TDT2 : Diffusion de particules - Correction

1 Applications directes

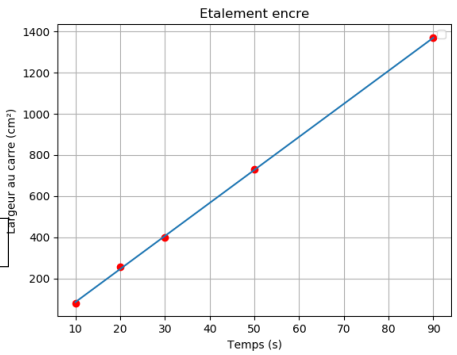
1. L'équation de diffusion en régime stationnaire $\Delta n = 0$ donne $d^2n/dt^2 = 0$ puis $dn/dx = a = \text{cte}$ puis $n(x) = ax + b$. D'après les conditions aux limites $n(0) = n_0$ et $n(L) = n_L$, on obtient : $n(x) = (n_L - n_0)x/L + n_0$. Alors la loi de Fick s'écrit : $j = D(n_L - n_0)/L = 10^{-10} \times (10^{16} \times 10^6)/10^{-6}$ $\boxed{= 10^{18} \text{ part.m}^{-2}.\text{s}^{-1}}$.
2. $\tau \simeq L^2/D = 0,1^2/(5.10^{10})$ $\boxed{= 2.10^7 \text{ s} \simeq 33 \text{ semaines}}$.
3. Surface doublée donne $S_2/S_1 = 2$, Or, $S_2/S_1 = L_2^2/L_1^2 = D\tau_2/(D\tau_1) = \tau_2/\tau_1$. Donc $\tau_2 = 2\tau_1 = 2$ h donc 1 h après.

2 Diffusion du CO_2 dans l'air

1. $\overrightarrow{j} = -D\overrightarrow{\text{grad}}(n)$, donc ici $\boxed{j_x = -D.dn/dx}$.
2. En régime stationnaire et géométrie unidimensionnelle, la densité de flux est identique en tout point. (démo en écrivant l'équation de conservation de la matière en stationnaire, cf cours).
3. Comme j est uniforme, $n(x) = j_x.x/D + \text{cte}$. Donc $j/D = -(n(L) - n(0))/L$. Alors $D = jL/(n(0) - n(L))$ $\boxed{= 2,4.10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}}$
4. $\Delta N = \phi_N.\Delta t = (j.S).\Delta t$ $\boxed{= 462.10^{15} \text{ particules}}$

3 Mesure du coefficient de diffusion d'une encre

1. $\boxed{d \simeq \sqrt{Dt}}$. Alors, tracer d^2 en fonction de t donnerait une droite de pente D, et d'ordonnée nulle à l'origine, si la loi est vérifiée.
2.
```
from matplotlib import pyplot as plt          # Pour tracer des graphes
from scipy.stats import linregress            # Pour regression lineaire
#### DONNEES EXPERIMENTALES ####
L_t = [10,20,30,50,90]           # liste des temps en s
L_d = [9,16,20,27,37]            # liste des largeurs de la tache en cm
#### CALCUL DES CARRES DE LA LARGEUR ####
L_dcarre = [d**2 for d in L_d]
#### CALCUL DE LA REGRESSION LINEAIRE ####
slope, intercept, r_value, p_value, std_err = linregress(L_t,L_dcarre)
# pente , ordonnee a l'origine , coeff de correlation , p-value , erreur standard de l'estimati
L_regression = [slope*t + intercept for t in L_t]
### TRACE DES PROFILS A DIFFERENTS INSTANTS ###
plt.figure()
plt.grid()                                #creation d'une grille
plt.xlabel("Temps (s)")                   #definition axe des x
plt.ylabel("Largeur au carre (cm**2)")    #def axe y
plt.title("Etalement encre")
plt.plot(L_t,L_dcarre,'ro')
plt.plot(L_t,L_regression)                #trace
plt.legend()                      #affichage de la legende
plt.show()
```



Visuellement, l'ajustement semble valide et donne $\boxed{D = 16,0 \pm 0,1 \text{ cm}^2.\text{s}^{-1}}$

4 Diffusion radiale

1. Soit une longueur L de tuyau (donc selon l'axe z), en régime stationnaire, le flux entrant dans la membrane en $r = a$ est égal au flux en $r \in [a, a + e]$ quelconque : $\phi(a) = \phi(r)$. Donc $j(a).(2\pi aL) = j(r).(2\pi rL)$, qui donne

$\boxed{j(r) = A/r}$ avec A constante indépendante de r.

2. L'équation de conservation de la matière en régime stationnaire : $\text{div}(\overrightarrow{j}) = 0$. Or, par symétrie, $\overrightarrow{j} = j(r)\overrightarrow{e_r}$, donc $\text{div}(\overrightarrow{j}) = \frac{1}{r}\frac{d(rj)}{dr} = 0$ donne $r.j(r) = \text{cte}$, soit $\boxed{j(r) = A/r}$.
3. La loi de Fick donne ici $j(r) = -Ddn/dr$ (composante suivant $\overrightarrow{e_r}$). Alors $dn/dr = -A/(Dr)$, en intégrant : $n(r) = B - (A/D)\ln(r)$. En utilisant les conditions aux limites $n(a) = n_0 = B - (A/D)\ln(a)$ et $n(a+e) = 0 = B - (A/D)\ln(a+e)$, après soustraction : $\boxed{A = Dn_0/\ln((a+e)/a)}$.
4. La deuxième condition aux limites donne $B = \frac{n_0}{\ln((a+e)/a)}\ln(a+e)$.

   Finalement, $n(r) = \frac{n_0}{\ln((a+e)/a)}\ln(a+e) - \frac{n_0}{\ln((a+e)/a)}\ln(r)$ puis $\boxed{n(r) = n_0\frac{\ln((a+e)/r)}{\ln((a+e)/a)}}$. On retrouve bien $n(a) = n_0$ et $n(a+e) = 0$.

5 Approche probabiliste

Cf cours.

6 Régime transitoire (*)

1. Calculer $\partial n/\partial t$ et $\partial^2 n/\partial x^2$ et vérifier que $\partial n/\partial t = D\partial^2 n/\partial x^2$.
2. Quasiment le même calcul... Calculer $j = -D\partial n/\partial x$ (Fick), puis vérifier $\partial j/\partial x + \partial n/\partial t = 0$
3. $n(L,\tau) = n(0,\tau)/2$ donne $\exp(-L^2/(4D\tau)) = 1/2$, soit $\boxed{L^2 = 4.\ln 2.D\tau}$. On retrouve la relation $L^2 \simeq D\tau$ avec un coefficient $4\ln 2 \simeq 2,77$

7 Taille critique d'une bactérie aérobie (*)

1. Soient deux sphères de rayons r_1 et $r_2 > r_1$. Considérons le système contenu entre ces deux sphères. En régime permanent, le nombre de molécule y est constant. Donc le flux entrant en r_1 vaut le flux sortant en r_2 : $\phi(r_1) = \phi(r_2)$. Ainsi, le flux ne dépend pas de la valeur de r. Si la bactérie consomme du dioxygène, sa concentration sera plus faible proche de la bactérie. Donc $n(r)$ croissante et $\phi < 0$.
2. Fick projeté : $-Ddn/dr = j = \phi/(4\pi r^2)$. Donc $dn/dr = -(\phi/(4\pi D)) \cdot (1/r^2)$. $\boxed{\alpha = \phi/(4\pi D)}$. En intégrant, $n(r) = \frac{\phi}{4\pi Dr} + \text{cte}$. CL : $n(r \to +\infty) = c_\infty \cdot \mathcal{N}_a$. Donc $\boxed{n(r) = \frac{\phi}{4\pi Dr} + c_\infty \mathcal{N}_a}$.
3. En régime stationnaire, le flux entrant dans la bactérie est égal au flux consommé.

   Donc $\boxed{-\phi(r = R) = \mathcal{A} \cdot \mathcal{N}_a \cdot \mu\frac{4}{3}\pi R^3}$.
4. Donc $\boxed{n(R) = -\frac{\mathcal{A}\mathcal{N}_a\mu\pi R^2}{D} + c_\infty}$. La bactérie ne peut maintenir sa consommation que si $n(R) > 0$ donc pour un rayon inférieur à la valeur critique $\boxed{R_c = \sqrt{\frac{3Dc_\infty}{\mathcal{A}\mu}} = 8\ \mu\text{m}}$. Ce seuil est plus grand que le rayon moyen de la bactérie E. Coli.

8 Problème : diffusion de neutrons (**)

TDT2 : Problème

1 - En régime permanent, d'après l'équation de diffusion : $\frac{d^2n}{dx^2} = 0$.

Donc $n(x) = A\,x + B$

D'après les conditions aux limites $\begin{cases} n(0) = n_0 \\ n(L) = n_L \end{cases}$

$\begin{cases} n_0 = B \\ n_L = A.L + B \end{cases}$ donc $\begin{cases} B = n_0 \\ A = \frac{n_L - n_0}{L} \end{cases}$

Donc $n(x) = \frac{n_L - n_0}{L} . x + n_0$.

La loi de Fick donne :

$$j_n = -D \frac{dn}{dx} = -D \frac{n_L - n_0}{L}$$

2 - a)

système Σ de volume $dV = S.dx$

* Variation du nombre de particules dans Σ entre t et $t+dt$:

$dN = n(x, t+dt) . dV - n(x, t) . dV$

$dN = S.dx . \frac{\partial n}{\partial t}(x,t) . dt$

* Particules entrantes en x pendant dt :

$\delta N_x = \Phi_N(x,t) . dt = j_n(x,t) . S . dt$

* Particules sortantes en $x+dx$ entre t et $t+dt$:

$\delta N_{x+dx} = j_n(x+dx, t) . S . dt$

* Particules absorbées pendant cette durée :

$\delta N_{abs} = K . dV . dt = K . S . dx . dt$

* Par conservation du nombre de particules :

$dN = \delta N_x - \delta N_{x+dx} - \delta N_{abs}$

$S.dx . \frac{\partial n}{\partial t}(x,t) . dt = -S . dt \left(j_n(x+dx,t) - j_n(x,t) \right) - K S . dx . dt$

$\left(\frac{\partial j_n}{\partial x} . dx \right)$

Alors, $\frac{\partial j_n}{\partial x} = -D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$ par la loi de Fick,

$$\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} = D . \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - K}$$

2-b) En régime permanent, $0 = -\frac{\partial j_n}{\partial x} - K$.

Donc $\boxed{j_n(x) = -K . x + J_0}$

d'après la condition aux limites $j_n(0) = J_0$.

2c) Alors $j_n(x) = 0$ pour

$$\boxed{L = \frac{J_0}{K}}$$

Autre méthode :

Si tous les neutrons entrants sont absorbés :

$$\underbrace{\Phi_N(x=0)}_{\text{N entrant par s.}} = \underbrace{K.(S.L)}_{\text{N absorbé dans volume (S.L) par s.}}$$

soit $J_0 . S = K . S . L$

donc $\boxed{L = \frac{J_0}{K}}$

2d) Le modèle avec K constant est irréaliste :

* Il donne $j_n \xrightarrow[x \to +\infty]{} -\infty$: un long barreau n'a aucune raison de produire un flux vers la gauche quand les particules entrent par la gauche.
* On peut montrer que $n(x)$ aurait des valeurs négatives à certains endroit si n_0 est faible.

Plus simplement, $K =$ cte implique qu'un volume V absorbe pendant Δt : $K.V.\Delta t$ particules. Ce qui est évidemment impossible s'il n'y en a pas !

Un modèle plus crédible supposerait un terme $\underline{K = k.n}$, nul si $n = 0$.

3 - On injecte $n(x,t) = f(x).g(t)$ dans l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + k.n$$

$$f(x).\frac{dg}{dt} = D.g(t).\frac{d^2 f}{dx^2} + k.f(x).g(t)$$

qu'on peut écrire vue comme une équa. diff en temps :

$$(*)\quad \frac{dg}{dt} + \underbrace{\left(-D\frac{d^2f/dx^2}{f} - k\right)}_{\text{cte par rapport à } t \text{ (dépend de } x)} . g(t) = 0$$

ou en distance : cte " " à x (" " t)

$$(**)\quad \frac{d^2 f}{dx^2} + \underbrace{\left(\frac{k}{D} - \frac{dg/dt}{D.g}\right)}. f(x) = 0$$

Suite [ ] - question 3)

Rappel sur ED linéaire du type $y'' + \alpha y = 0$

- Si $\alpha < 0$: $y(x) = Ae^{\sqrt{\alpha}x} + Be^{-\sqrt{\alpha}\cdot x}$ s'annule au max une fois.
- Si $\alpha = 0$: $y(x) = Ax + B$ idem
- Si $\alpha > 0$: $y(x) = A\cos(\sqrt{\alpha}\cdot x) + B\sin(\sqrt{\alpha}\cdot x)$ peut s'annuler plusieurs fois

Or, les conditions aux limites sont $\begin{cases} n(0) = 0 \\ n(L) = 0 \end{cases}$

Donc, (**) : $f'' + \underbrace{\left(\frac{k}{D} - \frac{dg/dt}{gD}\right)}_{\alpha > 0} f = 0$

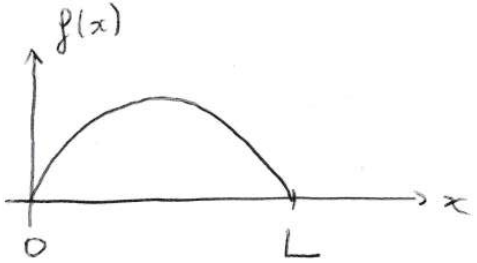
Alors $f(x) = A\sin(\sqrt{\alpha}\cdot x) + B\cos(\sqrt{\alpha}\cdot x)$

On a $f(0) = 0 = B$

et $f(L) = 0 = A\cdot\sin(\sqrt{\alpha}\cdot L)$

Pour avoir $f(x)$ toujours de même signe (car $n(x,t) \geq 0$), $\sqrt{\alpha}\cdot L = \pi$

Donc $\boxed{f(x) = A\cdot\sin\left(\frac{\pi\cdot x}{L}\right)}$



Comme $\frac{f''(x)}{f(x)} = -\frac{\pi^2}{L^2}$, (*) devient :

$$\frac{dg}{dt} + \left(\frac{D\pi^2}{L^2} - k\right)\cdot g(t) = 0$$

Soit $\boxed{g(t) = C.\exp\left(t.\left(k - \frac{D\pi^2}{L^2}\right)\right)}$

Ainsi $\boxed{n(x,t) = \underbrace{AC}_{\text{inconnue car on n'a pas de condition initiale.}}.\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\cdot\exp\left(t\left(k - \frac{D\pi^2}{L^2}\right)\right)}$

4) $n(x,t)$ diverge si $k > \frac{D\pi^2}{L^2}$,

soit $\boxed{L > \pi\sqrt{\frac{D}{k}} = L_0}$

Alors réaction nucléaire en chaîne !

→ principe de la bombe A.

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. Équation de diffusion 1D stationnaire aboutit à $\boxed{n(z) = \dfrac{L-z}{L-h} n_{\text{sat}}}$ avec $n_{\text{sat}} = \frac{\mathcal{N} P_{\text{sat}}}{RT}$ (modèle gaz parfait).

2. On a $\delta N = jSdt$ avec la section S du cylindre et la loi de Fick qui donne $j = \frac{Dn_{\text{sat}}}{L-h}$. Donc $\boxed{\delta N = \dfrac{Dn_{\text{sat}}S}{L-h}dt}$.

3. La diminution de volume δV est reliée à celle de masse par : $\delta V = \delta m/\mu$. Et $\delta N = \mathcal{N}\delta m/M$. Et on utilise $\delta V = -Sdh$.

   Donc $\boxed{\dfrac{dh}{dt} = -\dfrac{DMP_{\text{sat}}}{RT\mu(L-h)}}$. Alors par intégration par séparation des variables :

$$\tau = \int_{t=0}^{t=\tau} dt = \int_{h=h_0}^{h=0} -\frac{RT\mu(L-h)}{DMP_{\text{sat}}} dh = \frac{RT\mu}{DMP_{\text{sat}}}(Lh_0 - h_0^2/2)$$

   AN.

4. Comparer τ au temps caractéristique de diffusion dans le gaz : $\tau_{\text{diff}} = (L-h)^2/D$.