Équation de diffusion

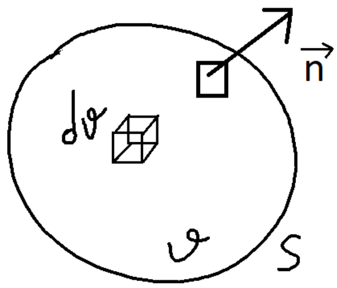
Rémi MEVAERE

4 décembre 2017

On souhaite dans cet article résoudre le cas classique de la diffusion de particules. On utilisera pour résoudre l'équation aux dérivées partielles la transformée de Fourier. Le document s'inspire franchement du **Perez** de *Thermodynamique*[1].

Étape 1 : établir l'équation de diffusion

FIGURE 1 – Les particules sont contenues dans un volume V délimité par une surface S



On se place dans le cas conservatif ou il n'y a pas de création ou de destruction de particules dans l'espace considéré. De sorte que la variation du nombre de particules ΔN ne dépend que des échanges avec l'extérieur, on pose N^r le nombre de particules échangées :

$$\Delta N = N^r \tag{1}$$

Pour établir l'équation de diffusion, écrivons le bilan entre deux instants proches t et $t + dt$:

$$dN = \delta N^r \tag{2}$$

On remarquera à ce titre que δN^r est une forme différentielle, c'est à dire qu'elle n'est pas *à priori* la différentielle d'une fonction. Ici δN^r sera pour nous le nombre de particules qui traversent une surface infiniment petite dS caractérisée par une normale $\mathbf{n}$.

δN^r correspond donc au *nombre de particules* qui traverserons cette surface. En fait, il s'agit de toutes les particules contenues dans le cylindre (Fig 2) de base dS et de hauteur $\mathbf{v}dt$.

$$\delta N^r = n_v(\mathbf{r}, t).\mathbf{n}.\mathbf{v}.dS.dt \tag{3}$$

Définissons le flux $d\phi$ comme le nombre de particules qui traversent la surface pendant dt.

$$d\phi = \frac{\delta N^r}{dt} = n_v.\mathbf{v}.\mathbf{n}.dS \tag{4}$$

$$d\phi = \mathbf{J_n}.\mathbf{n}.dS \tag{5}$$

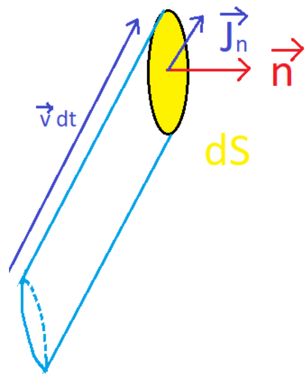
Le flux sera donc en intégrant sur une surface S :

$$\phi = \int_S \mathbf{J_n}.\mathbf{n}.dS \tag{6}$$

Reprenons le bilan (eq 2) :

$$dN = \delta N^r \tag{7}$$

FIGURE 2 – Cylindre de base dS et de hauteur $\mathbf{v}dt$



On note que si les particules se déplacent dans le sens de $\mathbf{n}$ elles sortent du volume étudié et donc doivent être comptées négativement.

$$d\int_V n_s.dV = dt\int_S \mathbf{J_n}.-\mathbf{n}.dS \tag{8}$$

Le théorème de flux-divergence (Ostrogradsky) donne :

$$d\int_V n_s.dV = -dt\int_V div(\mathbf{J_n})dV \tag{9}$$

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} = -div(\mathbf{J_n}) \tag{10}$$

On utilise les dérivées partielles car $n_v(\mathbf{r}, t)$ dépend de l'espace $\mathbf{r}$ et du temps t. Pas question ici d'utiliser les d droits.

Pour faciliter la résolution on travaillera dorénavant uniquement selon une dimension ici x.

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} = -\frac{\partial J_{n,x}}{\partial x} \tag{11}$$

On rappelle la loi *phénoménologique* de **Fick** :

$$\mathbf{J_n} = -D.\mathbf{grad}n_v \tag{12}$$

Ce qui nous permet d'obtenir l'équation de diffusion suivante :

$$\boxed{\frac{\partial n_v}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n_v}{\partial x^2}} \tag{13}$$

Étape 2 : Résoudre l'équation aux dérivées partielles

Avant de résoudre cette EDP il est nécessaire de mathématiser les conditions limites de notre problème.

Condition 1 : La totalité des particules se trouvent à $t = 0$ à l'origine ($x = 0$).

$$n_v(x, 0) = \delta(x) \tag{14}$$

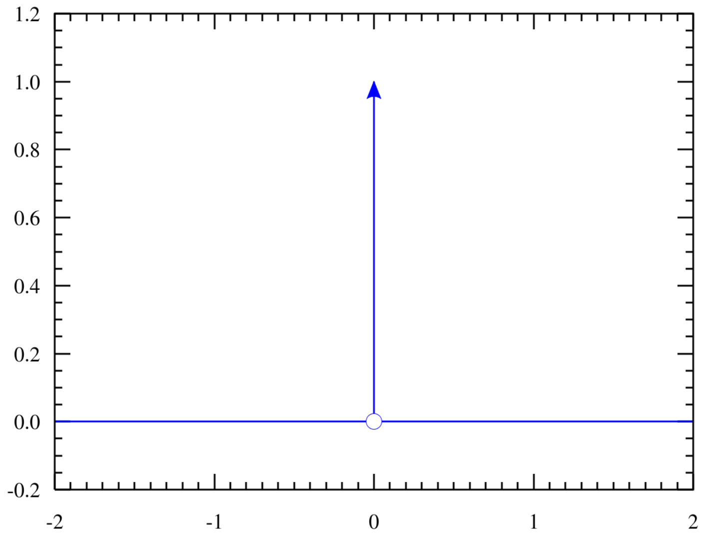
δ correspond à l'impulsion de **Dirac**(Fig 3), c'est une distribution.

Condition 2 : Les particules sont absentes à $\pm\infty$

$$\lim_{x\to\pm\infty} n_v(x, t) = 0 \tag{15}$$

La transformation de **Fourier** donne la transformée de Fourier :

Figure 3 – Représentation de l'impulsion de Dirac



$$\widehat{n_v}(u,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} n_v(x,t) exp(-i2\pi ux)dx \tag{16}$$

Les rôles de $\widehat{n_v}(u,t)$ et $n_v(x,t)$ sont réciproques :

$$n_v(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{n_v}(u,t) exp(+i2\pi ux)du \tag{17}$$

Reprenons la **condition 1** :

$$n_v(u,0) = TF\{n_v(x,0)\} = TF\{\delta x\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-0) exp(-i2\pi ux)dx = exp(0) = 1 \tag{18}$$

Nous pouvons maintenant substituer $n_v(x,t)$ dans l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} - D\frac{\partial^2 n_v}{\partial x^2} = 0 \tag{19}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{n_v}(u,t) exp(+i2\pi ux)du\right) - D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{n_v}(u,t) exp(+i2\pi ux)du\right) = 0 \tag{20}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} exp(+i2\pi ux)\left[\frac{\partial n_v\widehat{(u,t)}}{\partial t} + 4\pi^2 u^2 D n_v\widehat{(u,t)}\right]dx = 0 \tag{21}$$

$$\frac{dn_v\widehat{(u,t)}}{n_v\widehat{(u,t)}} = -4\pi^2 u^2 D dt \tag{22}$$

On résout l'équation différentielle

$$n_v\widehat{(u,t)} = n_v\widehat{(u,0)}.exp(-4\pi^2 u^2 Dt) = exp(-4\pi^2 u^2 Dt) \tag{23}$$

Puis on effectue la transformée de **Fourier** inverse pour retrouver $n_v(x,t)$:

$$n_v(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} exp(-4\pi^2 u^2 Dt) exp(+i2\pi ux)du = \int_{-\infty}^{+\infty} exp(-4\pi^2 u^2 Dt + i2\pi ux)du \tag{24}$$

$$n_v(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} exp(-4\pi^2 u^2 Dt + i2\pi ux)du \tag{25}$$

Le premier changement de variable $v = 2\pi u$ donne :

$$n_v(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dv}{2\pi} exp(-Dtv^2 + ivx) \tag{26}$$

$$n_v(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dv}{2\pi} exp\left[-\frac{v^2D^2t^2 - ivxDt}{Dt}\right] = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dv}{2\pi} exp\left[-\frac{v^2D^2t^2 - ivxDt - x^2/4}{Dt}\right] exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right) \tag{27}$$

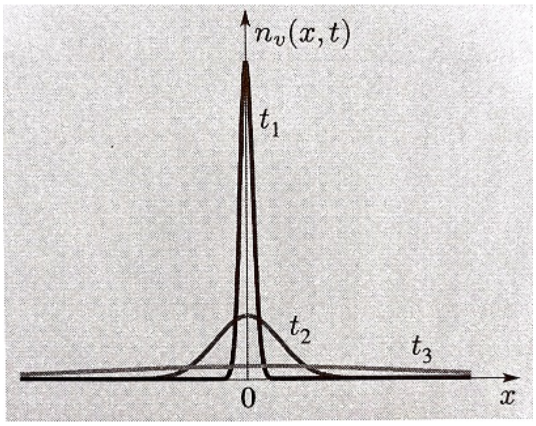
$$n_v(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dv}{2\pi} exp\left[-\frac{(vDt - ix/2)^2}{Dt}\right] exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right) \tag{28}$$

Le second changement de variable $z = vDt - ix/2$ donne :

$$n_v(x,t) = exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{2\pi Dt} exp\left[-\frac{z^2}{Dt}\right] = exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right)\left(\frac{1}{2\pi Dt}\right)(\pi Dt)^{1/2} \tag{29}$$

$$\boxed{n_v(x,t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{1/2}} exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right)} \tag{30}$$

Figure 4 – Merci à l'ouvrage de Mr PEREZ [1] pour le graphique



Ci-dessus est représentée la fonction $n_v(x,t)$ à trois dates différentes $t_1 < t_2 < t_3$. Sans surprise les particules qui au début était en $(x = 0)$ diffusent et la distribution s'élargit.

La largeur a mi-hauteur vaut :

$$LMH = 2\sqrt{2ln(2)}\sigma = 4\sqrt{ln(2)Dt} \tag{31}$$

Références

[1] José philippe PEREZ. *Thermodynamique - Fondements et Applications.* DUNOD, 3ème edition, 2001.