

I Mise en équation du modèle à cœur rétrécissant.

1) Etude de la diffusion du fluide dans la couche de produit poreux

Q1) Un volume V de solide non poreux est plus lourd qu'un même volume V de solide poreux puisque les pores n'ont pas de masse donc $\rho_s > \rho_{app}$

La porosité est une fraction volumique donc comprise entre 0 et 1.

Soit un volume V de solide poreux, il contient V_{pore} de pores et $V - V_{pore}$ de solide donc sa masse est $m = \rho_s \times (V - V_{pore})$ et c'est aussi $m = \rho_{app} \times V$. On introduit alors $\epsilon = \frac{V_{pore}}{V}$

d'où $\rho_{app} = \rho_s (1 - \epsilon)$ soit $\epsilon = \frac{\rho_s - \rho_{app}}{\rho_s} = \frac{1250}{2500} = 0,500$.

Rmq. je ne suis pas sûr du tout qu'il y ait 4 chiffres significatifs à ρ_s et ρ_{app} je table plutôt sur 2, voire 3.

si c'est 2: $\epsilon = 0,50$
 si c'est 3: $\epsilon = 0,500$

Q2) On va négliger les effets de bord

et faire comme si la particule était infinitement longue suivant (Oy) et (Oz) donc invariante par translation suivant ces directions.

La situation est parfaitement symétrique par rapport au plan $x = e$. donc on ne va étudier que la partie où $x \in [0, e]$.

2) Etablissement de l'équation de la diffusion de A dans la couche de produit poreux B

Rmq p3, B était un réactif et non le produit poreux.

Q3) La loi de Fick dit que le flux de particules est dirigé dans le sens des densités volumiques décroissantes.

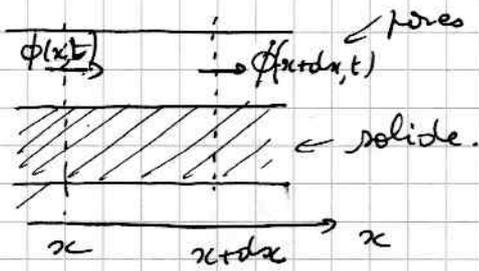
n est la densité volumique en m^{-3}

\vec{j} est le vecteur densité volumique de flux de particules en $m^{-2} s^{-1}$

(car $\vec{\phi} = \int_{\vec{n}} \vec{j} \cdot d\vec{S}$)

D est le coefficient de diffusion en $m^2 s^{-1}$.

Q4)



La surface de la zone où le fluide circule est $E \times S$.

Je fais un bilan de particules sur la tranche de longueur dx entre t et $t+dt$.

$$N(t+dt) = N(t) + \phi(x,t) dt - \phi(x+dx,t) dt.$$

or $N = \iiint m dV = n ES dx$.

(il n'y a pas de fluide dans le solide)

et $\phi = \iint \vec{j} \cdot d\vec{S} = j \times ES$.

seule la surface des pores est traversée par le flux.

d'où $[n(t+dt) - n(t)] ES dx = [j(x+dx,t) - j(x,t)] ES dt$.

DL $\frac{\partial n}{\partial t} \times ES dx dt = - \frac{\partial j}{\partial x} \times dx ES dt$

De plus $j = -D \frac{\partial n}{\partial x}$ à 1 D d'où $E \frac{\partial n}{\partial t} = ED \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$

D_e .

Q5) $D_e = ED$ est en $m^2 s^{-1}$

$D_e \frac{\partial C}{\partial x}$ est en $m^2 s^{-1} \cdot mol \cdot m^{-3} \cdot m^{-1} = mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$

et $k_0 C$ (et $k_c C$ aussi) est en $m \cdot s^{-1} \cdot mol \cdot m^{-3} = mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$

C'est bien homogène

On écrit le flux en $x=0^-$ en $x=0^+$

le flux molaire = $j \times \frac{1}{A}$
 $\phi_0 = j_m(x=0) \times ES = -D_e S \frac{\partial C}{\partial x}(x=0)$

ϕ_0 = le flux obtenu par conduction-convection.

C'est le même flux puisqu'il n'y a pas d'accumulation ni autre au niveau de l'interface.

Or on peut faire un tableau d'analogies:

diff thermique	$\vec{J}_{th} = -\lambda \vec{grad}(T)$	T	$\vec{J}_{th} = h (T_s - T_f) \vec{n}$
diff. de particules	$\vec{J}_{mol} = -D \vec{grad}(C)$	C	$\vec{J}_{mol} = coeff (C_s - C_f) \vec{n}$

ici ϕ_0 est orienté du fluide vers le solide
 c'est donc $\phi_0 = k_0 (C_e - C_s) S$

vers le fluide
 vers le solide
 c'est k_0
 c'est $C_s - C_e$

$$\left. \begin{array}{l} \text{avec } C(0) = C_s = B \\ \text{et } C(x) = Kx + B \end{array} \right\} K = \frac{C(x) - C_0}{x}$$

$$\text{et finalement } F_A = -D_e S \frac{C(x) - C_s}{x}$$

ça m'intrigait mieux
en fonction de x .

$$\text{càd. } \boxed{F_A = D_e S \left(\frac{C_s - C_x}{x} \right)}$$

Ouf, l'encre de signe est corrigée dans (6) (au prix d'une 2^e encre de calcul)

Q9) C'est m , ou C la concentration.

F_A est l'analogie de I

C est l'analogie de V , le potentiel.

$$\left. \begin{array}{l} F_A \text{ est l'analogie de } I \\ C \text{ est l'analogie de } V, \text{ le potentiel.} \end{array} \right\} \text{d'où } R_{\dots} = \frac{\Delta C}{F_A}$$

$$R_{te} = \frac{1}{k_D S}$$

$$R_{ti} = \frac{x}{D_e S}$$

$$R_{rc} = \frac{1}{k_c S}$$

$$\text{Alors } \boxed{F_A = \frac{C_e - C_s}{R_{te}} = \frac{C_s - C_x}{R_{ti}} = \frac{C_x - 0}{R_{rc}}}$$

↑ oublié de c .
(ou plutôt changement de notation, car après, c'est encore l_2)

$$\text{On va réécrire ça } C_e - C_s = R_{te} F_A$$

$$C_s - C_x = R_{ti} F_A$$

$$C_x - 0 = R_{rc} F_A$$

et on somme

$$C_e - 0 = (R_{te} + R_{ti} + R_{rc}) F_A$$

$$\text{ou encore } \boxed{F_A = \frac{C_e}{R_{te} + R_{ti} + R_{rc}}}$$

$$\text{où } \boxed{R_{eq} = R_{te} + R_{ti} + R_{rc} = \left(\frac{1}{k_D} + \frac{x}{D_e} + \frac{1}{k_c} \right) \frac{1}{S}}$$

Les résistances sont en série, R_{eq} est bien leur somme.

Q10)

$A + \nu B \rightarrow ?$ peu impure

Rmq: B est re-devenu un réactif et non le produit pur.

$$\text{d'où } \left| \frac{dN_A}{dt} = \frac{1}{\nu} \frac{dN_B}{dt} \right.$$

(si $\nu > 1$, C_A varie 3 fois que C_B)

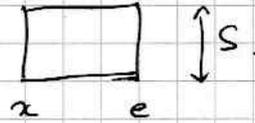
En outre, tout le A qui arrive en $x = x_g$ est consommé (en "moins")
d'où $dN_A = -\phi_A dt$ (N est la quantité de matière)

(2)

D'où
$$F_A = - \frac{dN_A}{dt} = - \frac{1}{\nu} \frac{dN_B}{dt}$$

Beut en réactif donc N_B diminue dans le temps

Q11) $N_B(x) = ?$



Je vais plutôt chercher la masse dans le volume considéré: $S \times (e-x)$

$$m_B = M_B N_B \quad \text{d'une part}$$

$$= \rho_B S(e-x) \quad \text{d'autre part}$$

$$N_B(x) = \frac{\rho_B S(e-x)}{M_B}$$

d'où
$$\frac{dN_B}{dt} = \frac{\rho_B S}{M_B} \times \left(- \frac{dx}{dt} \right)$$

ainsi
$$F_A = \frac{\rho_B S}{M_B \nu} \frac{dx}{dt}$$
 où
$$Q = \frac{\rho_B S}{M_B \nu}$$

Non demandé:

$$Q \text{ donne } F_A = \frac{c_e S}{\left(\frac{1}{k_0} + \frac{x}{De} + \frac{1}{k} \right)} \quad \text{et } Q_{10} \quad F_A = \frac{\rho_B S}{M_B \nu} \frac{dx}{dt}$$

d'où, en effet
$$\frac{dx}{dt} \underbrace{\frac{\rho_B S}{M_B \nu} \frac{1}{c_e S}}_K \left(\frac{1}{k_0} + \frac{x}{De} + \frac{1}{k} \right) = 1.$$

$$K \left(\frac{1}{k_0} + \frac{x}{De} + \frac{1}{k} \right) dx = dt$$

Q12) on intègre
$$\int_0^{t_f} dt = K \int_0^{x_f} \left(\frac{1}{k_0} + \frac{x}{De} + \frac{1}{k} \right) dx$$

$$t_f = K \left(\frac{x_f}{k_0} + \frac{x_f^2}{2De} + \frac{x_f}{k} \right)$$

j'introduis e pour avoir $\frac{x_f}{e}$ partout.

$$t_f = \underbrace{\frac{Ke}{k_0}}_{t_{oe}} \left(\frac{x_f}{e} \right) + \underbrace{\frac{Ke^2}{2De}}_{\tau_{oi}} \left(\frac{x_f}{e} \right)^2 + \underbrace{\frac{Ke}{k}}_{t_{oc}} \left(\frac{x_f}{e} \right)$$

caFD

ohi. car $e - k_0$.

Q13)
$$X_B = \frac{N_{B0} - N_B}{N_B}$$

$$Q14) \quad \frac{N_{B0}}{e} = \frac{N_B}{e-x_f} = \frac{N_{B0}-N_B}{x_f}$$

$$\text{d'où } \boxed{X_B = \frac{N_{B0}-N_B}{N_B} = \frac{x_f}{e}}$$

c'est la fraction molaire

$$\text{d'où } \boxed{t_f = t_{oe} X_B + t_{oi} X_B^2 + t_{oc} X_B}$$

Q15) Tout est connu quand $X_B=1$ ($x_f=e$) d'où

$$\boxed{t_0 = t_{oe} + t_{oi} + t_{oc}}$$

Q16) Je suppose que c'est la plaque qui a une épaisseur $2e$.

Si e est multipliée par 2 ($e \rightarrow e' = 2e$), alors

$$t_{oe} \text{ aussi } (t_{oe}' = 2t_{oe})$$

$$t_{oi} \text{ est multiplié par 4 } (t_{oi}' = 4t_{oi})$$

$$t_{oc} \text{ est multiplié par 2 } (t_{oc}' = 2t_{oc})$$

$$\text{D'où } t_0' = 2t_{oe} + 4t_{oi} + 2t_{oc} = 120 + 1200 + 240$$

$$t_0' = 1560 \Delta$$

$$\text{au lieu de } t_0 = 60 + 300 + 120 = 480 \Delta$$

$$t_0 \text{ est donc multiplié par } \frac{t_0'}{t_0} = \underline{3,25}$$

(les chiffres significatifs ne sont pas cohérents dans l'énoncé)

Il n'y a pas de relation simple entre t_0 , t_0' , e et e' . Ça dépend de t_{oi} , t_{oe} et t_{oc} pour chaque réaction

$$Q17) \quad t_{oi} \gg t_{oe} \text{ si } K \frac{e}{h_B} \ll K \frac{e^2}{2De} \quad \text{soit } \boxed{h_B \gg \frac{2De}{e}}$$

$$t_{oi} \gg t_{oc} \text{ si } K \frac{e^2}{2De} \gg K \frac{e}{h} \quad \text{soit } \boxed{h \gg \frac{2De}{e}}$$

Dans ce cas, l'étape cinétiquement déterminante est la diffusion interne. (c'est d'autant plus probable que e est grand).

Partie II. Résolution numérique du problème

Q18) On a $P = 2,5 \text{ bars}$ dunc $P_A = x_{O_2} P$ (pression partielle)
et $x_{O_2} = 0,21$
 $= 0,53 \text{ bars}$
 $P_A = 5,3 \cdot 10^4 \text{ Pa}$

L'écriture des chiffres significatifs dans l'énoncé et problématique
 f_B est donnée avec 5 chiffres, le reste avec 2 ou 3, voire 1 seul
pour ε . On donnera tout avec 2 chiffres significatifs.

Or $P_A V = n RT$ avec $C_e = \frac{n}{V}$

alors $C_e = \frac{P_A}{RT} = 5,4 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$

Q19) $t_0 = t_{oe} + t_{oi} + t_{oc}$

$$k = \frac{f_B}{C_e \pi_B} = \frac{4,13 \cdot 10^3}{5,4 \cdot 37,5 \cdot 10^{-3}} = 7,9 \cdot 10^3$$

$$t_{oe} = k \frac{e}{k_D} = 0,079 \text{ s} = t_{oc}$$

$$t_{oi} = \frac{ke^2}{2De} = 3,1 \cdot 10^3 \text{ s}$$

$$t_0 = t_{oi} = 3,1 \cdot 10^3 \text{ s} = 52 \text{ min}$$

C'est clairement le transport par diffusion (interne) qui est limitant.

Q20) def $C_{\text{gas}}(x, P, T)$:

return $x * P / (8,31 * T)$ # en unités SI.

Q21) 30 intervalles, c'est 31 points, donc de 0 à 30.

$$N = 30$$

$$\Delta x = e / N$$

$$\text{vect}_x = [i * \Delta x \text{ for } i \text{ in range}(N+1)]$$

Q22) $C(x, t + \Delta t) = C(x, t) + \frac{\partial C}{\partial t}(x, t) * \Delta t$

Q23) $\frac{\partial C}{\partial t}(x_i, t_k) = \frac{1}{\Delta t} (C(x_i, t_{k+1}) - C(x_i, t_k)) = \frac{1}{\Delta t} (C_{i,k+1} - C_{i,k})$

Q24) On a fait des DL2 pour avoir Δx^2

Q25) $E \frac{\partial C}{\partial t} = D_e \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ (2) dérivé

$$\frac{E}{\Delta t} (C_{i,k+1} - C_{i,k}) = D_e \frac{1}{(\Delta x)^2} (C_{i+1,k} - 2C_{i,k} + C_{i-1,k})$$

d'où $C_{i,k+1} = C_{i,k} \left(1 - \frac{2D_e \Delta t}{E(\Delta x)^2}\right) + \frac{D_e \Delta t}{E \Delta t} (C_{i+1,k} + C_{i-1,k})$

D'où, avec $r = \frac{D_e \Delta t}{E(\Delta x)^2}$ en $m^2 s^{-1} \cdot s \cdot m^{-2}$ c'est sans unité

$$C_{i,k+1} = C_{i,k} + r (C_{i+1,k} - 2C_{i,k} + C_{i-1,k}) \quad \text{C.F.D.}$$

Q26) On veut $\frac{D_e \Delta t}{E \Delta x^2} < 1/2$ d'où $\Delta t < \frac{E \Delta x^2}{2D_e}$

Il faut $\Delta t < 0,22 \cdot 10^{-3} s$

$\Delta t = 1,00 \cdot 10^{-4} s$ convient donc.

Q27) Il va falloir $3,15 \cdot 10^7$ points. (et si on laissait plutôt Δx en augmentant N ?)

Q28) (3) $D_e \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = k_D (C_e - C_s)$ d'après l'énoncé
 \uparrow \nwarrow $C(x=0)$ (D'après moi, il y a un signe -)
 C dans la phase gazeuse

cela donne $D_e \frac{C_{1,k} - C_{0,k}}{\Delta x} = k_D (C_e - C_{0,k})$

d'où $C_{0,k} \left(-\frac{D_e}{\Delta x} + k_D\right) = k_D C_e - \frac{D_e C_{1,k}}{\Delta x}$

Je divise tout par k_D et je divise par $(1 - \frac{D_e}{k_D \Delta x}) = 1 - s$.

donc $C_{0,k} = \frac{C_e - s C_{1,k}}{1 - s}$

Ce n'est pas ce qui est attendu, à moins de poser $s = -\frac{D_e}{k_D \Delta x}$.

Je prends donc pendant mon équation corrigée.

$$D_e \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = k_D (C_s - C_e)$$

$$D_e \frac{C_{1,k} - C_{0,k}}{\Delta x} = k_D (C_{0,k} - C_e)$$

$C_{0,k} \left(k_D + \frac{D_e}{\Delta x}\right) = k_D C_e + \frac{D_e C_{1,k}}{\Delta x}$ d'où

$$C_{0,k} = \frac{C_e + s C_{1,k}}{1 + s}$$

avec $s = \frac{D_e}{k_D \Delta x}$

et ça confirme l'absence de signe \ominus

Je prends (4) corrigée tout de suite

$$De \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=x_g} = -k_c C_g$$

\swarrow
 $C(x=x_g)$

ou $C_{i_g, k} = C_{i_g-1, k} - \frac{\partial C}{\partial x} (x=x_g, t=t_k) \times \Delta x$. par DL1 à gauche

d'où $\frac{De}{\Delta x} (C_{i_g, k} - C_{i_g-1, k}) = -k_c C_{i_g, k}$

ou encore $C_{i_g, k} \left(\frac{De}{\Delta x} + k_c \right) = \frac{De}{\Delta x} C_{i_g-1, k}$

avec $\mu = \frac{De}{k_c \Delta x}$

On obtient $C_{i_g, k} = \frac{\mu}{1+\mu} C_{i_g-1, k}$

Q29]

l3: IEMax = 1.35E7

l4: compteur = 0

l7: while compteur < IEMax:

l17: compteur = compteur + 1

Q30]

l7: vect-C[1]

l10: range(1, ifr) # ifr est exclu

l11: r*vect-Cprev[i-1] + (1-2*r)*vect-C[Preced[i]] + r*vect-Csucc[i+1]

l14: vect-C[ifr-1]

l17: vect-Cprev = vect-C[:]

pas simplement = vect-C
sinon les 2 pointeurs pointent
vers la même liste.

On peut aussi faire copy(vect-C)

Si on n'utilise pas vect-Cprev, on utilise vect-C[ifr-1] au rang $k+1$ (celui qu'on est en train de calculer) au lieu du rang k

Q31] $R_{k+1} = R_k - \frac{De}{V_{mol} B} (C_{i_f, k+1} - C_{i_f-1, k+1}) \frac{\Delta t}{\Delta x}$

Le code python est donc:

$$R = R - De/V_{mol} B \times Dt/Dx \times (vect-C[ifr] - vect-C[ifr-1])$$

↑ # le nouveau
↑ # l'ancien

Il faudrait calculer R_{k+1} donc $i_{fr}[k+1]$ après avoir calculé les $C_{i,k+1}$ mais c'est écrit de la faire l'3 dans l'énoncé du code 1. Ici, je faisais bien une initialisation pour $t=0$ à $i_{fr}=1$

Q32) $i_{fr} = \text{int}(R/\Delta x)$. # code pour i_{fr} pas 0, sinon $C_{i_{fr}-1}$ va poser Pb. et ensuite, je mettrai le calcul de i_{fr} l 12.

Q33) mat-C contient plusieurs lignes qui sont chacune un vect-C, et elle en contient $It_{max}/10^5 = 135$.

Vu qu'il y a 31 points où est calculée la concentration.

Donc la taille de mat-C est 135×31 .

vect-t et vect-R ont une taille de 135.

Q34) mat-C = np.zeros((315, 31))

li vect-t = np.zeros(315)

l14 if $j \times 1E5 == \text{compteur}$:

mat-C[j,:] = vect-C

vect-t[j] = $j \times 1E5 \times Dt$ # ou compteur * Dt

j = j + 1

Mais il aurait fallu initialiser j à 0 avant le début de la boucle.

Partie III. Comparaison entre les deux modèles

Q35) l12: mat-C n'a pas It_{max} lignes mais seulement $135 = \frac{It_{max}}{10^5}$

et c'est vect-R qui a vent trace, pas vect-x.

Q36) $t_{final} = \frac{N_{iterations}}{\Delta t} = 3042 \Delta$

en alusiose

On avait prévu $3,15 \cdot 10^3 \Delta$.

Il y a un écart de 3% environ donc c'est compatible.

