

Diffusion de particules

Notes de cours

mardi 12 septembre 2017

I- Approche microscopique du phénomène de diffusion

1. Caractéristiques du mouvement brownien



Mouvement brownien : s'y retrouver

Brown a étudié le mouvement de pollens dans l'eau, soumis aux chocs aléatoires des molécules d'eau.



Vitesse quadratique moyenne, temps de vol et libre parcours moyen : définition

En moyenne, une particule de masse m se déplace de façon rectiligne uniforme sur une longueur ℓ (le libre parcours moyen) entre deux chocs éloignés dans le temps de Δt (le temps de vol).

Sa vitesse quadratique moyenne $v_q = \frac{\ell}{\Delta t}$ est telle que l'énergie cinétique moyenne de la particule est $E_c = \frac{1}{2} m v_q^2$.

2. Modèle de la marche au hasard



Marche au hasard à une dimension *animation*

La figure 1 représente les différents chemins possibles le long d'un axe x en fonction du temps t pour une marche au hasard qui se fait en se déplaçant de Δx vers la gauche ou vers la droite tous les Δt .

Vous pouvez retrouver le schéma animé sur le site alain.lerille.free.fr.



Probabilité d'une position dans le cas de la marche au hasard à une dimension *animation*

La figure 2 représente l'évolution de la probabilité d'être en x en fonction du temps t (après n pas, donc $n\Delta t$) dans le cas de la marche au hasard qui se fait en se déplaçant de Δx vers la gauche ou vers la droite tous les Δt .

Vous pouvez retrouver le schéma animé sur le site alain.lerille.free.fr.



1 Passage d'une probabilité discrète à une densité de probabilité *exercice*

▷ Relier la probabilité $p(x_n, t_n)$ pour la particule d'être à l'abscisse x_n à la date t_n aux probabilités $p(x_{n-1}, t_{n-1})$ et $p(x_{n+1}, t_{n-1})$, où $x_n = n \Delta x$ et $t_n = n \Delta t$.

En passant à une probabilité continue, on peut écrire

$$p(x_n, t_n) \approx p(x_n, t_{n-1}) + \frac{\partial p}{\partial t} \Delta t$$

▷ Faire un tel développement limité au second ordre pour relier $p(x_{n-1}, t_{n-1})$ et $p(x_{n+1}, t_{n-1})$ à $p(x_n, t_{n-1})$.

▷ En utilisant la première relation trouvée, montrer que $p(x, t)$ vérifie une équation de diffusion dont on donnera le coefficient de diffusion D .

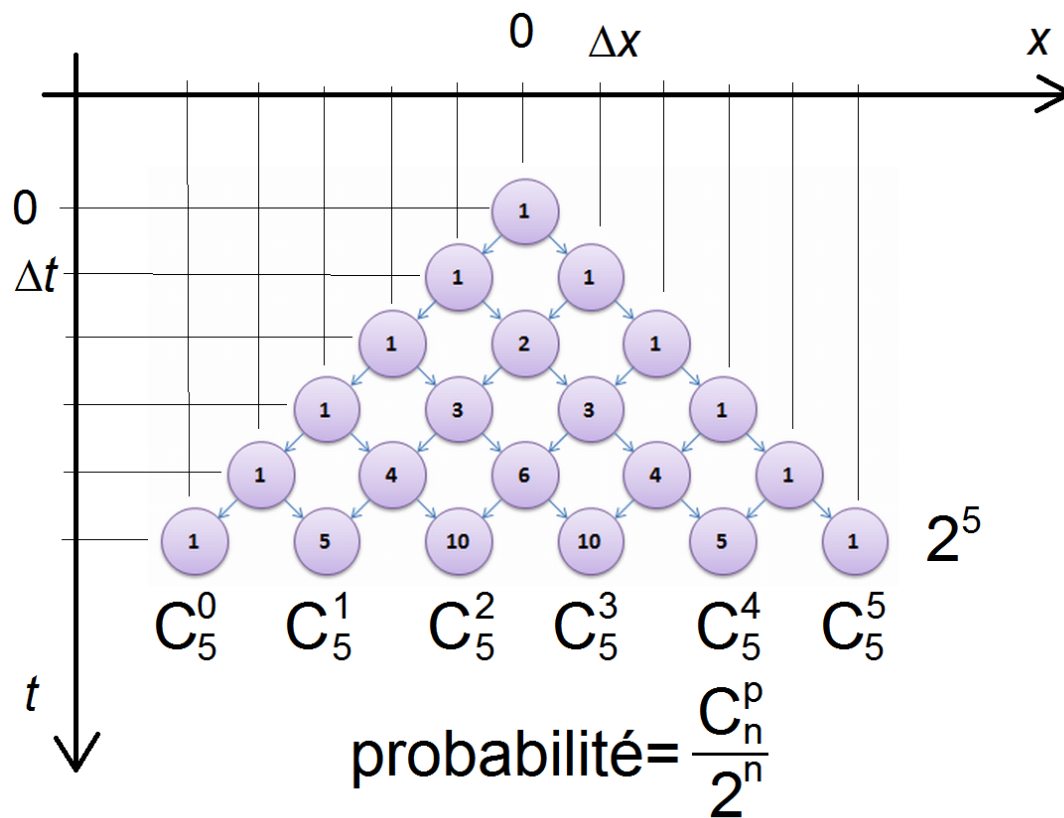


FIGURE 1 – Marche au hasard à une dimension

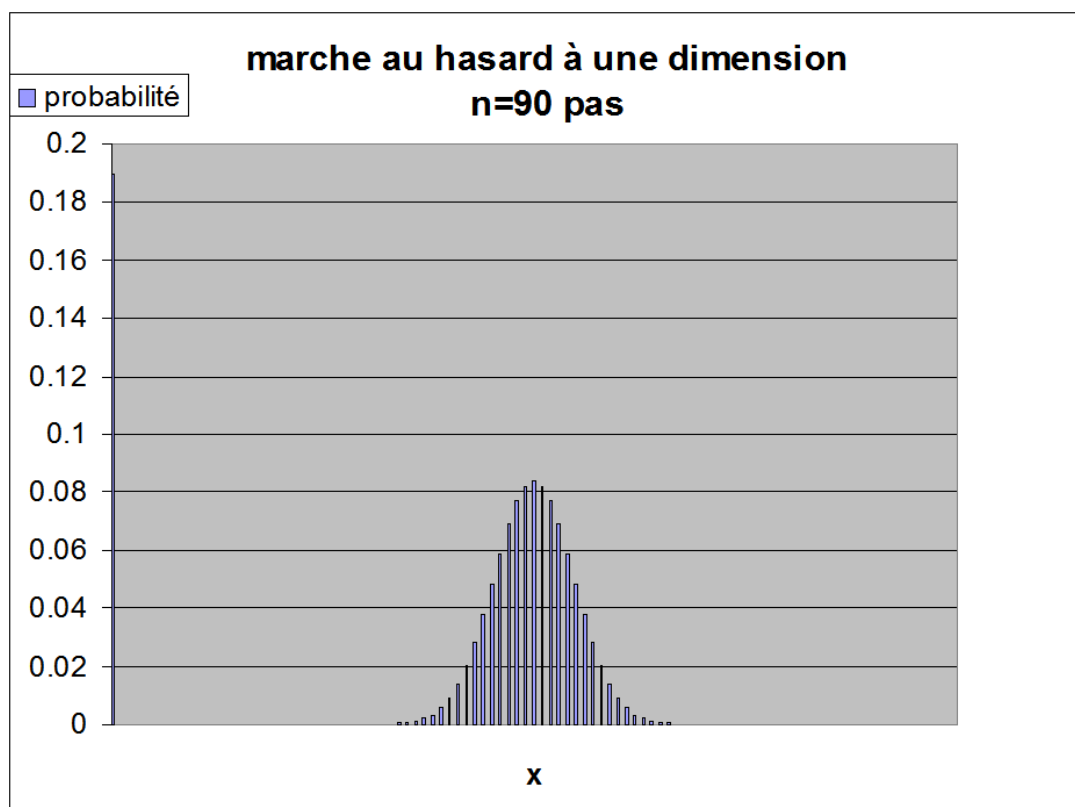


FIGURE 2 – Probabilité d'une position dans le cas de la marche au hasard à une dimension

$$\triangleright p(x_n, t_n) = \frac{1}{2}p(x_{n-1}, t_{n-1}) + \frac{1}{2}p(x_{n+1}, t_{n-1}).$$

$\triangleright$

$$\begin{cases} p(x_n, t_n) \approx p(x_n, t_{n-1}) + \frac{\partial p}{\partial t} \Delta t \\ p(x_{n-1}, t_{n-1}) \approx p(x_n, t_{n-1}) - \frac{\partial p}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \Delta x^2 \\ p(x_{n+1}, t_{n-1}) \approx p(x_n, t_{n-1}) + \frac{\partial p}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \Delta x^2 \end{cases}$$

$\triangleright$ On trouve donc

$$p(x_n, t_n) \approx p(x_n, t_{n-1}) + \frac{\partial p}{\partial t} \Delta t \approx \frac{1}{2} \left[p(x_n, t_{n-1}) - \frac{\partial p}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \Delta x^2 \right] + \frac{1}{2} \left[p(x_{n+1}, t_{n-1}) \approx p(x_n, t_{n-1}) + \frac{\partial p}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \Delta x^2 \right]$$

soit

$$\frac{\partial p}{\partial t} \Delta t \approx \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \Delta x^2$$

Ainsi, le coefficient de diffusion est $D = \frac{\Delta x^2}{2 \Delta t}$.



Probabilité continue : s'y retrouver

On admet que, si le nombre de pas est suffisamment grand, la probabilité d'être en x est gaussienne. En fait,

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

où D est le coefficient de diffusion pour que $n_0 = N_0 p(x)$ vérifie l'équation de diffusion (on peut d'ailleurs le vérifier en dérivant...)



Moyenne d'une grandeur $f(x)$ dans le cas de la marche au hasard à une dimension : s'y retrouver

$p(x) = A e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$ est la probabilité pour la particule d'être en x . La moyenne de la grandeur f est :

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) p(x) dx$$



2 Quelques moyennes dans le cas de la marche au hasard à une dimension : théorème

Le facteur A est trouvé par normalisation de la probabilité :

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} A e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx$$

Comme $p(x)$ est paire, $x p(x)$ est impaire est d'intégrale nulle :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x A e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx = 0$$

D'autre part,

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} A x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

car $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$. On remplace α par $\frac{1}{4Dt}$:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{4Dt}{2} \sqrt{4\pi Dt} = 2Dt$$

$\Rightarrow$

En moyenne, la particule ne bouge pas : $\langle x \rangle = 0$

mais la probabilité de la trouver plus loin de l'origine augmente, et on peut quantifier la distance moyenne de la particule à l'origine grâce à

$$\sqrt{\langle x^2 \rangle} \approx \sqrt{Dt}$$

3 Expression du coefficient de diffusion D en fonction du libre parcours moyen et de la vitesse quadratique moyenne : *théorème*

L'équation de diffusion nous permet de trouver :

$$\frac{1}{t} \approx \frac{D}{\langle x^2 \rangle}$$

soit

$$D \approx \frac{\langle x^2 \rangle}{t} \approx \frac{\ell^2}{t} \approx \ell v_q$$

où ℓ est le libre parcours moyen et v_q est la vitesse quadratique moyenne. $\Rightarrow$
Le coefficient de diffusion est relié à ℓ , le libre parcours moyen,
et v_q , la vitesse quadratique moyenne, par :

$$D \approx \ell v_q$$

II- Etablissement de l'équation de diffusion des particules

1. Flux de particules

Bref historique *s'y retrouver*

le physiologiste allemand Fick a étudié, le premier, la diffusion vers 1850.

Intérêt de l'étude *s'y retrouver*

la diffusion intervient dans de nombreux champs, en particulier :

- en biologie ;
- en chimie (en ce qui concerne la migration d'une espèce lors d'une chromatographie) ;
- en physique nucléaire (elle est le fondement de la séparation isotopique de l'uranium, mais est aussi présente au cœur d'un réacteur nucléaire en ce qui concerne les neutrons) ;
- en physique des matériaux (la diffusion des porteurs de charge dans une jonction $p-n$ a une forte incidence sur les propriétés électriques et optiques des diodes, diodes électroluminescentes et diodes lasers).

Densité de particules : définition

Le nombre N_0 de particules du système (ouvert) défini par le volume V , délimité par la surface fermée Σ est :

$$N_0 = \iiint_V n_0 \, d^3\tau$$

où n_0 est la densité volumique de ces particules (en m^{-3}).


Flux de particules à travers une surface orientée : définition

Le nombre dN_0 de particules qui traversent une surface orientée S pendant dt est :

$$dN_0 = \phi_N dt \text{ avec : } \phi_N = \iint_S \vec{j}_N d^2\vec{S}$$

Le flux ϕ_N s'exprime en s^{-1} .


Flux de particules à travers une surface orientée. schéma

La figure 3 représente le flux de particules à travers une surface orientée.

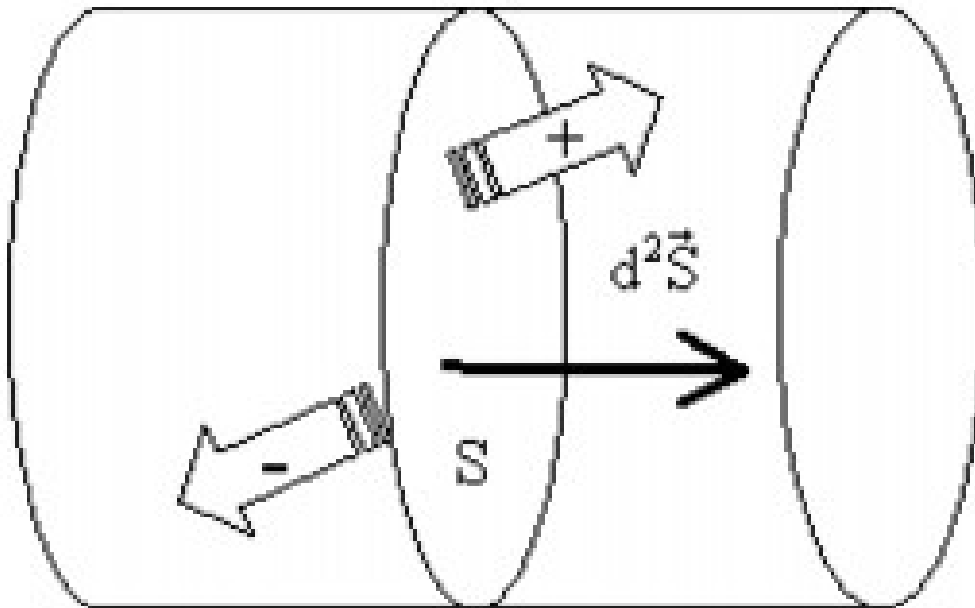


FIGURE 3 – Flux de particules à travers une surface orientée.


Densité volumique de flux de particules ayant toutes la même vitesse : s'y retrouver

$\vec{j}_N$ est le vecteur densité de courant de particules ($\|\vec{j}_N\|$ en $m^{-2} \cdot s^{-1}$). Il vaut

$$\vec{j}_N = n_0 \vec{v}$$

où $\vec{v}$ est la vitesse moyenne des particules.


Flux de particules à travers une surface fermée : définition

Un bilan pour le système délimité par la surface fermée Σ donne (s'il n'y a ni création, ni annihilation de ces particules par une réaction) :

$$\frac{dN_0}{dt} = - \oint_{\Sigma} \vec{j}_N d^2\vec{\Sigma}$$



Conventions thermodynamiques. schéma

La figure 4 représente une surface fermée. On introduit un signe moins dans les bilans car les conventions de l'analyse vectorielle et de la thermodynamique sont différentes.

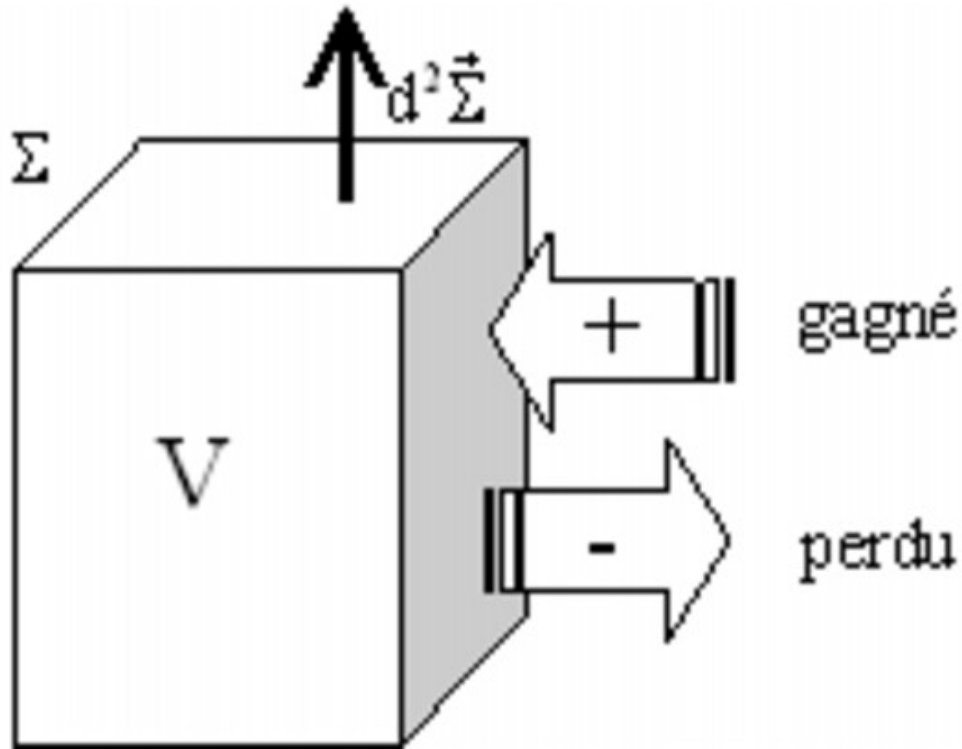


FIGURE 4 – Conventions thermodynamiques.

2. Loi de Fick



Loi de Fick : définition

On admet la loi phénoménologique suivante (loi de Fick) :

$$\vec{j}_N = -D \overrightarrow{\text{grad}}(n_0)$$

où D est le coefficient de diffusion (en $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$).



s'y retrouver

A une dimension x , la loi de Fick devient

$$\vec{j}_N = -D \frac{\partial n_0}{\partial x} \vec{u}_x$$

La loi de Fick revient à supposer une réponse ($\vec{j}_N$) proportionnelle aux causes (les inhomogénéités de n_0).

Le signe $-$ est là car les particules vont vers les zones peu denses.



Propriétés du coefficient de diffusion : *s'y retrouver*

D s'exprime en $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. On peut le supposer indépendant de n_0 .



Exemples de coefficients d'autodiffusion de gaz *tableau*

Le tableau 1 présente quelques valeurs numériques de coefficients d'autodiffusion de gaz à 20°C et $P = 1 \text{ atm}$.

espèce	D en $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Xe	44×10^{-7}
Kr	90×10^{-7}
N_2	200×10^{-7}

TABLE 1 – Quelques coefficients d'autodiffusion de gaz à 20°C et $P = 1 \text{ atm}$



Exemples de coefficients de diffusion dans l'eau *tableau*

Le tableau 2 présente quelques valeurs numériques de coefficients de diffusion moléculaire dans l'eau à 25°C .

molécule	D en $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
$NaCl$	19×10^{-10}
sucre	$5,2 \times 10^{-10}$

TABLE 2 – Quelques coefficients de diffusion moléculaire dans l'eau à 25°C



Modèle brownien : *s'y retrouver*

Un modèle brownien de l'agitation moléculaire conduit à la formule d'Einstein :

$$D = \frac{k_B T}{6\pi a \eta}$$

où a est le rayon des particules dont on observe la diffusion dans un fluide de viscosité η , à la température T .



Modèle collisionnel : *s'y retrouver*

Le coefficient de diffusion des particules du gaz dans lui-même est :

$$D = \frac{1}{3} \langle \ell \rangle \langle v \rangle$$

où le libre parcours moyen $\langle \ell \rangle$ est un ordre de grandeur de la distance parcourue entre deux chocs.



Loi de Graham : *s'y retrouver*

On admet la loi de Graham :

$$D = \frac{2 R^{\frac{3}{2}}}{3 \sqrt{\pi} \sigma} \frac{T^{\frac{3}{2}}}{P \sqrt{M}}$$

Expérimentalement, la dépendance de D en P^{-1} est bien vérifiée. Cependant on observe une variation expérimentale de D avec T^α , où $1,6 \leq \alpha \leq 2$, plutôt que $\alpha = 1,5$ comme prévu par l'expérience.



Exemples de coefficients de diffusion de gaz *tableau*

Le tableau 3 présente quelques valeurs numériques de coefficients de diffusion de gaz dans l'air à 0°C et $P = 1 \text{ atm}$. D varie comme $M^{-\frac{1}{2}}$ et donc diminue à mesure que la masse augmente.

gaz	D en $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
H_2	611×10^{-7}
CH_4	196×10^{-7}
O_2	178×10^{-7}
CO_2	138×10^{-7}

TABLE 3 – Quelques coefficients de diffusion de gaz dans l'air à 0°C et $P = 1 \text{ atm}$



Utilisation de la diffusion pour l'enrichissement de l'uranium. *photo*



La quasi-totalité des centrales nucléaires utilise un combustible « enrichi » à environ 4% en uranium 235 alors que cet élément n'est présent qu'à 0,7% dans l'uranium naturel essentiellement composé d'uranium 238. Un enrichissement à des teneurs en isotope 235 encore plus fortes est nécessaire pour la propulsion navale, ou les besoins militaires. En France, la diffusion gazeuse pour la séparation isotopique des isotopes de l'uranium a été mise en œuvre dès 1958 à Pierrelatte pour obtenir l'uranium très enrichi de la défense nationale. Depuis 1979, l'usine Georges-Besse d'EURODIF assure une production d'uranium enrichi pour des besoins civils. Cette très grosse usine est implantée sur le site de la centrale de Tricastin dans la vallée du Rhône.

L'uranium est injecté sous forme d'hexafluorure d'uranium UF_6 gazeux. Les molécules d'hexafluorure doivent traverser des membranes très fines percées de milliards de pores au cm^2 . Les molécules plus légères contenant l'isotope ^{235}U franchissent un tout petit peu plus rapidement ces barrières que l'isotope ^{238}U . Au bout de 1400 barrières à l'usine Georges-Besse, on obtient le taux d'enrichissement d'environ 4%.

4 Utilisation de la diffusion pour l'enrichissement de l'uranium. *exercice*

On donne la masse molaire du fluor : $M(F) = 19 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

▷ Calculer la variation relative des coefficients de diffusion des deux isotopes de l'uranium dans UF_6 gazeux.

$$\triangleright \frac{D(^{235}UF_6) - D(^{238}UF_6)}{D(^{238}UF_6)} = \sqrt{\frac{M(^{238}UF_6)}{M(^{235}UF_6)}} - 1 = 4,3 \times 10^{-3}.$$

3. Bilans de particules

5 Equation de diffusion sans création ni annihilation à une dimension *théorème*

⇒

L'équation de diffusion à une dimension (x) dans un milieu homogène de coefficient de diffusion D , sans création ni annihilation, est (si la densité de particule est $n_0(x, t)$) :

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2}$$

Cas où il y aurait création ou annihilation de particules *s'y retrouver*

S'il y a création et/ou annihilation, il faut rajouter (et/ou soustraire) des termes dans l'équation de diffusion.

Equation de diffusion sans création ni annihilation à trois dimensions *s'y retrouver*

L'équation de diffusion à trois dimensions dans un milieu homogène de coefficient de diffusion D , sans création ni annihilation, est

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = D \Delta n_0$$

Passer du 3D au cartésien *s'y retrouver*

On retrouve bien sûr l'équation à une dimension, en utilisant le laplacien en coordonnées cartésiennes :

$$\Delta n_0 = \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 n_0}{\partial z^2}$$

Passer du 3D au cylindrique *s'y retrouver*

On peut utiliser le laplacien en coordonnées cylindriques si $n_0(r, t)$:

$$\Delta n_0 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial n_0}{\partial r} \right)$$

Passer du 3D au sphérique *s'y retrouver*

On peut utiliser le laplacien en coordonnées sphériques si $n_0(r, t)$:

$$\Delta n_0 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial n_0}{\partial r} \right)$$

I

III- Solution de l'équation de diffusion

1. En régime permanent



Position du problème à une dimension *schéma*

La figure 5 représente une tige homogène, de section constante S , de longueur L_{AB} , fermée sur ses surfaces latérales, mise en contact avec deux milieux en x_A et en x_B , en régime permanent ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$).

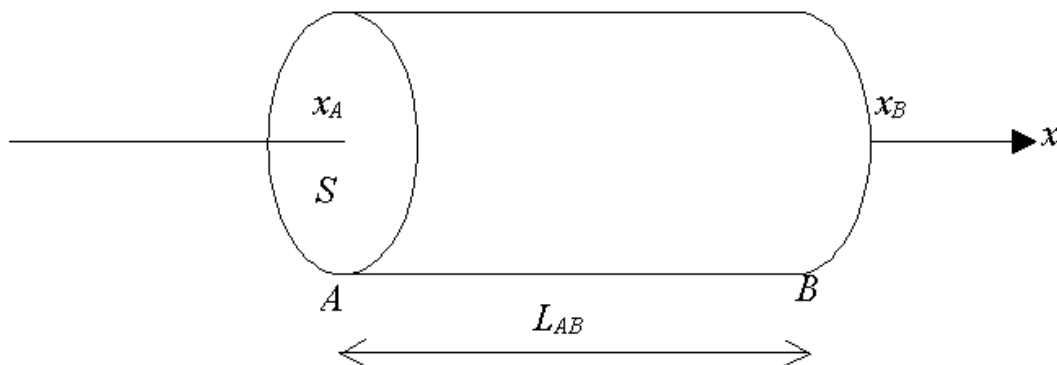


FIGURE 5 – Position du problème à une dimension



6 Solution de l'équation de diffusion en régime permanent *théorème*

⇒

On se souviendra qu'en régime permanent, dans un milieu homogène :

- la grandeur qui diffuse ($n_0(x)$) suit une loi affine,
- le flux (ϕ_N) est constant.



7 Résistance pour la diffusion des particules *théorème*

$\vec{\text{grad}}(n_0) = \frac{dn_0}{dx} \vec{u}_x = \frac{n_B - n_A}{x_B - x_A} \vec{u}_x$ et $\phi_N = \iint_S \vec{j}_N \cdot d^2S \cdot \vec{u}_x = D \frac{n_A - n_B}{L_{AB}} S$. Ainsi, on a ⇒

La différence de densité particulaire aux bornes d'un cylindre de coefficient de diffusion D , de section S et de longueur L_{AB} est (en convention récepteur) :

$$n_A - n_B = R_N \phi_N \quad \text{avec} \quad R_N = \frac{L_{AB}}{D S}$$

R_N s'exprime en $s \cdot m^{-3}$.

2. En régime quelconque



Propriétés de l'équation de diffusion *s'y retrouver*

Cette équation étant non invariante par transformation du sens d'écoulement du temps ($t \rightarrow -t$), la diffusion est irréversible.

Il y a unicité de la solution. Il existe des solutions analytiques dans des cas particuliers, mais souvent il

faut faire appel à une résolution numérique.

Les constantes d'intégration sont déterminées par les conditions aux limites (spatiales et temporelles).



Solution numérique : s'y retrouver

Il se peut que l'on ne trouve pas de solution analytique à l'équation de diffusion. On fait alors appel à une solution numérique, trouvée par ordinateur.



Ordre de grandeur : à retenir

L'équation de diffusion fait apparaître un temps caractéristique τ pour un système de taille caractéristique L :

$$\frac{1}{\tau} \sim \frac{D}{L^2}$$



Lenteur des phénomènes de diffusion : s'y retrouver

On voit donc que L varie comme $\sqrt{\tau}$: la diffusion est un phénomène lent, dans la mesure où, pour des tailles macroscopiques, les temps de diffusion sont souvent très grands.



1) Solution gaussienne de l'équation de diffusion *exercice*

- 1) Montrer que $n_0(x, t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$ vérifie l'équation de diffusion à une dimension $\frac{\partial n_0}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2}$.
- 2) Etude de la fonction.
 - 2.a) Montrer que $n_0(x, t)$ à t fixée est paire.
 - 2.b) Calculer $\Delta x(t)$ la largeur à mi-hauteur, telle que $n_0\left(\pm \frac{\Delta x(t)}{2}, t\right) = \frac{n_0(0, t)}{2}$.
 - 2.c) Tracer l'allure de $n_0(x, t)$ en fonction de x à plusieurs dates t .
- 3) Interprétation :
 - 3.a) comment varie la largeur à mi-hauteur $\Delta x(t)$ avec t ?
 - 3.b) Retrouver un équivalent de $\Delta x(t)$ en utilisant l'équation de diffusion.

Correction :

On dérive par rapport à l'espace une fois :

$$\frac{\partial n_0}{\partial x} = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{-2x}{4Dt}$$

puis une deuxième fois :

$$\frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2} = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{-2}{4Dt} \left[e^{-\frac{x^2}{4Dt}} + x \frac{-2x}{4Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \right] = \frac{N}{4Dt} \times e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \times \frac{-2}{\sqrt{4\pi Dt}} \times \left(1 - \frac{x^2}{2Dt} \right)$$

La dérivée par rapport au temps donne :

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = \frac{N}{4\pi Dt} \left(e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{-x^2}{4D} \frac{-1}{t^2} \sqrt{4\pi Dt} - e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{4\pi D}{2\sqrt{4\pi Dt}} \right) = \frac{N}{4\pi Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \left(\frac{-x^2 - \sqrt{4\pi Dt}}{2Dt} - \frac{\sqrt{4\pi Dt}}{2t} \right)$$

soit

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = \frac{N}{4\pi Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{\sqrt{4\pi Dt}}{2t} \left(-1 - \frac{-x^2}{2Dt} \right) = \frac{N}{4\pi Dt} \times e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \times \frac{-\pi D}{\sqrt{4\pi Dt}} \left(1 - \frac{x^2}{2Dt} \right)$$

On a bien

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2}$$

0.c) $n_0(x, t)$ est bien paire car $n_0(x, t) = n_0(-x, t)$.

1) La largeur à mi-hauteur est telle que

$$\frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{\Delta x^2}{16Dt}} \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{1}{2} \Leftrightarrow e^{+\frac{\Delta x^2}{16Dt}} = 2 \Leftrightarrow \Delta x^2 = 16 \ln(2) Dt$$

soit $\Delta x = 4\sqrt{\ln(2) Dt}$.

1.a) L'allure de $T(x, t)$ est une courbe en cloche (gaussienne).

2) Interprétation :

2.a) $\Delta x(t)$ varie avec t comme $\sqrt{Dt}$.

2.b) Avec l'équation de diffusion $\frac{\partial n_0}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2}$, on peut écrire :

$$\frac{1}{t} \approx D \frac{1}{\Delta x^2} \Rightarrow \Delta x \approx \sqrt{Dt}$$

qui n'est pas très loi de $\Delta x = 4\sqrt{\ln(2)}\sqrt{Dt}$. **Éléments de correction :**

On dérive par rapport à l'espace une fois :

$$\frac{\partial n_0}{\partial x} = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{-2x}{4Dt}$$

puis une deuxième fois :

$$\frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2} = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{-2}{4Dt} \left[e^{-\frac{x^2}{4Dt}} + x \frac{-2x}{4Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \right] = \frac{N}{4Dt} \times e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \times \frac{-2}{\sqrt{4\pi Dt}} \times \left(1 - \frac{x^2}{2Dt} \right)$$

La dérivée par rapport au temps donne :

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = \frac{N}{4\pi Dt} \left(e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{-x^2}{4D} \frac{-1}{t^2} \sqrt{4\pi Dt} - e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{4\pi D}{2\sqrt{4\pi Dt}} \right) = \frac{N}{4\pi Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \left(\frac{-x^2}{2Dt} \frac{-\sqrt{4\pi Dt}}{2t} - \frac{\sqrt{4\pi Dt}}{2t} \right)$$

soit

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = \frac{N}{4\pi Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{\sqrt{4\pi Dt}}{2t} \left(-1 - \frac{-x^2}{2Dt} \right) = \frac{N}{4\pi Dt} \times e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \times \frac{-\pi D}{\sqrt{4\pi Dt}} \left(1 - \frac{x^2}{2Dt} \right)$$

On a bien

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2}$$

0.c) $n_0(x, t)$ est bien paire car $n_0(x, t) = n_0(-x, t)$.

1) La largeur à mi-hauteur est telle que

$$\frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{\Delta x^2}{16Dt}} \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{1}{2} \Leftrightarrow e^{+\frac{\Delta x^2}{16Dt}} = 2 \Leftrightarrow \Delta x^2 = 16 \ln(2) Dt$$

soit $\Delta x = 4\sqrt{\ln(2) Dt}$.

1.a) L'allure de $T(x, t)$ est une courbe en cloche (gaussienne).

2) Interprétation :

2.a) $\Delta x(t)$ varie avec t comme $\sqrt{Dt}$.

2.b) Avec l'équation de diffusion $\frac{\partial n_0}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2}$, on peut écrire :

$$\frac{1}{t} \approx D \frac{1}{\Delta x^2} \Rightarrow \Delta x \approx \sqrt{Dt}$$

qui n'est pas très loi de $\Delta x = 4\sqrt{\ln(2)}\sqrt{Dt}$.



Solution gaussienne de l'équation de diffusion *animation*

La distribution de particules initialement disposées en $x = 0$ est une gaussienne dont la largeur augmente au cours du temps. C'est aussi le cas de la distribution de température pour une barre initialement chauffée en $x = 0$. On voit que le processus de diffusion est irréversible.

Vous pouvez retrouver une animation explicative sur le site alain.lerille.free.fr.

**Solution intégrale d'une gaussienne de l'équation de diffusion** *animation*

La distribution de température d'une barre dont les deux extrémités sont mises en contact avec des sources de chaleur différentes est l'intégrale d'une gaussienne (fonction *erf*). On voit que le processus de diffusion tend à rendre affine la distribution si $t \rightarrow \infty$.

Vous pouvez retrouver une animation explicative sur le site *alain.lerille.free.fr*.

Les techniques mathématiques à connaître

Calcul de l'opérateur gradient

Définition du gradient :

On posera $\boxed{df = \overrightarrow{grad}(f) \cdot \overrightarrow{d\ell}}$ donc $\boxed{\int_A^B \overrightarrow{grad}f \cdot \overrightarrow{d\ell} = f(B) - f(A)}$.

Dans le repère cartésien :

Rappelons que $df = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) dx + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) dy + \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right) dz$ et, comme en coordonnées cartésiennes $\overrightarrow{d\ell} = dx \vec{u}_x + dy \vec{u}_y + dz \vec{u}_z$, on peut écrire

$$\overrightarrow{grad}(f) = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) \vec{u}_x + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) \vec{u}_y + \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right) \vec{u}_z$$

Expression avec l'opérateur nabla : $\boxed{\overrightarrow{grad}(f) = \vec{\nabla} f}$

en posant l'opérateur nabla :

$$\vec{\nabla} = \vec{u}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{u}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{u}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

en coordonnées cartésiennes seulement!!!

Dans le repère cylindrique :

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right) dr + \left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right) d\theta + \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right) dz$$

mais cette fois

$$\overrightarrow{d\ell} = dr \vec{u}_r + r d\theta \vec{u}_\theta + dz \vec{u}_z$$

donc

$$\vec{grad}(f) = \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right) \vec{u}_r + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right) \vec{u}_\theta + \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right) \vec{u}_z$$

Dans le repère sphérique :

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right) dr + \left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right) d\theta + \left(\frac{\partial f}{\partial \varphi}\right) d\varphi$$

mais cette fois

$$\overrightarrow{d\ell} = dr \vec{u}_r + r d\theta \vec{u}_\theta + r \sin \theta d\varphi \vec{u}_\varphi$$

donc

$$\vec{grad}(f) = \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right) \vec{u}_r + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right) \vec{u}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial f}{\partial \varphi}\right) \vec{u}_\varphi$$

Expression dans un repère quelconque :

dans n'importe quel repère, on peut écrire $\boxed{\overrightarrow{grad}(f) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mu_1} \frac{\partial f}{\partial s_1} \\ \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial f}{\partial s_2} \\ \frac{1}{\mu_3} \frac{\partial f}{\partial s_3} \end{pmatrix}}$ avec

Coordonnées	$\vec{u}_1$	$\vec{u}_2$	$\vec{u}_3$	s_1	s_2	s_3	μ_1	μ_2	μ_3
cartésiennes	$\vec{u}_x$	$\vec{u}_y$	$\vec{u}_z$	x	y	z	1	1	1
cylindriques	$\vec{u}_r$	$\vec{u}_\theta$	$\vec{u}_z$	r	θ	z	1	r	1
sphériques	$\vec{u}_r$	$\vec{u}_\theta$	$\vec{u}_\varphi$	r	θ	φ	1	r	$r \sin \theta$

Technique à maîtriser

jeudi 14 septembre 2017

I- Les capacités exigibles

1. Bilans de particules



ce qu'il faut savoir faire *capacités*

Exprimer le nombre de particules traversant une surface en utilisant le vecteur $\vec{j}_N$.

Utiliser la notion de flux pour traduire un bilan global de particules.

Établir une équation traduisant un bilan local dans le seul cas d'un problème unidimensionnel en géométrie cartésienne, éventuellement en présence de sources internes.

Admettre et utiliser une généralisation en géométrie quelconque utilisant l'opérateur divergence et son expression fournie.

Utiliser la loi de Fick. Citer l'ordre de grandeur d'un coefficient de diffusion dans un gaz dans les conditions usuelles.

Utiliser la conservation du flux sous forme locale ou globale en l'absence de source interne.

Établir une équation de la diffusion dans le seul cas d'un problème unidimensionnel en géométrie cartésienne.

Utiliser une généralisation en géométrie quelconque en utilisant l'opérateur laplacien et son expression fournie.

2. Solutions de l'équation de diffusion



ce qu'il faut savoir faire *capacités*

Analyser une équation de diffusion en ordre de grandeur pour relier des échelles caractéristiques spatiale et temporelle.

3. Modèle de la marche au hasard



ce qu'il faut savoir faire *capacités*

Mettre en place un modèle probabiliste discret à une dimension de la diffusion (marche au hasard) et évaluer le coefficient de diffusion associé en fonction du libre parcours moyen et de la vitesse quadratique moyenne.

II- Méthodes

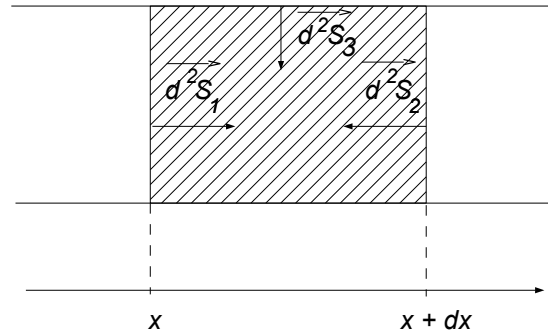
1. Bilans de particules



A) Etablissement de l'équation de diffusion des particules *méthode*

Il s'agit de faire un bilan particulaire : le nombre de particules $N = \iiint n d^3\tau$ du système défini (qui vérifie les symétries du problème) varie pendant dt de $dN = +C.dt - A.dt + dN_e$, où A est le terme d'absorption, C le terme de création, et le nombre de particules échangées dN_e est tel que $\frac{dN_e}{dt}$ est égal au flux de $\vec{j}_N$ à travers les parois du système orientées vers l'intérieur. On utilise la loi de Fick $\vec{j}_N = -D.\overrightarrow{\text{grad}}n$.

En cartésien, il faut prendre comme système un élément de volume compris entre x et $x + dx$ et bien penser à orienter les vecteurs surface vers l'intérieur du système.



2. Solutions de l'équation de diffusion



B) Ordre de grandeur et diffusion de particules *méthode*

L'équation de diffusion fait apparaître un temps caractéristique τ pour un système de taille caractéristique L :

$$\frac{1}{\tau} \sim \frac{D}{L^2}$$

3. Modèle de la marche au hasard



C) Evaluer le coefficient de diffusion à partir du modèle de la marche au hasard *méthode*

On peut relier le libre parcours moyen ℓ , le coefficient de diffusion D et le temps de vol Δt grâce à l'équation de diffusion :

$$\frac{1}{\Delta t} \approx \frac{D}{\ell^2}$$

soit

$$D \approx \frac{\ell^2}{\Delta t} = v_q \ell$$

avec v_q , la vitesse quadratique moyenne.

Les calculs dans le détail sont plus compliqués et partent du modèle discret de la marche au hasard à une dimension avant de passer à une densité de probabilité continue.

III- Exercices supplémentaires

1. Bilans de particules

1.1) Diffusion de particules à trois dimensions sans absorption ni création

Quelle est l'équation que suit n_0 , la densité volumique de particules dans un milieu homogène à trois dimensions, de coefficient de diffusion D , sans création ni annihilation ?

Conservation des particules : pour le volume V , s'il n'y a ni création ni annihilation de matière :

$$\frac{dN_0}{dt} = \iiint_V \frac{\partial n_0}{\partial t} d^3\tau = - \oint_{\Sigma} \vec{j}_N \cdot d^2\vec{\Sigma} = - \iiint_V \text{div}(\vec{j}_N) \cdot d^3\tau$$

Au niveau local, la loi de conservation des particules s'écrit donc :

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = -\text{div}(\vec{j}_N)$$

Si le système est homogène, le coefficient de diffusion D ne dépend pas de la position on a :

$$\text{div}(\vec{j}_N) = -D \cdot \text{div}(\vec{\text{grad}}(n_0)) = -D \cdot \nabla^2 n_0 = -D \cdot \Delta n_0$$

L'équation de diffusion à trois dimensions dans un milieu homogène de coefficient de diffusion D , sans création ni annihilation, est

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = D \cdot \Delta n_0$$

On retrouve bien sûr l'équation à une dimension.

1.2) Diffusion de particules à une dimension sans absorption ni création

Quelle est l'équation que suit n_0 , la densité volumique de particules dans un milieu homogène à une dimension x , de coefficient de diffusion D , sans création ni annihilation ?

On va faire un bilan pour un cylindre de section S entre les abscisses x et $x + dx$.

En x , le flux de particules est $\phi_N(x, t) = \iint_S \vec{j}_N \cdot d^2\vec{S} = -D \cdot S \cdot \left(\frac{\partial n_0}{\partial x}\right)_x$.

En $x + dx$, le flux de particules est $\phi_N(x + dx, t) = \iint_S \vec{j}_N \cdot d^2\vec{S} = -D \cdot S \cdot \left(\frac{\partial n_0}{\partial x}\right)_{x+dx}$.

Le nombre de particules est $N_0 = n(x, t) \cdot S \cdot dx$.

Le bilan est $\frac{dN_0}{dt} = \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} S \cdot dx = +\phi_N(x, t) - \phi_N(x + dx, t) = -\frac{\partial \phi_N}{\partial x} dx = D \cdot S \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2} dx$. D'où

$$\frac{\partial n_0(x, t)}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 n_0(x, t)}{\partial x^2}$$

1.3) Diffusion de particules à une dimension avec absorption et création

Quelle est l'équation que suit n_0 , la densité volumique de particules dans un milieu homogène à une dimension x , de coefficient de diffusion D , avec création et annihilation ?

On va faire un bilan pour un cylindre de section S entre les abscisses x et $x + dx$.

En x , le flux de particules est $\phi_N(x, t) = \iint_S \vec{j}_N \cdot d^2\vec{S} = -D \cdot S \cdot \left(\frac{\partial n_0}{\partial x}\right)_x$.

En $x + dx$, le flux de particules est $\phi_N(x + dx, t) = \iint_S \vec{j}_N \cdot d^2\vec{S} = -D \cdot S \cdot \left(\frac{\partial n_0}{\partial x}\right)_{x+dx}$.

Le nombre de particules est $N_0 = n(x, t) \cdot S \cdot dx$.

Le bilan est $\frac{dN_0}{dt} = \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} S \cdot dx = +\phi_N(x, t) - \phi_N(x + dx, t) + C \cdot S \cdot dx - A \cdot S \cdot dx = -\frac{\partial \phi_N}{\partial x} dx + C \cdot S \cdot dx - A \cdot S \cdot dx = D \cdot S \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2} dx + C \cdot S \cdot dx - A \cdot S \cdot dx$.

Dans un milieu homogène à une dimension x , de coefficient de diffusion D , avec création volumique C et annihilation volumique A ,

$$\frac{\partial n_0(x, t)}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 n_0(x, t)}{\partial x^2} + C - A$$

1.4) Création par réaction en chaîne dans un réacteur nucléaire

On s'intéresse aux neutrons créés par la réaction nucléaire qui a lieu dans le cœur du réacteur. Chaque neutron va casser plusieurs noyaux et ainsi donner naissance à de nouveaux neutrons.

Ecrire l'équation de diffusion pour la densité n_0 des neutrons.

Sachant que le terme de création est proportionnel à n_0 , on peut écrire $C = c \cdot n_0$, soit $\frac{\partial n_0(x, t)}{\partial t} = D \cdot \Delta n_0(x, t) + c \cdot n_0(x, t)$.

1.5) Source radioactive de particules

On s'intéresse à une source qui génère par une réaction radioactive des particules en un point O : $\left(\frac{dN}{dt}\right)_O = S_0$. On se place en régime permanent. Les particules diffusent avec un coefficient D dans le milieu environnant. Comme la diffusion est isotrope, la densité n_0 des particules ne dépend que du rayon r dans les coordonnées sphériques.

- 1) Dédurre l'équation différentielle suivie par n_0 grâce à l'expression du laplacien en sphérique :

$$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right)$$

si $f(r, t)$.

- 1) $\frac{dN}{dt} = 0 = +\phi_n(r_0) - \phi_n(r + dr)$ en orientant le flux vers les r croissants.

Comme $\phi_n(r) = -4 \cdot \pi \cdot r_0^2 \cdot D \cdot \left(\frac{\partial n_0}{\partial r}\right)_r = S_0$,

$$\phi_n(r + dr) = -4 \cdot \pi \cdot (r + dr)^2 \cdot D \cdot \left(\frac{\partial n_0}{\partial r}\right)_{r+dr} = -4 \cdot \pi \cdot r^2 \left(1 + 2 \frac{dr}{r}\right) \cdot D \cdot \left[\left(\frac{\partial n_0}{\partial r}\right)_r + \left(\frac{\partial^2 n_0}{\partial r^2}\right)_r \cdot dr\right],$$

soit au premier ordre $\phi_n(r + dr) = -\phi_n(r) - 4 \cdot \pi \cdot r_0^2 \cdot dr \cdot D \cdot \left[\left(\frac{\partial^2 n_0}{\partial r^2}\right)_r + \frac{2}{r} \left(\frac{\partial n_0}{\partial r}\right)_r\right]$,

On trouve donc $D \cdot \left[\left(\frac{\partial^2 n_0}{\partial r^2}\right)_r + \frac{2}{r} \left(\frac{\partial n_0}{\partial r}\right)_r\right] = 0$.

- 2) $\Delta f = \frac{1}{\mu_1 \cdot \mu_2 \cdot \mu_3} \left[\frac{\partial}{\partial s_1} \left(\frac{\mu_2 \cdot \mu_3}{\mu_1} \cdot \frac{\partial f}{\partial s_1} \right) + \frac{\partial}{\partial s_2} \left(\frac{\mu_3 \cdot \mu_1}{\mu_2} \cdot \frac{\partial f}{\partial s_2} \right) + \frac{\partial}{\partial s_3} \left(\frac{\mu_1 \cdot \mu_2}{\mu_3} \cdot \frac{\partial f}{\partial s_3} \right) \right]$

soit $\Delta n_0(r) = \frac{1}{r^2 \cdot \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \cdot \sin \theta \cdot \frac{\partial n_0}{\partial r} \right) \right] = \frac{1}{r^2} \left[2 \cdot r \cdot \frac{\partial n_0}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2 n_0}{\partial r^2} \right]$ ce qui redonne bien la même équation de diffusion.

1.6) Séparation isotopique

L'uranium naturel contient une faible proportion (0,72%) de l'isotope ^{235}U , qui seul intéresse l'industrie nucléaire, le reste étant de l'isotope ^{238}U . Il convient donc d'enrichir le minerai naturel en ^{235}U . On commence pour cela à préparer l'hexafluorure UF_6 , gazeux.

La diffusion est d'autant plus rapide que les molécules sont plus légères (loi de Graham) : le coefficient de diffusion dépend de la masse molaire M en $\frac{1}{\sqrt{M}}$.

On arrive à une séparation acceptable moyennant de très nombreux passages successifs du mélange gazeux à travers des cloisons poreuses.

- 1) Calculer le rapport r des vitesses de diffusion de $^{235}\text{UF}_6$ et $^{238}\text{UF}_6$, connaissant la masse molaire du fluor : $M(F) = 19 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

- 1) Les vitesses de diffusion de $^{235}\text{UF}_6$ et $^{238}\text{UF}_6$ sont dans le rapport :

$$r = \frac{v(^{235}\text{UF}_6)}{v(^{238}\text{UF}_6)} = \sqrt{\frac{238 + 6 \cdot M(F)}{235 + 6 \cdot M(F)}} = 1,00429$$

2. Solutions de l'équation de diffusion

2.7) Temps de diffusion du CO_2 dans une pièce

On donne le coefficient de diffusion du dioxyde de carbone dans l'air : $D = 0,14 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

- 1) Calculer l'ordre de grandeur de la durée t que mettrait du dioxyde de carbone à diffuser dans une salle dont le volume vaut $V = 50 \text{ m}^3$.

- 1) $L^2 = D \cdot t$, d'où :

$$t = \frac{V^{\frac{2}{3}}}{D} = 11 \text{ jours}$$

2.8) Absorption de neutrons par le bore

On considère une assemblée de neutrons dans un milieu leur faisant subir de nombreux chocs, qui leur communiquent une vitesse d'agitation moyenne constante v . On appellera $n(x, y, z, t)$ le nombre de neutrons par unité de volume.

1) Rappeler la loi de Fick qui donne le vecteur densité de courant de neutrons $\vec{j}_n$, dont le flux à travers une surface quelconque est égal au nombre de neutrons traversant cette surface par unité de temps.

Le milieu absorbe les neutrons et on supposera que chaque neutron parcourt une distance λ_a jusqu'à son absorption. Le nombre A de réactions d'absorption par seconde et par unité de volume est $A = \frac{n \cdot v}{\lambda_a}$.

2) Vérifier que cette relation est homogène.

3) Etablir l'équation aux dérivées partielles vérifiées par n .

On se place dans un milieu semi-infini situé dans le demi-espace correspondant aux valeurs positives de x (un mur). Il est limité en $x = 0$ par une source plane délivrant N_0 neutrons par unité de surface et par seconde.

4) Calculer la densité de neutrons $n(x)$ en régime permanent.

5) Déterminer l'épaisseur L du mur pour diminuer la densité de neutrons d'un facteur 1000.

1)

$$\vec{j}_n = -D \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(n)$$

où D est le coefficient de diffusion, caractéristique du milieu.

2)

$$[A] = \frac{n \cdot v}{\lambda_a} = \text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$$

3) On retranche A à l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \cdot \Delta n - A$$

4) La précédente équation devient : $D \frac{d^2 n}{dx^2} = A = \frac{n \cdot v}{\lambda_a}$.

Sa solution est de la forme : $n = A_- \cdot e^{-x \cdot \sqrt{\frac{v}{\lambda_a \cdot D}}} + A_+ \cdot e^{+x \cdot \sqrt{\frac{v}{\lambda_a \cdot D}}}$.

La condition à la limite $x \rightarrow \infty$ nous donne : $n \rightarrow 0 \Rightarrow A_+ = 0$.

La condition à la limite $x = 0$ nous donne : $j_n = N_0 = -D \cdot \frac{dn}{dx} = D \sqrt{\frac{v}{\lambda_a \cdot D}} A_-$.

Donc :

$$n = N_0 \cdot \sqrt{\frac{\lambda_a}{v \cdot D}} \cdot e^{-x \cdot \sqrt{\frac{v}{\lambda_a \cdot D}}}$$

5) On cherche L tel que $e^{-L \cdot \sqrt{\frac{v}{\lambda_a \cdot D}}} = \frac{1}{10^3}$, soit :

$$L = 3 \cdot \ln(10) \sqrt{\frac{\lambda_a \cdot D}{v}}$$

2.9) Stabilité d'un réacteur nucléaire

1) On considère une assemblée de neutrons dans un milieu leur faisant subir de nombreux chocs, qui leur communiquent une vitesse d'agitation moyenne constante v . On appellera $n(x, y, z, t)$ le nombre de neutrons par unité de volume.

Le milieu absorbe les neutrons et on supposera que chaque neutron parcourt une distance λ_a jusqu'à son absorption.

Le nombre A de réactions d'absorption par seconde et par unité de volume est $A = \frac{n \cdot v}{\lambda_a}$.

1.a) Vérifier que cette relation est homogène.

On supposera en outre que le milieu contient des sources de neutrons représentées par la création de $S(x, y, z)$ neutrons par seconde et par unité de volume.

1.b) En admettant le modèle simple suivant lequel, lors d'une absorption, il y a capture d'un neutron qui donne lieu à une fission délivrant K neutrons, exprimer $S(x, y, z)$.

2) On considère le cas d'un réacteur nucléaire en régime permanent, compris entre deux faces planes perpendiculaires à Ox aux points d'abscisse $x = \pm \frac{a}{2}$, sur lesquelles la densité de neutrons est nulle : $n(x = \pm \frac{a}{2}) = 0$. (régime stable d'un réacteur nucléaire).

2.a) Établir l'équation différentielle suivie par n dans un tel milieu.

- 2.b)** Que doit vérifier $K - 1$?
2.c) Donner la forme de la répartition correspondante de densité $n(x)$ des neutrons.
2.d) Exprimer alors v pour que le réacteur atteigne effectivement un régime stable (régime critique).

1)

1.a)

$$[A] = \frac{n.v}{\lambda_a} = \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$$

1.b)

$$S = K \frac{n.v}{\lambda_a}$$

2)

2.a) On ajoute à l'équation de diffusion S et on retranche A : $\frac{\partial n}{\partial t} = D \Delta n - A + S$.
 En régime permanent l'équation différentielle sur n devient :

$$\frac{d^2 n}{dx^2} + (K - 1) \frac{n.v}{D \cdot \lambda_a} = 0$$

2.b) On cherche une solution sinusoïdale : $n = n_0 \cdot \cos(k \cdot x + \varphi)$, avec $k^2 = \frac{(K-1) \cdot v}{D \cdot \lambda_a}$. Il faut donc que

$$K > 1$$

2.c) Pour s'annuler en $x = \pm \frac{a}{2}$, la densité de neutrons doit être :

$$n = n_0 \cdot \cos \frac{\pi \cdot x}{a}$$

2.d) Il faut que $k = \frac{\pi}{a} = \sqrt{\frac{(K-1) \cdot v}{D \cdot \lambda_a}}$ soit :

$$v = \frac{\pi^2 \lambda_a \cdot D}{a^2 (K - 1)}$$

3. Modèle de la marche au hasard

3.10) De la marche au hasard à la densité de probabilité gaussienne

1) On s'intéresse à une particule qui se déplace selon l'axe x sur une longueur ℓ vers la gauche ou vers la droite tous les Δt . On prendra n et k entiers et on appelle $p(k, n)$ la probabilité d'être en $x = k\ell$ à la date $t = n\Delta t$.

1.a) Que doit vérifier k pour que p soit non nul ?

1.b) Exprimer $p(k, n)$ en utilisant la fonction $C_n^p = \frac{n!}{p!(n-p)!}$.

2) On suppose que $n \gg 1$. On admet que dans ce cas :

$$\frac{C_n^p}{2^n} \sim \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \exp \left[\frac{-2}{n} \left(\frac{n}{2} - p \right)^2 \right]$$

2.a) Que devient $p(k, n)$?

2.b) En passant au continu, exprimer la densité de probabilité $p(x, t)$ telle que $p(x, t) \times 2\ell = p(k, n)$.

2.c) On peut montrer que $p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$. Exprimer alors le coefficient de diffusion D en fonction de ℓ et Δt .

1) Marche au hasard

1.a) Après n pas, k est compris entre $-n$ et $+n$. D'autre part, si n est impair, k aussi et si n est pair, k aussi.

1.b) Il y a 2^n chemins possibles. On voit sur le triangle de Pascal que le nombre de chemins possibles pour aller en $x = k\ell$ vaut

- C_n^p avec $p = \frac{n+k}{2}$ si n est impair (et k aussi, compris entre $-n$ et $+n$);

- C_n^p avec $p = \frac{n+k}{2}$ si n est pair (et k aussi, compris entre $-n$ et $+n$).

Dans tous les cas, on prendra donc :

$$p(k, n) = \frac{C_n^{\frac{n+k}{2}}}{2^n}$$

2) Passage au continu :

2.a) Avec la formule donnée la probabilité devient :

$$p(k, n) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \exp \left[\frac{-2}{n} \left(\frac{n}{2} - \frac{n+k}{2} \right)^2 \right] = \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \exp \left[\frac{-2}{n} \left(\frac{k}{2} \right)^2 \right] = \sqrt{\frac{2}{\pi n}} \exp \left[\frac{-k^2}{2n} \right]$$

2.b) En utilisant $k = \frac{x}{\ell}$ et $n = \frac{t}{\Delta t}$.

$$p(x, t) 2\ell \approx \sqrt{\frac{2\Delta t}{\pi t}} \exp \left[-x^2 \frac{\Delta t}{2\ell^2 t} \right]$$

On aboutit à :

$$p(x, t) = \sqrt{\frac{2\Delta t}{\pi 4\ell^2 t}} \exp \left[-x^2 \frac{\Delta t}{2\ell^2 t} \right]$$

2.c) On a bien : $p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$, si l'on pose

$$D = \frac{\ell^2}{2\Delta t}$$

3.11) Solution gaussienne de l'équation de diffusion

1) Montrer que $n_0(x, t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$ vérifie l'équation de diffusion à une dimension $\frac{\partial n_0}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2}$.

On dérive par rapport à l'espace une fois :

$$\frac{\partial n_0}{\partial x} = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{-2x}{4Dt}$$

puis une deuxième fois :

$$\frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2} = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{-2}{4Dt} \left[e^{-\frac{x^2}{4Dt}} + x \frac{-2x}{4Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \right] = \frac{N}{4Dt} \times e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \times \frac{-2}{\sqrt{4\pi Dt}} \times \left(1 - \frac{x^2}{2Dt} \right)$$

La dérivée par rapport au temps donne :

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = \frac{N}{4\pi Dt} \left(e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{-x^2}{4D} \frac{-1}{t^2} \sqrt{4\pi Dt} - e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{4\pi D}{2\sqrt{4\pi Dt}} \right) = \frac{N}{4\pi Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \left(\frac{-x^2}{2Dt} \frac{-\sqrt{4\pi Dt}}{2t} - \frac{\sqrt{4\pi Dt}}{2t} \right)$$

soit

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = \frac{N}{4\pi Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{\sqrt{4\pi Dt}}{2t} \left(-1 - \frac{-x^2}{2Dt} \right) = \frac{N}{4\pi Dt} \times e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \times \frac{-\pi D}{\sqrt{4\pi Dt}} \left(1 - \frac{x^2}{2Dt} \right)$$

On a bien

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_0}{\partial x^2}$$

3.12) Densité de probabilité gaussienne

On admet que

$$\begin{cases} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \end{cases}$$

1) Déterminer le coefficient de normalisation A de la densité de probabilité $p(x, t) = A e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$.

- 2) Calculer $\langle x \rangle$, la valeur moyenne de x .
- 3) Calculer $\langle x^2 \rangle$, la moyenne quadratique de x .

1) On pose $\alpha = \frac{1}{4Dt}$. Aussi,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} A e^{-\alpha x^2} dx = A \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1$$

donc

$$A = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}$$

2) Comme la fonction $x e^{-\alpha x^2}$ est impaire,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x A e^{-\alpha x^2} dx = 0$$

3)

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} A x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

On remplace α par $\frac{1}{4Dt}$:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \frac{4Dt}{2} \sqrt{4\pi Dt} = 2Dt$$

3.13) De la marche au hasard à la formule d'Einstein

On admet que les trois directions de l'espace étant indépendantes,

$$\langle x^2 + y^2 + z^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = 3 \langle x^2 \rangle$$

1) Le modèle de la marche au hasard à une dimension suivant x donne à la date t :

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt$$

où D est le coefficient de diffusion. En déduire $\langle x^2 + y^2 + z^2 \rangle$ pour un modèle à trois dimensions.

2) L'observation du mouvement brownien de particules de taille a à la surface d'un liquide de viscosité η à la température T aboutit à la relation :

$$\langle x^2 + y^2 \rangle = \frac{2k_B T}{3\pi\eta a} t$$

En déduire le coefficient de diffusion D de ces particules de taille a dans le volume du liquide de viscosité η à la température T .

- 1) Pour un modèle à trois dimensions : $\langle x^2 + y^2 + z^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = 3 \langle x^2 \rangle = 6Dt$.
- 2) A 2D : $\langle x^2 + y^2 \rangle = \frac{2k_B T}{3\pi\eta a} t = 2 \langle x^2 \rangle = 4Dt$, donc

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}$$

4. Techniques mathématiques - Calcul de l'opérateur gradient

4.14) Calcul d'un gradient en coordonnées cartésiennes

1) Donner l'expression de $\vec{\text{grad}} f$ pour $f(x, y, z) = \frac{x^2}{y} + z$.

- 1) On calcule les dérivées partielles de $f(x, y, z) = \frac{x^2}{y} + z$:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{2x}{y}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{-x^2}{y^2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial z} = 1$$

d'où $\overrightarrow{\text{grad}} f = \frac{2x}{y} \vec{u}_x - \frac{x^2}{y^2} \vec{u}_y + \vec{u}_z$.

4.15) Calcul d'un gradient en coordonnées cylindriques

- 1) Donner l'expression de $\overrightarrow{\text{grad}} f$ pour $f(r, \theta, z) = \frac{\cos \theta}{r^2}$.

- 1) On calcule les dérivées partielles de $f(r, \theta, z) = \frac{\cos \theta}{r^2}$:

$$\frac{\partial f}{\partial r} = -\frac{2 \cos \theta}{r^3}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} = -\frac{\sin \theta}{r^2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial z} = 0$$

et on utilise le formulaire :

$$\overrightarrow{\text{grad}}(f) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mu_1} \frac{\partial f}{\partial s_1} \\ \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial f}{\partial s_2} \\ \frac{1}{\mu_3} \frac{\partial f}{\partial s_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \\ \frac{\partial f}{\partial z} \end{pmatrix}$$

d'où $\overrightarrow{\text{grad}} f = -\frac{2 \cos \theta}{r^3} \vec{u}_r - \frac{\sin \theta}{r^3} \vec{u}_\theta$.

4.16) Calcul d'un gradient en coordonnées sphériques

- 1) Donner l'expression de $\overrightarrow{\text{grad}} f$ pour $f(r, \theta, \varphi) = \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r^2}$.

- 1) On calcule les dérivées partielles de $f(r, \theta, \varphi) = \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r^2}$:

$$\frac{\partial f}{\partial r} = -\frac{2 \cos \theta \sin \varphi}{r^3}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} = -\frac{\sin \theta \sin \varphi}{r^2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} = \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r^2}$$

et on utilise le formulaire :

$$\overrightarrow{\text{grad}}(f) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mu_1} \frac{\partial f}{\partial s_1} \\ \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial f}{\partial s_2} \\ \frac{1}{\mu_3} \frac{\partial f}{\partial s_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \\ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \end{pmatrix}$$

d'où $\overrightarrow{\text{grad}} f = -\frac{2 \cos \theta \sin \varphi}{r^3} \vec{u}_r - \frac{\sin \theta \sin \varphi}{r^3} \vec{u}_\theta + \frac{\cos \varphi}{\tan \theta r^3} \vec{u}_\varphi$.

4.17) Calcul d'un autre gradient en coordonnées sphériques

- 1) Donner l'expression de $\overrightarrow{\text{grad}} f$ pour $f(r, \theta, \varphi) = \frac{-\cos \theta}{r^2}$.

1) On calcule les dérivées partielles de $f(r, \theta, \varphi) = \frac{-\cos \theta}{r^2}$:

$$\frac{\partial f}{\partial r} = \frac{2 \cos \theta}{r^3}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} = \frac{\sin \theta}{r^2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} = 0$$

et on utilise le formulaire :

$$\overrightarrow{\text{grad}}(f) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mu_1} \frac{\partial f}{\partial s_1} \\ \frac{1}{\mu_2} \frac{\partial f}{\partial s_2} \\ \frac{1}{\mu_3} \frac{\partial f}{\partial s_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \\ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \end{pmatrix}$$

d'où $\overrightarrow{\text{grad}} f = \frac{2 \cos \theta}{r^3} \vec{u}_r + \frac{\sin \theta}{r^3} \vec{u}_\theta$.

4.18) Calcul d'une variation finie à partir d'un gradient

1) On donne $\overrightarrow{\text{grad}} f = x \vec{u}_x + y \vec{u}_y$. Calculer Δf si on part de l'origine ($x = y = 0$) pour aller en $A(1, 1)$.

1)

$$\overrightarrow{\text{grad}} f = x \vec{u}_x + y \vec{u}_y \Rightarrow \text{d}f = x \text{d}x + y \text{d}y$$

donc

$$\Delta f = \int_O^A \text{d}f = \int_O^A (x \text{d}x + y \text{d}y)$$

On pose $B(1, 0)$ et on peut écrire un chemin :

$$\Delta f = \int_O^B (x \text{d}x + y \text{d}y) + \int_B^A (x \text{d}x + y \text{d}y) = \int_O^B (x \text{d}x + 0 \text{d}y) + \int_B^A (1 \text{d}x + y \text{d}y) = \int_0^1 (x \text{d}x) + \int_0^1 (y \text{d}y) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

Travaux dirigés

vendredi 15 septembre 2017

Cet exercice sera fait en demi-groupe lors de la séance de travaux dirigés.

Arrêter une centrale nucléaire

article de Jeanne Portal

disponible à l'adresse <http://rue89.nouvelobs.com>

pour arrêter une centrale nucléaire, « ça ne semble pas aussi simple que d'appuyer sur un bouton ».

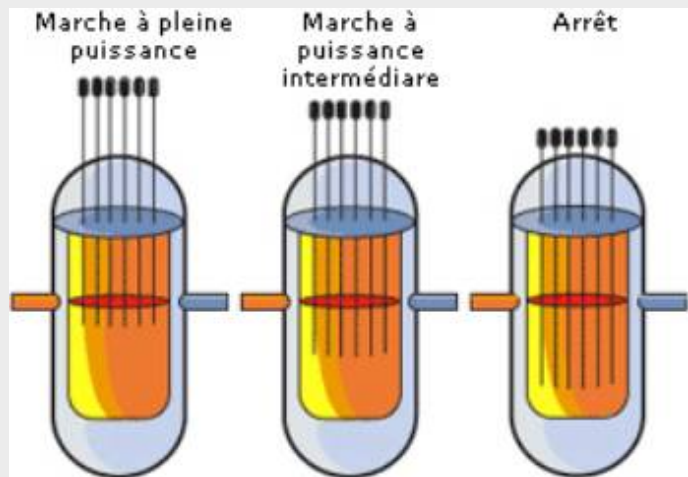
Voici comment doit se passer l'arrêt, sur le plan théorique, et pour les centrales françaises : des barres de contrôle (appelées « crayons ») situées au cœur du réacteur ont la capacité de stopper le processus de fission nucléaire.

Ces barres, composées dans un alliage très précis, ont la capacité de capter les neutrons et donc de régler la puissance en fonction de leur position dans le combustible.

Lors d'un arrêt d'urgence du réacteur, l'ensemble des barres, tenues par un électro-aimant, chute dans le cœur du réacteur en l'espace de quelques secondes.

Cette chute est provoquée par une coupure de courant, soit par intervention humaine, soit automatiquement lorsqu'une anomalie est détectée.

Dans le même temps, de l'acide borique (absorbeur de neutrons) est injecté dans l'eau où est immergé le combustible.



Enoncé

On considère le cas d'un réacteur nucléaire en régime permanent, compris entre deux faces planes perpendiculaires à Ox aux points d'abscisse $x = \pm \frac{a}{2}$.

On considère une assemblée de neutrons dans un milieu leur faisant subir de nombreux chocs, qui leur communiquent une vitesse d'agitation moyenne constante v . On appelle $n(x, t)$ le nombre de neutrons par unité de volume : $n(x = \pm \frac{a}{2}, \forall t) = 0$.

Le coefficient de diffusion des neutrons dans le milieu est noté D .

Le milieu absorbe les neutrons et on supposera que chaque neutron parcourt une distance λ_a jusqu'à son absorption : $A = \frac{n \cdot v}{\lambda_a}$ est le nombre de réactions d'absorption par seconde et par unité de volume.

Par ailleurs, $S = K \frac{n \cdot v}{\lambda_a}$ est le nombre de neutrons créés par la réaction nucléaire par seconde et par unité de volume.

1) Exprimer v pour que le réacteur atteigne un régime stable (indépendant du temps).

Correction

1) On ajoute à l'équation de diffusion S et on retranche A : $\frac{\partial n}{\partial t} = D.\Delta n - A + S$.
En régime permanent l'équation différentielle sur n devient :

$$\frac{d^2 n}{dx^2} + (K - 1) \frac{n.v}{D.\lambda_a} = 0$$

On cherche une solution sinusoïdale : $n = n_0.\cos(k.x + \varphi)$, avec $k^2 = \frac{(K-1).v}{D.\lambda_a}$. Il faut donc que

$$K > 1$$

Pour s'annuler en $x = \pm \frac{a}{2}$, la densité de neutrons doit être :

$$n = n_0.\cos \frac{\pi.x}{a}$$

Il faut que $k = \frac{\pi}{a} = \sqrt{\frac{(K-1).v}{D.\lambda_a}}$ soit :

$$v = \frac{\pi^2}{a^2} \frac{\lambda_a.D}{K - 1}$$

Devoir non surveillé

vendredi 15 septembre 2017

Le document est à lire, l'exercice est à rendre.

Albert Einstein et la théorie du mouvement brownien

B. Pourprix et J. Lannoo

Bulletin de l'Union des physiciens - pp. 1123 à 1132 (extraits)

La théorie microscopique de la diffusion

L'année 1905 est, pour EINSTEIN, une année d'intense activité. Le 17 mars et le 30 juin, il envoie à la revue « Annalen der Physik » deux articles révolutionnaires, l'un sur les quanta de lumière, l'autre sur la relativité. Entre temps, il écrit deux articles sur le mouvement brownien, Le second de ces articles, qui jouit lui aussi d'une grande célébrité, constitue l'objet de notre étude, il a pour titre : « Sur le mouvement de petites particules en suspension dans un liquide, prédit par la théorie cinétique moléculaire de la chaleur ».

En 1905, la réalité objective des molécules et des atomes n'est pas encore reconnue par tous, « J'avais pour principal objectif... de trouver des faits qui confirmeraient dans toute la mesure du possible l'existence d'atomes de taille finie déterminée... » (EINSTEIN - Notes autobiographiques). Le fait prédit par EINSTEIN est le suivant : si la théorie moléculaire de la chaleur est valable, des particules microscopiques en suspension dans un liquide exécutent des mouvements d'amplitude suffisante pour être visibles au microscope.

Manquant de données numériques, EINSTEIN n'est pas certain que ces mouvements sont identiques à ceux qui, dénommés mouvements browniens, ont été observés pour la première fois par le botaniste BROWN en 1826. De plus, il semble ignorer non seulement le travail qu'effectue SMOLUCHOWSKI à la même époque que lui, mais aussi les résultats obtenus en 1888 par le physicien français GOUY à qui l'on doit « d'avoir formulé nettement l'hypothèse qui voit dans ce mouvement continu des particules en suspension dans un fluide un écho de l'agitation thermique moléculaire. » (LANGEVIN).

Il nous semble intéressant de présenter cet article d'EINSTEIN qui nous exposera les différentes phases de la construction de sa théorie microscopique de la diffusion.

Concepts et hypothèses

- HYPOTHÈSE 1. Le mouvement de chaque particule est indépendant des mouvements des autres particules. Cette hypothèse est justifiée si la concentration des particules est suffisamment faible.

- HYPOTHÈSE 2. Les mouvements d'une même particule pendant deux intervalles de temps successifs peuvent être considérés comme indépendants à condition que ces intervalles de temps ne soient pas trop petits. En effet, si les mouvements irréguliers de la particule sont dus aux mouvements des molécules de liquide eux-mêmes irréguliers, on conçoit que la particule, après un temps τ pas trop petit, a perdu la mémoire de son mouvement antérieur.

Trois concepts sont introduits : l'intervalle de temps τ ; la variation Δ de la coordonnée x de position de la particule pendant τ ; la probabilité $\Phi(\Delta) d\Delta$ pour que la variation de position soit comprise entre les valeurs Δ et $\Delta + d\Delta$.

Ainsi EINSTEIN adopte une conception purement cinématique des mouvements individuels des particules. Ce choix des concepts nous renseigne sur l'intention de l'auteur : prouver que le processus de diffusion consiste en la superposition des déplacements irréguliers des particules individuelles.

Les concepts ne deviennent opératoires que si les hypothèses 1 et 2 sont précisées et complétées par les hypothèses suivantes :

- HYPOTHÈSE 3 ou loi de conservation du nombre de particules dans la tranche comprise entre les abscisses x et $x + dx$:

$$(8) \quad n(x, t + \tau) dx = dx \int_{\Delta=-\infty}^{+\infty} n(x - \Delta, t) \Phi(\Delta) d\Delta$$

- HYPOTHÈSE 4 sur $\Phi(\Delta)$

(9.a) $\Phi(\Delta) = \Phi(-\Delta)$

(9.b) $\Phi(\Delta) \neq 0$ seulement pour les très petites valeurs de Δ .

Ces quatre hypothèses contribuent ensemble à donner un contenu physique aux concepts de base τ , Δ et $\Phi(\Delta)$. Parmi ces hypothèses, c'est bien sûr la loi (8) qui est de loin la plus importante.

La phase déductive.

La loi (8) sert en effet de base à un formalisme mathématique déductif conduisant à l'équation de diffusion. En effectuant des développements de TAYLOR dans le premier membre (τ petit) et dans le second membre (hypothèse 9. b) on obtient :

$$(10) \quad n(x, t) + \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} \tau = n(x - \Delta, t) \int_{\Delta=-\infty}^{+\infty} \Phi(\Delta) d\Delta - \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \int_{\Delta=-\infty}^{+\infty} \Delta \Phi(\Delta) d\Delta + \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} \int_{\Delta=-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2} \Phi(\Delta) d\Delta + \dots$$

L'hypothèse (9 a) entraîne que les 2ième, 4ième, etc. termes du second membre de (10) sont nuls. La fonction $\Phi(\Delta)$ étant normalisée,

$$\int_{\Delta=-\infty}^{+\infty} \Phi(\Delta) d\Delta = 1$$

l'équation (10) se réduit à :

$$(11) \quad \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2}$$

qui est l'équation bien connue de la diffusion, où le coefficient de diffusion D a pour expression :

$$(12) \quad D = \frac{1}{\tau} \int_{\Delta=-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2} \Phi(\Delta) d\Delta$$

Ce résultat prouve que le processus de diffusion résulte de la superposition des déplacements irréguliers des particules individuelles.

EINSTEIN remarque que la résolution de l'équation (11) se trouve simplifiée si, au lieu de repérer les positions des particules par rapport au même système de coordonnées, on affecte à chaque particule son propre repère. On en a le droit, puisque le mouvement de chaque particule est, d'après l'hypothèse 1, indépendant des mouvements des autres particules. On suppose que l'origine de ce repère coïncide avec la position, à $t = 0$, du centre de gravité de la particule : chaque particule est en $x = 0$ à $t = 0$. La fonction $n(x, t)$ change alors de signification : $n(x, t) dx$ représente le nombre de particules dont la position est comprise entre x et $x + dx$ à l'instant t . Les conditions initiales ont maintenant une expression simple ;

$$(13) \quad \begin{cases} n(x, t = 0) = 0 \quad \forall x \\ \int_{-\infty}^{+\infty} n(x, t = 0) dx = N \text{ (nombre total de particules)} \end{cases}$$

Le problème mathématique ainsi posé est identique à celui que l'on rencontre dans la théorie, bien connue à l'époque, sur la diffusion de N particules sans interaction, partant du même point au même instant ; sa solution est :

$$(14) \quad n(x, t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

Le déplacement moyen des particules, à partir de la position qu'elles occupent à $t = 0$ s'en déduit :

$$(15) \quad L = \sqrt{x^2} = \sqrt{2Dt}$$

EINSTEIN prévoit que le déplacement moyen L est visible au microscope. Si la validité de la relation (15) est confirmée par l'expérience, on mesure l'intérêt de ce résultat : le mouvement brownien des particules en suspension fournit une preuve visible de la validité de la théorie moléculaire de la chaleur et de l'hypothèse moléculaire elle-même ; les particules en suspension, ayant la même énergie cinétique moyenne que les molécules, « fonctionnent comme des molécules visibles » (Jean PERRIN).

Enoncé

1) Marche au hasard

On s'intéresse à une marche au hasard qui se fait en se déplaçant de ℓ vers la gauche ou vers la droite tous les τ , de façon équiprobable.

1.a) Avec les notations d'Einstein, tracer alors l'allure de la fonction $\Phi(\Delta)$.

1.b) Les hypothèses (9.a) et (9.b) sont-elles vérifiées ?

1.c) En utilisant la relation (8) et la condition initiale (13), tracer l'allure de $n(x, t)$ à $t = \tau$, 2τ , et 3τ .

2) Solution gaussienne.

On s'intéresse à la fonction donnée par l'équation (14).

2.a) Vérifier que c'est bien une fonction solution de l'équation de diffusion (11), comme le déclare le document.

2.b) Tracer sur le même graphique l'allure de $n(x, t_1)$ et $n(x, t_2)$ où $t_2 > t_1$.

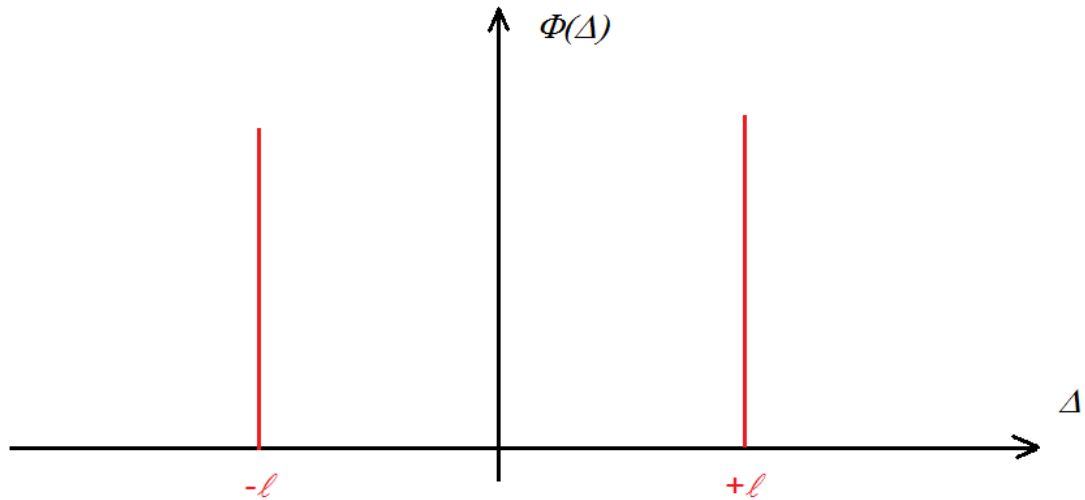
2.c) Les conditions initiales (13) semblent-elles vérifiées ?

Correction

1) Marche au hasard

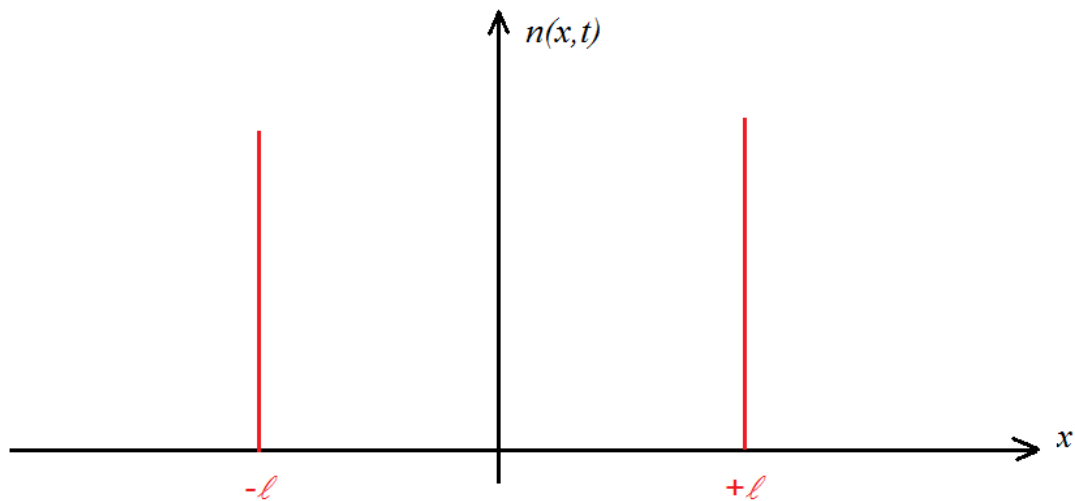
1.a) Avec les notations d'Einstein, $\Phi(\Delta) = 0$ partout, sauf en $x = \ell$ et en $x = -\ell$.

La courbe est la suivante :

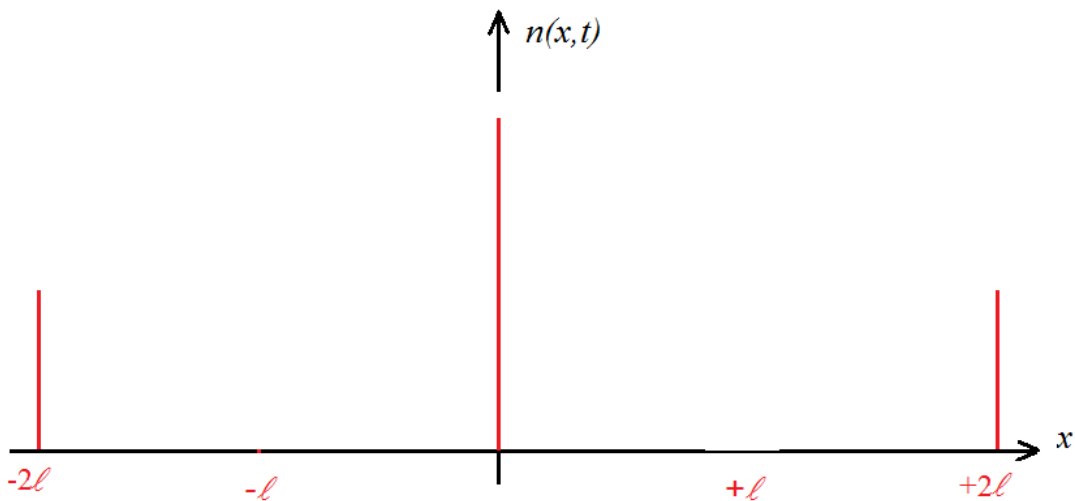


1.b) Les hypothèses (9.a) et (9.b) sont bien vérifiées.

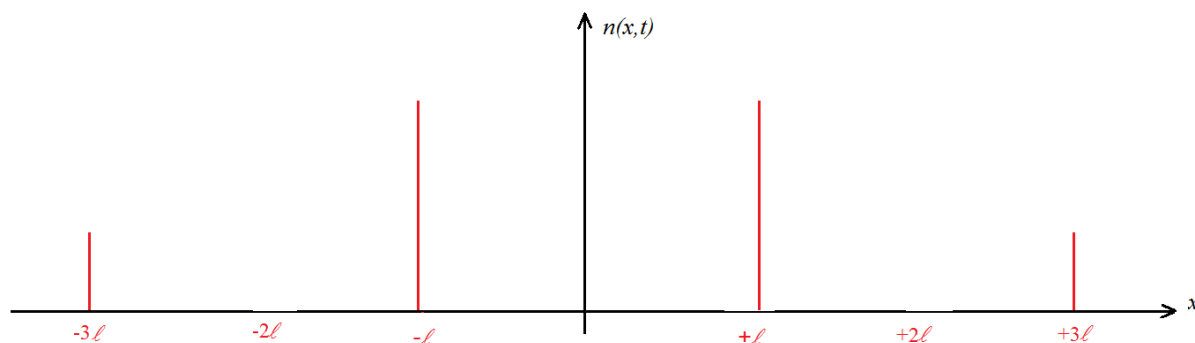
1.c) Allure de $n(x, t)$ à $t = \tau$:



à 2τ :



à 3τ :



2) Solution gaussienne.

2.a) Pour vérifier que c'est bien une fonction solution de l'équation de diffusion (11), comme le déclare le document, il faut faire les calculs pour s'en convaincre !

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{N}{\sqrt{4\pi D}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \left(\frac{-1}{2} t^{-\frac{3}{2}} + t^{-\frac{1}{2}} \frac{-x^2 - 1}{4D} \right) = \frac{N}{\sqrt{4\pi D}} \frac{1}{t} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \left(\frac{-1}{2} + \frac{x^2}{4Dt} \right)$$

et

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial x} = \frac{N}{\sqrt{4\pi D}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{-2x}{4Dt}$$

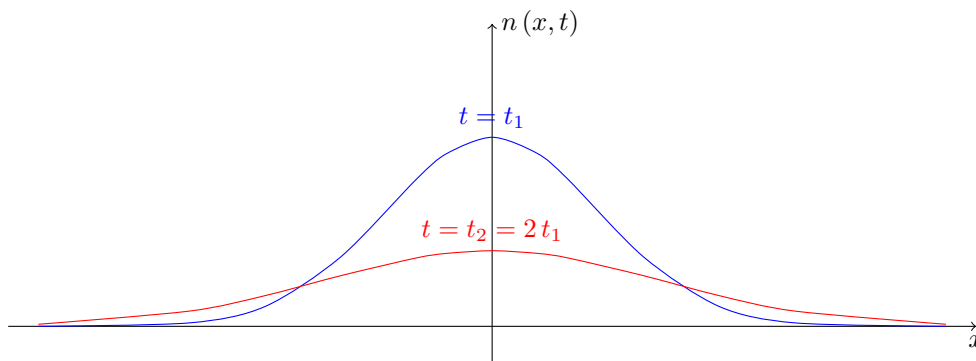
donc

$$\frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} = \frac{N}{\sqrt{4\pi D}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \left(\frac{-2}{4Dt} + \frac{-2x}{4Dt} \frac{-2x}{4Dt} \right) = \frac{N}{\sqrt{4\pi D}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \frac{1}{Dt} \left(\frac{-1}{2} + \frac{x^2}{4Dt} \right)$$

On a donc bien

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

2.b) Les allures de $n(x, t_1)$ et $n(x, t_2)$ où $t_2 > t_1$ sont les suivantes :



2.c) Les conditions initiales (13) semblent bien vérifiées car si $t \rightarrow 0$, la gaussienne tend vers un pic (dit de Dirac) centré en 0.