

Diffusion de particules

I Phénoménologie de la diffusion de particules

1. Phénomène de diffusion
2. Flux de particules et vecteur densité de courant
3. Loi de Fick

II Étude de régimes stationnaires

1. Régime stationnaire et conservation du flux
2. Diffusion dans une membrane
3. Diffusion autour d'une goutte sphérique
4. Formulation locale et opérateur divergence
5. Exemple de régime stationnaire avec terme source

III Étude de régimes non stationnaires

1. Bilan de particules et diffusion à une dimension
2. Généralisation à trois dimensions
3. Exemple : diffusion à partir d'une couche mince
4. Longueur de diffusion
5. Exemple de régime variable avec terme source (HP)

IV Diffusion et marche aléatoire

1. Agitation thermique et diffusion
2. Estimation du coefficient de diffusion
3. Parcours quadratique moyen depuis une origine
4. La diffusion comme évolution d'une probabilité

V Modélisation numérique

Phénomène de diffusion

La diffusion de particules consiste en un transport de particules sans déplacement du milieu porteur.

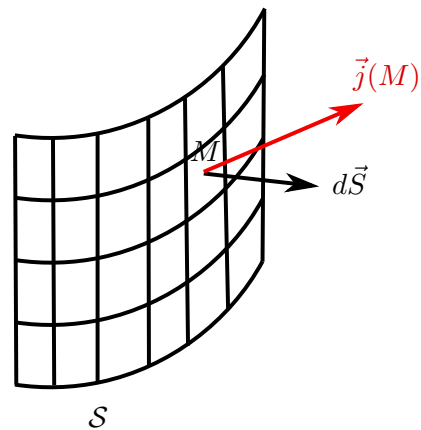


FIGURE 1 – Illustration du flux d'un vecteur au travers d'une surface \mathcal{S} décomposée en éléments infinitésimaux.

valeurs de D en $\text{cm}^2.\text{s}^{-1}$		
$\text{H}_2\text{O}/\text{air}$ à 25°C	glucose/eau à 25°C	Ag/Cu solide à 800°C
0,24	$5,2 \cdot 10^{-6}$	$2,4 \cdot 10^{-10}$

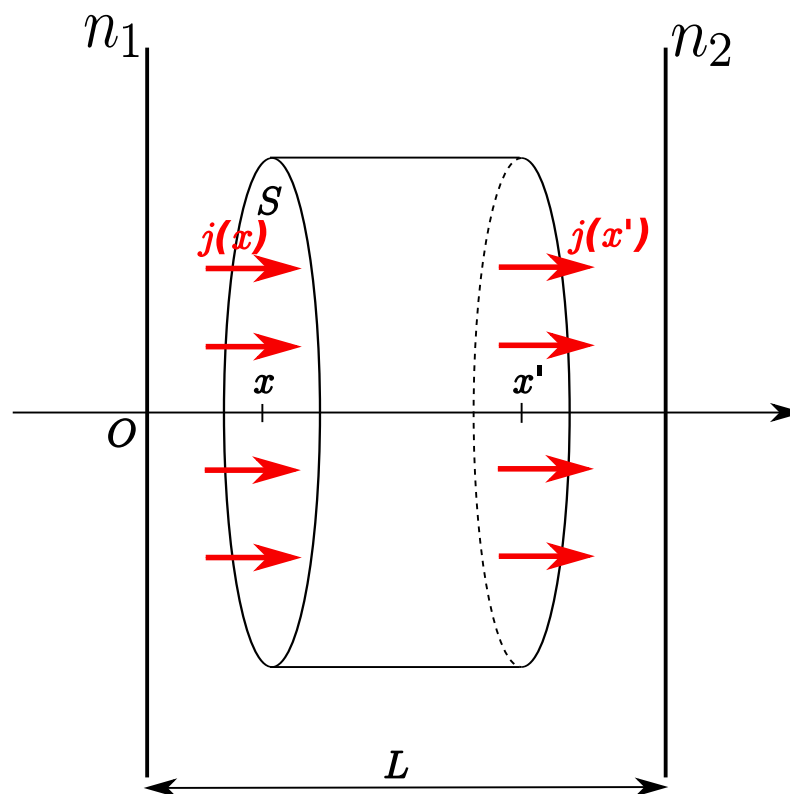


FIGURE 2 –

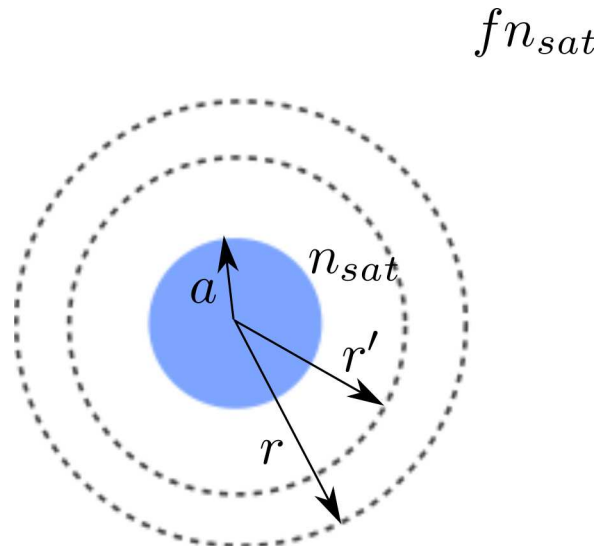


FIGURE 3 – Une goutte sphérique de rayon a s'évapore dans l'air de taux d'humidité f . Près de la goutte, l'équilibre liquide-vapeur est supposé établi. En régime stationnaire, déterminer la densité particulaire $n(r)$ de la vapeur d'eau dans l'air autour de la goutte. Dans un second temps, déterminer le temps que prend l'évaporation de la goutte.

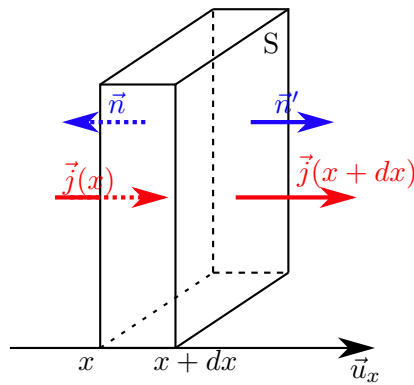


FIGURE 4 – Flux infinitésimal dans un problème unidimensionnel

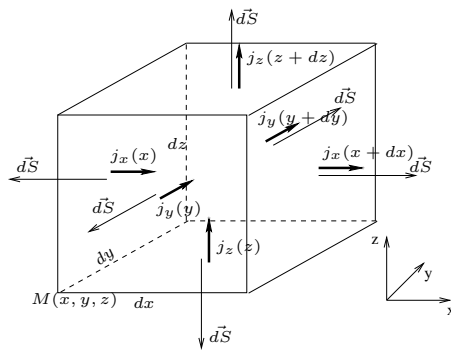
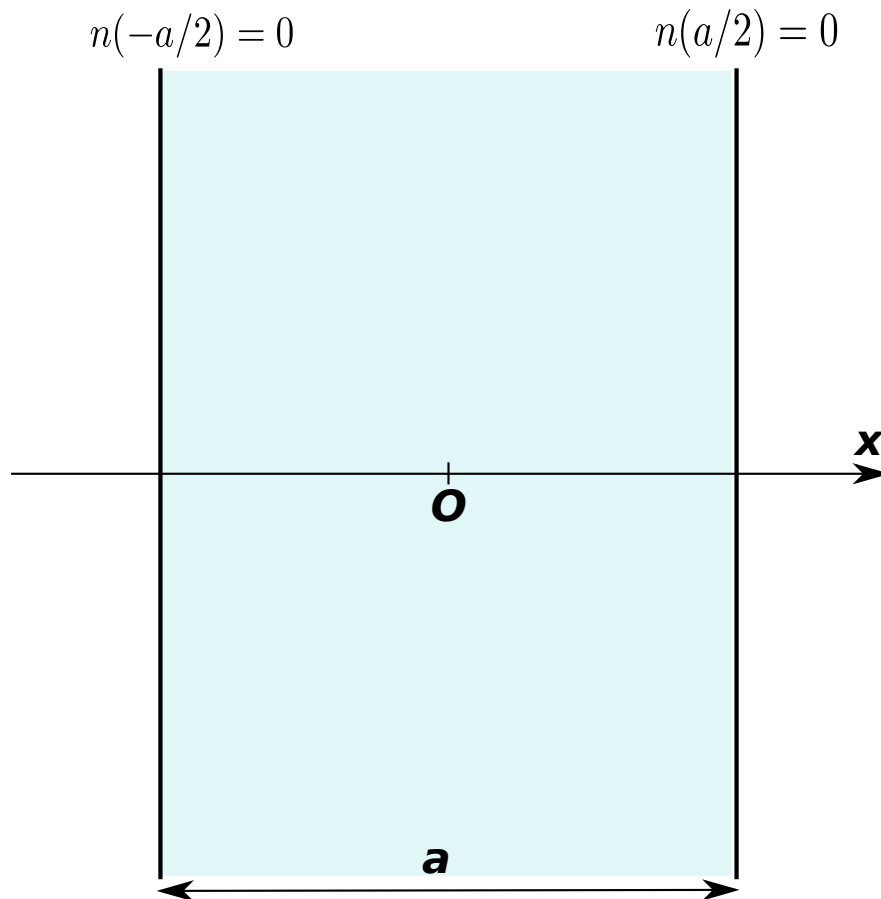


FIGURE 5 – Flux infinitésimal dans un problème tridimensionnel et lien avec l'opérateur divergence

FIGURE 6 – **Diffusion de neutrons dans un réacteur.** Les noyaux d'un échantillon d'uranium fissionnent en libérant des neutrons qui diffusent dans le solide tout en provoquant de nouvelles fission dans un mécanisme de réaction en chaîne. Pendant dt , la probabilité qu'un neutron soit absorbé est dt/τ_0 . Quand un neutron est absorbé, K nouveaux neutrons sont en moyenne produits. Les deux bords du réacteur sont absorbants. Discuter selon la valeur de τ la possibilité d'un régime stationnaire et, lorsqu'il est établi, déterminer la densité particulière $n(x)$ des neutrons.



Démonstration de l'équation de la diffusion unidimensionnelle avec terme source

Démonstration de l'équation de la diffusion

On raisonne à partir du schéma de la figure 5. Soit $N_{\text{stock}}(t)$ le nombre de particules contenues à l'instant t dans la tranche représentée : $N_{\text{stock}}(t) = S dx n(x, t)$. Le bilan de particules s'écrit

$$\begin{aligned}
 N_{\text{stock}}(t + dt) - N_{\text{stock}}(t) &= dN_{\text{ech}} + dN_{\text{prod}} \\
 S dx n(x, t + dt) - S dx n(x, t) &= j(x, t) S dt - j(x + dx, t) S dt + p S dx dt \\
 dx [n(x, t + dt) - n(x, t)] &= -dt [j(x + dx, t) - j(x, t)] + p dx dt \\
 \frac{n(x, t + dt) - n(x, t)}{dt} &= - \frac{j(x + dx, t) - j(x, t)}{dx} + p \\
 \frac{\partial n}{\partial t} &= - \frac{\partial j}{\partial x} + p \quad \text{ou encore} \quad \boxed{\frac{\partial j}{\partial x} + \frac{\partial n}{\partial t} = p}
 \end{aligned}$$

Cette équation constitue une traduction locale du bilan de particules. Il suffit ensuite d'utiliser la loi de Fick sous la forme $j = -D \frac{\partial n}{\partial x}$ pour éliminer j et obtenir

$$\boxed{\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{1}{D} \frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{p}{D}} \quad .$$

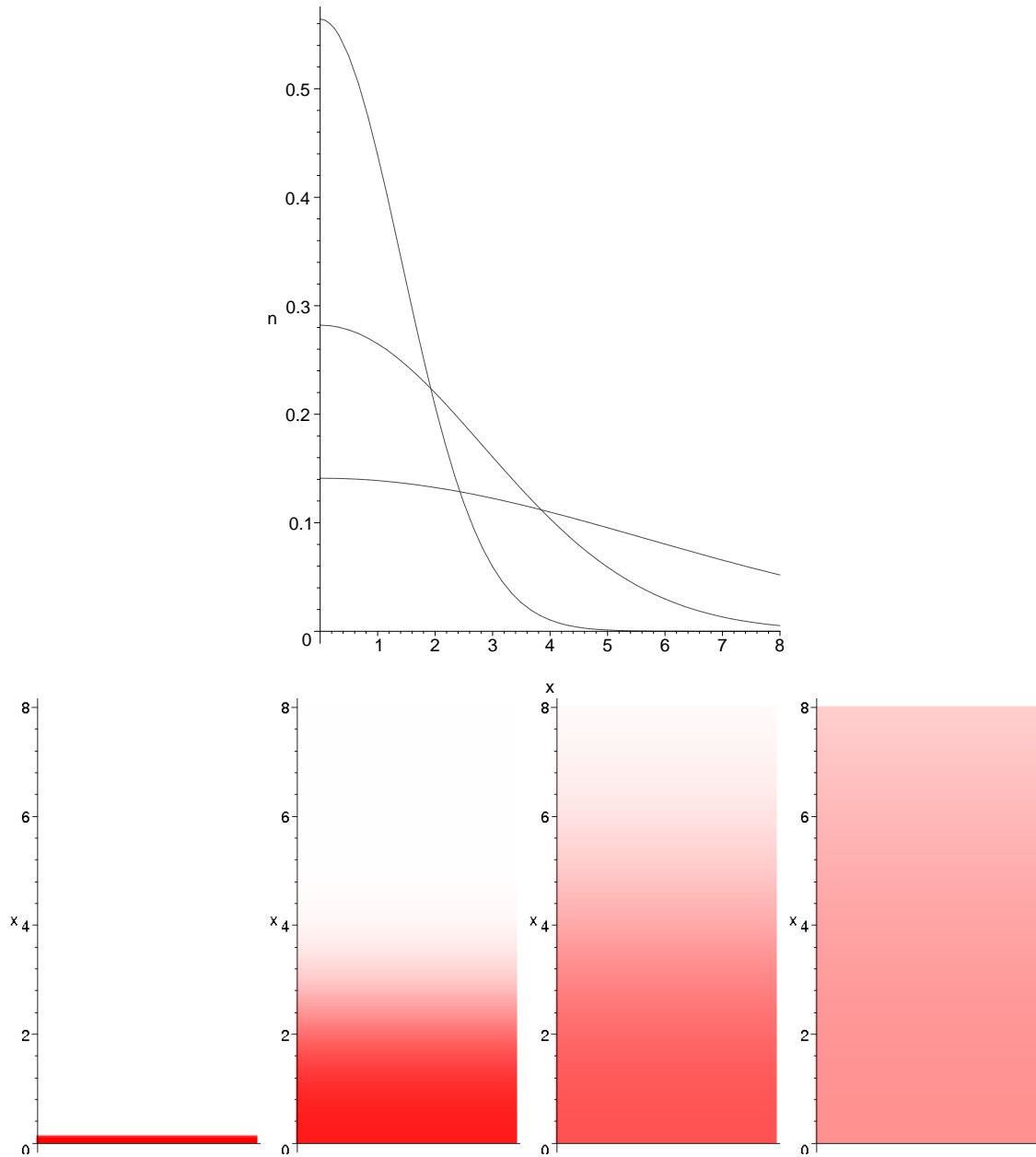


FIGURE 7 – Diffusion d'un colorant initialement disposé en une mince couche au fond d'un récipient. En haut : évolution du profil de concentration au cours du temps. Les courbes sont tracées à des instants t_1 , $4t_1$ et $16t_1$. En bas : évolution visuelle de la solution au cours du temps. De gauche à droite sont placés les instants $t = 0$, t_1 , $4t_1$ et $16t_1$

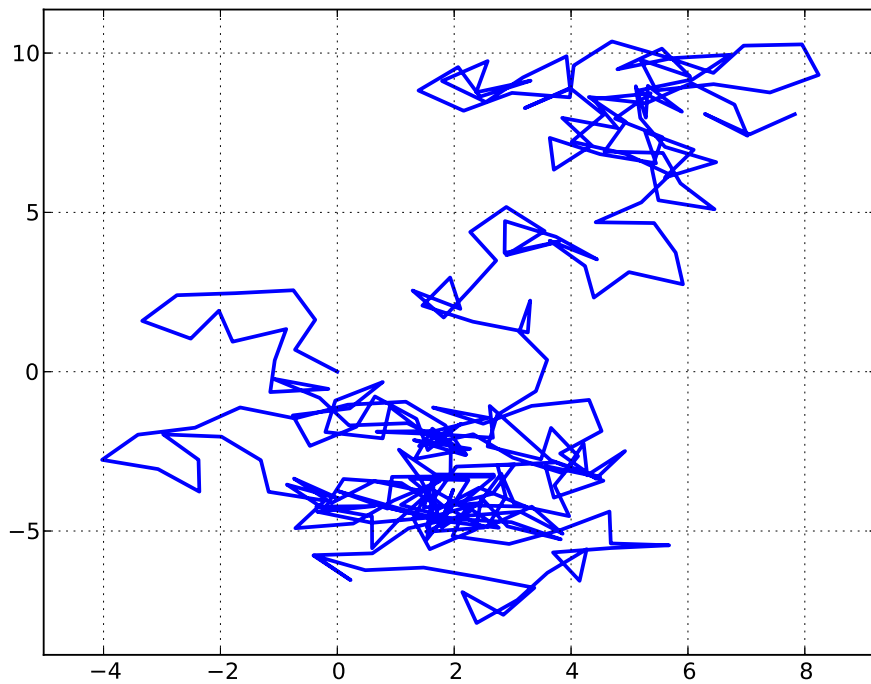


FIGURE 8 – Allure d’une marche aléatoire de 300 pas à partir de l’origine. L’unité de longueur est la longueur d’un pas, correspondant au libre parcours moyen des molécules.

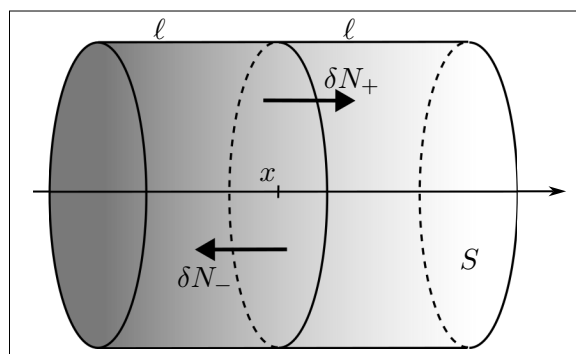


FIGURE 9 – Estimation du coefficient de diffusion.

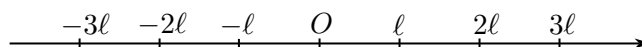


FIGURE 10 – Positions occupées par une particule effectuant une marche aléatoire unidimensionnelle avec des pas de longueur ℓ .