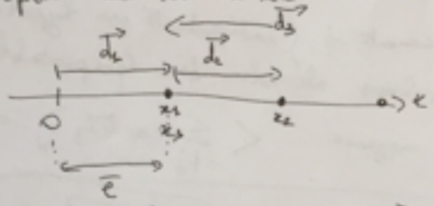
Exercice 5 – **Evaluation de coefficients de diffusion – aspect microscopique via marche au hasard**

## Marche au hasard à 1D

5. Pas de longueur $\bar{\ell}$ pour une particule le long de $x$ avec équiprobabilité selon $\pm \vec{u_x}$

Ex :




Au bout de N sauts, la position finale $\vec{x_N}$ est telle que :

$$\vec{x_N} = \vec{d_1} + \vec{d_2} + \vec{d_3} + \dots + \vec{d_N}$$

$$x_N \vec{u_x} = \sum_{i=1}^{N} \vec{d_i}$$

avec $\vec{d_i} = \varepsilon_i \bar{\ell} \vec{u_x}$

et $\varepsilon_i = \pm 1$

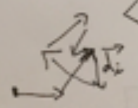
et $\varepsilon_i^2 = 1$

$$x_N \vec{u_x} = \sum_{i=1}^{N} \left( \varepsilon_i \bar{\ell} \vec{u_x} \right) = \bar{\ell} \vec{u_x} \times \left( \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i \right)$$

donc $x_N = \bar{\ell} \times \left( \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i \right)$

$$\langle x_N \rangle_N = \bar{\ell} \times \underbrace{\langle ( \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i ) \rangle_N}_{=0}$$

pour N suffisamment grand car autant de chance d'avoir +1 ou −1




Rqe) A 3D → $\vec{x_N} = \sum_{i=1}^{N} \vec{d_i} \rightarrow \langle \vec{x_N} \rangle_N = \vec{0}$ et $\langle x_N \rangle_N = 0$

longueur du saut $\bar{\ell}$ avec redistribution aléatoire des direct. à chaque saut (isotropie)

$$\rightarrow \quad x_N^2 = \vec{x_N} \cdot \vec{x_N} = \underbrace{d_1^2 + d_2^2 + \dots + d_N^2}_{= \sum_{i=1}^{N} \bar{\ell}^2 \varepsilon_i^2} + \underbrace{\sum_{i \neq j} \vec{d_i} \cdot \vec{d_j}}_{+0}$$

termes égaux aléatoirement à $\bar{\ell}^2 \times \pm 1 = \varepsilon_i \varepsilon_j \bar{\ell}^2$

donc $\langle \sum_{i \neq j} \bar{\ell}^2 \varepsilon_i \varepsilon_j \rangle = 0$ pour N suffisamment grand

somme de N termes égaux à 1

distance quadratique moyenne

$$\boxed{\langle x_N^2 \rangle_N = \bar{\ell}^2 \times N}$$

Rqe) à 3D → $r_N^2 = d_1^2 + d_2^2 + \dots + d_N^2 + \sum_{i \neq j} \vec{d_i} \cdot \vec{d_j}$

$$= N \bar{\ell}^2 + \bar{\ell}^2 \sum_{i \neq j} \cos \theta_{ij}$$

car tous les déplacement ont m̂ longueur $\bar{\ell}$ avec $\theta_{ij}$ l'angle entre $\vec{d_i}$ et $\vec{d_j}$ 2 déplacements ≠ (indépendants par hypothèse).

$\theta_{ij}$ prend des valeurs aléatoires donc équiprobables sur $[0 ; 2\pi]$ et en moyenne : $\langle \sum_{i \neq j} \cos \theta_{ij} \rangle_N = 0$

---

La distance moyenne parcourue $L$ est $\boxed{L = \sqrt{\langle x_N^2 \rangle_N} = \bar{\ell} \sqrt{N}}$

et non pas 0 !!!

2 – Soit $\tau$ le temps moyen entre 2 sauts (⇒ temps moyen entre deux collisions dans le modèle du gaz)

$\boxed{t = N \tau}$ → temps pour parcourir L → effectuer N déplacements

↳ vrai pour N >> 1 (suffisamment grand)

donc $\boxed{L = \bar{\ell} \times \sqrt{\frac{t}{\tau}}}$

à comparer à $L \propto \sqrt{t}$ → cf. cours !

3 – Rappel : cours → équation de diff. → $L = \sqrt{D \tau_{éq}}$

donc $\boxed{D = \frac{\bar{\ell}^2}{\tau}}$

4 – Rappel : $v_q \simeq \frac{\bar{\ell}}{\tau} \rightsquigarrow \tau = \frac{\bar{\ell}}{v}$ → $\boxed{D = \bar{\ell} v_q}$

avec $v_q \simeq 450 \, m.s^{-1}$ → $D_{\text{oxygène}} \simeq 4 \times 10^{-5} \, m^2.s^{-1}$

$D_{\text{liquide}} \simeq 4 \times 10^{-8} \, m^2.s^{-1}$

ordre de grandeur satisfaisant

5 – Comparaison Einstein : $D_{\text{gaz}} \simeq 1 \times 10^{-7} \, m^2.s^{-1}$

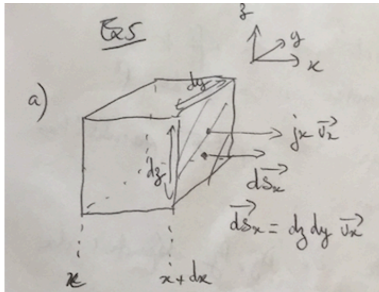
$D_{\text{liquide}} \simeq 2 \times 10^{-9} \, m^2.s^{-1}$

modèle a priori + approprié aux structures sphériques + grosses qu'une molécule.

Exercice 6 – **Diffusion + convection de polluants dans l'air**

Ex5

a)




$\vec{dS_x} = dz\, dy\, \vec{u_x}$

$$\vec{j} = j_x(M,t)\vec{u_x} + j_y(M,t)\vec{u_y} + j_z(M,t)\vec{u_z}$$

Loi de Fick.

$$\vec{j} = -D\,\vec{\text{grad}}\,c = -D\left(\frac{\partial c}{\partial x}\vec{u_x} + \frac{\partial c}{\partial y}\vec{u_y} + \frac{\partial c}{\partial z}\vec{u_z}\right)$$

Bilan de masse : en l'absence de convection

• bilan dans le volume dV par variation de $c(M,t)$

$$\delta^2 m = m(t+dt) - m(t) = [c(M,t+dt) - c(M)]\,dV$$
$$= \frac{\partial c}{\partial t}\,dt\,dV$$

• bilan par variation avec flux :

$$\delta^2 m = \delta^2 m_x + \delta^2 m_y + \delta^2 m_z$$ → on décompose les variations sur chaque axe.

$$\delta^2 m_x = [\underbrace{\delta\phi_x(x)}_{\text{entrant}} - \underbrace{\delta\phi_x(x+dx)}_{\text{sortant}}]\,dt = -\frac{\partial(\delta\phi)}{\partial x}\,dx\,dt$$

avec $\delta\phi_x = \vec{j}\cdot\vec{dS_x} = j_x\, dS_x = j_x\, dy\,dz$

$$\delta^2 m_x = -\frac{\partial j_x}{\partial x}\,dy\,dz\,dx\,dt = -\frac{\partial j_x}{\partial x}\,dV\,dt$$

de même raisonnement sur y et z conduit à

$$\delta^2 m = -\left(\frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}\right)dV\,dt = -\text{div}\,\vec{j}\,dV\,dt$$

donc $\boxed{\text{div}\,\vec{j} + \frac{\partial c}{\partial t} = 0}$ → équation de conservation de la masse

Avec la loi de Fick $\vec{j} = -D\,\vec{\text{grad}}\,c$ et $\text{div}\,\vec{\text{grad}} = \Delta$

$$\boxed{\frac{\partial c}{\partial t} - D\,\Delta c = 0}$$

b) Près du sol le mvt vertical est affecté → en effet sa composante ⊥ au sol $v_z$ doit s'annuler au contact du sol ($v_z = 0$ sur le sol), alors que les composantes parallèles ont une contrainte moins forte.

c) En présence de diffusion turbulente $D_x, D_y, D_z$ dépendent du point M et de la direction

$$\vec{j}_{\text{turbulent}} = -D_x\frac{\partial c}{\partial x} - D_y\frac{\partial c}{\partial y} - D_z\frac{\partial c}{\partial z}$$

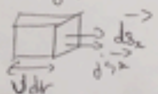
D ≠ selon la direction (milieu inhomogène par turbulence)

Le vent de vecteur vitesse $U\vec{u_x}$ provoque un mvt de convection → déplacement global du support.

Ce courant est à l'origine d'un flux de particules et donc de masse

Évaluons $\vec{j}_{\text{convection}}$ selon $\vec{u_x}$ : $\vec{j}_{\text{convection}} = j_{c,x}\,\vec{u_x}$

et son flux selon x (seulement) :




les particules qui traversent $\vec{dS_x}$ pdt dt sont contenues dans le volume $dV = U\,dt\,dy\,dz$, elles transportent une masse :

$$\delta m_x = c \times dV$$
$$= c\,U\,dt\,dy\,dz$$

soit un flux élémentaire $\delta\phi_x = \frac{\delta m_x}{dt}$

$$\delta\phi_x = c\,U\,dy\,dz$$
$$= j_{cx}\,dS_x$$
$$= \vec{j_c}\cdot\vec{dS_x}$$

donc $j_x = c\,U$

on obtient donc dans le bilan global :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial\overbrace{\left(cU + -D_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)}^{j_x}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y}\overbrace{\left(-D_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)}^{j_y} - \frac{\partial}{\partial z}\overbrace{\left(-D_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)}^{j_z}$$

$$\boxed{\frac{\partial c}{\partial t} + U\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial c}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)}$$

Ici on a négligé le flux de diffusion turbulente par rapport au flux convectif : $\dfrac{\left|D_x \, \partial c/\partial x\right|}{|cU|} \approx \dfrac{D_x \cancel{c}}{U \cancel{c} X} = \dfrac{D_x}{UX} \ll 1$

↳ distance caractéristique $U$ selon $X$

d) $$c(x,y,z) = \frac{q_m}{2\pi \sqrt{D_y D_z}\, x} \, e^{\left(-\frac{y^2 U}{4 D_y x} - \frac{(z - H_{eff})^2 U}{4 D_z x}\right)}$$

Concentration sol $\to z = 0$ et dans l'axe du panache $y = 0$

$$c(x,0,0) = \frac{q_m}{2\pi \sqrt{D_y D_z}\, x} \, e^{\left(-\frac{H_{eff}^2 U}{4 D_z x}\right)}$$

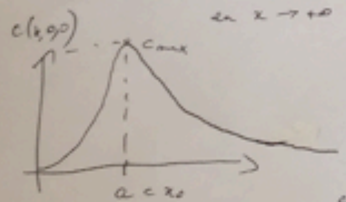
Etudier cette fonction revient à étudier $f(x) = \dfrac{e^{-a/x}}{x}$

$$f'(x) = e^{-a/x} \times \left(-\frac{1}{x^2} + \frac{1}{x}\left(\frac{a}{x^2}\right)\right) = \frac{e^{-a/x}}{x^3}(a - x)$$

$f \nearrow \overset{a \to max}{} \searrow$

en $x = 0 \to \lim\limits_{x \to 0} \dfrac{e^{-a/x}}{x} \to 0$ (exp. domine)

en $x \to +\infty \to \lim\limits_{x \to +\infty} \dfrac{e^{-a/x}}{x} \sim \dfrac{1}{x} \to 0$




$x_0 = a = 2,7$ km $= \dfrac{H_{eff}^2 U}{4 D_z}$

$C_0 = C_{max} = 3,9 \cdot 10^{-5}$ g.m$^{-3}$

Rmq) $\dfrac{D_x}{UX} = \dfrac{D_x}{3 \times 2,7 \times 10^3} \ll 1$ (si $D_x, D_y, D_z$ ≈ égaux)

e) La valeur est donc déposée au sol.

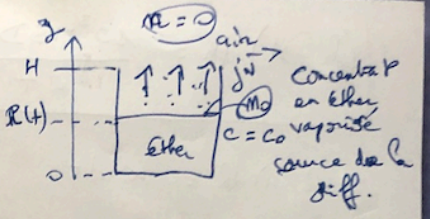
f) Pour ↓ la concentrat° au sol :

→ augmenter $H_{eff}$ → vitesse d'éjection du polluant ou hauteur de la cheminée

→ ↓ $q_m$ → le débit de rejets polluants (bien sûr)

→ augmenter $U$ → dispersion par le vent.

## Évaporat° de l'Éther




$H = 8$ cm
initialem^t $h_0 = 5$ cm

<u>Hyp du modèle</u> : $P(\text{éther}) \simeq 0$ pour $z > H$
$P(\text{éther}) = P_s(\text{éther})$ pour $z = h$
$= 0{,}58$ bar

ceci fixe les condit° aux limites pour le gradient de concentrat° en éther

a) On se place dans l'ARQS : vaporisé dans la zone $h \leq z \leq H$

$\operatorname{div} \vec{j_N} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0 \rightarrow \operatorname{div} \vec{j_N} = 0$ ($\rightarrow$ flux conservatif)

avec $\vec{j_N} = -D \,\overrightarrow{\text{grad}}\, n \rightarrow \Delta n = 0$

avec $n = n(z) \rightarrow \frac{d^2 n}{dz^2} = 0 \rightarrow n = Az + B$

condit° aux limites : $n(z = h) = n_0$, $n(z = H) = 0$

donc $\boxed{n = \frac{-n_0}{H - h}(z - H)}$

avec $n_0 = x_s \times n$, $x_s = \frac{P_s}{P} = 0{,}58$

Rappel : GP $\Rightarrow$

GP de ls n° condit° $(T, P)$

nombre de mol

et $PV = N RT$ ; $\mathcal{N}_A \times \frac{N}{V} = \frac{\mathcal{N}_A P}{RT} = n$ densité en particules

$\Rightarrow \boxed{n_0} = \boxed{\frac{x \mathcal{N}_A P_s}{RT}} = \boxed{\frac{\mathcal{N}_A P_s}{k_B T}}$

b) $\boxed{\underset{\text{trav}}{\phi(z = h)}} = \iint_S \vec{j_N} \cdot \vec{dS} = \boxed{+\frac{D n_0 S}{H - h}}$ $\rightarrow$ flux $> 0$ $\hookrightarrow$ sortant de la solut° d'éther.

$\vec{j_N} = -D \frac{dn}{dx}$

c) Le volume d'éther varie en conséquence des pertes par diffusion dans l'air

$dN(\text{éther}) = -\phi(z = h)\,dt = -\frac{D S n_0}{H - h} dt$ $\rightarrow$ $dV = V_{\text{occupé}}\, dN_{\text{éther}}$ par 1 part.

et $dV = dh \times S = \frac{10^3 M}{\rho \mathcal{N}_A} \times -\left(\frac{D S n_0}{H - h}\right) dt$ ; $\frac{10^3 M \rightarrow \text{en g.mol}^{-1}}{\rho \mathcal{N}_A}$

$(h - H)\,dh = \frac{10^3 M}{\rho \cancel{\mathcal{N}_A}} \times D S \times \frac{\cancel{\mathcal{N}_A} P_s}{RT} dt$

$$\boxed{(h - H)\,dh = \frac{10^3 M S D P_s}{RT} dt}$$

$\frac{dh}{dt} \propto h$ grande vitesse d'évaporat° au début puis très faible qd $h \to 0$

$(h - H)\,dh = K\,dt$ avec $K = \frac{10^3 M S D P_s}{RT}$

$\int_{h(t=0) = h_0}^{h} (h' - H)\,dh' = \int_{t=0}^{t} K\,dt'$

$\left[\frac{h'^2}{2} - Hh'\right]_{h_0}^{h} \Rightarrow \boxed{\frac{h^2}{2} - Hh - \frac{h_0^2}{2} + Hh_0 = Kt}$

d) Pour l'évaporat° totale :

$\int_{h_0}^{0} (h' - H)\,dh = \int_{t=0}^{t=\tau} K\,dt \rightarrow \left[\frac{h^2}{2} - Hh\right]_{h_0}^{0} = K\tau$

$\tau = \frac{1}{K}\left(-\frac{h_0^2}{2} + Hh_0\right)$

$$\boxed{\tau = \frac{h_0}{K}\left(H - \frac{h_0}{2}\right)}$$

<u>Autre méthode</u> : analyse en ordre de grd. de l'éq. diff.

$|(h - H)\,dh| \propto \left(\frac{h_0}{2} - H\right)\Delta h \simeq K\,\Delta t$

$\Delta h = h$ passe de $h_0 \to 0$
$\Delta t = \tau$

$\left(\frac{h_0}{2} - H\right) \times h_0 \simeq K\tau$

distance typique $h$ pdt que le niveau passe de $h_0 \to 0$
$\hookrightarrow$ on prend $\frac{h_0}{2}$ (moyenne)

$\tau \simeq \frac{h_0}{K}\left(H - \frac{h_0}{2}\right) \rightarrow$ m̂ résultat !

c) ARQS si $\tau \ll \tau_{\text{diff}}$ : la diffusion s'adapte immédiatement à la variat° de niveau $h(t)$ : (elle adapte le profil de $n(z)$ tjs linéaire) avec $\tau_{\text{diff}} = \frac{L^2}{D}$ ici $L$ typique $\simeq |H - h(t)| \simeq \frac{H}{2}$

donc $\tau \simeq 18\,h \ll \tau_{\text{diff}} \simeq 1$ min