Complément de cours - Modèle probabiliste de la diffusion

Objectif ✔ : Evaluer le coefficient de diffusion en fonction de grandeurs caractéristiques de l'échelle mésoscopique grâce à un raisonnement probabiliste.

Modélisation : trois échelles, hypothèses et relations élémentaires

- ✓ ***Modélisation du milieu siège de la diffusion – 3 échelles***

  Echelle macroscopique : nombre total de particules dans le milieu N.

  Echelle mésoscopique :
  - libre parcours moyen ℓ et la vitesse quadratique moyenne est u ;
  - densité particulaire volumique $n(\mathrm{M}, t)$;
  - milieu découpé en « cases » mésoscopiques de volume ℓ^3.

  Conséquence : le temps caractéristique de changement de case est donc $\tau = \dfrac{\ell}{u}$.

  Echelle microscopique (échelle d'une particule diffusante) : la probabilité qu'une particule se trouve dans la case n°k à l'instant t est notée $p(\mathrm{M}_k, t)$ où M_k est le « centre » de la case n°k.
  On admet que cette probabilité ne dépend pas de la particule considérée (i.e. les particules sont indiscernables).

- ✓ ***Relation entre les 3 échelles***

$$n(\mathrm{M}_k, t) = N \times p(\mathrm{M}_k, t)$$

- ✓ ***Loi statistique utilisée au niveau microscopique***

  Toutes les τ secondes, une particule quelconque est susceptible de changer de case selon une loi probabiliste fournie par l'énoncé en fonction du modèle envisagé.

Exemple – Diffusion unidimensionnelle

Pour une diffusion unidimensionnelle selon Ox, la probabilité qu'une particule se trouve dans la case n°k d'abscisse $x_k = k\,\ell$ à l'instant t est notée $p(x_k, t)$.
Loi statistique : toutes τ secondes, une particule quelconque saute aléatoirement dans l'une des deux cases voisines avec la même probabilité.

1. Si une particule se trouve dans la case k à l'instant $t + \tau$, on peut affirmer qu'elle se trouvait à la date t dans l'une des deux cases voisines avec une égale probabilité.
   En déduire la relation entre $p(x_k, t + \tau)$, $p(x_{k-1}, t)$ et $p(x_{k+1}, t)$.

2. En considérant que ℓ est très petit devant la taille du système macroscopique et τ est très petit devant la durée d'observation, écrire les développements limités :
   - de $p(x_k, t + \tau)$ à l'ordre 1 ;
   - de $p(x_{k-1}, t)$ et $p(x_{k+1}, t)$ à l'ordre 2.

3. En déduire l'équation vérifiée par $p(x, t)$ (en notant $x = x_k$).

4. En déduire l'équation vérifiée par $n(x, t)$ et donner l'expression du coefficient de diffusion D en fonction de ℓ et u.

Exercice – Diffusion unidimensionnelle de neutrons

Des neutrons sont répartis sur des sites M_n de largeur a situés en $x_n = n\,a$.
Un neutron quelconque met une durée τ pour sauter d'un site M_n à l'un de ses plus proches voisins M_{n-1} ou M_{n+1} avec la même probabilité et on suppose de plus qu'un neutron peut être absorbé (il disparaît donc) au cours d'un saut entre deux sites avec la probabilité $\alpha\tau$ où α est une constante positive.

1. Soit $p(x_n, t)$ la probabilité qu'un neutron se situe en x_n à l'instant t.
   Exprimer $p(x_n, t + \tau)$ en fonction de $p(x_{n-1}, t)$, $p(x_{n+1}, t)$ et $\alpha\tau$.

2. En considérant que a est très petit devant la taille du système macroscopique et τ est très petit devant la durée d'observation, on admet qu'on peut définir une fonction $p(x, t)$, définie pour tout x, coïncidant avec $p(x_n, t)$ pour tout n.
   Montrer que $p(x, t)$ vérifie l'équation : $\dfrac{\partial p}{\partial t} = -\alpha p + D' \dfrac{\partial^2 p}{\partial x^2}$.
   Donner l'expression de D'.

Réponses exemple

1. $p(x_k, t + \tau) = ½\, p(x_{k-1}, t) + ½\, p(x_{k+1}, t)$
2.
3. $\tau \dfrac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{2}\ell^2 \dfrac{\partial^2 p}{\partial x^2}$
4. Equation de diffusion avec $D = ½\,\ell u$.

Réponses exercice

1. Sans absorption, l'équation est la même que celle de l'exemple.
   Si la probabilité d'être absorbé est $\alpha\tau$ alors la probabilité de ne pas être absorbé est $1-\alpha\tau$ ⇒ la probabilité de venir de M_{n-1} est donc $½\, p(x_{n-1}, t) \times (1-\alpha\tau)$. De même pour M_{n+1}.
2. $D' = D\,(1-\alpha\tau)$ avec $D = ½\, a^2 / \tau$.
   Rq : avec $\ell = a$ et $u = a/\tau$, on retrouve $D = ½\,\ell u$.