

Équation de la diffusion en 1-D

A. Introduction

1. Généralités

La diffusion couvre une gamme de phénomènes qui ont tous comme particularité d'être non réversibles dans le temps. Nous parlerons surtout ici de la diffusion d'un fluide dans un autre, résultant, en général, en un mélange dont l'homogénéité va croissant avec le phénomène de diffusion, comme le lait dans le café ou le mélange d'azote et d'oxygène de l'atmosphère qui est uniforme et est le résultat d'une diffusion. De façon générale, le résultat est une uniformisation spatiale des différentes concentrations.

La diffusion peut être causée par une pression appliquée de l'extérieur sur le fluide. Nous attendons alors un terme de source pour décrire cette pression dans l'équation différentielle qui décrit le phénomène. Nous savons aussi qu'une substance en haute concentration locale dans une autre va souvent tendre, si les fluides sont miscibles, à diffuser en tendant vers un mélange homogène. Il peut y avoir ou non une source de *nouvelle* substance en une région de l'espace, auquel cas un terme de source doit décrire cette situation. La forme exacte des termes de source varie énormément d'une situation à l'autre. Morse & Feshbach et Thikonov, parmi d'autres, discutent de cette question pour plusieurs situations. S'il y a terme de source, ce terme affecte généralement la partie *particulière* de la solution. L'autre partie de la solution, la partie *homogène* est toujours présente et constitue toute la solution s'il n'y a pas de source. C'est ce que nous allons étudier ci-dessous.

Une variable, notée ψ va mesurer la concentration (quantité par unité de *volume*) de la substance diffusante. Nous posons que l'expérience démarre à $t = 0$, auquel moment, par exemple, une surconcentration locale, dont la forme spéciale reste à fixer

expérimentalement, engendre la diffusion de la substance pour $t > 0$ vers les régions avoisinantes. Nous sommes intéressés à connaître la concentration pour ces temps $t > 0$, i.e. son évolution temporelle en tout point du domaine de diffusion, donc en tout t . Nous voulons également savoir comment cette concentration s'étale dans l'espace, i.e. comment elle varie avec x , cela en tout temps t . En bref, nous voulons savoir comment ψ varie en t et en x .

2. L'équation de diffusion

Le point de départ est l'hypothèse que la substance est conservée, au sens où, une fois générée par une source, elle n'est pas détruite. Il s'ensuit que la densité/concentration obéit à une équation de conservation

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(x,t) = 0$$

Le *moteur* de la diffusion est une différence locale de concentration qui génère *naturellement* un courant de substance, $\vec{j}(x,t)$, en ce lieu, vers l'extérieur si la concentration y est plus élevée et vers l'intérieur si la concentration y est moins élevée. Nous posons ici que ce courant est proportionnel au gradient de densité, avec le signe - pour respecter la direction du courant (il *descend* la pente). Nous avons donc

$$\vec{j}(x,t) = -D \nabla \psi(x,t)$$

où D est un coefficient de proportionnalité appelé coefficient de diffusion et dont la valeur dépend des substances en contact. Il dépend de la substance diffusante et du milieu dans lequel elle diffuse, tenant compte de façon globale de l'interaction (viscosité, fugacité...) entre les deux milieux. Remplaçant nous donne

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} - D \nabla^2 \psi(x,t) = 0$$

C'est l'équation homogène de diffusion dont la solution nous donnera la concentration $\psi(x,t)$ en tout lieu et en tout temps, dans les limites pertinentes à notre problème.

En fait, cette équation est générale et s'applique donc à tous les phénomènes de diffusion, allant de la crème dans le café jusqu'aux photons dans la masse d'une étoile. Pour spécialiser la solution au problème particulier auquel nous faisons face, il nous faut ajouter les conditions initiales qui peuvent être, par exemple, la distribution de la concentration au temps $t = 0$. Cette condition initiale suppose donc que nous avons une

connaissance *expérimentale* de la fonction de concentration pour toute valeur de x au temps $t = 0$, donc que nous connaissons $\psi(x, 0)$. En ajustant la solution générale à cette condition, nous pourrions obtenir finalement la solution particulière à notre problème.

B. Quelques propriétés de l'équation de diffusion

Cette équation est dite *parabolique* dans le langage des mathématiques. Elle contient une dérivée réelle du premier ordre en t et une dérivée réelle du deuxième ordre en x . Comme nous le verrons, une conséquence est que la solution n'est pas réversible dans le temps et n'est donc pas valable pour $t < 0$; elle n'est pas invariante sous renversement du temps

Note : l'équation de Schrödinger a des dérivées des mêmes ordres, mais la dérivée p/r au temps est imaginaire; le résultat est que la solution reste valide sous renversement du temps.

L'équation de diffusion est aussi linéaire et homogène : chaque terme contient ψ à la puissance un, si nous n'avons pas de terme de source, disons $f(x, t)$ qui aurait rendu l'équation de la forme

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = f(x, t)$$

Dans ce dernier cas, elle ne serait plus homogène. L'équation ne contient pas non plus de termes non linéaires comme, par exemple $\frac{\partial \psi^2}{\partial t}$ qui la rendrait quadratique, donc non linéaire. Une conséquence très importante est que, si deux (ou plusieurs) solutions différentes existent, disons $\psi_1(x, t)$ et $\psi_2(x, t)$, alors une combinaison linéaire de ces deux solutions est aussi solution, i.e.

$$\psi(x, t) = c_1 \psi_1(x, t) + c_2 \psi_2(x, t)$$

est aussi solution de l'équation. Cela se vérifie trivialement en remplaçant dans l'équation sachant qu'individuellement $\psi_1(x, t)$ et $\psi_2(x, t)$ vérifient l'équation. Cette propriété s'avérera extrêmement utile lorsque nous chercherons à ajuster la solution générale pour construire la solution particulière de l'équation à notre problème.

C. Solution générale en 1-D

Nous cherchons ici la solution de l'équation homogène. Par simple observation, il est clair que l'équation homogène a une solution générale qui peut être obtenue par séparation de variable. Dans ce cas, nous écrivons

$$\psi(x, t) = R(x)\Phi(t)$$

Nous remplaçons dans l'équation homogène de diffusion, ce qui donne

$$R(x) \frac{d\Phi(t)}{dt} = D\Phi(t) \frac{d^2 R(x)}{dx^2}$$

où n'apparaissent plus que des dérivées ordinaires puisque les fonctions sont à une seule variable et que x et t peuvent être variés indépendamment dans ce problème.

Divisons (par la gauche évidemment) par la fonction $\psi(x, t) = R(x)\Phi(t)$ elle-même. Nous avons

$$\frac{1}{\Phi(t)} \frac{d\Phi(t)}{dt} = D \frac{1}{R(x)} \frac{d^2 R(x)}{dx^2}$$

Clairement, le terme de gauche contient toute et seulement la dépendance en t alors que celui de droite contient toute et seulement la dépendance en x . Comme t et x peuvent être physiquement variés indépendamment, elles doivent être mathématiquement des variables indépendantes et il est alors possible de varier arbitrairement la valeur de ces deux termes, mais l'égalité les oblige à rester égaux. La seule possibilité de garantir la validité de l'équation (le signe $=$) est d'imposer que chaque terme soit en fait égal à une constante, la même bien sûr. Nous avons donc

$$\frac{1}{\Phi(t)} \frac{d\Phi(t)}{dt} = D \frac{1}{R(x)} \frac{d^2 R(x)}{dx^2} = c : \text{une constante}$$

L'équation se découple alors en deux équations, une pour t et une pour x . Ce sont

$$\frac{1}{\Phi(t)} \frac{d\Phi(t)}{dt} = c$$

$$D \frac{1}{R(x)} \frac{d^2 R(x)}{dx^2} = c$$

a) Partie temporelle

Attaquons-nous à la première de ces deux équations. Nous avons

$$\frac{1}{\Phi(t)} \frac{d\Phi(t)}{dt} = c \Rightarrow \frac{d\Phi(t)}{dt} = c\Phi(t)$$

Cette équation très simple est du 1er ordre et nous en connaissons la solution générale, c'est une exponentielle simple

$$\Phi(t) = Ae^{ct}$$

où A est une constante d'intégration qui devra, comme la constante c , être spécifiée en ajustant la solution à la réalité physique. Nous cherchons la solution pour la période $t > 0$.

Il est alors essentiel que la constante c soit négative, sinon la concentration ira augmentant dans le temps jusqu'à exiger que le système contienne plus de substance que celle initialement présente. En fait, pour $c > 0$, la concentration augmente partout avec le temps, ce qui est clairement à l'encontre de tout ce que nous savons sur la diffusion. Il peut être utile d'écrire cette constante comme

$$c = -\frac{1}{\tau} \quad \text{où } \tau \text{ est positif et a les dimensions d'un temps}$$

$$\Rightarrow \Phi(t) = Ae^{-t/\tau}$$

On voit que τ est un temps caractéristique (de diffusion) et que la fonction $\Phi(t)$ voit sa valeur diminuer de moitié à chaque fois que le temps augment de $\approx 0.693\tau$.

b) Partie spatiale

Il reste évidemment l'équation en x qui se lit ici

$$D \frac{1}{R(x)} \frac{d^2 R(x)}{dx^2} = c = -\frac{1}{\tau} \Rightarrow \frac{d^2 R(x)}{dx^2} = -\frac{1}{D\tau} R(x)$$

Cette équation est également bien connue. Elle est du 2e ordre et a donc deux solutions générales indépendantes bien connues. Nous connaissons même plusieurs façons de les écrire

$$R(x) = \left\{ \begin{array}{cc} \sin kx \text{ et } \cos kx \\ OU \\ e^{ikx} \text{ et } e^{-ikx} \end{array} \right\} \quad \text{où } k^2 = \frac{1}{D\tau} \Rightarrow k = \pm \sqrt{\frac{1}{D\tau}}$$

Ces deux familles de solutions ne sont pas indépendantes puisque

$$e^{\pm ikx} = \cos kx \pm i \sin kx \Leftrightarrow \begin{cases} \cos kx = \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} \\ \sin kx = \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i} \end{cases}$$

De plus, la dernière forme est complexe. Comme la concentration est ici une quantité physique réelle, il est évident qu'il faudra savoir comment extraire une partie ou composante réelle de cette quantité. Écrire que $R(x) = e^{\pm ikx}$ est pour l'instant un *truc* mathématique, mais il s'avère assez utile pour que nous choisissons de le garder, quitte à ne conserver à la fin que ce qui correspond réellement à notre concentration physique.

Ainsi, la solution générale de l'équation est de la forme

$$\psi(x,t) = C e^{\pm ikx} e^{-t/\tau}, \text{ ou mieux } \psi(x,t) = (C_+ e^{ikx} + C_- e^{-ikx}) e^{-t/\tau}$$

On note que cette solution générale compte trois paramètres dont la valeur numérique ne peut pas être fixée par l'équation seule. Ce sont C_+ , C_- et k (ou τ), les deux derniers dépendant de c . Leur valeur numérique servira à ajuster la solution générale aux conditions particulières de la situation physique étudiée. Notons que nous aurions très bien pu écrire notre solution générale comme

$$\psi(x,t) = (A \sin kx + B \cos kx) e^{-t/\tau}$$

et nos paramètres ajustables auraient été A , B et k . En effet, τ n'est pas un paramètre indépendant additionnel, puisqu'il est fonction de k : $\tau = 1/Dk^2$.

D. Solution particulière

a) Comment on la construit

La solution ci-dessus est la solution générale. Pour décrire une situation physique particulière, nous devons introduire une donnée additionnelle, Ça peut être la connaissance de la situation qui prévalait au début de l'expérience. Cela suppose donc que nous connaissons la valeur en tout point de la valeur expérimentale de la concentration initiale que nous notons $\psi_e(x,0)$ et qui est *expérimentalement* connue. Par ailleurs, nous avons, de la solution générale, une expression pour la concentration initiale. Les deux devraient être identiques, i.e. nous devrions avoir

$$\psi(x,0) = C_+ e^{ikx} + C_- e^{-ikx} = \psi_e(x,0)$$

ou encore

$$\psi(x,0) = (A \sin kx + B \cos kx) = \psi_e(x,0)$$

Même en disposant des trois paramètres ajustables, il n'arrivera à peu près jamais que ces paramètres seront suffisants pour satisfaire la condition initiale décrite par l'équation ci-dessus!

Pour sortir de cette impasse apparente, nous utilisons la propriété déjà énoncée que la somme de deux solutions est solution. Nous n'avons pas encore fixé la valeur de k (ou de τ). Leur valeur demeure à la disposition de la solution pour l'ajuster à la situation physique. En fait, notre incapacité à satisfaire l'équation vient de ce que l'équation générale ne fait intervenir qu'une seule valeur de k . Imaginons qu'il n'y ait pas seulement une valeur de k qui soit pertinente pour notre problème, mais qu'il y en ait plusieurs (ce nombre peut atteindre l'infini, du moins en principe). Supposons d'abord que ces valeurs soient discrètes. Nous aurons alors une séquence de valeurs de k , que nous noterons

$$k_n = \pm \sqrt{\frac{1}{D\tau_n}} \Rightarrow \tau_n = \frac{1}{Dk_n^2}$$

En imposant cette dernière relation entre chaque paire k_n et τ_n , nous garantissons que l'équation est satisfaite pour cette paire. L'équation sera donc toujours satisfaite pour une combinaison linéaire (une somme) de ces solutions, chacune identifiée par n . Nous aurons alors

$$\psi(x, t) = \sum_n C_n e^{ik_n x} e^{-t/\tau_n} = \sum_n C_n e^{ik_n x} e^{-Dk_n^2 t}$$

qui sera aussi solution de l'équation de diffusion. Ici n court sur toutes les *valeurs* de n qui correspondent aux valeurs positives et négatives de k .

Une fois les valeurs des k_n choisies, il nous reste tous les coefficients C_n dont la valeur peut être ajustée pour satisfaire la condition initiale physiquement connue, i.e. notre solution particulière prend la forme, sachant que $e^0 = 1$,

$$\sum_n C_n e^{ik_n x} = \psi_e(x, 0)$$

Comme nous disposons maintenant d'un *grand* nombre de paramètres ajustables, les C_n , dont le nombre peut atteindre l'infini, il pourra devenir possible de satisfaire la condition initialement fixée par l'expérience et de garantir que le signe d'égalité ci-dessus est valide, donc que l'équation est satisfaite par la solution particulière.

C'est un peu long ici de démontrer que la solution existe et est unique dans ces conditions. Il vaut cependant la peine de se pencher sur le choix des valeurs de k_n qui ont été retenues. En général, ces valeurs sont dictées aussi bien par la mathématique, la géométrie, que par la situation physique. En fait, la mathématique, ou surtout la géométrie de notre problème physique est suffisante. Ce problème est étudié plus en détail en Annexe. Mentionnons seulement que si le système physique a une longueur totale L , alors le *bon* choix pour les valeurs des k_n est

$$k_n = \pm \frac{n\pi}{L} \Rightarrow \tau_n = \frac{1}{Dk_n^2} = \frac{L^2}{Dn^2\pi^2}$$

Notons que nous couvrons toutes les valeurs, positives et négatives si nous laissons la somme aller de $-\infty$ à $+\infty$, ce que nous ferons ici. Dans ce cas, les \pm deviennent inutiles.

Ce que nous avons ci-dessus pour la condition initiale (CI) est

$$\psi_e(x,0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n e^{ik_n x} \quad (\text{CI})$$

où une fonction connue, à gauche, est représentée comme une série de fonctions connues fois des coefficients à déterminer. C'est la même chose que représenter un vecteur connu à l'aide d'une somme de vecteurs de base, chacun multiplié par la composante du vecteur, comme

$$\vec{A} = A_x \hat{i} + A_y \hat{j} + A_z \hat{k}$$

On peut dire que les coefficients C_n sont les composantes de la fonction (vecteur)

$\psi_e(x,0)$ dans la base des fonctions (vecteurs de base) $e^{ik_n x}$.

b) Calcul des composantes

Une fois la base choisie, les composantes d'un vecteur donné sont uniques. De même ici, on les calcule en multipliant chaque côté de l'équation (CI) par $e^{-ik_n x}$, intégrant sur tout l'espace et utilisant l'orthogonalité des exponentielles sur le domaine de x , ce qui laisse (ci-dessous, nous avons réutilisé n au lieu de m)

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{tout l'espace}} \psi_e(x,0) e^{-ik_n x} dx$$

Cette intégrale est calculable puisque la fonction $\psi_e(x,0)$ est connue.

On note que si L devient large, et même très large, la différence entre deux valeurs successives de k devient de plus en plus petite. En fait, lorsqu'en particulier cette longueur L devient très longue p/r à une longueur caractéristique de diffusion, alors au lieu de sommer sur des valeurs de k discrètes mais de plus en plus près les une des autres, on remplace la somme discrète par une somme continue, une intégrale. Il n'y a plus d'indice n , k lui-même devient l'indice et on a

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} e^{-t/\tau(k)} dk \quad \text{où} \quad \tau(k) = \frac{1}{Dk^2} \Rightarrow e^{-t/\tau(k)} = e^{-Dk^2 t}$$

et l'application de la condition initiale mène à

$$\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} dk = \psi_e(x, 0)$$

et nous en déduisons, par la théorie des transformées de Fourier que le calcul des *composantes* donne

$$C(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{tout l'espace}} \psi_e(x, 0) e^{-ikx} dx$$

Techniquement, les intégrales ci-dessus appartiennent à une famille qui porte le nom de transformées de Fourier.

c) Un exemple

Nous pouvons nous pencher sur un cas particulier. Supposons que la condition initiale soit telle que les coefficients $C(k)$ gardent la même valeur, disons C_0 , quelque soit la valeur de k . Cela correspond à une distribution initiale de la substance qui serait extrêmement localisée, idéalement en un point, puisque cela correspond à

$$\psi_e(x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} C_0 e^{ikx} dk = C_0 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk = 2\pi C_0 \delta(x).$$

Il est clair que cela décrit une concentration initiale centrée à l'origine, $x = 0$, donc extrêmement localisée.

Dans ce cas, les intégrales sont relativement simples et la concentration sera donnée par

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} e^{-Dk^2 t} dk = C_0 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} e^{-Dk^2 t} dk = \frac{C_0 \pi}{(Dt)^{1/2}} e^{-x^2 / 4 Dt}$$

Cette forme de la solution de l'équation de diffusion est bien connue et est souvent présentée comme étant *typique*. On voit ici qu'elle correspond à une situation particulière

où la substance est initialement concentrée en un très faible espace autour d'un point appelé $x = 0$.

E. Diffusion avec dissipation

Nous allons étudier ici le cas où, à la diffusion, se greffe un mécanisme qui *capture* la substance. Cette capture peut être physique (collage), chimique (réaction), même atomique, nucléaire (réactions idoinies). Nous posons que la capture par le milieu se fait à un taux qui est proportionnel à la concentration elle-même. C'est intuitivement satisfaisant pour bon nombre de mécanismes qui ne sont pas saturés. Nous caractériserons la capture par un paramètre que nous noterons κ et qui aura les dimensions inverses du temps et qu'on peut écrire $\kappa = 1/\tau_c$, où τ_c est un temps caractéristique de *capture* qui dépend des milieux en présence.

L'équation de diffusion devient dans ces conditions

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} - \kappa \psi(x,t) = D \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{\tau_c} \psi(x,t)$$

Elle reste linéaire et homogène et la séparation de variable fonctionne encore. Nous retrouvons donc, pour la partie temporelle

$$\Phi(t) = A e^{-t/\tau}$$

L'équation pour la partie spatiale est légèrement modifiée, pas dans sa forme, mais dans la relation entre les paramètres puisqu'elle devient

$$\begin{aligned} D \frac{1}{R(x)} \frac{d^2 R(x)}{dx^2} &= -\frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tau_c} = \frac{\tau - \tau_c}{\tau_c \tau} = -\frac{1}{\tau_T} \Rightarrow \tau_T = \frac{\tau \tau_c}{\tau_c - \tau} \\ \Rightarrow \frac{d^2 R(x)}{dx^2} &= -\frac{1}{D \tau_T} R(x) \end{aligned}$$

Ici, $\frac{1}{\tau_T}$ est obtenu par la différence de deux termes. Rappelant que τ et τ_c sont les inverses des coefficients, nous identifions deux situations très différentes selon que τ est plus petit ou plus grand que τ_c .

a) La capture l'emporte

Commençons par examiner le mécanisme que nous n'avons pas encore étudié, la capture avec un taux proportionnel à la concentration. Ici, la constante de capture est plus importante que celle de diffusion et nous avons $\tau \gg \tau_c$. Alors le temps caractéristique de capture est beaucoup plus court que celui de diffusion. Dans un laps de temps donné, nous aurons beaucoup plus de processus de capture que de diffusion et la capture l'emportera. En effet

$$\tau_T \equiv -\frac{\tau\tau_c}{\tau} \equiv -\tau_c$$

Dans ce cas τ_T est négatif et le coefficient dans le côté droit de l'équation en x est maintenant positif, puisqu'il est $-1/\tau_T$. La solution en sera sérieusement affectée.

Avant de l'étudier, étudions d'abord un cas très simple. S'il n'y avait que de la capture et pas de diffusion, l'équation deviendrait

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\kappa \psi(x,t), \quad \text{avec } \kappa > 0$$

La solution est très simple

$$\psi = Ae^{-\kappa t} = Ae^{-t/\tau_c}$$

Cette décroissance temporelle en exponentielle simple est très typique de ce genre de mécanisme et se retrouve dans à peu près tous les phénomènes de désintégration, par exemple, où un échantillon perd ses membres à un taux proportionnel à sa propre densité/concentration.

Reprenons le problème au complet où l'équation en x devient avec $s_T = -\tau_T > 0$

$$\Rightarrow \frac{d^2 R(x)}{dx^2} = \frac{1}{Ds_T} R(x) \quad \text{où} \quad \frac{1}{Ds_T} \text{ est positif}$$

L'équation étant du 2e ordre, il y a deux solutions indépendantes

$$R(x) = Ae^{Kx} + Be^{-Kx} \quad \text{où} \quad K = \sqrt{\frac{1}{Ds_T}}$$

Cette solution est constituée d'un terme croissant et d'un terme décroissant lorsque x croît vers les valeurs positives. Ce type de terme est *dangereux* et il faut parfois faire un choix physique. Ce choix dépend du système étudié, de sa géométrie, de ses dimensions propres et caractéristiques, ainsi que de la façon dont on choisit de mesurer les distances. Posons

par exemple que notre système est physiquement situé entre $x=0$ et $x=L$. Dans ce cas, si L est très grand p/r aux distances propres du mécanisme i.e. si la concentration est devenue essentiellement non mesurable (trop faible) longtemps avant d'atteindre $x=L$, alors on peut dire que la dimension du système est essentiellement infinie p/r au mécanisme étudié. Dans ce cas, il n'est pas possible de retenir le terme croissant qui n'a physiquement pas de sens, sa croissance pouvant exiger la *création* de nouvelle substance pour satisfaire la croissance de la concentration. On ne gardera alors que le terme décroissant

$$R(x) = Be^{-Kx}$$

Le phénomène est dominé complètement par une disparition exponentielle de la substance à mesure qu'on s'éloigne du point où était la source. Au total ici, la solution générale est du type

$$\psi(x,t) = \psi_0 e^{-Kx} e^{-t/\tau_c}$$

montrant des décroissances exponentielles spatiales et temporelles.

b) La diffusion l'emporte

i) La solution générale

Si $\tau < \tau_c$, alors le mécanisme de diffusion est plus *important* que celui de capture et alors $\tau_T > 0$. En effet, l'argument est l'inverse de celui ci-dessus et on voit que

$$\tau_T \equiv \frac{\tau\tau_c}{\tau_c} \equiv \tau$$

et nous aurons comme équation pour x

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} = -\frac{1}{D\tau_T} R(x) \quad \text{où} \quad -\frac{1}{D\tau_T} \text{ est négatif}$$

La situation reste semblable à celle que nous avons étudiée dans le cas de la diffusion pure. Les solutions sont exactement de la même forme, sauf que nous avons une relation différente entre τ et k , relation qui devient

$$k = \sqrt{\frac{1}{D\tau_T}} = \sqrt{\frac{\tau_c - \tau}{D\tau_c}} \Rightarrow \tau = \frac{\tau_c}{1 + k^2 D\tau_c}$$

La solution générale garde la même forme sauf pour ce changement et elle devient donc

$$\psi(x,t) = Ce^{ikx} e^{-(1+k^2 D\tau_c)t/\tau_c} = Ce^{ikx} e^{-k^2 Dt} e^{-t/\tau_c}$$

Aux facteurs diffusifs que nous connaissions déjà vient se greffer un facteur d'amortissement exponentiel simple qui caractérise la capture. Dans le cas de la présente limite, si $\tau \ll \tau_c$, alors le facteur de capture ne deviendra significatif qu'après un temps assez long puisque τ_c est *grand*, donc e^{-t/τ_c} reste près de l'unité sauf lorsque t s'approche de τ_c .

ii) La solution particulière

Comme auparavant, nous devons pratiquement toujours considérer une combinaison linéaire afin de pouvoir décrire la situation physique particulière qui prévaut dans notre montage expérimental. Techniquement, c'est assez simple puisque la solution générale ci-dessus nous permet d'écrire directement que la somme qui donne la solution particulière est

$$\psi(x, t) = e^{-t/\tau_c} \sum_n C_n e^{ik_n x} e^{-t/\tau_n}$$

C'est exactement de la même forme que dans le cas où nous n'avions pas de capture (ni désintégration ni réaction ni...), sauf qu'on lui ajoute un facteur de décroissance exponentielle dans le temps. Ce facteur est à l'extérieur de la somme puisqu'il ne contient rien qui dépende de k donc de k_n . Le facteur additionnel est lui-même d'une forme maintenant connue, une décroissance temporelle exponentielle typique des mécanismes de *disparition* de la substance initiale, à un taux proportionnel à la concentration/densité locale elle-même.

Les composantes C_n sont maintenant données en ajustant la solution particulière à la concentration initiale expérimentalement connue et notée $\psi_e(x, 0)$

$$\psi(x, 0) = \sum_n C_n e^{ik_n x} e^{-t/\tau_n} = \psi_e(x, 0)$$

Ils auront donc exactement la même valeur que dans le cas où il n'y a pas de capture !

Ceci demeure vrai quand on passe au cas *continu* où nous obtenons

$$\psi(x, t) = e^{-t/\tau_c} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} e^{-t/\tau(k)} dk \quad \text{où} \quad \tau(k) = \frac{1}{Dk^2} \Rightarrow e^{-t/\tau(k)} = e^{-Dk^2 t}$$

Encore ici, la seule différence avec le cas sans capture est l'apparition de ce facteur de décroissance exponentielle dans le temps. Les composantes $C(k)$ seront les mêmes que

sans capture pour les cas où la solution particulière est déterminée par des conditions initiales à $t = 0$. Pour une situation où la substance est initialement concentrée essentiellement dans un point, nous aurons alors que $C(k) = C_0$, une constante et nous obtenons une expression semblable à celle déjà obtenue

$$\psi(x,t) = e^{-t/\tau_c} \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{ikx} e^{-Dk^2 t} dk = \frac{C_0 \pi e^{-t/\tau_c}}{(Dt)^{1/2}} e^{-x^2/4Dt}$$

mais où, ici encore, on voit apparaître le facteur additionnel de décroissance exponentielle dans le temps.

NOTE : La forme explicite des solutions obtenues dans cette section est valable pour les conditions initiales données. Si on change ces conditions, i.e. si on change les conditions expérimentales, la solution changera. Le lecteur intéressé pourra consulter la littérature pour d'autres exemples (voir par exemple Mathews & Walkers, 8-4; Morse & Feshbach, ch.12 ; etc).

©Pierre Amiot, 2012.