

Higher National School of Hydraulic

The Library

Digital Repository of ENSH



المدرسة الوطنية العليا للري

المكتبة

المستودع الرقمي للمدرسة العليا للري



The title (العنوان):

Contribution à l'étude de la diffusion de la matière dans un canal.

The paper document Shelf mark (الشفرة) : 6-0003-16

APA Citation (APA توثيق):

Medjouti, Hind (2016). Contribution à l'étude de la diffusion de la matière dans un canal[Thèse de master, ENSH].

The digital repository of the Higher National School for Hydraulics "Digital Repository of ENSH" is a platform for valuing the scientific production of the school's teachers and researchers.

Digital Repository of ENSH aims to limit scientific production, whether published or unpublished (theses, pedagogical publications, periodical articles, books...) and broadcasting it online.

Digital Repository of ENSH is built on the open DSpace software platform and is managed by the Library of the National Higher School for Hydraulics. <http://dspace.ensh.dz/jspui/>

المستودع الرقمي للمدرسة الوطنية العليا للري هو منصة خاصة بتقييم الإنتاج العلمي لأساتذة و باحثي المدرسة.

يهدف المستودع الرقمي للمدرسة إلى حصر الإنتاج العلمي سواء كان منشورا أو غير منشور (أطروحات، مطبوعات، مبداعات، مقالات، الدوريات، كتب....) و بثه على الخط.

المستودع الرقمي للمدرسة مبني على المنصة المفتوحة DSpace و يتم إدارته من طرف مديرية المكتبة للمدرسة العليا للري.

كل الحقوق محفوظة للمدرسة الوطنية العليا للري.



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

ECOLE NATIONALE SUPERIEURE D'HYDRAULIQUE -ARBAOUI Abdellah-

DEPARTEMENT : HYDRAULIQUE URBAINE

MEMOIRE DE MASTER

En vue de l'obtention du diplôme de Master en Hydraulique

Option: Alimentation en eau potable

THEME DU PROJET :

Etude de la Diffusion de la matière dans un canal.

PRESENTE PAR :

M^{lle} MEDJOUTI Hind.

Devant les membres du jury

Nom et Prénoms	Grade	Qualité
M ^{me} MEDDI Hind	M.C.B	Président
M ^r AMMARI Abdelhadi	M.C.B	Examineur
M ^{me} HOULI Samia	M.A.A	Examineur
M ^r BOUFEKANE Abdelmadjid	M.A.A	Examineur
M ^{me} MOKRANE Wahiba	M.A.A	Promotrice

REMERCIEMENTS

Je remercie tout d'abord Dieu le tout puissant de m'avoir donnée la chance et le courage pour réaliser ce travail.

A l'issus de ce modeste travail, je tiens à exprimer mes sincères remerciements à :

- ✧ Ma promotrice Mme W.MOKRANE qui m'a beaucoup aidé par ses orientations et ses précieux conseils pour l'élaboration de cette étude ;*
- ✧ Mme BOUAKAZ KARIMA qui m'a aussi aidé par ses idées et ses orientations ...*
- ✧ Tous les enseignants de l'Ecole Nationale Supérieure de l'Hydraulique qui ont participé à ma formation ;*
- ✧ Tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin ;*

Nos vifs remerciements iront aussi aux membres de jury qui nous ferons l'honneur de juger et d'enrichir ce travail par leurs propositions.

*Grands mercis à vous tous.
MEDJOUTI HIND*

Dédicace

Je dédie ce travail particulièrement à :

D'abord ma très chère mère que dieu la protège, qui n'a jamais cessé de m'encourager et qui a toujours sacrifié et souffert pour mon bien être et ma réussite.

Mon père qui s'est toujours montré présent et qui a fait en sorte que je ne manque de rien.

A mon mari Mohamed ,mes frères Mounir et Hakim , ma chère sœur Manel , mon neveu Anes et ma belle sœur Asma .

A toute la famille MEDJOUTI ,

A mes meilleurs amis : Assoum , Sarah , Adel , Meriem

A tous mes amis de l'ENSH,

Medjouti Hind

:

خلال هذا العمل قمنا بإعطاء بعض المفاهيم التي تتعلق بظاهرة
لها .

موضوعين: أولهما تحليل الظاهرة نظريا مع تقديم وصف دقيق لها . و ثانيا
راستها باستعمال MATHEMATICA الذي يعطي حلولا للمعادلات التي تعرف الظاهرة المدروسة
بيانات ثنائية ثلاثية . أو على شكل حلول حسابية إن أمكن ذلك .

Résumé

Dans ce travail, nous rappelons les bases théoriques du phénomène de la diffusion de la matière dans un canal. Ensuite, nous avons développé un code numérique pour modéliser la diffusion de la matière et l'écoulement en repos.

Notre étude regroupe deux parties : La première est de décrire une description théoriquement de phénomène de la diffusion. La deuxième ,est l'étude de phénomène en utilisant un modèle mathématique qui s'appelle MATHEMATICA qui donne des résultats aux équations des dérivées partielle sous formes graphique en deux dimensions à trois dimensions . L'algorithme qu'on a est utilisé est un algorithme simple pour obtenir le champ de la concentration à partir de l'équation de continuité. Le code de calcul a été validé en se basant sur les résultats disponibles dans la littérature.

Abstract

In this work, we recall the theoretical bases of the phenomenon of diffusion of material into a channel. Then, the numerical study a phenomenon and laminar flow.

Our study regroup two parts: The first is to give a general description of the phenomenon. The second is the phenomenon study using a mathematical model called MATHEMATICA that delivers results to equations of partial derivatives graphically in 2 to 3 dimensions. The algorithm is used to obtain the field of concentration starting from the equation of continuity. The code of calculating was validated based on the results which were available in the literature.

Sommaire

INTRODUCTION GENERAL	1
-----------------------------------	---

Chapitre I : Rappel mathématique et mécanique des fluides.

Introduction	2
I.1. Rappel mathématique	2
I.1.1. Opérations sur les vecteurs	2
I.1.2. Définition	2
I.1.3 .Classification des vecteurs	2
I.1.4. Composantes d'un vecteur.....	2
I.1.5 .Opérateurs et vecteurs	3
I .2. Rappel mécanique des fluides	4
I.2.1. Généralités	4
I.2.2. Les équations de base	7
I.2.3. Différents régimes d'un écoulement	8
Conclusion	11

Chapitre II : La théorie de la diffusion.

Introduction	12
II -1.Définition de la diffusion	12
II -1.1.Mise en évidence du transport de matière par diffusion	12
II -1.2. Mais pour la matière diffuse.....	12
II -2. Les lois diffusionnelles de fick	13
II-3 La diffusion de la matière	14
II-3.1 . Coefficients de diffusion	14

II-3.2 . Equation de diffusion	15
II-3.3 . Théorie de la diffusion	17
Conclusion.....	19

Chapitre III : Etat de connaissance.

Introduction.....	20
III.1 Aperçu bibliographique	20
III.2 Etat de l’art de la modélisation numérique.....	21
III.2.1 Les modèles unidimensionnels et bidimensionnels.....	21
III.2.2.Les modèles tridimensionnels	22
III.3. Terminologie	23
III.4. Diffusion, diffusion moléculaire, et migration.....	23
Conclusion	25

Chapitre IV : Modélisation mathématique.

Introduction.....	26
IV.1.Généralités	26
IV.1.1. Définition d’un modèle mathématique	26
IV.1.2. Description générale.....	26
IV.2. Modélisation mathématique	29
IV.2. 1. Formulation bidimensionnelle	29
IV.2. 2. Formulation unidimensionnelle.....	29
IV.2. 3. La simulation avec MATHEMATICA de l’équation de diffusion pour une seule dimension (1D)	29
IV.2. 4. La simulation avec MATHEMATICA de l’équation de diffusion en deux dimensions.....	37
Conclusion	42

CONCLUSION GENERALE

REFERENCE BIBLIOGRAFIE

LISTE DES FIGURES

Chapitre IV : modélisation mathématique

Figure IV.1: données de départ	30
Figure IV.2: l'obtention des résultats	31
Figure IV.3: résultats graphique $C=F(t)$	31
Figure IV.4: $C=F(X)$	32
Figure IV.5: résultats en 3 dimensions	32
Figure IV.6: données de base	34
Figure IV.7: résultats la Concentration en fonction de temps	34
Figure IV. 2: résultats la concentration en fonction de l'espace.....	35
Figure IV .3: résultats en 3 dimensions.....	35
Figure IV .4: données de base.....	37
Figure IV. 5: concentration en fonction de temps.	38
Figure IV .6: la concentration en fonction de l'espace.	38
Figure IV .7: résultats en 3 dimensions.....	39
Figure IV.8: résultats la concentration en fonction de temps.....	40
Figure IV.9: la concentration en fonction de l'espace.....	41
Figure IV.10: résultats en 3 dimensions.....	41

Nomenclature

- C** : concentration de la matière kg/m^3 .
- C₀** : concentration initial kg/m^3 .
- D** : coefficient de diffusivité m^2/s .
- F** : flux $\text{kg/m}^2.\text{s}$.
- F** : La densité de courant de particules.
- V** : vitesse de particule.
- q_e** : Terme des sources qui peut inclure un terme dû à une réaction chimique ou à un changement de phase.
- dt** : Pas de temps (s)
- dx** : Pas de longueur (m)
- dy** : Pas de largeur (m)
- h** : Profondeur (m)
- L** : Longueur (m)
- S** : Surface (m^2)
- t** : Temps (s)
- ρ** : Masse volumique (kg/m^3)
- M** : la masse (m)
- V** : volume (m^3)
- : poids spécifique (N/m^3)
- x** : Coordonnée suivant la longueur (m)
- y** : Coordonnée suivant la largeur (m)
- P** : la pression (N/m^2)
- la force de frottement par unité de surface,
- g** : l'accélération de la pesanteur,

Introduction

Générale.

Introduction générale

La diffusion présente dans notre vie sous plusieurs formes et en particulier dans les domaines industriels et environnementaux fait partie de la dynamique des fluides, domaine de recherche vaste par sa diversité d'outils d'étude face à la complexité des phénomènes naturels.

Certains investigateurs et industriels cherchent à contrôler le phénomène de diffusion, qui est tantôt nuisible, tantôt utile (par exemple dans des procédés d'amélioration des caractéristiques mécaniques (traitements de surface comme la nitruration ou cémentation), la résistance à la corrosion et les procédés d'assemblage par brasage). Le cristal résulte de la diffusion du plomb (25% environ de son poids) dans la matrice siliceuse du verre en fusion. Il est transparent pour le spectre visible de la lumière, mais opaque aux rayons X .

Mais le domaine de diffusion qui fait l'objet de ce modeste travail de recherche scientifique va viser comme milieu le domaine liquide et en particulier les canaux dont le phénomène de diffusion peut être assimilé à celui des estuaires ou des oueds. Le but de notre étude est alors l'étude de la diffusion de la matière dans un canal.

A cet effet nous avons organisé notre travail en quatre chapitres :

- Le premier chapitre englobe des rappels mathématiques et mécanique des fluides et en particulier d'analyse vectorielle et des notions élémentaires.
- la théorie de la diffusion est abordée dans le deuxième chapitre.
- Le troisième chapitre donne un aperçu bibliographique sur les recherches antérieures pour établir l'état de connaissance actuel de la diffusion.
- Le dernier chapitre entre dans le cadre de la modélisation de notre phénomène qui est la diffusion de la matière dans un canal en utilisant un logiciel de modélisation MATHEMATICA pour la simulation.
- Enfin, ce présent travail est terminé par une conclusion générale.

Chapitre

I : Rappel

mathématique

et mécanique

des fluides .

Introduction :

L'outil mathématique est nécessaire pour tous domaines physiques de recherche. Dans le but de rassembler les opérateurs outils pour l'élaboration de notre projet de simulation de la diffusion de la matière dans un milieu liquide, nous donnons un rappel d'une analyse vectorielle et de mécanique des fluides mathématiques .

I.1. Rappel mathématique ¹

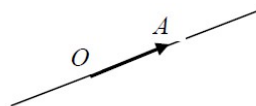
I. 1.1 .Opérations sur les vecteurs

Dans tout ce qui suit, on s'intéressera à l'ensemble E des vecteurs \vec{V} de l'espace usuel. E est un espace Euclidien à trois dimensions.

I. 1.2. Définition

Un vecteur est un segment de droite OA sur lequel on a choisi une origine O et une extrémité A ; il est défini par :

- son origine ;
- sa direction ;
- son sens ;
- son module.



Par convention on adopte la notation suivante : vecteur : \vec{V} ou \overline{OA}

I. 1.3. Classification des vecteurs

Il existe plusieurs types de vecteurs :

- *Vecteur libre* : la direction, le sens et le module sont donnés mais la droite support et le point d'application (origine du vecteur) ne sont pas connues ;
- *Vecteur glissant* : le point d'application (origine du vecteur) n'est pas fixé ;
- *Vecteur lié* : tous les éléments du vecteur sont déterminés ;
- *Vecteur unitaire* : c'est un vecteur dont le module est égal à 1.

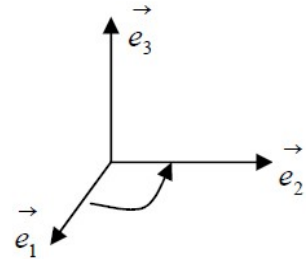
I. 1.4. Composantes d'un vecteur

Considérons une base de l'espace R^3 notée : $R_0 = (O, \vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$. Cette base est orthonormée

$$\text{Si : } \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \begin{cases} 1 & \text{si } i=j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Chapitre I : Rappel mathématique et mécanique des fluides.

La base R_0 est dite directe si un observateur se plaçant à l'extrémité du vecteur \vec{e}_3 verra le vecteur \vec{e}_1 tourner vers le vecteur \vec{e}_2 dans le sens contraire des aiguilles d'une montre.



Dans cette base un vecteur \vec{V} de composantes $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ s'écrirait :

$$\vec{V} = x\vec{e}_1 + y\vec{e}_2 + z\vec{e}_3$$

Les quantités réelles x, y, z sont appelées composantes du vecteur \vec{V} dans la base \mathbb{R}^3 .

La notation adoptée est la suivante :

$$\vec{V} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

I. 1.5. Opérateurs et vecteurs

a) Opérateur gradient dans un repère orthonormé : $R(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$

On définit l'opérateur vectorielle noté : $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$ comme étant la dérivée dans l'espace suivant les trois directions des vecteurs unitaires. Le gradient d'un scalaire U est défini comme étant la dérivée vectorielle suivant les trois directions respectives $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ par rapport aux variables : x, y, z .

$$\overrightarrow{\text{grad}}U(x, y, z) = \frac{\partial U}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial U}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial U}{\partial z}\vec{k} \quad \text{ou} \quad \overrightarrow{\text{grad}}U = \vec{\nabla}U$$

b) Opérateur divergence dans un repère orthonormé : $R(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$

La divergence d'un vecteur $\vec{V} = V_x\vec{i} + V_y\vec{j} + V_z\vec{k}$ est définie comme étant le produit

scalaire de l'opérateur : $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$ par le vecteur \vec{V} , noté $\text{div} \vec{V} = \vec{\nabla} \cdot \vec{V}$

$$\vec{V}$$

La divergence d'un vecteur est un scalaire.

c) Opérateur rotationnel dans un repère orthonormé : $R(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$

Le rotationnel d'un vecteur $\vec{V} = V_x \vec{i} + V_y \vec{j} + V_z \vec{k}$ est définie comme étant le produit

vectorel de l'opérateur : $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$ par le vecteur \vec{V} , noté

$$\text{rot } \vec{V} = \vec{\nabla} \wedge \vec{V}$$

$$\text{rot}(\vec{V}) = \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \right) \wedge (V_x \vec{i} + V_y \vec{j} + V_z \vec{k})$$

Le rotationnel d'un vecteur est aussi un vecteur.

Remarque :

Si f est un champ scalaire et \vec{A} et \vec{B} deux vecteurs quelconques, les relations suivantes sont vérifiées :

$$\text{div}(f \vec{A}) = f \text{div } \vec{A} + \vec{A} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} f ;$$

$$\text{rot}(\text{rot } \vec{A}) = \overrightarrow{\text{grad}}(\text{div } \vec{A}) - \Delta \vec{A} , \text{ avec } \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} ;$$

$$\text{rot}(f \vec{A}) = \overrightarrow{\text{grad}} f \wedge \vec{A} + f \text{rot } \vec{A} ;$$

$$\text{rot}(\overrightarrow{\text{grad}} f) = \vec{0} ;$$

$$\text{rot}(\vec{A}) = \vec{0} ;$$

$$\text{div}(\vec{A} \wedge \vec{B}) = \vec{B} \cdot \text{rot}(\vec{A}) - \vec{A} \cdot \text{rot}(\vec{B})$$

I.2. Rappel mécanique des fluides

I.2.1. Généralités ²:

Un fluide est un milieu matériel continu qui se déforme continuellement sous l'action de la moindre force de cisaillement. C'est pourquoi on dit que le fluide s'écoule. Un fluide prend la forme du récipient avec les parois duquel il est en contact. Le mot fluide est synonyme de substance dont les éléments se mettent en mouvement avec une liberté totale (fluides idéaux, dits non visqueux) ou une liberté restreinte (fluides réels, dits visqueux).

En Mécanique des Fluides (des liquides ou des gaz) on considère l'écoulement des fluides du point de vue macroscopique, c'est-à-dire du point de vue de milieux continus. Dans ce cadre, bien qu'un élément du fluide soit composé d'un très grand nombre de molécules, c'est aux propriétés moyennes de cet élément macroscopiques que l'on s'intéresse.

Par une particule de fluide on entend dire un élément de fluide qui est infinitésimal au sens mathématique, c'est-à-dire assimilée à un point en analogie avec la notion de point matériel en mécanique rationnelle. Ainsi on admet qu'une particule de fluide a les mêmes propriétés en tous ses points.

Vu par un physicien, la Mécanique des Fluides constitue une branche de physique. En revanche, pour un mathématicien il s'agit d'une branche de mathématiques appliquées. Par ailleurs, vue les soucis d'applications d'ingénierie, l'ingénieur la voit comme une science qui s'appuie, en grande partie, sur l'expérience. En effet, la science de la mécanique des fluides est un ensemble constitué de tous ces composantes car La Science est un ensemble ordonné et systématique de connaissances établies par l'analyse théorique, l'observation et l'expérience. A vrai dire l'étude de La Mécanique des Fluides ne peut être effectuée en profondeur qu'avec une maîtrise considérable de mathématiques. En Mécanique des Fluides l'observation, l'expérience et la mathématique sont aussi bien inséparables comme une cellule vivante et l'eau.

a) Volume de contrôle

Volume de contrôle. On appelle volume de contrôle toute région géométrique $V(t)$, matérielle et arbitraire, délimitée par une surface matérielle $S(t)$ perméable aux particules fluides, isolée dans la pensée pour analyser le mouvement du fluide. Un volume de contrôle peut être déformable, mobile ou fixe.

b) PROPRIETES DES LIQUIDES

- **Masse volumique**

La masse volumique (ρ) est le rapport :
$$\rho = \frac{\text{Masse}}{\text{Volume}} = \frac{M}{V_{ol}} \quad [\text{Kg/m}^3]$$

Pour les liquides, le volume est pratiquement insensible aux variations de pression et, dans la majorité des cas, il augmente faiblement quand la température augmente, l'eau faisant exception à cette règle en dessous de 4°C.

- $\rho_{\text{eau}} = 1000 \text{ kg/m}^3$

- $\rho_{\text{mercure}} = 13546 \text{ kg/m}^3$
- $\rho_{\text{air sec}} = 1,205 \text{ kg/m}^3$

- **Poids spécifique**

Il représente la force de gravité agissant sur la masse par unité de volume :

$$\gamma = g \cdot \rho \text{ [N/m}^3\text{]}$$

$$\gamma_{\text{eau}} = 104 \text{ N/m}^3$$

- **Viscosité**

La viscosité d'un fluide en mouvement est la propriété qui exprime sa résistance à une force tangentielle.

c) Caractérisation des forces dans un écoulement

✓ **Les forces**

Les forces qui agissent sur un volume fini de fluide sont de deux types :

- *Les forces de volumes,*
- *Les forces de surfaces.*

- **Les forces de volumes**

Elles se composent des forces suivantes :

- Les forces de pesanteur.
- Les forces d'accélération pure :

$$F_{\text{accélération pure}} = M \frac{\partial V}{\partial t}$$

- Les forces d'accélération convective :

$$F_{\text{accélération convective}} = M \left(\frac{\partial V}{\partial x} \cdot V_x + \frac{\partial V}{\partial y} \cdot V_y + \frac{\partial V}{\partial z} \cdot V_z \right)$$

- **Les forces de surfaces**

Elles se composent des forces suivantes :

- Les forces de pression :

La pression (p) est le rapport entre une force F agissant perpendiculairement

à la surface (A) d'un fluide :
$$p = \frac{F}{A}$$

- Les forces de frottement de viscosité :

$$F = \mu A \frac{\partial U}{\partial y}$$

d) Importance des différentes forces

En général, l'hydraulicien doit s'occuper de l'effet de la force dominante. Dans la plupart des problèmes d'écoulement des fluides, la pesanteur, la viscosité et l'élasticité

sont prépondérantes, mais pas toujours simultanément.

L'importance relative des différentes forces agissant sur un liquide est calculée par des

nombre adimensionnels représentant les rapports entre ces forces. L'analyse dimensionnelle permet de simplifier ces rapports. Les différentes dimensions utilisées sont :

L : longueur,
T : temps,
 ρ : masse volumique.

➤ Le Nombre d'Euler

Le nombre de Euler est le rapport entre les forces d'inertie (Ma) et les forces de pression (pA).

$$\frac{Ma}{pA} = \frac{(\rho L^3) \left(\frac{L}{T^2}\right)}{\rho L^2} = \rho \frac{V^2}{p}$$

M : la masse,
a : l'accélération du fluide,
p : la pression,
A : la surface d'application de la pression,
V : vitesse caractéristique de l'écoulement.

Ce rapport est utilisé lorsqu'on calcul les forces (statiques et dynamiques) de l'eau sur une paroi ou un ouvrage.

➤ Le Nombre de Reynolds

Le Nombre de Reynolds (Re) est le rapport entre les forces d'inertie (Ma) et les forces de viscosité (τA).

$$\Re = \frac{Ma}{\tau A} = \frac{(\rho L^3) \left(\frac{L}{T^2}\right)}{\mu \left(\frac{L/T}{L}\right) L^2} = \rho \frac{VL}{\mu}$$

τ : la force de frottement par unité de surface,
A : la surface d'application de la force de frottement,
L : longueur caractéristique de l'écoulement.

Chapitre I : Rappel mathématique et mécanique des fluides.

Ce rapport permet de distinguer le régime laminaire et turbulent.

Si $Re >$ valeur dépendant de l'ouvrage étudié **alors** turbulent

Si $Re <$ valeur dépendant de l'ouvrage étudié **alors** laminaire

➤ Le Nombre de Froude

Le nombre de Froude est le rapport entre les forces d'inertie (Ma) et les forces de pesanteur (Mg).

$$\frac{T^2}{L/\dot{\iota}}$$
$$\frac{\dot{\iota}}{(\rho L^3)\dot{\iota}}$$
$$\frac{Ma}{Mg} = \dot{\iota}$$

g : l'accélération de la pesanteur,

L : longueur caractéristique de l'écoulement,

V : vitesse caractéristique de l'écoulement.

Ce rapport permet de distinguer le régime fluvial ou torrentiel

I.2.2. LES EQUATIONS DE BASE

Equations de l'écoulement :

- l'équation de continuité ou équation de conservation de la masse (m) du fluide :

Cette équation exprime le principe de conservation de la masse : la variation de masse de fluide d'un élément de volume dv pendant un temps dt est égale à la masse de fluide entrante dans ce volume déduite de la masse de fluide sortante.

- Variation de masse entre t et $t+dt$:

La masse de fluide contenue dans le volume $dv=dx.dy.dz$ est égale au temps t à :
 $\rho.dx.dy.dz$

Après un temps dt dans ce même volume, la masse est égale à : $(\rho + \frac{\partial \rho}{\partial t} dt)$

$dx.dy.dz$

On constate donc une variation de masse de : $\frac{\partial \rho}{\partial t} dt \cdot dx.dy.dz$

En écrivant que la variation de masse de fluide d'un élément de volume dv pendant un temps dt est égale à la masse de fluide entrante dans ce volume moins la masse de fluide sortante, on a :

Chapitre I : Rappel mathématique et mécanique des fluides.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho w)}{\partial z}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho V) = 0$$

C'est l'équation de continuité d'un fluide conservatif.

- Cas des fluides incompressibles :

Si le fluide est en mouvement permanent ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$) la masse volume ρ est indépendante du temps et si le fluide est incompressible, ρ est indépendant de x , y et z , l'équation de continuité se réduit à :

$$\text{div}(V) = 0$$

L'interprétation physique de cette équation est la suivante : les débits Q entrant et sortant à travers un volume quelconque et rempli du fluide doivent être égaux.

- L'équation de Bernoulli :

Si le fluide est parfait (cad sans viscosité) et incompressible, on a le long d'une ligne de courant :

$$p + \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho g z = cte$$

I.2.3. Différents régimes d'un écoulement

En fonction du nombre Reynolds on distingue trois régimes d'écoulement : le **régime laminaire**, **de transition** et **turbulent**.

1. Écoulement uniforme à surface libre

L'écoulement à surface libre est caractérisé par l'existence d'une surface libre en contact direct avec l'air ambiant, donc la surface de l'écoulement à une pression égale à la pression atmosphérique.

L'écoulement dans les conduites fermées à la pression atmosphérique, ou lorsque le niveau d'eau est égale au diamètre de la conduite est aussi un écoulement à surface libre.

➤ Classification des écoulements à surface libre :

Les écoulements à surface libre sont classés en différents types :

a)- Écoulement uniforme et non uniforme :

Chapitre I : Rappel mathématique et mécanique des fluides.

L'écoulement est uniforme si pour une longueur donnée du canal, la vitesse, la profondeur, la pente et la section du canal restent constantes :

$$\frac{\partial V}{\partial x} = 0, \frac{\partial Y}{\partial x} = 0$$

dans ce cas la ligne de charge, la surface d'eau ainsi que le radier sont parallèles.

b)- Écoulement permanent et non permanent :

Si les caractéristiques de l'écoulement (Vitesse, profondeur, débit) restent constantes dans une section du canal, et ne change pas par rapport au temps, l'écoulement est dit permanent.

$$\frac{\partial V}{\partial t} = 0, \frac{\partial Y}{\partial t} = 0$$

c)- Écoulement Laminaire et Turbulent :

L'écoulement est dit laminaire si le nombre de Reynolds est inférieur à 500 ou 600.

d)- Écoulement Fluviale, Critique et Torrentielle :

L'écoulement est supposée fluvial si le nombre de Froude est inférieur à 1.

Si : (F=1) , l'écoulement est Critique

Si : (F>1) l'écoulement est Torrentiel.

➤ **Distribution des pressions en écoulement à surface libre :**

Dans un écoulement rectiligne à surface libre la distribution des pressions est hydrostatique, ça veut dire que la pression est reliée à la profondeur suivant une loi linéaire :

$P = \varpi Y$, où P est la pression au fond d'un canal, Y est la profondeur et ϖ est le poids volumique du liquide qui s'écoule.

Dans le cas où on a un profil de canal concave ou convexe, le liquide subi une accélération supplémentaire qui peut être au même sens ou au sens opposé de l'accélération de la gravité, on doit dans ce cas corriger la pression.

➤ **Détermination des débits dans les canaux à ciel ouvert en écoulement uniforme:**

Il existe plusieurs formules de calcul de débits pour les régimes uniformes, les plus répons sont :

Chapitre I : Rappel mathématique et mécanique des fluides.

a)- Formule de Chézy :

La formule de Chézy est de la forme :

$$V = C * \sqrt{R * i}$$

Donc :

$$Q = C * S * \sqrt{R * i}$$

Où :

V : vitesse moyenne de l'écoulement.

S : section de l'écoulement ;

C : coefficient de Chézy (dépend de la rugosité du canal);

R : rayon hydraulique ($R = S/P$, P est le périmètre mouillé);

i : pente du radier.

b)- Formule de Manning- Strickler :

L'expression du coefficient de Chézy dans cette formule est : $C = \frac{1}{N} R^{\frac{1}{6}}$

N : coefficient de Manning qui caractérise la nature du canal.

Donc : $Q = \frac{1}{N} \times S \times R^{\frac{2}{3}} \times i^{\frac{1}{2}}$

Pour Strickler $K = 1/N$ qui est fonction de la nature du canal.

L'expression devient :

$$Q = K_s \times S \times R^{\frac{2}{3}} \times i^{\frac{1}{2}}$$

Les valeurs de K_s sont données par les tableaux suivants pour les canaux artificiels et naturels.

K_s est liée directement à la rugosité des parois du canal, elle fut exprimée suivant plusieurs formules, la plus utilisée est celle de Stricker :

$$K_s = \frac{1}{N} = 26 \left(\frac{1}{d_{65}} \right)^{\frac{1}{6}} \quad \text{L'unité est } m^{1/3}/s$$

Chapitre I : Rappel mathématique et mécanique des fluides.

d_{65} : est le diamètre qui correspond au pourcentage 65% sur la courbe granulométrique des sédiments qui représente le matériau du canal.

Conclusion :

Dans cette partie nous avons donnée des généralités et des rappelles de mathématique et de mécanique des fluides qui serviront de connaissances de base pour les chapitres suivants.

Chapitre II :

La théorie de

la diffusion .

Introduction :

Ce chapitre est consacré à l'étude de la théorie de la diffusion de la matière que nous illustrons avec des exemples.

II -1. Définition de la diffusion⁷ :

Des phénomènes de diffusion sont présents dans de très nombreux domaines de la physique. La diffusion peut toujours être considérée selon deux approches : du point de vue ondulatoire, et du point de vue particulaire. Dans le premier cas, la diffusion de la chaleur constitue le meilleur exemple. Dans ce deuxième cas, la diffusion se caractérise par un transfert de matière, qui est la réponse d'un milieu à toute modification de la répartition des concentrations. Même à l'équilibre, les échanges de matière se poursuivent continuellement à l'échelle moléculaire : on parle alors d'auto-diffusion.

Dans les solides, la diffusion est un déplacement aléatoire d'atomes, d'ions, de molécules ou de lacunes, dans le réseau cristallin provoqué en général par agitation thermique. Les phénomènes de diffusion sont extrêmement lents aux températures ordinaires ; ils peuvent cependant être considérablement activés par la température ou la présence de certaines anomalies structurelles. La diffusion joue un rôle fondamental dans plusieurs processus déterminant les structures et les propriétés des matériaux. Parmi eux, on peut citer la cristallisation, les transformations de phases, et plusieurs autres processus spécifiques dans les semi-conducteurs ...

Ainsi nous déduisons que la diffusion est un mécanisme de transport de matière sous l'effet d'un gradient de concentration, depuis les zones concentrées en matière vers les zones moins concentrées.

II -1.1. Mise en évidence du transport de matière par diffusion :

S'il existe une différence de concentration dans l'espace, par exemple entre deux compartiments séparés par une membrane perméable (laissant passer le solvant comme le soluté). La matière se déplace du compartiment concentré vers le moins concentré. Ce transfert s'effectue, jusqu'à ce que l'équilibre en concentration soit atteint ; c'est la diffusion.

II -1.2. Mais pourquoi la matière diffuse ? ⁷

Physiquement, la diffusion reflète le « mélange » ayant lieu entre molécules du à l'inévitable agitation thermique moléculaire. Dans un liquide, les molécules sont condensées et donc proches les unes des autres. Dès qu'une molécule s'éloigne de sa position les interactions avec ses voisines ont tendance à la ramener à sa position initiale. Cependant, une certaine concordance dans les déplacements peut entraîner un changement de position « mélange » entre molécules : la diffusion. Ainsi, à 20°C, par diffusion une molécule d'eau se déplace en moyenne de 0,3 mm de sa position initiale au bout de 1 minute. Cette distance est doublée à 50°C et est toujours proportionnelle à la racine du temps. Si on place des molécules ou des particules (inférieure à 1 mm) dans ce mélange agité de molécules, les chocs

désordonnés des molécules environnantes provoquent le déplacement irrégulier et incessant des molécules ou des particules : le mouvement Brownien .Ainsi une particule de 0.5 mm de diamètre dans l'eau se déplace de sa position initiale de x mm en 1 minute en moyenne. Si on place des molécules ou des particules (inférieure à 1 μm) dans ce mélange agité de molécules, les chocs désordonnés des molécules environnantes provoquent le déplacement irrégulier et incessant des molécules ou des particules : le mouvement brownien . Ainsi une particule de 0.5 mm de diamètre dans l'eau se déplace de sa position initiale de x mm en 1 minute en moyenne.

II -2. Les lois diffusionnelles de Fick³

Lorsqu'on s'intéresse au transfert de matière, on doit distinguer deux cas, selon que le transfert se fait au sein d'une phase ou entre deux phases partiellement ou totalement immiscibles. En outre, chacune des phases peut être mobile ou immobile.

Une phase immobile ne signifie pas qu'il n'y a pas de mouvement d'ensemble des molécules, mais au niveau de la phase, le transport se fait uniquement par diffusion moléculaire, et il n'existe pas dans la phase de tourbillons provoquant - avec une dégradation d'énergie mécanique et de quantité de mouvement - le brassage d'agrégats de fluide ayant des compositions différentes. Par opposition, dans le cas d'une phase mobile, le transport par diffusion des constituants n'est pas dû uniquement à la diffusion moléculaire mais aussi à la diffusion turbulente.

Il convient de distinguer deux types de diffusion moléculaire et turbulente.

a) Diffusion moléculaire

Par suite des déformations des molécules par translation, rotation et vibration, ces dernières sont animées d'un mouvement aléatoire si leur concentration dans un même milieu n'est pas homogène. Ainsi, si on considère un plan normal à la direction du gradient de concentration d'un réactif A quelconque, ou n'importe quel autre plan, il existe un flux de molécules A à travers ce plan. En outre, pour des solutions diluées, la direction du déplacement de chacune des molécules A est indépendante des autres et donc de leur concentration. Il en résulte que dans un système où il existe un gradient de concentration et plus généralement un gradient de potentiel chimique, la fraction de molécules A traversant le plan normal au gradient est le même de chaque côté du plan. Il se produit un déplacement des molécules de A de la région à potentiel chimique élevé vers celle à potentiel chimique plus faible et s'il n'y a pas d'effets contraires il y aura égalité des potentiels chimiques ce qui correspond à l'équilibre thermodynamique.

Pour les systèmes binaires gazeux, on peut évaluer le flux de diffusion moléculaire à partir des structures moléculaires des constituants à l'aide d'une théorie relativement compliquée mais cependant très avancée que l'on appelle la théorie cinétique des gaz. La diffusion moléculaire existe également dans les liquides et les solides .

b) Diffusion turbulente

Lorsqu'une phase animée d'un mouvement d'ensemble est telle qu'il existe dans le milieu des remous favorisant le brassage des agrégats du fluide, le déplacement des molécules d'un

constituant A quelconque, est tel que l'on peut encore superposer à l'écoulement d'ensemble un flux analogue au flux diffusionnel. Certes ce flux n'a rien à voir au flux diffusionnel car son évaluation n'est pas liée directement à la structure du constituant A mais plus précisément à la nature de l'écoulement.

Dans de nombreux cas, on pourra négliger dans un premier temps, le flux diffusionnel par rapport au flux principal dû à l'écoulement d'ensemble. Cependant, si l'on cherche à se rapprocher plus finement de la réalité physique, il sera nécessaire d'en tenir compte (cas des distributions de temps de séjour du fluide dans les réacteurs et échangeurs à garnissage, dans les colonnes à pulvérisation, dans les colonnes à bulles, etc.).

II -3. La diffusion de la matière :

D'un point de vue phénoménologique, et au premier ordre, le phénomène de diffusion est régi par une loi énoncée par Adolf Fick.

C'est ce qui fait par exemple qu'une goutte d'encre va tendre à colorer toute la masse d'eau où elle est introduite, ou qu'une goutte de parfum produira une odeur perçue dans toute une pièce. Ce phénomène est plus rapide pour les gaz, et très lent au sein des matériaux secs, denses et durs. Il se produit plus rapidement dans les matériaux à haut coefficient de perméabilité (sable ou roche calcaire poreuse par exemple). Il peut être freiné ou accéléré par des interactions avec le substrat (cf. capillarité, précipitation...) ou selon les caractéristiques électrochimiques et électrostatiques des matières en présence, phénomène par exemple mis à profit pour séparer des molécules dans certains gels exposés à un champ électrique.

II -3.1. Coefficients de diffusion⁷

La vitesse du phénomène de diffusion est quantifiée par la diffusivité ou le coefficient de diffusion. Généralement la diffusivité augmente avec la température. Cependant, alors que la diffusivité des gaz est pratiquement indépendante de la composition mais varie avec la pression, la diffusivité des liquides et des solides est essentiellement dépendante de la concentration. L'estimation de la diffusivité peut se faire de différentes façons.

Autrement dit la valeur des coefficients de diffusion détermine la vitesse de transport des espèces par diffusion. Pour les espèces ioniques, la valeur du coefficient de diffusion influence également la vitesse du transport par migration.

Ordre de grandeur de la diffusivité :

- gaz 10^{-5} - 10^{-3} m²/s
- liquide 10^{-10} - 10^{-9} m²/s
- solide 10^{-15} - 10^{-13} m²/s

Le phénomène de transfert de matière par diffusion opère dès qu'il y a une différence de concentration. C'est un phénomène spontané et inévitable (phénomène dispersif) conduisant à un équilibre et qui donc s'oppose à la fonction principale d'un procédé.

II -3.2. Equation de diffusion

1. Première équation de Fick

La première loi de Fick constitue une loi fondamentale de diffusion de molécules. Elle s'applique aussi bien au gaz, qu'aux liquides ou aux solides.

Considérons le flux de particules d'une certaine espèce, les particules peuvent être des molécules, des atomes, des défauts ponctuels, des électrons libres ou des trous électroniques, etc ... Soit $C(x,t)$ leur concentration, exprimée en nombre de particules ou atomes par unité de volume.

On définit le flux de diffusion F comme la quantité de matière (particules) qui traverse par seconde l'unité d'aire d'une surface normale au mouvement de transfert étudié. F est aussi appelé la densité de courant de particules.

En présence d'un gradient de concentration, on admet qu'il s'établit un flux de particule dans le sens descendant, et que ce flux est proportionnel au gradient correspondant :

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} = -D \text{grad} C \quad (2.1)$$

Où D est appelé coefficient de diffusion ou diffusivité. Il est généralement exprimé en cm^2/s ou m^2/s .

C est la concentration de particule exprimée en atome/ m^3 ou atome/ cm^3 .

Le signe négatif indique que le flux diffuse de la région ayant une forte concentration de particules à la moins forte.

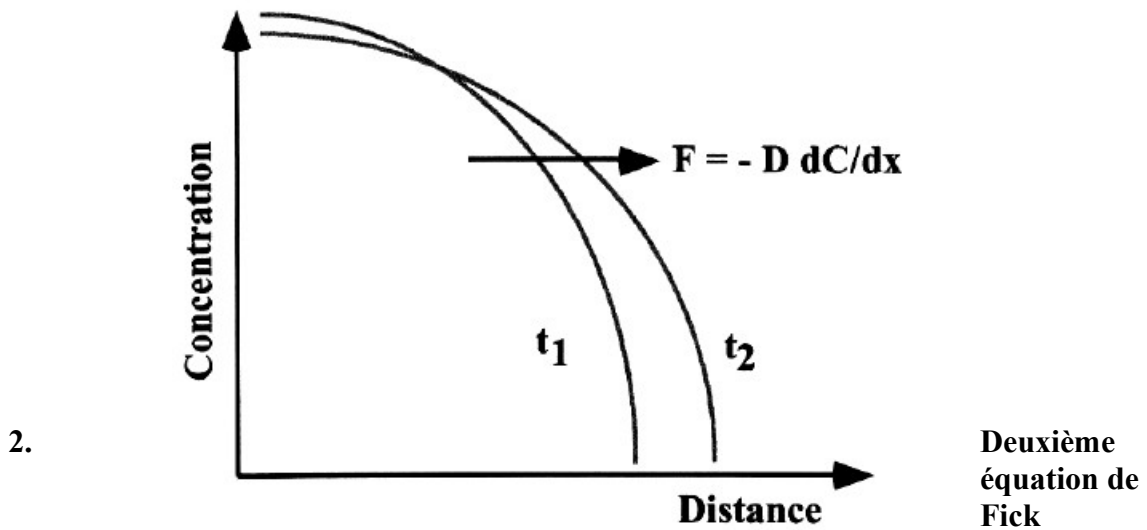
La relation précédente est connue sous le nom de première loi de Fick. Elle se généralise à trois dimensions :

$$F = -\left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} + D_y \frac{\partial C}{\partial y} + D_z \frac{\partial C}{\partial z}\right) \quad (2.2)$$

Si D est une constante quelle que soit la direction dans l'espace (milieu isotrope), on peut écrire :

$$F = -D \left(\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (2.3)$$

La loi de Fick affirme alors qu'il y a proportionnalité entre le gradient de concentration et le flux de diffusion.



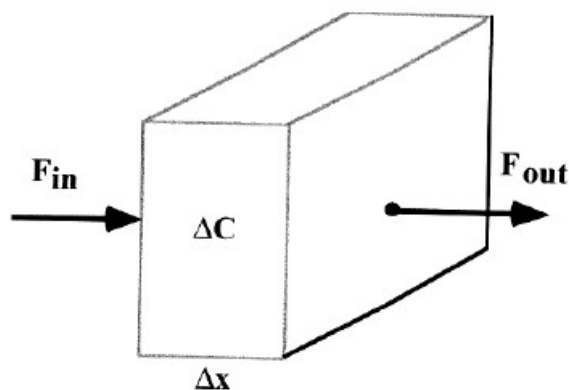
Aussi appelée équation de la diffusion, la seconde équation de Fick exprime en tout point x la variation temporelle de la concentration $C(x,t)$ en fonction de sa variation spatiale au voisinage de ce point.

La première équation de Fick est utilisée en régime permanent seulement, c'est-à-dire le flux de particules ne dépend pas de temps.

La deuxième loi de Fick exprime non plus un régime permanent de diffusion, mais un régime transitoire ou l'on suppose $\frac{\partial C}{\partial t} \neq 0$. La variation de la concentration en fonction du temps est alors définie par la relation :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} \quad (2.4)$$

La deuxième équation de Fick décrit comment le changement (variation) dans le flux entrant et le flux sortant dans le volume (figure).



En combinant les deux équations. On obtient :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.5)$$

L'équation générale de la diffusion (ou deuxième équation de Fick), la relation précédente, est une équation aux dérivées partielles du second ordre de type parabolique, qui caractérise un processus irréversible. Elle intervient ainsi dès que l'on s'intéresse à la diffusion en tant que processus spatio-temporel. Elle est pratiquement impossible à résoudre analytiquement. Par contre si D est indépendant de la concentration, elle se simplifie notablement. L'équation précédente s'écrit alors :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.6)$$

C'est la seule forme de la deuxième loi de Fick qui peut être analytiquement résolue. On pourra considérer un nombre fini de solutions. L'équation précédente admet des solutions analytiques qui expriment la forme de diffusion C(x,t) et permet de calculer le coefficient de diffusion D à partir de profils expérimentaux.

II -3.3. Théorie de la diffusion :

- **Bilans de particules et loi de Fick**

- Le bilan de particules :

La variation de nombre de particule dans dV = Nombre de particules entrantes – Nombre de particules sortantes

$$\frac{\partial c}{\partial t} dV = j(x,t)S - F(x+dx,t)S \quad (2.7)$$

Avec :

c(x, y, z, t) : La concentration particulaire

$\vec{F}(x, y, z, t)$: La densité de courant de particules

S : section de particules

- Equation de conservation locale de particules (1D) :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \text{grad}(c) = -\frac{\partial F}{\partial x} \quad (2.8)$$

- Equation de conservation locale de particules (3D) :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + V \text{grad}(c) + \text{div} F = 0 \quad (2.9)$$

Sans pertes ni création de matière.

- Loi de Fick :

La loi empirique de Fick décrit le phénomène de la diffusion en énonçant que le flux de matière, j , est proportionnel au gradient de concentration par l'intermédiaire du coefficient de diffusivité, D :

$$F = -D \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$F = -D \text{grad}(c) \tag{2.10}$$

- \dot{c} Équation de diffusion bidimensionnelle :

En combinant :

- La conservation de particule : $\frac{\partial c}{\partial t} + V \text{grad}(c) = -\dot{c}(F)$ (2.11)

- La loi de Fick : $F = -D \text{grad}(c)$ (2.12)

Il résulte donc :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + V \text{grad}(c) = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) + q_e \tag{2.13}$$

Avec :

q_e : Terme des sources qui peut inclure un terme dû à une réaction chimique ou à un changement de phase.

En négligeant q_e , donc on aura :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \tag{2.14}$$

L'équation générale de la diffusion est une équation aux dérivées partielles du second ordre. Elle ne peut être résolue analytiquement tant que D et V dépendent de la concentration, et donc de x et t .

- En l'absence de terme de transport, c'est-à-dire Si le liquide ambiant est immobile, $\vec{V}(u,v) = 0$ (c.-à-d. $u = v = 0$), on parle de la **diffusion pure**. L'équation, prend alors la forme suivante :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (2.15)$$

Cette équation est souvent qualifiée improprement de seconde loi de Fick. Il existe des expressions analytiques pour les solutions des équations (2.14) et (2.15), différentes suivant les conditions initiales et aux limites du problème. Ces solutions expriment la forme du profil de diffusion $c(x, t)$ et permettent de calculer le coefficient de diffusion D à partir des profils expérimentaux.

Exemple :

$$C(x, t) = C_0 \cdot \text{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4 \cdot D \cdot t}}\right) \quad (2.16)$$

Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons donné un aperçu sur le phénomène de la diffusion de matière, nous avons abouti à une équation générale de ce dernier et par la suite et dans les chapitres suivants on va établir la simulation et la modélisation de ce phénomène en se basant sur la solution de l'équation générale.

Chapitre III :

Etat de

connaissance .

Introduction :

Nombreuses sont les recherches qui ont été menées dans le domaine d'étude du phénomène de la diffusion de la matière dans le cas de n'importe quelle état liquide, solide ou gazeuse le long d'un écoulement dans des canaux ou des micro-canaux

III .1. Aperçu bibliographique

En 1827, le botaniste Robert Brown observe le mouvement erratique de petites particules à l'intérieur de grains de pollen. Il ne s'agit pas d'un phénomène de diffusion, puisque ce qui bouge est une particule macroscopique, mais cette « marche aléatoire » (*random walk*), autrement appelé par le nom de son observateur « mouvement brownien », servira de modèle pour la diffusion.⁶

Le physiologiste Adolph Fick qui en 1855 dans un papier intitulé " Uber Diffusion" présente le processus de diffusion moléculaire par analogie avec les travaux de Fourier de 1822 sur l'écoulement de chaleur.

Osborne Reynolds bien connu pour le paramètre permettant de distinguer les régimes d'écoulement, est le premier en 1874 à formuler une proportionnalité entre la diffusivité d'un contaminant passif et la viscosité turbulente liée aux fluctuations de vitesse.⁶

Joseph Boussinesq dans les années 1877 est parmi les premiers à s'intéresser au phénomène de diffusion turbulente dans l'eau et à étudier en particulier les marées fluviales, la houle, le clapotis et les tourbillons à partir d'observations visuelles relevées dans la nature. C'est également à lui que l'on doit l'hypothèse de proportionnalité entre les flux turbulents et les gradients moyens.⁶

Les véritables jalons des études modernes sur la dispersion de particules marquées dans un écoulement laminaire, sont dus à Sir Geoffrey Taylor en 1921 dans une analyse intitulée "Diffusion by continuous movements". Ce travail est d'une importance capitale puisque 70 ans plus tard il fait toujours référence et n'a subi depuis que quelques modifications ou extensions, notamment au cas des écoulements turbulents uniformes en conduite (Taylor 1953-1954).

Cette dernière analyse considère la réalisation de deux points essentiels:

- un champ de turbulence stationnaire et homogène,
- l'observateur suit les particules marquées dans leur mouvement au cours du temps.

Elder (1959) puis Fischer (1967-1969) ont repris l'analyse de Taylor en l'appliquant respectivement à des écoulements à surface libre en canal de laboratoire et en rivière.

Fischer (1968) entre autres, a montré que la simulation d'un champ de concentration dans un plan horizontal $C(x,y)$ est possible à partir d'un modèle bidimensionnel tenant compte en particulier du taux de transfert turbulent moyen (quelque fois appelé à tort "coefficient de diffusion") dans la direction transversale par rapport à l'écoulement.

La connaissance de ce taux représente la difficulté majeure du problème puisqu'il s'agit normalement d'une inconnue que l'on doit estimer de façon expérimentale.

Une revue des fondements théoriques de l'existence des coefficients de diffusion (cf. les

ouvrages généraux de De Moor 1983 et de Favre, Kovasnay, Dumas, Gaviglio & Coantic 1976) nous a convaincu de la prudence avec laquelle il fallait considérer ces paramètres.

Parmi ces études, nombreuses sont celles qui correspondent à des cas idéalisés relatifs à des écoulements en canaux de laboratoire. Beltaos (1975) souligne, à ce sujet, que l'extrapolation de résultats d'études en laboratoire en vue de l'estimation des taux de transfert turbulent dans la nature, est généralement peu sûre.

En ce qui concerne les études in situ, le nombre de travaux concernant la diffusion est beaucoup plus réduit. Ceux-ci révèlent la variabilité importante des valeurs caractérisant les propriétés de mélange transversal dans les écoulements naturels.

Elder (1959) a montré, à la suite des travaux de Taylor (1921-1954), que le taux de transfert vertical de quantité de mouvement était proportionnel au produit de la profondeur par la vitesse de frottement. Ce résultat a également été appliqué aux taux de transfert transversal. L'intérêt d'une adimensionalisation par la profondeur de l'écoulement et par la vitesse de frottement permet de réduire la variabilité des valeurs à prendre en compte. Cependant, au fur et à mesure que de nouvelles déterminations de terrain viennent s'ajouter à la liste déjà existante, on constate que la diversité des grandeurs ainsi exprimées augmente à nouveau (rapport de 1 à 40).⁶

Les études ont d'abord porté sur la détermination de valeurs moyennes intéressant l'ensemble ou une partie d'un cours d'eau. Dans un deuxième temps et jusqu'à une quinzaine d'années, seules des grandeurs moyennes dans un bief délimité ou dans une section, étaient habituellement proposées dans la littérature relative aux expériences in situ.

Cette démarche se justifie assez bien lorsqu'on s'intéresse à l'impact d'une pollution dans le champ éloigné de son rejet (Schatzmann & Naudasher 1980). Par contre, dans le champ proche et le champ moyen, le problème posé réclame généralement des renseignements plus locaux sur les caractéristiques de l'écoulement.

Depuis une dizaine d'années, sont apparues des adaptations de la méthode basée sur la variation de la taille du panache avec la distance à l'émission. Ces adaptations consistent essentiellement à prendre en compte de façon discrète les variations de la profondeur et de la vitesse d'une berge à l'autre.

III.2. Etat de l'art de la modélisation numérique

III.2.1. Les modèles unidimensionnels et bidimensionnels

Les modèles à une seule dimension ont ses dispositions par rapport à l'hydraulique fluviale. Ceux-ci sont généralement utilisés pour modéliser les écoulements ayant une direction privilégiée, possédant une cote de la surface libre constante dans une section en travers et vérifiant un champ de pression hydrostatique. Ils résolvent les équations de Saint Venant 1D et déterminent pour chaque section la hauteur d'eau et le débit (ou la vitesse moyenne).

Par exemples concernant le transport de polluants, ce type de modèle ne peut être utilisé que lorsque les concentrations sont supposées homogènes sur un profil en travers. En cours d'eau, cette condition est généralement vérifiée dans le champ lointain, domaine situé à une certaine distance du rejet appelée distance de « bon mélange » . A cette distance, le mélange s'est réalisé dans les directions verticales et transversales. Le polluant est représenté par une concentration moyenne, fonction du temps et de l'abscisse en long, qui est déterminée à l'aide d'une équation classique de diffusion unidimensionnelle.

Il existe de nombreux travaux traitant de codes à une dimension. A titre d'exemple, il est possible de se référer à Simon L. (a) [1990] ou à Rigaudière P. [1992] .⁵

Les codes bidimensionnels plus complexes résolvent les équations de Saint Venant 2D. La pression est toujours supposée hydrostatique mais la description est plus précise puisqu'elle fait intervenir la hauteur d'eau et les deux composants de la vitesse moyenne sur une verticale.

Pour ce cas, il est possible de se référer à Bujon G. [1983] ou à Simon L.[1990].

III.2.2. Les modèles tridimensionnels

Les modélisations tridimensionnelles qui résolvent les équations de Navier-Stokes et les équations de convection-diffusion en trois dimensions. Ces modélisations sont beaucoup moins répandues que les précédentes en raison des capacités des ordinateurs qui ont été longtemps insuffisantes pour résoudre les équations en trois dimensions.

Parmi ces modèles, figure le célèbre code numérique aux éléments finis TELEMAC 3D du laboratoire National d'Hydraulique d'EDF (Janin J.M. & al.[1992]) qui est utilisé pour étudier le mélange des eaux douces et salées, la dilution thermique, la dispersion d'agents polluants ou le transport de sédiments en suspension .Sa grande particularité est d'employer un changement de coordonnées verticale afin de travailler sur un maillage indépendant du temps alors que le domaine physique, délimité en hauteur par le fond et la surface libre, varie avec le temps selon le mouvement de la surface libre.

Un second exemple est le modèle aux volumes finis LMT3D de Slovénie (Rajar R & Cetina M. [1997]) mis au point pour le même type d'études. Dans celui-ci, le domaine physique est divisé en un certain nombre de couches d'épaisseurs h variant uniquement d'une couche à l'autre. Seule couche supérieure possède une épaisseur h_A qui dépend des coordonnées de l'espace et du temps puisqu'elle fournit la courbure de la surface libre. Par intégration sur la verticale, le système d'équation fait intervenir la variable h qui est connu a priori dans tout l'espace sauf au niveau de la couche supérieure. L'ajout d'une équation de continuité sur le volume de contrôle permet ensuite de fermer le système. ⁵

III.3. TERMINOLOGIE

Il est intéressant de préciser les distinctions entre quelques termes employés dans la littérature pour désigner les processus de transfert et de transport de masse dans les écoulements turbulents, comme les canaux ou les rivières.

Les termes que l'on retrouve le plus souvent sont l'advection, la diffusion moléculaire, la diffusion turbulente, le cisaillement, la dispersion et le mélange.

- **L'advection** est une forme de transport résultant du déplacement horizontal ou vertical d'une masse d'eau et imposée par un système de courants caractérisé par la distribution des vitesses .
- **La diffusion moléculaire** entraîne l'éparpillement de particules sous l'action de mouvements microscopiques totalement aléatoires qu'il y ait ou non écoulement. Ce phénomène est décrit par les lois de Fick et l'équation générale de la diffusion moléculaire.
- **La diffusion turbulente** est, par analogie avec la diffusion moléculaire (mais uniquement en présence d'un écoulement et de surcroît turbulent), un processus d'éparpillement aléatoire dont le pouvoir est comparativement bien plus important.
- Le **cisaillement** ("shear" en anglais) représente une forme de transport caractéristique de zones l'écoulement se déplaçant avec des amplitudes différentes en moyennes, donnant lieu à des gradients de vitesse et à une turbulence inhomogène.
- **La dispersion** désigne l'action conjuguée de l'advection et du cisaillement (essentiellement par rapport à la direction longitudinale) et du phénomène de pure diffusion turbulente.

III.4. Diffusion, diffusion moléculaire, et migration

- **Le déplacement** des atomes, ions ou molécules dans un milieu, que celui-ci soit solide (cristallin ou amorphe), liquide ou gazeux, est appelé de manière générale « migration » .
- **la diffusion** désigne au sens large des transferts obéissants aux lois de Fick ;
- **La diffusion moléculaire** est la migration induite par l'agitation thermique, à l'exception des autres phénomènes ;
- **L'autodiffusion** est le phénomène se produisant quand un atome se déplace parmi des atomes de même nature. Par exemple, on parlera d'autodiffusion du fer pour désigner la migration d'un atome de fer dans un cristal de fer. Lorsque la diffusion fait suite à la mise en contact de deux milieux homogènes différents, on parle d' **interdiffusion** ;

- **l'interdiffusion** désigne la pénétration d'un matériau dans l'autre (quand deux matériaux sont fortement accolés)
- **le tenseur de diffusion** est le rapport entre la vitesse de diffusion d'un produit (contaminant dans une roche perméable par exemple), alors que le **gradient de concentration** est la somme d'un tenseur de diffusion moléculaire, scalaire, dépendant de la nature du produit considéré et d'un tenseur de diffusion mécanique, plein, dépendant également de la vitesse de Darcy.

Conclusion

Enfin, malgré les multiples études menées sur la diffusion depuis le dix-neuvième siècle, que nous avons cité dans ce chapitre, et vu la diversité des matières ainsi que la nature du milieu ce domaine demeure attractif que ce soit par la modélisation physique ou mathématique. En utilisant ses données nous nous sommes fixer l'étude par modélisation numérique de la matière dans un canal.

Chapitre IV :La modélisation mathématique .

Introduction :

Un modèle de simulation en informatique est une représentation du réel qui permet de proposer une solution face à un problème donné. Mais en réalité il n'arrive pas à une représentation exacte du réel, d'une part et d'autre part pour toute solution il implique des simplifications. Le meilleur des modèles n'est donc pas nécessairement proche du réel, mais il permet d'approcher la réalité. Donc qu'est ce que c'est qu'un modèle mathématique ? Et pour quoi fait-on une modélisation ?

IV.1. Généralités :**IV.1.1. Définition d'un modèle mathématique :**

C'est une traduction d'une observation physique dans le but de lui appliquer des outils mathématiques. Puis généralement, en sens inverse, la traduction des résultats mathématiques obtenus en prévision par exemple en hydrologie ou opérations dans le monde réel (contrôle de risque). Le mot modélisation est aussi très utilisé dans le monde du graphisme, où l'on modélise des objets en 3D ou en 2D.

IV.1.2. Description générale :**a) Qu'est-ce-que MATHEMATICA ?⁴**

MATHEMATICA est un logiciel de calcul formel et numérique développé par Wolfram Research . Il permet essentiellement de faire du calcul formel (manipulation d'expressions mathématiques sous forme symbolique, par exemple : calcul de dérivées, de primitives, simplification d'expressions, etc...) et du calcul numérique (évaluation d'expressions mathématiques sous forme numérique; par exemple : calcul des premières décimales du nombre évaluation approchée d'intégrales, etc...). MATHEMATICA incorpore un langage de programmation sophistiqué et permet aussi de faire des graphiques. C'est un logiciel très utilisé en enseignement, dans la recherche scientifique et dans l'industrie.

Contrairement à la plupart des langages de programmation (tels que C et Fortran), MATHEMATICA peut manier non seulement des quantités numériques (nombres entiers, réels ou complexes), mais aussi des polynômes, des fonctions, des séries, etc. MATHEMATICA permet d'effectuer des opérations telles que la dérivation, l'intégration, le calcul de limites, ainsi que la simplification d'expressions compliquées et la résolution d'équations. Grâce à l'interface graphique, il est également possible de visualiser les résultats en traçant des courbes ou même des surfaces dans l'espace tridimensionnel.

La version standard de MATHEMATICA contient des milliers de fonctions prédéfinies. Il est possible d'augmenter encore les possibilités en incluant des bibliothèques de fonctions adaptées à des utilisations plus spécifiques dans des domaines spécialisés de physique, mathématiques, chimie, ingénierie, etc. De ce fait, MATHEMATICA est devenu un outil de travail quotidien pour bon nombre de chercheurs.

b) Ou trouver MATHEMATICA ?

L'UPMC a une licence globale permettant d'installer MATHEMATICA sur tous les ordinateurs d'enseignement. En particulier, il est disponible sur les ordinateurs du L'UTES (Bâtiment Atrium), y compris ceux en libre service. La licence globale permet également aux enseignants et aux étudiants d'installer MATHEMATICA sur n'importe quel ordinateur personnel (à la maison). Pour cela, connectez vous sur le site <https://mon.upmc.fr>, allez dans la rubrique "Mes Outils", puis suivez les instructions pour télécharger et installer MATHEMATICA. L'activation se fait par un mot de passe et nécessite l'appartenance à l'UPMC.

c) Noyau et interface graphique

MATHEMATICA est composé de deux parties : le noyau ("kernel") et l'interface graphique ("front end"). Le noyau constitue le cœur du logiciel; il interprète les instructions d'entrée (écrites en langage MATHEMATICA), puis calcule et retourne le résultat. L'interface graphique s'occupe de l'interaction avec l'utilisateur. Elle gère le fichier de travail (souvent appelé "feuille MATHEMATICA" ou "notebook"), permet de taper les instructions et de visualiser les résultats. Le logiciel dispose aussi d'un traitement de texte, permettant ainsi d'inclure du texte parmi les calculs effectués; ce document a d'ailleurs été rédigé avec MATHEMATICA. Plusieurs palettes d'outils sont disponibles pour aider à l'édition aussi bien de textes que d'expressions mathématiques (voir menu "Palettes").

d) Un fichier MATHEMATICA

Un fichier MATHEMATICA, aussi appelé "notebook", a une extension ".nb". Il est structuré en cellules ("cells"). Une cellule est constitué d'une ou de plusieurs lignes et est repérée par un crochet à droite du fichier. On peut avoir des cellules contenant des instructions MATHEMATICA (cellule de type "In"), des résultats de calculs (cellule de type "Out"), du texte (cellule du type "Text"), un titre de paragraphe (cellule de type "Section"), Etc.....

On peut sélectionner la totalité d'une cellule en cliquant sur son crochet à droite. On peut ensuite effacer (\leftarrow), copier (Ctrl + c), couper (Ctrl+x), coller (Ctrl +v) la cellule, comme dans un logiciel de traitement de texte normal. Par défaut, les nouvelles cellules créées sont des cellules d'instructions MATHEMATICA. On peut changer le type d'une cellule, après l'avoir sélectionnée, par le menu "Format > Style".

Une cellule peut contenir plusieurs sous-cellules, formant ainsi des groupes structurés de cellules. Pour faciliter la lecture du fichier, on peut ouvrir ou fermer des groupes de cellules en double-cliquant sur le crochet correspondant (ou en cliquant sur le triangle à gauche du titre).

Pensez à sauvegarder souvent votre fichier MATHEMATICA (menu "File", puis "Save" ou "Save As"), les mauvaises manipulations étant fréquentes...

e) Menu Aide

MATHEMATICA inclut une documentation exhaustive (voir le menu "Help", puis "Documentation Center" ou "Virtual Book"), incluant de nombreux exemples directement exécutable dans les pages d'aide.

La commande "Find Selected Function" (ou touche "F1") est très pratique : dans un fichier MATHEMATICA, après avoir placé le curseur sur une instruction MATHEMATICA, appuyez sur F1 pour afficher la page d'aide correspondante à cette instruction.

f) Caractéristiques

MATHEMATICA compte ou permet :

- Une bibliothèque de fonctions élémentaires.
- Une bibliothèque de fonctions spéciales.
- Outils pour la manipulation des matrices.
- Outils pour manipuler des nombres complexes.
- Outils pour tracer de graphes en 2D et 3D mais aussi la création d'animations.
- Il permet de résoudre différents types d'équations : équation diophantienne, équation différentielle, équation aux dérivées partielles, équation différentielle algébrique, et les suites définies par récurrence.
- Il permet de faire des calculs statistiques, de tester des hypothèses, de faire des calculs probabilistes.
- Il offre un langage de programmation de type essentiellement fonctionnel.
- Outils pour la visualisation et l'analyse des graphes.
- Outils pour résoudre des problèmes combinatoires.
- Il permet la manipulation des expressions régulières.
- une bibliothèque de fonctions de la théorie des nombres.
- permet l'appel à Wolfram | Alpha pour interpréter des requêtes en langage courant (en anglais), voire pour les exécuter et en récupérer le résultat.

g) Conditions initiales

Tout modèle numérique nécessite des conditions initiales qui représentent l'état de base du modèle à l'instant où commence la simulation. Si les variables possèdent des valeurs initiales constantes, il est possible de les livrer de manière directe au logiciel.

Pour insérer des conditions initial au MATHEMATICA, on écrit « I Cond = », et on donne la valeur entre deux crochets.

Les conditions imposées au temps $t=0$, sont les conditions initiales.

h) Conditions aux limites

Une condition aux limites est une contrainte sur les valeurs que prennent les solutions des équations aux dérivées ordinaires et des équations aux dérivées partielles sur une frontière.

Les conditions aux limites dépendent de la réalité du problème à étudier et du nombre de variables mise en jeu .

Pour insérer les conditions aux limites au logiciel MATHEMATICA, on écrit « B Conds= » et on donne les valeurs.

IV.2. Modélisation mathématique :

IV.2. 1. Formulation bidimensionnelle

La diffusion de la concentration dans un milieu est régie par le système d'équation au dérivée partielle suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t} + V \quad (c) = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right)$$

Où C est la concentration moyenne sur la profondeur d'eau, h. Le paramètre D représente la diffusivité transversale et V la vitesse moyenne dans la section.

La simulation est basée donc sur le calcul du champ de concentration C, qui résulte de la résolution de l'équation classique de transport de matière par diffusion.

IV.2. 2. Formulation unidimensionnelle

En système d'une dimension le modèle se simplifie et s'écrit :

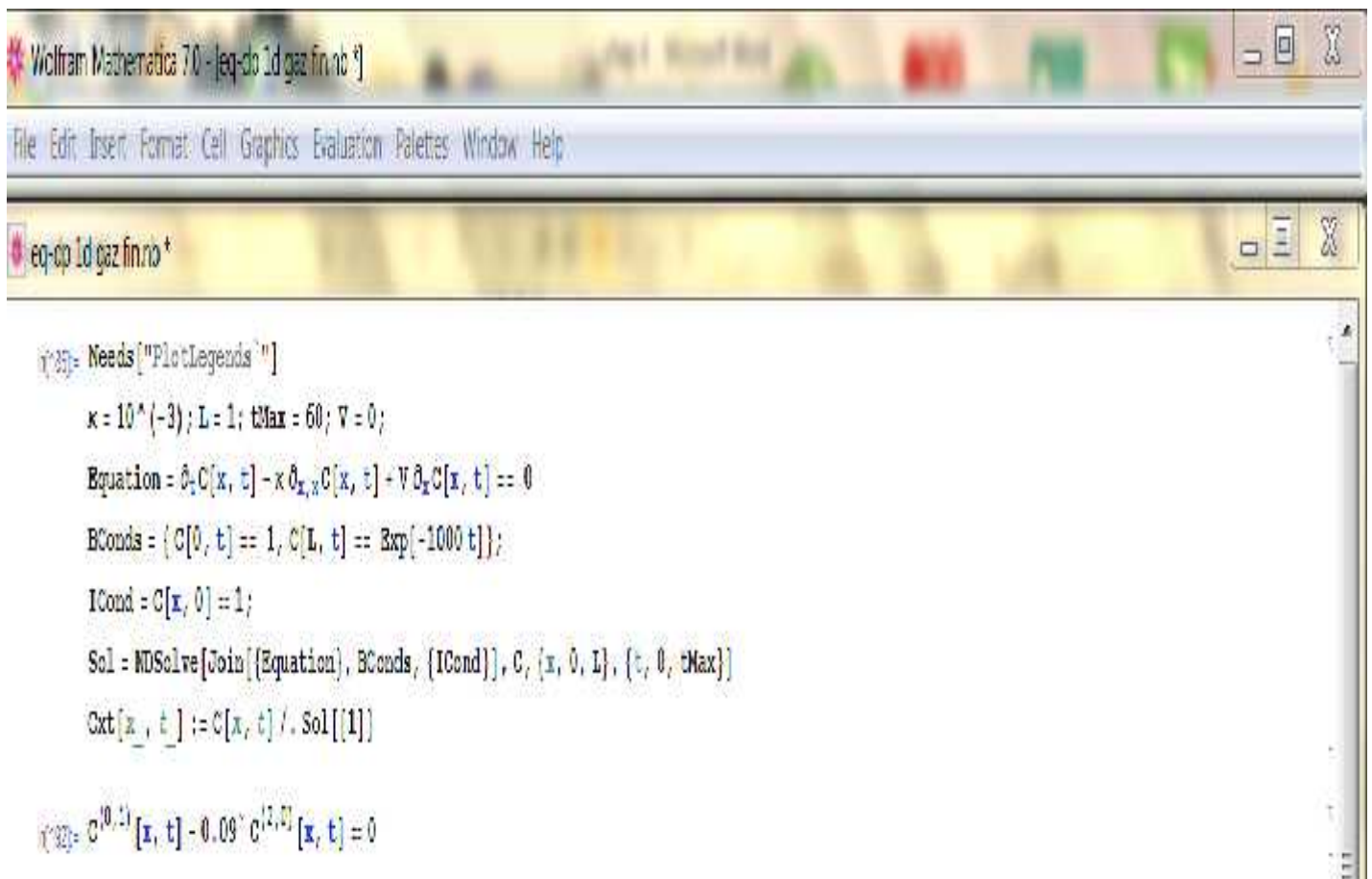
$$\frac{\partial}{\partial t} + V \frac{\partial}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

IV.2. 3. La simulation avec MATHEMATICA de l'équation de diffusion pour une seule dimension (1D) :

a) Le cas d'un gaz quelconque :

Pour ce cas la, nous avons imposé des valeurs concernant la diffusivité, la largeur du canal, le temps maximal, la concentration initiale et la vitesse.

Puisque on a un écoulement en repos donc on prend $V=0\text{m/s}$.



```

Wolfram Mathematica 7.0 - [eq-dp 1d gaz fin.ro *]
File Edit Insert Format Cell Graphics Evaluation Palettes Window Help
eq-dp 1d gaz fin.ro *

In[35]:= Needs["PlotLegends`"]
κ = 10^(-3); L = 1; tMax = 60; V = 0;
Equation = ∂tC[x, t] - κ ∂x,xC[x, t] + V ∂xC[x, t] == 0
BConds = {C[0, t] == 1, C[L, t] == Exp[-1000 t]};
ICond = C[x, 0] == 1;
Sol = NDSolve[Join[{Equation}, BConds, {ICond}], C, {x, 0, L}, {t, 0, tMax}]
Cxt[x_, t_] := C[x, t] /. Sol[[1]]

In[32]:= C(0,1)[x, t] - 0.09 * C(2,0)[x, t] == 0

```

Figure IV.1: données de départ

Après avoir écrit l'équation de la diffusion en une seule dimension, les conditions initiales (ICond) et les conditions aux limites (BConds), on écrit la forme de solution qu'on veut obtenir, puis on exécute pour avoir les résultats ou bien la solution de cette équation c'est-à-dire la concentration sous forme graphique en 2D ou en 3D.

```

eq-op 1d gaz fin.nb
In[135]:= Needs["PlotLegends`"]
x = 10^(-3); L = 1; tMax = 60; V = 0;
Equation =  $\partial_t C[x, t] - x \partial_{x,x} C[x, t] + V \partial_x C[x, t] == 0$ 
BConds = {C[0, t] == 1, C[L, t] == Exp[-1000 t]};
ICond = C[x, 0] = 1;
Sol = NDSolve[Join[{Equation}, BConds, {ICond}], C, {x, 0, L}, {t, 0, tMax}]
Cxt[x_, t_] := C[x, t] /. Sol[[1]]

In[136]:= C^(0,1)[x, t] - 0.09 C^(2,0)[x, t] = 0

In[137]:= {(C + InterpolatingFunction[{{0., 1.}, {0., 1.}], "<>"])}

In[138]:= Plot[{Cxt[0.5, t], Cxt[0.25, t], Cxt[0.2, t]}, {t, 0, tMax}, PlotLegend + {"Cxyt 0.5", "Cxyt 0.25", "Cxyt 0.2"}]

In[139]:=
Plot[{Cxt[x, 10], Cxt[x, 20], Cxt[x, 30]}, {x, 0, L}, PlotLegend + {"Cxyt,10", "Cxyt,20", "Cxyt,30"}]

In[140]:= Plot3D[Cxt[x, t], {x, 0, L}, {t, 0, tMax}]
    
```

Figure IV. 2 : l'obtention des résultats

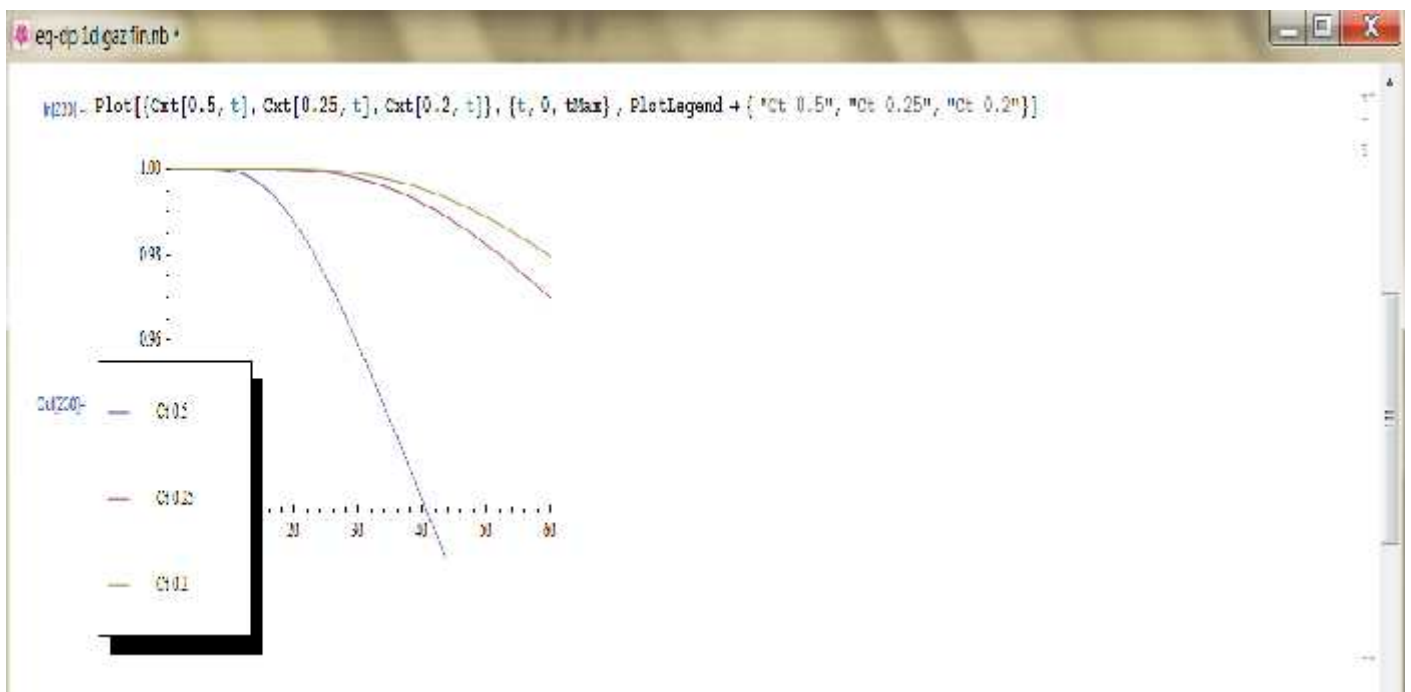


Figure IV. 3: résultats graphiques C=F(t)

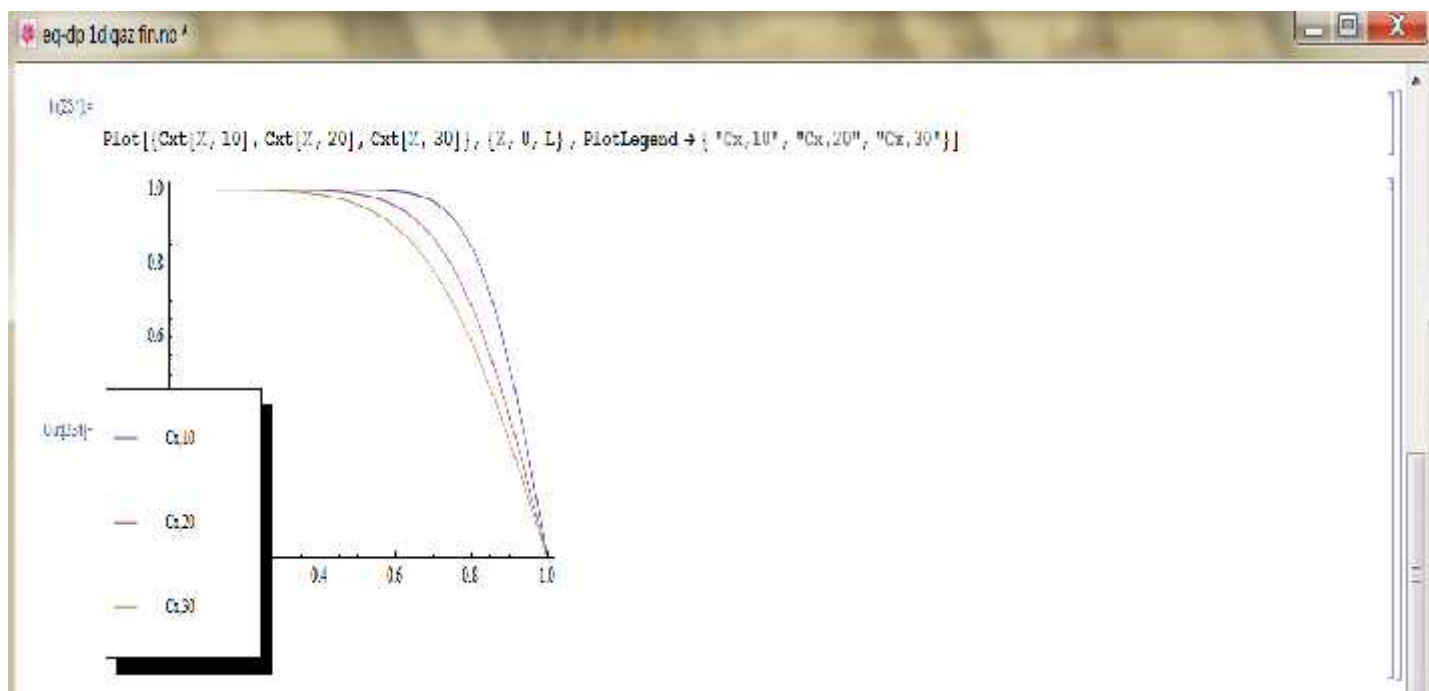


Figure IV .4: $C=F(X)$

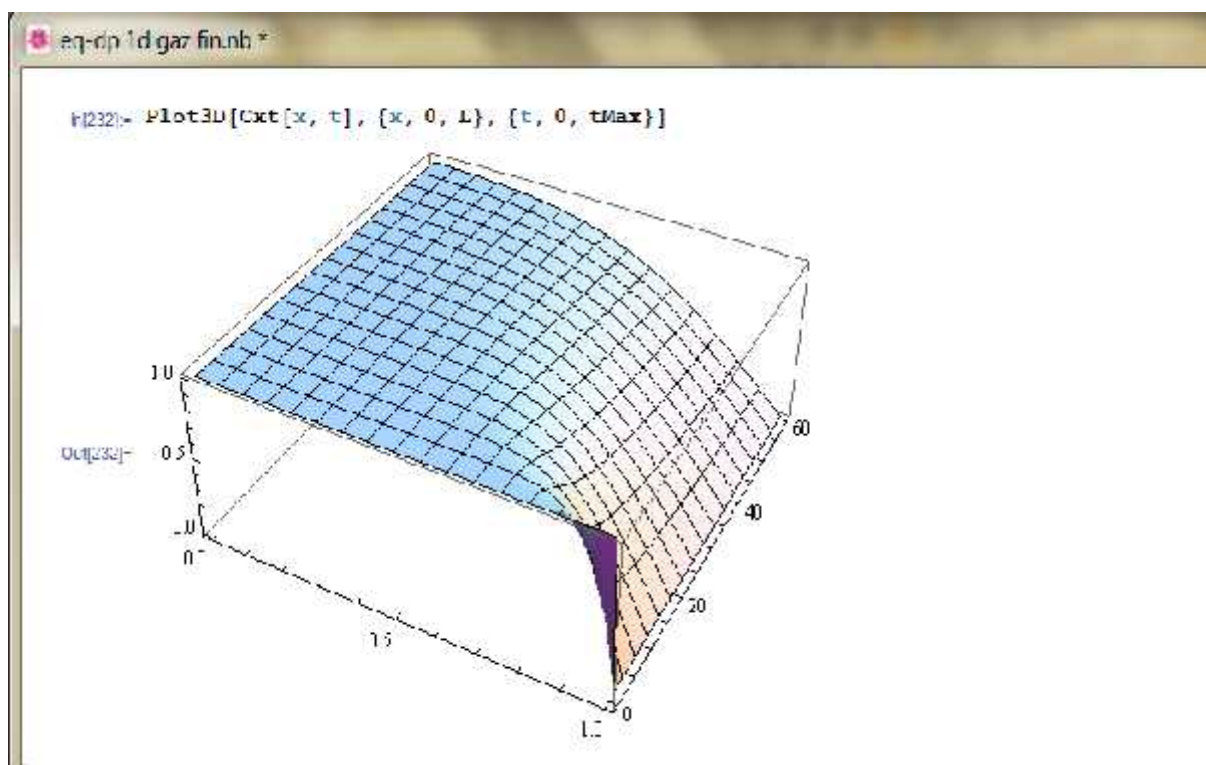


Figure IV. 5: résultat en 3 dimensions

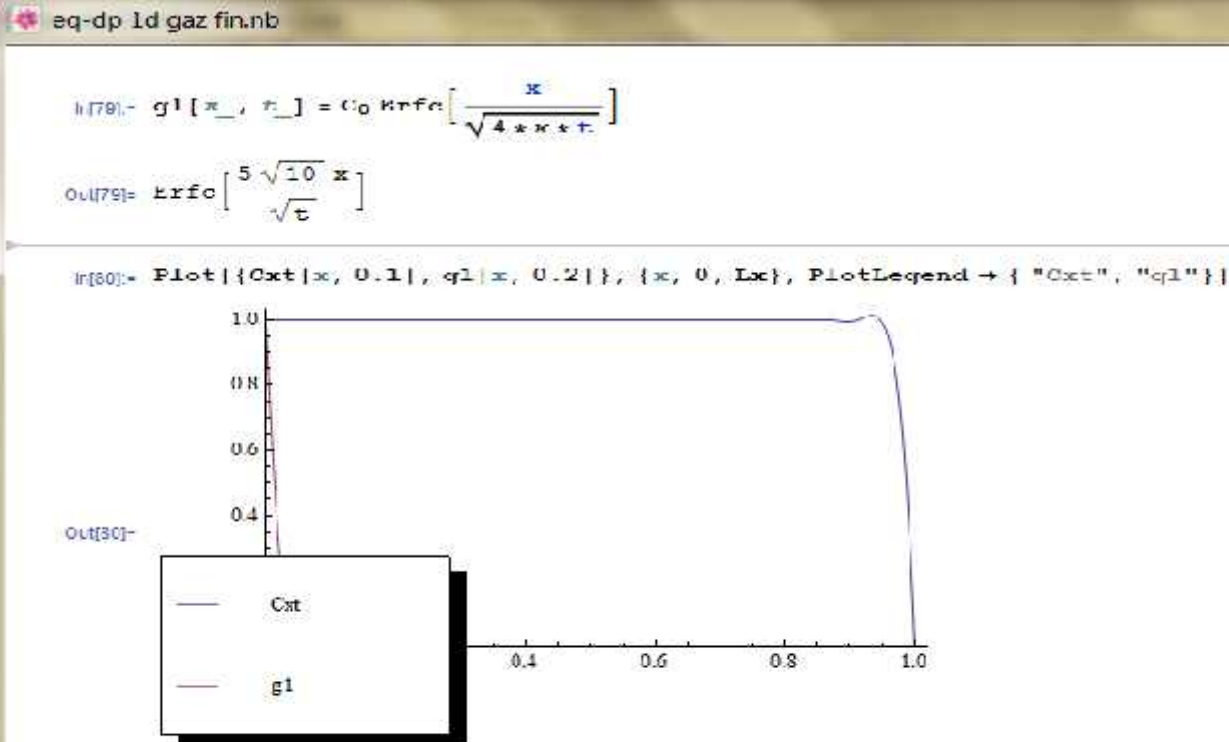


Figure IV 6: comparaison entre la solution numérique et analytique.

Interprétation des résultats :

Pour ce cas c'est dire pour le cas d'un gaz en une seule dimension :

D'après la figure 3 qu'illustre la variation de la concentration en fonction de temps nous avons :

- A $t=0$ s et pour un x fixé en 0.5 m, nous avons une concentration constante jusqu'à 16s et pour l'intervalle de temps [16s -60s] , une courbe plongeante ayant un maximal de concentration de $1\text{kg}/\text{m}^3$.
- Pour un x fixé en 0.25 m, nous avons une concentration constante pour l'intervalle de temps [0-28s] et une diminution de concentration sous forme une courbe plongeante pour [28-60s].
- Pour un x fixé en 0.2m, nous avons une concentration constante pour [0-30s] et une diminution sous forme une courbe plongeante pour [30-60s] .

D'après la figure 4 qui présente la variation de concentration en fonction de l'espace x , nous avons :

- Pour un temps fixé en 10s, la concentration reste constante dans l'intervalle $x \in [0-0.6\text{m}]$ et diminue sous forme une courbe toujours plongeante dans le reste de l'intervalle c'est dire lorsque $x \in [0.6-1\text{m}]$.

- Pour un temps fixé en 20s, la concentration reste constante dans l'intervalle $x \in [0-0.5m]$ et diminue sous forme une courbe toujours plongeante dans le reste de l'intervalle c'est dire lorsque $x \in [0.5-1m]$.
- Pour un temps fixé en 30s, la concentration reste constante dans l'intervalle $x \in [0-0.35m]$ et diminue sous forme une courbe toujours plongeante dans le reste de l'intervalle c'est dire lorsque $x \in [0.35-1m]$.

b) Le cas d'un coefficient de diffusivité égale à 0.03 m² /s:

```

In[325]= Needs["PlotLegends`"]
κ = 0.03; L = 1; tMax = 60; V = 0;
Equation = ∂xC[x, t] - κ ∂xxC[x, t] + V ∂tC[x, t] == 0
BConds = { C[0, t] == 1, C[L, t] == Exp[-1000 t] };
ICond = C[x, 0] == 1;
Sol = NDSolve[Join[{Equation}, BConds, {ICond}], C, {x, 0, L}, {t, 0, tMax}]
Cxt[x_, t_] := C[x, t] /. Sol[[1]]

Out[327]= C(C,1)[x, L] - 0.03 C(2,C)[x, 0] = 0

Out[330]= {C -> InterpolatingFunction[{{0., 1.}, {0., 60.}}, <>]}

In[312]= C(C,1)[x, t] - 0.09 C(2,D)[x, t] = 0
Out[312]= C(C,1)[x, t] - 0.09 C(2,C)[x, t] = 0

In[313]= {C -> InterpolatingFunction[{{0., 1.}, {0., 1.}}, <>]}
Out[313]= {C -> InterpolatingFunction[{}]}
    
```

Figure IV .7: données de base

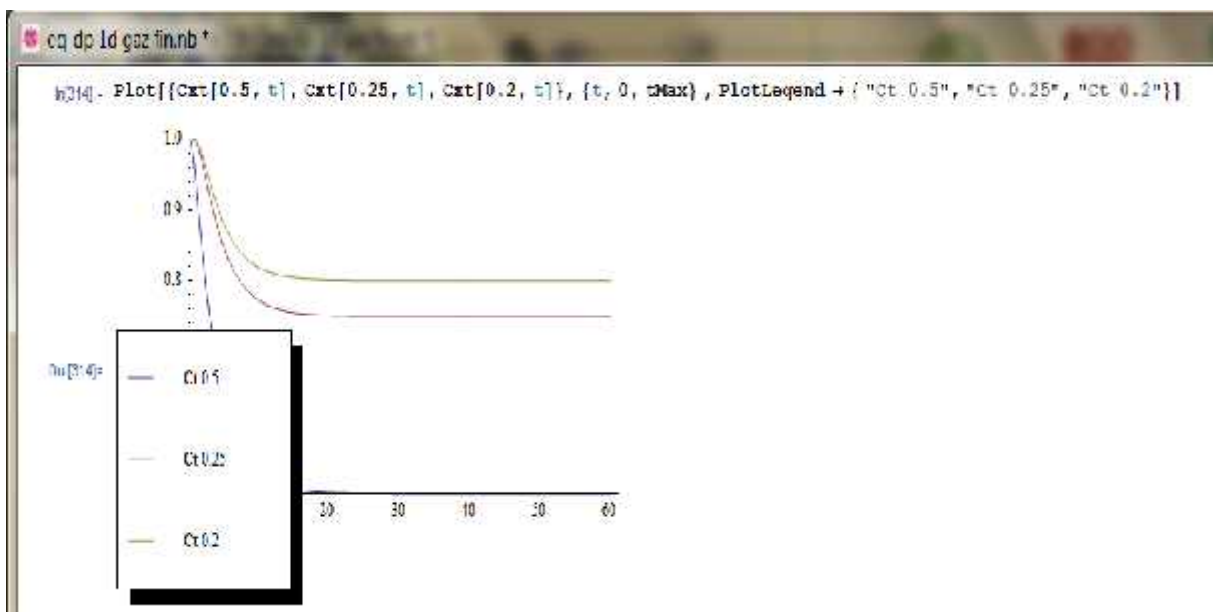
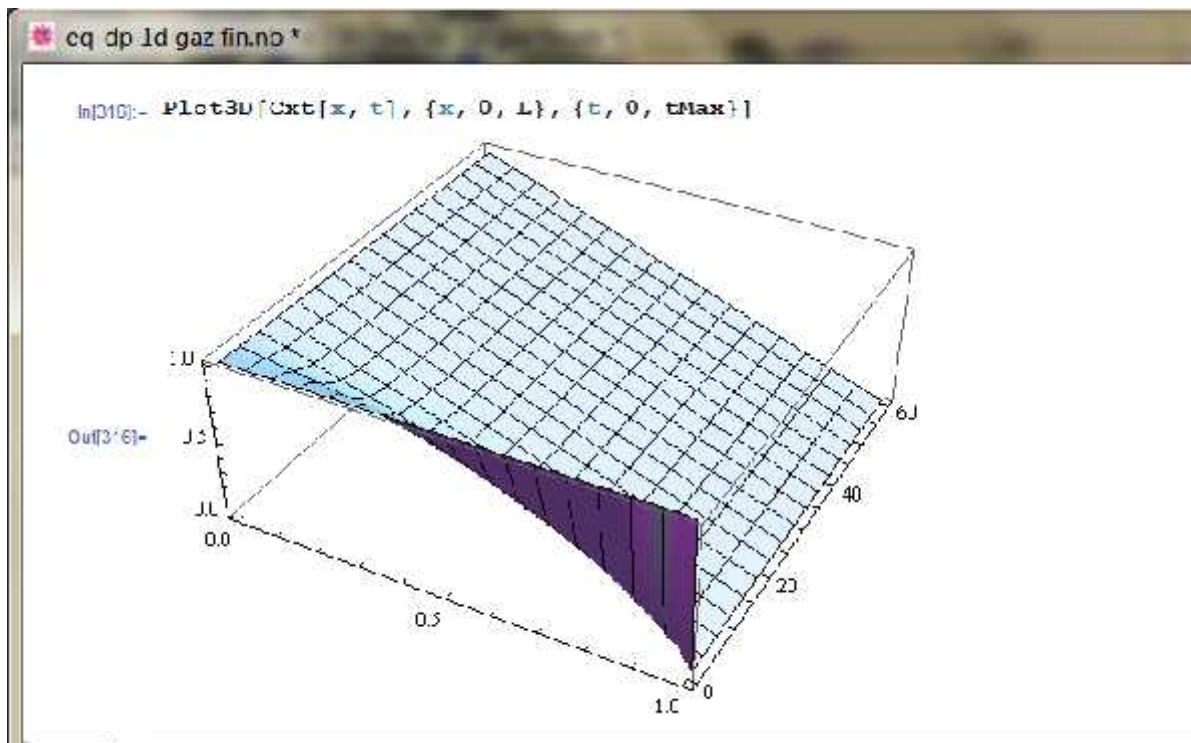
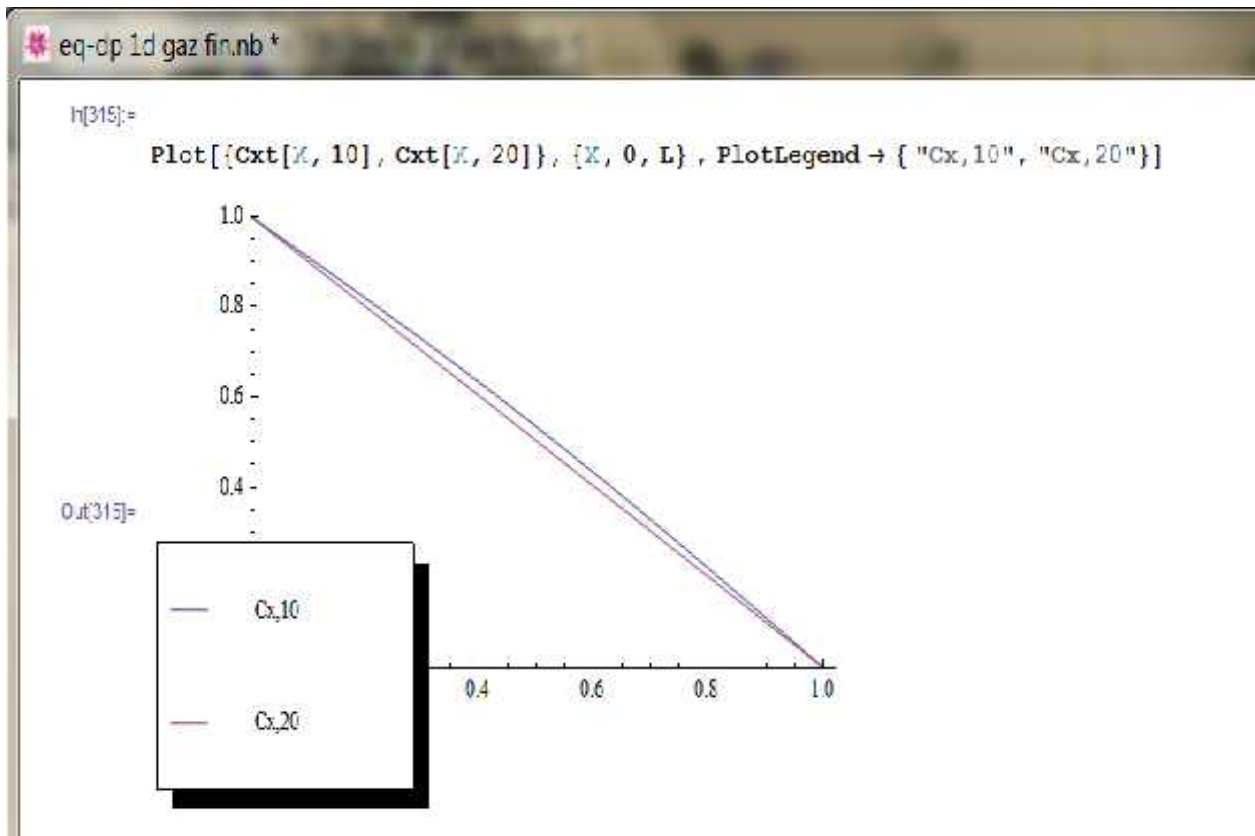


Figure IV .8: résultat la Concentration en fonction de temps



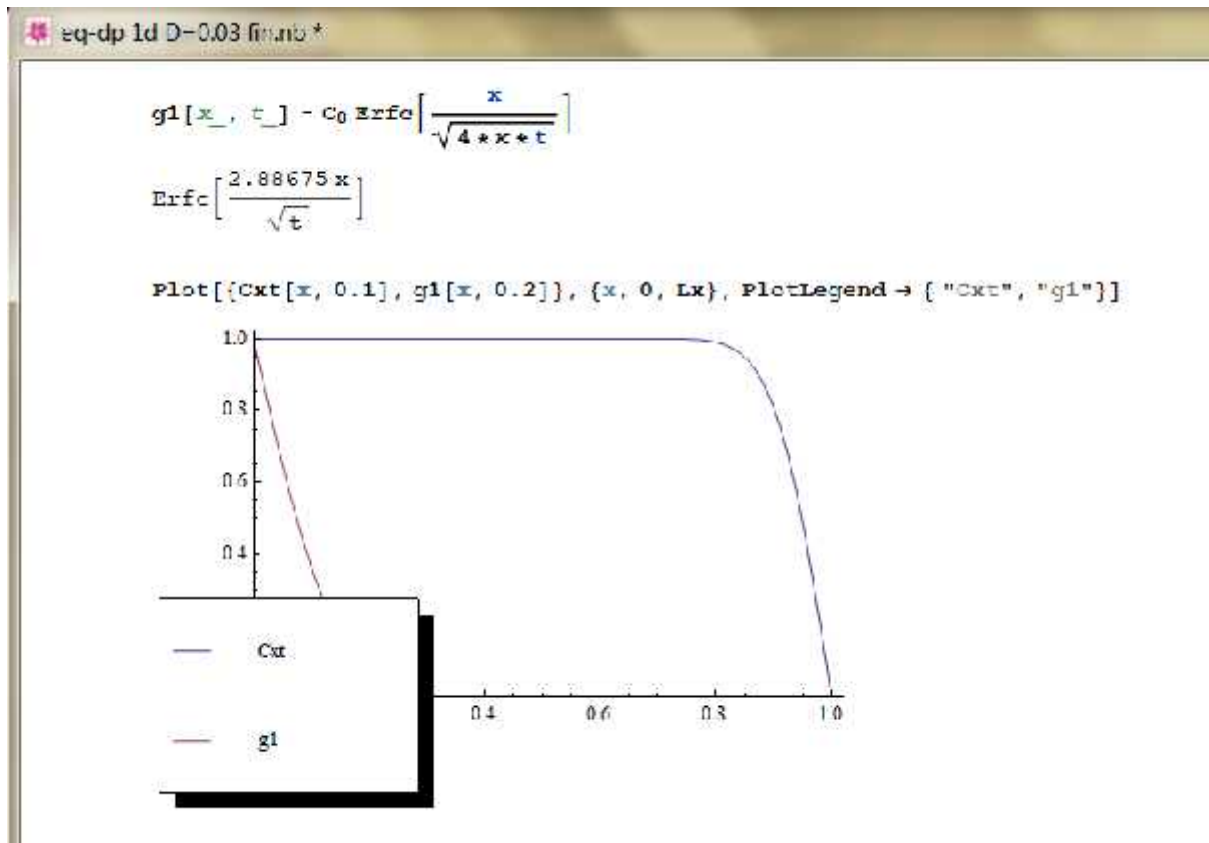


Figure IV .11: comparaison entre la solution numérique et analytique pour le cas d'un $D=0.03\text{m}^2/\text{s}$.

Interprétation des résultats :

D'après la figure 8 qu'illustre la variation de la concentration en fonction de temps nous avons :

- Pour un x fixé en 0.5 m, nous remarquons une diminution de concentration jusque quelle atteint le zéros pour un $t=20\text{s}$.
- Pour un x fixé en 0.25 m, nous avons une diminution de la concentration pour l'intervalle de temps [0-18s] et une stabilisation de concentration pour le reste de l'intervalle.
- Pour un x fixé en 0.2m, nous avons une diminution de la concentration pour $t \in [0-16\text{s}]$ et une stabilisation pour [16 -60s] .

D'après la figure 9 qui présente la variation de concentration en fonction de l'espace x, nous avons :

- Pour un temps fixé en 10s, nous avons une diminution de la concentration sous forme une droite incliné de pente négative.
- Pour un temps fixé en 20s, la même chose pour le cas précédent.

c) Le cas d'un coefficient de diffusivité égale à $0.09\text{m}^2/\text{s}$:

```

eq-dp 1d D=0.09fin.nb

Needs["PlotLegends`"]
x = 0.09; L = 1; tMax = 60; v = 0;
Equation = Dt[C[x, t]] - κ Dxx[C[x, t]] + v DxC[x, t] == 0
BConds = {C[0, t] == 1, C[L, t] == Exp[-1000 t]};
ICond = C[x, 0] == 1;
Sol = NDSolve[Join[{Equation}, BConds, {ICond}], C, {x, 0, L}, {t, 0, tMax}]
Cxt[x_, t_] := C[x, t] /. Sol[[1]]

C(1,1)[x, t] - 0.09 C(2,2)[x, t] == 0

{{C -> InterpolatingFunction[{{0., 1.}, {0., 60.}}, <>]}}

C(1,2)[x, t] - 0.09 C(2,1)[x, t] == 0
C(1,2)[x, t] - 0.09 C(2,2)[x, L] == 0

{{C -> InterpolatingFunction[{{0., 1.}, {0., 1.}}, "<>"]}}
{{C -> InterpolatingFunction[...]}
    
```

Figure IV .12 : Données de départ pour $D= 0.09\text{m}^2/\text{s}$.

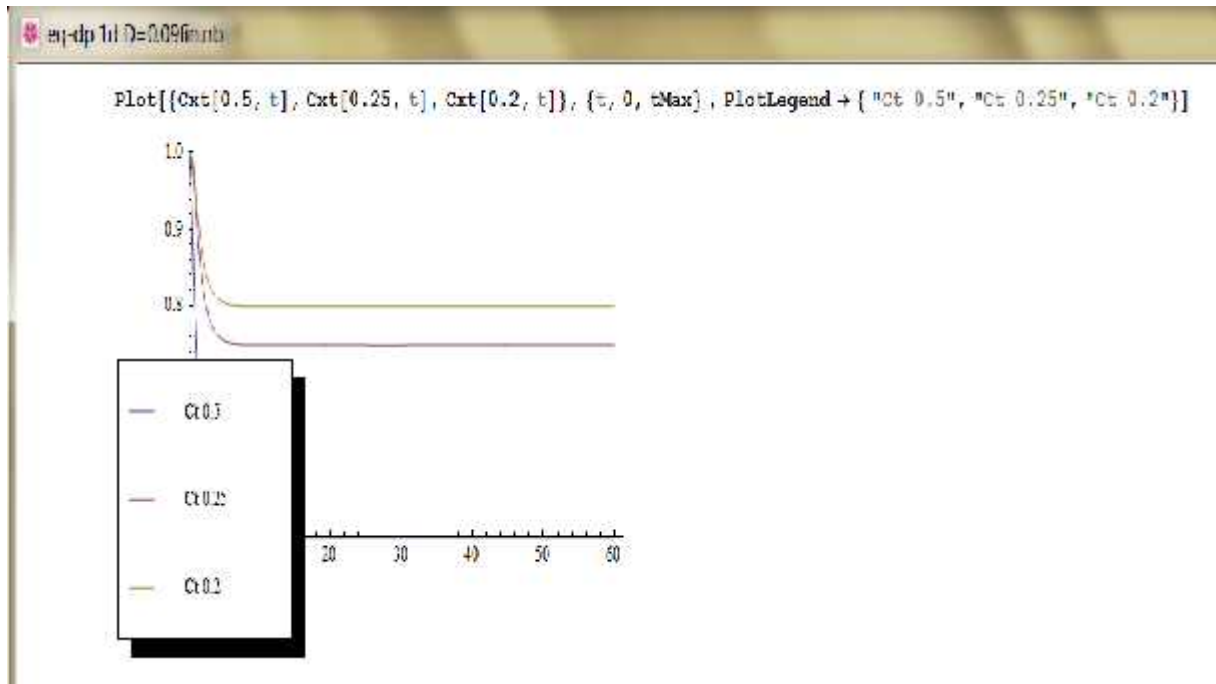


Figure IV .13: la variation de concentration en fonction de temps pour $D=0.09\text{m}^2/\text{s}$.

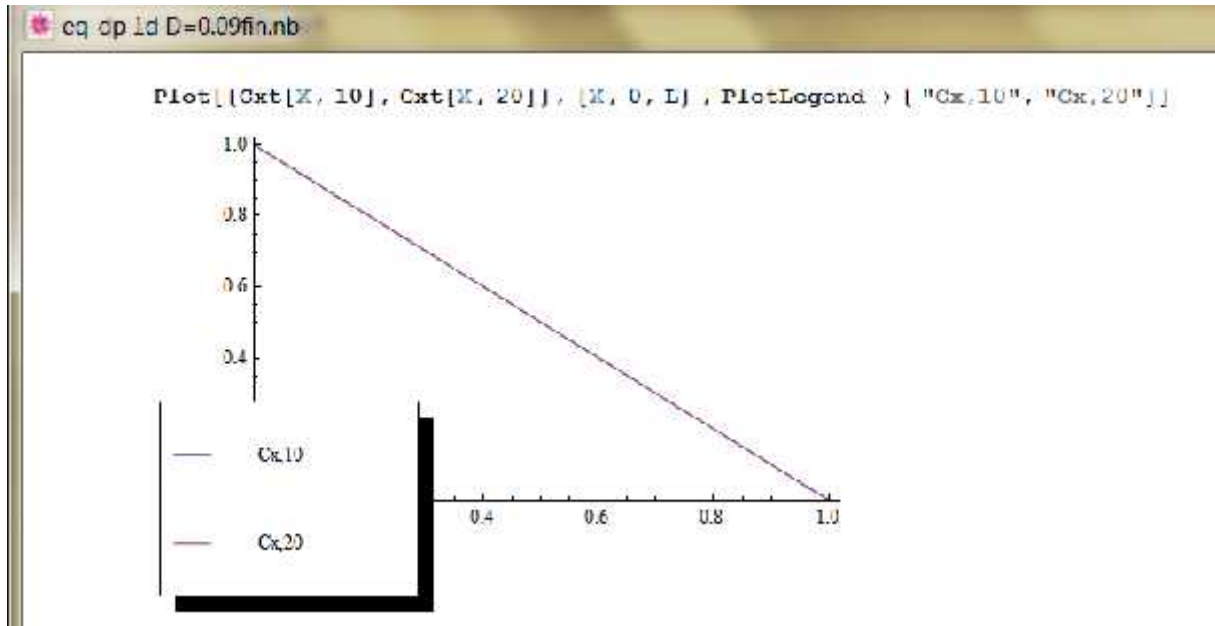


Figure IV .14: la variation de concentration en fonction de l'espace pour $D=0.09\text{m}^2/\text{s}$.

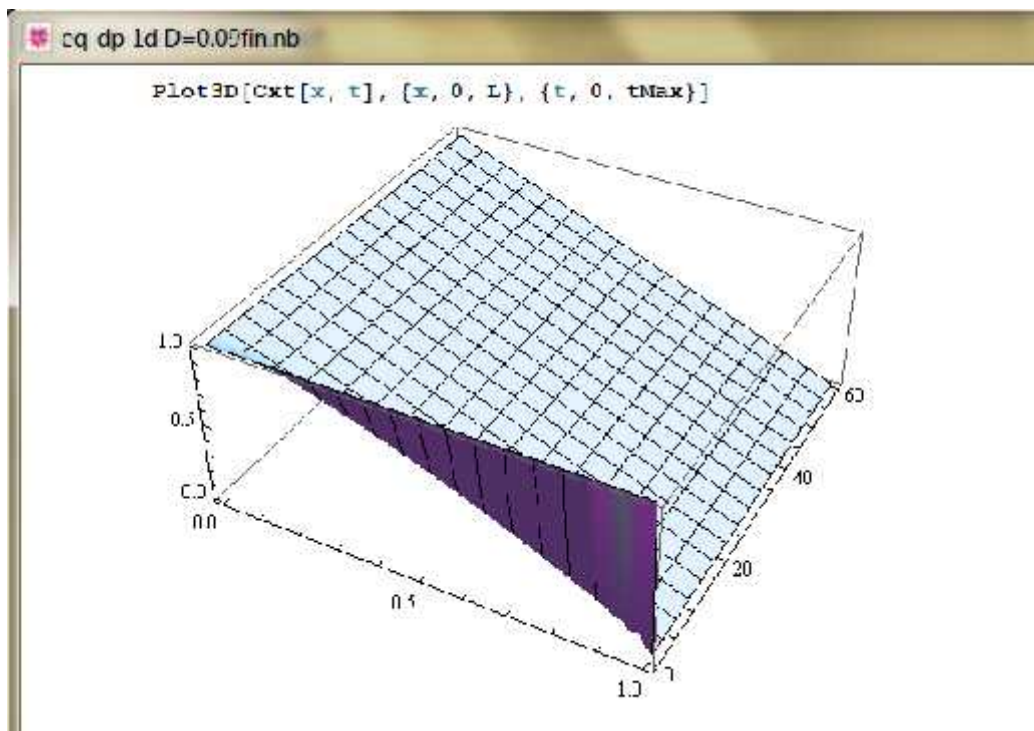


Figure IV . 15: les résultats en 3 dimensions pour $D=0.09\text{m}^2/\text{s}$.

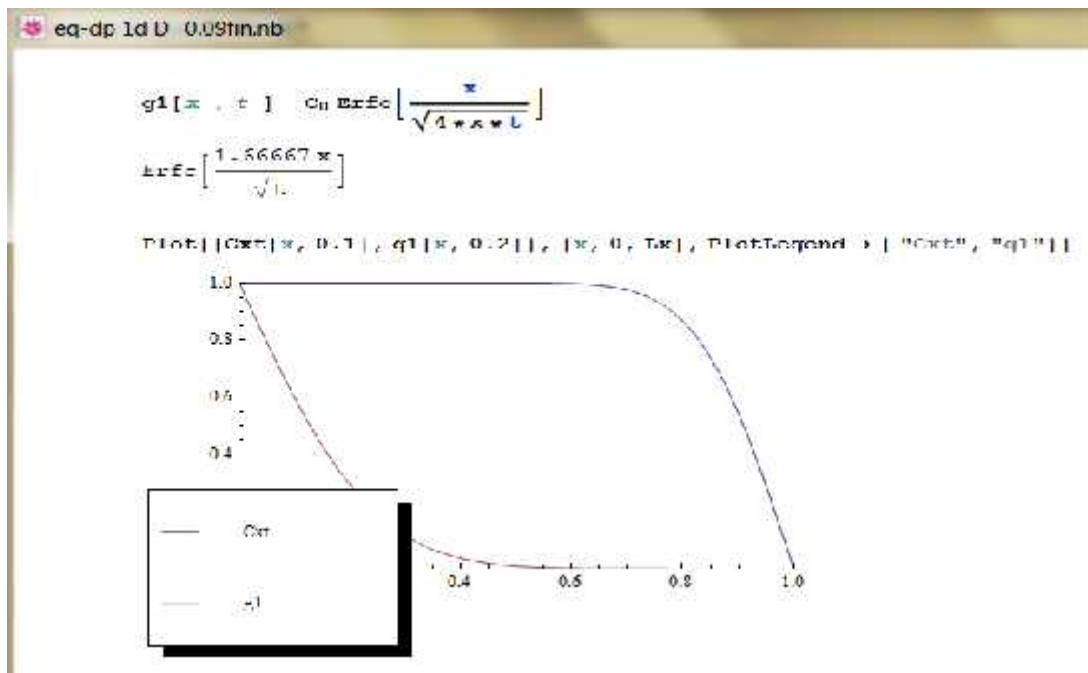


Figure IV. 16: La comparaison entre la solution numérique et analytique pour D=0.09m²/s

Interprétation des résultats :

D’après la figure 13 qu’illustre la variation de la concentration en fonction de temps nous avons :

- Pour un x fixé en 0.5 m, nous remarquons une diminution de concentration jusque quelle atteint le zéros pour un t= 5s .
- Pour un x fixé en 0.25 m, nous avons une diminution de la concentration pour l’intervalle de temps [0-8s] et une stabilisation de concentration pour le reste de l’intervalle.
- Pour un x fixé en 0.2m, nous avons une diminution de la concentration pour t∈[0-10s] et une stabilisation pour [8 -60s] .

D’après la figure 12 qui présente la variation de concentration en fonction de l’espace x, nous avons :

- Pour un temps fixé en 10s, nous avons une diminution de la concentration sous forme une droite incliné de pente négative.
- Pour un temps fixé en 20s, nous remarquons une disparition de la droite.

d) Le cas de coefficient de diffusivité égale à $0.1 \text{ m}^2/\text{s}$:

```

eq-dp 1d D=10^-5finno ^
In[165]: Needs["PlotLegends "]
x = 0.1; L = 1; tMax = 60; v = 0;
Equation =  $\partial_t C[x, t] - x \partial_{x,x} C[x, t] + v \partial_x C[x, t] == 0$ 
BConds = { C[0, t] == 1, C[L, t] == Exp[-1000 t] };
ICond = C[x, 0] == 1;
Sol = NDSolve[Join[{Equation}, BConds, [ICond]], C, {x, 0, L}, {t, 0, tMax}]
Cxt[x_, t_] := C[x, t] /. Sol[[1]]

Out[167]=  $C^{(2,1)}[x, t] - 0.1 C^{(2,0)}[x, t] == 0$ 

Out[170]= {{C -> InterpolatingFunction[{{0., 1.}, {0., 60.}], <>]};

In[172]=  $C^{(2,1)}[x, t] - 0.09 C^{(2,0)}[x, t] == 0$ 
Out[172]=  $C^{(2,1)}[x, t] - 0.09 C^{(2,0)}[x, t] == 0$ 

In[173]= {{C -> InterpolatingFunction[{{0., 1.}, {0., 1.}], "<>"]}}
Out[173]= {{C -> InterpolatingFunction[]}}
    
```

Figure IV .17: Données de départ pour $D=0.1 \text{ m}^2/\text{s}$

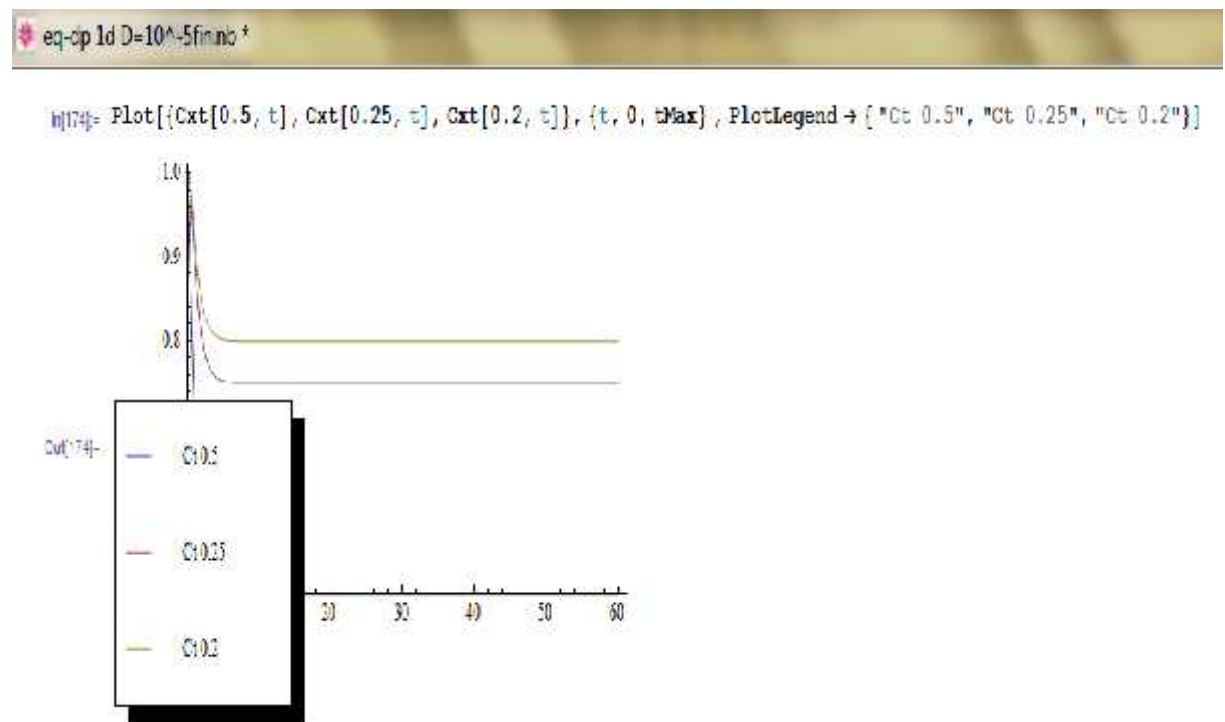


Figure IV. 18: la variation de concentration en fonction de temps pour $D=0.1 \text{ m}^2/\text{s}$.

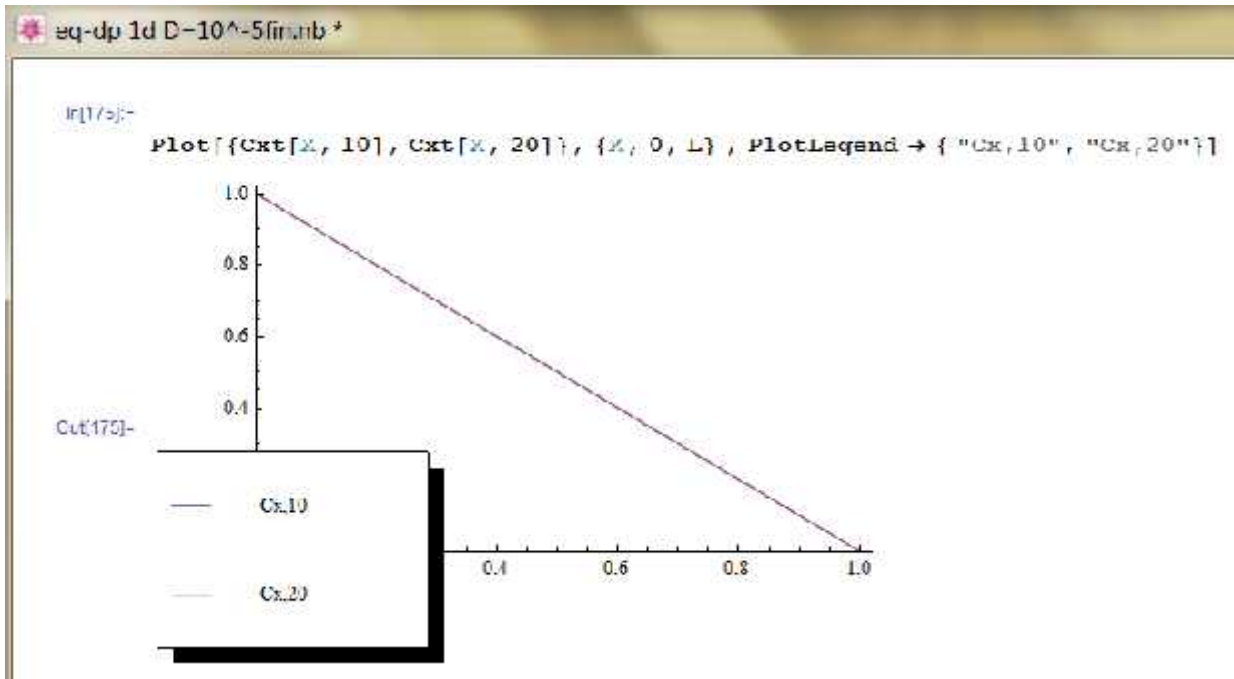


Figure IV. 19: la variation de concentration en fonction de l'espace pour $D=0.1 \text{ m}^2/\text{s}$.

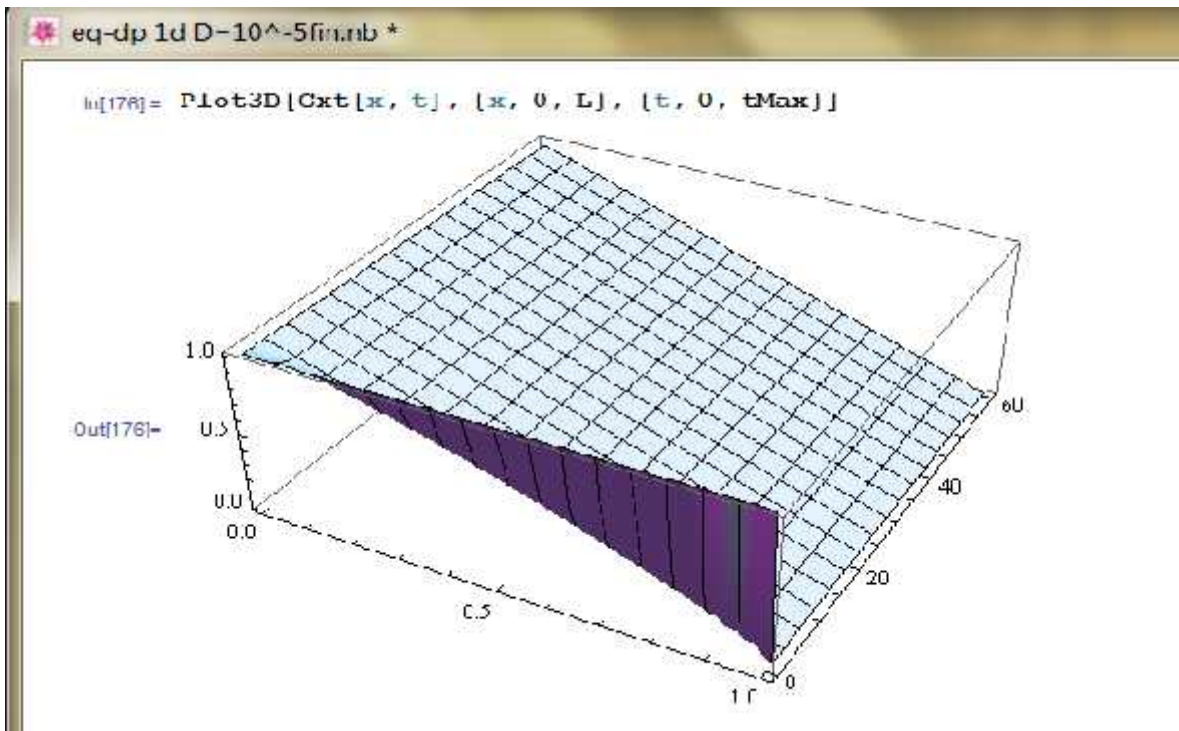


Figure IV. 20: les résultats en 3 dimensions pour $D=0.1 \text{ m}^2/\text{s}$.

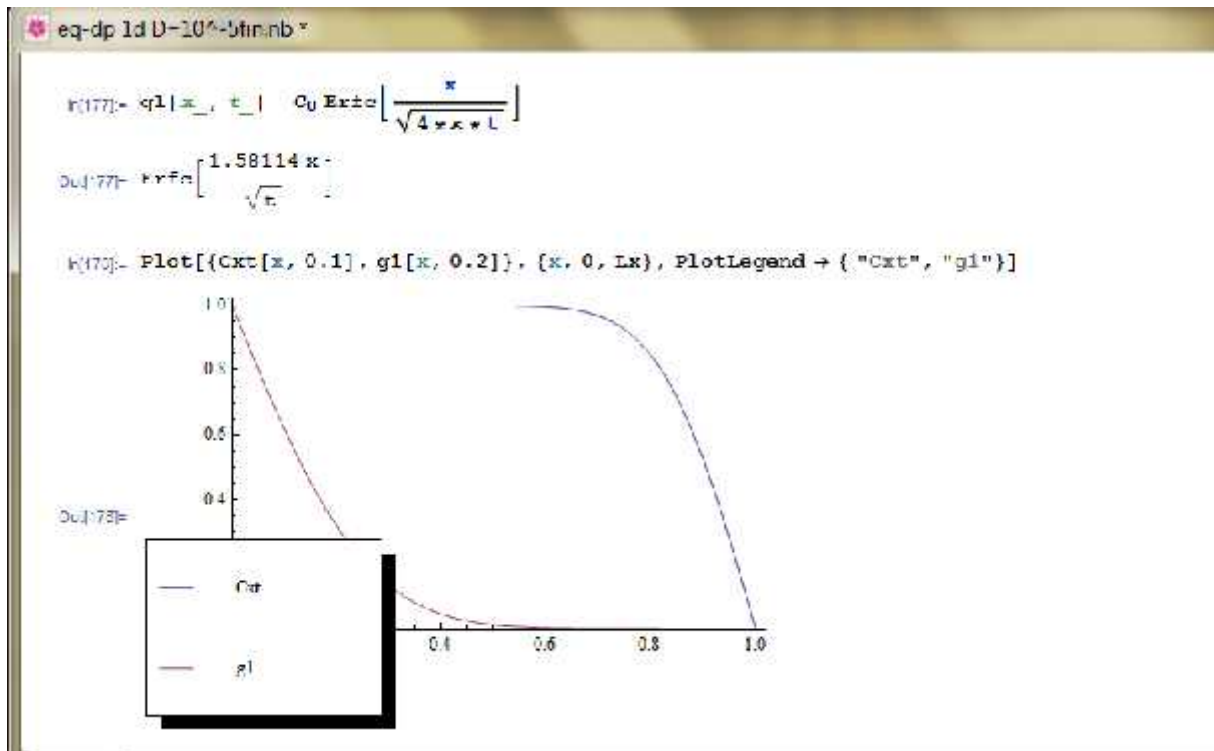


Figure IV. 21: comparaison entre la solution numérique et analytique pour $D=0.1 \text{ m}^2/\text{s}$.

Interprétation des résultats :

D'après la figure 18 qu'illustre la variation de la concentration en fonction de temps nous avons :

- Pour un x fixé en 0.5 m, nous remarquons une diminution de concentration jusque quelle atteint le zéro pour un $t=3\text{s}$.
- Pour un x fixé en 0.25 m, nous avons une diminution de la concentration pour l'intervalle de temps $[0-4\text{s}]$ et une stabilisation de concentration pour le reste de l'intervalle.
- Pour un x fixé en 0.2m, nous avons une diminution de la concentration pour $t \in [0-3\text{s}]$ et une stabilisation pour $[3-60\text{s}]$.

D'après la figure 19 qui présente la variation de concentration en fonction de l'espace x , nous avons :

- Pour un temps fixé en 10s, nous avons une diminution de la concentration sous forme d'une droite inclinée de pente négative.
- Pour un temps fixé en 20s, nous remarquons une disparition de la droite.

e) Le cas de coefficient de diffusivité égale à $1\text{m}^2/\text{s}$:

```

eq-dp 1d D=1m.nb *

In[179]: Needs["PlotLegends`"]
κ = 1; L = 1; tMax = 60; V = 0;
Equation = ∂tC[x, t] - κ ∂xxC[x, t] + V ∂xC[x, t] == 0
BConds = {C[0, t] == 1, C[L, t] == Exp[-1000 t]};
ICond = C[x, 0] == 1;
Sol = NDSolve[Join[Equation], BConds, [ICond]], C, {x, 0, L}, {t, 0, tMax}]
Cxt[x_, t_] := C[x, t] /. Sol[[1]]

Out[181]= C(0,1)[x, t] C(2,0)[x, t] == 0

Out[104]= {{C -> InterpolatingFunction[{{0., 1.}, {0., 60.}}, <>]}}

In[136]: C(0,1)[x, t] - 0.09 C(2,0)[x, t] == 0
Out[166]= C(0,1)[x, t] - 0.09 C(2,0)[x, t] == 0

In[137]: {{C -> InterpolatingFunction[{{0., 1.}, {0., 1.}], "<>"]}}
Out[167]= {{C -> InterpolatingFunction[[]]}}
    
```

Figure IV.22 : Données de départ pour $D=1\text{ m}^2/\text{s}$.

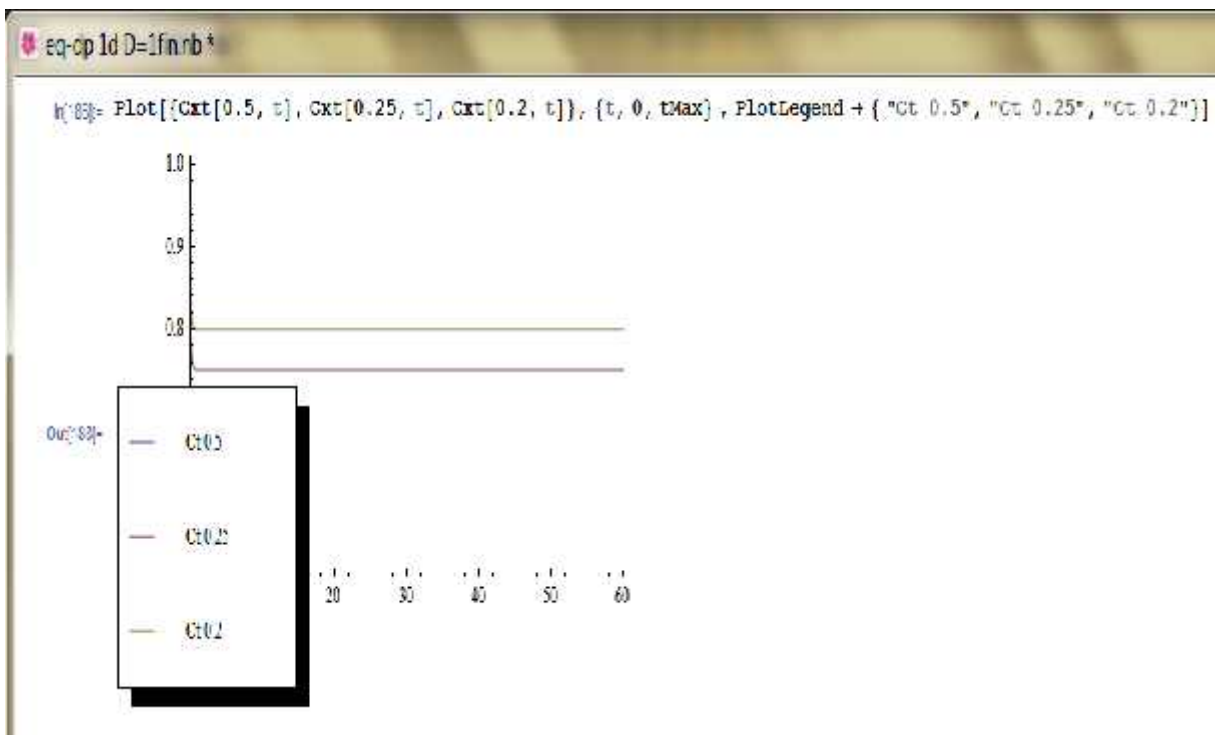


Figure IV.23 : variation de concentration en fonction de temps pour $D=1\text{ m}^2/\text{s}$.

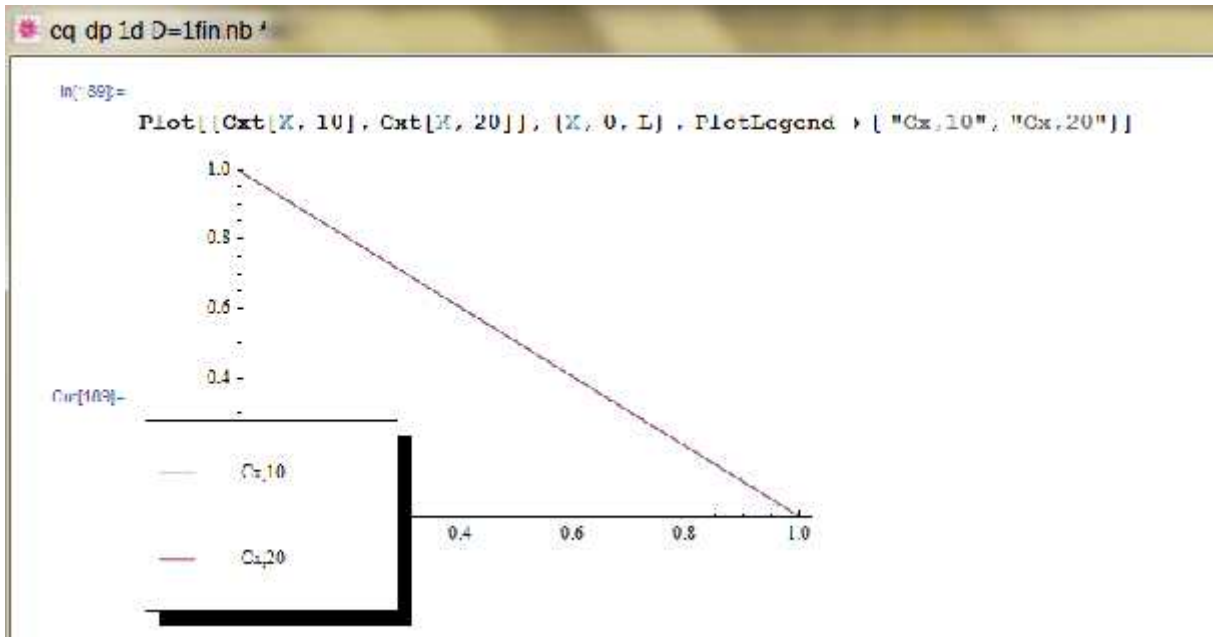


Figure IV.24 : variation de concentration en fonction de l'espace pour $D=1 \text{ m}^2/\text{s}$.

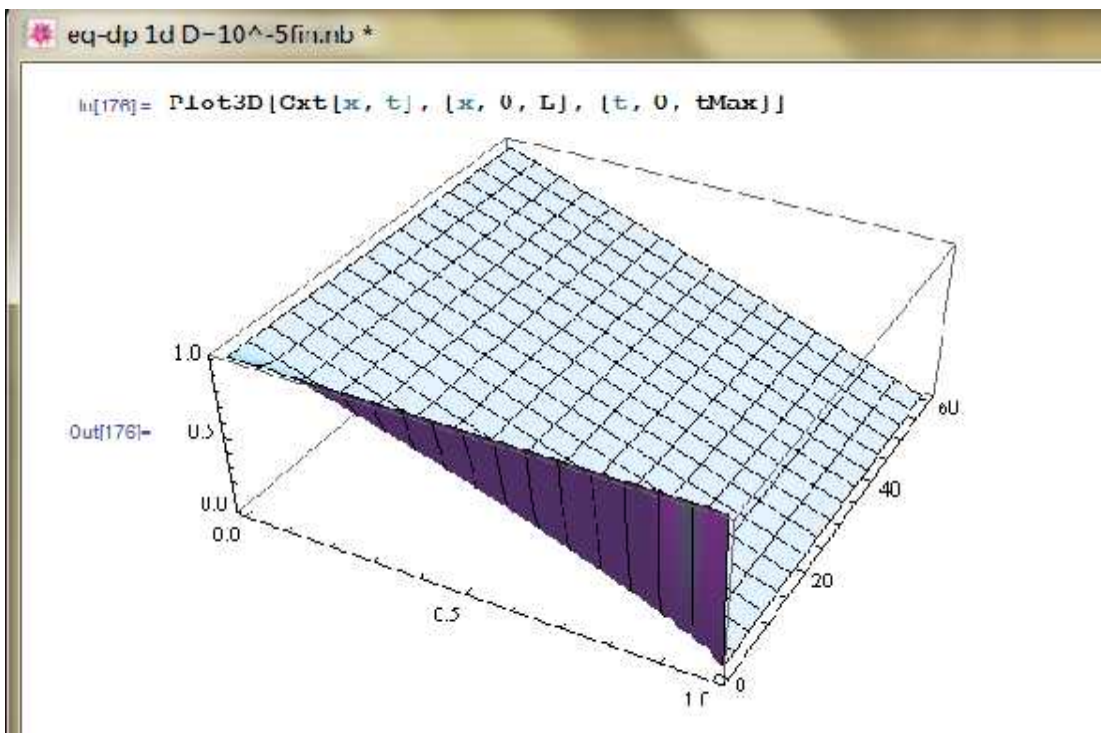


Figure IV.25: les résultats en 3 dimensions pour $D=1 \text{ m}^2/\text{s}$.

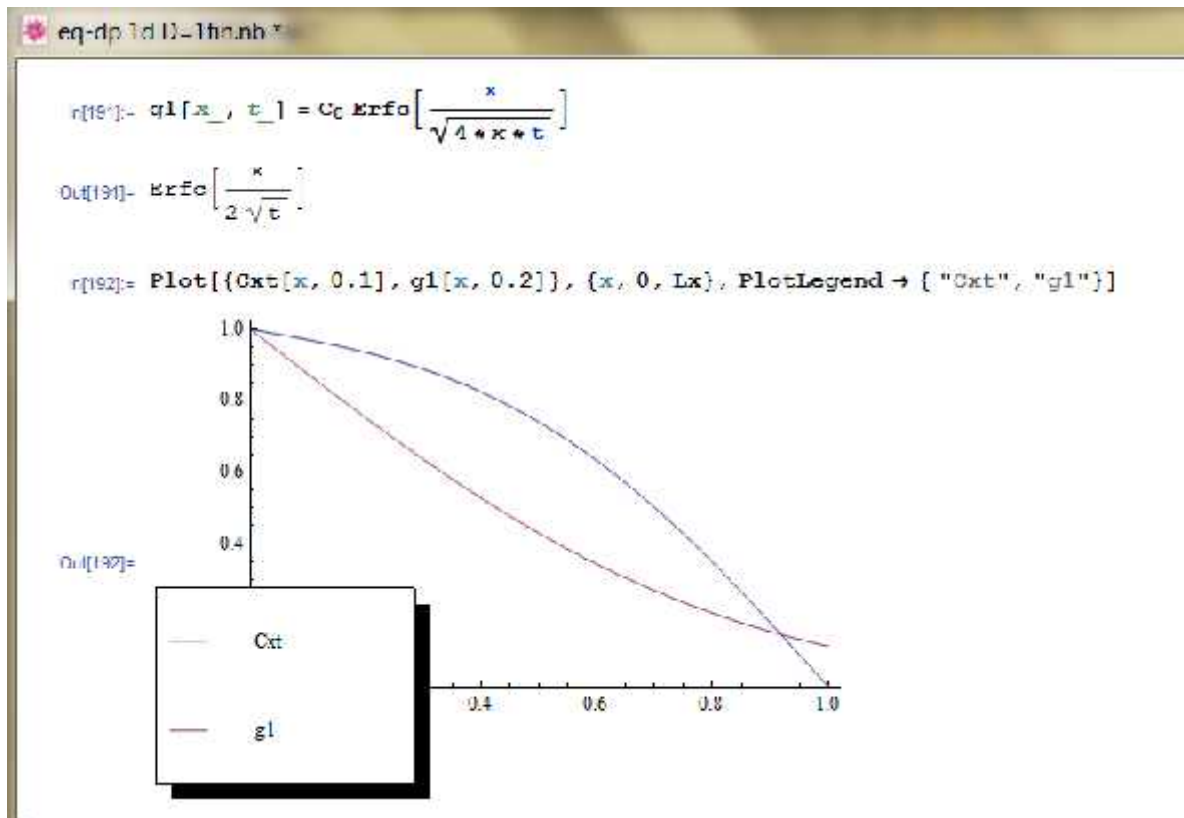


Figure 26 : comparaison entre la solution numérique et analytique pour $D=1 \text{ m}^2/\text{s}$.

Interprétation des résultats :

D'après la figure 23 qui illustre la variation de la concentration en fonction de temps nous avons :

- Pour un x fixé en 0.5 m, nous remarquons une disparition de graphique.
- Pour un x fixé en 0.25 m, nous avons une diminution brusque de la concentration pour des instants proches de 0 et une stabilisation de concentration pour le reste de l'intervalle.
- Pour un x fixé en 0.2m, nous avons une diminution brusque de la concentration pour des instants proches de zéros et une stabilisation pour le reste de l'intervalle .

D'après la figure 24 qui présente la variation de concentration en fonction de l'espace x , nous avons :

- Pour un temps fixé en 10s, nous avons une diminution de la concentration sous forme une droite incliné de pente négative.
- Pour un temps fixé en 20s, nous remarquons une disparition de la droite.

Comparaison des résultats : la solution numérique et analytique

D'après les figures 6, 11, 16, 21 et 26 nous remarquons que la solution numérique donnée par le logiciel MATHEMATICA diverge de la solution analytique respectivement pour $D=10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$, $D=0.03 \text{ m}^2/\text{s}$ et $D=0.09 \text{ m}^2/\text{s}$, et converge pour des valeurs proches de l'unité.

IV.2. 4. La simulation avec MATHEMATICA de l'équation de diffusion en deux dimensions :

a) Le cas d'un gaz quelconque :

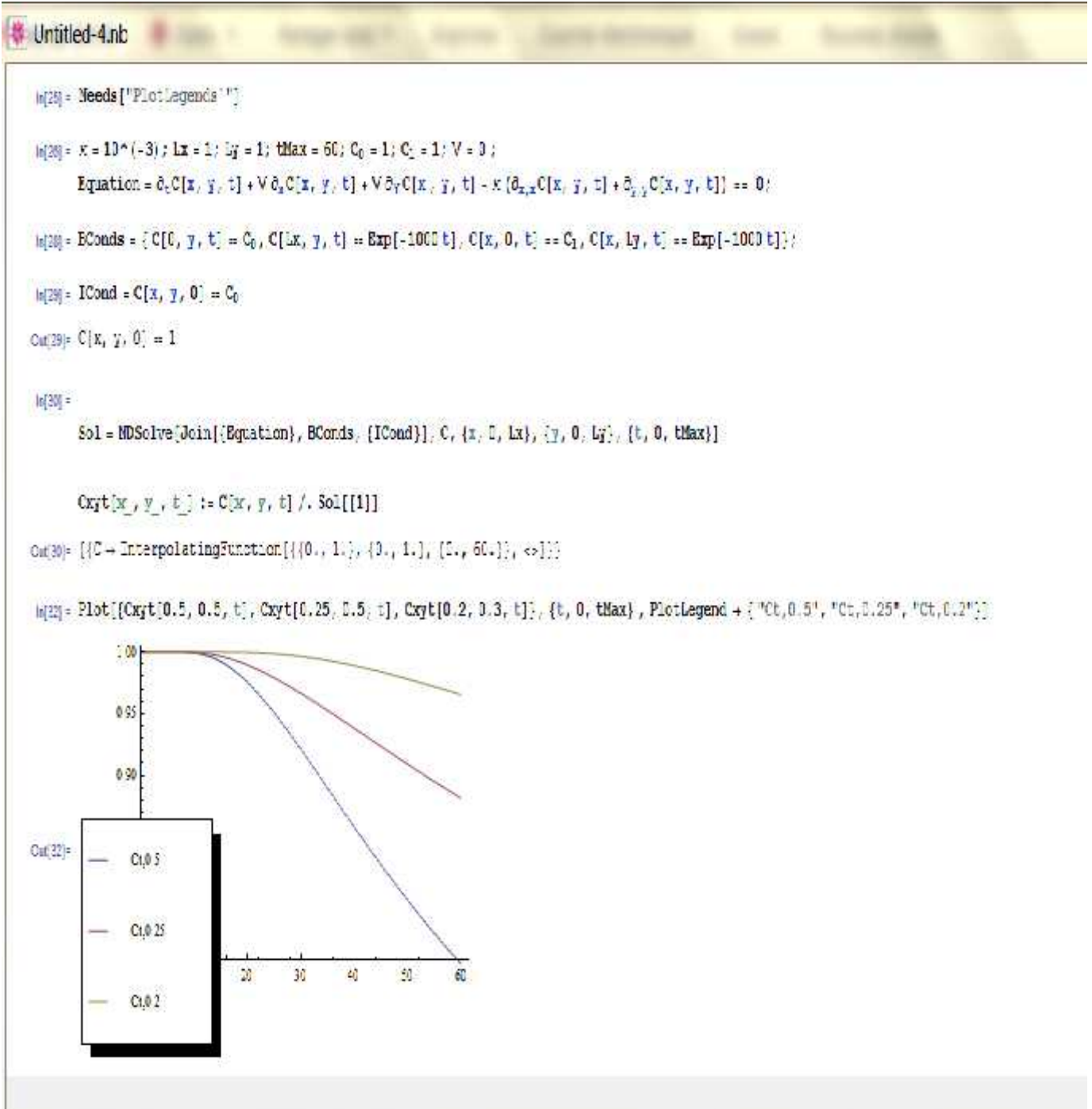


Figure IV .27: la variation de concentration en fonction de temps pour un gaz en 2 dimensions.

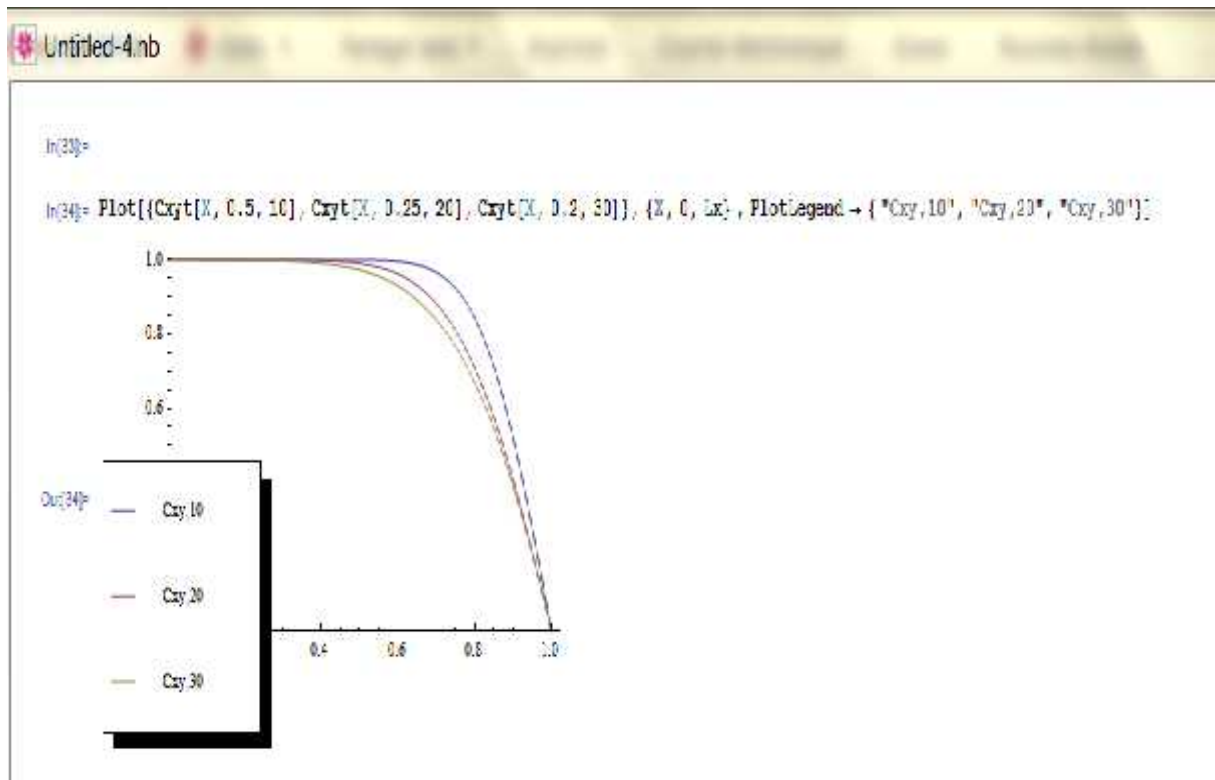


Figure IV .28: la concentration en fonction de l'espace.

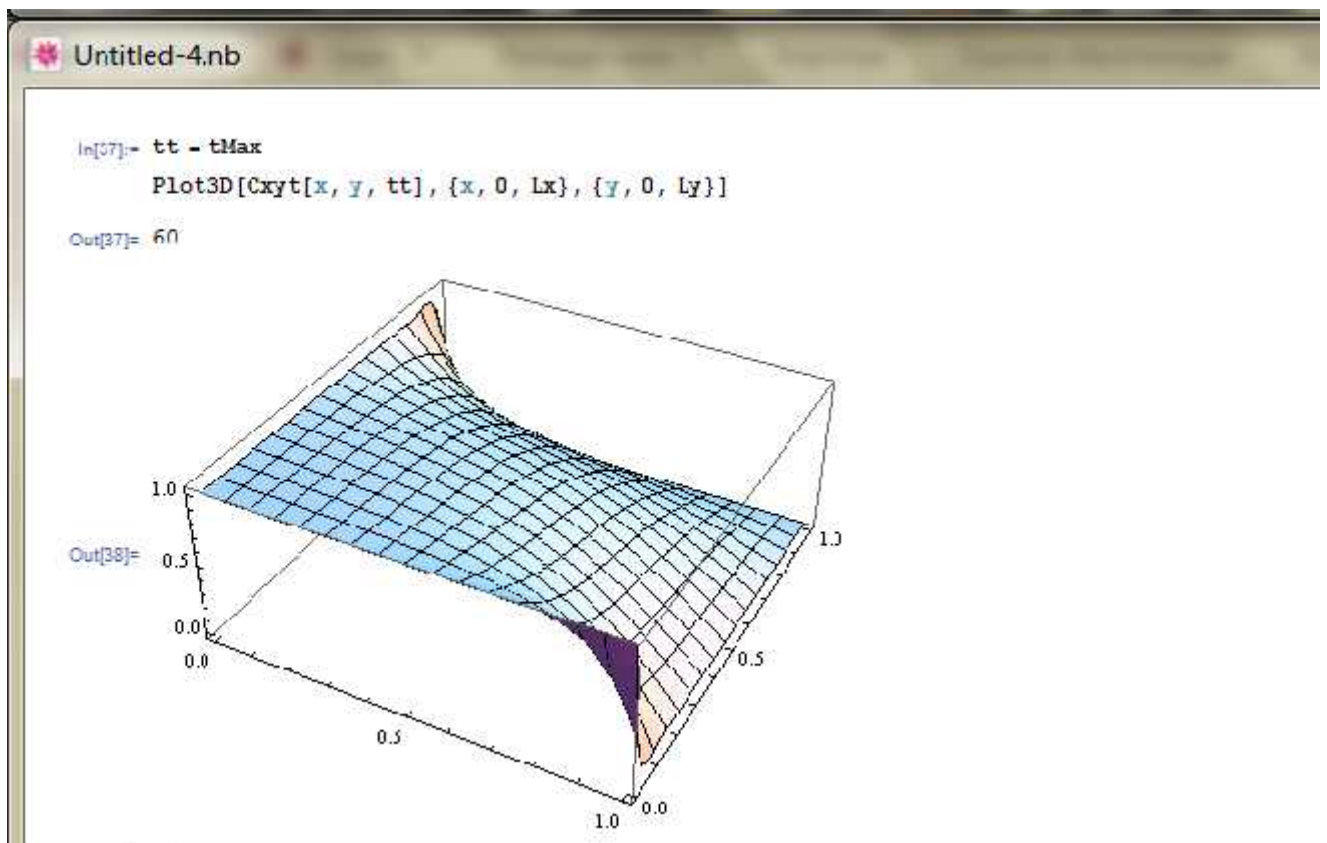


Figure IV .29: résultat en 3 dimensions.

Interprétation des résultats :

D'après la figure 27 qu'illustre la variation de la concentration en fonction de temps nous avons :

- Pour un x fixé en 0.5 m, nous avons une concentration constante sur l'intervalle [0-19 s] et une diminution de cette dernière sur l'intervalle [19-60s] et coupe l'axe des abscisses pour $t=0.95$ s .
- Pour un x fixé en 0.25 m, nous avons une concentration constante sur l'intervalle [0-20 s] et une diminution de cette dernière sur l'intervalle [20-60s].
- Pour un x fixé en 0.2m, nous avons une concentration constante sur l'intervalle [0-25 s] et une diminution de cette dernière sur l'intervalle [25-60s].

D'après la figure 28 qui présente la variation de concentration en fonction de l'espace x , nous avons :

- Pour un temps fixé en 10s, nous avons une concentration constante sur l'intervalle [0-0.55m] et une diminution sur $x \in [0.55-1m]$.
- Pour un temps fixé en 20s, nous avons une concentration constante sur l'intervalle [0-0.5m] et une diminution sur $x \in [0.5-1m]$.
- Pour un temps fixé en 30s, nous avons une concentration constante sur l'intervalle [0-0.4m] et une diminution sur $x \in [0.4-1m]$

b) Le cas d'un coefficient de diffusivité égale à $0.09 \text{ m}^2/\text{s}$:

```

eq-dp-2dim d=0.09.nb

In[193]:= Needs["PlotLegends`"]
κ = 0.09; Lx = 1; Ly = 1; tMax = 60; C0 = 1; C1 = 1; V = D;
Equation = ∂tC[x, y, t] + V ∂xC[x, y, t] + V ∂yC[x, y, t] - κ (∂x,xC[x, y, t] + ∂y,yC[x, y, t]) == C;

In[196]:= BConds = { C[0, y, t] == C0, C[Lx, y, t] == Exp[-1000 t], C[x, 0, t] == C1, C[x, Ly, t] == Exp[-1000 t] };

In[197]:= ICond = C[x, y, 0] == C0

Out[197]:= C[x, y, 0] == 1

In[198]:=
Sol = NDSolve[Join[{Equation}, BConds, {ICond}], C, {x, 0, Lx}, {y, 0, Ly}, {t, 0, tMax}]

Cxyt[x_, y_, t_] := C[x, y, t] /. Sol[[1]]

Out[199]:= {{C -> InterpolatingFunction[{{0., 1.}, {0., 1.}, {0., 60.}], <>}}

```

Figure IV.30: Données de départ pour $D=0.09 \text{ m}^2/\text{s}$ pour 2 dimensions

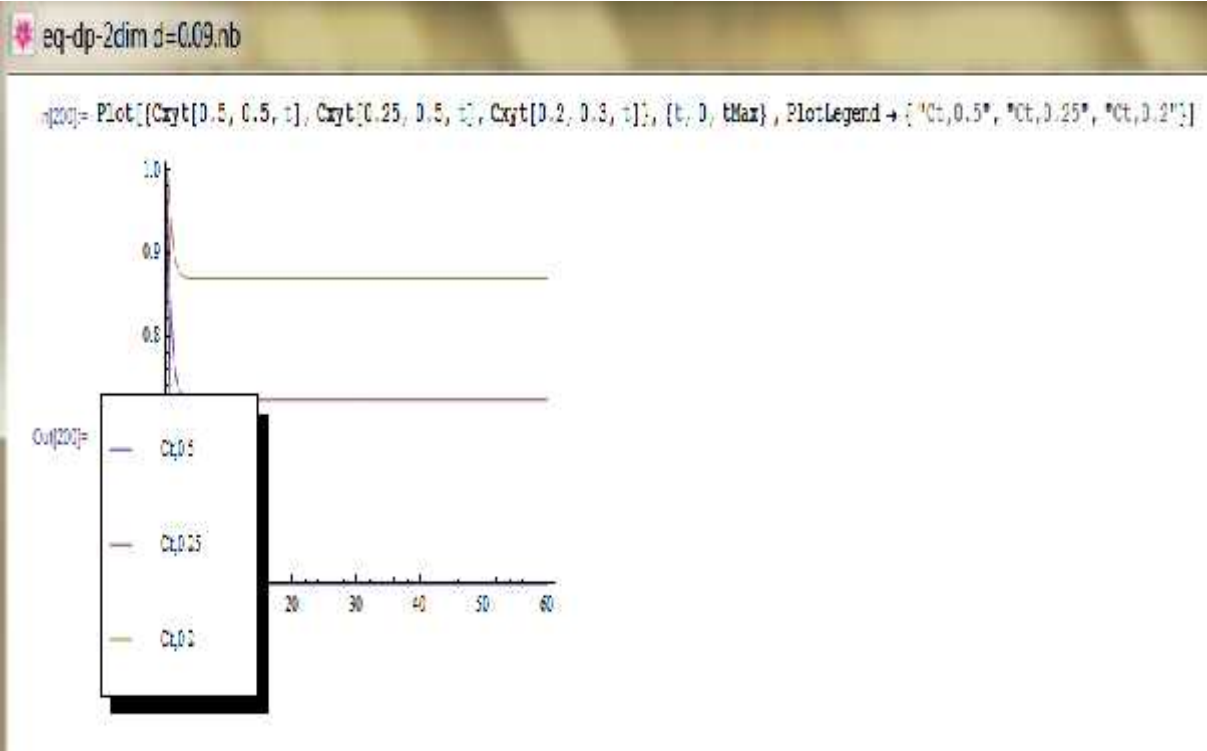


Figure IV.31: la concentration en fonction de temps pour $D=0.09m^2/s$ en 2 dimensions.

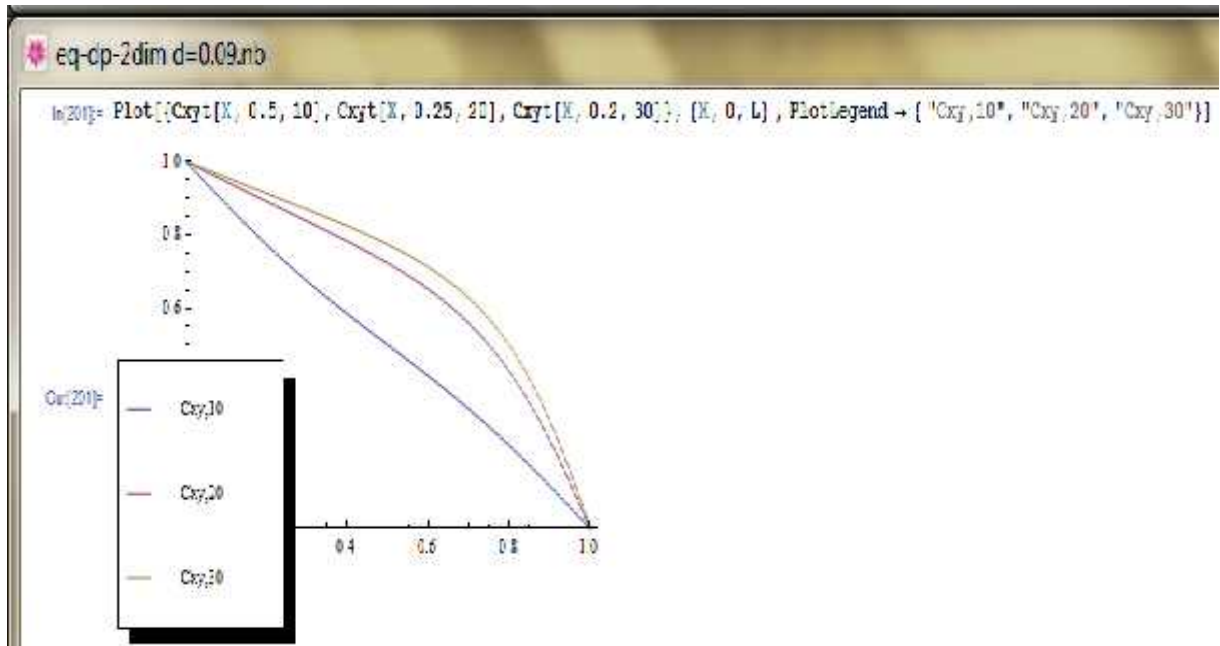


Figure IV.32: la concentration en fonction de l'espace pour $D=0.09\text{m}^2/\text{s}$.

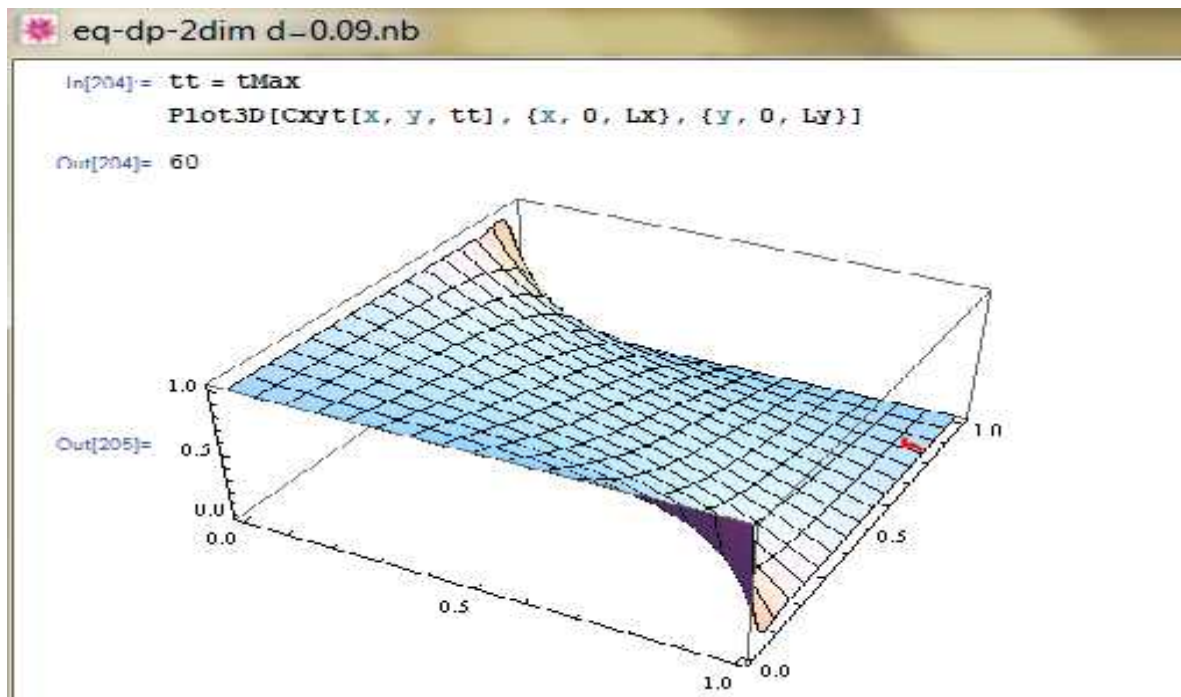


Figure IV.33: résultat en 3 dimensions

Interprétation des résultats :

D'après la figure 31 qu'illustre la variation de la concentration en fonction de temps nous avons :

- Pour un x fixé en 0.5 m, nous avons une diminution de concentration pour des instants proches de zéros secondes jusqu'à qu'elle coupe les axes des abscisses a l'instant 2 s.
- Pour un x fixé en 0.25 m, nous avons une diminution de concentration sur l'intervalle [0-4 s] et une stabilisation de cette dernière une valeur égale 0.78kg/m^3 sur le reste de l'intervalle.
- Pour un x fixé en 0.2m, La même chose pour x fixé en 0.25 m, mais dans ce cas la concentration se stabilise a une valeur égale 0.88 kg / m^3 .

D'après la figure 32 qui présente la variation de concentration en fonction de l'espace x , nous avons :

- Pour un temps fixé en 10s, nous avons une diminution de concentration jusqu'elle atteint le zéros pour un $x=1\text{m}$.
- Pour un temps fixé en 20s , nous avons une diminution de concentration jusqu'elle atteint le zéros pour un $x=1\text{m}$.
- Pour un temps fixé en 30s, nous avons une diminution de concentration jusqu'elle atteint le zéros pour un $x=1\text{m}$.

Conclusion :

D'après la simulation qui a été faite et les résultats que nous avons obtenus, nous avons remarqué que pour différentes valeurs de coefficient de diffusivité, les solutions numériques ont des allures semblables.

La comparaison de ces résultats avec la solution analytique révèle une convergence à partir de valeur proche de l'unité du coefficient de diffusivité.

Conclusion Générale.

Conclusion générale

En conclusion générale de ce modeste travail avec le quel nous espérons contribuer à l'étude de la diffusion de la matière, nous pouvons constater que :

Ce phénomène est régi par un système d'équation aux dérivées partielles dont la solution analytique dépend de la fonction erreur « ercf »

La résolution de ce système en utilisant un logiciel MATHEMATICA par des simulations du phénomène pour différents type de matière, nous a permis de déduire que le suivie de la concentration se fait en détectant un intervalle d'espace variable pour le maximum de concentration évoluant dans le temps pour une diffusivité de $0.09\text{m}^2/\text{s}$, $0.03\text{m}^2/\text{s}$, $0.1\text{m}^2/\text{s}$, et $1\text{m}^2/\text{s}$

Pour des matières solides et liquides ayant un coefficient de diffusion inférieure à 0.01 le logiciel que nous avons utilisé ne donne pas de solution.

Pour des matières ayant des coefficients de diffusivité compris entre 0.01 à 0.09 la solution numérique diverge de la solution analytique, par contre pour des valeurs proches de l'unité elles convergent.

Ainsi nous espérons avoir participé avec ce travail à l'étude de la diffusion et en particulier dans un milieu liquide pouvons être un canal artificiel ou naturel par la détermination de son évolution dans le temps et dans l'espace.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES :

Ouvrages généraux

- ❖ [01] **A. KADI** «MECANIQUE RATIONNELLE (Cours et exercices résolus) »
Edition université M'HAMED OUGARA- BOUMERDES ,
p.16,17,18,19,20,21 ,22,23,24,25,26,27.
- ❖ [02] **ADIL RIDHA** «DYNAMIQUE DES FLUIDES REELS M1
MATHEMATIQUES ET APPLICATIONS : SPECIALITE MECANIQUE » Edition
université de Caen- Département de Mathématiques et Mécanique 2008, p .
1 ,2,3 ,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13 .
- ❖ [03] **MICHEL HOUDE** «Introduction aux phénomènes de transfert » Edition
université de technologie Compiègne. mise en ligne le 02/02/1998 Modifié le
22/05/2006.
- ❖ [04] «Premier Pas avec MATHEMATICA » Edition Université de Pierre et Marie
Curie 2012/2013.
- ❖ [05] **Nathalie BUIL**. Modélisation tridimensionnelle du transport de polluants dans
les écoulements à surface libre. Thèse pour obtenir le titre de Docteur de l'Université
Claude Bernard-Lyon 1999.
- ❖ [06] **Olivier MASSON**. Contribution à l'étude de la diffusion transversale dans les
cours d'eau. Travail pour obtenir le diplôme de Doctorat, université de Savoie- France
1991.

Le site internet

- ❖ [07] **WIKIPEDIA** Encyclopédie libre. www.wikipedia.com

Le logiciel

- ❖ **MATHEMATICA**