

Réaction avec diffusion

On peut modéliser la diffusion avec une réaction chimique grâce une équation différentielle du second ordre. En phase homogène avec une réaction chimique irréversible ayant comme réactif A et comme produit B, cette équation s'écrit :

$$\frac{d^2 C_A}{dz^2} = \frac{k}{D_{AB}} C_A$$

C_A est la concentration en réactif A (kg/m^3)

z est la distance étudiée (m)

k est la constante cinétique (s^{-1})

D_{AB} est le coefficient de diffusion de A dans B (m^2/s)

Supposons un espace à une dimension dont un côté est soumis à une concentration connue et qui présente une diffusion purement axiale. Les conditions initiales du problème peuvent s'écrire :

$$z = 0 \quad C_A = C_{A0}$$

$$z = L \quad \frac{dC_A}{dz} = 0$$

C_{A0} est la concentration à la surface (constante).

Ce problème admet une solution analytique de la forme :

$$C_A = C_{A0} \frac{\cosh[L(\sqrt{k/D_{AB}})(1 - z/L)]}{\cosh(L\sqrt{k/D_{AB}})}$$

Question 1 : Créer un programme permettant le calcul de la solution analytique. Tracer le résultat.

AN : $C_A=0,2$ (kg/m^3) $L=10^{-3}$ m $k=10^{-3}$ s^{-1} $D_{AB}=1,2 \cdot 10^{-9}$ m^2/s

Question 2 : Mettre en place un programme permettant la résolution de l'équation différentielle. On supposera que $dC_A/dz=-10$ $\text{kg/m}^3/\text{m}$ en $z=0$.

Question 3 : La condition initiale précédemment utilisée ne permet de respecter la condition finale en $z=L$. Construire un programme permettant de rechercher la condition initiale adéquate permettant $dC_A/dz=0$ en $z=L$.

Question 4 : comparer le résultat avec la solution analytique.