Modélisation d'un phénomène de diffusion

J. Erhel

Janvier 2014

1 Phénomène de diffusion

voir http://www.breves-de-maths.fr/la-conduction-un-moteur-universel/

1.1 Exemples de diffusion

Le phénomène de diffusion ou de conduction est de façon générale un transport de masse ou d'énergie, d'une zone de forte valeur d'une quantité physique vers une zone de faible valeur de cette même quantité. Voici quatre exemples:

- diffusion ou conduction de la chaleur: transfert d'énergie thermique grâce à une différence de température entre deux zones.
- conduction d'un courant électrique: déplacement de particules chargées grâce à une différence de potentiel électrique.
- diffusion d'une espèce chimique en solution dans un fluide: transport d'une espèce chimique grâce à une différence de concentration.
- écoulement de l'eau dans une nappe phréatique: transfert de volumes d'eau grâce à une différence de pression ou de hauteur.

1.2 Notions de conductivité et de conservation

Dans chacun des cas, on mesure une quantité physique:

- la température,
- le potentiel électrique,
- la concentration,
- la charge hydraulique (qui est la somme de la pression et de la hauteur).

La différence de cette quantité entre deux zones induit un transport irréversible d'énergie ou de masse, dont la vitesse dépend des propriétés du système. Dans un milieu très conducteur, la vitesse de diffusion est forte et inversement, dans un milieu faiblement conducteur, la vitesse de diffusion est faible. Plus précisément, la vitesse de diffusion est proportionnelle à l'écart de quantité entre les deux zones et le coefficient de proportion est la conductivité du milieu. Cette relation est une loi physique, dite de comportement, qui porte un nom différent suivant le phénomène considéré.

- chaleur: loi de Fourier
- électricité: loi d'Ohm
- chimie: loi de Fick
- écoulement: loi de Darcy

La diffusion respecte aussi une deuxième loi, qui est une loi fondamentale de conservation, d'énergie ou de masse. Ainsi, lorsqu'on considère un volume dans le système, on peut définir des flux à travers ce volume. La loi de conservation stipule que le flux entrant doit être égal au flux sortant.

1.3 Différents types de diffusion

La quantité mesurée varie en général dans l'espace et cette variation spatiale induit la diffusion.

Lorsque la quantité n'évolue pas au cours du temps, le système est à l'équilibre, on dit qu'il est stationnaire. A contrario, si la quantité varie au cours du temps, le système est dynamique.

Lorsque la conductivité ne dépend pas de la quantité mesurée, le phénomène de diffusion est linéaire. En effet, la loi de comportement exprime une proportion entre la vitesse et la différence de quantité physique. De même, la loi de conservation exprime une proportion entre des flux, donc entre des vitesses.

Par contre, lorsque la conductivité dépend de la quantité mesurée, le système devient non linéaire. En effet, il y a une rétroaction qui modifie la conductivité, alors que cette conductivité modifie la vitesse de diffusion.

1.4 Ecoulement de l'eau dans une nappe phréatique

voir http://www.irisa.fr/sage/jocelyne/cours/INSA/insa1-2012.ppt

notion de milieu poreux; exemple du sable; notions de perméabilité et porosité ;

loi de Darcy: histoire de Darcy, expériences, fontaines de Dijon ;

notion de charge hydraulique; piézomètre

données et variables:

- conductivité K exprimée en m/s
- porosité: constante égale à un dans la suite
- section S, longueur h

- charge $p = P/\rho g + z$ exprimée en m
- débit G en m^3/s

loi de Darcy: $G = -KS(p_2 - p_1)/h$
vitesse de Darcy: $v = G/S$ donc $v = -K(p_2 - p_1)/h$.
loi de conservation de la masse, avec une source Q, dans le cas stationnaire: $(G2 - G1) = Q$

1.5 Modélisation et simulation d'un problème de diffusion

Pour étudier les phénomènes de diffusion, on peut construire un dispositif expérimental, qui permet par exemple de vérifier la loi de comportement et de mesurer la conductivité. La plupart du temps, le phénomène de diffusion interfère avec d'autres phénomènes et il est difficile de l'isoler. De plus, il est parfois difficile de modifier les conditions d'expérience pour étudier l'impact d'un changement.

On peut aussi développer un modèle, qui est une représentation de la réalité, pour analyser les caractéristiques principales d'une diffusion.

2 Modèle mathématique de la diffusion

La modélisation va exprimer mathématiquement les lois de comportement et de conservation. Le milieu où a lieu le phénomène de diffusion est un volume 3D, ou une surface 2D, ou un intervalle 1D.

2.1 Modèle 1D stationnaire et linéaire

Nous allons maintenant détailler le modèle stationnaire linéaire avec une géométrie 1D. Le système n'évolue pas dans le temps et la conductivité ne dépend pas de la quantié. Le milieu est par exemple un bâton idéalisé par un segment.

Pour définir la quantité en tout point x d'un intervalle 1D, on utilise une fonction $p(x)$; de même, on utilise une fonction $v(x)$ pour la vitesse de diffusion. Les données physiques sont aussi des fonctions, comme la conductivité $K(x)$ et la source $q(x)$.

Considérons d'abord la loi de comportement. On introduit la notion de gradient, qui est la différence des valeurs entre deux points divisée par la distance entre ces deux points. Le gradient vaut donc $\frac{p(x+h)-p(x)}{h}$ entre deux points d'un bâton à une distance h (*dessin*). La loi de comportement définit la vitesse $v(x)$ en un point x, en faisant tendre la distance h vers 0. Mathématiquement, la limite du gradient, quand h tend vers 0, est par définition la dérivée $\frac{dp}{dx}(x)$. La loi de comportement s'écrit alors

$$v(x) = -K(x)\ \frac{dp}{dx}(x).$$

On a simplement traduit la proportion entre la vitesse et le gradient de la quantité, avec la conductivité comme coefficient de proportion.

Considérons maintenant la loi de conservation. On analyse les flux dans un intervalle de longueur h et là encore, on calcule la limite, quand h tend vers 0. La loi s'écrit alors

$$\frac{dv}{dx}(x) = q(x),$$

où $\frac{dv}{dx}(x)$ est la dérivée de la vitesse et où $q(x)$ mesure des entrées ou sorties de flux dues à des sources ou des fuites.

On obtient ainsi l'équation différentielle linéaire

$$\frac{d(K dp/dx)}{dx}(x) + q(x) = 0.$$

L'inconnue est la fonction $p(x)$, qu'il faut réussir à calculer partout dans le bâton.

Cette équation est incomplète lorsqu'on considère un bâton de longueur finie, avec des bords, donc un intervalle $[0, L]$: en effet, les lois sont valables à l'intérieur du domaine, l'intervalle $]0, L[$ et il faut des équations pour obtenir les valeurs aux bords $p(0)$ et $p(L)$.

Il y a plusieurs conditions possibles: le plus simple est de fixer p, autrement dit connaître la valeur de la quantité aux bords. On peut aussi fixer v, autrement dit connaître le flux aux bords.

Si on fixe p au moins à un bout, on peut démontrer l'existence et l'unicité de la solution au problème posé, en faisant des hypothèses sur la fonction de conductivité $K(x)$ et sur la fonction de source $q(x)$.

Prenons un exemple très simple: $K(x) = k$ et $q(x) = 0$.

Alors l'équation différentielle devient $\frac{d^2p}{dx^2}(x) = 0$ donc $dp/dx(x) = c$ et $p(x) = cx + p(0)$.

On a donc $p(L) = cL + p(0)$ donc $c = \frac{p(L)-p(0)}{L}$.

La solution de l'équation est donc $p(x) = \frac{p(L)-p(0)}{L}x + p(0)$ et $v(x) = -k(p(L) - p(0))/L$.

Dans cet exemple, on sait calculer la fonction p. En général, le théorème d'existence est non constructif; on sait que p existe mais on ne sait pas exprimer p avec une fonction simple. Il faut alors calculer une solution approchée. Avec des méthodes mathématiques, on définit un problème plus simple, dont la solution est une bonne approximation de la solution exacte. Cette solution peut Ãªtre calculée sur ordinateur Ã l'aide d'algorithmes numériques.

2.2 Modèles 2D et 3D stationnaires et linéaires

En 2D, un point est repéré par ses coordonnées (x, y) dans un repère et il faut généraliser avec des fonctions à deux variables: la charge $p(x, y)$, etc. La vitesse est un vecteur de fonctions avec deux composantes, défini par $\overrightarrow{v}(x, y) = \begin{pmatrix} v_x(x, y) \\ v_y(x, y) \end{pmatrix}$. *(dessin)*

Le gradient est aussi un vecteur avec deux composantes, comme la vitesse. Il faut tenir compte de la variation spatiale dans la direction horizontale et dans la direction verticale. Quand on fait tendre la distance horizontale vers 0, la limite du gradient horizontal (la première composante du vecteur) est la dérivée partielle $\partial p/\partial x(x,y)$; de même, la limite du gradient vertical (la deuxième composante du vecteur) est la dérivée partielle $\partial p/\partial y(x,y)$. On note $\overrightarrow{\nabla} p(x,y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial x} \\ \frac{\partial p}{\partial y} \end{pmatrix}$ le gradient de p au point (x,y).

Dans le cas où la conductivité est isotrope (la même dans toutes les directions), c'est un nombre et la loi de comportement s'écrit

$$\overrightarrow{v}(x,y) = -K(x,y)\overrightarrow{\nabla} p(x,y).$$

Pour une conductivité anisotrope, l'écriture est un peu plus compliquée.

La variation de flux totale doit aussi tenir compte des directions, en ajoutant la variation horizontale et la variation verticale. On définit la fonction divergence du vecteur vitesse par $\nabla.v(x,y) = \partial v_x/\partial x(x,y) + \partial v_y/\partial y(x,y)$. La loi de conservation s'écrit

$$\nabla.\overrightarrow{v}(x,y) = q(x,y).$$

En 3D, un point a trois coordonnées (x,y,z); on utilise une fonction à trois variables $p(x,y,z)$ et la vitesse $v(x,y,z) = \begin{pmatrix} v_x(x,y,z) \\ v_y(x,y,z) \\ v_z(x,y,z) \end{pmatrix}$ est un vecteur avec trois composantes. Le gradient de p est aussi un vecteur avec trois composantes, les trois dérivées partielles dans chacune des trois directions. La fonction divergence est la somme des trois dérivées partielles de la vitesse. On écrit les deux lois de la même façon qu'en 2D:

$$\begin{aligned} \overrightarrow{v}(x,y,z) &= -K(x,y,z)\overrightarrow{\nabla} p(x,y,z), \\ \nabla.\overrightarrow{v}(x,y,z) &= q(x,y,z) \end{aligned}$$

Les lois de comportement et de conservation sont ainsi traduites en équations, dont les inconnues sont les fonctions $p(x)$ et $v(x)$. On peut aussi écrire une seule équation avec la fonction $p(x)$. Cette équation aux dérivées partielles est le modèle mathématique exprimant le phénomène de diffusion. Il doit être complété par des conditions aux bords du domaine. Par exemple, la fonction $p(x)$ est connue ou le flux est connu.

Avec des hypothèses sur la conductivité, la source et les conditions aux bords, on peut démontrer mathématiquement que l'équation a une solution unique. De plus, la solution bouge seulement un peu lorsque les données (ici, la conductivité, la source et les conditions aux bords) bougent un peu. On dit que le problème est bien posé. Sauf pour des cas simples, il n'est en général pas possible de déterminer une formule pour la fonction $p(x)$. Néanmoins, parce qu'on sait que cette fonction existe et est unique, on peut définir un procédé mathématique qui définit une approximation de cette fonction. Pour cela, on va approcher les dérivées sans passer à la limite, mais en gardant la petite longueur h dans le gradient et dans la variation de flux. C'est un peu plus compliqué que cela mais c'est le fil conducteur. On démontre que lorsque h tend vers 0, alors la solution approchée $p_h(x)$ tend vers la solution exacte $p(x)$, dans un sens mathématique qui est défini de façon rigoureuse.

La fonction $p_h(x)$ est donc la solution d'un problème approché. Dans le cas linéaire, il s'agit d'un système linéaire de N équations avec N inconnues, où N est le nombre de variables qui caractérisent la fonction p_h. On sait résoudre un système linéaire, avec des algorithmes spécifiques lorsque N est grand.

2.3 Modèles dynamiques et non linéaires

Pour tenir compte de l'évolution temporelle, les fonctions dépendent aussi de la variable temps t, comme de la variable d'espace. Le modèle est un peu plus compliqué, avec des dérivées partielles en temps et en espace. Une méthode d'approximation consiste à approcher d'abord les dérivées en espace, puis celles en temps.

Dans le cas non linéaire, les preuves d'existence et d'unicité sont plus ardues. Le système d'équations approché est aussi non linéaire et plus difficile à résoudre.

Le système étudié peut coupler plusieurs phénomènes de diffusion ou un phénomène de diffusion et un autre phénomène physique. Par exemple, un modèle de diffusion-réaction peut analyser deux espèces chimiques qui diffusent dans un fluide et qui réagissent entre elles, comme dans le modèle de morphogenèse développé par Turing. Ces modèles couplés sont complexes, avec des interactions entre les variables, et leur étude est compliquée.