

Double diffusion, convection de Boussinesq et convection profonde en air atmosphérique pollué ou humide

Pierre-Antoine Bois

Laboratoire de mécanique de Lille, UMR CNRS 8107, UFR de mathématiques, bâtiment M3, USTL, 59655 Villeneuve d'Ascq cedex, France

Reçu le 6 décembre 2005 ; accepté après révision le 25 août 2006

Disponible sur Internet le 22 septembre 2006

Présenté par Évariste Sanchez-Palencia

Résumé

On donne la forme prise par les équations de diffusion moléculaire et on montre comment la détermination des coefficients de diffusion moléculaire de scalaires passifs inertes (polluants, humidité, etc.) dans l'air atmosphérique peut être réalisée en première approximation par des relevés de pression, température et densités dans le milieu au repos. Ces approximations sont valables lorsque l'on écrit des équations de convection peu profonde (équations de Boussinesq), quelle que soit la fréquence de Brunt–Väisälä (donc dans la stratosphère et la troposphère). Dans le cas de la convection profonde, possible uniquement dans la troposphère, la faible fréquence de Brunt–Väisälä affecte aussi l'équation de diffusion moléculaire, celle-ci modifiant de son côté la forme des équations de convection. Des évaluations plus fines des coefficients doivent également être faites, à partir de relevés statiques pour différentes distributions de température par exemple. *Pour citer cet article : P.-A. Bois, C. R. Mécanique 334 (2006).*

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Double diffusion, Boussinesq convection and deep convection in polluted or moist atmospheric air. We derive the molecular diffusion equations, and we show how the determination of the molecular diffusion coefficients of passive scalars (pollutants or moisture) in the atmospheric air may be performed, in first approximation, by means of data of pressure, temperature and densities in the medium at the rest. These approximations are sufficient in order to write the equations of shallow convection (Boussinesq equations), whatever be the Brunt–Väisälä frequency of the medium (as well as in the troposphere and in the stratosphere). In the case of deep convection, which is possible in the troposphere only, the weakness of the Brunt–Väisälä frequency modifies the molecular diffusion equations, and these equations also modify the equations of convection. More accurate evaluations of the diffusion coefficients must also be made, using, for instance, static datas associated with several temperature distributions. *To cite this article: P.-A. Bois, C. R. Mécanique 334 (2006).*

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Mots-clés : Mécanique des fluides ; Diffusion moléculaire ; Air hétérogène ; Convection peu profonde ; Convection profonde

Keywords: Fluid mechanics; Molecular diffusion; Heterogeneous air; Shallow convection; Deep convection

Adresse e-mail : pierre-antoine.bois@univ-lille1.fr (P.-A. Bois).

Abridged English version

The main aim of this Note is to express the degeneracies of the equations of the polluted atmospheric convection in both cases where the Brunt–Väisälä (B–V) frequency is of order unity (case of the stratosphere) and in the case of weak B–V frequency (case of the troposphere). The most original equation, in a polluted atmosphere, is the molecular diffusion equation. In the convection of heterogeneous fluids the molecular diffusion equation is usually written with the help of Fick’s law. Although this law agrees with standard experiments, the principles of thermodynamics lead to more sophisticated constitutive equations, namely, in the case of inert pollutants, Eqs. (1) and (2), from which we deduce the values (3) of the diffusion coefficients. Moreover, we assume that the mixture is an ideal mixture of $N + 1$ polytropic gases, the concentrations $(q_\alpha)_{\alpha=1,\dots,N}$ of the N pollutants being of order of magnitude $O(q^*)$, and the concentration q_0 of the dry air being $1 - O(q^*)$ (q^* is a small numerical parameter). Under these assumptions the diffusion equations are expressed in the approximate form (9).

Now we examine an equilibrium state of the mixture. The static equations read in the form (10)–(12). These equations, taken into account the formulæ (4) and (7), provide the static values, say $\tilde{C}_{\alpha\beta}(z)$, of the diffusion coefficients for a given equilibrium state characterized by a temperature $\tilde{T}(z)$ and the concentrations of pollutants $\tilde{Q}(\alpha)(z)_{\alpha=1,\dots,N}$.

In order to study the convection in the medium, we now distinguish two cases, namely: (i) large B–V frequency of the static state (stratospheric convection); and (ii) weak B–V frequency of the static state (tropospheric convection). In the case (i) the only possible convection is a Boussinesq convection: the characteristic length of the convection, say L , is small before the atmospheric height H . The convection may exist either in thin medium (shallow convection in shallow medium), or in deep medium (shallow convection in deep medium). The equations lead to the first approximation (16) of diffusion equations. In these equations the diffusion coefficients $C_{\alpha\beta}$ are the static coefficients $\tilde{C}_{\alpha\beta}$, hence: either constant (in a shallow medium) or slowly varying with the altitude (in a deep medium).

In the case (ii) two kinds of convection may arise: (ii-1) the shallow convection, which is not very different of that of the case (i); and (ii-2) the deep convection: the length L is of the same order as the atmospheric height H , and the relevant motion equations are the anelastic equations. In this case, three degeneracies of the diffusion equations may arise, according with the magnitude of the concentrations of pollutants: for large concentrations, the resulting motion is quasi-static (Eq. (24)); for weak concentrations, both Boussinesq motions (Eq. (25)) and anelastic motions (Eq. (26)) can occur; for very small concentrations of pollutants, the convection remains the same as in pure fluid, while the molecular diffusion is a static diffusion only. Each diffusion coefficient $C_{\alpha\beta}$ is the sum of a coefficient $\tilde{C}_{\alpha\beta}$ (which is, in that case, rapidly variable) and a perturbation $\bar{C}_{\alpha\beta}$ which may be estimated using measurements of several static states of the medium.

1. Introduction

Un des mécanismes de diffusion d’impuretés dans l’air atmosphérique est celui de diffusion–convection. Dans l’air pur il s’agit de la diffusion de la chaleur. Dans l’air pollué ou humide on doit également tenir compte du transport de ces impuretés dans le milieu. Ce transport, pour une espèce inerte de concentration q , est écrit ordinairement à l’aide d’une formule $\rho dq/dt = C \Delta q$ (loi de Fick usuelle). Bien que cette loi concorde souvent avec l’expérience, les principes de la rhéologie conduisent à des équations moins simples : le premier objet de cette Note, qui complète et généralise une autre Note [1] est de préciser les conditions de validité des différentes formes prises par les équations de diffusion moléculaire dans un air hétérogène : un fluide hétérogène composé de $N + 1$ constituants est décrit à l’aide de $N + 2$ variables thermodynamiques, par exemple : la pression p , la température T , et N concentrations q_α ($1 \leq \alpha \leq N$). Dans ce qui suit nous considérons un mélange d’impuretés dans l’air. Nous désignons par q_α la concentration massique de la α -ème impureté, la concentration de l’air étant alors $q_0 = 1 - \sum q_\alpha$. La loi d’état s’exprime sous une forme $\rho = f(p, T, (q_\alpha)_{(\alpha=1,\dots,N)})$, où f est un opérateur algébrique.

On a montré par ailleurs [2] que la diffusion moléculaire pour le constituant de concentration q_α peut s’exprimer linéairement en fonction du gradient de pression et des gradients de concentrations des impuretés à l’aide de coefficients de diffusion $C_{\alpha\beta}$, $0 \leq \beta \leq N$: $C_{\alpha 0}$ définit la diffusion moléculaire due au gradient de pression, $C_{\alpha\alpha}$ représente la diffusion directe de l’impureté, les $C_{\alpha\beta}$ tels que $\alpha \neq \beta$ représentent une diffusion croisée due aux gradients de concentration des autres impuretés. On montre comment une estimation des $C_{\alpha\beta}$ peut être déduite de relevés expérimentaux de température, pression et masses volumiques dans le milieu au repos.

On s'intéresse ensuite à la forme prise par ces équations lorsque l'on étudie des problèmes de convection. On examine successivement les deux cas courants de convection atmosphérique : Boussinesq et anélastique. Dans la stratosphère, seule peut apparaître une convection Boussinesq (peu profonde, mais qui peut éventuellement s'étendre sur une distance profonde). On examine les conséquences de l'approximation de Boussinesq sur la diffusion moléculaire dans le milieu. Dans la troposphère, la fréquence de Brunt–Väisälä du milieu est toujours petite : deux convections peuvent être envisagées, d'échelle petite devant la hauteur atmosphérique ou de même ordre de grandeur que cette échelle voir [3]. Les deux cas correspondent à des dégénérescences différentes des équations de la quantité de mouvement et de l'énergie, et imposent d'autres dégénérescences des équations de diffusion moléculaire. On examine les contraintes qu'imposent ces équations, en particulier l'existence, dans le cas de la convection profonde, d'une diffusion statique des polluants dans le milieu.

2. Equations de diffusion dans l'air atmosphérique pollué

Nous rappelons ci-dessous des conclusions établies dans [2]. Le milieu est un fluide composé de $N + 1$ constituants *inertes* (pas d'échange de masse entre les constituants). L'indice 0 caractérise l'air, les indices $\alpha = 1, \dots, N$ les impuretés. Avec des notations classiques : \mathbf{u} , p , ρ , T , des concentrations massiques q_α et des vitesses de diffusion \mathbf{v}_α , les lois de diffusion dans le milieu peuvent s'écrire

$$\rho \, dq_\alpha/dt + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = 0, \quad \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha = -A_\alpha \nabla_T (g_\alpha - g_0) = -C_{\alpha 0} \nabla p - \sum_{\beta=1}^N C_{\alpha\beta} \nabla q_\beta, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (1)$$

$$\rho [c_p \, dT/dt - (1/\rho) \, dp/dt] = \tau_{ij} D_{ij} + \nabla \cdot (k \nabla T) - \sum_{\alpha=0}^N \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla h_\alpha + \rho Q \quad (2)$$

$$C_{\alpha 0} = A_\alpha \frac{\partial}{\partial p} (g_\alpha - g_0)_{T, q_\beta, (\beta=1, \dots, N)}, \quad C_{\alpha\beta} = A_\alpha \frac{\partial}{\partial q_\beta} (g_\alpha - g_0)_{T, p, q_\gamma \neq \beta}, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (3)$$

L'Éq. (1) est l'équation de diffusion moléculaire pour le constituant α . L'Éq. (2) est l'équation de l'énergie. On a désigné par c_p la chaleur spécifique du fluide à pression et à concentrations constante, τ_{ij} et D_{ij} désignent le tenseur des contraintes visqueuses et le tenseur des taux de déformations, h_α est l'enthalpie massique du α -ème constituant, g_α son potentiel chimique. On a supposé dans l'équation de l'énergie l'existence d'un terme de source de chaleur de densité volumique ρQ , ce qui correspond à la situation pratique du milieu atmosphérique. Le coefficient k est la conductivité thermique. L'indice T dans (1) marque une dérivation à température constante. Les coefficients $C_{\alpha\beta}$ dans (1) et (3) et k dans (2) sont des fonctions des variables d'état p , T , $(q_\alpha)_{\alpha=1, \dots, N}$. Ils dépendent linéairement d'une fonction indéterminée $A_\alpha(p, T, (q_\gamma)_{\gamma=1, \dots, N})$.

Nous supposons de plus le mélange *idéal* : le potentiel chimique g_α n'est autre que l'enthalpie libre partielle du constituant d'indice α . Si les concentrations massiques q_α ($\alpha = 1, \dots, N$) sont petites, d'ordre de grandeur q^* (q^* est un petit paramètre), la concentration q_0 de l'air sec est alors telle que $1 - q_0$ est petit d'ordre de grandeur q^* . Les formules (3) prennent les formes simplifiées

$$C_{\alpha\alpha} = A_\alpha \frac{\partial}{\partial q_\alpha} (g_\alpha - g_0)_{T, p}, \quad C_{\alpha\beta} = -A_\alpha \frac{\partial}{\partial q_\beta} (g_0)_{T, p}, \quad \alpha, \beta \geq 1, \alpha \neq \beta \quad (4)$$

On vérifie sans difficulté que d'après (3) on a dans ce cas

$$C_{\alpha\beta} = O(A_\alpha) \quad \text{si } \alpha \neq \beta, \quad C_{\alpha\alpha} = O(A_\alpha/q^*) \quad (5)$$

Supposons enfin que le milieu est un *mélange de gaz parfaits*. La constante polytropique de l'air sec est \mathcal{R}_0 , les constantes des impuretés sont \mathcal{R}_α , $\alpha = 1, \dots, N$. Nous désignons par c_{p0} , c_{v0} les chaleurs spécifiques de l'air, par $c_{p\alpha}$, $c_{v\alpha}$ celles des impuretés. L'équation d'état du milieu s'écrit

$$\rho = p/(\mathcal{R}_m T), \quad \mathcal{R}_m = \mathcal{R}_0 q_0 + \sum_{\alpha=1}^N \mathcal{R}_\alpha q_\alpha = \mathcal{R}_0 + \sum_{\alpha=1}^N (\mathcal{R}_\alpha - \mathcal{R}_0) q_\alpha \quad (6)$$

\mathcal{R}_m est un moyennage des constantes des gaz parfaits sur l'ensemble du milieu. On a bien évidemment $\mathcal{R}_m = \mathcal{R}_0 + O(q^*)$. Pour les lois d'état choisies, les coefficients $C_{\alpha\beta}$ donnés par (4) ont les expressions

$$C_{\alpha 0} = -A_\alpha(\mathcal{R}_0 - \mathcal{R}_\alpha)T/p, \quad C_{\alpha\alpha} = A_\alpha \mathcal{R}_\alpha T/q_\alpha, \quad C_{\alpha\beta} = A_\alpha \times O(1) \quad \text{si } \alpha \neq \beta \tag{7}$$

Pour des $q_\alpha \ll 1$ le coefficient $C_{\alpha\alpha}$ est prépondérant devant les autres $C_{\alpha\beta}$, de sorte que les formules (1) peuvent être approchées par

$$\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha = -A_\alpha [[(\mathcal{R}_\alpha - \mathcal{R}_0)T \nabla p] / p + [\mathcal{R}_\alpha T \nabla q_\alpha] / q_\alpha] = -C_{\alpha 0} \nabla p - C_{\alpha\alpha} \nabla q_\alpha \tag{8}$$

$$\rho \, dq_\alpha / dt - \nabla \cdot [C_{\alpha 0} \nabla p + C_{\alpha\alpha} \nabla q_\alpha] = 0 \tag{9}$$

Nous supposons désormais que le milieu est de l'air occupant un domaine non borné verticalement, avec une pression qui tend vers 0 si $z \rightarrow +\infty$. Le milieu est placé dans un champ de pesanteur soit $\mathbf{g} = -g\mathbf{k}$ (\mathbf{k} vecteur unitaire vertical ascendant). Comme on l'a dit plus haut, il est nécessaire de déterminer d'abord un état d'équilibre du milieu, soit $(\tilde{R}(z), \tilde{P}(z), \tilde{T}(z), \tilde{Q}_\alpha(z)_{\alpha=1,\dots,N})$. Pour des concentrations d'ordre de grandeur arbitraire, les équations sont les formes statiques de (1) et (2), et celles de l'équation de la quantité de mouvement et de l'équation d'état, soit

$$C_{\alpha 0} \frac{d\tilde{P}}{dz} + \sum_{\beta=1}^N C_{\alpha\beta} \frac{d\tilde{Q}_\beta(z)}{dz} = K_\alpha, \quad K_\alpha = cte, \quad \alpha = 1, \dots, N \tag{10}$$

$$\frac{d}{dz} \left[k \frac{d\tilde{T}}{dz} - \sum_{\alpha=0}^N K_\alpha \tilde{h}_\alpha \right] + \tilde{R}(z) Q(z) = 0 \tag{11}$$

$$\frac{d\tilde{P}}{dz} + \tilde{R}g = 0, \quad \tilde{R} = f(\tilde{P}, \tilde{T}, \tilde{Q}_1, \tilde{Q}_2, \dots, \tilde{Q}_n) \tag{12}$$

Pour une distribution de température $\tilde{T}(z)$ donnée, les Éqs. (10)–(12) forment un système bien posé, l'équation de l'énergie fournissant la valeur du terme de source $Q(z)$. Dans la pratique ces équations ne sont pas utilisées de cette façon : les distributions $\tilde{T}(z), \tilde{P}(z), \tilde{Q}_\alpha(z)$ sont déterminées expérimentalement, de sorte que les Éqs. (10) et (11) fournissent les coefficients de diffusion correspondant à la distribution d'équilibre (les Éqs. (12) étant implicitement satisfaites par la donnée même des mesures). Dans un mélange idéal, les coefficients $C_{\alpha\beta}$ dépendent linéairement des paramètres A_α , les autres paramètres (voir (4) et (7)) étant connus en fonction de la loi d'état. Il s'agit donc de déterminer les A_α . Ceux-ci ne peuvent pas être déduits d'une formule générale $A_\alpha(p, T, (q_\gamma)_{\gamma=1,\dots,N})$, cette dépendance n'étant pas connue a priori. En revanche, on peut déduire leurs valeurs d'équilibre, soit $\tilde{C}_{\alpha\beta}(z), \tilde{A}_\alpha(z)$. Pour des gaz parfaits, si nous utilisons (10) en remplaçant les $C_{\alpha\beta}$ en fonction des A_α à l'aide de (7), nous obtenons

$$\tilde{A}_\alpha(z) = \frac{K_\alpha}{\tilde{T}(z) \left(\frac{\mathcal{R}_\alpha - \mathcal{R}_0}{\tilde{P}(z)} \frac{d\tilde{P}}{dz} + \frac{\mathcal{R}_\alpha}{\tilde{Q}_\alpha(z)} \frac{d\tilde{Q}_\alpha}{dz} \right)} \tag{13}$$

A titre d'exemple, considérons une atmosphère standard humide (air clair) avec les relevés de température, de pression, de masses volumiques (totale et de vapeur d'eau) de l'US Standard Atmosphere (voir [4]). On a un seul coefficient $\tilde{A}_\alpha(z)$ à déterminer, soit $\tilde{A}_v(z)$, correspondant à la diffusion de la vapeur d'eau dans le mélange. On en déduit aisément les valeurs de $\tilde{A}_v(z)/K_v$ et de $\tilde{C}_{v0}(z)/K_v$ et $\tilde{C}_{vv}(z)/K_v$ lorsque z varie de 0 à 110 km d'altitude. Pour obtenir complètement $\tilde{A}_v(z), \tilde{C}_{v0}(z)$ et $\tilde{C}_{vv}(z)$ il faut disposer ensuite d'une mesure expérimentale de K_v , qui peut être réalisée à partir d'une seule expérience de convection peu profonde en laboratoire.

3. Convection dans un milieu à fréquence de Brunt–Väisälä importante (stratosphère)

L'état de convection est caractérisé par un faible paramètre de compressibilité dans le milieu, soit $\varepsilon \ll 1$ (voir [5]). D'après (12) l'état d'équilibre dépend de l'unique variable $\zeta = z/H$, où $H = p_0/(\rho_0 g)$ (p_0, ρ_0 : pression et masse volumique de référence). Nous supposons dans ce qui suit que l'échelle verticale de la convection (par exemple la longueur d'onde) est L , et nous désignons par F^{*-2} le paramètre L/H . Le carré de la fréquence de Brunt–Väisälä de l'état statique est $N^2(z)$, et on pose $N^2(z) = (g/H)\bar{N}^2(\zeta)$: $\bar{N}^2(\zeta)$ est un nombre sans dimension.

Lorsque $\bar{N}^2(\zeta) = O(1)$ (cas de la stratosphère) la seule convection possible est une convection Boussinesq (d'échelle peu profonde). Une condition nécessaire pour valider l'approximation de Boussinesq est que $F^{*-2} = \varepsilon$. Les variables se développent alors sous une forme qui généralise un développement classique en milieu pur [5]

$$\begin{cases} p = \tilde{P}(\zeta) + \varepsilon^2 \bar{p}, & \rho = \tilde{R}(\zeta) + \varepsilon \bar{\rho}, & T = \tilde{T}(\zeta) + \varepsilon \bar{T}, & \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \\ q_\alpha = \tilde{Q}(\zeta) + \varepsilon \bar{q}_\alpha, & h_\alpha = \tilde{h}_\alpha(\zeta) + \varepsilon \bar{h}_\alpha, & \mathbf{v}_\alpha = \varepsilon \bar{\mathbf{v}}_\alpha \end{cases} \quad (14)$$

Nous supposons pour simplifier que le milieu est un mélange idéal de gaz parfaits. Les coefficients A_α dépendent des variables $p, T, (q_\gamma)_{\gamma=1, \dots, N}$, de sorte que les $C_{\alpha\beta}$ sont fonctions des mêmes variables. Compte tenu des conditions, nous pouvons les supposer de la forme

$$C_{\alpha 0} = \tilde{C}_{\alpha 0}(\zeta) + \varepsilon \bar{C}_{\alpha 0}, \quad C_{\alpha\beta} = \tilde{C}_{\alpha\beta}(\zeta) + \varepsilon \bar{C}_{\alpha\beta} \quad (15)$$

où $\tilde{C}_{\alpha 0}(\zeta)$ et les $\tilde{C}_{\alpha\beta}(\zeta)$ désignent les coefficients statiques écrits à l'aide de la variable ζ , les $\bar{C}_{\alpha 0}$ et les $\bar{C}_{\alpha\beta}$ étant des grandeurs non déterminées à ce stade. Les équations du mouvement s'écrivent après élimination des termes statiques

$$\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha = -\varepsilon \sum_{\beta=1}^N \tilde{C}_{\alpha\beta} \nabla \bar{q}_\beta + \varepsilon^2 \tilde{C}_{\alpha 0} \nabla \bar{p}, \quad \rho \, dq_\alpha / dt - \varepsilon \nabla \cdot \left[\sum_{\beta=1}^N \tilde{C}_{\alpha\beta} \nabla \bar{q}_\beta \right] = \varepsilon^2 \nabla \cdot (\tilde{C}_{\alpha 0} \nabla \bar{p}) \quad (16)$$

$$\rho (c_p \, dT / dt - (\lambda T / \rho) \, dp / dt) = \tau_{ij} D_{ij} + \varepsilon \nabla \cdot (k \nabla \bar{T}) - \sum_{\alpha=0}^N \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla h_\alpha \quad (17)$$

La deuxième équation (16) est une loi de Fick avec des effets croisés (dus aux coefficients $C_{\alpha\beta}$ tels que $\beta \geq 1$), mais sans la dépendance par rapport à la pression due au terme de coefficient $C_{\alpha 0}$: cet effet n'apparaît qu'à l'ordre ε^2 à cause du terme $\nabla \bar{p}$. L'écriture de la relation (17) à l'aide de variables sans dimension, montre également que la dissipation visqueuse $\tau_{ij} D_{ij}$ est d'ordre ε^2 (cette conclusion est classique en approximation de Boussinesq).

Dans le cas particulier où l'ordre de grandeur q^* des concentrations de polluants est petit, les dérivées $\partial g_0 / \partial q_\alpha$ sont des $O(1) \forall \alpha$ tandis que $\partial g_\alpha / \partial q_\alpha$ est un $O(1/q^*)$. Compte tenu de la multiplication par les gradients ∇q_α , la partie principale de la deuxième équation (1) s'écrit

$$\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha = -A_\alpha \nabla T (g_\alpha - g_0) = -C_{\alpha 0} \nabla p - C_{\alpha\alpha} \nabla q_\alpha + O(q^*) \quad (18)$$

On insère (18) dans (16), en observant que l'on peut encore simplifier (16) en tenant compte de ce que les $C_{\alpha\beta}$ sont pris à l'état d'équilibre du milieu : ces coefficients sont soit des constantes (si la convection s'opère sur une hauteur de même ordre de grandeur que L), soit des fonctions lentement variables de z (si le mouvement s'étend sur une hauteur de même ordre de grandeur que H) et leurs dérivées par rapport à z sont d'ordre ε au moins. Les relations (16) s'écrivent dans ce cas

$$\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha = -\varepsilon \tilde{C}_{\alpha\alpha}(\zeta) \nabla \bar{q}_\alpha + \varepsilon^2 \tilde{C}_{\alpha 0}(\zeta) \nabla \bar{p} + O(\varepsilon^2), \quad R_0(\zeta) \, dq_\alpha / dt = \varepsilon \tilde{C}_{\alpha\alpha}(\zeta) \Delta \bar{q}_\alpha + o(\varepsilon) \quad (19)$$

La diffusion moléculaire s'exprime donc dans ce cas, à l'ordre ε compris, par une loi de Fick usuelle, avec des coefficients de diffusion constants ou lentement variables.

L'équation de l'énergie peut de la même manière être approchée par l'équation

$$\tilde{R}(\zeta) c_p \, dT / dt - dp / dt = \varepsilon \nabla \cdot (k \nabla \bar{T}) + O(\varepsilon^2), \quad \rho c_p \, dT / dt - dp / dt = \nabla \cdot (k \nabla T) + O(\varepsilon^2) \quad (20)$$

où k est une constante ou une fonction de ζ (lentement variable).

4. Convection dans un milieu à faible fréquence de Brunt–Väisälä (troposphère)

Lorsque $\bar{N}^2(\zeta) = o(1)$, deux convections peuvent s'établir suivant que $F^{*-2} < 1$ ou $F^{*-2} = 1$. En milieu pur, si l'on désigne par $\varepsilon^{2\mu}$ l'ordre de grandeur de $\bar{N}^2(\zeta)$ ($0 < \mu \leq 1$), l'examen systématique des dégénérescences des équations peut être fait en fonction des trois paramètres $F^{*-2}, \varepsilon, \mu$ (voir [3]). On obtient des mouvements de convection dans le cas $\{\mu \leq 1, F^{*-2} = \varepsilon^{1-\mu} \leq 1\}$. Cette convection est une convection Boussinesq si $\mu < 1$, une convection anélastique (voir par exemple [6]) si $\mu = 1$ (F^{*-2} est alors nécessairement égal à 1).

Dans le milieu pollué, l'étude des équations de l'énergie et de la quantité de mouvement conduit à la même discussion qu'en milieu pur. Seules doivent donc être examinées ensuite les équations de diffusion moléculaire. Sous l'hypothèse que $F^{*-2} = \varepsilon^{1-\mu}$, les développements (14) deviennent

$$\begin{cases} p = \tilde{P}(\zeta) + \varepsilon^2 \bar{p}, & \rho = \tilde{R}(\zeta) + \varepsilon^{1+\mu} \bar{\rho}, & T = \tilde{T}(\zeta) + \varepsilon^{1+\mu} \bar{T}, & \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \\ q_\alpha = q^*(\tilde{Q}(\zeta) + \varepsilon^{1+\mu} \bar{q}_\alpha), & h_\alpha = \tilde{h}_\alpha(\zeta) + \varepsilon^{1+\mu} \bar{h}_\alpha \end{cases} \quad (21)$$

$$C_{\alpha 0} = \tilde{C}_{\alpha 0}(\zeta) + \varepsilon^{1+\mu} \bar{C}_{\alpha 0}, \quad C_{\alpha \beta} = \tilde{C}_{\alpha \beta}(\zeta) + \varepsilon^{1+\mu} \bar{C}_{\alpha \beta} \quad (22)$$

Examinons les contraintes imposées par l'équation de diffusion moléculaire. Par commodité nous désignons par ε^ν l'ordre de grandeur q^* , avec $\nu \geq 0$. Il est commode alors de poser, conformément à (5), $C_{\alpha 0} = D_{\alpha 0}$, $C_{\alpha \beta} = D_{\alpha \beta}$ si $\alpha \neq \beta$, $C_{\alpha \alpha} = D_{\alpha \alpha}/q^*$ de sorte que nous posons dans (22)

$$C_{\alpha \beta} = \tilde{D}_{\alpha \beta}(\zeta) + \varepsilon^{1+\mu} \bar{D}_{\alpha \beta} \quad (\beta = 0, \dots, n, \alpha \neq \beta), \quad C_{\alpha \alpha} = \varepsilon^{-\nu} (\tilde{D}_{\alpha \alpha}(\zeta) + \varepsilon^{1+\mu} \bar{D}_{\alpha \alpha}) \quad (23)$$

On obtient ensuite pour l'équation de diffusion moléculaire les dégénérescences suivantes :

(i) Si $\nu < 2\mu$ (forte concentration de polluants) :

$$\bar{w} = 0 \quad (\text{écoulement quasi-statique}) \quad (24)$$

(ii) Si $\nu = 2\mu$ (écoulement de convection) :

(ii-1) $0 < \mu < 1$ (cas de Boussinesq)

$$\tilde{R}(\zeta) \bar{w} \tilde{Q}'_\alpha(\zeta) = \nabla \cdot (\tilde{D}_{\alpha \alpha}(\zeta) \nabla \bar{q}_\alpha) \quad (25)$$

(ii-2) $\mu = 1$ (cas anélastique, $\zeta = z$)

$$\tilde{R}(z) \bar{w} \tilde{Q}'_\alpha(z) = \nabla \cdot \{ \tilde{D}_{\alpha \alpha}(z) \nabla \bar{q}_\alpha + \tilde{D}_{\alpha 0}(z) \nabla \bar{p} + \tilde{D}_{\alpha 0} \tilde{P}'(z) \mathbf{k} + \tilde{D}_{\alpha \alpha} \bar{Q}'_\alpha(z) \mathbf{k} \} \quad (26)$$

(iii) Si $\nu > 2\mu$ (écoulement à diffusion moléculaire purement statique) : les Éqs. (25) et (26) restent valables à conditions de remplacer le premier membre par zéro.

5. Détermination des coefficients de diffusion non statiques

Les cas mis en évidence ci-dessus mettent en jeu des perturbations $\bar{D}_{\alpha 0}$ et $\bar{D}_{\alpha \alpha}$ des coefficients de diffusion $D_{\alpha 0}$ et $D_{\alpha \alpha}$, qui dans les deux cas ne se réduisent donc pas à leur terme statique $\tilde{D}_{\alpha 0}(\zeta)$ ou $\tilde{D}_{\alpha \alpha}(\zeta)$. Compte tenu des formes générales (23) de ces coefficients, on peut écrire

$$D_{\alpha \alpha} = \tilde{D}_{\alpha \alpha}(\zeta) + \left(\frac{\partial D_{\alpha \alpha}}{\partial T} \right)_{\substack{p=\tilde{P}(\zeta) \\ T=\tilde{T}(\zeta)}} \varepsilon^{1-\mu} \bar{T} + \left(\frac{\partial D_{\alpha \alpha}}{\partial p} \right)_{\substack{p=\tilde{P}(\zeta) \\ T=\tilde{T}(\zeta)}} \varepsilon^2 \bar{p} + o(\varepsilon^{1-\mu}) \quad (27)$$

de sorte que la détermination de $\bar{D}_{\alpha \alpha}$ se ramène à celle des dérivées partielles $\partial D_{\alpha \alpha} / \partial p$ et $\partial D_{\alpha \alpha} / \partial T$ dans l'état statique du milieu. Ces dérivées partielles peuvent être évaluées si l'on dispose de plusieurs mesures statiques pour des répartitions différentes de pression et de température (pour obtenir les deux dérivées partielles il suffit de disposer de trois relevés différents).

6. Conclusions

On a montré dans cette étude comment l'équation de diffusion moléculaire intervient dans la convection de l'air atmosphérique pollué par des impuretés ou de l'humidité (insaturée). Dans les zones où la fréquence de Brunt–Väisälä est importante, la seule convection possible est une convection Boussinesq, et la diffusion moléculaire y prend sa forme générale (loi de Fick avec ou sans effets de diffusion croisée). Lorsque la fréquence de Brunt–Väisälä est petite, la convection peu profonde est remplacée par un écoulement quasi-statique lorsque la concentration des polluants est forte (c'est un cas peu réaliste). Si cette concentration est plus faible (de même ordre de grandeur que le carré de la fréquence de Brunt–Väisälä), il peut exister une convection profonde réelle qui, dans ce cas, comporte une diffusion moléculaire moins dégénérée (ce cas peut être celui de l'atmosphère humide). Enfin, si la concentration des polluants est très faible, les équations de convection sont analogues à celles d'un fluide pur (soit Boussinesq soit anélastique), celle de la diffusion moléculaire se bornant à une diffusion statique (ce cas peut être celui de la pollution par espèces chimiques). Dans tous les cas, les coefficients de diffusion peuvent être déduits de relevés statiques de température, pression et densités en fonction de l'altitude.

Ces résultats sont établis pour des mélanges inertes, mais ne sont pas liés strictement à la propriété de mélange inerte : si l'on considère un mélange non inerte, la présence de termes de source dans certaines équations de bilan des masses pour les constituants provoque : (i) un nombre d'équations de diffusion inférieur à celui du nombre de constituants ; et (ii) la présence d'effets croisés beaucoup plus inattendus dans les équations de diffusion moléculaire déduites de ces équations de bilan et des équations stœchiométriques exprimant les échanges de masse entre les constituants. Si ces équations s'expriment par des équations algébriques, comme c'est le cas pour des réactions chimiques ou pour un phénomène de vaporisation–liquéfaction, cette prise en compte est à l'origine d'une réduction du milieu à un milieu équivalent comportant moins de constituants, mais dans lequel les diffusions sont plus complexes. On peut comparer, à titre d'exemple, les résultats obtenus ici à ceux de [1,7,2] pour l'air nuageux avec l'approximation d'aérosol [8–10]. La différence la plus notable résulte de l'écriture dans les milieux nuageux de la loi de Clausius–Clapeyron exprimant les échanges de masse : le milieu ternaire est ramené à un milieu binaire équivalent, mais la diffusion dans ce milieu comporte en même temps des effets Soret ou Dufour, même en convection peu profonde. La structure générale des coefficients de diffusion est, en revanche, analogue, et leur détermination (en particulier leur variation en fonction de l'altitude) peut s'effectuer par des relevés statiques comme on l'a vu ici pour l'air humide clair.

Références

- [1] P.A. Bois, C. R. Mécanique 330 (2002) 627–632.
- [2] P.A. Bois, K. Figureux, *Phil. Mag.* 85 (2005) 4393–4408.
- [3] P.A. Bois, *Mech. Res. Comm.* 33 (2006) 628–635.
- [4] J.H. Seinfeld, S.P. Pandis, *Atmospheric Chemistry and Physics*, J. Wiley and Sons, New York, 1997.
- [5] P.A. Bois, *Geophys. Astrophys. Fluid Dynam.* 58 (1991) 45–55.
- [6] A.H. Sobel, L.M. Solvani, J. Nilsson, *J. Atmos. Sci.* 58 (2001) 3650–3665.
- [7] P.A. Bois, A. Kubicki, *Ann. Geophys.* 21 (2003) 2201–2218.
- [8] F. Einaudi, D.P. Lalas, *J. Atmos. Sci.* 30 (1973) 365–376.
- [9] C.S. Bretherton, *J. Atmos. Sci.* 44 (1987) 1809–1827.
- [10] C.S. Bretherton, *J. Atmos. Sci.* 45 (1988) 2391–2409.