Chapitre th 3 : diffusion de particules

Il y a deux façons de transporter des particules d'un point à un autre:

• le transport par déplacement macroscopique de matière: c'est la convection.

• le transport à l'échelle microscopique, sans déplacement macroscopique de matière: c'est la diffusion. La diffusion se produit dans un système où la concentration d'un constituant n'est pas homogène, le constituant migre des zones de forte concentration vers les zones de basse concentration, le phénomène est très lent et cesse lorsque la concentration est uniforme. La diffusion est un phénomène microscopique dont le moteur est l'agitation thermique.

Exemples de phénomènes de diffusion:

I. **Bilan de particules**

Le nombre total de particules dans un système peut varier pour plusieurs raisons:

- Le système peut échanger des particules avec le milieu extérieur

- Il peut y avoir des particules créées ou des particules qui disparaissent du système (particules produites ou absorbées par des réactions chimiques ou des réactions nucléaires)

On note:

$N(t)$

$N(t+dt)$

δN_s

δN_e

δN_c

δN_a

En régime variable, la conservation du nombre de particules s'écrit:

En régime stationnaire, la conservation du nombre de particules s'écrit:

II. **Les grandeurs physiques**

1. Définitions

$n(x,t)$:

Relation entre concentration et densité particulaire:

$\overrightarrow{j_D}(x,t)$:

Son sens et sa direction sont

Sa norme représente

Relation entre $\overrightarrow{j_D}(x,t)$ et $\overrightarrow{v}$, vitesse des particules:

Le vecteur densité de courant de particules est d'autant plus grand que

Remarque: en régime permanent ou stationnaire, on écrit

2. Utilisation de ces grandeurs

$n(x,t)$ sert à calculer le nombre de particules présentes dans un volume
$\overrightarrow{j_D}$ sert à calculer le nombre de particules qui traversent une surface

On donne $n(x,t)$ et $\overrightarrow{j_D} = j(x,t)\overrightarrow{e_x}$ où j_D désigne la projection de $\overrightarrow{j_D}(x,t)$ sur Ox:

Le nombre de particules présentes à l'instant t_1 dans un cylindre de section S compris entre x et $x+dx$ s'écrit:

Le nombre de particules présentes à l'instant t_2 dans un cylindre de section S compris entre x et $x+dx$ s'écrit:

Le nombre de particules qui traversent une surface S placée en x entre les instants t et $t+dt$ s'écrit:

Soit le cylindre d'axe Ox, de section S compris entre x_1 et x_2.

Le nombre de particules présentes dans le cylindre à l'instant t s'écrit:

Le nombre de particules qui entrent dans le cylindre entre t et $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules qui sortent du cylindre entre t et $t + dt$ s'écrit:

III. **Loi de Fick**

La loi de Fick est une loi phénoménologique (c'est une loi qui décrit le phénomène sans chercher à l'expliquer), elle s'écrit : $\overrightarrow{j_D} = -D \ \overrightarrow{\text{grad}} \ n$

où D est un coefficient positif appelé coefficient de diffusion ou diffusivité, il dépend des particules qui diffusent et du support dans lequel elles diffusent.

Unité de D:

Ordres de grandeur de D:

diffusion de particules dans un gaz : $D \approx 10^{-5} \ m^2.s^{-1}$

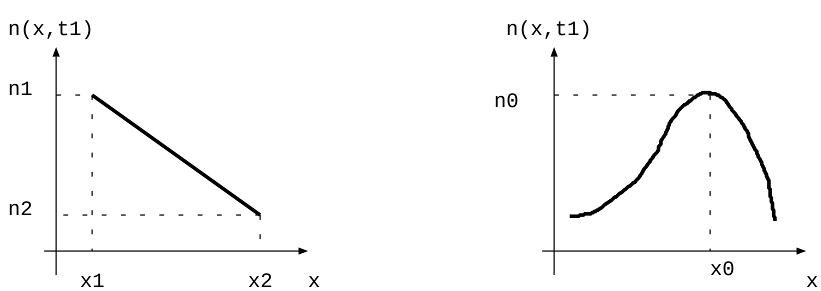
diffusion de particules dans un liquide : $D \approx 10^{-10} \ m^2.s^{-1}$

diffusion de particules dans un solide : $D \approx 10^{-15} \ m^2.s^{-1}$ à $10^{-30} \ m^2.s^{-1}$

A une dimension, lorsque la diffusion se produit selon l'axe Ox, la loi de Fick s'écrit:

Quel est le sens physique de cette loi?

Illustration graphique: $j_D(x,t) = -D\dfrac{\partial n}{\partial x}(x,t)$ où $\dfrac{\partial n}{\partial x}(x,t)$ représente



IV. **Bilan local de particules**

L'objectif de ce paragraphe est d'apprendre à établir l'équation locale traduisant la conservation du nombre de particules en présence de diffusion et éventuellement en présence de sources internes de productions de particules, pour des situations où la densité particulaire ne dépend que d'une coordonnée d'espace.

1. *Cas où la diffusion se produit selon Ox*

La diffusion se produit selon Ox dans un système de section S (surface perpendiculaire à la direction Ox). On note $n(x,t)$ la densité particulaire en x à l'instant t et $\overrightarrow{j_D}(x,t) = j_D(x,t)\overrightarrow{e_x}$. On note p le nombre de particules produites par unité de volume et de temps.

On considère le système élémentaire

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant t s'écrit:

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules qui entrent dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit:

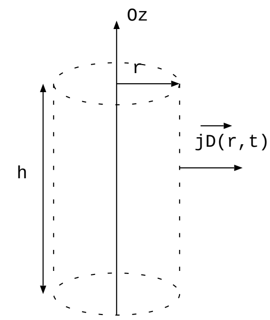
Le nombre de particules qui sortent du système entre t et $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules produites dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit:

La conservation du nombre de particules s'écrit:

Remarque: dans le cas où la diffusion se produit selon Ox, Oy et Oz soit $n = n(x,y,z,t)$ et $\overrightarrow{j_D}(x,y,z,t) = j_{Dx}\overrightarrow{e_x} + j_{Dy}\overrightarrow{e_y} + j_{Dz}\overrightarrow{e_z}$, l'équation de conservation du nombre de particules devient:

2. *Cas où la diffusion est radiale dans un cylindre*



On note $n(r,t)$ la densité particulaire en r à l'instant t et $\overrightarrow{j_D}(r,t) = j_D(r,t)\overrightarrow{e_r}$. On note p le nombre de particules produites par unité de volume et de temps.

On considère le système élémentaire

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant t s'écrit:

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant $t + dt$ s'écrit:

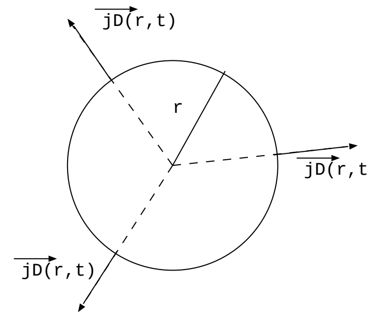
Le nombre de particules qui entrent dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules qui sortent du système entre t et $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules produites dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit:

La conservation du nombre de particules s'écrit:

3. *Cas où la diffusion est radiale dans une sphère*



On note $n(r,t)$ la densité particulaire en r à l'instant t et $\overrightarrow{j_D}(r,t) = j_D(r,t)\overrightarrow{e_r}$. On note p le nombre de particules produites par unité de volume et de temps.

On considère le système élémentaire

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant t s'écrit:

Le nombre de particules présentes dans le système à l'instant $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules qui entrent dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules qui sortent du système entre t et $t + dt$ s'écrit:

Le nombre de particules produites dans le système entre t et $t + dt$ s'écrit:

La conservation du nombre de particules s'écrit:

V. **Equation de diffusion en régime variable sans production de particules**

L'équation de diffusion est l'équation différentielle aux dérivées partielles vérifiées par la densité particulaire. On la trouve en combinant la loi de Fick et l'équation de conservation du nombre de particules (dite équation bilan local de particules).

1. *Cas de la diffusion à 1D selon Ox.*

La loi de Fick s'écrit:

Le bilan local de particules s'écrit (en absence de production de particules):

On a donc:

2. *Cas général à 3D*

La loi de Fick s'écrit:

Le bilan local de particules s'écrit (en absence de production de particules):

On a donc:

Le Laplacien en coordonnées cartésiennes:

Le Laplacien en coordonnées cylindriques ou sphériques:

3. *Commentaires sur l'équation de diffusion*

Que devient cette équation lorsqu'on change t en $-t$? Commenter.

Calculer un ordre de grandeur du temps de diffusion: on note L la distance de diffusion des particules pendant un temps τ:

AN: temps de diffusion d'un parfum dans l'air sur une distance $d = 1\ m$

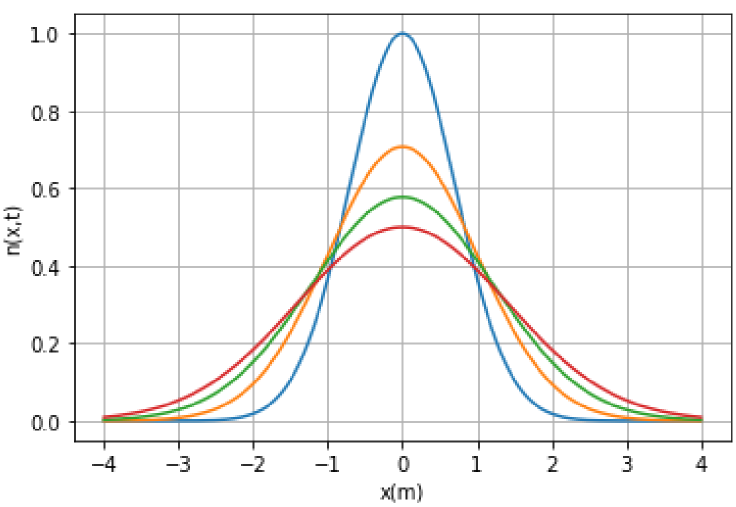
AN: temps de diffusion d'une solution de permanganate de potassium dans l'eau sur une distance $d = 10\ cm$:

Que devient cette équation en régime stationnaire?

Exemple de solution de cette équation: dans le cas où on injecte des molécules en un point d'abscisse $x = 0$ à $t = 0$, on montre que la densité volumique de particules s'écrit $n(x,t) = \frac{n_0}{\sqrt{4Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$.

```
import matplotlib.pyplot as plt
import random
x=np.linspace(-4,4,1000)
def y(x,t):
——return np.exp(−x∗∗2/t)/t∗∗0.5
for i in range(1,5):
——plt.plot(x,y(x,i))
plt.grid()
plt.xlabel('x(m)')
plt.ylabel('n(x,t)')
plt.show()
def f(a,b,g):
——s,N=0,1000
——d=(b-a)/N
——for i in range(N):
—— ——s=s+g(a+d*i)*(b-a)
——return s
def g1(x):
——return y(x,1)
print('f(-10,10,y(x,1)))=',f(-10,10,g1))
def g2(x):
——return y(x,2)
print('f(-10,10,y(x,2)))=',f(-10,10,g2))
def g3(x):
——return y(x,3)
print('f(-10,10,y(x,3)))=',f(-10,10,g3))
```

L'exécution du code donne:



f(-10,10,y(x,1)))= 1772.4538509055164

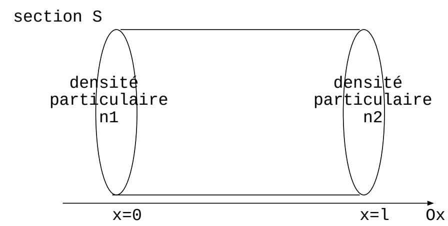
f(-10,10,y(x,2)))= 1772.453850905514

f(-10,10,y(x,3)))= 1772.4538509055158

VI. **Cas du régime stationnaire**

1. *Sans production de particules* :

Soit un cylindre d'axe Ox de section S compris entre $x = 0$ et $x = l$. On note $n(x)$ la densité particulaire dans ce cylindre avec $n(x = 0) = n_1$ et $n(x = l) = n_2$, ces densités particulaires sont maintenues constantes au cours du temps aux extrémités du cylindre.

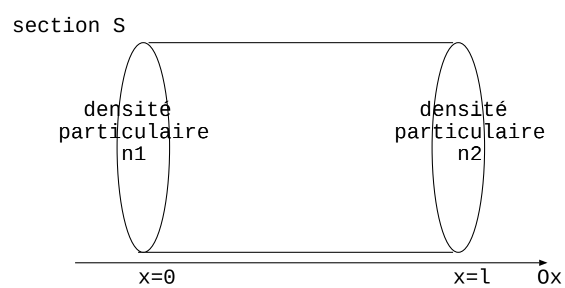


Commentaires préliminaires sur ce dispositif:

Recherche de $j(x)$ et $n(x)$.

2. *Avec production de particules* :

Soit un cylindre d'axe Ox de section S compris entre $x = 0$ et $x = l$. On note $n(x)$ la densité particulaire dans ce cylindre avec $n(x = 0) = n_1$ et $n(x = l) = n_2$, ces densités particulaires sont maintenues constantes au cours du temps aux extrémités du cylindre. Il y a dans ce dispositif production de particules par une réaction chimique, on note p le nombre de particules produites par unité de temps et de volume (p constante positive).

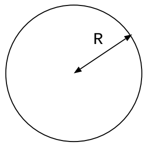


Recherche de $j(x)$ et $n(x)$

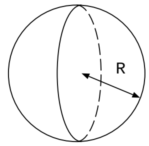
VII. **Outils mathématiques indispensables**

Surfaces:

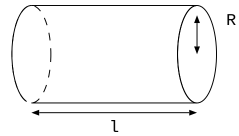
d'un disque



d'une sphère



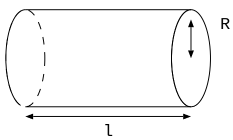
latérale d'un cylindre



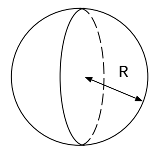
.

Volumes:

d'un cylindre

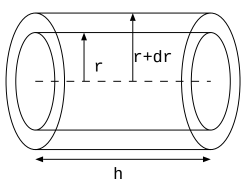


d'une sphère

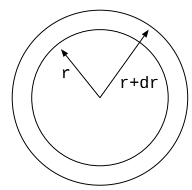


.

entre 2 cylindres de rayons r et $r + dr$



entre 2 sphères de rayons r et $r + dr$



.

Développements limités:

On rappelle que $f(x+\epsilon) \approx f(x) + \epsilon f'(x)$ pour ϵ petit ou encore $f(x+\epsilon) - f(x) \approx \epsilon f'(x)$.

pour dx petit : $f(x + dx) - f(x) \approx$

pour dt petit : $g(t + dt) - g(t) \approx$

pour dx petit : $f(x + dx, t) - f(x, t) \approx$

pour dt petit : $g(x, t + dt) - g(x, t) \approx$