

Équations macroscopiques de la physique classique



Diffusion

G. Vinsard

Gerard.Vinsard@univ-lorraine.fr
<https://gerard.vinsard.fr>

28 août 2019

Objectifs de la leçon

- ▶ Introduire l'équation de diffusion de quantités sur l'exemple (emblématique) de la concentration de sel dans un liquide immobile ;
- ▶ Montrer que les moyens simples utilisés ne sont pas suffisant pour des cas complexes
- ▶ Introduire le vocabulaire formel de description des régions de l'espace et des opérateurs différentiels ;
- ▶ Introduire les lois de Fick.

L'eau salée : constat

► Lorsqu'on plonge un morceau de sel solide dans de l'eau immobile, le sel se dissout dans l'eau et on obtient de l'eau salée ;
1g de sel solide dans 1l d'eau conduit à une eau salée de concentration $c = 1 \text{ g/l}$ (en négligeant la variation de volume due à l'introduction du sel).

► Cependant le phénomène n'est pas instantané ; avant que l'eau soit uniformément salée il y a une concentration qui dépend de la position dans le volume et du temps et peut donc être représentée par une fonction

$$\begin{aligned} c &: \mathbb{R} \times D \longrightarrow \mathbb{R} \\ (t, \vec{x}) &\longrightarrow c(t, \vec{x}) \end{aligned}$$

où $D \subset E_3$ est le domaine occupé par l'eau dans l'espace. Si on donne un domaine $\delta D \subset D$ alors la quantité de sel dans le domaine δD est

$$q = \int_{\delta D} c(t, \vec{x}) dV \quad (\text{en g})$$

L'eau salée : mécanisme

- ▶ La question qui se pose est celle de déterminer l'équation qui permet de déterminer c dans le temps.
- ▶ Si l'eau est immobile **c'est une équation de diffusion**. Pourquoi ?
 - ▶ (approche théorique) Parce que si on décrit les *particules de sel*¹ comme des particules animées d'un mouvement brownien et qu'on applique la loi de Stokes-Einstein on arrive à ce résultat.
 - ▶ (approche phénoménologique) Parce que si on admet d'emblée que c'est bien une équation de diffusion et qu'on compare les prédictions qu'on peut faire avec cette hypothèse avec ceux d'une expérience alors on obtient des résultats concordants.

1. Il n'y a pas de particule de sel mais des ions sodium Na^+ et chlore Cl^- aussi faudrait-il parler de particules de sodium et de particules de chlore qui auraient chacune leur propre concentration. Cependant du fait de la contrainte de neutralité électrique ces concentrations sont pratiquement égales entre elles. D'où la légitimité de l'abus de langage de *particule de sel*

L'eau salée : équation de diffusion, le gradient 1/2

► C'est entendu, la concentration de sel dans l'eau évolue selon une équation de diffusion ! Mais qu'est-ce qu'une équation de diffusion ?

► Si $D \subset E_3$ est donné, ainsi qu'un coefficient α , appelé la diffusivité, la concentration c évolue selon une équation de diffusion si elle est solution de

$$\partial_t c - \vec{\nabla} \cdot (\alpha \vec{\nabla} c) = 0 \text{ dans } D$$

où le vecteur $\vec{\nabla} c$, appelé le gradient de c et dépendant de la position $\vec{x}$ et du temps t , est défini ainsi : pour un vecteur $\vec{d}$ quelconque mais normé ($|\vec{d}| = 1$) :

$$(\vec{\nabla} c) \cdot \vec{d} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{c(t, \vec{x} + \epsilon \vec{d}) - c(t, \vec{x})}{\epsilon}$$

L'eau salée : équation de diffusion, le gradient 2/2

- En coordonnée cartésiennes, la position dans l'espace E_3 est $\vec{x} = x \vec{k}_x + y \vec{k}_y + z \vec{k}_z$; et, si on laisse fixe les vecteurs de base $\vec{k}_x, \vec{k}_y, \vec{k}_z$, on peut considérer que c est une fonction des coordonnées x, y, z , soit

$$c(t, \vec{x}) = c(t, x, y, z)$$

- Le gradient de c s'écrit alors

$$\vec{\nabla} c = \partial_x c \vec{k}_x + \partial_y c \vec{k}_y + \partial_z c \vec{k}_z$$

- C'est donc une fonction vectorielle

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} c &: \mathbb{R} \times D \longrightarrow E_3(\text{kg}/\text{m}^4) \\ (t, \vec{x}) &\longrightarrow \vec{\nabla} c(t, \vec{x}) = \partial_x c \vec{k}_x + \partial_y c \vec{k}_y + \partial_z c \vec{k}_z \end{aligned}$$

dont l'image est appelée $E_3(\text{kg}/\text{m}^4)$ plutôt que E_3 parce qu'*a priori* les éléments de E_3 sont des positions (en m) alors que que l'unité du gradient d'une concentration est le $(\text{g}/\text{l})/\text{m} = \text{kg}/\text{m}^4$

L'eau salée : équation de diffusion, la divergence - 1/2

► Le gradient de concentration est donc défini : d'une façon qui ne dépend pas des coordonnées utilisées et en considérant que ces dernières sont les coordonnées cartésiennes. Mais qu'est-ce qu'une divergence ?

Provisoirement on se place en coordonnées cartésiennes (on reviendra là dessus).

► Si on se donne une fonction vectorielle quelconque (pas forcément le gradient d'une concentration)

$$\begin{aligned}\vec{\Phi} : \mathbb{R} \times D &\longrightarrow E_3(\text{unité}) \\ (t, \vec{x}) &\longrightarrow \vec{\Phi}(t, \vec{x}) = \Phi_x \vec{k}_x + \Phi_y \vec{k}_y + \Phi_z \vec{k}_z\end{aligned}$$

la divergence de $\vec{\Phi}$, notée $\vec{\nabla} \cdot \vec{\Phi}$, est une fonction scalaire

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{\Phi} : \mathbb{R} \times D &\longrightarrow \mathbb{R}(\text{unité/m}) \\ (t, \vec{x}) &\longrightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{\Phi}(t, \vec{x}) = \partial_x \Phi_x + \partial_y \Phi_y + \partial_z \Phi_z\end{aligned}$$

L'eau salée : équation de diffusion en coordonnées cartésiennes

► En regroupant les définitions du gradient et de la divergence, considérant que D est une constante, on obtient que l'équation de diffusion s'écrit

$$\partial_t c - \alpha \Delta c = 0 \text{ dans } D$$

où s'introduit l'opérateur laplacien défini (en coordonnées cartésiennes) par

$$\Delta c = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} c) = \partial_{xx}^2 c + \partial_{yy}^2 c + \partial_{zz}^2 c$$

Exercice No 1 : diffusion unidirectionnelle

- On place du sel au fond d'une éprouvette de rayon $R = 1\text{cm}$ qu'on remplit d'eau pure jusqu'à une hauteur $L = 1\text{m}$ comptée à partir de l'interface sel/eau ;
- On sait que la diffusivité du sel dans l'eau est $\alpha = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$; que la concentration maximale de sel en eau est de 360 g/l ; que la hauteur L est grande devant R . Combien de temps faut-il pour atteindre une concentration de 30 g/l (eau de mer) à une distance de $x = 10\text{cm}$?
- Que devient la concentration dans l'eau de l'éprouvette au bout d'un temps infini ?

Indication : Chercher les solutions de

$$\text{pour } z > 0 : \alpha \partial_{zz} c - \partial_t c = 0 ; c(t = 0, z) = 0$$

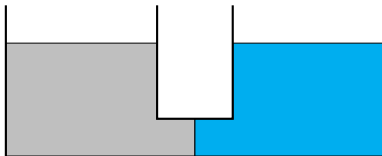
qui sont de la forme

$$c(t, z) = F\left(\frac{z}{2\sqrt{\alpha t}}\right) \text{ avec } \begin{array}{lcl} F & : & \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} \\ u & \longrightarrow & F(u) \end{array} \text{ à déterminer}$$

Exercice No 2 : diffusion en géométrie cylindrique

Compliquons les choses !

On connecte une cuve remplie d'eau salée avec une concentration de 30g/l à une autre identique remplie d'eau pure



► Dans l'approximation 2D (géométrie cylindrique par rapport à la direction transverse au plan de la feuille), faire une figure comportant des noms de domaines et de bords de domaines et écrire les équations du problème d'évolution de la concentration en spécifiant toutes les variables utilisées.

Pour les illustrations, cf. script FreeFem++

<https://gerard.vinsard.fr/Cours/EMPC/L2diffusion.edp>

Que manque-t'il ?

- L'exercice No 1 a pu être fait en supposant que c ne dépendait que de z , la coordonnée suivant l'axe de l'éprouvette ; comme h était assez grand on a pu (au moins pour la première question) se dispenser de la condition aux limites à mettre en $z = h$.
- Mais là il devient nécessaire de bien comprendre les conditions aux limites à ajouter à l'équation de diffusion ;
- Dans une complication ultérieure de l'exercice, il sera également nécessaire de pouvoir exprimer les opérateurs différentiels en coordonnées cylindriques ; et donc de partir de définitions intrinsèques de ces derniers.

Ce qui suit devrait permettre cela.

Les lieux de l'espace

- ▶ Les planches qui suivent donnent le vocabulaire utilisé pour décrire en toute généralité des ensembles de position de l'espace, les lieux ;
- ▶ On s'est limité aux paramétrisations de lieux connexes, c'est à dire d'un seul tenant. Mais bien entendu, par exemple, le bord d'une surface peut être composé de deux ou plus courbes non connectées les unes aux autres et donc il forme un ensemble de courbes non connexes.
- ▶ Et d'autres complications peuvent encore apparaître et c'est la raison pour laquelle ce genre de description a été formalisée par des mathématiciens professionnels !
- ▶ C'est assez complexe. Toutefois, avec un peu de bonne volonté on peut arriver à s'accorder sur la dénotation des termes utilisés et c'est ce qui est demandé 😊

Les lieux de l'espace : les courbes

► Un premier type de lieux de l'espace est celui des courbes continues et différentiables (on dit aussi lisse) presque partout, soit

$$\{\vec{X}(u) = X(u) \vec{k}_x + Y(u) \vec{k}_y + Z(u) \vec{k}_z \text{ avec } 0 < u < 1\}$$

où X, Y, Z sont des fonctions de $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ continues, différentiables (sauf éventuellement en un nombre fini de points : il faut pouvoir former un carré) ne s'annulant pas simultanément et telles que $u \rightarrow \vec{X}(u)$ soit une injection de $]0, 1[$ dans E_3 .

Ces courbes peuvent être ouvertes ($\vec{X}(0) = \lim_{u \rightarrow 0} \vec{X}(u) \neq \vec{X}(1)$) ou refermées sur elles-mêmes ($\vec{X}(0) = \vec{X}(1)$).

De celles qui sont ouvertes on dit qu'elles ont pour bord les points $\vec{X}(0)$ et $\vec{X}(1)$; des autres qu'elles n'ont pas de bord.

Le vecteur $\vec{\tau} = \frac{d\vec{X}}{du} / \left| \frac{d\vec{X}}{du} \right|$ est le vecteur tangent à la courbe ($| |$ est la norme euclidienne).

Les lieux de l'espace : les surfaces 1/2

► Un second type de lieux de l'espace est celui des surfaces continues et différentiables (on dit aussi lisse) presque partout, soit

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{X}(u, v) = X(u, v) \vec{k}_x + Y(u, v) \vec{k}_y + Z(u, v) \vec{k}_z \\ \text{avec } 0 < u < 1 \text{ et } 0 < v < 1 \end{array} \right\}$$

où X, Y, Z sont des fonctions de $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ continues, différentiables et telles que les deux vecteurs $\partial_u \vec{X} = \partial_u X \vec{k}_x + \partial_u Y \vec{k}_y + \partial_u Z \vec{k}_z$; $\partial_v \vec{X} = \partial_v X \vec{k}_x + \partial_v Y \vec{k}_y + \partial_v Z \vec{k}_z$ ne sont ni nuls ni colinéaires $\partial_u \vec{X} \times \partial_v \vec{X} \neq \vec{0}$ ($\times$ le produit vectoriel) et telles que $(u, v) \rightarrow \vec{X}(u, v)$ soit une injection de $]0, 1[\times]0, 1[$ dans E_3 .

Les vecteurs $\vec{\tau}_u = \partial_u \vec{X} / |\partial_u \vec{X}|$ et $\vec{\tau}_v = \partial_v \vec{X} / |\partial_v \vec{X}|$ sont les vecteurs tangents à la surface; le vecteur $\vec{n} = \vec{\tau}_u \times \vec{\tau}_v$ est le vecteur normal à la surface.

Les lieux de l'espace : les surfaces 2/2

La fonction qui à un point de la surface associe le vecteur $\vec{n}$ qui lui correspond est appelé un **champ de normales**.

Il y a en fait deux candidats pour être une normale à la surface en un point : $\vec{n}$ et $-\vec{n}$ et le choix de l'un ou de l'autre dépend de la paramétrisation choisie (par exemple si on permute u et v dans l'ordre dans lequel on considère les deux paramètres) ; et il y a aussi des surfaces pathologiques comme le ruban de Moebius qui ne permettent guère de faire un choix franc de la normale, fut-il conventionnel.

Les surfaces peuvent avoir un bord ou pas suivant que les courbes $\{\vec{X}(0, v) \text{ avec } 0 < v < 1\}$, $\{\vec{X}(1, v) \text{ avec } 0 < v < 1\}$, $\{\vec{X}(u, 0) \text{ avec } 0 < u < 1\}$, $\{\vec{X}(u, 1) \text{ avec } 0 < u < 1\}$ s'identifient ou non les unes avec les autres.

Si elle ont un bord on les appelle des surfaces à bord. Sinon ce sont des surfaces sans bord.

Les lieux de l'espace : les domaines (ou régions)

- Un second type de lieux de l'espace est celui des domaines

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{X}(u, v, w) = X(u, v, w) \vec{k}_x + Y(u, v, w) \vec{k}_y + Z(u, z, w) \vec{k}_z \\ \text{avec } 0 < u < 1 ; 0 < v < 1 \text{ et } 0 < w < 1 \end{array} \right\}$$

où X, Y, Z sont des fonctions de $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ continues, différentiables, telles que le produit mixte $\partial_u \vec{X} \cdot (\partial_v \vec{X} \times \partial_w \vec{X})$ ne s'annule pas et telles que $(u, v, w) \rightarrow \vec{X}(u, v, w)$ soit une injection de $]0, 1[\times]0, 1[\times]0, 1[$ dans E_3 .

A priori un domaine D a un bord qui correspond à une surface notée ∂D ; si cette surface est lisse le domaine est qualifié aussi de lisse.

Celui des deux champs de normales de la surface qui est orienté de façon que les normales pointent vers l'extérieur de D est appelé le champ de normales extérieures du bord ∂D .

Champs de scalaires et de vecteurs

- Un domaine $D \subset E_3$ étant donné, un champ de scalaire ϕ est une fonction de $D \rightarrow \mathbb{R}$
- Et de la même façon un champ de vecteur $\vec{v}$ est une fonction à valeur vectorielle dans $E_3(\text{unité})$ comme décrit planche 7 mais sans nécessairement faire référence aux coordonnées cartésiennes, donc de $D \rightarrow E_3(\text{unité})$
- Étant donné une courbe

$$C = \{\vec{X}(u) = X(u) \vec{k}_x + Y(u) \vec{k}_y + Z(u) \vec{k}_z \text{ avec } 0 < u < 1\}$$

la **circulation du champ de vecteur** $\vec{v}$ le long de la courbe est définie par

$$\int_C \vec{v} \cdot \vec{\tau} dL = \int_0^1 \vec{v}(\vec{X}(u)) \cdot \frac{d\vec{X}(u)}{du} du$$

(faire le calcul)

Leur intégration sur des lieux

► Étant donné une surface

$$S = \left\{ \begin{array}{l} \vec{X}(u, v) = X(u, v) \vec{k}_x + Y(u, v) \vec{k}_y + Z(u, z) \vec{k}_z \\ \text{avec } 0 < u < 1 \text{ et } 0 < v < 1 \end{array} \right\}$$

orientée par la donnée de son vecteur normal $\vec{n}$, le **flux du champ de vecteur** $\vec{v}$ à travers la surface S est défini par

$$\int_S \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \int_0^1 du \int_0^1 dv \vec{v}(\vec{X}(u, v)) \cdot \left(\partial_u \vec{X}(u, v) \times \partial_v \vec{X}(u, v) \right)$$

(faire le calcul)

Les opérateurs différentiels : le gradient

- Prenons une fonction f de $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Sa dérivée $f'(x)$ est parfaitement définie par

$$\forall a, b : \int_a^b f'(x) dx = f(b) - f(a)$$

- Prenons maintenant une fonction ϕ de $E_3 \rightarrow \mathbb{R}$ et supposons que son gradient soit défini de façon analogue comme le champ de vecteur $\vec{\nabla}\phi$ pour lequel

$$\forall C : \int_C (\vec{\nabla}\phi) \cdot \vec{\tau} dL = \phi(\vec{X}(1)) - \phi(\vec{X}(0))$$

Cette définition coïncide avec celles faites précédemment du gradient. (faire le calcul)

- C'est une définition intrinsèque (sans nécessiter le recours aux coordonnées) du gradient.

Les opérateurs différentiels : la divergence

► Prenons ensuite un champ de vecteurs $\vec{v}$, un domaine D de bord ∂D (une surface donc) et supposons que sa divergence soit définie comme le champ de scalaires $\vec{\nabla} \cdot \vec{v}$ tel que

$$\forall D : \int_D (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) dV = \int_{\partial D} \vec{v} \cdot \vec{n} dS$$

L'intégrale de la divergence de $\vec{v}$ sur D est le flux de $\vec{v}$ sur le bord ∂D de D orienté vers l'extérieur.

► Cette définition coïncide avec celle faite précédemment (en coordonnées cartésiennes) de la divergence (et si on adopte celle-ci, celle-la porte le nom de théorème de Green-Ostrogradsky (faire le calcul))

► C'est la définition intrinsèque de la divergence.

Calcul différentiel en coordonnées cylindriques

- Les coordonnées cylindriques sont r , θ et z telles que

$$\vec{x} = r \vec{k}_r + z \vec{k}_z \quad \text{avec} \quad \vec{k}_r = \cos \theta \vec{k}_x + \sin \theta \vec{k}_y \\ \text{et} \quad \vec{k}_\theta = -\sin \theta \vec{k}_x + \cos \theta \vec{k}_y$$

- Un champ scalaire ϕ dépend donc de r , θ et z ainsi que son gradient $\vec{\nabla}\phi$; la définition intrinsèque permet de trouver l'expression du gradient en composante qui est

$$\vec{\nabla}\phi = \partial_r \phi \vec{k}_r + \frac{\partial_\theta \phi}{r} \vec{k}_\theta + \partial_z \phi \vec{k}_z$$

(le faire)

- Un champ de vecteurs $\vec{v}$ s'écrit : $\vec{v} = v_r \vec{k}_r + v_\theta \vec{k}_\theta + v_z \vec{k}_z$ et la définition intrinsèque permet de trouver l'expression de sa divergence qui est

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \frac{\partial_r(r v_r)}{r} + \frac{\partial_\theta v_\theta}{r} + \partial_z v_z$$

(le faire)

Application à l'équation de diffusion

- L'équation de diffusion

$$\partial_t c - \vec{\nabla} \cdot (\alpha \vec{\nabla} c) = 0 \text{ dans } D \subset E_3$$

peut maintenant être sinon démontrée, du moins commentée avec d'autres mots que ceux qu'on a employés jusqu'ici.

- Intégrons la sur un domaine $\delta D \subset D$, il vient

$$\frac{d}{dt} \int_D c \, dV + \int_{\partial \delta D} (-\alpha \vec{\nabla} c) \cdot \vec{n} \, dS$$

soit

$$\frac{d\delta Q}{dt} + \delta\Phi = 0$$

où $\delta Q = \int_{\delta D} c \, dV$ est la masse de sel dans le domaine δD et

$\delta\Phi = \int_{\partial \delta D} (-\alpha \vec{\nabla} c) \cdot \vec{n} \, dS$ un terme qui reste à analyser.

Le flux massique de sel

- On appelle flux massique de sel la quantité

$$\vec{\Phi} = -\alpha \vec{\nabla} c$$

Son unité est le $kg/(m^2 s) = m^2/s \times kg/m^3 \times 1/m$ et dans un mécanisme diffusif la 1^o loi de Fick postule que la quantité de sel qui traverse une surface S dans la direction de sa normale $\vec{n}$ et par unité de temps est

$$\Phi = \int_S \vec{\Phi} \cdot \vec{n} dS$$

- Si la surface S est le bord $\partial\delta D$ d'un domaine δD alors la quantité $\delta\Phi = \int_{\partial\delta D} \vec{\Phi} \cdot \vec{n} dS$ de sel qui quitte ce domaine s'équilibre avec la variation temporelle $d\delta Q/dt$ de la quantité δQ de sel présente dans le domaine, soit

$$\frac{d\delta Q}{dt} + \delta\Phi = 0 \Leftrightarrow \frac{d}{dt} \int_D c dV + \int_{\partial\delta D} \left(-\alpha \vec{\nabla} c \right) \cdot \vec{n} dS = 0$$

c'est la 2^o loi de Fick ; les deux lois sont équivalentes à l'équation de diffusion.

Le gain que procure la considération du flux massique de sel

- Si le domaine D qui contient de l'eau salé (dont la concentration initiale est une donnée) est entièrement une **paroi imperméable** au sel (par exemple du verre ou l'interface eau/air si on admet que le sel ne se dissout pas dans l'air) alors, en plus de l'équation de diffusion dans D on peut écrire que

$$\vec{\Phi} \cdot \vec{n} = 0 \text{ sur } \partial D$$

pour traduire que le flux massique de sel à la paroi ∂D n'est pas dirigé dans une direction qui ferait sortir du sel du domaine D

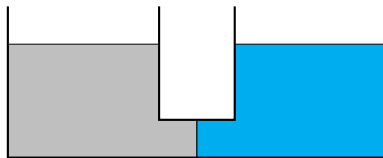
- Si au contraire une portion $\Gamma \subset \partial D$ de ce bord ∂D est faite de sel, celui-ci se dissout dans l'eau et on ne peut pas écrire cette relation sur Γ ; et c'est là qu'on utilise une autre condition comme celle de fixer la concentration à la valeur maximale qu'elle peut voir sur cette partie du bord, soit

$$c = c_{\max} \text{ sur } \Gamma$$

Faire maintenant l'exercice No 2

Il ne doit plus rien manquer !

On connecte une cuve remplie d'eau salée avec une concentration de $30g/l$ à une autre identique remplie d'eau pure

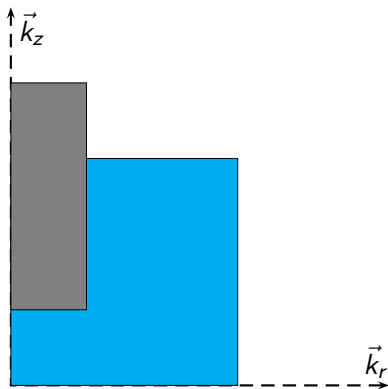


► Dans l'approximation 2D (géométrie cylindrique par rapport à la direction transverse au plan de la feuille), faire une figure comportant des noms de domaines et de bords de domaines et écrire les équations du problème d'évolution de la concentration en spécifiant toutes les variables utilisées.

Pour les illustrations, cf. script FreeFem++ L2diffusion.edp

Exercice No 3

On plonge un bâton de sel à symétrie axisymétrique dans un récipient lui-même axisymétrique de même axe et rempli d'eau pure. La section méridionale de la géométrie est donc (gris pour le bâton, bleu pour l'eau)



Écrire les équations permettant le calcul de la concentration en sel au cours du temps.