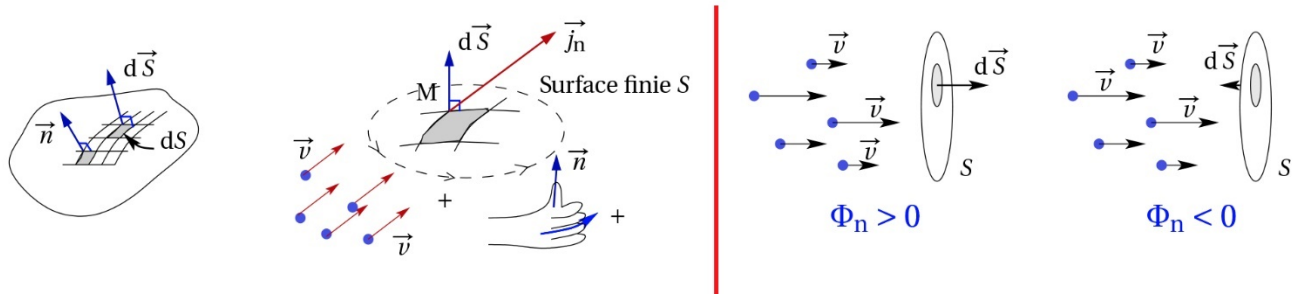
TH2 – Diffusion de particules

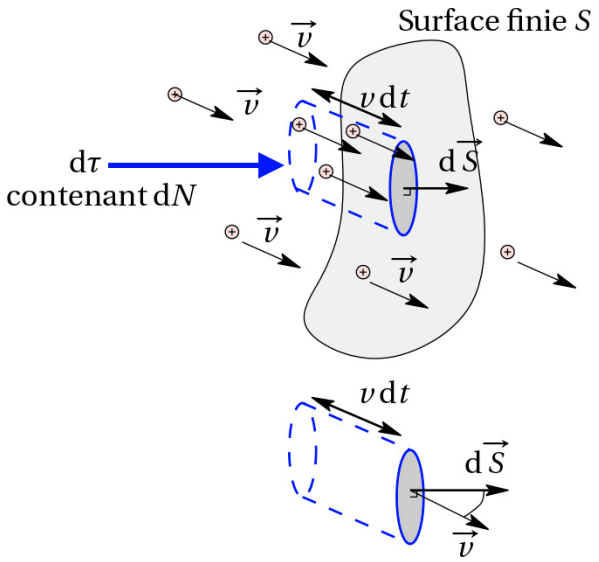
3.2 Diffusion de particules		
Vecteur densité de flux de particules $\overrightarrow{j_n}$.	Exprimer le flux de particules traversant une surface orientée en utilisant le vecteur $\overrightarrow{j_n}$.	Cette notion de flux est fondamentale car on va souvent la retrouver par la suite.
Bilans de particules.	Utiliser la notion de flux pour traduire un bilan global de particules. Établir l'équation locale traduisant un bilan de particules dans le cas d'un problème ne dépendant qu'une d'une seule coordonnée d'espace en coordonnées cartésiennes, cylindriques et sphériques, éventuellement en **présence** de sources internes. Utiliser l'opérateur divergence et son expression fournie pour exprimer le bilan local de particules dans le cas d'une géométrie quelconque.	On va généraliser la démonstration, avant de s'intéresser aux différentes coordonnées. La principale différence vient dans la définition des surfaces entrantes et sortantes.
Loi de Fick.	Utiliser la loi de Fick. Citer l'ordre de grandeur d'un coefficient de diffusion dans un gaz dans les conditions usuelles.	La loi de Fick est une loi phénoménologique.
Régimes stationnaires.	Utiliser, en régime stationnaire, la conservation du flux sous forme locale ou globale en l'absence de sources internes.	Le mot en absence de sources internes est fortement mentionné dans le programme.
Équation de diffusion en l'absence de sources internes.	Établir l'équation de la diffusion en l'absence de sources internes. Utiliser l'opérateur laplacien et son expression fournie pour écrire l'équation de diffusion dans le cas d'une géométrie quelconque. Analyser une équation de diffusion en ordres de grandeur pour relier des échelles caractéristiques spatiale et temporelle.	À l'inverse dans la partie « Diffusion thermique » cette mention disparaît…
Approche microscopique du phénomène de diffusion.	Mettre en place un modèle probabiliste discret à une dimension de la diffusion (marche au hasard) et évaluer le coefficient de diffusion associé en fonction du libre parcours moyen et de la vitesse quadratique moyenne. *<u>Capacité numérique</u> : à l'aide d'un langage de programmation, simuler la marche au hasard d'un grand nombre de particules à partir d'un centre et caractériser l'étalement spatial de cet ensemble de particules au cours du temps.*	

I – Mouvement de particules
I-1) Diffusion et convection
I-2) Vecteur densité de courant de particules
a) Flux de particules à travers $\overrightarrow{dS}$
b) Vecteur densité de courant de particules
c) Remarques
i. Orientation de $\overrightarrow{dS}$
ii. Notation $\delta^2 N$ ou δN
d) Exemple dans un cas convectif
II – Bilan de particules
II-1) Principe
II-2) Bilans de particules à une dimension
a) Présentation
b) Équation de conservation en coordonnées cartésiennes.
c) Équation de conservation en coordonnées cylindriques
d) Équation de conservation en coordonnées sphériques
II-3) Cas général
II-4) Bilan global de particules
III - Loi de Fick
III-1) Énoncé

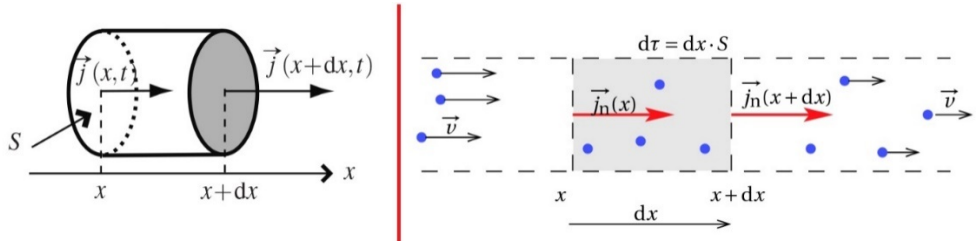
III-2) Limites de validité de la loi de Fick
IV - Régime stationnaire
IV-1) En absence de sources internes
IV-2) Application
V – Equation de diffusion
V-1) Formulation
V-2) Solution en ordre de grandeur
V-3) Nombre de Péclet
V-4) Conditions aux limites
V-5) Exemple non stationnaire
VI – Approche microscopique
VI-1) Marche au hasard
V-2) Coefficient de diffusion

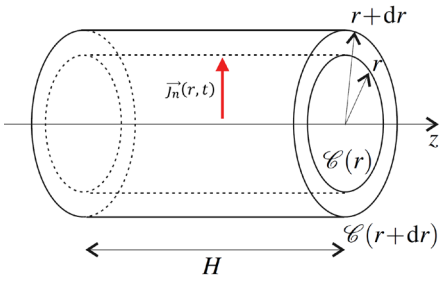
I-2) Vecteur densité de courant de particules

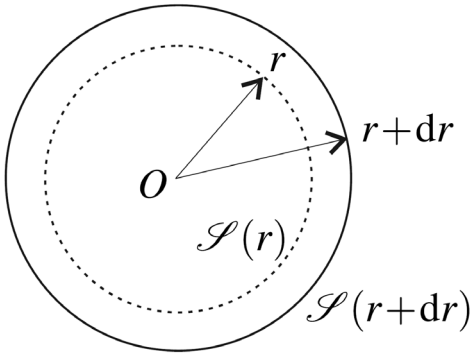




II-2) Bilans de particules à une dimension





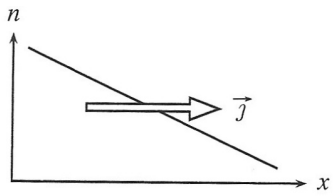


II-3) Cas général

D'après le formulaire sur l'opérateur divergence :

Cartésiennes	Cylindriques	Sphériques
$\boldsymbol{div\,\vec{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}}$	$div\,\vec{A} = \frac{1}{r}\frac{\partial(rA_r)}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial A_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial A_z}{\partial z}$	$div\,\vec{A} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial(r^2A_r)}{\partial r} + \frac{1}{r sin\theta}\frac{\partial(sin\theta\, A_\theta)}{\partial \theta} + \frac{1}{r sin\theta}\frac{\partial(A_\varphi)}{\partial \varphi}$

III-1) Énoncé

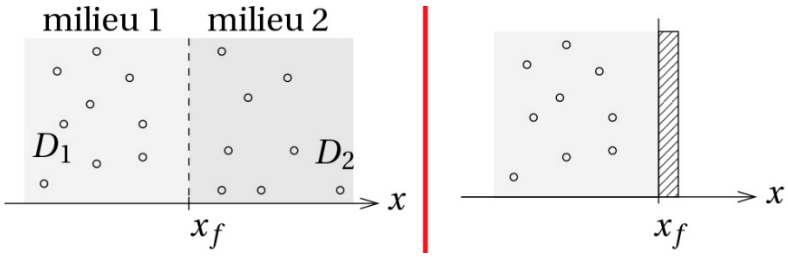


Type de diffusion	Molécules dans les gaz	Molécules dans un liquide	Atomes dans un solide
$[D]/m^2s^{-1}$	10^{-6} à 10^{-4}	10^{-12} à 10^{-8}	10^{-30} à 10^{-16}
Type de diffusion	Vapeur d'eau dans l'air	Sucre dans l'eau	Al dans le cuivre
$[D]/m^2s^{-1}$	$22\ 10^{-6}$	$0{,}52\ 10^{-9}$	$1{,}3\ 10^{-30}$

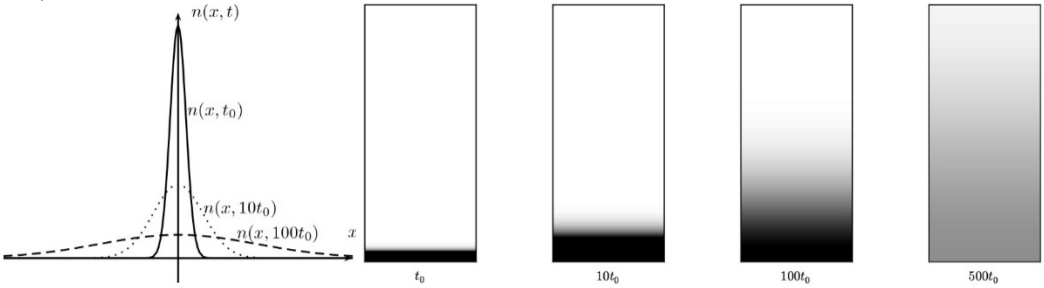
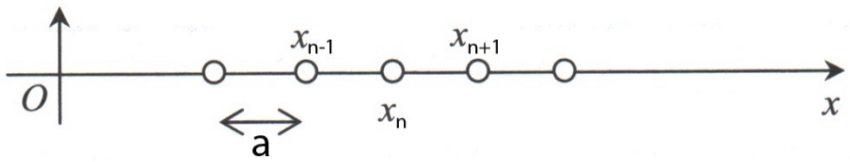
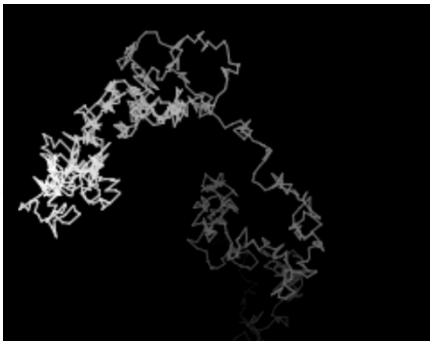
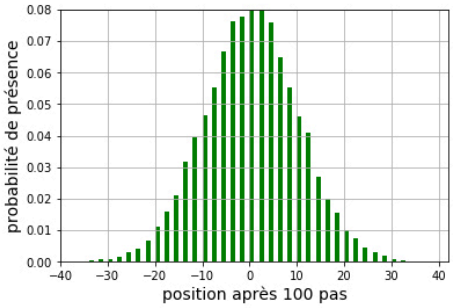
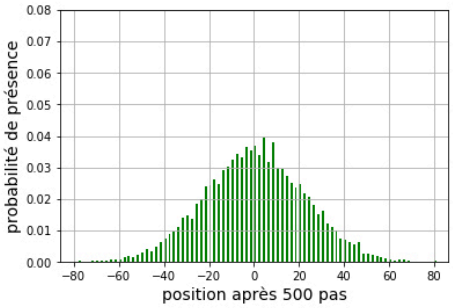
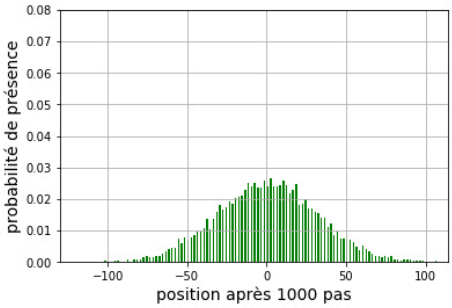
V-1) Formulation

Cartésiennes	Cylindriques	Sphériques
$\boldsymbol{\Delta f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}}$	$\boldsymbol{\Delta f = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}}$	$\boldsymbol{\Delta f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(sin\theta\frac{\partial f}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}}$

V-4) Conditions aux limites



V-5) Exemple non stationnaire



VI-1) Marche au hasard