

Diffusion de particules

1.

I - Phénoménologie de la diffusion de particules

1. Phénomène de diffusion

On considère un milieu matériel (eau, air, solide) dans lequel existent des particules reconnaissables (ex: parfum dans l'air, glucose dans l'eau, atomes de phosphore dans du silicium).

Soit $n(\mathbf{r}, t)$ la densité particulaire en m^{-3}



et contient $n(\mathbf{r}, t) dV$ particules

A l'équilibre n est uniforme, on étudie ici des situations hors équilibre (n pas uniforme). La diffusion va tendre à homogénéiser n .

Phénomène de diffusion: la diffusion de particules consiste en un transport de particules sans déplacement du milieu porteur.

△ Ne pas confondre la diffusion avec la convection qui est associée à un déplacement du milieu.

△ Ne pas confondre la diffusion avec la migration (sous l'effet d'une force).

2. Flux de particules et vecteur densité de courant

cf. Figure 1

Pendant dt , le nombre de particules qui traversent dS algébrisées selon $\vec{u}$ est $d^2N = \underbrace{\vec{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \vec{dS}}_{\text{particule} \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}} dt$

Pendant dt , S est traversée par dN particules: $dN = \int_S \vec{j}(\mathbf{r}, t) \cdot \vec{dS} dt$

On appelle flux de particules: $\Phi(\vec{j}, S) = \int \vec{j}(n, t) \cdot d\vec{S}$

Alors $dN = \underbrace{\Phi}_{\text{particule} \cdot \text{s}^{-1}} dt$

En pratique, on aura souvent $\Phi = jS$ ou $\Phi = -jS$.

La diffusion est due à l'agitation thermique,

soit $\vec{v}(n, t)$ la vitesse moyenne des particules,

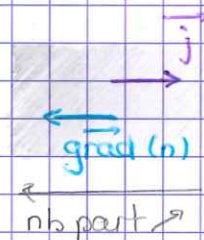
on admet:

$$\vec{j}(n, t) = n(n, t) \vec{v}(n, t)$$

3. Loi de Fick

$$\vec{\text{grad}} n = \begin{vmatrix} \frac{\partial n}{\partial x} \\ \frac{\partial n}{\partial y} \\ \frac{\partial n}{\partial z} \end{vmatrix}$$

mesure l'hétérogénéité de n.



On postule:

$$\exists D \in \mathbb{R}^+, \vec{j}(n, t) = -D \vec{\text{grad}} n(n, t)$$

coef de diffusion

$$[m^{-2} \cdot s^{-1}]$$

$$[m^2 \cdot s^{-1}]$$

$$[m^{-1}]$$

$$[m^{-3}]$$

cf. tableau

l'unité de D est celle du peintre en bâtiment

C'est une loi phénoménologique, elle décrit la réalité sans chercher d'explication sous-jacente.

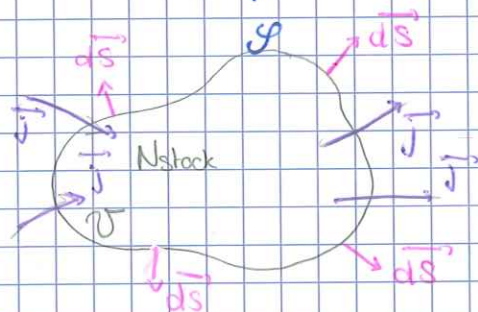
Suite du chapitre: on étudie les variations spatiotemporelles de n par des bilans de particules.

II- Etude de régimes stationnaires

1. Régime stationnaire et conservation du flux

En régime stationnaire (RS) $n(\Pi, t)$ ne dépend pas de t .

On maintient un déséquilibre permanent.



surface fermée.

$\vec{ds}'$ vers l'ext

$\oint$

$$N_{\text{stock}} = \int_V n(\Pi) d\tau \quad \text{ce nombre reste constant}$$

les arrivées et départs de particules doivent se compenser.

Pendant dt , V échange dN_e particules :

$$dN_e = - \oint_S \vec{j} \cdot \vec{ds} dt$$

$$\text{bilan: } dN_{\text{stock}} = dN_e$$

$$\text{ici } dN_{\text{stock}} = 0$$

$$\text{donc } dN_e = 0$$

$$\text{d'où } \oint_S \vec{j} \cdot \vec{ds} = 0$$

Cette égalité a lieu pour toute surface S fermée, on dit que $\vec{j}$ est à flux conservatif.

2. Diffusion dans une membrane

cf. Figure 2

$$n(\Pi) = n(x)$$

$$j = -D \frac{dn}{dx} \vec{e}_x$$

on cherche n sur $[0, L]$

bilan: cylindre figure 2.

Pendant dt , il échange dN_e particules

$$dN_e = - \oint \vec{j} \cdot d\vec{s} dt = 0 \text{ car } \vec{j} \perp d\vec{s}$$

$$\frac{dN_e}{dt} = - \int_{S_{xe}} \vec{j} \cdot d\vec{s} - \int_{S_{xe'}} \vec{j} \cdot d\vec{s} - \int_{S_{lat}} \vec{j} \cdot d\vec{s}$$

pour latéral

$$= - \int_{S_{xe}} \vec{j}(x) \cdot (-dS \vec{e}_x) - \int_{S_{xe'}} \vec{j}(x') \cdot dS \vec{e}_x$$

$$\vec{j}(x) = j(x) \vec{e}_x$$

$$= j(x) S - j(x') S$$

$$= (j(x) - j(x')) S$$

bilan: $dN_{stock} = dN_e$

ici RS donc $dN_{stock} = 0$

donc $dN_e = 0$

donc $(j(x) - j(x')) S = 0$

donc $j(x) = j(x')$

donc

$$\exists j_0 \in \mathbb{R}, \forall x, j(x) = j_0$$

Loi de Fick: $-D \frac{dn}{dx} = j_0$

$$\frac{dn}{dx} = \frac{-j_0}{D} \rightarrow n = \frac{-j_0}{D} x + C$$

Conditions de bord (CB)

$$CB \begin{cases} n(0) = n_1 \rightarrow C = n_1 \\ n(L) = n_2 \rightarrow \frac{-j_0}{D} L + n_1 = n_2 \rightarrow \frac{-j_0}{D} = \frac{n_2 - n_1}{L} \end{cases}$$

$$n = \frac{n_2 - n_1}{L} x + n_1 \quad \text{et} \quad j_0 = D \frac{n_1 - n_2}{L}$$

3. Diffusion autour d'une goutte sphérique

cf. Figure 3

* Loin de la goutte, $P_{H_2O} = \underbrace{\int P_{sat}}_{\text{humidité relative}}$

GP:

$$P_{H_2O} \underbrace{\delta \mathcal{V}}_{\text{petit volume}} = \frac{\delta N}{N_A} RT \quad \text{d'où } n = \frac{\delta N}{\delta \mathcal{V}}$$
$$= \frac{N_A}{RT} P_{H_2O}$$
$$= \frac{N_A}{RT} \int P_{sat}$$

$$n_{sat} = \frac{N_A}{RT} P_{sat} \quad n = \int n_{sat}$$

* On cherche $n = n(x)$ $x \in [a, +\infty[$ $\vec{j} = -D \frac{dn}{dx} \vec{u}_x = j(x) \vec{u}_x$
figure 3, on fait un bilan sur la zone comprise entre x' et x .

Pendant dt , il échange dN_e particules.

$$dN_e = - \int_{\mathcal{V}_x} \vec{j} \cdot d\vec{S} \, dt + \int_{\mathcal{V}_{x'}} \vec{j} \cdot d\vec{S} \, dt$$
$$= - \int_{\mathcal{V}_x} j(x) \vec{u}_x \cdot d\vec{S} \vec{u}_x \, dt + \int_{\mathcal{V}_{x'}} j(x') \vec{u}_x \cdot d\vec{S} \vec{u}_x \, dt$$
$$= -j(x) dt \int_{\mathcal{V}_x} dS + j(x') \int_{\mathcal{V}_{x'}} dS \, dt$$
$$= (-j(x) S(x) + j(x') S(x')) dt$$

bilan $dN_{stock} = dN_e$

ici RS $dN_{stock} = 0$

donc $dN_e = 0$

donc $j(x) S(x) = j(x') S(x')$

on voit bien la conservation des flux.

$$\exists \Phi_0 \in \mathbb{R}, \forall x \in [a, \infty[, j(x) S(x) = \Phi_0$$

$$j(x) = \frac{\Phi_0}{S(x)} = \frac{\Phi_0}{4\pi x^2}$$

surface de la
sphère de rayon x

$$\text{Fick: } -D \frac{dn}{dx} = \frac{\Phi_0}{4\pi x^2}$$

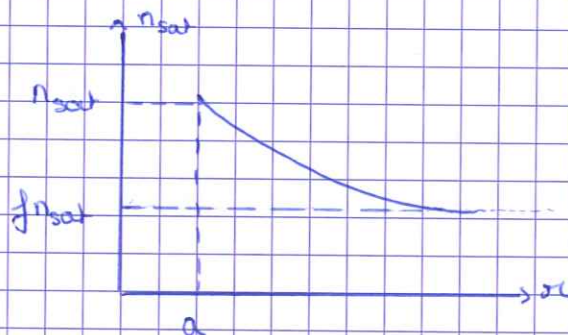
$$\frac{dn}{dx} = \frac{-\Phi_0}{4\pi D x^2}$$

$$n = \frac{\Phi_0}{4\pi D} \frac{1}{x} + C$$

$$\text{CB: } \begin{cases} n(\infty) = f n_{\text{sat}} \rightarrow C = f n_{\text{sat}} \\ n(a) = n_{\text{sat}} \rightarrow \frac{\Phi_0}{4\pi D a} + f n_{\text{sat}} = n_{\text{sat}} \end{cases}$$

$$\rightarrow \frac{\Phi_0}{4\pi D} = a n_{\text{sat}} (1 - f)$$

$$n = \frac{a n_{\text{sat}} (1 - f)}{x} + f n_{\text{sat}}$$



$$\Phi_0 = 4\pi D a n_{\text{sat}} (1 - f)$$

On étudie la disparition / évaporation de la goutte.

Pendant dt , la goutte émet $\Phi_0 dt$ particules en même temps
à une vitesse de $da < 0$.

Le volume disparu : $-4\pi a^2 da$

et contenait $-4\pi a^2 da \frac{e}{\pi} \frac{N_A}{\pi}$ particules

$$V = \frac{4}{3} \pi a^3$$

$$dV = 4\pi a^2 da$$

On a donc $\Phi_0 dt = -4\pi a^2 da \frac{e}{\pi} \frac{N_A}{\pi}$

càd : $4\pi D a n_{\text{sat}} (1 - f) dt = -4\pi a^2 da \frac{e}{\pi} \frac{N_A}{\pi}$

$$\frac{D n_{\text{sat}} (1 - f) \pi dt}{e N_A} = -a da$$

$$\int_0^{t_f} \frac{D n_{\text{sat}} (1-f) \Gamma}{e N_A} dt = \int_{a_0}^{a=0} -a da$$

$$\frac{D n_{\text{sat}} (1-f) \Gamma t_f}{e N_A} = \frac{a_0^2}{2}$$

$$t_f = \frac{a_0^2 e N_A}{2 D n_{\text{sat}} (1-f) \Gamma}$$

On a ici négligé la convection.

⚠ On fait ici l'hypothèse du RS pour trouver n mais si a dépend du temps n n'est pas est ! Le calcul suppose le régime quasi stationnaire.

4. Formulation locale et opérateur divergence

cf. Figure 4

* situation unidimensionnelle $n(x)$ $\vec{j} = j(x) \vec{u}_x$

$$d^2 N_e = - \oint \vec{j} \cdot d\vec{S} dt$$

$$= -d\Phi dt$$

$$d\Phi = j(x+dx)S - j(x)S$$

$$= S \left(\frac{j(x+dx) - j(x)}{dx} \right) dx$$

$$= S \frac{dj}{dx} dx$$

$$S dx = dZ$$

$$d\Phi = \frac{dj}{dx} dZ$$

$$d^2 N_e = -d\Phi dt$$

* situation tridimensionnelle

$$n(x, y, z)$$

$$j_x(x, y, z)$$

$$\vec{j}$$

$$j_y(x, y, z)$$

$$j_z(x, y, z)$$

bilan domaine figure 5

$$dN_e = -d\phi dt$$

avec $d\phi = \oint \vec{j} \cdot d\vec{S}$

En groupant les faces 2 par 2 on obtient:

$$d\phi = dy dz \frac{\partial j_x}{\partial x} dx + dx dz \frac{\partial j_y}{\partial y} dy + dx dy \frac{\partial j_z}{\partial z} dz$$

$$d\phi = \left(\frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} \right) d\tau$$

On appelle divergence du vecteur $\vec{j}$:

$$\text{div } \vec{j}(\tau) = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$$

$$d\phi = \text{div } \vec{j} d\tau$$

retour au bilan : $dN_{\text{stock}} = dN_e$

ici $dN_{\text{stock}} = 0$ donc $dN_e = 0$

donc $d\phi = 0$

et $\forall \tau, \text{div } \vec{j}(\tau) = 0$

Cette relation exprime localement l'idée : le flux de $\vec{j}$ se conserve.

Avec un formulaire d'analyse vectorielle, on peut utiliser cette relation directement pour résoudre les problèmes.

* Retour sur la goutte

$$\vec{j} = j(r) \vec{u}_r$$

$$\text{div } \vec{j} = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 j) = 0$$

$$\Leftrightarrow r^2 j = E \quad \text{constante}$$

$$j(r) = \frac{E}{r^2}$$

même résultat que II.3 avec $E = \frac{\Phi_0}{4\pi}$

5. Exemple de régime stationnaire avec sources

En plus de se déplacer, les particules peuvent être produites ou détruites dans l'espace.

taux volumique de production
de particules (algébrique) : $p(\Pi)$ en $m^{-3} s^{-1}$

Pendant dt , dans $d\tau$, le nombre de particules produites est

$$d^2 N_{\text{prod}} = p d\tau dt$$

* bilan 1d Figure 4

$$d^2 N_e = - S dx \frac{dj}{dx} dt$$

$$d^2 N_{\text{prod}} = p S dx dt$$

$$\text{bilan } d^2 N_{\text{stock}} = d^2 N_e + d^2 N_{\text{prod}}$$

$$\text{ici } d^2 N_{\text{stock}} = 0$$

$$\text{donc } d^2 N_e + d^2 N_{\text{prod}} = 0$$

$$- S dx \frac{dj}{dx} dt + S dx dt p = 0$$

$$\frac{dj}{dx} = p$$

$$\text{loi de Fick : } j = - D \frac{dn}{dx}$$

$$\text{donc } \frac{d^2 n}{dx^2} = p \quad \frac{d^2 n}{dx^2} = \frac{-P}{D}$$

Pour p donné on résout pour trouver n (avec CB) :

* bilan 3d Figure 5

$$d^2 N_e = - d\tau \cdot \text{div } \vec{j} dt$$

$$d^2 N_{\text{prod}} = p d\tau dt$$

$$\text{bilan : } d^2 N_{\text{stock}} = d^2 N_e + d^2 N_{\text{prod}}$$

$$\text{ici RS } d^2 N_{\text{stock}} = 0$$

$$\text{donc } d^2 N_e + d^2 N_{\text{prod}} = 0$$

$$-dZ \cdot \text{div } \vec{j} dt + p dZ dt = 0$$

$$\text{div } \vec{j}(\pi) = p(\pi)$$

c'est l'expression locale du bilan

$$\text{Fick : } \vec{j} = -D \text{grad } n$$

$$-D \text{div} (\text{grad } n) = p$$

$$\text{opérateur Laplacien : } \Delta = \text{div grad}$$

$$-D \Delta n = p$$

$$\Delta n = -\frac{p}{D}$$

Exercice : (cas 1d) cf. Figure 6

$$dp = \frac{dt}{\tau_0} \leftarrow \text{temps}$$

Rq: on est en fait le bilan pour arriver à la formule.

Dans dZ , il y a $n d\tau_0$ neutrons

$$d^2 N_{\text{détruit}}^{\text{absorbé}} = n d\tau_0 \frac{dt}{\tau_0}$$

$$d^2 N_{\text{créé}} = K d^2 N_{\text{détruit}} = \frac{Kn}{\tau_0} dt dZ$$

$$\text{ici } d^2 N_{\text{prod}} = \frac{Kn}{\tau_0} dt dZ - \frac{n}{\tau_0} dt dZ$$

$$p = \frac{Kn}{\tau_0} - \frac{n}{\tau_0} = (K-1) \frac{n}{\tau_0}$$

$$\frac{dn^2}{dx^2} + \frac{(K-1)n}{D\tau_0} = 0$$

• si $K < 1$: $-q^2 = \frac{K-1}{DZ_0}$

$$n(x) = A e^{qx} + B e^{-qx}$$

$$CB \begin{cases} n\left(\frac{a}{2}\right) = 0 & A e^{\frac{qa}{2}} + B e^{-\frac{qa}{2}} = 0 \\ n\left(-\frac{a}{2}\right) = 0 & A e^{-\frac{qa}{2}} + B e^{\frac{qa}{2}} = 0 \end{cases}$$

unique solution : $A = B = 0$

$$n(x) = 0.$$

En régime stationnaire, le réacteur est éteint

• si $K = 1$: $n(x) = Ax + B$ idem

• si $K > 1$: $q^2 = \frac{K-1}{DZ_0}$ $[q] = \frac{1}{L}$

$$n(x) = A \cos qx + B \sin qx$$

$$CB \begin{cases} n\left(\frac{a}{2}\right) = 0 & A \cos\left(\frac{aq}{2}\right) - B \sin\left(\frac{aq}{2}\right) = 0 \\ n\left(-\frac{a}{2}\right) = 0 & A \cos\left(\frac{aq}{2}\right) + B \sin\left(\frac{aq}{2}\right) = 0 \end{cases}$$

On a d'autres solutions que $A=0$ et $B=0$ si $\det=0$

$$-2 \cos \frac{qa}{2} \sin \frac{qa}{2} = 0$$

$$\left(\begin{array}{l} \sin(qa) = 0 \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow qa = l\pi \quad l \in \mathbb{N}$$

On choisit d'étudier pour $l=1$.

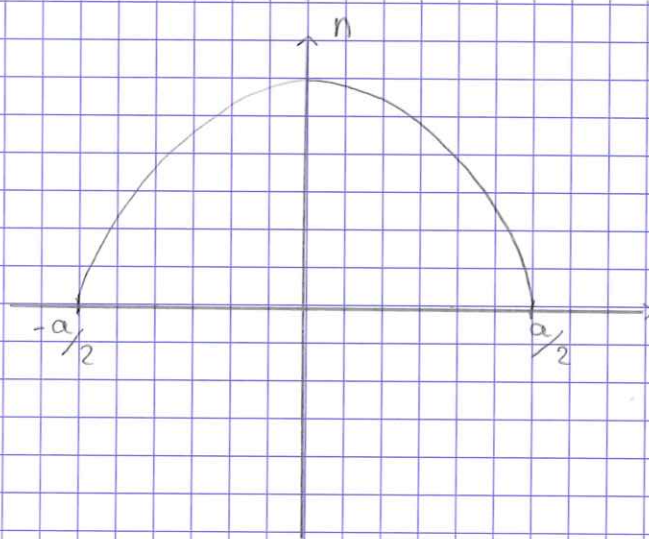
$$qa = \pi$$

en reprenant les CB $\cos \frac{qa}{2} = 0$ donc $B=0$

$$\text{donc } n(x) = A \cos(qx) = A \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

$$\text{avec } a = \frac{\pi}{q} = \pi \sqrt{\frac{DZ_0}{K-1}}$$

il faut bien choisir a



question: combien les plaques absorbent-elles de neutrons par unité de temps?

voir feuille supplémentaire

III - Régimes non stationnaires

$n(x, t)$ évolue

1. Bilan de particules et diffusion à une dimension

cf. Figure 4

* cas 1d :

à redémontrer par ♥

Pendant dt , ce système est le siège de :

$$• dN_e = - \frac{\partial j}{\partial x} S dx dt$$

$$• d^2 N_{prod} = p S dx dt$$

Pendant dt , le stock de particules varie

$$\begin{aligned} dN_{stock} &= N_{stock}(t+dt) - N_{stock}(t) \\ &= S dx [n(x, t+dt) - n(x, t)] \\ &= S dx [n(x, t+dt) - n(x, t)] \end{aligned}$$

Bilan :

$$dN_{stock} = dN_e + dN_{prod}$$

$$\begin{aligned} S dx [n(x, t+dt) - n(x, t)] &= - S dx dt \frac{\partial j}{\partial x} + p S dx dt \\ \frac{n(x, t+dt) - n(x, t)}{dt} &= - \frac{\partial j}{\partial x} + p \end{aligned}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} + p$$

$$\frac{\partial j}{\partial x} + \frac{\partial n}{\partial t} = p$$

Fick : $j = -D \frac{\partial n}{\partial x}$

d'où $-D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial n}{\partial t} = p$

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

Equation dérivée partielle (EDP) à résoudre pour trouver n .

Il faut se donner des CB (conditions de bord) et des CI (conditions initiales).

2. Généralisation à trois dimensions

bilan Figure 5

$$\begin{aligned} \bullet dN_{\text{stock}} &= N_{\text{stock}}(t+dt) - N_{\text{stock}}(t) \\ &= n(\Omega, t+dt) d\Omega - n(\Omega, t) d\Omega \\ &= d\Omega [n(\Omega, t+dt) - n(\Omega, t)] \end{aligned}$$

$$\bullet dN_{\text{prod}} = p(\Omega, t) d\Omega dt$$

$$\bullet dN_e = -\text{div} \vec{j} d\Omega dt$$

bilan: $dN_{\text{stock}} = dN_e + dN_{\text{prod}}$

$$n(\Omega, t+dt) - n(\Omega, t) = p dt - \text{div} \vec{j} dt$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\text{div} \vec{j} + p$$

$$\text{div} \vec{j} + \frac{\partial n}{\partial t} = p$$

bilan local

Fick: $-D \Delta n + \frac{\partial n}{\partial t} = p$

$$\Delta n - \frac{1}{D} \frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{p}{D}$$

Equation diffusion
3d avec source

précision :

$$\vec{\text{grad}} n \quad \left| \quad \begin{array}{c} \frac{\partial n}{\partial x} \\ \frac{\partial n}{\partial y} \\ \frac{\partial n}{\partial z} \end{array} \right.$$

$$\text{div } \vec{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}$$

$$\Delta n = \text{div}(\vec{\text{grad}} n) = \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial z^2}$$

En coordonnées cylindriques ou sphériques on lit Δ dans un formulaire

Equation de la diffusion pure : (sans terme source)

$$\Delta n - \frac{1}{D} \frac{\partial n}{\partial t} = 0$$

3. Exemple : diffusion unidimensionnelle à partir d'une couche mince.

cf. Figure 7

section du récipient S , $n(x, t)$

avec, en $x=0$

N_0 particules

CI à $t=0$

on néglige la gravité

$$\text{On a : } \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{1}{D} \frac{\partial n}{\partial t} = 0 \quad \text{sur } x \in [0, \infty[, t > 0$$

CB : le fond est imperméable

$$\Rightarrow \vec{j}(0, t) = \vec{0}$$

$$\text{i.e. } \frac{\partial n}{\partial x}(0, t) = 0$$

la solution s'écrit : $n(x, t) = \frac{N_0}{S\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$

8

vérification (à faire)

on dérive on regarde
si ça marche dans
l'équation

Figure 7 On voit le colorant envahir peu à peu l'éprouvette.

• $n(0, t) = \frac{N_0}{S\sqrt{\pi Dt}} \rightarrow$

• largeur à mi-hauteur

$$n(x_{1/2}, t) = \frac{1}{2} n(0, t)$$

$$\frac{N_0}{S\sqrt{\pi Dt}} e^{-x_{1/2}^2/4Dt} = \frac{1}{2} \frac{N_0}{S\sqrt{\pi Dt}}$$

$$e^{-x_{1/2}^2/4Dt} = \frac{1}{2}$$

$$x_{1/2} = 2\sqrt{\ln 2} \sqrt{Dt}$$

$x_{1/2}(t) \nearrow$: étalement.

• on peut vérifier que $N_0 = \int_0^\infty n(x, t) S dx$

Les aires sous les
différentes courbes
sont égales.

* distance quadratique moyenne parcourue

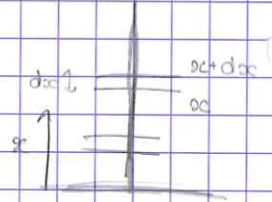
pas à connaître mais bien à avoir compris

$$\sigma_{qm}^2 = \frac{1}{N_0} \int_0^\infty x^2 n(x, t) S dx$$

$$= \int_0^\infty \frac{x^2}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx$$

$$= 2Dt$$

admis



$$\sigma_{qm}(t) = \sqrt{2Dt}$$

4. longueur de diffusion

Inspiré par l'exemple précédent, on a l'intuition du résultat suivant:

Dans un phénomène de diffusion, la distance typique parcourue par la grandeur diffusante en une durée t est $L \propto \sqrt{Dt}$

$[D]: m^2 \cdot s^{-1}$, unités OK

donc $t \propto \frac{L^2}{D}$ ordre de grandeur de la durée d'homogénéisation sur une longueur L .

Analyse d'ordre de grandeur:

n_0 : ODG de n et de ses variations

L : échelle spatiale des variations de n

t : échelle temporelle des variations de n

En ODG: $\left| \frac{\partial n}{\partial t} \right| \approx \frac{n_0}{t}$ $\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \approx \frac{n_0}{L^2}$

Or $\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = \frac{1}{D} \frac{\partial n}{\partial t}$ donc $\frac{n_0}{L^2} \approx \frac{1}{D} \frac{n_0}{t}$

donc $L^2 \approx Dt$ loi d'échelle des phénomènes diffusifs

AN: du sucre dans l'eau

3

$$t = 1h \quad L = \sqrt{Dt} = 1mm$$

$$L = 2mm \rightarrow t = 4h$$

$$L = 3mm \rightarrow t = 9h$$

phénomène lent, plus on attend moins ça avance.

5. Exemple de régime variable avec terme source hors programme

Figure 6

section sur le réacteur à neutrons

$$RS \Rightarrow a = \pi \sqrt{\frac{D\tau_0}{k-1}} = a_c$$

Si $a \neq a_c$, régime non stationnaire

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{1}{D} \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{-\rho}{D}$$

$$\rho = (k-1) \frac{n}{\tau_0}$$

$$\text{donc } \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{1}{D} \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{-(k-1)n}{D\tau_0}$$

$$\text{on cherche } n(x, t) = f(t) \times \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

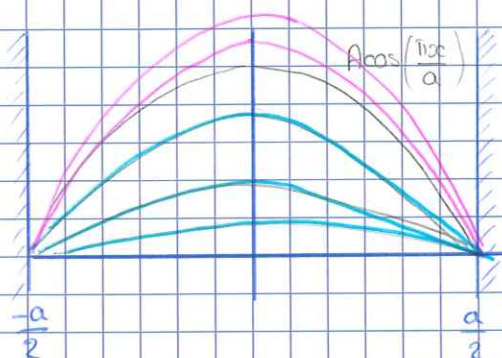
$$\frac{-\pi^2}{a^2} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) f(t) - \frac{f'(t) \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)}{D} = \frac{(-k+1)f(t) \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)}{D\tau_0}$$

$$\frac{-\pi^2}{a^2} f(t) - \frac{f'(t)}{D} = \frac{(-k+1)f(t)}{D\tau_0}$$

$$f'(t) + f(t) \left(\frac{D\pi^2}{a^2} - \frac{(k-1)}{\tau_0} \right) = 0$$

$$f(t) = A \exp(-ts)$$

$$\text{Donc } n(x, t) = A \exp^s(-st) \times \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$



si $s < 0$, $a > a_c$ BOUM

si $s > 0$, $a < a_c$

n décroît et tend vers 0,
le réacteur s'éteint

IV - Diffusion et marche aléatoire

1. Agitation thermique et diffusion

L'agitation thermique est la base du phénomène de diffusion.

Vitesse quadratique moyenne gaz :

$$\frac{1}{2} m v_{qm}^2 = \frac{3}{2} k_B T$$

$$v_{q,m} = \sqrt{\frac{3 k_B T}{m}} \quad m = \frac{M}{N_A}$$

ODG : dans l'air à T ambiante : $v_{qm} \approx 500 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

A cause des collisions avec d'autres molécules le mouvement est du type suivant :

l : libre parcours moyen

τ : temps de vol moyen



cf. Figure 8

ODG : $l = v_{qm} \tau$

$l \approx 0,1 \mu\text{m}$ $\tau \approx 2 \times 10^{-10} \text{ s}$ à T amb P amb

2. Estimation du coefficient de diffusion

cf. Figure 9

$n(x, t)$

Les molécules se déplacent aléatoirement, mais celles qui vont de gauche à droite sont plus nombreuses que celles qui vont de droite à gauche. On pressent un lien avec la loi de Fick.

Pendant une durée τ (temps de vol) on calcule :

$$\delta N_+ = \frac{1}{6} S l n(x - \frac{l}{2}, t)$$

$$\delta N_- = \frac{1}{6} S l n(x + \frac{l}{2}, t)$$

algébrisé selon $\vec{u}_{\vec{x}}$:

10

Le nombre de particules qui traversent S est : $\delta N = \delta N_+ - \delta N_-$

$$\delta N = \frac{1}{6} S \ell \left[n(x - \frac{\ell}{2}, t) - n(x + \frac{\ell}{2}, t) \right]$$

$$= \frac{1}{6} S \ell^2 \left[\frac{n(x - \frac{\ell}{2}, t) - n(x + \frac{\ell}{2}, t)}{\ell} \right]$$

$$= -\frac{1}{6} S \ell^2 \frac{\partial n}{\partial x}$$

ℓ ne tend pas vers 0
mais il est très petit
par rapport aux variations
de n

$$\Phi = \frac{\delta N}{\tau} = -\frac{1}{6} \frac{S \ell^2}{\tau} \frac{\partial n}{\partial x}$$

or on sait que :

$$\Phi = j S \quad j = -D \frac{\partial n}{\partial x} \quad \Phi = -DS \frac{\partial n}{\partial x}$$

En identifiant les 2 expressions de Φ on a : $D = \frac{1}{6} \frac{\ell^2}{\tau}$

AN: gaz : $D = 0,1 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

ODG correct dans un gaz.

3. Parcours quadratique moyen depuis une origine

cf. Figure 10

univers 1d :

$t=0$: particule en 0

à $t=0, t=\tau, t=2\tau \dots$ elle bouge de Δx

Δx aléatoire :

proba

$$\begin{cases} P(\Delta x = +\ell) = \frac{1}{2} \\ P(\Delta x = -\ell) = \frac{1}{2} \end{cases}$$

Après N sauts, $t = N\tau$, elle se trouve en x

$$x = \underbrace{\Delta x_1 + \Delta x_2 + \Delta x_3 + \dots + \Delta x_N}$$

ils suivent tous la même loi
de probabilité
et les sauts sont indépendants

espérance : $E(x) = \langle x \rangle$

$$\begin{aligned} &= \langle \Delta x_1 \rangle + \langle \Delta x_2 \rangle + \dots + \langle \Delta x_N \rangle \\ &= 0 + 0 + \dots + 0 \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \langle \left(\sum_i \Delta x_i \right)^2 \rangle \\ &= \langle \sum_i \Delta x_i^2 + \sum_{i < j} 2 \Delta x_i \Delta x_j \rangle \\ &= \underbrace{\sum_i \langle \Delta x_i^2 \rangle}_{= l^2} + 2 \underbrace{\sum_{i < j} \langle \Delta x_i \Delta x_j \rangle}_{= \langle \Delta x_i \rangle \langle \Delta x_j \rangle \text{ (car indépendants)}} \\ &= \underbrace{\sum_i \langle \Delta x_i^2 \rangle}_{= l^2} + 2 \underbrace{\sum_{i < j} \langle \Delta x_i \rangle \langle \Delta x_j \rangle}_{= 0} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= N l^2 \\ &= \frac{t}{\tau} l^2 \\ &= \frac{l^2}{\tau} t \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_{qm} &= \sqrt{\langle x^2 \rangle} \\ &= \sqrt{\frac{l^2}{\tau} t} \end{aligned}$$

même comportement en $\sqrt{t}$ que dans III.4.

$$x_{qm} = \sqrt{2Dt}$$

En identifiant, on trouve $D = \frac{l^2}{2\tau}$: résultat analogue à IV.2

4. La diffusion comme évolution d'une probabilité.

cf. Figure 10

1d

sauts aléatoires $\pm l$

$t_0 = 0, t_1 = \tau, t_2 = 2\tau, \dots$

donc $P_n(t) = P(x = nl, t)$

$n-1 \quad n \quad n+1$

$$P_n(t + \tau) = \frac{1}{2} P_{n-1}(t) + \frac{1}{2} P_{n+1}(t)$$

$$p_n(t+\tau) - p_n(t) = \frac{\tau}{2} (p_{n-1}(t) + p_{n+1}(t) - 2p_n(t))$$

passage à la limite continue :

suite $p_n(t) \rightarrow$ fonction $p(x, t)$

formule de Taylor

$$p_n(t) = p(n\ell, t)$$



$$\textcircled{1} \quad p_{n+1}(t) = p(n\ell + \ell, t) \simeq p(n\ell, t) + \ell \frac{\partial p}{\partial x}(n\ell, t) + \frac{\ell^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(n\ell, t)$$

$$\textcircled{2} \quad p_{n-1}(t) = p(n\ell - \ell, t) \simeq p(n\ell, t) - \ell \frac{\partial p}{\partial x}(n\ell, t) + \frac{\ell^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(n\ell, t)$$

$$\textcircled{1} + \textcircled{2} \quad p_{n-1}(t) + p_{n+1}(t) \simeq 2p_n(t) + \frac{\ell^2}{\partial x^2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(n\ell, t)$$

$$p_{n+1}(t) + p_{n-1}(t) - 2p_n(t) \simeq \frac{\ell^2}{\partial x^2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(n\ell, t)$$

approximation classique d'une dérivée seconde discrétisée.

retour au calcul :

$$\frac{p(n\ell, t+\tau) - p(n\ell, t)}{\tau} \simeq \frac{1}{2} \frac{\ell^2}{\tau} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(n\ell, t)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} \simeq \frac{\ell^2}{2\tau} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{2\tau}{\ell^2} \frac{\partial p}{\partial t} = 0$$

On retrouve l'équation de la diffusion et on identifie $D = \frac{\ell^2}{2\tau}$



II-5. complément.

à droite :

$$\begin{aligned}\Phi_d &= \int j\left(\frac{x}{2}\right) \cdot dS \vec{u}_x \\ &= j\left(\frac{a}{2}\right) \vec{u} \cdot S \vec{u}_x \\ &= DAS \frac{\pi}{a} \\ &= DAS \sqrt{\frac{k-1}{D\tau_0}}\end{aligned}$$

idem à gauche $\Phi_g = \Phi_d$

$$\Phi_{\text{tot}} = 2\Phi_d$$

• nombre de neutrons produits par unité de temps

$$\frac{dN_{\text{prod}}}{dt} = \int_{-a/2}^{a/2} p S dx$$

$$p = \frac{k-1}{\tau_0} n$$

$$= \frac{(k-1)S}{\tau_0} \int_{-a/2}^{a/2} n(x) dx$$

$$= \frac{A(k-1)S}{\tau_0} \int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{AS(k-1)}{\tau_0} \left[\frac{a}{\pi} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right]_{-a/2}^{a/2}$$

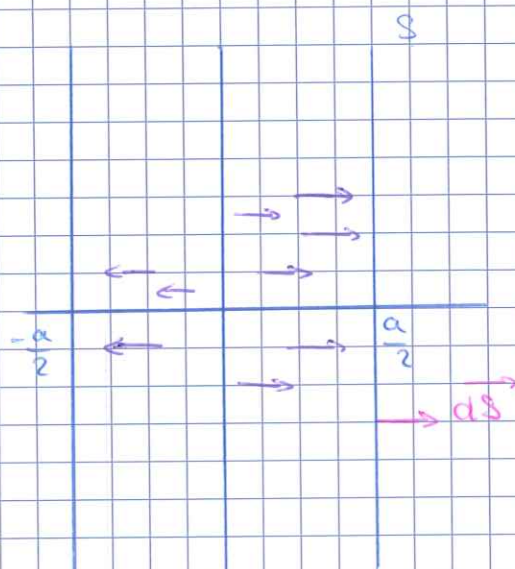
$$= \frac{AS(k-1)}{\tau_0} \left(\frac{a}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) - \frac{a}{\pi} \sin\left(-\frac{\pi}{2}\right) \right)$$

$$= 2 \frac{AS(k-1)}{\tau_0} \frac{a}{\pi}$$

$$= 2 \frac{AS(k-1)}{\tau_0} \sqrt{\frac{D\tau_0}{k-1}}$$

$$= 2 DAS \sqrt{\frac{k-1}{D\tau_0}}$$

$$= 2\Phi_d$$



$$\vec{j} = -D \frac{\partial n}{\partial x} \vec{u}_x$$

$$n(x) = A \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

$$a = \pi \sqrt{\frac{D\tau_0}{k-1}}$$

