# Phénomènes de transport 3 Diffusion de particules

# Compétences

A	la fin de ce chapitre, je saurai :
	Citer les deux modes de transfert de particules.
	Exprimer le débit de particules comme le flux du vecteur $\overrightarrow{j}_N$ 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.

# 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



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

#### 1.2 Transfert de masse

Transférer de la masse implique transporter des particules massives<sup>1</sup>.

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 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

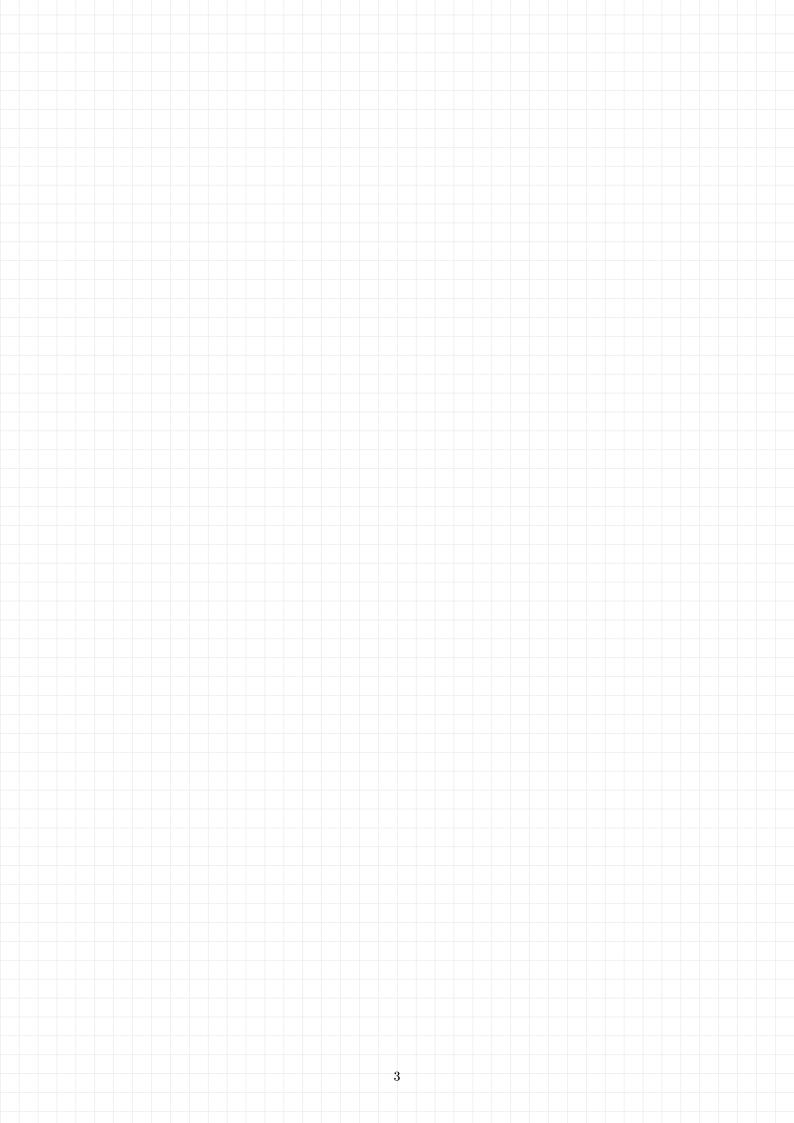
Parfum dans une pièce sans courant d'air, encre dans de l'eau au repos.

## 2 vecteur densité de courant de particule et densité particulaire

# 2.1 Définition du vecteur densité de courant de particule $\overrightarrow{j}_N$

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

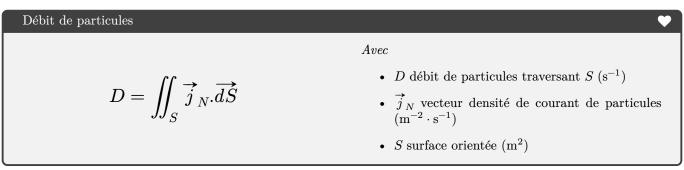
 $<sup>^1</sup>$ Une particule massive est une particule qui a une masse non nulle, c'est-à-dire une particule qui n'est pas un photon.



# 

#### 2.2 Débit de particules

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



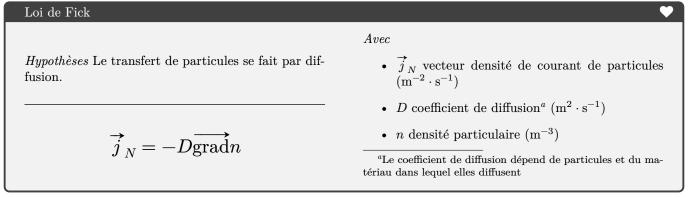
#### 2.3 Densité particulaire

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

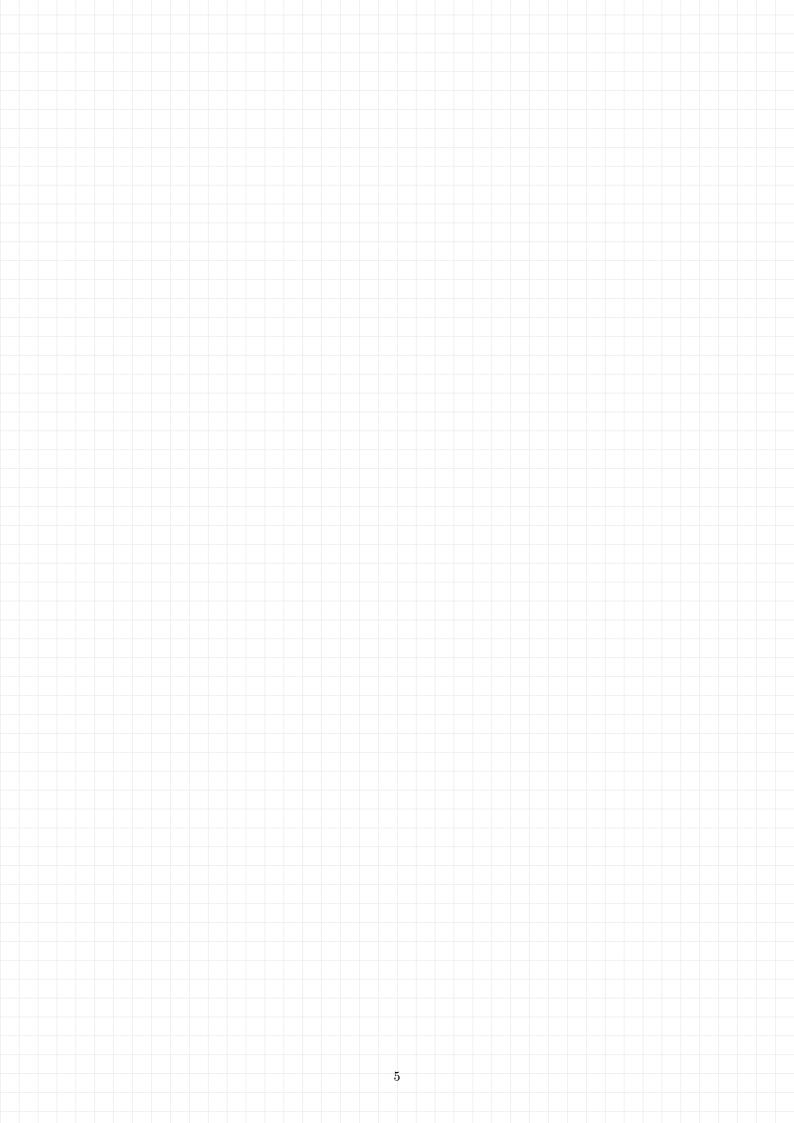
La densité particulaire est une grandeur intensive.

#### 2.4 Loi de Fick

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



Le signe  $\langle - \rangle$  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<sup>2</sup> dans le système<sup>3</sup>.

#### 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 = 7.

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

Avec

#### Équation locale de conservation du nombre de particules



$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\operatorname{div} \overrightarrow{j}_N + a$$

- n la densité particulaire (m<sup>-3</sup>)
- $\overrightarrow{j}_N$  le vecteur densité de courant de particules  $(\mathbf{m}^{-2} \cdot \mathbf{s}^{-1})$
- a le nombre de particules créées par unité de temps et de volume  $(m^{-3} \cdot s^{-1})$

### 3.2 Équation de diffusion

Si on remplace le vecteur densité de courant de particules  $\overrightarrow{j}_N$  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

 $Hypoth\`{e}ses$  Les particules sont transportées par diffusion

Avec

- n la densité particulaire (m<sup>-3</sup>)
- a le nombre de particules créées par unité de temps et de volume  $(m^{-3} \cdot s^{-1})$
- D est le coefficient de diffusion  $(m^2 \cdot s^{-1})$

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

L'équation de diffusion est une équation aux dérivées partielles<sup>4</sup>.

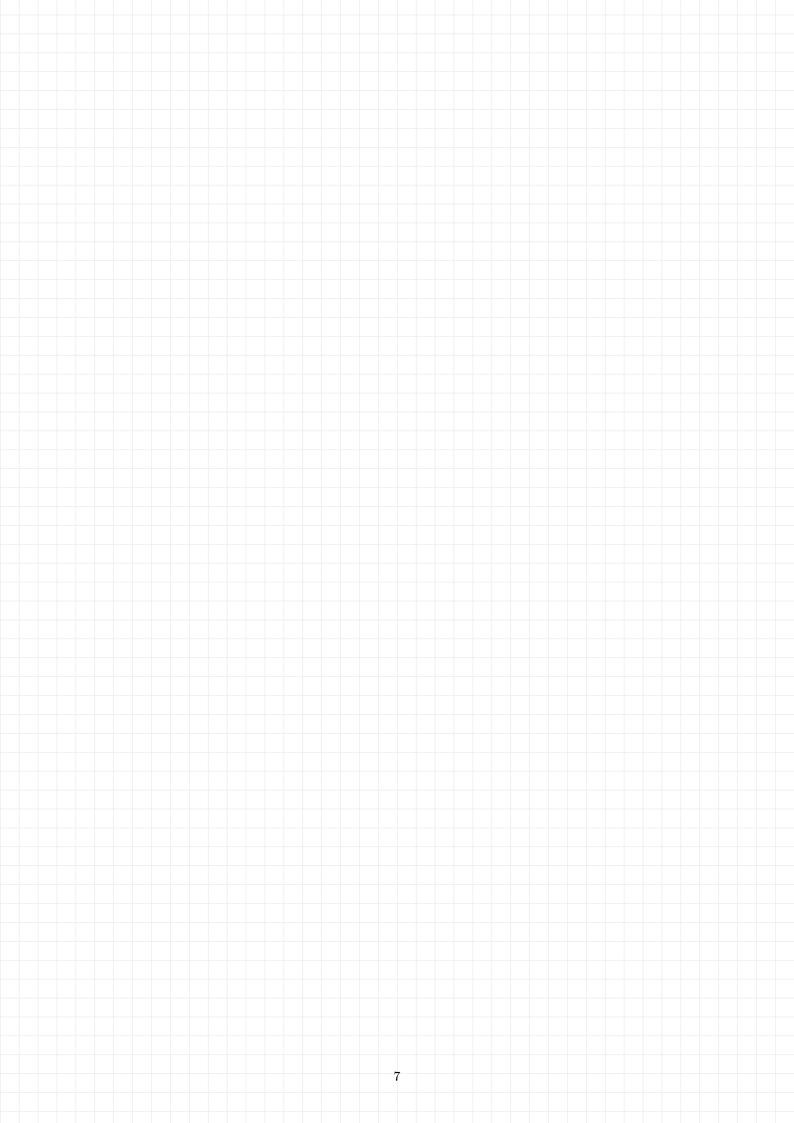
#### 3.3 Irréversibilité

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

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Souvent, les particules ne sont pas créées de rien mais sont le résultat de réactions chimiques ou nucléaires.

 $<sup>^3</sup>$ On compte négativement les particules qui sortent du système ou qui y sont détruites.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Une équation aux dérivées partielles est une équation portant sur les dérivées d'une même grandeur par rapport à des grandeurs différentes. Par exemple, une équation entre  $\frac{\partial f}{\partial x}$  et  $\frac{\partial f}{\partial t}$  est une équation aux dérivées partielles.



# TD

## 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

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

where the axis Oz 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, show that a diffusion phenomenon exists. Express the current density vector  $\vec{j}_{\text{diff}}$ .
- 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  $\vec{j}_{\text{mig}}$  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,  $\tau$ ,  $k_B$ , 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  $\mu$  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  $O_2$  dissous à la distance r de O (r > R). La diffusion de  $O_2$  obéit à la loi de Fick avec un coefficient de diffusion de  $D = 2 \times 10^{-9}$  USI. Loin de la bactérie, la concentration molaire volumique de  $O_2$  dissous dans le lac vaut  $c_0 = 0.2 \,\mathrm{mol} \cdot \mathrm{L}^{-1}$ .

La consommation en  $O_2$  de la bactérie est proportionnelle à sa masse. On introduit le taux horaire de consommation de  $O_2$  par unité de masse, noté a et mesuré en mol.kg<sup>-1</sup>.s<sup>-1</sup>.

- 1. Rappeler la loi de Fick reliant le vecteur densité de courant particulaire  $\vec{j} = j(r)\vec{u_r}$  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 le nombre  $\phi(r)$  de molécules de  $O_2$  qui traversent par unité de temps une sphère de rayon r (r > R) en fonction de j(r) et de r. Justifier que  $\phi$  ne dépend pas du rayon r de la sphère considérée.
- 5. Déterminer l'expression de la densité particulaire n(r) en  $O_2$  dissous dans l'eau. On exprimera les deux constantes d'intégration en fonction de D,  $\phi$ ,  $\mathcal{N}_A$  et  $c_0$ . En déduire la densité particulaire  $n_R$  en surface de la bactérie, en r=R.
- 6. En étudiant la consommation en  $O_2$  de la bactérie pendant une durée dt, exprimer  $\phi$  en fonction de a,  $\mathcal{N}_A$ , de la masse volumique  $\mu$  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  $a=2\times 10^{-2}\,\mathrm{mol\cdot kg^{-1}\cdot s^{-1}}$ . Comparer ce résultat à la dimension caractéristique R=1 à  $10\,\mathrm{m}$  d'une bactérie réelle.

## 3 Désintégration de l'uranium 235 ★★

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

$$^{235}_{92}$$
U + n  $\longrightarrow$  X + Y +  $\nu$ n +  $\gamma$ 

où X et Y sont deux noyaux plus légers, n est un neutron et  $\gamma$  représente l'énergie émise. La valeur moyenne de  $\nu$  est 2,5. L'énergie moyenne libérée par cette désintégration est  $170 \times 10^6$  eV. Cette réaction a une probabilité  $\frac{N}{\tau}$  de se produire par unité de temps et de volume.

On note N(x, y, z, t) le nombre de neutrons par unité de volume et  $\vec{j}$  le vecteur densité de courant de neutrons.

On donne, en sphériques, pour des grandeurs ne dépendant que de r et de t:  $\overrightarrow{\text{grad}}N = \frac{\partial N}{\partial r}\overrightarrow{e_r}$ ,  $\operatorname{div}\overrightarrow{j} = \frac{1}{r^2}\frac{r^2\partial j_r}{\partial r}$  et  $\Delta N = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial N}{\partial r}\right)$ .

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

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\operatorname{div} \overrightarrow{j} + \frac{\nu - 1}{\tau} N(x, y, z, t)$$

- 2. On considère une sphère de rayon R d'uranium 235 et on suppose le problème à symétrie sphérique. On recherche une solution de l'équation ci-dessus sous la forme  $N(r,t)=\frac{f(t)g(r)}{r}$ . Déterminer les équations vérifiées par f et par g.
- 3. On prend pour condition aux limites N(r=R)=0. Justifier.
- 4. Quelles sont les différentes formes de solution pour g(r). Lesquelles décrivent physiquement la réaction en chaine d'une bombe nucléire? Résoudre l'équation différentielle sur g(r).
- 5. En déduire la solution de l'équation sur f(t).
- 6. Sous quelle condition sur le rayon la réaction s'emballe-t-elle?
- 7. Quelle masse minimale doit donc avoir une bombe nucléaire?