

TD Advection-diffusion
(d'après Matthieu Roy-Barman)

Emission d'hydrocarbures par une forêt.

D'après Jacob (1999). Atmospheric Chemistry.



Les forêts émettent des composés organiques volatiles qui sont impliqués dans la formation de l'ozone dans les zones urbaines. On souhaite déterminer le flux d'isoprène émis par une forêt. Les mesures sont faites à partir d'une tour instrumentée installée au-dessus de la canopée. La concentration en isoprène est de 1,5 ppbv à 20 m d'altitude et de 1,2 ppbv à 30 m d'altitude. Le coefficient de diffusion turbulente est $K_z = 10^5 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ et la densité de l'air est de $1,2 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$. La masse molaire de l'air est de $28,9 \text{ g/mol}$.

Quel est le flux d'isoprène émis par la canopée ?

Transport de la chaleur dans le système hydrothermal de « Steamboat Spring »

D'après Turcotte et Schubert (1982) Geodynamics.

Les roches magmatiques qui se mettent en place sous la surface terrestre réchauffent les eaux souterraines. Cela conduit à la formation de systèmes hydrothermaux : à proximité des roches magmatiques, l'eau contenue dans les aquifères s'échauffe, elle devient moins dense et elle s'élève vers la surface. Au voisinage de la surface, l'eau se refroidit, redescend et elle peut ainsi réalimenter les aquifères au voisinage des roches magmatiques. Le cycle recommence alors (Fig 2). À Steamboat Springs, dans le Nevada, il en résulte la présence de nombreux geysers à la surface sur une surface de 1 km². Le service géologique des Etats-Unis (USGS) a mesuré le profil de température entre 0 et 200 m de profondeur (Fig 3). Pour simplifier, on considère ici un système unidimensionnel (axe y, y=0 à la surface, y → +∞ vers le centre de la Terre) dans lequel l'eau chaude monte vers la surface à une vitesse verticale v (donc négative selon y) et la chaleur diffuse verticalement dans l'ensemble du milieu (roche+ fluide) avec une conductivité thermique moyenne k proche de la conductivité thermique de la roche. On suppose également qu'il y a un équilibre thermique entre la roche et le fluide ($T_{\text{roche}} = T_{\text{fluide}} = T$). (Fig 2).



Fig. 1

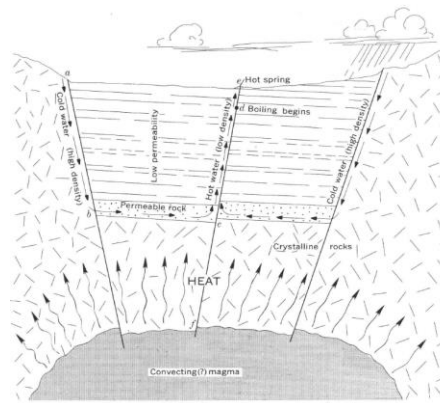


Fig. 2

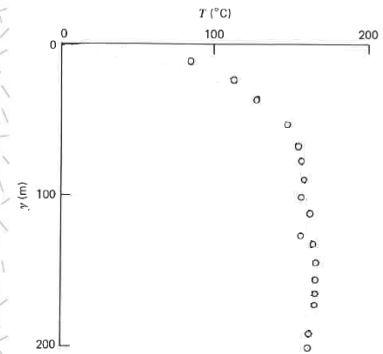


Fig. 3

- 1- Ecrire l'équation de conservation de la température dans l'ensemble « roche+fluide ».
- 2- Déterminez l'équation du profil de température. On notera T_r la température de l'eau du côté du réservoir de magma et T_0 la température de l'eau en surface.
- 3- Comparez le profil modélisé par cette équation avec le profil mesuré en utilisant les données fournies par l'USGS :
 - conductivité thermique moyenne du milieu (eau et roche) : $k = 3.35 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
 - densité de l'eau : $\rho_f = 1000 \text{ kg.m}^{-3}$
 - capacité calorifique de l'eau: $c_{pf} = 4185 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
 - $T_r = 165^\circ\text{C}$
 - $T_0 = 10^\circ\text{C}$
 ainsi que $v = - 6,7.10^{-8} \text{ m.s}^{-1}$.
- 4- La valeur de v donnée ci-dessus a été choisie pour assurer une bonne comparaison entre le modèle simple et les mesures. On cherche donc à l'évaluer indépendamment. Le débit total de l'eau thermique en surface est estimé à $7,12.10^{-2} \text{ m}^3/\text{s}$. Quelle aire est nécessaire pour assurer ce débit en surface avec la vitesse de Darcy v ? Ce résultat est-il cohérent avec les données ?

Dispersion dans un aquifère sableux.

D'après Mackay et al. (1986). A natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer: 1. Approach and overview of plume movement. *Water Resources Research*, 22(13), 2017-2029.

On souhaite caractériser l'advection et la dispersion dans une nappe d'eau sous-terrainne s'écoulant dans une couche de sable. Pour cela, on injecte de l'eau salée et du tétrachlorure de carbone (CCl_4) dans un puits situé aux coordonnées $x=0$ et $y=0$. On mesure ensuite les concentrations en Cl^- et en CCl_4 prélevés dans une multitude de puits d'échantillonnages situés en aval du puits d'injection durant presque 2 ans. Le résultat des analyses est présenté sur la figure ci-dessous. Par ailleurs, les mesures montrent que la dispersion verticale est négligeable.

2026

MACKAY ET AL.: SOLUTE TRANSPORT IN A SAND AQUIFER, 1

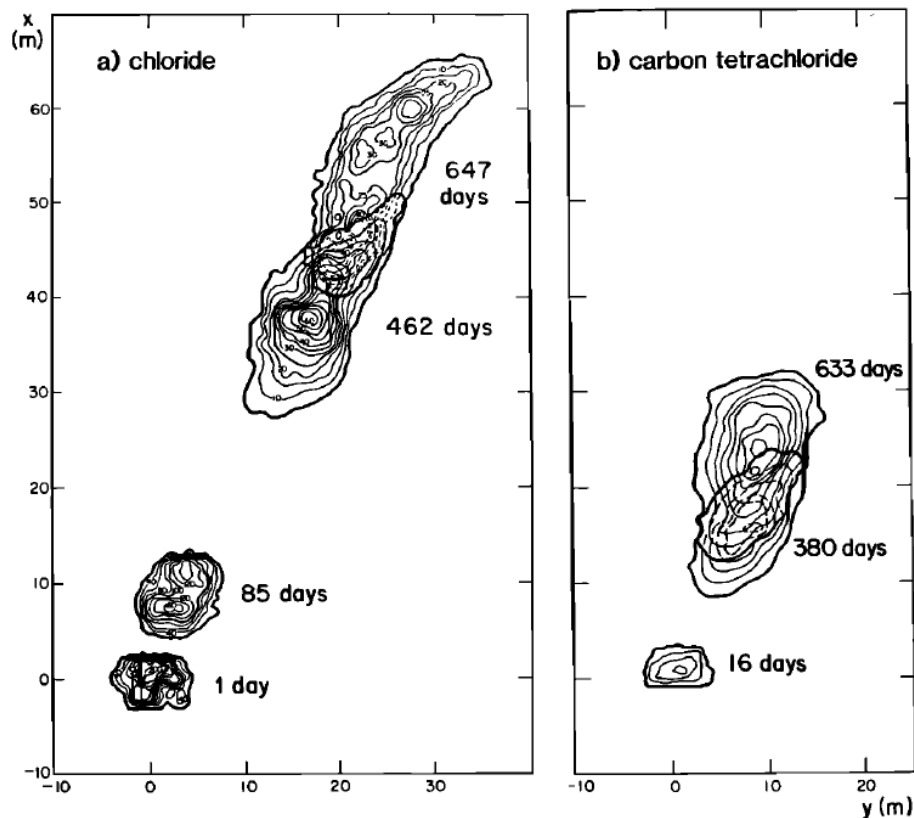


Fig. 8. Vertically averaged concentration distribution of two solutes: (a) chloride ion, 1, 85, 462, and 647 days after injection (averaging interval: $z = -1.5$ to $z = -7.5$ m) and (b) carbon tetrachloride, 16, 380, and 633 days after injection (averaging interval: $z = -1.5$ to $z = -6.0$ m).

- 1- Commentez la distribution de Cl^- au cours du temps.
- 2- Ecrire l'équation d'advection-diffusion de Cl^- , expliquer la signification des différents termes et justifier les simplifications éventuelles.
- 3- Il existe une solution analytique à l'équation $\frac{dC}{dt} = D_d \frac{d^2C}{dx'^2} - u \frac{dC}{dx'}$ pour une injection instantanée d'une masse M de traceur au temps $t=0$ au point $x=0$:

$$C(t, x) = \frac{M}{2\sqrt{\pi D_d t}} \times \exp\left(-\frac{(x' - ut)^2}{4D_d t}\right)$$

Commentez cette formule. Que vous rappelle-t-elle ?

- 4- Faites le lien entre cette solution et la relation temps/distance de diffusion vue en classe.
- 5- Estimez la vitesse d'advection et le coefficient de dispersion à partir de ces résultats.
- 6- Commentez et expliquez la distribution de CCl_4 .

7- Ecrire l'équation et justifiez l'équation d'advection-diffusion de CCl_4 . On supposera qu'il y a un équilibre chimique rapide entre le CCl_4 en solution et le CCl_4 adsorbé sur les grains de sable ce qui conduit à une relation de proportionnalité entre la quantité de CCl_4 en solution et le CCl_4 adsorbé dans un volume d'aquifère donné. Il y a donc également une relation de proportionnalité entre la concentration totale en CCl_4 (en solution ou adsorbé) et la concentration de CCl_4 en solution.

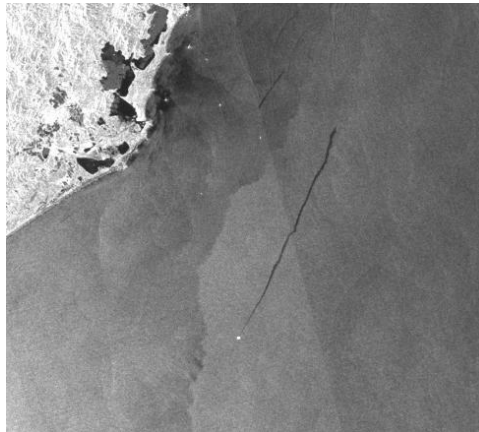
On note le facteur de retardement: $R = \frac{\text{quantité totale de } \text{CCl}_4 \text{ dans un volume d'aquifère}}{\text{quantité de } \text{CCl}_4 \text{ en solution dans le même volume d'aquifère}}$

On suppose R constant avec x' .

8- Déterminez le facteur de retardement de CCl_4 .

Dégazage en mer

D'après Thual (2010) Hydrodynamique de l'environnement



Les satellites peuvent détecter de jour le largage d'hydrocarbures par un pétrolier si la concentration massique de pétrole dans le panache de pollution en surface dépasse une concentration minimale de $C_d=0.2 \text{ kg/m}^2$. Dans cet exercice, on se propose de vérifier si un largage de $M=10$ tonnes d'hydrocarbures peut être détecté par satellite.

Hypothèses :

- Un pétrolier largue en mer une masse $M = 10$ tonnes d'hydrocarbures sur une distance $L = 1 \text{ km}$ en maintenant sa vitesse dans une direction x fixe. Le pétrole étant plus léger que l'eau, il reste à la surface et il est dispersé dans les directions x et y .
- On néglige les variations des différentes variables du problème en fonction de x
- A $t = t_0$, on suppose que la concentration surfacique (kg.m^{-2}) moyenne du polluant peut être représentée par $C_0(y) = C_m \times \exp\left(-\frac{y^2}{2l_0^2}\right)$ avec $l_0 = 1 \text{ m}$.
- On modélise le transport du panache de pollution par le seul phénomène de diffusion turbulente à l'aide d'un coefficient de diffusivité turbulente k_C que l'on suppose constant et égal à $k_C = 10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$. On négligera les autres composantes du transport

Données : $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{y^2}{2K^2}} dy = K\sqrt{2\rho}$

Questions

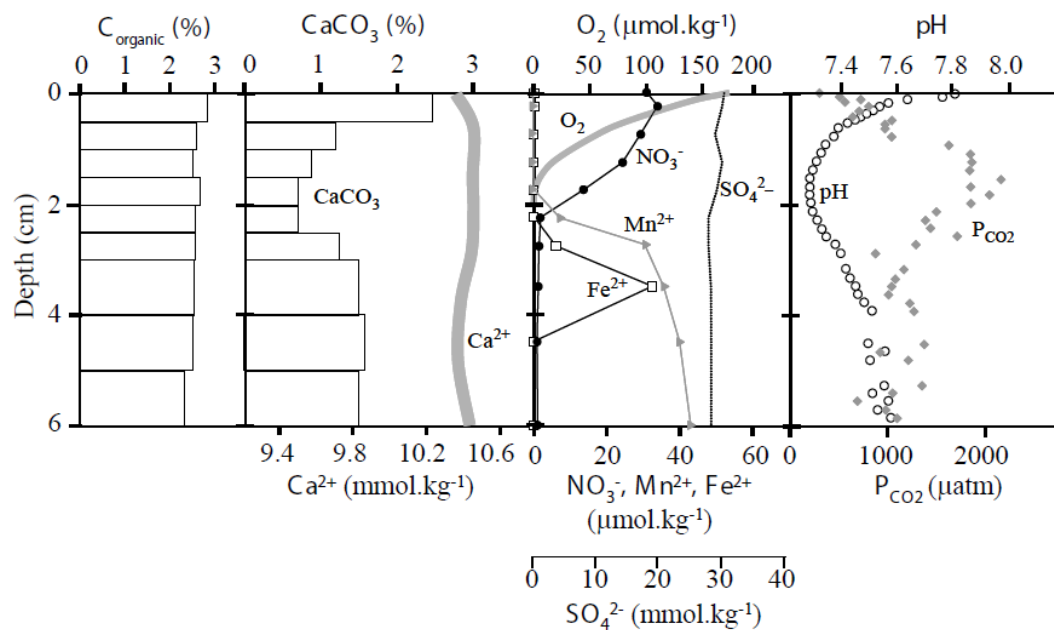
- 1- Justifiez brièvement le fait que les variations des différentes variables du problème en fonction de x peuvent être négligées
- 2- Ecrivez le lien entre la masse d'hydrocarbures larguée et la concentration massique C_m . Déduisez en l'expression de C_m en fonction de M et de l_0 . Calculez C_m .
- 3- Exprimez le flux de diffusion turbulente.
- 4- Ecrivez l'équation d'advection-diffusion vérifiée par $C(y,t)$
- 5- Montrez que $C(y,t) = C_m \frac{l_0}{l(t)} \exp\left(-\frac{y^2}{2l^2(t)}\right)$ est solution de l'équation précédente avec $l^2(t) = 2kt$. Le calcul pourra être facilité en écrivant $C(y,t)$ sous la forme : $C(y,t) = A(t)\exp(-j(y,t))$.
- 6- Trouvez t_0 pour que l'on ait $C(y,t_0) = C_0(y)$
- 7- Pour quelle valeur de y , $C(y,t)$ est-elle maximum ? Trouvez l'expression du temps T au bout duquel le maximum de concentration est en dessous du seuil de détection C_d .
- 8- Application numérique : Calculez T . Est-il possible de dégazer la nuit sans être détecté la journée suivante ?

Estimation des flux d'O₂ dans les sédiments marins.

D'après Pfeifer et al. (2002). Geochim. Cosmochim. Acta 66, 4247–4259.

La figure ci-dessous présente la Composition des fluides interstitiels et de la phase particulaire dans un sédiment de l'Atlantique équatorial.

- 1- A partir de vos connaissances en (géo)chimie, expliquer le profil de concentration en oxygène dissous. Commenter rapidement la distribution des autres éléments.
- 2- Dans quel sens se fait le flux net d'O₂ à l'interface eau-sédiment.
- 3- A partir de la figure, estimez le flux d'O₂ diffusant depuis les eaux de fond vers le sédiment. On prendra $\phi = 90\%$ et $D = 1,4 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.
- 4- Une chambre benthique (sorte de cloche à fromage posée sur le fond de l'océan et dans laquelle on fait des prélèvements à intervalle régulier) mise en place dans la même zone mesure une consommation d'O₂ de $2 \text{ mmol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{j}^{-1}$. Comparez ces 2 valeurs.



Composition des fluides interstitiels et de la phase particulaire dans un sédiment de l'Atlantique équatorial (upwelling du Gabon). Modifié d'après Pfeifer et al. (2002).

Diffusion des gaz dans les quarantièmes rugissants (Jean-Baptiste et Poisson, 2000).

Afin d'estimer l'épaisseur du film stagnant qui limite les échanges de gaz entre l'eau et l'atmosphère dans des conditions de vent intense, on injecte dans le lac des îles Kerguelen des quantités connues de deux gaz, SF₆ et ³He, et on suit l'évolution de leurs concentrations. Les concentrations décroissent exponentiellement au cours du temps. La concentration en ³He est divisée par deux tous les 6,5 jours, alors que la concentration en SF₆ est divisée par deux tous les 15 jours. On suppose qu'à tout instant, la concentration des gaz est uniforme dans le lac (car le vent le mélange vigoureusement) et que la concentration des gaz dans l'atmosphère est nulle.

- 1- Pourquoi la concentration en SF₆ décroît-elle plus lentement que celle d'³He ?
- 2- Écrire l'équation de conservation d'un gaz diffusant du lac vers l'atmosphère.
- 3- En déduire l'épaisseur du film stagnant et les vitesses de piston correspondantes.

On donne :

- Profondeur du lac = 47 m
- Surface du lac : 0,5 km²
- Coefficients de diffusion moléculaires $D_{SF_6} = 2,5 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ et $D_{^3\text{He}} = 5,8 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

Quand la pression partielle d'un gaz dans l'océan de surface est différente de celle dans l'air, il y a une différence de la concentration du gaz dissous entre le sommet et la base du film stagnant. Prenons le cas d'O₂. L'équation de conservation dans le film s'écrit :

$$\frac{d[O_2]}{dt} = - \frac{d}{dx} \left(-D_{O_2} \frac{d[O_2]}{dx} \right) = D_{O_2} \frac{d^2[O_2]}{dx^2} \quad (6.15)$$

D étant constant, on se sort du terme de dérivation. À l'échelle du **film stagnant** (environ 30 μm), le temps de parcours d'une molécule d'**oxygène** par **diffusion moléculaire** est de l'ordre de $t = \Delta z^2 / (2 D_{O_2}) = (3 \times 10^{-5})^2 / (2 \times 2,3 \times 10^{-9}) = 0,2 \text{ s}$. L'état stationnaire est donc rapidement atteint dans le film, si bien que le gradient de concentration dans le film dC/dx est constant. Le flux net de gaz est donc donné par l'équation :

$$F = -D_{O_2} / \Delta z ([O_2] - [O_2]^{\text{sat}}) \quad (6.16)$$

$$F = -\alpha_{O_2} D_{O_2} / \Delta z (P_{O_2}^{\text{eau de mer}} - P_{O_2}^{\text{atmosphère}})$$

où Δz est l'épaisseur du film stagnant, O₂ la concentration en oxygène dissous et ^{sat} correspond à sa valeur à l'équilibre avec l'atmosphère. D , α et O₂^{sat} étant connus, la difficulté est de déterminer Δx . Différentes méthodes sont utilisées : certaines sont basées sur le bilan des flux de gaz radioactifs naturels comme ²²²Rn (exemple 5.3 du chapitre 5) ou la pénétration de ¹⁴CO₂ (chapitre 8) dans l'océan, d'autres sur des mesures en souffleries ou encore de diffusion vers l'atmosphère de composés volatils naturels ou artificiels (Exercices d'approfondissement 1).

Il faut préciser que F est un flux par unité de surface. Lors des échanges entre l'atmosphère et un réservoir de surface F et de hauteur h sans termes sources et puits, l'équation de conservation devient :

$$Sh \frac{d[O_2]}{dt} = -S \frac{D_{O_2}}{\Delta z} ([O_2] - [O_2]^{\text{sat}}) \quad (6.17)$$

Soit :

$$\frac{d[O_2]}{dt} = - \frac{D_{O_2}}{h \times \Delta z} ([O_2] - [O_2]^{\text{sat}}) \quad (6.18)$$

Evaluation de la bioturbation dans les sédiments marins

D'après Schmidt et al. (2002)

On veut déterminer l'intensité de la bioturbation dans les sédiments marins de la marge ibérique. Pour cela, on utilise le thorium-234 (^{234}Th). ^{234}Th est produit dans l'eau de mer par désintégration de l'uranium (^{238}U). ^{234}Th est lui-même radioactif. Il a une demi-vie de 24 jours (constante de désintégration de ^{234}Th , $\lambda = 0,0288 \text{ j}^{-1}$). Comme le thorium est un élément insoluble, il les fixe sur les particules marines qui chutent vers le sédiment. Il y a donc une concentration élevée en ^{234}Th dans les sédiments de surface. Si le sédiment est bioturbé (mélangés par des animaux qui y font leurs terriers), on trouve du ^{234}Th plus profondément dans le sédiment.

On mesure la concentration en ^{234}Th dans des sédiments marins prélevés sur la marge ibérique. La vitesse d'accumulation des sédiments est de l'ordre de 0.3 mm.a^{-1} . On trouve du ^{234}Th jusqu'à 1 cm de profondeur.

1- Quelle est la profondeur de la couche bioturbée ?

Dans le sédiment, la concentration en ^{234}Th est divisée par 2 tous les 2 mm. On représente la bioturbation par un terme de diffusion caractérisé par le coefficient de diffusion D_{biot} .

2- Ecrire l'équation de conservation de ^{234}Th dans les sédiments (on suppose qu'il reste accroché aux particules). On négligera le terme de sédimentation.

3- Sachant que la solution générale de l'équation différentielle: $a \frac{d^2 c}{dx^2} - b \frac{dc}{dx} = 0$ est de la forme $C = A e^{(-\sqrt{b/a} \times x)} - B e^{(+\sqrt{b/a} \times x)}$ où A et B sont des constantes d'intégration, déduire l'évolution de la concentration de ^{234}Th en fonction de la profondeur dans le sédiment.

4- Quelle est la valeur de D_{biot} ?

Références bibliographiques générales

Géochimie Marine: circulation océanique, cycle du carbone et changement climatique, Matthieu Roy-Barman et Catherine Jeandel ? Vuibert, 2011. dispo dans les bibliothèques d'Orsay et de l'UVSQ (UFR des sciences) et à Orsay en anglais

Corrigendum sur le lien : <https://www.researchgate.net/publication/305083239> Corrigendum 9 juillet 2016

Applications pour l'atmosphère (en anglais):

Atmospheric Chemistry, Daniel Jacobs, Princeton University Press, 1999. disponible gratuitement sur internet:

<http://acmg.seas.harvard.edu/people/faculty/djj/book/> et aussi disponible en livre à l'UVSQ

Applications pour les surfaces continentales:

Environmental Organic Chemistry, Rene P. Schwarzenbach, Philip M. Gschwend, Dieter M. Imboden

Wiley, On trouve une version pdf librement accessible sur le web je crois. Un modèle pour moi !