Phénomènes de transport

Chapitre I : Diffusion de particules

Contents

Phénomènes de transport

Chapitre I : Diffusion de particules

Objectifs :

- *Présentation du phénomène de diffusion ; loi de Fick ; Equation de diffusion ;*
- *Interprétation microscopique de la diffusion.*

1 Le phénomène de diffusion

Il existe deux modes de transfert (ou échange) de matière à travers une surface :

- la **convection** attribuée à un déplacement global de matière,
- la **diffusion** en l'absence d'un tel déplacement d'ensemble.

Un exemple classique de diffusion est l'ouverture d'une bouteille de parfum : même dans une pièce sans aucun courant d'air on perçoit assez rapidement une odeur agréable dans toute la pièce.
Un phénomène de diffusion apparaît donc comme un phénomène de transport de particules sans mouvement mascroscopique du support. Ce transport se produit dans un système initialement hors équilibre, des régions riches en particules vers les régions pauvres en particules ; il tend donc à uniformiser la répartition des particules qui diffusent :

Le phénomène de diffusion est irréversible

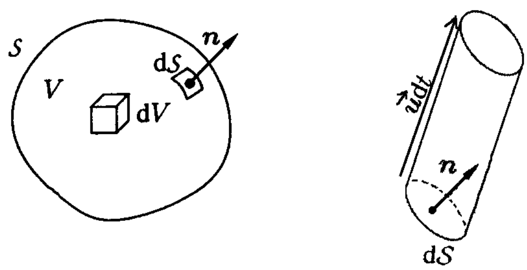
Dans la suite du cours on négligera les phénomènes de convection (hypothèse justifiée dans les solides mais plus discutable dans les liquides et les gaz).

Exemple : Une détente de Joule-Gay-Lussac (cf. cours de thermodynamique de 1ère année) peut s'expliquer également en terme de diffusion. Le phénomène de diffusion et les lois énoncées plus loin sont une traduction macroscopique de l'agitation thermique des particules : les collisions entre les molécules du gaz vont progressivement uniformiser sa concentration. Une particule, après un choc, a la même probabilité de se retrouver à gauche ou à droite ; comme il y a plus de particules à gauche (au départ) il y aura plus de particules se déplaçant vers la droite d'où l'évolution vers une répartition équitable des particules.

2 Loi de Fick

2.1 Vecteur densité de courant de particules

Soit un milieu (gaz, solide ou liquide), de volume V délimité par une surface fermée S, dans lequel peuvent diffuser des particules :



Soit $n(M,t)$ la densité particulaire de particules diffusantes.
Soit $d^2N(M,t)$ le nombre de particules traversant l'élément de surface $d\overrightarrow{S}$ (centré sur M) entre et $t+dt$.
On admet que l'on peut considérer que ces particules sont animées d'une vitesse moyenne $\overrightarrow{u}(M,t)$.
Les particules ayant traversé $d\overrightarrow{S}$ se retrouvent dans un cylindre de section $d\overrightarrow{S}$ et de génératrice $\overrightarrow{u}(M,t)dt$ de volume $d\mathcal{V}$:

$$d^2N(M,t) = n(M,t).d\mathcal{V} = n(M,t)d\overrightarrow{S}.\overrightarrow{u}(M,t)dt$$

d'où un flux élémentaire de particules (nb de particules par unité de temps) :

$$\delta\phi(M,t) = \frac{d^2N(M,t)}{dt} = n(M,t)d\overrightarrow{S}.\overrightarrow{u}(M,t)$$

On remarque que l'on peut écrire le flux sous la forme :

$$\boxed{\phi(t) = \oiint_S \delta\phi(M,t) = \oiint_S \overrightarrow{j}(M,t).d\overrightarrow{S}} \qquad \text{(Flux de particules)}$$

$$\boxed{\text{avec } \overrightarrow{j}(M,t) = n(M,t).\overrightarrow{u}(M,t)} \qquad \text{(Vecteur } \overrightarrow{j}\text{)}$$

Le flux de particules ϕ diffusées à travers une surface S est égale au flux du vecteur densité de particules $\overrightarrow{j}$ diffusées à travers cette surface S.

Unités: $\overrightarrow{j}$ s'exprime en $\mathrm{m^{-2}.s^{-1}}$

Remarques :

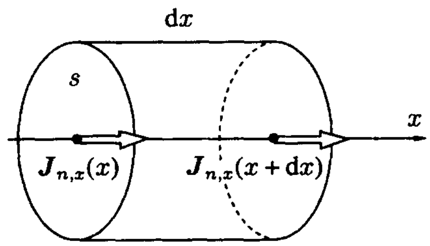
1) le nombre de particules traversant l'élément de surface $d\overrightarrow{S}$ pendant dt est :

$$d^2N(M,t) = \overrightarrow{j}(M,t).d\overrightarrow{S}.dt$$

2) dans la suite du cours on se place dans le cas d'un problème unidimensionnel : $d^2N(x,t) = j(x,t)dSdt$

2.2 Equation de conservation du nombre de particules

Comme dans de nombreux cas semblables (conservation de la masse, conservation de la charge, ...) on peut établir une équation de conservation du nombre de particules (on exclue ici toute création ou absorption des particules diffusées).
Soit un cylindre élémentaire de section S compris entre les abcisses x et $x + dx$:



On effectue un bilan du nombre de particules contenues dans ce cylindre entre t et $t + dt$:
la variation du nombre de particules contenues dans ce cylindre, notée $d^2N(x,t)$, est égale au nombre de particules reçues, compté algébriquement :

$$\begin{aligned} d^2N(x,t) &= j(x,t)Sdt - j(x+dx,t)Sdt \\ &= -(j(x+dx,t) - j(x,t))Sdt \\ &= -\frac{\partial j(x,t)}{\partial x}dxSdt \end{aligned}$$

Sdx représente le volume du cylindre élémentaire, $\frac{d^2N(x,t)}{Sdx}$ est donc égale à $dn(x,t)$ = variation du nombre de particule par unité de volume en x entre t et $t + dt$; d'où l'équation de conservation du nombre de particules :

$$\boxed{\frac{\partial j(x,t)}{\partial x} + \frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = 0} \qquad \text{(Equation de conservation)}$$

Remarques :

1) L'équation précédente est aussi appelée **équation de continuité**.

2) La généralisation de l'équation précédente dans le cas à 3 dimensions donne $div\,\overrightarrow{j}(M,t) + \frac{\partial n(M,t)}{\partial t} = 0$.

3) Si certaines particules apparaîssent ou disparaîssent dans le milieu (à la suite par exemple de réactions chimiques) on obtient $div\,\overrightarrow{j}(M,t) + \frac{\partial n(M,t)}{\partial t} = \sigma$ où σ est le **taux de production de particules** par unité de temps et par unité de volume.

Exercise 1 Exercice n° 01 : *Démontrer directement l'équation $div\,\overrightarrow{j}(M,t) + \frac{\partial n(M,t)}{\partial t} = 0$ en utilisant les opérateurs différentiels.*

Entre t et $t + dt$ la variation dN du nombre N de particules contenues dans le volume $\mathcal{V}$ est :

$$\begin{aligned} dN(t) &= -\phi(t)dt = -\left(\oiint_S \delta\phi(M,t)\right)dt = -\left(\oiint_S \overrightarrow{j}(M,t).d\overrightarrow{S}\right)dt \\ \Rightarrow \frac{dN(t)}{dt} &= -\left(\oiint_S \overrightarrow{j}(M,t).d\overrightarrow{S}\right) \end{aligned}$$

de plus

$$dN(t) = d\left(\iiint_V n(M,t)\,d\tau\right) \Rightarrow \frac{dN(t)}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\iiint_V n(M,t)\,d\tau\right) = \iiint_V \frac{\partial n(M,t)}{\partial t}\,d\tau$$

$$\Rightarrow \iiint_V \frac{\partial n(M,t)}{\partial t} = -\left(\oiint_S \vec{j}(M,t).d\vec{S}\right)$$

$$\Rightarrow \iiint_V \frac{\partial n(M,t)}{\partial t}\,d\tau + \iiint_V div\,\vec{j}(M,t).d\tau = 0$$

$$\Rightarrow \iiint_V \left(\frac{\partial n(M,t)}{\partial t} + div\,\vec{j}(M,t)\right).d\tau = 0$$

Cette intégrale est nulle pour tout volume V ; on a bien $\frac{\partial n(M,t)}{\partial t} + div\,\vec{j}(M,t) = 0$.

2.3 Loi de Fick

Il faut maintenant relier $\vec{j}$, vecteur densité de particules diffusées, à la densité particulaire pour obtenir une expression ne faisant plus intervenir $\vec{u}(M,t)$.
On dispose pour cela des observations suivantes :

- la diffusion cesse lorsque la répartition $n(M,t)$ est homogène,
- la diffusion se fait toujours des régions les plus riches en particules vers les régions les moins riches.

Adolphe FICK proposa vers 1856 la forme la plus simple rendant compte de ces deux observations en reliant linéairement $j(x,t)$ et $\frac{\partial n(x,t)}{\partial x}$:

$$\boxed{j(x,t) = -D\left(\frac{\partial n(x,t)}{\partial x}\right)_t} \qquad \text{(Loi de FICK 1 D)}$$

D est le **coefficient de diffusion** ou **diffusivité** ; il s'exprime en $\mathrm{m^2.s^{-1}}$.
D dépend de la nature des particules qui diffusent et du milieu dans lequel a lieu la diffusion.
Le tableau ci-dessous donne quelques valeurs de D dans différents cas et pour une température $t = 25\,°\mathrm{C}$.

Phase	**Gaz**	**Gaz**	**Gaz**	**Liquide**	**Liquide**	**Solide**
Support	*Air*	*Air*	H_2	H_2O	H_2O	*Cu*
Particules diffusantes	H_2	O_2	D_2	H_2	O_2	*Al*
D **en** $\mathrm{m^2.s^{-1}}$	$7,12.10^{-5}$	$2,06.10^{-5}$	$1,24.10^{-4}$	$5,13.10^{-9}$	$1,80.10^{-9}$	$1,30.10^{-30}$

Remarques :
1) Pour les valeurs ci-dessus, la pression n'est pas précisée alors que D peut dépendre de P.
2) La loi de Fick est une loi phénoménologique qui rend compte de la diffusion dans de nombreux cas mais elle n'est pas universelle. Comme dans de nombreux cas, le modèle linéaire n'est plus valable si l'inhomogénéité est trop importante.
3) Le signe $(-)$ permet d'avoir D toujours positif.
4) Dans le cas à 3 dimensions la loi de FICK s'écrit :

$$\boxed{\vec{j}(M,t) = -D\ \overrightarrow{grad}\ n(M,t)} \qquad \text{(Loi de FICK 3 D)}$$

3 Equation de la diffusion

3.1 Diffusion sans apport de particules

Pour obtenir l'équation de diffusion, il suffit de reporter la Loi de Fick dans l'équation de continuité :

$$\frac{\partial j(x,t)}{\partial x} + \frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = 0 \text{ avec } j(x,t) = -D\frac{\partial n(x,t)}{\partial x}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x}\left(-D\frac{\partial n(x,t)}{\partial x}\right) + \frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = 0$$

En supposant que D est constant (indépendant du point où on se place) on obtient :

$$-D\left(\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2}\right) + \frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = 0$$

d'où

$$\boxed{\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2}\right)} \qquad \text{(Equation de diffusion 1D)}$$

Remarque : on constate que cette équation n'est pas invariante par renversement du temps, c'est à dire par changement de t en $(-t)$. C'est la loi de Fick qui induit cette irréversibilité en imposant que la diffusion se fasse des zones riches en particules vers les zones pauvres en particules.

Le phénomène de diffusion est fondamentalement irréversible.

3.2 Cas général

Dans le cas à 3 dimensions l'équation de diffusion s'écrit :

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

où $\Delta n(M,t)$ représente le laplacien de $n(M,t)$.
Si certaines particules apparaîssent ou disparaîssent dans le milieu on obtient :

$$\boxed{\frac{\partial n(M,t)}{\partial t} = D\,\Delta n(M,t) + \sigma} \qquad \text{(Equation de diffusion 3D)}$$

où σ est le taux de production de particules par unité de temps et par unité de volume.
Cette équation s'appelle **équation de Poisson** et lorsque σ est nul on retrouve l'**équation de Laplace**. La résolution de cette équation est un problème mathématique classique dont la solution dépend des symétries du problème et des conditions aux limites.

4 Résolution de l'équation de diffusion

4.1 Cas du régime permanent

On se place dans le cas à 1 dimension.
Dans le cas du régime permanent toutes les grandeurs sont constantes (mais pas uniformes).
L'équation de diffusion donne alors $D\left(\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2}\right) = \frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = 0$ donc $\frac{d^2 n(x)}{dx^2} = 0$.

En régime permanent la densité particulaire est donc une fonction affine de l'abscisse et le vecteur densité de particules diffusées est constant.

Exemple : Déterminer, en régime permanent, le flux de particules dans un tuyau de section S et de longueur L, lorsque les concentrations en molécules diffusantes sont constantes à l'entrée ($n = n_1$ pour $x = 0$) et à la sortie ($n = n_2 < n_1$ pour $x = L$).

En régime permanent, l'équation de diffusion donne $\frac{d^2 n(x)}{dx^2} = 0$ donc :

$$\boxed{n(x) = \frac{n_2 - n_1}{L}x + n_1}$$

Le flux de particules qui traverse le tuyau est :

$$\boxed{\phi = j\,S = -D\frac{dn(x)}{dx}S = \frac{D\,S}{L}(n_1 - n_2)}$$

4.2 Cas du régime quelconque

La résolution de l'équation de diffusion en régime quelconque est un problème difficile. Pour une étude plus précise voir le TD d'info Maple sur la résolution d'un problème analogue (équation de la chaleur).
Il est tout de même possible d'effectuer une analyse dimensionnelle pour obtenir une durée caractéristique de la diffusion.
Soit L la longueur caractéristique du problème étudié et soit τ le temps caractéristique de la diffusion. On effectue un changement de variable pour se ramener à des grandeurs sans dimension; on pose $x^* = x/L$ et $t^* = t/\tau$;
L'équation de diffusion s'écrit alors :

$$\frac{\partial n}{\partial t^*} = \frac{D\,\tau}{L^2}\frac{\partial^2 n}{\partial x^{*2}}$$

Cette nouvelle équation **adimensionnée** peut se résoudre numériquement.
On admet que pour équilibrer les variations temporelles et spatiales, on a $\frac{D\tau}{L^2} \approx 1$ (ou l'on cherche à construire une grandeur homogène à une diffusivité à partir de τ et L) ; on a alors

$$\boxed{\tau = \frac{L^2}{D}}$$

Exercice n° 02 : Ordre de grandeur
1. Evaluer τ pour la diffusion d'un gaz dans un récipient, dans une pièce.
2. Même question pour un morceau de sucre dans une tasse de café.
Commenter.

5 Analogie électrique

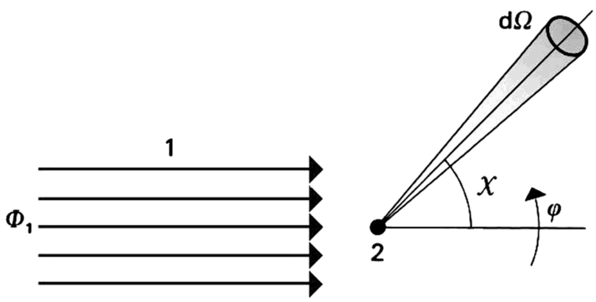
Lorsqu'un conducteur, de conductivité électrique γ, est soumis à une différence de potentiel, il est le siège d'un courant électrique dont le vecteur densité de courants électrique $\vec{j}$ est relié au champ électrique $\vec{E} = -\overrightarrow{grad}\, V$ selon la loi d'Ohm locale $\vec{j} = \gamma\vec{E} = -\gamma\, \overrightarrow{grad}\, V$.
L'intensité I qui traverse le conducteur est égale au flux du vecteur $\vec{j}$ à travers la section du conducteur et représente le flux des charges électriques.
Tout comme la loi d'Ohm, la loi de Fick est une loi "phénoménologique". Cela signifie que ce n'est pas une loi fondamentale (comme la loi de gravitation), mais une relation généralement bien vérifiée entre deux grandeurs. Ces deux lois traduisent que, dans un certain domaine d'approximation, l'effet (densité de courants ou densité de flux de particules) est proportionnel à la cause (gradient de potentiel ou de densité particulaire).
Le tableau ci-dessous résume les analogies entre les lois de Fick et d'Ohm, qui traduisent toutes les deux des phénomènes de transport de particules ou de charge. Elles correspondent à une évolution spontanée du milieu qui tend à estomper son inhomogénéité, conformément au second principe de la thermodynamique.

Loi de Fick	**Loi d'Ohm**
vecteur densité de particules $\vec{j}$	vecteur densité de courant électrique $\vec{j}$
densité particulaire n	potentiel V
coefficient de diffusion D	conductivité électrique γ
$\vec{j} = -D\, \overrightarrow{grad}\, n$	$\vec{j} = -\gamma\, \overrightarrow{grad}\, V$

6 Interprétation microscopique

6.1 Section efficace de collision

6.1.1 Définition



On considère l'expérience représentée ci-dessus, dans laquelle un faisceau de particules monocinétiques 1 vient bombarder **une** particule cible 2, et ces particules subissent, sur la cible, des collisions élastiques. Pour la commodité du raisonnement, on peut supposer que la particule 2 a une masse infinie et qu'elle est donc immobile (en fait cela revient, dans le cas général où m_2 est finie, à décrire le mouvement relatif en considérant des mobiles fictifs de masse μ).
On suppose que les particules sont réparties au hasard dans la section droite du faisceau.
Il y a une diffusion des particules dans toutes les directions et on peut mesurer le nombre de particules dN_d/dt diffusées par unité de temps dans un petit angle solide $d\Omega$ centré sur une direction repérée par les deux angles χ et φ ; on pose alors par définition :

$$\frac{dN_d}{dt} = \Phi_1 \sigma(\chi, \varphi)\, d\Omega = \Phi_1 \sigma(\chi, \varphi) \sin\chi d\chi d\varphi$$

où Φ_1 est le flux (nombre de particules, par unité de temps et par unité de surface) transporté par le faisceau incident. La quantité $\sigma(\chi,\varphi)$ a les dimensions d'une surface ; on l'appelle section efficace différentielle de collision élastique. À partir de cette grandeur, on peut définir la **section efficace totale** :

$$\sigma_T = \int_\chi \int_\varphi \sigma(\chi,\varphi) \sin\chi d\chi d\varphi$$

On appelle section efficace (totale) de collision σ le rapport entre le nombre N_d de particules diffusées par unité de temps (qui ont donc heurté la particule fixe) et le flux Φ_1 :

$$\boxed{\sigma_T = \frac{N_d}{\Phi_1}} \qquad \text{(Section efficace)}$$

Unités : σ est une surface et s'exprime en m^2 et souvent en barn : $1\text{barn} = 10^{-28}\,\text{m}^2$.

Remarques :
1) si la cible comporte N_c centres diffuseurs on aura :

$$N_d = N_c\,\Phi_1\sigma$$

2) dans le cas d'une cible de longueur L et de section utile S comportant n_c centres diffuseurs par unité de volume

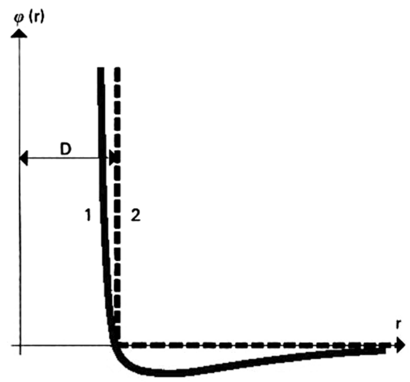
$$N_d = N_c\,\Phi_1\sigma = n_c S\,L\,\Phi_1\sigma$$

3) dans le cas précédent, la probabilité p pour qu'une particule incidente ait une collision avec une particule cible est :

$$p = \frac{N_d}{\Phi_1 S} = n_c\,L\,\sigma$$

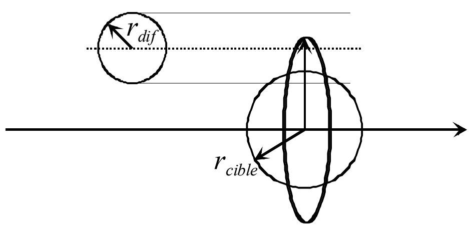
6.1.2 Modèle des sphères dures

La section efficace dépend de la nature de l'interaction entre les particules diffusantes et les particules cibles.
Il faut donc connaître la loi d'interaction $\varphi(r)$; on représente souvent les interactions entre deux atomes neutres, ou entre une particule chargée et un atome, en adoptant le modèle simplifié dit des boules de billard (ou des **sphères dures**). Dans ce modèle, on néglige complètement les interactions à grande distance et on suppose qu'une force répulsive infinie apparaît pour une certaine distance critique $r = D = r_{cible} + r_{diffusée}$.



Avec les mêmes notations qu'au paragraphe précédent, une particule mobile heurte la cible si son centre se trouve dans le cercle de rayon D : $N_d = \Phi_1\left(\pi D^2\right)$ soit

$$\boxed{\sigma_T = \pi\left(r_{cible} + r_{diffusée}\right)^2} \qquad (\sigma_T \text{ spheres dures})$$



Exercice n° 03 : Diffusion de neutrons

Un faisceau monocinétique de neutrons d'intensité I_0 (I_0 représente le nombre de neutrons traversant une section perpendiculaire au faisceau de surface unité, pendant l'unité de temps) arrive en $x = 0$ dans un milieu contenant N noyaux de bore par unité de volume. Lors de la collision entre un neutron et un noyau de bore, il se produit une réaction nucléaire au cours de laquelle le neutron est absorbé par le bore.

1) Déterminer l'intensité du faisceau de neutrons $I(x)$ en un point d'abscisse x du milieu en fonction de I_0, N et de la section efficace σ de la collision neutron-bore.

2) Calculer la proportion de neutrons absorbée par une longueur L de milieu.

Données : $\sigma = 284$ barns ; $N = 5.10^{24}\,\mathrm{m}^{-3}$; $L = 12\,\mathrm{cm}$.

6.2 Libre parcours moyen

On appelle **libre parcours moyen** la distance ℓ que parcourt en moyenne une particule mobile entre deux collisions successives.
Soit v la vitesse des particules mobiles.
D'après le paragraphe 6.1.1., la probabilité p pour qu'une particule incidente ait une collision avec une particule cible entre t et $t + L/v$ est :

$$p = \frac{N_d}{\Phi_1 S} = n_c\, L\, \sigma$$

il y aura donc, en moyenne $p/\left(L/v\right) = n_c\, v\, \sigma$ chocs par unité de temps donc une durée $\tau = 1/\left(n_c\, v\, \sigma\right)$ entre deux chocs successifs.

Le libre parcours moyen est donc :

$$\boxed{\ell = v\tau = \frac{1}{n_c \sigma}} \qquad \text{(Libre parcours moyen avec cible fixe)}$$

Dans le cas de l'autodiffusion il faut prendre la vitesse relative entre cible et particule diffusée ; on admet que :

$$\boxed{\ell = \frac{1}{\sqrt{2}\, n\, \sigma}} \qquad \text{(Libre parcours moyen dans l'autodiffusion)}$$

Exercice n° 04 : Ordres de grandeur

Calculer des ordres de grandeur de la section efficace σ , de la durée moyenne τ entre les deux collisions et du libre parcours moyen ℓ des molécules d'argon considéré comme un gaz parfait, à la pression $P = 10^5\,\mathrm{Pa}$ et à la température $T = 300\,\mathrm{K}$.

Données : rayon de l'atome d'argon : $r = 0,15\,\mathrm{nm}$; masse molaire de l'argon : $M = 39,9\,\mathrm{g.\,mol^{-1}}$; constante des gaz parfaits : $R = 8,31\,\mathrm{J.\,K^{-1}.\,mol^{-1}}$; nombre d'Avogadro : $N_A = 6,02 \times 10^{23}\,\mathrm{mol^{-1}}$.

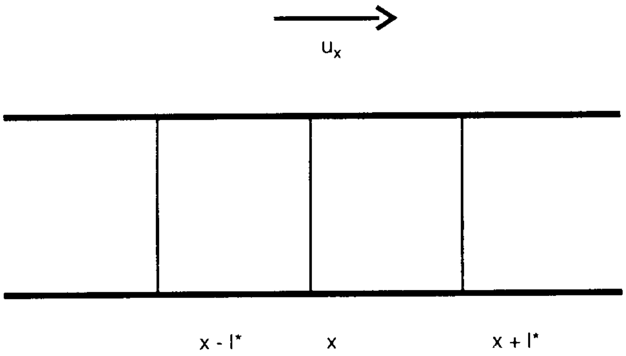
6.3 Coefficient de diffusion d'un gaz

6.3.1 Hypothèses simplificatrice

Nous étudions la diffusion unidirectionnelle dans un cylindre d'axe Ox et de section dS.
On recherche le vecteur densité de particules $\overrightarrow{j}$ diffusées pour obtenir le coefficient D ; pour cela on calcule le nombre δN de particules traversant la section d'abscisse x entre les instants t et $t + dt$; dt est une durée mésoscopique : elle est donc très grande devant la durée microscopique τ qui sépare en moyenne deux collisions successives d'une molécule (pour obtenir des comportements moyens) et elle est très inférieure à la durée caractéristique des variations des grandeurs macroscopiques telles que la densité particulaire $n(x, t)$.
Pour simplifier nous adoptons le modèle suivant :

- les vecteurs vitesses $\vec{v}$ des molécules du gaz diffusé ont tous la même norme v^*, égale à la vitesse quadratique moyenne ;
- dans tout échantillon du système, les vecteurs-vitesses $\vec{v}$ des molécules du gaz diffusé se répartissent pour un sixième des molécules dans chacune des six directions : $+\vec{u}_x$, $-\vec{u}_x$, $+\vec{u}_y$, $-\vec{u}_y$, $+\vec{u}_z$, $-\vec{u}_z$; cette hypothèse traduit de manière simplifiée l'isotropie de la distribution des vitesses ;
- les molécules du gaz diffusé ne subissent pas d'autres interactions que les chocs sur les molécules du gaz-support ; ainsi, entre deux chocs, ces molécules ont un mouvement rectiligne uniforme ; ce mouvement a lieu dans l'une des directions $+\vec{u}_x$, $-\vec{u}_x$, $+\vec{u}_y$, $-\vec{u}_y$, $+\vec{u}_z$, $-\vec{u}_z$ d'après la deuxième hypothèse ;
- les chocs ont lieu aux mêmes instants pour toutes les molécules ; si ℓ désigne le libre parcours moyen, la durée τ entre deux chocs est égale à $\tau = v^*/\ell$ (dans l'air, dans les conditions usuelles, $\ell \approx 0,15\,\mu\mathrm{m}$ $v^* \approx 500\,\mathrm{m.\,s^{-1}}$ et $\tau \approx 3.10^{-10}\,\mathrm{s}$).

6.3.2 Calcul du coefficient de diffusion



Soit t l'instant où toutes les molécules ont eu un choc ; elle ne subiront donc aucun choc entre les instants t et $t+\tau$. Seules les molécules qui ont un vecteur-vitesse selon $\vec{u}_x$ ou $-\vec{u}_x$ peuvent franchir dS et participer à la diffusion. Pendant la durée τ, elles ont une vitesse v^* et parcourent une distance $v^*\tau$ égale au libre parcours moyen ℓ, soit dans le sens de $-\vec{u}_x$, soit dans le sens de $-\vec{u}_x$.
Les molécules qui peuvent franchir dS dans le sens de $\vec{u}_x$ pendant la durée τ sont donc celles qui sont situées dans le cylindre de section dS et de hauteur $\ell = v^*\tau$, compris entre les abscisses $x-\ell$ et x et qui ont un vecteur-vitesse parallèle à $\vec{u}_x$.
En assimilant la densité moléculaire moyenne dans ce cylindre à $n(x-\ell)$, le nombre de molécules qu'il contient vaut $n(x-\ell)v^*\tau dS$. Parmi ces molécules, seule une sur six possède un vecteur vitesse parallèle à $\vec{u}_x$. Le nombre de molécules traversant dS dans le sens de $\vec{u}_x$ pendant la durée τ vaut donc

$$\delta N_{\vec{u}_x,\tau} = \frac{1}{6} n(x-\ell)v^*\tau dS$$

De même les molécules qui peuvent franchir dS dans le sens de $-\vec{u}_x$ pendant la durée τ sont celles qui sont situées dans le cylindre de section dS et de hauteur ℓ compris entre les abscisses x et $x+\ell$ et qui ont un vecteur-vitesse parallèle à $-\vec{u}_x$. En assimilant la densité moyenne dans ce cylindre à $n(x+\ell)$, il y en a

$$\delta N_{-\vec{u}_x,\tau} = \frac{1}{6} n(x+\ell)v^*\tau dS$$

En définitive, le nombre algébrique δN de molécules franchissant dS pendant la durée τ vaut

$$\delta N_\tau = \delta N_{\vec{u}_x,\tau} - \delta N_{-\vec{u}_x,\tau} = -\frac{1}{6}\left[n(x+\ell) - n(x-\ell)\right] v^*\tau dS$$

En limitant les calculs à l'ordre un en ℓ, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} n(x+\ell) - n(x-\ell) &= \left[n(x) + \ell\left(\frac{\partial n}{\partial x}\right)\right] - \left[n(x) - \ell\left(\frac{\partial n}{\partial x}\right)\right] \\ &\Rightarrow \quad \delta N_\tau = -\frac{1}{3}\ell\left(\frac{\partial n}{\partial x}\right) v^*\tau dS \end{aligned}$$

$\left(\frac{\partial n}{\partial x}\right)$doit être considéré comme indépendant du temps pendant la durée dt. Nous pouvons donc sommer aisément les nombres de particules traversant dS entre les instants t et $t+\tau$, $t+\tau$ et $t+2\tau$, $t+2\tau$ et $t+3\tau$ etc. jusqu'à atteindre l'instant $t+dt$:

$$\delta N = \sum \delta N_\tau = \sum -\frac{1}{3}\ell\left(\frac{\partial n}{\partial x}\right) v^*\tau dS = -\frac{1}{3}\ell\left(\frac{\partial n}{\partial x}\right) v^* dS \sum \tau$$

$$\Rightarrow \delta N = -\frac{1}{3}\ell\left(\frac{\partial n}{\partial x}\right) v^* dS dt \Rightarrow j = \frac{\delta N}{dSdt} = -\frac{1}{3}\ell\left(\frac{\partial n}{\partial x}\right) v^*$$

Par identification avec la loi phénoménologique de Fick $j = -D\left(\frac{\partial n}{\partial x}\right)$ nous obtenons l'expression du coefficient de diffusion

$$\boxed{D = \frac{1}{3}\ell v^*}$$

<u>*Exercice n° 03*</u> : Diffusion en présence de sources de particules

On étudie la diffusion unidirectionnelle de neutrons dans un barreau de plutonium cylindrique d'axe Ox et de section droite d'aire S, s'étendant entre les abscisses $x=0$ et $x=L$ et on note $n(M,t)$ le nombre de neutrons par unité de volume. Cette diffusion satisfait à la loi de Fick, avec un coefficient de diffusion $D = 22\,\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-1}$.
D'autre part, du fait de réaction nucléaires entre les neutrons et la matière, des neutrons sont produits : pendant une durée

dt, dans un élément de volume $d\tau(M)$, il apparaît $\delta Np = Kn(M,t)d\tau(M)dt$ neutrons, où $K = 3,5.10^4\,\mathrm{s}^{-1}$ est une constante positive homogène à l'inverse d'un temps et caractéristique des réactions nucléaires.
On admettra en première approximation que n doit s'annuler à tout instant aux extrémités du cylindre en $x = 0$ et $x = L$. En revanche on supposera que $n(x,t)$ ne s'annule pas à l'intérieur du cylindre.

1) Etablir l'équation aux dérivées partielles dont $n(x,t)$ est solution.

2) Déterminer $n(x)$ à une constante multiplicative près en régime stationnaire. Montrer que ce régime n'est possible que pour une valeur particulière L_s de L. Calculer L_s.

3.a) En régime quelconque, chercher $n(x,t)$ à une constante multiplicative près sous la forme factorisée $n(x,t) = h(x)g(t)$.

3.b) En déduire que $n(x,t)$ diverge si L est supérieur à une valeur critique L_c qu'on explicitera et qu'on calculera.

Exercice n° 04 : Solution autosimilaire de l'équation de la diffusion

Dans un cylindre de section droite d'aire S, infiniment long s'étendant de $x = -\infty$ à $x = +\infty$ et rempli d'un fluide-support, on introduit à l'instant $t = 0$, N_0 particules qu'on répartit uniformément entre les sections d'abscisse $x = \pm\varepsilon$ avec ε tendant vers zéro. On s'intéresse au phénomène de diffusion des particules. On note D le coefficient de diffusion et $n(x,t)$ la densité particulaire.

1) Rappeler l'équation pilote de la diffusion dont est solution $n(x,t)$. Formuler les conditions aux limites $n(x=-\infty,t)$ et $n(x=+\infty,t)$. On admet que la condition initiale est équivalente à

$$\int_{-\infty}^{+\infty} n\left(x, t=0\right) dx = \frac{N_0}{2}$$

Un théorème de mathématiques assure qu'il existe une unique solution $n(x,t)$ de l'équation pilote de la diffusion satisfaisant à ces conditions aux limites et à cette condition initiale.

2) On définit la nouvelle fonction $f(X,T) = pn(pX,qT)$, ce qui revient à faire une double similitude $x = pX$ et $t = qT$ sur l'espace et le temps. Montrer que pour un choix convenable de p et q à préciser, $f(X,T)$ est solution de l'équation pilote de la diffusion et satisfait aux mêmes conditions aux limites et à la même condition initiale que $n(x,t)$. En déduire que la solution $n(x,t)$ vérifie pour tout nombre q positif la propriété d'autosimilarité suivante :

$$n(x,t) = q^{1/2}n(q^{1/2}x, qt)$$

3) En remarquant qu'à un instant t donné, on peut faire le choix $q = 1/t$, montrer qu'on doit chercher $n(x,t)$ sous la forme

$$n(x,t) = \frac{g\left(u\right)}{t^{1/2}} \text{ avec } u = x^2/t$$

Déterminer la fonction inconnue $g(u)$ à une constante multiplicative A près, sachant que quelques lignes de calcul différentiel permettent d'obtenir

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{u^{1/2}}{t^{3/2}}\frac{d\left(u^{1/2}g\left(u\right)\right)}{du} \text{ et } \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = \frac{4u^{1/2}}{t^{3/2}}\frac{d\left(u^{1/2}g\left(u\right)\right)}{du}$$

Comment déterminerait-on la constante A ?