

## LP n°18 : Phénomènes de transport

Salim EL MARD

5 Décembre 2016

### Niveau

L2

### Prérequis

- Premier et second principe de la thermodynamique
- Conservation de la matière et de l'énergie

### Objectifs

- Utiliser la notion de flux pour traduire un bilan global. Établir une équation traduisant un bilan local.
- Citer l'ordre de grandeur d'un coefficient de diffusion dans un gaz dans les conditions usuelles.
- Établir une équation de la diffusion. Analyser une équation de diffusion en ordre de grandeur pour relier des échelles caractéristiques spatiale et temporelle.

## Introduction

Certaines propriétés macroscopiques telles que la diffusion moléculaire, la diffusion thermique, la conductivité, etc, peuvent être attribuées au transport de grandeurs physiques. Ainsi la diffusion moléculaire est due au transport du nombre de particules par unité de volume, la diffusion thermique au transport de l'énergie, la conduction électrique au transport de la charge électrique.

Au cours de cette leçon on va s'attacher à décrire la diffusion de particules de façon rigoureuse puis de décrire la diffusion thermique en remarquant les analogies avec la diffusion de particules.

### A Diffusion de particules

#### A.1 Mise en évidence de la diffusion de particules - Loi de conservation - Loi de Fick

##### A.1.1 Approche qualitative

Considérons un béccher d'eau et déposons une goutte d'encre au milieu de la surface d'eau. On remarque alors que la goutte s'étale à la surface d'abord rapidement puis de moins en moins vite.

Poutant l'eau étant statique, aucun courant n'a pu entraîner l'encre. On dit que les espèces chimique qui composent l'encre ont été diffusé. Ce transport se produit initialement hors équilibre des régions riches en espèce vers le régions pauvres en espèce. Il tend à uniformiser la répartition des espèces chimiques. Dans la suite on appellera particule toutes entités élémentaire (atomes, molécules, ions, neutron, ...) et on utilisera la grandeur locale « nombre de particules par unité de volume » :

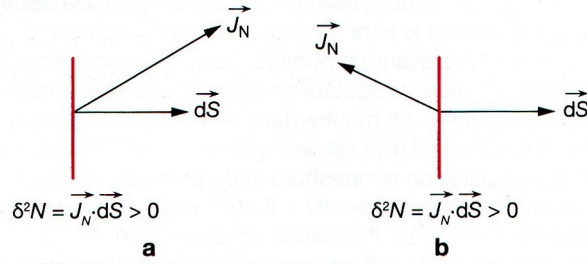


FIGURE 1: *Signe de  $\delta^2 N$  en fonction de la configuration*

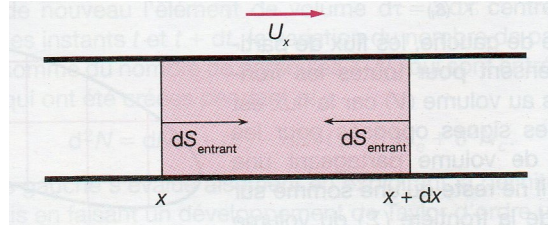


FIGURE 2: *Élément de volume  $d\tau$*

$$n(M, t) = \frac{dN}{d\tau}$$

où  $dN$  est le nombre de particule dans l'élément de volume mésoscopique  $d\tau$  centré sur le point  $M$ .

#### A.1.2 Vecteur densité de flux de particules et flux de particules

On peut définir un vecteur densité de flux de particules  $\vec{j}_N$  tel que le nombre de particules  $\delta^2 N$  traversant un élément de surface orienté  $\vec{dS}$  entre les instants  $t$  et  $t + dt$  vaut :

$$\delta^2 N = \vec{j}_N \cdot \vec{dS} dt$$

où le nombre de particules est compté positivement si les particules traversent l'élément de surface dans le sens de  $\vec{dS}$  et négativement dans le cas contraire (voir figure 1). L'unité de  $\vec{j}_N$  est le  $m^{-2}s^{-1}$ .

On définit aussi le flux élémentaire de particule  $d\phi$  à travers un élément de surface  $\vec{dS}$  comme le nombre de particules qui traversent  $\vec{dS}$  par unité de temps :  $d\phi = \frac{\delta^2 N}{dt}$  ce qui conduit à :

$$d\phi = \vec{j}_N \cdot \vec{dS}$$

On obtient alors l'expression du flux de particules à travers une surface (S) :

$$\phi = \iint_{(S)} \vec{j}_N \cdot \vec{dS}$$

#### A.1.3 Nombre de particules reçues par un élément de volume

Considérons le cas particulier de la diffusion unidirectionnelle dans un cylindre d'axe  $Ox$  et de section droite  $S$ , dont les parois latérales ne laissent passer aucune particule. Dans ce cas le vecteur  $\vec{j}_N$  est de la forme  $\vec{j}_N = j_N(x, t)\vec{u}_x$ . Considérons le volume élémentaire  $d\tau = Sdx$  compris à chaque instant entre les abscisses  $x$  et  $x + dx$  (voir figure 2) et évaluons le nombre de particules  $\delta^2 N_e$  qui entrent dans  $d\tau$  entre les instants  $t$  et  $t + dt$ .

Le nombre de particules qui entrent dans  $d\tau$  par la section d'abscisse  $x$  entre  $t$  et  $t + dt$  vaut :

$$\delta N_x = \iint_{(S)} j_N \vec{u}_x \cdot dS_{entrant} \vec{u}_x dt = S j_N(x, t) dt$$

Sur la section d'abscisse  $x + dx$  entre les instant  $t$  et  $t + dt$  on a :

$$\delta N_{x+dx} = \iint_{(S)} j_N \vec{u}_x \cdot dS_{entrant}(-\vec{u}_x) dt = -S j_N(x+dx, t) dt$$

On peut alors exprimer le nombre totale de particules entrant :

$$\delta^2 N_e = \delta N_x + \delta N_{x+dx} = -S(j_N(x+dx, t) - j_N(x, t)) dt$$

On peut réécrire cette expression sous la forme :

$$\delta^2 N_e = -\frac{\partial j_N}{\partial x} d\tau dt$$

On peut généraliser cette expression à trois dimension en écrivant :

$$\delta^2 N_e = -div \vec{j}_N d\tau dt$$

#### A.1.4 Bilan locale de particules

Si dans notre système se déroule des réactions chimiques ou bien des réactions nucléaire, il peut y avoir création ou disparitions de particules. Notons  $\sigma(M, t)$  le nombre de particules créées par unité de temps et de volume. On peut alors écrire le nombre de particules créées  $\delta^2 N_c$  pendant  $dt$  dans un élément de volume  $d\tau$  :

$$\delta^2 N_c = \sigma S d\tau dt$$

Reprenons alors le problème unidimensionnel précédent. En prenant en compte la création de particules, la variation du nombre de particule dans  $d\tau$  s'écrit :

$$d^2 N = \delta^2 N_e + \delta^2 N_c$$

On obtient alors en remplaçant les différents termes par leurs expression en fonction de la densité de particules et de la densité de flux de particules  $\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial j_N}{\partial x} + \sigma$

En généralisant cette expression à trois dimensions on obtient l'équation de conservation du nombre de particule :

$$\frac{\partial n(M, t)}{\partial t} = -div \vec{j}_N(M, t) + \sigma(M, t)$$

#### A.1.5 Loi de Fick

On dispose d'une équation à 4 inconnues. Il nous faut alors une équation vectorielle pour connaître  $n(M, t)$  et  $\vec{j}_N(M, t)$ . Cette deuxième équation est la loi de Fick :

$$\vec{j}_N(M, t) = -D \overrightarrow{grad} n(M, t)$$

avec  $D$  le coefficient de diffusion, une constante positive qui s'exprime en  $m^2 s^{-1}$ . Ce coefficient dépend de la nature de la particule diffusée et du milieu dans lequel elle diffuse. Les ordres de grandeurs de ce coefficient sont :

Type de diffusion	$D$ en $m^2 s^{-1}$
Molécules dans un gaz	$10^{-6}$ à $10^{-4}$
Molécules dans un liquide	$10^{-12}$ à $10^{-8}$
Atomes dans un solides	$10^{-30}$ à $10^{-16}$

Cette loi a été établit expérimentalement en remarquant que les particules diffusent des lieux les plus concentrés vers les lieux les moins concentrés, ce qui va engendrer un flux de densité de particules. Cependant cette loi n'est plus valable dans les cas où le gradient de densité est trop important, le gradient de densité varie trop vite dans le temps, et dans les milieux anisotropes dans lequel la diffusion dépend de la direction.

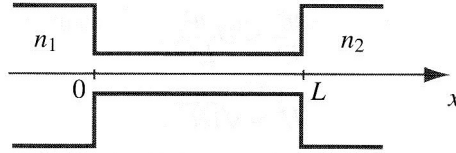


FIGURE 3: Un problème de diffusion en régime stationnaire

## A.2 Equation de diffusion

En combinant l'équation de conservation et la loi de Fick, on peut en déduire l'équation qui pilote l'évolution de la densité de particules. On obtient l'équation de diffusion des particules :

$$\frac{\partial n(M, t)}{\partial t} - D\Delta n(M, t) = \sigma(M, t)$$

A partir de cette équation on peut en déduire que la diffusion de particules est un phénomène irréversible puisque en remontant le cours du temps on changerait  $dt$  en  $-dt$  et comme la dérivée temporelle est d'ordre impair ceci modifierait l'équation.

Dans la suite on étudiera cette équation dans le cas où il n'y a ni création ni disparition de particules (c'est à dire  $\sigma(M, t) = 0$ ).

### A.2.1 Longueur et temps caractéristiques associés

Faisons une première étude de l'équation de diffusion à partir d'ordre de grandeurs. On peut écrire  $\frac{\partial n}{\partial t} \sim \frac{n^*}{T^*}$  et  $\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \sim \frac{n^*}{L^{*2}}$  et on en déduit :

$$L^* \sim \sqrt{DT^*}$$

Appliquons ce résultat dans le cas de la diffusion du sucre dans une tasse de café sans agitation. Le coefficient de diffusion du sucre dans le café est  $D = 0,5 \cdot 10^{-9} m^2 \cdot s^{-1}$  et la tasse a une taille  $L = 3cm$ . On trouve alors un temps caractéristique de diffusion  $T^* = 3semaines$ . On en conclue qu'il est nécessaire d'agiter le café si on souhaite le boire chaud.

### A.2.2 Cas du régime stationnaire

En régime stationnaire les grandeurs locales sont indépendantes du temps. L'équation de diffusion devient alors l'équation de Laplace :

$$\Delta n(M) = 0$$

Prenons un exemple décrivant ce cas.

Soit un tube de longueur  $L$  établissant la communication entre deux réservoir dans lequel un soluté est aux concentrations constantes  $n_1$  et  $n_2$  (voir figure 3). On cherche la concentration en soluté dans le tube en faisant les hypothèses suivantes :

- Elle ne dépend que de la coordonnée  $x$  le long du tube
- elle ne dépend pas du temps

Dans ce cas l'équation de Laplace s'écrit  $\frac{\partial^2 n(x)}{\partial x^2} = 0$  d'où  $n(x) = Ax + B$ , où  $A$  et  $B$  sont des constantes à déterminer en utilisant les conditions aux limites  $n(0) = n_1$  et  $n(L) = n_2$ . On trouve alors :

$$n(x) = \frac{n_2 - n_1}{L}x + n_1$$

$$\vec{j} = -D \frac{dn}{dx} \vec{u}_x = D \frac{n_1 - n_2}{L} \vec{u}_x$$

On remarque que le vecteur densité de courant est indépendant de la position. On pouvait déjà le deviner en réécrivant l'équation de conservation en régime stationnaire.

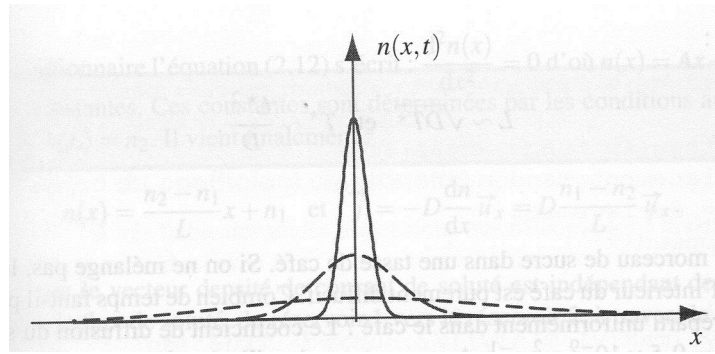


FIGURE 4: Diffusion d'une tache d'encre.  $n(x, t_0)$  en trait plein,  $n(x, 10t_0)$  en tireté large,  $n(x, 100t_0)$  en tireté étroit

### A.2.3 Cas du régime instationnaire

Prenons l'exemple de l'élargissement diffusif d'une tâche d'encre. On adopte un modèle unidimensionnel. La densité de particule  $n$  ne dépend que de  $x$  et de  $t$  et le colorant est mis initialement en  $x = 0$ . La condition initiale est  $n(x, 0) = 0$  et les conditions aux limites sont  $n(\text{infini}, t) = n(-\text{infini}, t) = 0$ . On peut alors trouver par une approche microscopique une solution de la forme :

$$n(x, t) = \frac{A}{\sqrt{Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

où  $A$  est une constante dépendant du nombre de particules déposées sur le papier (voir figure 4).

On peut alors quantifier ce résultat en évaluant la demi-largeur  $\delta$  à mi-hauteur de la courbe obtenue :  $n(\delta, t) = \frac{n(0,t)}{2}$  soit  $\exp\left(\frac{\delta^2}{4Dt}\right) = \frac{1}{2}$  puis  $\frac{\delta^2}{4Dt} = \ln 2$  ce qui donne au final

$$\delta = \sqrt{4 \ln(2) Dt}$$

On retrouve un résultat analogue à celui obtenu avec l'étude des ordres de grandeurs de l'équation de diffusion. On remarque alors que la diffusion est rapide aux temps courts puis varie doucement.

## B Diffusion thermique

Passons maintenant à la diffusion thermique. On peut supposer que, comme ce phénomène porte le même nom, il est analogue à la diffusion de particules. Essayons de voir ça.

Jusqu'à présent nous n'avons étudié que des transferts thermiques entre deux états d'équilibre par application du premier principe. Le second principe nous a permis de comprendre le sens des transferts thermiques. Maintenant on va s'intéresser au facteur temporel lors d'un transfert thermique.

### B.1 Mise en évidence de la diffusion thermique - Loi de conservation - Loi de Fourier

#### B.1.1 Modes transferts thermique

Il existe trois mécanismes de transfert thermique :

- la conduction thermique est un transport d'énergie dans un milieu matériel sans déplacement macroscopique de matière.
- la convection thermique est un transfert thermique dû à un déplacement de matière.
- le rayonnement est un transfert d'énergie par onde électromagnétique

#### B.1.2 Loi de conservation

De la même manière qu'en diffusion de particules, on peut définir un flux de densité de chaleur  $\vec{j}_Q$  ( $W.m^{-2}$ ) à travers une surface tel que :

$$\delta^2 Q = \vec{j}_Q \vec{dS} dt$$

En faisant un bilan de chaleur reçu par un élément de volume on montre alors que la chaleur  $Q_e$  qui entre dans ce volume élémentaire entre les instants  $t$  et  $t + dt$  s'écrit :

$$\delta Q_e = -\text{div} \vec{j}_Q d\tau dt$$

Dans la suite on va supposer un solide au repos et indéformable donc le travail des forces de pression est nul.

Le premier principe nous montre alors que si notre solide est parcouru par un courant électrique, siège d'une réaction nucléaire ou encore siège d'une réaction chimique, il y aura création de chaleur  $\delta Q_c$  qui s'exprime de différentes manières suivant le phénomène qui crée cette chaleur.

Faisons maintenant un bilan d'énergie totale locale dans une situation de diffusion thermique unidimensionnelle.

On peut exprimer la capacité thermique de notre solide :

$$dC = c\mu d\tau = \mu c S dx$$

avec  $\mu$  la masse volumique du solide

et comme  $d^2U = dC(T(M, t + dt) - T(M, t))$  on peut écrire :

$$d^2U = \mu c S dx dt \frac{\partial T}{\partial t}$$

En combinant les deux équations exprimant l'énergie interne et en généralisant à trois dimensions on obtient finalement l'équation de conservation de l'énergie :

$$\text{div} \vec{j}_Q + \mu c \frac{\partial T}{\partial t} = \sigma$$

On remarque qu'elle est de la même forme que l'équation de conservation du nombre de particules.

### B.1.3 Loi de Fourier

Il s'agit d'une loi expérimentale analogue à la loi de Fick :

$$\vec{j}_Q = -\lambda \overrightarrow{\text{grad}} T$$

où  $\lambda$  est la conductivité thermique dont on peut donner quelques ordres de grandeurs :

matériau	$\lambda$ à 300K en W/m/K
cuivre	$4,0 \cdot 10^2$
acier	$\approx 50$
béton	$\approx 1$
eau	$6,0 \cdot 10^{-1}$
air (sous $P = 1\text{bar}$ )	$2,6 \cdot 10^{-2}$

De la même manière qu'avec la loi de Fick, cette loi n'est plus valable pour des gradients trop importants, des gradients variant rapidement dans le temps.

## B.2 Equation de diffusion

En combinant la loi de Fourier et l'équation de conservation on obtient alors l'équation de diffusion thermique totalement analogue à l'équation de diffusion de particules :

$$\frac{\partial T(M, t)}{\partial t} - D_{th} \Delta T(M, t) = \sigma(M, t)$$

avec le coefficient de diffusion thermique

$$D_{th} = \frac{\lambda}{\mu c}$$

## Conclusion(s)

On aura vu au cours de cette leçon comment caractériser la diffusion de particules et la diffusion thermique au niveau macroscopique en combinant lois de conservations et observation de la nature. On aura également constaté que les deux phénomènes de diffusion traité ici sont totalement analogue et dans la suite de cette leçon on pourrait également traité le cas de la diffusion de charge qui serait de la même forme.

## Bibliographie

[1] Physique tout-en-un PC-PC\*, M.-N Sanz, J'intègre, DUNOD

[2] Physique PC-PC\*, S. Olivier, Tec&Doc, Lavoisier

[3] Thermodynamique, J.P Pérez, DUNOD

## Commentaires

- penser à relier les loi phénoménologique aux second principe
- établir des équations de diffusion comprenant les termes convectifs
- ne pas parler du terme de création si on ne l'utilise pas
- préciser qu'on se concentre sur la diffusion de particules et la diffusion thermique car sujet très vaste et donner le nom des autres phénomènes de transport