

# Diffusion de particules

L. Menguy, PSI\*, Lycée Montesquieu, Le Mans

Septembre 2008

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  - 1. Définitions
  - 2. Le bilan de particules
  - 3. Loi de Fick
  - 4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  - 1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  - 2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  - 1. Etude d'ordres de grandeur
  - 2. Cas du régime stationnaire
  - 3. Exemple d'un régime non stationnaire

# Les phénomènes de diffusion

## Définition

Le phénomène de diffusion est un transport de matière (donc de particules) qui tend à uniformiser la distribution, donc s'effectuant dans le sens des concentrations décroissantes.

## Conséquences

La diffusion est un phénomène irréversible

**! Les phénomènes de transport sont multiples !**

Il faut bien distinguer les phénomènes de diffusion des phénomènes de convection et de micro-convection !

# Les phénomènes de diffusion

## Définition

Le phénomène de diffusion est un transport de matière (donc de particules) qui tend à uniformiser la distribution, donc s'effectuant dans le sens des concentrations décroissantes.

## Conséquences

La diffusion est un phénomène irréversible

**! Les phénomènes de transport sont multiples !**

Il faut bien distinguer les phénomènes de diffusion des phénomènes de convection et de micro-convection !

# Les phénomènes de diffusion

## Définition

Le phénomène de diffusion est un transport de matière (donc de particules) qui tend à uniformiser la distribution, donc s'effectuant dans le sens des concentrations décroissantes.

## Conséquences

La diffusion est un phénomène irréversible

! Les phénomènes de transport sont multiples !

Il faut bien distinguer les phénomènes de diffusion des phénomènes de convection et de micro-convection !

# Les phénomènes de diffusion

## Définition

Le phénomène de diffusion est un transport de matière (donc de particules) qui tend à uniformiser la distribution, donc s'effectuant dans le sens des concentrations décroissantes.

## Conséquences

La diffusion est un phénomène irréversible

**! Les phénomènes de transport sont multiples !**

Il faut bien distinguer les phénomènes de diffusion des phénomènes de convection et de micro-convection !

# Plan du cours

## I. Les phénomènes de diffusion

## II. Bilans de particules et loi de Fick

1. Définitions
2. Le bilan de particules
3. Loi de Fick
4. Coefficient de diffusion

## III. Les équations de la diffusion

1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)

## IV. Quelques pistes de résolution...

1. Etude d'ordres de grandeur
2. Cas du régime stationnaire
3. Exemple d'un régime non stationnaire

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  - 1. Définitions
  - 2. Le bilan de particules
  - 3. Loi de Fick
  - 4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  - 1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  - 2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  - 1. Etude d'ordres de grandeur
  - 2. Cas du régime stationnaire
  - 3. Exemple d'un régime non stationnaire

## Quelques définitions

### Définitions

- La concentration particulaire  $n(x, y, z, t)$
- La densité de courant de particules  $\vec{j}(x, y, z, t)$
- Le flux de particules  $\Phi$  à travers  $S$

## Quelques définitions

### Définitions

- La concentration particulaire  $n(x, y, z, t)$
- La densité de courant de particules  $\vec{j}(x, y, z, t)$
- Le flux de particules  $\Phi$  à travers  $S$

# Quelques définitions

## Définitions

- La concentration particulaire  $n(x, y, z, t)$
- La densité de courant de particules  $\vec{j}(x, y, z, t)$
- Le flux de particules  $\Phi$  à travers  $S$

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  1. Définitions
  2. Le bilan de particules
  3. Loi de Fick
  4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  1. Etude d'ordres de grandeur
  2. Cas du régime stationnaire
  3. Exemple d'un régime non stationnaire

## Bilan de particules unidimensionnel

$$\begin{array}{l} \text{Variation du nombre} \\ \text{de particules dans } dV \end{array} = \begin{array}{l} \text{Nb de parti-} \\ \text{cules entrantes} \end{array} - \begin{array}{l} \text{Nb de parti-} \\ \text{cules sortantes} \end{array}$$
$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} dV = j(x, t) S - j(x + dx, t) S$$

Equation de conservation locale de particules (1D)

$$\frac{\partial n}{\partial t} = - \frac{\partial j}{\partial x}$$

## Bilan de particules unidimensionnel

$$\begin{array}{l} \text{Variation du nombre} \\ \text{de particules dans } dV \end{array} = \begin{array}{l} \text{Nb de parti-} \\ \text{cules entrantes} \end{array} - \begin{array}{l} \text{Nb de parti-} \\ \text{cules sortantes} \end{array}$$
$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} dV = j(x, t) S - j(x + dx, t) S$$

Equation de conservation locale de particules (1D)

$$\frac{\partial n}{\partial t} = - \frac{\partial j}{\partial x}$$

## Bilan de particules unidimensionnel

$$\begin{array}{lcl} \text{Variation du nombre} & = & \text{Nb de parti-} \\ \text{de particules dans } dV & & \text{cules entrantes} \quad - \quad \text{Nb de parti-} \\ & & \text{cules sortantes} \\ \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} dV & = & j(x, t) S \quad - \quad j(x + dx, t) S \end{array}$$

Equation de conservation locale de particules (1D)

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$$

# Bilan de particules tridimensionnel

- On applique le principe de conservation du nombre de particules sur un volume  $V$  entouré d'une surface fermée  $S$
- On applique le théorème de Green-Ostrogradski

Equation de conservation locale de particules (3D)

$$\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0$$

Sans perte ni création de matière

# Bilan de particules tridimensionnel

- On applique le principe de conservation du nombre de particules sur un volume  $V$  entouré d'une surface fermée  $S$
- On applique le théorème de Green-Ostrogradski

Equation de conservation locale de particules (3D)

$$\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0$$

Sans perte ni création de matière

# Bilan de particules tridimensionnel

- On applique le principe de conservation du nombre de particules sur un volume  $V$  entouré d'une surface fermée  $S$
- On applique le théorème de Green-Ostrogradski

## Equation de conservation locale de particules (3D)

$$\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0$$

Sans perte ni création de matière

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  - 1. Définitions
  - 2. Le bilan de particules
  - 3. Loi de Fick
  - 4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  - 1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  - 2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  - 1. Etude d'ordres de grandeur
  - 2. Cas du régime stationnaire
  - 3. Exemple d'un régime non stationnaire

# Loi de Fick

## Loi de Fick

- A une dimension :  $j = -D \frac{\partial n}{\partial x}$
- A trois dimensions :  $\vec{j} = -D \overrightarrow{\text{grad}}(n)$

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

# Loi de Fick

## Loi de Fick

- A une dimension :  $j = -D \frac{\partial n}{\partial x}$
- A trois dimensions :  $\vec{j} = -D \overrightarrow{\text{grad}}(n)$

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

# Loi de Fick

## Loi de Fick

- A une dimension :  $j = -D \frac{\partial n}{\partial x}$
- A trois dimensions :  $\vec{j} = -D \overrightarrow{\text{grad}}(n)$

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

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  1. Définitions
  2. Le bilan de particules
  3. Loi de Fick
  4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  1. Etude d'ordres de grandeur
  2. Cas du régime stationnaire
  3. Exemple d'un régime non stationnaire

## Exemples de coefficients de diffusion

- Coefficients de diffusion (ou autodiffusion) de gaz sous une atmosphère :

	$T$ (K)	$D$ ( $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ )
$\text{H}_2$ dans $\text{H}_2$	273	$12,85 \cdot 10^{-5}$
$\text{H}_2$ dans l'air	273	$6,11 \cdot 10^{-5}$
$\text{H}_2\text{O}$ dans l'air	273	$2,19 \cdot 10^{-5}$
$\text{O}_2$ dans l'air	273	$1,78 \cdot 10^{-5}$

## Exemples de coefficients de diffusion

- Coefficients de diffusion dans les liquides :

	$T$ (K)	$D$ ( $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ )
NaCl dans l'eau	298	$1,9 \cdot 10^{-9}$
le sucre dans l'eau	298	$0,52 \cdot 10^{-9}$

- Coefficients de diffusion solide-solide :  
Al dans Cu (à 298 K) :  $1,30 \cdot 10^{-30} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

## Exemples de coefficients de diffusion

- Coefficients de diffusion dans les liquides :

	$T$ (K)	$D$ ( $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ )
NaCl dans l'eau	298	$1,9 \cdot 10^{-9}$
le sucre dans l'eau	298	$0,52 \cdot 10^{-9}$

- Coefficients de diffusion solide-solide :  
Al dans Cu (à 298 K) :  $1,30 \cdot 10^{-30} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  - 1. Définitions
  - 2. Le bilan de particules
  - 3. Loi de Fick
  - 4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  - 1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  - 2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  - 1. Etude d'ordres de grandeur
  - 2. Cas du régime stationnaire
  - 3. Exemple d'un régime non stationnaire

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  - 1. Définitions
  - 2. Le bilan de particules
  - 3. Loi de Fick
  - 4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  - 1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  - 2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  - 1. Etude d'ordres de grandeur
  - 2. Cas du régime stationnaire
  - 3. Exemple d'un régime non stationnaire

# L'équation de diffusion unidimensionnelle

- En combinant :

- La conservation de particules :  $\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$

- La loi de Fick :  $j = -D \frac{\partial n}{\partial x}$

- On aboutit à :

Equation de diffusion 1D

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

- Commentaires

# L'équation de diffusion unidimensionnelle

- En combinant :

- La conservation de particules :  $\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$

- La loi de Fick :  $j = -D \frac{\partial n}{\partial x}$

- On aboutit à :

## Equation de diffusion 1D

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

- Commentaires

# L'équation de diffusion unidimensionnelle

- En combinant :

- La conservation de particules :  $\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$

- La loi de Fick :  $j = -D \frac{\partial n}{\partial x}$

- On aboutit à :

## Equation de diffusion 1D

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

- Commentaires

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  - 1. Définitions
  - 2. Le bilan de particules
  - 3. Loi de Fick
  - 4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  - 1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  - 2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  - 1. Etude d'ordres de grandeur
  - 2. Cas du régime stationnaire
  - 3. Exemple d'un régime non stationnaire

# L'équation de diffusion tridimensionnelle

- En combinant :

- La conservation de particules :  $\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0$
- La loi de Fick :  $\vec{j} = -D \operatorname{grad}(n)$

- On aboutit à :

Equation de diffusion 3D

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

- Commentaires

# L'équation de diffusion tridimensionnelle

- En combinant :

- La conservation de particules :  $\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0$
- La loi de Fick :  $\vec{j} = -D \operatorname{grad}(n)$

- On aboutit à :

## Equation de diffusion 3D

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

- Commentaires

# L'équation de diffusion tridimensionnelle

- En combinant :

- La conservation de particules :  $\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0$
- La loi de Fick :  $\vec{j} = -D \operatorname{grad}(n)$

- On aboutit à :

## Equation de diffusion 3D

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

- Commentaires

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  - 1. Définitions
  - 2. Le bilan de particules
  - 3. Loi de Fick
  - 4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  - 1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  - 2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  - 1. Etude d'ordres de grandeur
  - 2. Cas du régime stationnaire
  - 3. Exemple d'un régime non stationnaire

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  - 1. Définitions
  - 2. Le bilan de particules
  - 3. Loi de Fick
  - 4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  - 1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  - 2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  - 1. Etude d'ordres de grandeur
  - 2. Cas du régime stationnaire
  - 3. Exemple d'un régime non stationnaire

## Ordres de grandeurs

- Basé sur une analyse dimensionnelle
- Aboutit à :

$$\tau \approx \frac{l^2}{D}$$

- Exemple : grenadine dans l'eau sur  $l \approx 10$  cm

$$\tau \approx \frac{0,1^2}{10^{-9}} \approx 10^7 \text{ s} \approx 100 \text{ jours} \quad !$$

## Ordres de grandeurs

- Basé sur une analyse dimensionnelle
- Aboutit à :

$$\tau \approx \frac{l^2}{D}$$

- Exemple : grenadine dans l'eau sur  $l \approx 10$  cm

$$\tau \approx \frac{0,1^2}{10^{-9}} \approx 10^7 \text{ s} \approx 100 \text{ jours} \quad !$$

## Ordres de grandeurs

- Basé sur une analyse dimensionnelle
- Aboutit à :

$$\tau \approx \frac{l^2}{D}$$

- Exemple : grenadine dans l'eau sur  $l \approx 10$  cm

$$\tau \approx \frac{0,1^2}{10^{-9}} \approx 10^7 \text{ s} \approx 100 \text{ jours} \quad !$$

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  - 1. Définitions
  - 2. Le bilan de particules
  - 3. Loi de Fick
  - 4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  - 1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  - 2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  - 1. Etude d'ordres de grandeur
  - 2. Cas du régime stationnaire
  - 3. Exemple d'un régime non stationnaire

## Le régime stationnaire

- Régime stationnaire = pas d'évolution temporelle :  $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$
- A une dimension, la concentration varie linéairement
- Exemples

# Le régime stationnaire

- Régime stationnaire = pas d'évolution temporelle :  $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$
- A une dimension, la concentration varie linéairement
- Exemples

## Le régime stationnaire

- Régime stationnaire = pas d'évolution temporelle :  $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$
- A une dimension, la concentration varie linéairement
- Exemples

# Plan du cours

- I. Les phénomènes de diffusion
- II. Bilans de particules et loi de Fick
  - 1. Définitions
  - 2. Le bilan de particules
  - 3. Loi de Fick
  - 4. Coefficient de diffusion
- III. Les équations de la diffusion
  - 1. Equation de diffusion unidimensionnelle (1D)
  - 2. Equation de diffusion tridimensionnelle (3D)
- IV. Quelques pistes de résolution...
  - 1. Etude d'ordres de grandeur
  - 2. Cas du régime stationnaire
  - 3. Exemple d'un régime non stationnaire

## Exemple : le tube de section $S$ (unidimensionnel)

- A  $t = 0$ , on place  $N_0$  particules en  $x = 0$  (problème 1D)

- Solution :  $n(x, t) = \frac{N_0}{S(4\pi Dt)^{1/2}} \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right)$

- La solution doit vérifier :

- L'équation de diffusion
- Les conditions aux limites
- Les conditions initiales
- La conservation totale des particules (condition redondante) :

$$N_0 = N_{totale} = \int_{-\infty}^{+\infty} n(x, t) S dx$$

## Exemple : le tube de section $S$ (unidimensionnel)

- A  $t = 0$ , on place  $N_0$  particules en  $x = 0$  (problème 1D)

- Solution :  $n(x, t) = \frac{N_0}{S(4\pi Dt)^{1/2}} \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right)$

- La solution doit vérifier :

- L'équation de diffusion
- Les conditions aux limites
- Les conditions initiales
- La conservation totale des particules (condition redondante) :

$$N_0 = N_{totale} = \int_{-\infty}^{+\infty} n(x, t) S dx$$

## Exemple : le tube de section $S$ (unidimensionnel)

- A  $t = 0$ , on place  $N_0$  particules en  $x = 0$  (problème 1D)

- Solution :  $n(x, t) = \frac{N_0}{S(4\pi Dt)^{1/2}} \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right)$

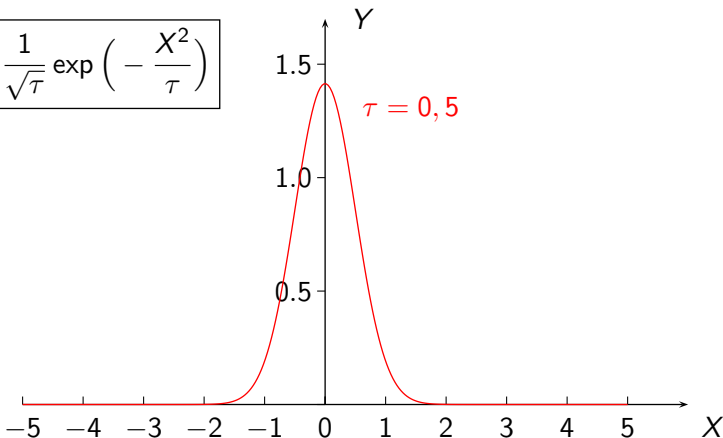
- La solution doit vérifier :

- L'équation de diffusion
- Les conditions aux limites
- Les conditions initiales
- La conservation totale des particules (condition redondante) :

$$N_0 = N_{totale} = \int_{-\infty}^{+\infty} n(x, t) S dx$$

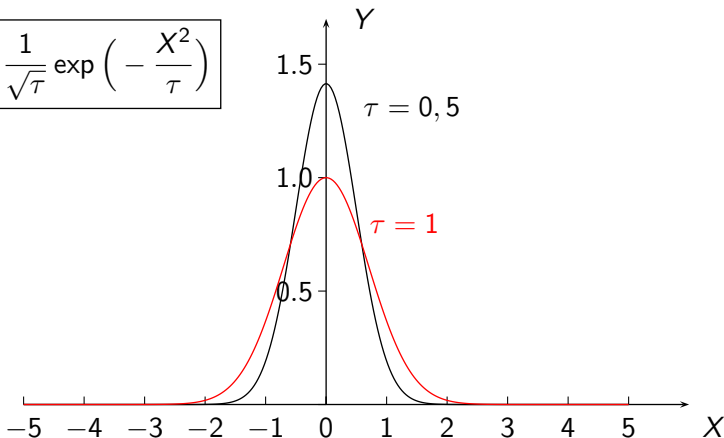
## Tracé de la solution

$$Y(X, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{X^2}{\tau}\right)$$



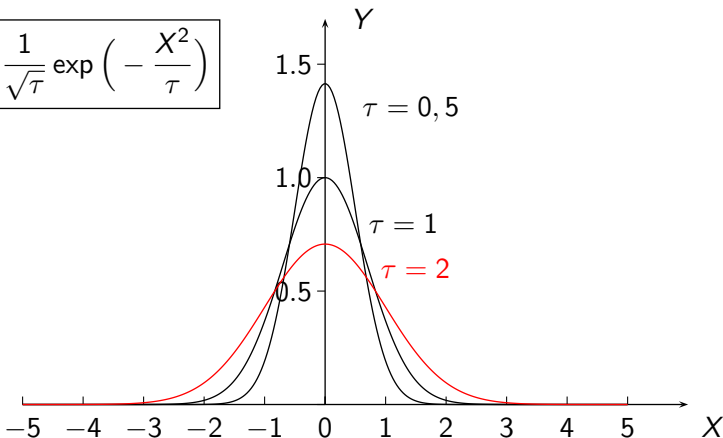
## Tracé de la solution

$$Y(X, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{X^2}{\tau}\right)$$



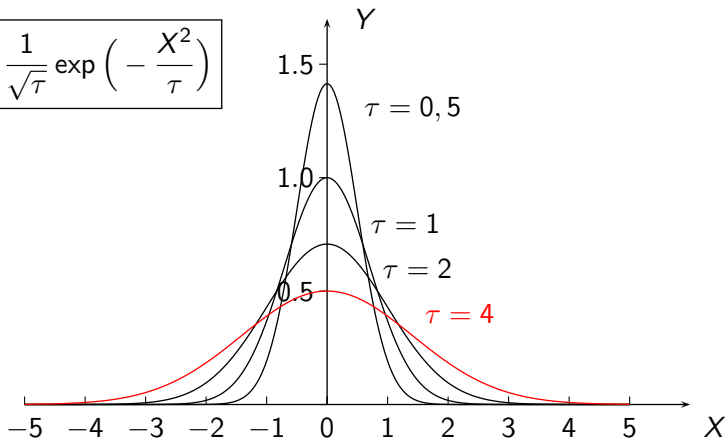
## Tracé de la solution

$$Y(X, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{X^2}{\tau}\right)$$



## Tracé de la solution

$$Y(X, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{X^2}{\tau}\right)$$



## Tracé de la solution

$$Y(X, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{X^2}{\tau}\right)$$

