Phénomènes de transport 3
Diffusion de particules

Compétences

- ❏ Citer les deux modes de transfert de particules.
- ❏ Exprimer le débit de particules comme le flux du vecteur $\vec{\jmath}_N$ à travers une surface orientée.
- ❏ Énoncer et utiliser la loi de Fick.
- ❏ Établir l'équation locale de bilan de particules avec ou sans terme source.
- ❏ Établir l'équation de diffusion.
- ❏ Relier l'équation de diffusion à l'irréversibilité temporelle du phénomène.

Entrainements

❏ 10.1 ❏ 10.2 ❏ 10.3 ❏ 10.4 ❏ 10.5 ❏ 10.6 ❏ 10.7 ❏ 10.8 ❏ 10.9 ❏ 10.10
❏ 10.11 ❏ 10.12 ❏ 10.13 ❏ 10.14 ❏ 10.15

Exercices

❏ Exercice 1 ❏ Exercice 2 ❏ Exercice 3 ❏ Exercice 4

Résumé du cours

1. Transfert de masse

1.1. Particules

Une particule est un petit élément d'un système. Toutes les particules ont une masse, à part les photons.

Exemple

Neutron, électron, atome, molécule, ion, grain de pollen, grain de sable

Dans ce chapitre, on s'intéresse aux particules neutres. Les particules chargées sont traitées dans le chapitre « Transport de charge ».

Application ✍[1]

Dans l'exemple ci-dessus, quelles particules sont neutres ?

1.2. Transfert de masse

Transférer de la masse implique transporter des particules massives[1].

Deux phénomènes contribuent à transférer de la masse

Transfert par convection Le transfert par convection a lieu lorsqu'un mouvement macroscopique existe dans un fluide. Les particules présentes dans le fluide sont transportées avec lui.

Exemple

Plancton transporté par les courants marins, particules fines transportées par le courants atmosphériques.

Transfert par diffusion

https://www.youtube.com/watch?v=cD3dOlcxVmE

Même en l'absence de mouvement macroscopique, les particules ont un mouvement d'agitation. L'agitation des particules fait migrer les particules des zones de plus forte concentration vers les zones de plus faible concentration.

Exemple

Parfum dans une pièce sans courant d'air, encre dans de l'eau au repos.

2. Vecteur densité de courant de particule et densité particulaire $\vec{\jmath}_N$

2.1. Définition

La norme du vecteur densité de courant de particule $vv\{j\}_N$ est le nombre de particules transportées par unité d'aire et de temps.

Le sens et la direction du vecteur densité de courant de particule $\vec{\jmath}_N$ sont le sens et la direction de transport des particules.

[1]Une particule massive est une particule qui a une masse non nulle, c'est-à-dire une particule qui n'est pas un photon.

Nombre de particules traversant une surface élémentaire ♥

$$\delta^2 N = \vec{\jmath}_N \cdot \overrightarrow{\mathrm{d}S}\,\mathrm{d}t$$

Avec
- $\vec{\jmath}_N$ le vecteur densité de courant de particule ($\mathrm{m^{-2}\,s^{-1}}$)
- $\delta^2 N$ le nombre de particules traversant $\mathrm{d}S$ (sans unité)
- $\mathrm{d}S$ la surface élémentaire ($\mathrm{m^2}$)

Lien avec la vitesse moyenne ♥ ✍2

$$\vec{\jmath}_N = n\vec{v}$$

Avec
- $\vec{\jmath}_N$ le vecteur densité de courant de particule ($\mathrm{m^{-2}\,s^{-1}}$)
- $\vec{v}$ la vitesse moyenne des particules ($\mathrm{m\,s^{-1}}$)

2.2. Débit de particules

Le débit de particules est l'intégrale du vecteur densité de courant de particule sur une surface orientée.

Débit de particules ♥

$$\Phi = \iint_S \vec{\jmath}_N \cdot \overrightarrow{\mathrm{d}S}$$

Avec
- Φ le débit de particules ($\mathrm{s^{-1}}$)
- $\vec{\jmath}_N$ le vecteur densité de courant de particule ($\mathrm{m^{-2}\,s^{-1}}$)

2.3. Densité particulaire

La densité particulaire (ou densité de particules) est le nombre de particules par unité de volume. La densité particulaire se mesure en $\mathrm{m^{-3}}$.

La densité particulaire est une grandeur intensive.

2.4. Loi de Fick

La loi de Fick relie la densité particulaire au vecteur densité de courant de particules diffusées.

Loi de Fick ♥

Hypothèse : Le transport de particules se fait par diffusion.

$$\vec{\jmath}_N = -D\overrightarrow{grad}\,n$$

Avec
- $\vec{\jmath}_N$ le vecteur densité de courant de particule ($\mathrm{m^{-2}\,s^{-1}}$)
- D le coefficient de diffusion ($\mathrm{m^2\,s^{-1}}$)
- n la densité particulaire ($\mathrm{m^{-3}}$)

Le signe « − » dans la loi de Fick correspond à un sens de diffusion des zones où il y a le plus de particules vers les zones où il y a le moins de particules.

3. Équation de diffusion

3.1. Bilan de particules

On peut faire le bilan du nombre de particules dans un système : la variation du nombre de particules dans un système est égale au nombre de particule rentrant dans le système plus le nombre de particules créées[2] dans le système[3].

Exemple

Dans un hôpital, en une journée, 253 personnes sont rentrées, 243 sont sorties, 5 sont nées et 2 sont décédées. Le nombre de personnes dans l'hôpital a varié de $253 - 243 + 5 - 2 = 13$.

Faire le bilan de particules sur un système infinitésimal permet de démontrer l'équation locale de conservation du nombre de particules.

[2]Souvent, les particules ne sont pas créées de rien mais sont le résultat de réactions chimiques ou nucléaires.
[3]On compte négativement les particules qui sortent du système ou qui y sont détruites.

Équation locale de conservation du nombre de particules ♥ ✍[3]

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\mathrm{div}\,\vec{\jmath}_N + a$$

Avec
- n la densité particulaire ($\mathrm{m^{-3}}$)
- $\vec{\jmath}_N$ le vecteur densité de courant de particule ($\mathrm{m^{-2}\,s^{-1}}$)
- a le nombre de particules créées par unité de temps et de volume ($\mathrm{m^{-3}\,s^{-1}}$)

3.2. Équation de diffusion

Si on remplace le vecteur densité de courant de particules $vv\{j\}_N$ grâce à la loi de Fick dans l'équation locale de conservation du nombre de particules, on obtient l'équation de diffusion.

Équation de diffusion ♥ ✍[4]

Hypothèse : Les particules sont transportées par diffusion

$$\frac{\partial n}{\partial t} - D\Delta n = a$$

Avec
- n la densité particulaire ($\mathrm{m^{-3}}$)
- D le coefficient de diffusion ($\mathrm{m^{2}\,s^{-1}}$)
- a le nombre de particules créées par unité de temps et de volume ($\mathrm{m^{-3}\,s^{-1}}$)

3.3. Irréversibilité

L'équation de diffusion n'est pas invariante par renversement du temps. L'équation de diffusion est donc irréversible.

Exercices

1. Einstein relation and stability of isothermal atmosphere

The atmosphere is described as an isothermal ideal gas. In the terrestrial gravitation field, pressure varies as

$$P(z) = P_0 \exp\left(-\frac{mgz}{k_B T}\right)$$

where the axis O_z is vertical and ascending, $z = 0$ at see level and $k_B = \frac{R}{\mathcal{N}_A}$ is the Boltzmann constant.

1/ Using the ideal gas law, ascertain the particule density $n(z)$.

2/ Using Fick law, express the current density vector $\vec{\jmath}_{diff}$ due to the diffusion of particules.

3/ The particules that make air are in motion at microscopic scale. The collisions between particules are modeled with a drag force $\vec{f} = -\frac{m}{\tau}\vec{v}$ that apply on an average particle. Make an inventory of the forces and deduce the limit speed $\vec{v}$ of an average particule. Deduce the current density vector $\vec{\jmath}_{mig}$ due to the gravitation.

4/ By making an inventory of the particules on a slice of atmosphere in a stationary state, express a relation between D, τ, k_B, T and m. This relation is known as Einstein relation.

2. Taille critique d'une bactérie aérobie

On étudie les conditions de survie d'une bactérie dans un lac de très grande taille à la température $T_0 = 297\,\mathrm{K}$. Pour vivre, elle a besoin de consommer le dioxygène dissous dans l'eau au voisinage de sa surface.

La bactérie est modélisée par une boule de centre O fixe, de rayon R, de masse volumique μ identique à celle de l'eau.

On se place en régime stationnaire et on note $n(r)$ la densité particulaire, exprimée en m^{-3}, de $\mathrm{O_2}$ dissous à la distance r de O ($r > R$). La diffusion de $\mathrm{O_2}$ obéit à la loi de Fick avec un coefficient de diffusion de $D = 2 \cdot 10^{-9}$ U.S.I.. Loin de la bactérie, la concentration molaire volumique de $\mathrm{O_2}$ dissous dans le lac vaut $c_0 = 0.2\,\mathrm{mol\,L^{-1}}$.

La consommation en $\mathrm{O_2}$ de la bactérie est proportionnelle à sa masse. On introduit le taux horaire de consommation de $\mathrm{O_2}$ par unité de masse, noté a et mesuré en $\mathrm{mol\,kg^{-1}\,s^{-1}}$.

1/ Rappeler la loi de Fick reliant le vecteur densité de courant particulaire $\vec{\jmath} = j(r)\vec{e}_r$ à la densité particulaire $n(r)$.

2/ Quelle est l'unité de D.

3/ Établir l'équation de diffusion de particules en coordonnées sphériques.

4/ Exprimer Φ, le nombre de molécules de $\mathrm{O_2}$ qui traversent par unité de temps une sphère de rayon r ($r > R$) en fonction de $j(r)$ et de r. Justifier que Φ ne dépend pas du rayon r de la sphère considérée.

5/ Déterminer l'expression de la densité particulaire $n(r)$ en $\mathrm{O_2}$ dissous dans l'eau. On exprimera les deux constantes d'intégration en fonction de D, Φ, $\mathcal{N}_a$ et c_0. En déduire la densité particulaire n_R en surface de la bactérie, en $r = R$.

6/ En étudiant la consommation en $\mathrm{O_2}$ de la bactérie pendant une durée $\mathrm{d}t$, exprimer Φ en fonction de a, $\mathcal{N}_a$, de la masse volumique μ de la bactérie et de son rayon R.

7/ En déduire l'expression de n_R. Comment varie n_R en fonction de R.

8/ Quelle inégalité doit vérifier n_R pour que la bactérie ne suffoque pas. En déduire l'expression du rayon critique R_c d'une bactérie aérobie. Effectuer l'application pour $a = 1 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{mol\,kg^{-1}\,s^{-1}}$ et sachant que la bactérie une masse volumique comparable a celle de l'eau. Comparer ce résultat à la dimension caractéristique $R = 1$ à $10\,\mathrm{\mu m}$ d'une bactérie réelle.

3. Désintégration de l'uranium 235 ★★

On étudie une boule de rayon R constituée d'uranium 235.

L'uranium 235 n'a pas un noyau stable, celui-ci peut se fissionner en « captant » un neutron selon la réaction nucléaire

${}^{235}_{92}\mathrm{U} \; + \; 1 \text{ neutron} \longrightarrow \mathrm{X} \; + \; \mathrm{Y} \; + \; \nu \text{ neutrons}$

où X et Y sont deux noyaux plus légers. La valeur moyenne de ν est 2.5. Cette réaction a une probabilité $\frac{n}{\tau}$ de se produire par unité de temps et de volume.

On se place en coordonnées sphériques, note $n(r,t)$ le nombre de neutrons par unité de volume et $\vec{\jmath}(r,t)$ le vecteur densité de courant de neutrons.

On donne, en sphériques, pour des grandeurs ne dépendant que de r et de t :

- $\overrightarrow{grad}\, n = \frac{\partial n}{\partial r}\vec{e}_r$
- $\mathrm{div}\ \vec{\jmath} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 j\right)$
- $\Delta n = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial n}{\partial r}\right)$

On prend pour condition aux limites $n(r=R)=0$

1/ En faisant un bilan de neutron sur une volume mésoscopique, démontrer l'équation fondamentale de la neutronique :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\mathrm{div}\ j + \frac{\nu-1}{\tau}n$$

2/ On recherche une solution de l'équation ci-dessus sous la forme $N(r,t) = \frac{f(t)g(r)}{r}$. Montrer que f et g vérifient les équations différentielles suivantes :

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = Kf(t)$$
$$D\frac{\mathrm{d}^2 g}{\mathrm{d}r^2} + \left(\frac{\nu-1}{\tau} - K\right)g(r) = 0$$

où K est une constante qu'on ne cherchera pas à déterminer pour l'instant.

3/ Quelles sont les différentes formes de solution pour $g(r)$. Lesquelles sont compatibles avec les conditions aux limites ? Résoudre l'équation différentielle sur $g(r)$.

4/ Quelle est la forme de la solution de l'équation sur $f(t)$.

5/ Sous quelle condition sur le rayon la réaction s'emballe-t-elle ?

6/ En déduire la masse critique d'uranium 235 nécessaire pour qu'une réaction en chaîne puisse se produire. La masse volumique de l'uranium 235 est $19.1\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$, le coefficient de diffusion des neutrons dans l'uranium 235 est $2\cdot 10^5\,\mathrm{m^2\,s^{-1}}$ et le temps moyen avant capture d'un neutron est $5.4\cdot 10^{-9}\,\mathrm{s}$.

4. Désintégration de l'uranium 235 ★

On étudie une boule de rayon R constituée d'uranium 235.

L'uranium 235 n'a pas un noyau stable, celui-ci peut se fissionner en « captant » un neutron selon la réaction nucléaire

${}^{235}_{92}\mathrm{U} \; + \; 1 \text{ neutron} \longrightarrow \mathrm{X} \; + \; \mathrm{Y} \; + \; \nu \text{ neutrons}$

où X et Y sont deux noyaux plus légers. La valeur moyenne de ν est 2.5. Cette réaction a une probabilité $\frac{n}{\tau}$ de se produire par unité de temps et de volume.

On se place en coordonnées sphériques, note $n(t,r)$ le nombre de neutrons par unité de volume et $\vec{\jmath}(t,r)$ le vecteur densité de courant de neutrons.

On prend pour condition aux limites $\forall t, (t, r = R) = 0$

1/ En faisant un bilan de neutron sur une volume mésoscopique, démontrer l'équation aux dérivées partielles vérifiée par n :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{D}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial n}{\partial r}\right) + \frac{\nu - 1}{\tau}n$$

2/ On pose $y(t,r) = rn(t,r)$. Montrer que y vérifie l'équation de diffusion

$$\frac{\partial y}{\partial t} = D\frac{\partial^2 y}{\partial r^2} + \frac{\nu - 1}{\tau}y$$

3/ Quelles sont les conditions aux limites vérifiées par y en $r = 0$ et $r = R$?

Pour résoudre numériquement l'équation de diffusion, on discrétise l'espace avec un pas $\mathrm{d}r$ et le temps avec un pas $\mathrm{d}t$. On note $y_{i,j} = y(i\,\mathrm{d}t, j\,\mathrm{d}r)$.

4/ Établir le schéma d'Euler explicite pour résoudre numériquement l'équation de diffusion vérifiée par y :

$$y_{i+1,j} = y_{i,j} + D\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}r^2}\left(y_{i,j+1} - 2y_{i,j} + y_{i,j-1}\right) + \frac{\nu - 1}{\tau}\,\mathrm{d}t y_{i,j}$$

5/ Compléter le code Python ci-dessous pour simuler la désintégration de l'uranium 235 dans la boule. On prendra comme condition initiale une densité de neutrons uniforme dans la boule égale à $1 \cdot 10^{12}\,\mathrm{m}^3$ (sauf aux conditions aux limites où elle est nulle).

```python
import numpy as np

R = 0.2 # rayon de la boule en m
nu = 2.5 # nombre moyen de neutrons émis par fission
tau = 5.4e-9 # temps moyen entre deux fissions en s
D = 2e5 # diffusivité des neutrons dans l'uranium 235 en m2/s

Nx = 50 # nombre d'échantillons spatiaux
Nt = 1000 # nombre d'échantillons temporels

dx = ... # pas spatial
dt = 0.5 * dx**2 / (2*D) # pas temporel (condition de stabilité)

t = ... # array contenant tous les instants
r = ... # array contenant toutes les positions

y = ... # initialisation de la matrice avec des zéros
y[0,1:-1] = ... # condition initiale : densité uniforme

for i in range(0, Nt-1):
    for j in range(1, Nx-1):
        y[i+1, ...] = 0 # condition aux limites en r=0
        y[i+1, ...] = 0 # condition aux limites en r=R
        # schéma d'Euler explicite
        y[i+1,j] = ...
```

6/ Tracer la densité de neutrons en fonction du rayon pour aux instants $t = 0$, $t = \frac{t_{\max}}{4}$, $t = \frac{t_{\max}}{2}$, $t = 3\frac{t_{\max}}{4}$ et $t = t_{\max}$ où $t_{\max}$ est le temps final de la simulation.

7/ Tracer l'évolution temporelle de la densité de neutrons en $r = \frac{R}{2}$.

8/ Pour des petites valeurs de R, la densité de neutrons tend vers 0 avec le temps. Pour des grandes valeurs de R, la densité de neutrons croît exponentiellement avec le temps. Déterminer la valeur critique de R séparant ces deux comportements. On pourra procéder par essais successifs et on la déterminera à 5 cm près.