Phénomènes de transport **III — Diffusion de particules**

La diffusion de particules

La diffusion de particules est un déplacement de particules dans un milieu matériel, sans déplacement macroscopique de matière (contrairement à la convection). Ce phénomène **irréversible** tend à uniformiser la densité de particules diffusantes.

Le déplacement observé des particules diffusantes n'est dû à aucune « force » : c'est un simple effet statistique, dû aux chocs aléatoires des particules diffusantes avec les molécules du milieu de diffusion. On observe la marche aléatoire d'un ensemble de particules des régions de concentration élevée vers les régions de plus faible concentration.

Le transport par convection est un déplacement de matière dû à un mouvement macroscopique du milieu.

Densité de particules, vecteur densité de flux de particules

Densité volumique de particules

La répartition des particules diffusantes dans le milieu est décrite par la densité volumique de particules $n(M,t)$, variable intensive décrite à l'échelle mésoscopique : le nombre d'un particules contenues dans un volume mésoscopique $\mathrm{d}\tau_M$ situé en M est $\delta N = n(M,t)\,\mathrm{d}\tau_M$.

- $n(M,t) \geqslant 0$.
- $n(M,t)$ s'exprime en m^{-3}.

Flux de particules

Le flux de particules $\Phi_\Sigma(t)$ à travers une surface Σ orientée est le nombre de particules traversant cette surface par unité de temps.

Le nombre de particules traversant une surface orientée Σ pendant $\mathrm{d}t$ s'écrit

$$\delta N_\Sigma(t) = \Phi_\Sigma(t)\,\mathrm{d}t\,.$$

- Le nombre δN_Σ est algébrique, son signe étant déterminé par l'orientation arbitraire de la surface. Si les particules traversent effectivement dans le sens de l'orientation, on a $\delta N > 0$, alors que l'on a $\delta N_\Sigma < 0$ dans le cas contraire. **Une surface fermée est conventionnellement orientée vers l'extérieur.**
- Le flux Φ_Σ est une grandeur algébrique qui s'exprime en s^{-1} (analyse dimensionnelle : $\dim(\Phi_\Sigma) = \mathrm{T}^{-1}$).

Vecteur densité de flux de particules

Par définition du vecteur densité de flux de particules :

$$\Phi_\Sigma(t) = \iint_{M\in\Sigma} \vec{j}_N(M,t)\,\mathrm{d}\vec{S}_M\,.$$

- Φ_Σ s'écrit donc comme le flux du champ vectoriel $\vec{j}_N(M,t)$ à travers la surface orientée Σ.
- Le vecteur surface élémentaire $\mathrm{d}\vec{S}_M$ est normal à la surface en M, dirigé dans le sens d'orientation de la surface. Le flux élémentaire à travers cette surface est $\mathrm{d}\Phi = \vec{j}_N \cdot \mathrm{d}\vec{S}$.
- Dans le cas — fréquent — où la surface S est plane et où $\vec{j}_N(M,t)$ est uniforme sur cette surface, on a

$$\Phi_\Sigma(t) = \vec{j}_N(M,t) \cdot \vec{S} = \vec{j}_N(M,t) \cdot \vec{n}\, S$$

  où $\vec{n}$ est le vecteur unitaire normal à la surface.
- La norme $\|\vec{j}_N(M,t)\|$ s'exprime en $\mathrm{m}^{-2}\cdot\mathrm{s}^{-1}$ (analyse dimensionnelle : $\dim(\|\vec{j}_N(M,t)\|) = \mathrm{L}^{-2}\mathrm{T}^{-1}$).

➤ Dans le cas où des particules, de densité n, se déplacent avec une même vitesse $\vec{v}$, on peut associer à ce mouvement [1] un vecteur densité de courant $\boxed{\vec{j} = n\vec{v}}$.

Le nombre (algébrique) de particules traversant la surface orientée Σ entre t et $t + \mathrm{d}t$ s'écrit :

$$\boxed{\delta N(t) = \left(\iint_{M\in\Sigma} \vec{j}_N(M,t) \cdot \mathrm{d}\vec{S}_M \right) \mathrm{d}t}.$$

➤ Le système étudié est décrit à l'aide de deux champs :
- le champ scalaire $n(M,t)$ décrivant l'état du système à l'aide de la variable intensive $n(M,t)$;
- le champ vectoriel $\vec{j}_N(M,t)$ décrivant l'évolution du système siège d'un phénomène diffusif.

Bilan de particules

On considère un phénomène diffusif unidimensionnel, selon la direction Ox :
- la densité volumique de particules s'écrit alors $n(M,t) = n(x,t)$;
- le vecteur densité de courant de particules s'écrit $\vec{j}_N(M,t) = j_N(x,t)\vec{e}_x$.

Dans le cas où il n'y a pas de production ou d'absorption de particules diffusantes au sein du milieu, le bilan de particules s'écrit :

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial j_N(x,t)}{\partial x}.$$



En géométrie quelconque, le bilan de particules se généralise sous la forme :

$$\frac{\partial n(M,t)}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{j}_N(M,t).$$

➤ En géométrique cylindrique, dans le cas où $\vec{j}_N(M,t) = j_N(r,t)\vec{e}_r$, on a [2] $\operatorname{div}\vec{j}_N(M,t) = \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial\left(r\, j_N(r,t)\right)}{\partial r}$.

➤ En géométrique sphérique, dans le cas où $\vec{j}_N(M,t) = j_N(r,t)\vec{e}_r$, on a [2] $\operatorname{div}\vec{j}_N(M,t) = \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial\left(r^2 j_N(r,t)\right)}{\partial r}$.

➤ Dans le cas où il y a production ou absorption de particules diffusantes, le bilan s'écrit dans le cas unidimensionnel

$$\boxed{\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial j_N(x,t)}{\partial x} + p(x,t)},$$

où $p(x,t)$ est le nombre (algébrique) de particules produites par unité de volume et de temps.

➤ En l'absence de production ou d'absorption surfacique de particules, le flux est une fonction continue de x.

Loi de Fick

Un courant de diffusion apparaît quand la densité de particule n'est pas uniforme ; il est donné par la loi de Fick :

$$\vec{j}_N(M,t) = -D\overrightarrow{\operatorname{grad}}\, n(M,t),$$

où $D > 0$ est le **coefficient de diffusion** (en $\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$)

➤ C'est une loi phénoménologique, qui n'est donc pas universelle. Le courant de diffusion $\vec{j}_N$ peut être considéré comme la réponse du milieu à la perturbation $\dfrac{\partial n}{\partial x} \neq 0$: la loi de Fick suppose une réponse linéaire et instantanée du milieu.

➤ La loi de Fick n'est plus valable si le gradient densité est trop grand (la réponse est alors non linéaire), si $n(x,t)$ varie trop vite dans le temps, ou dans le cas d'un milieu anisotrope.

1. Même si ce n'est pas un phénomène de diffusion.
2. Cette expression sera donnée et n'est pas à mémoriser.

- Le signe − traduit le sens de la diffusion : les particules vont des régions de densité particulaire élevée aux régions de densité plus faible, de façon à homogénéiser cette densité.
- Si la densité $n(M,t)$ est uniforme, on a $\vec{j}_N(M,t) = \vec{0}$: il n'a pas de diffusion.
- Pour $n(M,t) = n(x,t)$ en coordonnées cartésiennes, on a $\overrightarrow{\text{grad}}\, n = \dfrac{\partial n(x,t)}{\partial x}\vec{e}_x$.
- On retiendra que pour $n(M,t) = n(r,t)$ en coordonnées cylindriques, on a $\overrightarrow{\text{grad}}\, n = \dfrac{\partial n(r,t)}{\partial r}\vec{e}_r$.
- On retiendra que pour $n(M,t) = n(r,t)$ en coordonnées sphériques, on a $\overrightarrow{\text{grad}}\, n = \dfrac{\partial n(r,t)}{\partial r}\vec{e}_r$.

Ordres de grandeur à connaître

molécules dans un gaz	$D \approx 10^{-5}\ \text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
molécules dans un liquide	$D \approx 10^{-10}\ \text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
atomes dans un solide	$D \approx 10^{-30}\ \text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$

Équation de la diffusion

Cas unidimensionnel sans production de particules

Dans le cas où D est constant, la densité particulaire $n(M,t)$ vérifie l'équation de la diffusion

$$\frac{\partial n(M,t)}{\partial t} = D\Delta n(M,t)\,,$$

- L'équation de la diffusion n'est pas invariante par renversement du temps (c'est-à-dire en effectuant le changement de variable $t' = -t$). Cela traduit le *caractère irréversible* du phénomène de diffusion.
- L'équation de la diffusion est une équation aux dérivées partielles. Elle n'a pas de solution générale : la forme de sa solution dépend du domaine de définition de $n(M,t)$, des conditions initiales (pour $t = 0$) et des conditions aux frontières (pour certains points M).
- En géométrie cartésienne pour un phénomène unidimensionnel, l'équation de la diffusion s'écrit

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}\,.$$

- L'équation de la diffusion se rencontre dans de nombreux domaines de la physique (ou d'autres sciences). Un phénomène décrit par une loi de la forme $\dfrac{\partial y}{\partial t} = a\Delta y$ sera qualifié de **phénomène diffusif**.

Ordres de grandeur

On note L^* l'échelle de longueur caractéristique du phénomène et T^* sa durée caractéristique. De l'équation de la diffusion on déduit

$$L^* \sim \sqrt{DT^*}$$

- La diffusion met un temps très long pour se produire sur une grande distance : $L^* \propto \sqrt{T^*}$.

Cas du régime stationnaire sans production de particules

Dans le régime stationnaire les grandeurs locales $n(M)$ et $\vec{j}_N(M)$ ne dépendent plus du temps.

Cas unidimensionnel (coordonnées cartésiennes)

L'équation de la diffusion se ramène à $\dfrac{\text{d}^2 n(x)}{\text{d}x^2} = 0$, où D ne figure plus.

- Le profil de densité est affine $n(x) = \alpha x + \beta$, indépendant de D.

➤ Le vecteur densité de flux de particules est uniforme : $\vec{j}_N = -D\alpha\,\vec{e}_x$. Le flux Φ est indépendant de x.

➤ On peut directement établir cette équation par un bilan de particules, sans passer par l'équation de la diffusion.

Géométrie quelconque

La densité particulaire vérifie l'**équation de Laplace** en régime stationnaire :

$$\Delta n(M) = 0\,.$$

Le bilan de particules conduit à

$$\operatorname{div} \vec{j}_N(M) = 0\,.$$

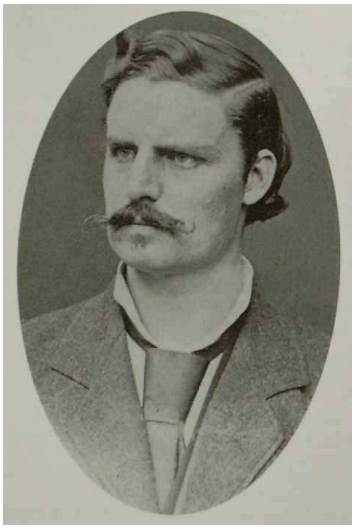
Le vecteur densité de flux de particules est à flux conservatif.

➤ En géométrie sphérique, le flux de particules à travers une sphère de rayon r est indépendant de r ; on a $\Phi(r) = \Phi_0$.

➤ En géométrie cylindrique, le flux de particules à travers un cylindre de rayon r et de hauteur H est indépendant de r ; on a $\Phi(r) = \Phi_0$.

Mais qui était-il ?

Adolf Fick, 1829-1901, physiologiste [3] allemand.
Il étudie la diffusion du sel dans l'eau et établit sa loi de la diffusion dans ses fameux articles publiés en **1855**, à l'âge de 26 ans. Son intuition a été de procéder par analogie avec la loi de Fourier décrivant la diffusion thermique (1822). Il fait allusion à la théorie atomique, alors balbutiante, pour tenter d'expliquer le phénomène, mais ce n'est que 50 ans plus tard qu'Einstein donnera l'explication théorique de la diffusion de particules (1905). Cette analyse est confirmée par l'étude expérimentale du mouvement brownien menée par Jean Perrin.
Il est l'auteur du premier traité de physique pour la médecine, où sont étudiés divers champs de la biophysique : mélange de l'air dans les poumons, contractions musculaires, hydrodynamique de la circulation sanguine, fonctionnement du cœur, etc.
En 1870, il met au point une méthode de mesure du débit cardiaque (principe de Fick).





3. La physiologie est l'étude des organismes vivants.