Th2. Diffusion de particules

(2. Équation de diffusion)

d) Approche microscopique : marche au hasard

● Idée générale

On cherche à retrouver l'équation de diffusion (sans terme de source) à partir d'une étude statistique du comportement microscopique des particules, c'est-à-dire de leur agitation thermique aléatoire, caractérisée par leur libre parcours moyen ℓ_{m} (distance moyenne parcourue entre deux chocs), leur vitesse (quadratique) moyenne u, et la durée moyenne entre deux chocs $\tau = \ell_{\mathrm{m}}/u$.

● Modèle 1D discret

On adopte ici un modèle unidimensionnel simplifié, appelé *marche au hasard*, dans lequel les valeurs moyennes deviennent des valeurs fixes. Ainsi les hypothèses sont les suivantes :

– toutes les particules se trouvent sur l'axe (Ox) ;

– pendant chaque intervalle de temps τ, chaque particule subit un choc avec une autre puis parcourt la distance ℓ_{m}, aléatoirement vers la gauche ou vers la droite, de façon équiprobable.

Notons $P(x,t)$ la probabilité, pour une molécule, de se trouver à l'abscisse x à l'instant t.

Si une particule se trouve en x à un instant $t+\tau$, c'est qu'elle se trouvait à t, soit en $x+\ell_{\mathrm{m}}$, soit en $x-\ell_{\mathrm{m}}$, avec la même probabilité. On peut donc écrire : $P(x,t+\tau) = \frac{1}{2}\left[P(x+\ell_{\mathrm{m}},t) + P(x-\ell_{\mathrm{m}},t)\right]$.

Effectuons un développement de Taylor des trois termes de l'équation, au voisinage de x et de t :

$$P(x+\ell_{\mathrm{m}},t) \approx P(x,t) + \ell_{\mathrm{m}}\frac{\partial P}{\partial x}(x,t) + \frac{1}{2}\ell_{\mathrm{m}}^2\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}(x,t) \;;\qquad P(x-\ell_{\mathrm{m}},t) \approx P(x,t) - \ell_{\mathrm{m}}\frac{\partial P}{\partial x}(x,t) + \frac{1}{2}\ell_{\mathrm{m}}^2\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}(x,t) \;;$$

$P(x,t+\tau) \approx P(x,t) + \tau\frac{\partial P}{\partial t}(x,t)$ [le terme d'ordre 2 ne sera pas utile].

L'équation devient alors :

$$P(x,t) + \tau\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) = \frac{1}{2}\left[P(x,t) + \ell_{\mathrm{m}}\frac{\partial P}{\partial x}(x,t) + \frac{1}{2}\ell_{\mathrm{m}}^2\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}(x,t) + P(x,t) - \ell_{\mathrm{m}}\frac{\partial P}{\partial x}(x,t) + \frac{1}{2}\ell_{\mathrm{m}}^2\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}(x,t)\right]$$

soit après simplification : $\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) = \frac{\ell_{\mathrm{m}}^2}{2\tau}\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}(x,t)$.

Or la densité volumique de particules $n^*(x,t)$ est proportionnelle à la probabilité $P(x,t)$. On a donc bien obtenu la forme de l'équation de diffusion (sans terme de source) : $\frac{\partial n^*}{\partial t}(x,t) = \frac{\ell_{\mathrm{m}}^2}{2\tau}\frac{\partial^2 n^*}{\partial x^2}(x,t)$

avec un coefficient de diffusion $D = \frac{\ell_{\mathrm{m}}^2}{2\tau} = \frac{1}{2}\ell_{\mathrm{m}}u$.

● Simulation informatique de la marche au hasard

On peut simuler à l'aide d'un programme informatique la marche au hasard d'un grand nombre de particules à partir d'un centre, en une, deux ou trois dimensions, et caractériser l'étalement spatial de cet ensemble de particules au cours du temps : voir documents et codes Python fournis en annexe.

● Modèle plus élaboré

On peut travailler sur un modèle plus réaliste, tridimensionnel, et tenant compte de la distribution statistique des vitesses des particules. Les calculs sont alors beaucoup plus complexes mais on retrouve toujours, en ordre de grandeur : $\boxed{D \sim \ell_{\mathrm{m}}u}$.