \ell v$.

6 Régime transitoire (*)

On place N_0 particules en $x = 0$ dans un récipient de très grande taille où aura lieu un phénomène de diffusion unidimensionnelle selon x. La solution en régime transitoire s'écrit $n(x,t) = \frac{N_0}{\sqrt{4\pi D t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$.

1. Vérifier que $n(x, t)$ est bien solution de l'équation de diffusion.
2. Vérifier que la solution est bien cohérente avec le principe de conservation de la matière.
3. On définit la longueur L de diffusion telle que $n(L, \tau) = n(0, \tau)/2$. Déterminer alors la relation entre L et τ. Commenter.

7 Taille critique d'une bactérie aérobie (*)

Une bactérie est modélisée par une sphère de centre O fixe, de rayon R et de masse volumique $\mu = 10^3$ kg.m^{-3}. Elle évolue dans un lac où on note $n(r)$ le nombre de molécules de dioxygène dissous par unité de volume à distance $r > R$. Dans l'eau, le dioxygène diffuse selon un coefficient $D = 2.10^{-9}$ m^2.s^{-1}. Loin de la bactérie, la concentration molaire vaut $c_\infty = 0,2$ mol.m^{-3}. Dans la géométrie considérée, $\overrightarrow{\text{grad}}(n) = \frac{\partial n}{\partial r}\overrightarrow{u_r}$. La consommation molaire en dioxygène de la bactérie est proportionnelle à sa masse avec un taux massique horaire $\mathcal{A} = 0,02$ mol.kg^{-1}.s^{-1}.

1. En régime permanent, justifier que le flux ϕ à travers une sphère de rayon r dans le sens croissant ne dépend pas de r. A priori, que dire du signe de ϕ ?
2. Démontrer que $n(r)$ vérifier l'équation $dn/dr = -\alpha/r^2$ avec α à exprimer en fonction de ϕ. En déduire complètement $n(r)$ en fonction notamment de ϕ et du nombre d'Avogadro $\mathcal{N}_a$.
3. Exprimer ϕ en fonction de $\mathcal{N}_a$, $\mathcal{A}$, μ et R.
4. En déduire $n(R)$ en fonction de $\mathcal{N}_a$, $\mathcal{A}$, μ, R, D, c_∞. Montrer que la bactérie ne peut survivre que si son rayon est inférieur à un rayon critique R_c. AN.

8 Problème : diffusion de neutrons (**)

On étudie la diffusion unidirectionnelle de neutrons dans un barreau cylindrique, de longueur L et de section S, en supposant qu'il n'y a pas d'évasion par la surface latérale et en notant :

• $n(x, t)$ la densité volumique des neutrons à l'abscisse x et à l'instant t,

• $j_n(x, t)$ la densité de courant de neutrons diffusés (de valeur égale au nombre algébrique de neutrons traversant par unité de surface et de temps la section du barreau d'abscisse x, à la date t, dans le sens des x croissants).

On note D le coefficient de diffusion des neutrons dans le milieu. La loi de Fick est vérifiée.

1. On note n_0 et n_L la concentration en neutrons mobiles respectivement en $x = 0$ et à l'abscisse $x = L$. Quelle serait, en régime permanent et en négligeant tout phénomène d'absorption, la valeur de j_n (densité du courant de neutrons) en fonction de n_0, n_L, L et D ?

2. Dans cette question, on suppose qu'une pastille irradiée, placée dans le prolongement du barreau, envoie dans celui-ci un flux homogène et constant de neutrons. On note J_0 (valeur constante positive) le nombre de neutrons traversant par unité de surface et de temps la section du barreau d'abscisse $x = 0$ et n_0 la concentration en neutrons mobiles à cet endroit. On tient compte de l'absorption des neutrons par le matériau en notant K le nombre de neutrons par unité de volume et de temps absorbés par le matériau. K est une constante positive.
   (a) En faisant le bilan des neutrons absorbés ou produits dans une tranche d'épaisseur dx à l'abscisse x, montrer que $n(x,t)$ vérifie l'équation différentielle :
   $$\frac{\partial n}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - K \tag{1}$$
   (b) Déterminer, en régime permanent, $j_n(x)$ en fonction de J_0, K et x.
   (c) En déduire pour quelle valeur $x = L$ de l'abscisse le courant de neutrons s'annule. Montrer que ce dernier résultat pouvait être obtenu plus simplement.
   (d) Expliquer en quoi l'hypothèse considérant K comme une constante est irréaliste et suggérer une hypothèse de remplacement.
3. On étudie la diffusion unidimensionnelle des neutrons dans un barreau de matière fissile. Deux phénomènes se produisent dans la matière fissile : la réaction de fission absorbe des neutrons mais en produit plus qu'elle n'en absorbe. La concentration en neutrons mobiles vérifie alors l'équation différentielle :
   $$\frac{\partial n}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + k \cdot n \qquad \text{avec } k = \text{cte} > 0 \tag{2}$$
   La concentration en neutrons mobiles est nulle aux deux extrémités du barreau : ($n = 0$ en $x = 0$ et en $x = L$). En posant $n(x,t) = f(x).g(t)$, Déterminer la solution $n(x,t)$ à une constante multiplicative près.
4. Montrer que $n(x,t)$ diverge au cours du temps si la longueur L du barreau est supérieure à une valeur limite L_0 qu'on exprimera en fonction de D et k. Que se passe-t-il si L est supérieure à L_0 ?

9 Évaporation de l'éther (***)

Un tube cylindrique de hauteur totale L est rempli sur une hauteur h d'éther liquide. À la surface de l'éther, la pression partielle d'éther est égale à la pression de vapeur saturante de l'éther à la température ambiante $T_0 = 293$ K. À la sortie du tube, la pression partielle de l'éther est négligeable. Données : masse molaire de l'éther $M = 74,1$ g.mol^{-1} ; masse volumique de l'éther liquide$\mu = 626$ kg.m^{-3} ; $P_{\text{sat}}(293\text{ K}) = 0,583$ bar ; coefficient de diffusion de l'éther dans l'air $D = 1,5.10^{-5}$ m^2.s^{-1} ; nombre d'Avogadro $\mathcal{N} = 6,02.10^{23}$ mol^{-1}.

1. On suppose que la durée caractéristique de variation de hauteur $h(t)$ est beaucoup plus lente que la durée caractéristique de diffusion de l'éther dans l'air, de telle sorte qu'on puisse considérer que la diffusion de l'éther dans l'air se fait en régime quasi-permanent. En déduire la densité moléculaire $n(z,t)$ de la vapeur d'éther dans l'air en fonction de L, $h(t)$, z et de données.
2. Exprimer le nombre de molécules d'éther qui s'évaporent entre t et $t + dt$.
3. Déterminer l'équation différentielle vérifiée par la hauteur d'éther $h(t)$. En déduire la durée nécessaire à l'évaporation de l'éther contenu sur une hauteur de 15 cm dans un tube de 20 cm.
4. Vérifier l'hypothèse de régime quasi-stationnaire effectuée à la première question.