

THESE

présentée devant

L'UNIVERSITE CLAUDE BERNARD - LYON I
ECOLE DOCTORALE MEGA

pour l'obtention

du DIPLOME DE DOCTORAT
Spécialité : MECANIQUE

(arrêté du 25 avril 2002)

présentée et soutenue publiquement le
11 juillet 2005

par

César Augusto AGUIRRE

*Dispersion et mélange atmosphérique euléro-lagrangien
de particules fluides réactives
Application à des cas simples et complexes*

Directeur de thèse : Dr. Serge SIMOËNS

Jury : MM.

CALMET I., Maître de Conférence, Ecole Centrale de Nantes
PINHO BRASIL JUNIOR A. C., Professeur, Université de Brasilia (Bresil)
SABELNIKOV V., Directeur de Recherche ONERA / DEFA
WALLACE J.M., Professeur, Université de Maryland, Maryland (USA)
GENCE J.-N., Professeur, Université Claude Bernard, Lyon I
SIMOËNS S., Chargé de Recherche CNRS, Ecole Centrale de Lyon
Invitée : STAQUET C., Professeur, LIGE - Grenoble

Dedication

Cette thèse est dédiée à ma famille : mon épouse *Blanca Celina*, sans ses efforts et son dévouement pour nous tous, cela n'aurait pas pu aboutir. A mes enfants *Germán César*, *Christian Alejandro* et *Ana Valeria* qui m'ont accompagné tout au long de ces cinq années d'études supérieures en France et qui ont dû faire l'effort d'apprendre la langue et de s'adapter à la vie scolaire.

Je dédie aussi cette thèse à mes parents *Leopoldo César* et *Mirta Raquel Teresa* et à ma belle mère *Alicia* et ma tante *Martha* qui ont su nous encourager depuis l'Argentine dans les moments difficiles que nous avons vécu loin de la terre "*natale*".

Enfin, à ma soeur *Sandra Fabiana* et à mes frères *Marcelo Daniel* et *Leonardo Ivan* qui ont su être toujours près de nous malgré les 11.000 *km* de distance.

Dedicación

Dedico esta tesis a mi familia : mi esposa *Blanca Celina*, sin la dedicación y el esfuerzo que ella a puesto en el cuidado de todos nosotros, esta odisea no habría podido concluir bien. A mis hijos *Germán César*, *Christian Alejandro* y *Ana Valeria* que me han acompañado durante estos largos cinco años de estudios superiores en Francia y que han debido hacer el esfuerzo de aprender la lengua francesa y de adaptarse a la vida escolar.

Es dedicada también a mis padres *Leopoldo César* y *Mirta Raquel Teresa*, a mi suegra *Alicia* y tía *Martha* que han sabido alentarnos desde Argentina en los difíciles momentos que hemos pasado lejos de la tierra "*natal*".

A mi hermana *Sandra Fabiana* y mis hermanos *Marcelo Daniel* y *Leonardo Ivan* que han sabido estar siempre cerca nuestro a pesar de los 11.000 *km* de distancia que nos separan.

Remerciements

Cette thèse est le but d'un projet d'études supérieures en France que j'ai commencé il y a cinq ans grâce à un programme d'échange des étudiants de l'Amérique du Sud et de la France sous la direction du Professeur *Victoriano Ruas* (France) et du Professeur *Sergio Idhelson* (Argentine). Le programme **ALFA** (*Amérique Latine Formation Académique*) m'a permis de travailler avec des chercheurs de très haut niveaux scientifique comme les Dr. *Michel Ayrault* et Dr. *Serge Simoëns* pendant l'année 2000.

Une fois rentré en Argentine, cette expérience m'a encouragée à demander une bourse *Saint-Exupery* qui heureusement m'a été accordée en septembre 2001 par l'Ambassade de France en Argentine et le Ministère d'Education d'Argentine, cela fait déjà 4 ans. Cette démarche n'a pu être possible sans l'appui de plusieurs personnes que je voudrais remercier.

D'abord j'exprime ma gratitude à tous ceux qui m'ont encouragé à revenir pour une deuxième fois en France pour faire une étude de doctorat dans un des plus prestigieux laboratoires d'Europe : Lic. *Armando Brizuela*, Ing. *Corina Romero* et Ing. *Griselda Carñel* qui ont dû aussi prendre ma place dans les tâches de l'enseignement et de la recherche en Argentine. Aux membres du Conseil Directif de la Faculté des Sciences Agronomiques de l'Université de Entre Ríos qui ont accepté mon demande de congé de longue durée pendant toutes ces années.

Je voudrais remercier très vivement à Monsieur *Serge Simoëns* qui a accepté d'être mon directeur de thèse et qui m'a fait découvrir un sujet passionnant comme la chimie atmosphérique en jouant son rôle tant du côté scientifique que du côté humain. Je lui suis reconnaissant et admirateur toujours de son capacité d'éclairer en quelques mots les questions les plus diverses grâce à un sens physique formidable. Ces conseils pertinents m'ont permis de regarder au bon endroit et de retrouver les choses essentielles parmi les résultats de mes calculs numériques. Il a fait aussi la très pénible tâche de corriger mes fautes d'orthographe en français.

Aussi toute ma gratitude à Monsieur *Michel Ayrault* qui a été à mon côté depuis le début et qui a su m'apporter son soutien scientifique et humain pendant ces cinq années. Je lui suis très reconnaissant.

Je tiens à remercier Monsieur Professeur *J.-N. Gence* pour l'écoute et les nombreux

conseils qu'il m'a donné. Sa qualité et son professionnalisme dans l'enseignement m'ont fait découvrir avec simplicité et rigueur scientifique les *bases physiques de la turbulence*. Je le remercie entre autre d'avoir accepté d'être membre du jury.

Je remercie Monsieur *Vladimir Sabelnikov* et Monsieur *Antonio Pinho Brasil Juniors* d'avoir accepté d'être rapporteurs de cette thèse et membres du jury. Leurs qualités et leur expérience scientifique largement reconnues valorisent sans doute le travail effectué.

J'exprime ma gratitude aussi à Monsieur *James Wallace* et Madame *Isabelle Calmet* qui ont aimablement accepté d'être membres du jury.

Je souhaite remercier par son accueil au Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique, Professeur *Denis Jeandel*, directeur lors de mon entrée et le Professeur *Michel Lance*, actuel directeur.

Enfin, je remercie aux centres IDRIS et le CEA de m'avoir accordé des heures de calcul pour ce travail.

Agradecimientos

Esta tesis es el final de un proyecto de estudios superiores en Francia que he comenzado hace ya cinco años gracias a un programa de intercambio de estudiantes de América del Sur y Francia bajo la dirección de los Señores *Victoriano Ruas* (Francia) y *Sergio Idhelson* (Argentina). El programa **ALFA** *America Latina Formación Académica* me ha permitido trabajar con investigadores de muy alto nivel científico como el Señor *Michel Ayrault* y el Señor *Serge Simoëns* durante el año 2000.

A finales de ese año, una vez en Argentina, esta experiencia muy positiva me motivó a solicitar una beca *Saint Exupery* que felizmente me fue otorgada en septiembre 2001 por la Embajada Francesa en Argentina y el Ministerio de Educación de Argentina, de esto hace ya 4 años. Este logro no habría sido posible sin el apoyo de varias personas a las que quisiera agradecer.

Gracias a todos aquellos que me impulsaron a volver por segunda vez a Francia en calidad de doctorando en uno de los más prestigiosos laboratorios de Europa : Lic. *Armando Brizuela*, Ing. *Corina Romero* e Ing. *Griselda Carñel* que han debido también cubrir mi lugar en las tareas de docencia y de investigación en Argentina. A los miembros del Consejo Directivo de la Facultad de Ciencias Agropecuarias de la Universidad Nacional de Entre Ríos, que han aceptado mi solicitud de licencia durante todos estos años.

Quisiera agradecer muy especialmente al Señor *Serge Simoëns* haber aceptado ser mi director de tesis y que me ha hecho descubrir un tema apasionante como la química de la atmósfera cubriendo aspectos tanto científicos como humanos. Mi sincera gratitud y admiración por su capacidad de aclarar en pocas palabras las más diversas cuestiones gracias a su formidable sentido de la física. Sus consejos pertinentes me han permitido encontrar las respuestas esenciales muchas veces camufladas entre los resultados de mis calculos numéricos. Él ha realizado además la penosa tarea de corregir mis faltas de ortografía en francés.

También expreso toda mi gratitud al Señor *Michel Ayrault* que ha estado a mi lado desde el comienzo y que me ha brindado su apoyo científico y humano durante estos cinco años. Le estoy sinceramente muy agradecido.

Agradezco también al Señor Profesor *J.-N. Gence* por su atención y numerosos consejos que me ha brindado. Su calidad y profesionalismo docente me han hecho descubrir con

suma simplicidad y rigor científico las *bases físicas de la turbulencia*. Le agradezo además el haber aceptado ser miembro del jurado.

Mi agradecimiento va también para los Señores *Vladimir Sabelnikov* y *Antonio Pinho Brasil Juniors* por haber aceptado ser los correctores de esta tesis y miembros del jurado. Sus cualidades y experiencia científica largamente reconocidas valorizan sin duda el trabajo efectuado.

Mi gratitud va también para el Señor *James Wallace* y la Señora *Isabelle Calmet* que han aceptado amablemente ser miembros del jurado.

Yo deseo agradecer por su acogida en el Laboratorio de Mecánica de Fluides y de Acústica, al Profesor *Denis Jeandel*, director a mi llegada a Francia y al Profesor *Michel Lance*, actual director.

Por último, agradezco a los centros IDRIS y CEA por haberme acordado las horas de cálculo para este trabajo de tesis.

Table des matières

NOTATIONS	19
INTRODUCTION	31
1 MODÈLE ATMOSPHERIQUE	39
1.1 Introduction	39
1.2 Les grandeurs thermodynamiques	39
1.3 Les équations du modèle	40
1.3.1 Bilan de masse	41
1.3.2 Bilan de quantité de mouvement	41
1.3.3 Bilan de pression	44
1.3.4 Quelques approximations dans l'équation de la quantité de mouvement	47
1.3.5 Bilan des autres grandeurs thermodynamiques	49
1.4 Modèle de turbulence	49
1.4.1 La Simulation des Grandes Échelles (LES)	50
1.4.2 Les modèles de sous-maille pour la fermeture de l'équation de quantité de mouvement	55
1.4.3 Fermeture de type Smagorinsky	57
1.4.4 L'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille	65
1.4.5 Fermeture d'ordre 1,5 avec l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille	71
1.5 Modèles de paroi	72
2 MODÈLE STOCHASTIQUE	79
2.1 Introduction	79
2.2 Modèle Lagrangien	79
2.2.1 L'équation de Langevin classique	80
2.2.2 Les effets de non-stationnarité de la turbulence	87
2.2.3 L'équation de Fokker-Planck	88
2.3 Modèle stochastique lagrangien	90
2.3.1 Fonction de densité filtrée du champ de vitesse (VFDF)	92
2.3.2 L'équation de transport de la VFDF	93
2.3.3 Fermeture de l'équation de transport de la VFDF	96

3	MÉTHODES NUMÉRIQUES	103
3.1	Introduction	103
3.2	Les principales caractéristiques du code ARPS	103
3.2.1	Schéma numérique	103
3.2.2	Modèles	104
3.2.3	Conditions aux limites	104
3.2.4	Conditions initiales	104
3.2.5	Le maillage de calcul et le système de coordonnées	107
3.2.6	Les équations de Navier-Stokes en coordonnées curvilignes	115
3.3	Apports et modifications du code ARPS pour la Simulation des Grandes Échelles	123
3.3.1	Le modèle de fermeture “Smagorinsky Dynamique”	123
3.3.2	Conditions initiales et conditions aux limites	130
3.3.3	Modèle de paroi pour le terme de dissipation dans l’équation de transport de l’énergie cinétique turbulente de sous-maille	138
4	VALIDATION DYNAMIQUE DU CODE LES	141
4.1	Introduction	141
4.2	Validation dans le cas de l’expérience de Fackrell & Robins (1982)	141
4.2.1	Données de l’expérience	142
4.2.2	Les grandeurs caractéristiques de la turbulence	145
4.2.3	Paramètres pour la simulation des Grandes Échelles dans le cas de l’expérience de Fackrell & Robins (1982)	147
4.2.4	Résultats	159
4.2.5	Discussion	169
4.3	Validation dans le cas de l’expérience de Gong & Ibbetson (1989)	171
4.3.1	Données de l’expérience	172
4.3.2	Grandeurs caractéristiques de la turbulence	175
4.3.3	Choix des paramètres pour la simulation des Grandes Échelles dans le cas de l’expérience de Gong & Ibbetson (1989)	176
4.3.4	Résultats	181
4.3.5	Discussion	187
5	LE MODÈLE COUPLÉ LES-STOCHASTIQUE	197
5.1	Introduction	197
5.2	Description et mise en place du modèle couplé	197
5.2.1	Les équations	197
5.2.2	La discrétisation du modèle	199
5.2.3	Conditions initiales pour les particules fluides	200
5.2.4	Conditions aux limites pour les particules fluides	200
5.2.5	Méthode de calcul de concentration des particules fluides	201
5.3	Validation dans le cas de l’expérience de Fackrell & Robins (1982)	201
5.3.1	Résultats	202

5.3.2	Discussion	211
5.4	Validation dans le cas de l'expérience de Gong (1991)	213
5.4.1	Résultats	214
5.4.2	Discussion	224
6	MODÈLE DE DIFFUSION ET DES RÉACTIONS CHIMIQUES	227
6.1	Introduction	227
6.2	Le rôle des modèles	227
6.3	Le modèle de diffusion	228
6.4	Le modèle des réactions chimiques	230
6.5	Application à la dispersion d'un panache réactif de NO dans une atmosphère de O_3	231
6.5.1	Conditions initiales de concentration des espèces	232
6.5.2	Construction des boîtes de mélange	232
6.5.3	Calcul de concentration volumique des espèces chimiques avec la méthode des particules fluides	233
6.5.4	Conditions d'application du modèle de diffusion	234
6.5.5	La réaction chimique entre NO et O_3	235
6.6	Le rôle des flux de masse turbulents	235
6.7	Mélange turbulent et réactions chimiques	236
6.7.1	Modèle à gradient pour la corrélation des fluctuations de concentration des espèces	240
6.8	Résultats de la simulation de la dispersion d'un panache réactif de NO dans une atmosphère de O_3	241
6.8.1	Profils de la concentration de la Fraction de mélange (FM)	241
6.8.2	Profils de la concentration des espèces chimiques	242
6.8.3	Profils de l'intensité de ségrégation	242
6.8.4	Comparaison avec la simulation de MEEDER & NIEUWSTADT (2000)	257
6.9	Discussion	260
7	SIMULATION DE LA DISPERSION D'UN PANACHE REACTIF SUR UN VILLAGE EN ARGENTINE	263
7.1	Introduction	263
7.2	Déscription de la zone d'étude et situation de la simulation	263
7.2.1	Modèle digital du terrain	265
7.2.2	Données caractéristiques de la surface du terrain	265
7.2.3	Données météorologiques	267
7.3	Obtention des paramètres nécessaires à partir des données disponibles	268
7.3.1	Conditions initiales et aux limites	268
7.3.2	Paramètres de la simulation numérique des Grandes Echelles	272
7.3.3	Données de la source de pollution	274
7.4	Résultats	274
7.5	Discussion	287

CONCLUSION	288
ANNEXES	293
A Les tenseurs de Fokker-Planck	295
B Méthodes d'interpolation	299
B.1 Méthode d'interpolation tri-linéaire des Polynômes de Lagrange	299
B.2 Méthode d'interpolation barycentrique	302
C Calcul de la concentration d'espèces	305
D Technique d'injection supplémentaire des particules fluides autour des panaches	309
BIBLIOGRAPHIE	311

Table des figures

1	Sources d'émission de polluant et les phénomènes associés à sa transformation et dispersion dans l'atmosphère.	33
2.1	Position d'une particule fluide au sein d'une maille de calcul	97
3.1	Position des grandeurs de calcul sur une maille de type Arakawa C-grid. . .	108
3.2	Maillage physique et maillage de calcul.	109
3.3	Agencement vertical du maillage de calcul.	114
3.4	Division du domaine : <i>domaine de pre-calcul</i> et <i>domaine utile de calcul</i> . . .	133
3.5	Conditions initiales de calcul.	135
3.6	Champ de vitesse initial	135
4.1	Profils expérimentaux et loi logarithmique de la vitesse moyenne axiale (FACKRELL & ROBINS (1982))	142
4.2	Profils expérimentaux et analytiques des fluctuations de la vitesse (FACKRELL & ROBINS (1982))	144
4.3	Disposition des boîtes du maillage de calcul pour la coordonnée axiale. . .	149
4.4	Variation de la taille verticale des boîtes du maillage en fonction de l'indice vertical.	152
4.5	Variation de la taille verticale des boîtes du maillage en fonction de l'élévation sur le terrain.	153
4.6	Variation de l'indice vertical de boîtes du maillage en fonction de l'élévation sur le terrain.	153
4.7	Contraction verticale des mailles du maillage de calcul pour le choix du maillage grossier.	154
4.8	Contraction verticale des mailles du maillage de calcul pour le choix du maillage raffiné.	154
4.9	Profil des moyennes glissantes de la vitesse axiale grandes échelles en utilisant un maillage de calcul fin.	160
4.10	Profils des moyennes glissantes de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse grandes échelles en utilisant un maillage de calcul fin. . .	160
4.11	Profil des moyennes glissantes des grandes échelles de la vitesse axiale en utilisant un maillage de calcul grossier.	161

4.12	Profils des moyennes glissantes de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse grandes échelles en utilisant un maillage de calcul grossier.	161
4.13	Profils de la vitesse moyenne axiale grandes échelles	163
4.14	Profils de l'énergie cinétique turbulente des différents composantes et totale de la vitesse obtenus à $x - x_s = 0,96\delta$	164
4.15	Profils de l'énergie cinétique turbulente des différents composantes et totale de la vitesse obtenus à $x - x_s = 1,92\delta$	165
4.16	Profils de l'énergie cinétique turbulente des différents composantes et totale de la vitesse obtenus à $x - x_s = 2,88\delta$	166
4.17	Profils de l'énergie cinétique turbulente des différents composantes et totale de la vitesse obtenus à $x - x_s = 3,83\delta$	167
4.18	Profils de l'énergie cinétique turbulente des différents composantes et totale de la vitesse obtenus à $x - x_s = 4,79\delta$	168
4.19	Profils de vitesse moyenne axiale mesurés dans l'expérience de GONG & IBBETSON (1989)	172
4.20	Profils moyens de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse mesurés par GONG & IBBETSON (1989).	174
4.21	Disposition des boîtes du maillage de calcul pour la coordonnée axiale dans le cas du sol plat.	177
4.22	Disposition des boîtes du maillage de calcul pour la coordonnée axiale dans le cas de la colline.	178
4.23	Contraction verticale des mailles du maillage de calcul dans le cas du sol plat.	179
4.24	Contraction verticale des mailles du maillage de calcul dans le cas de la colline.	179
4.25	Profils de moyennes glissantes de la vitesse axiale grandes échelles.	182
4.26	Profils de moyennes glissantes de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations axiales et verticales de vitesse grandes échelles.	182
4.27	Vitesse moyenne axiale grandes échelles à $x = 1,51 m$. Calcul numérique et mesures expérimentales de GONG & IBBETSON (1989). Cas du sol plat. . . .	183
4.28	Profils de l'énergie cinétique turbulente et des fluctuations à $x = 1,51 m$. Calcul numérique et mesures expérimentales de GONG & IBBETSON (1989). Cas du sol plat.	184
4.29	Vitesse moyenne axiale grandes échelles à $x = 1,71 m$. Calcul numérique et mesures expérimentales de GONG & IBBETSON (1989). Cas du sol plat. . . .	184
4.30	Vitesse moyenne axiale grandes échelles à $x = 1,91 m$. Calcul numérique et mesures expérimentales de GONG & IBBETSON (1989). Cas du sol plat. . . .	185
4.31	Profils de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse aux abscisses $x = 1,71 m$ et $x = 1,91 m$. Calcul numérique et mesures expérimentales de GONG & IBBETSON (1989). Cas du sol plat.	185
4.32	Profils de moyennes glissantes de la vitesse axiale grandes échelles.	189
4.33	Profils des moyennes glissantes de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations axiales et verticales de la vitesse grandes échelles.	190

4.34	Vitesse moyenne axiale grandes échelles calculée avec différents intervalles de temps à $z = 3$ mm.	191
4.35	Vitesse moyenne axiale rapportée à la vitesse extérieure pour cinq positions sur la colline en fonction de la hauteur sur le terrain rapportée à la hauteur du sommet.	192
4.36	Différence entre la vitesse moyenne axiale perturbée en non perturbée par la présence de la colline rapportée à la vitesse moyenne axiale non perturbée pour cinq positions sur la colline en fonction de la hauteur sur le terrain rapportée à la hauteur du sommet.	193
4.37	Différence entre les moyennes des énergies cinétiques turbulentes des fluctuations de la vitesse axiale perturbée en non perturbée par la présence de la colline rapportée à la moyenne de l'énergie cinétique turbulente de la fluctuation de vitesse axiale non perturbée pour cinq positions comme fonction de la hauteur sur le terrain rapportée à la hauteur du sommet.	194
4.38	Différence entre les moyennes des énergies cinétiques turbulentes des fluctuations de la vitesse transversale perturbée en non perturbée par la présence de la colline rapportée à la moyenne de l'énergie cinétique turbulente de la fluctuation de vitesse transversale non perturbée pour cinq positions comme fonction de la hauteur sur le terrain rapportée à la hauteur du sommet. . .	195
4.39	Différence entre les moyennes des énergies cinétiques turbulentes des fluctuations de la vitesse verticale perturbée en non perturbée par la présence de la colline rapportée à la moyenne de l'énergie cinétique turbulente de la fluctuation de vitesse verticale non perturbée pour cinq positions comme fonction de la hauteur sur le terrain rapportée à la hauteur du sommet. . .	196
5.1	Disposition des boîtes du maillage de calcul et stations de mesure de la concentration de propane (FACKRELL & ROBINS (1982)).	202
5.2	Evolution de la quantité des particules (NP) dans le domaine de calcul. . .	203
5.3	Profils de la concentration moyenne du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapportés à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 0,96\delta$	205
5.4	Profils de la concentration moyenne du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapportés à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 1,92\delta$	205
5.5	Profils de la concentration moyenne du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapportés à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 2,88\delta$	206
5.6	Profils de la concentration moyenne du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapportés à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 3,83\delta$	206
5.7	Profils de la concentration moyenne du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapportés à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 4,79\delta$	207
5.8	Profils de l'écart-type de la concentration du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapporté à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 0,96\delta$.	207
5.9	Profils de l'écart-type de la concentration du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapporté à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 1,92\delta$.	208

5.10	Profils de l'écart-type de la concentration du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapporté à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 2,88\delta$.	208
5.11	Profils de l'écart-type de la concentration du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapporté à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 3,83\delta$.	209
5.12	Profils de l'écart-type de la concentration du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapporté à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 4,79\delta$.	209
5.13	Panaches instantanés des particules fluides.	210
5.14	Trajectoires de particules fluides éjectées de la source.	211
5.15	Evolution de la vitesse longitudinale d'une particule fluide dans son parcours en aval de la source.	212
5.16	Evolution de la vitesse verticale d'une particule fluide.	212
5.17	Profils de la concentration de CO_2 en amont d'une colline bi-dimensionnelle.	215
5.18	Profils de la concentration de CO_2 en aval d'une colline bi-dimensionnelle.	215
5.19	Courbes de concentration de CO_2 dans le plan perpendiculaire à la direction de l'écoulement sur le sommet d'une colline bidimensionnelle.	216
5.20	Profils de la concentration de CO_2 au pied en amont d'une colline bi-dimensionnelle. Comparation à deux hauteurs de source différentes.	218
5.21	Profils de la concentration de CO_2 à demi-pente en amont d'une colline bi-dimensionnelle. Comparation à deux hauteurs de source différentes.	218
5.22	Profils de la concentration de CO_2 au sommet d'une colline bi-dimensionnelle. Comparation à deux hauteurs de source différentes.	219
5.23	Profils de la concentration de CO_2 à demi-ente en aval d'une colline bi-dimensionnelle. Comparation à deux hauteurs de source différentes.	219
5.24	Profils de la concentration de CO_2 au pied en aval d'une colline bi-dimensionnelle. Comparation à deux hauteurs de source différentes.	220
5.25	Profils de flux de masse turbulents verticaux de CO_2 au centre du panache dans le cas d'une source placée plus bas que la hauteur de la demi-pente d'une colline bidimensionnelle.	222
5.26	Profils de flux de masse turbulents verticaux de CO_2 au centre du panache dans le cas d'une source placée plus haut que la hauteur de la demi-pente d'une colline bidimensionnelle.	222
5.27	Profils de flux de masse axiaux de CO_2 au centre du panache dans le cas d'une source placée plus bas que la hauteur de la demi-pente d'une colline bidimensionnelle.	223
5.28	Profils de flux de masse axiaux de CO_2 au centre du panache dans le cas d'une source placée plus haut que la hauteur de la demi-pente d'une colline bidimensionnelle.	223
5.29	Evolution des flux de masse axiaux totaux.	224
6.1	Profils moyens de l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation dans la couche limite de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).	233
6.2	Profil moyen de la taille d'une boîte de mélange, calculé selon l'équation (6.7).	234

6.3	Profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 0,96\delta$	243
6.4	Profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 1,92\delta$	243
6.5	Profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 2,88\delta$	244
6.6	Profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 3,83\delta$	244
6.7	Profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 4,79\delta$	245
6.8	Profils de l'écart-type de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 0,96\delta$	245
6.9	Profils de l'écart-type de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 1,92\delta$	246
6.10	Profils de l'écart-type de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 2,88\delta$	246
6.11	Profils de l'écart-type de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 3,83\delta$	247
6.12	Profils de l'écart-type de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 4,79\delta$	247
6.13	Profils des flux de masse turbulents verticaux de la fraction de mélange FM' des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 0,96\delta$	248
6.14	Profils des flux de masse turbulents verticaux de la fraction de mélange FM' des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 1,92\delta$	248
6.15	Profils des flux de masse turbulents verticaux de la fraction de mélange FM' des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 2,88\delta$	249
6.16	Profils des flux de masse turbulents verticaux de la fraction de mélange FM' des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 3,83\delta$	249
6.17	Profils des flux de masse turbulents verticaux de la fraction de mélange FM' des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 4,79\delta$	250
6.18	Profils de la concentration des espèces chimiques réactives NO , O_3 et $NO_2 + O_2$ rapportés à sa valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 0,96\delta$	250
6.19	Profils de la concentration des espèces chimiques réactives NO , O_3 et $NO_2 + O_2$ rapportés à sa valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 1,92\delta$	251
6.20	Profils de la concentration des espèces chimiques réactives NO , O_3 et $NO_2 + O_2$ rapportés à sa valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 2,88\delta$	251
6.21	Profils de la concentration des espèces chimiques réactives NO , O_3 et $NO_2 + O_2$ rapportés à sa valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 3,83\delta$	252
6.22	Profils de la concentration des espèces chimiques réactives NO , O_3 et $NO_2 + O_2$ rapportés à sa valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 4,79\delta$	252
6.23	Evolution spatiale sur l'axe du panache de la valeur de la concentration moyenne des l'espèces chimiques réactives	253

6.24	Evolution de la hauteur du panache et hauteurs maximale et minimale de la concentration de $NO = 2ppm$	253
6.25	Profils du coefficient d'intensité de ségrégation des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 0,96\delta$	254
6.26	Profils du coefficient d'intensité de ségrégation des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 1,92\delta$	254
6.27	Profils du coefficient d'intensité de ségrégation des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 2,88\delta$	255
6.28	Profils du coefficient d'intensité de ségrégation des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 3,83\delta$	255
6.29	Profils du coefficient d'intensité de ségrégation des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 4,79\delta$	256
6.30	Evolution spatiale en aval de la source pour le coefficient D_s du modèle de corrélation des fluctuations turbulentes de la concentration des espèces chimiques réactives	256
6.31	Evolution spatial du coefficient d'intensité de ségrégation I_s des espèces chimiques NO et O_3 en aval de la source	260
7.1	Situation géographique de la zone d'étude. Diamante - Entre Ríos - Argentine.	264
7.2	Secteur de Carte Topographique de la zone d'étude. Village de <i>Las Masitas</i> . Diamante - Entre Ríos - Argentine.	265
7.3	Site d'installation hypothétique d'une usine près du village de <i>Las Masitas</i> .	266
7.4	Modèle topographique du terrain de la zone d'étude. Vue aérienne des niveaux du relief.	266
7.5	Modèle topographique du terrain de la zone d'étude. Vue tridimensionnelle des niveau du relief.	267
7.6	Extrait du registre des grandeurs météorologiques obtenues par la station automatique installée dans le village.	269
7.7	Profils de la vitesse moyenne du vent sur le terrain et sur le fleuve.	271
7.8	Vue aérienne du panache de NO sur le village 3,5 minutes après l'initialisation du rejet.	275
7.9	Vue latérale depuis le sud du panache de NO sur le village 3,5 minutes après l'initialisation du rejet.	276
7.10	Zoom de la vue latérale depuis le sud du panache de NO sur le village 3,5 minutes après l'initialisation du rejet.	277
7.11	Emplacements des sites choisis pour obtenir les profils de la concentration des espèces chimiques réactives.	278
7.12	Profils des concentrations de NO calculées en aval de la source.	279
7.13	Profils des concentrations de NO calculées en aval de la source (continuation).	279
7.14	Profils de la concentration d'espèces chimiques réactives rapportées à la valeur maximale. Station A : $x - x_s = 140 m$	282
7.15	Profils de la concentration d'espèces chimiques réactives rapportées à la valeur maximale. Station B : $x - x_s = 320 m$	282

7.16	Profils de la concentration d'espèces chimiques réactives rapportées à la valeur maximale. Station C : $x - x_s = 500 \text{ m}$	283
7.17	Profils de la concentration d'espèces chimiques réactives rapportées à la valeur maximale. Station D : $x - x_s = 680 \text{ m}$	283
7.18	Profils de la concentration d'espèces chimiques réactives rapportées à la valeur maximale. Station E : $x - x_s = 860 \text{ m}$	284
7.19	Profils de la concentration d'espèces chimiques réactives rapportées à la valeur maximale. Station F : $x - x_s = 1040 \text{ m}$	284
7.20	Profils de l'évolution de la concentration de NO et de l'altitude du centre du panache avec les niveaux de concentration $C_{NO} = 2 \text{ ppm}$	285
7.21	Evolution de l'altitude du centre du panache de NO et les niveaux de concentration $C_{NO} = 2 \text{ ppm}$	285
7.22	Profils de l'évolution de la hauteur (par rapport au sol) du panache de NO et les niveaux de concentration $C_{NO} = 2 \text{ ppm}$	286
7.23	Concentration instantanée de NO au niveaux du sol à $t = 4 \text{ minutes}$	286
B.1	Schéma d'interpolation tri-linéaire des polynômes de Lagrange.	301
B.2	Schéma d'interpolation barycentrique.	303
C.1	Exemple de calcul de la concentration d'espèces dans une boîte de mélange.	307
D.1	Problème de diffusion avec O_3 appauvri autour du panache de NO et sa solution.	310

Notations

Indices et exposants

Indices et exposants	Définition
\mathcal{G}^0	Valeur initial de la grandeur \mathcal{G} .
$\overline{\mathcal{G}}$	Valeur moyenne temporelle de la grandeur \mathcal{G} obtenue à une position de repère fixe (Valeur moyenne eulérienne).
$\langle \mathcal{G} \rangle$	Valeur moyenne temporelle de la grandeur \mathcal{G} de repère movil en suivant la trajectoire d'une particule dans un écoulement (Valeur moyenne Lagrangienne).
\mathcal{G}'	Fluctuation associée à la moyenne spatial de la grandeur \mathcal{G} .
$\tilde{\mathcal{G}}$	Valeur de la grandeur \mathcal{G} ponderée par la densité moyenne horizontelle ($\bar{\rho}$).
\mathcal{G}^\oplus	Filtre spatial de taille Δ appliqué à la grandeur \mathcal{G} .
\mathcal{G}^\top	Filtre spatial de taille $\alpha\Delta$ ($\alpha \in \mathbf{R}$ et $2 \leq \alpha \leq 3$) appliqué à la grandeur \mathcal{G} .
\mathcal{G}^\ominus	Valeur résiduelle après d'avoir appliquée un filtre de taille Δ à la grandeur \mathcal{G} .
\mathcal{G}^\perp	Valeur résiduelle après d'avoir appliquée un filtre de taille $\alpha\Delta$ à la grandeur \mathcal{G} .
$\vec{\mathcal{G}}$	Vecteur de la grandeur \mathcal{G} .
\mathcal{G}_i	$i^{\text{ième}}$ composante de $\vec{\mathcal{G}}$.
\mathcal{G}_{ij}	Composante du tenseur \mathcal{G} située à la $i^{\text{ième}}$ ligne et $j^{\text{ième}}$ colonne.
\mathcal{G}_{ij}^a	Partie anisotrope de \mathcal{G}_{ij} .
\mathcal{G}_0	Valeur de référence de la grandeur \mathcal{G} .
$\mathcal{G}_{(m)}$	Valeur de la grandeur \mathcal{G} correspondant à la position du centre de la maille (m) du millage de calcul numérique.
\mathcal{G}_{tr}	Valeur de la grandeur \mathcal{G} correspondant au niveau de la tropopause.

Lettres latines

Symbole	Unité	Définition
a	-	Facteur dans le terme déterministe de l'équation de <i>Langevin</i> sous sa forme discrète.
A	-	Rapport entre la constante du gaz pour l'air sec et humide.
A_s	m^2	Aire de la source de rejet du gaz ou des particules solides.
$\vec{A}(t)$	$m s^{-2}$	Vecteur de l'accélération de <i>Langevin</i> .
b	-	Facteur du terme aléatoire dans la équation de <i>Langevin</i> sous sa forme discrète.
b_{ij}	-	Tenseur d'anisotropie dans l'équation stochastique lagrangienne.
B	$m s^{-2}$	Terme qui tient compte des effets de la bouyance dans l'équation de la quantité de mouvement.
c_m	<i>ppm</i>	Concentration d'un espèce chimique portée par la particule fluide m .
c_{mA}	<i>ppm</i>	Concentration de l'espèce chimique A portée par la particule fluide m .
c_{mB}	<i>ppm</i>	Concentration de l'espèce chimique B portée par la particule fluide m .
c_n	<i>ppm</i>	Concentration d'un espèce chimique portée par la particule fluide n .
C	$kg m^{-1}$	Rapport entre le coefficient de viscosité turbulent (k_m) et la norme du tenseur de déformation filtré ($ \underline{S}^\oplus $).
C_0	-	Constante de <i>Kolmogorov</i> .
C_{dif}	-	Rapport entre le temps caractéristique de la turbulence et le temps caractéristique de la diffusion moléculaire.
C_{dm}	-	Coefficient de frottement dynamique.
C_{dm_T}	-	Coefficient de frottement dynamique sur une surface solide rugueuse.
C_{dm_F}	-	Coefficient de frottement dynamique sur une surface liquide rugueuse.
C_{dh}	-	Coefficient de frottement scalaire.
C_g	$m s^{-1}$	Vitesse de propagation des ondes de gravité.
C_n	-	Concentration de une espèce chimique par rapport à la concentration initiale.
C_p	$kcal kg^{-1} \text{ } ^\circ K^{-1}$	Chaleur spécifique de l'air à pression constante.
C_s	-	Constante de <i>Smagorinsky</i> .

Symbole	Unité	Définition
C_u	-	Coefficient de correction des fluctuations de la vitesse axiale.
C_v	-	Coefficient de correction des fluctuations de la vitesse transverselle.
C_w	-	Coefficient de correction des fluctuations de la vitesse verticale.
C_ε	-	Constante du modèle de longueur de mélange pour le terme de dissipation total (grandes échelles et sous-maille) de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille (E^\ominus).
C_{ij}	$m^2 s^{-2}$	Tenseur croisé issue de l'application du filtre de taille Δ à la corrélation de vitesse.
$C_{ij}^{(M)}$	$m^2 s^{-2}$	Tenseur croisé modifié issue d'une double application du filtre de taille Δ sur la corrélation de vitesse.
$C_{ij}^{(M\top)}$	$m^2 s^{-2}$	Tenseur croisé modifié issue d'une double application des filtres de différentes tailles (Δ et $\alpha\Delta$) sur la corrélation de vitesse.
d_s	m	Diamètre de la source de rejet de gaz ou des particules solides.
Da	-	Nombre de <i>Damköler</i> .
D_s	m^{-2}	Coefficient du modèle à gradient de la corrélation des fluctuations de concentrations des espèces chimiques réactives.
\mathcal{D}_β	m	Distance euclidienne entre la particule p et le nœud β dans une maille de calcul numérique.
e	$kcal kg^{-1} \text{ } ^\circ K^{-1}$	Rapport entre la constante du gaz pour l'air sec et celle de la vapeur d'eau.
E	$m^2 s^{-2}$	Energie cinétique turbulente.
$F(t)$	$kgm s^{-2}$	Force de <i>Langevin</i> .
F_i	$m s^{-2}$	Accélération de l'écoulement produit par les forces de pression dans la résolution des équations de <i>Navier-Stockes</i> de type RANS (<i>Reynolds Average Navier-Stockes</i>).
FM	-	Fraction de mélange des espèces chimiques.
g	$m s^{-2}$	Accélération de la gravité.
\sqrt{G}	-	Déterminant des Jacobiens de la matrice de transformation des coordonnées.
$G(\vec{r})$	m^{-1}	Fonction de filtrage spatial.
\mathcal{G}_{ij}	$m s^{-2}$	Tenseur de la partie déterministe du modèle stochastique lagrangien.

Symbole	Unité	Définition
h	m	Hauteur du sommet d'une colline.
h_{q_j}	$kg\ m^{-1}\ s^{-2}$	$j^{ième}$ composante du flux turbulent des substances d'eau.
h_{θ_j}	$kg\ m^{-1}\ s^{-2}$	$j^{ième}$ composante du flux turbulent de la température potentielle dans l'équation de transport filtrée.
H_{θ_j}	$kg\ m^{-1}\ s^{-2}$	$j^{ième}$ composante du flux turbulent de la température potentielle dans l'équation de transport doublement filtrée.
I_s	-	Coefficient d'intensité de ségrégation des espèces chimiques réactives.
J_1, J_2, J_3	-	Jacobien de transformation des coordonnées.
k_v	-	Constante de <i>Von-Kármán</i> .
k_{vT}	-	Constante de <i>Von-Kármán</i> pour une surface solide rugueuse.
k_{vF}	-	Constante de <i>Von-Kármán</i> pour une surface liquide rugueuse.
k_z	$cm^2\ s^{-1}$	Coefficient de diffusivité turbulente.
K_0	$ppm^{-1}\ s^{-1}$	Constante cinétique de réaction chimique.
K_d	$ppm^{-1}\ s^{-1}$	Constante cinétique de réaction chimique directe.
K_i	$ppm^{-1}\ s^{-1}$	Constante cinétique de réaction chimique inverse.
l	m	Echelle caractéristique d'une structure dans un écoulement turbulent.
L	m	Longueur d'Obukhov.
L_c	m	Distance entre les positions correspondants à la demi-hauteur d'une colline gaussienne.
L_l	m	Dimension moyenne des plus gross turbillons énergétiques.
\mathcal{L}_{ij}	$m^2\ s^{-2}$	Tenseur <i>Leonard</i> issue de l'application du filtre de taille Δ sur la corrélation de vitesse.
$\mathcal{L}_{ij}^{(M)}$	$m^2\ s^{-2}$	Tenseur <i>Leonard</i> modifié issue d'une double application du filtre de taille Δ sur la corrélation de vitesse.
$\mathcal{L}_{ij}^{(M^T)}$	$m^2\ s^{-2}$	Tenseur <i>Leonard</i> modifié issue d'une double application du filtres de différent tailles (Δ et $\alpha\Delta$) sur la corrélation de vitesse.
\mathcal{L}^n	-	Coefficient d'ordre n des Polynômes de <i>Lagrange</i> .
m	kg	Masse d'une particule fluide.

Symbole	Unité	Définition
\mathcal{M}_{ij}	s^{-2}	Tenseur différence des produits des tenseurs déformation filtrés avec filtres de différent taille.
N	s^{-1}	Fréquence de <i>Brunt-Väisälä</i> .
N_p	-	Nombre des particules fluides.
\mathcal{N}_j	$m^{-1} s^{-1} \circ K$	$j^{ième}$ composante de la différence de corrélation déformation-gradient de température potentielle.
p	Pa	Pression atmosphérique.
\mathcal{P}	-	Fonction densité de probabilité.
$\mathcal{P}_{\mathcal{L}}$	-	Fonction densité de probabilité filtrée correspondant au champ de vitesse.
Pr	-	Nombre de <i>Prandtl</i> .
q_{li}	$kg m^{-3}$	Rélation de mélange d'eau à l'état liquide avec l'air.
q_s	$kg m^{-3}$	Rélation de mélange de la vapeur d'eau rapportée à celle de la saturation dans l'air.
q_v	$kg m^{-3}$	Rélation de mélange de la vapeur d'eau avec l'air.
q_ϕ	$kg m^{-3}$	Rélation de mélange d'eau avec l'air.
\mathcal{Q}_j	$kg m^{-2} s^{-1} \circ K$	$j^{ième}$ composante de la différence de corrélation vitesse-température potentielle (la vitesse est pondérée par la densité de l'air).
\vec{r}	m	Vecteur position dans l'espace euclidienne du repère mobile.
R_d	$J kg^{-3} \circ K^{-1}$	Constante universelle de l'équation des gaz parfaits pour l'air sec.
Re	-	Nombre de <i>Reynolds</i> bati sur l'épaisseur de la couche limite.
Re_t	-	Nombre de <i>Reynolds</i> caractéristique de la turbulence.
R_w	$J kg^{-3} \circ K^{-1}$	Constante universelle de l'équation des gaz parfaits pour l'air humide.
RH	-	Humidité de l'air par rapport à celle de la saturation.
$\mathcal{R}i_b$	-	Nombre de <i>Richardson</i> .
\mathcal{R}_{ij}	$m^2 s^{-2}$	Tenseur <i>Reynolds</i> de sous-maille issue de l'application du filtre de taille Δ sur la corrélation de vitesse.
$\mathcal{R}_{ij}^{(M)}$	$m^2 s^{-2}$	Tenseur <i>Reynolds</i> de sous-maille modifié issue d'une double application du filtre de taille Δ sur la corrélation de vitesse.
$\mathcal{R}_{ij}^{(MT)}$	$m^2 s^{-2}$	Tenseur <i>Reynolds</i> de sous-maille modifié issue d'une double application des filtres de différent tailles (Δ et $\alpha\Delta$) sur la corrélation de vitesse.
$\mathcal{R}_{nd}(0)$	-	Valeurs aléatoires équiprobables sur l'intervalle $[0, 1]$.

Symbole	Unité	Définition
$\vec{s}(t)$	-	Vecteur des variables d'état lagrangienne (position, vitesse, etc).
S_{ij}	s^{-1}	Tenseur de déformation.
$ S^\oplus $	s^{-1}	Norme du tenseur de déformation filtré avec un filtre de taille Δ .
$S_{q\phi}$	$kg\ m^{-2}\ s^{-2}$	Terme qui représente les sources (signe positive) ou les puits (signe négative) dans l'équation de transport des mélanges d'eau avec l'air.
S_θ	$kg\ m^{-2}\ s^{-2}$	Terme qui représente les sources (signe positive) ou les puits (signe négative) dans l'équation de transport de la température potentielle.
t	s	Variable temporelle.
t_e	s	Temps de stabilité de calcul numérique.
t_l	s	Temps caractéristique d'une structure dans un écoulement turbulent.
T	$^\circ K$	Température absolue.
T_a	s	Temps intégrale de l'accélération Lagrangienne.
T_{ch}	s	Temps caractéristique de la réaction chimique des espèces.
T_{dif}	s	Temps caractéristique de la diffusion moléculaire.
T_t	s	Temps caractéristique de la turbulence.
T_L	s	Temps intégrale de la vitesse Lagrangienne.
T_R	s	Temps de relaxation de la vitesse Lagrangienne vers sa valeur moyenne.
u	$m\ s^{-1}$	Composante axiale de la vitesse eulérienne.
u_i	$m\ s^{-1}$	$i^{ième}$ composante de la vitesse eulérienne.
u_l	$m\ s^{-1}$	Vitesse caractéristique d'une structure dans un écoulement turbulent.
u'_t	$m\ s^{-1}$	Vitesse caractéristique de la turbulence.
u_*	$m\ s^{-1}$	Vitesse de frottement.
u_{*F}	$m\ s^{-1}$	Vitesse de frottement sur une surface liquide rugueuse.
u_{*T}	$m\ s^{-1}$	Vitesse de frottement sur une surface solide rugueuse.
U_e	$m\ s^{-1}$	Vitesse extérieur à la couche limite.
U_s	$m\ s^{-1}$	Vitesse de l'écoulement à la hauteur de la source de rejet du gaz ou des particules solides.
\hat{U}	$m\ s^{-1}$	Composante axiale de la vitesse Lagrangienne.
\hat{U}_i	$m\ s^{-1}$	$i^{ième}$ composante de la vitesse Lagrangienne.
$\vec{\hat{U}}$	$m\ s^{-1}$	Vecteur vitesse Lagrangienne.

Symbole	Unité	Définition
v	$m s^{-1}$	Composante transverselle de la vitesse eulérienne.
V_{qs}	$m s^{-1}$	Vitesse terminal des hydrométéoros.
V_s	$m s^{-1}$	Vitesse du son (à niveau de la mer $V_s = 340,29 m s^{-1}$).
\vec{V}	$m s^{-1}$	Vecteur vitesse eulérienne.
\hat{V}	$m s^{-1}$	Composante transverselle de la vitesse Lagrangienne.
$ \vec{V}_A $	$m s^{-1}$	Module du vecteur vitesse obtenue à la hauteur de la première maille de calcul au-dessus de la paroi.
$ \vec{V}_{Amin} $	$m s^{-1}$	Module du vecteur vitesse minimale imposée à la hauteur de la première maille de calcul au-dessus de la paroi.
w	$m s^{-1}$	Composante verticale de la vitesse eulérienne.
\hat{W}	$m s^{-1}$	Composante verticale de la vitesse Lagrangienne.
x	m	Coordonnée axiale (abscisse) dans l'espace euclidienne du repère fixe dans le domaine de calcul numérique.
x_i	m	$i^{ième}$ composante du vecteur position dans l'espace euclidienne du repère fixe.
x_s	m	Abscisse d'emplacement de la source de rejet du gaz ou des particules solides.
\vec{x}	m	Vecteur position dans l'espace euclidienne du repère fixe.
y	m	Coordonnée transverselle dans l'espace euclidienne du repère fixe dans le domaine de calcul numérique.
z	m	Coordonnée verticale dans l'espace euclidienne du repère fixe dans le domaine de calcul numérique.
z_0	m	Hauteur de la rugosité caractéristique du sol.
z_{0T}	m	Hauteur de la rugosité caractéristique sur une surface solide.
z_{0F}	m	Hauteur de la rugosité caractéristique sur une surface liquide.
z^+	-	Coordonnée verticale dans l'espace euclidienne du repère fixe en unités de paroi.
z_T	m	Hauteur du domaine de calcul numérique.
z_s	m	Hauteur de la source de rejet du gaz ou des particules solides.
z''	m	Coordonnée verticale relative au sol.
z_{ref}	m	Élévation d'un plane horizontelle de référence.

Lettres grecques

Symbole	Unité	Définition
α	-	Rapport entre la taille du filtre test $(.)^\top$ et la taille du filtre spatial $(.)^\oplus$.
α_1	-	Coefficient du terme isotrope pour le tenseur \mathcal{G}_{ij} de l'équation stochastique lagrangienne.
α_2	-	Coefficient du terme anisotrope pour le tenseur \mathcal{G}_{ij} de l'équation stochastique lagrangienne.
α_u	s^{-1}	Facteur du terme déterministe dans l'équation de <i>Langevin</i> sous sa forme continue.
β_u	s^{-1}	Facteur du terme aléatoire dans l'équation de <i>Langevin</i> sous sa forme continue.
γ_u	$m s^{-2}$	Terme de l'accélération dans l'équation stochastique lagrangienne.
δ	m	Épaisseur de la couche limite.
δ_{ij}	-	Symbole de Kronecker
$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$		
Δ	m	Taille caractéristique du maillage ou taille du filtre $(.)^\oplus$.
Δt	s	Pas de temps de calcul numérique.
Δt_G	s	Grand pas de temps du calcul numérique.
Δt_p	s	Petit pas de temps du calcul numérique.
ΔT_e	s	Intervalle de temps entre registres des grandeurs instantanées obtenues dans la simulation numérique.
Δ_A	m	Taille verticale de la première maille au-dessus du sol.
Δb	m	Taille des boîtes de mélange des espèces chimiques.
Δx	m	Taille du maillage dans la direction axiale.
Δy	m	Taille du maillage dans la direction transverselle.
Δz	m	Taille du maillage dans la direction verticale.
Δz_2	m	Taille verticale moyenne de la sub-zone d'étirement vertical du maillage de calcul numérique.
Δz_m	m	Taille verticale moyenne du maillage de calcul numérique.

Symbole	Unité	Définition
Δz_{min}	m	Taille verticale des mailles plus proches à la paroi.
Δz_{max}	m	Taille verticale des mailles plus proche à la hauteur du domaine de calcul.
ε_{ij}	$kg\ m^{-1}\ s^{-3}$	Tenseur de la taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente totale.
ε_{vij}	$kg\ m^{-1}\ s^{-3}$	Tenseur de la taux de dissipation visqueuse de l'énergie cinétique turbulente.
ε_{SGSij}	$kg\ m^{-1}\ s^{-3}$	Tenseur de la taux de dissipation de sous-maille de l'énergie cinétique turbulente.
$\mathcal{E}rr$	$kg\ m^{-1}\ s^{-2}$	Fonction <i>Erreur</i> dans la détermination de la constante de <i>Smagorinsky</i> .
ϵ	-	Tenseur antisymétrique.
$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & ijk = 123, 231, 321, \\ 0, & \text{deux indices répétés,} \\ -1, & ijk = 321, 213, 132. \end{cases}$		
ζ	m	Coordonnée verticale dans le repère curviligne.
η	m	Coordonnée transverselle dans le repère curviligne.
θ	$^{\circ}K$	Température potentielle.
θ_A	$^{\circ}K$	Température potentielle correspondant à la première maille au-dessus de la paroi.
θ_v	$^{\circ}K$	Température potentielle virtuelle.
\mathcal{K}	$kg\ m^{-1}\ s^{-2}$	Coefficient de masse qui exprime les changement de volume d'un corps par rapport aux changement de la pression.
λ	m	Echelle de <i>Taylor</i> de la turbulence.
μ	$kg\ m^{-1}\ s^{-1}$	Viscosité dynamique du fluide.
ν	$m^2\ s^{-1}$	Viscosité cinématique du fluide.
$\nu(t)$	-	Variable aléatoire.
ν_t	$m\ s^{-2}$	Viscosité turbulente.
ν_K	m	Echelle de <i>Kolmogorov</i> .
ξ	m	Coordonnée axiale dans le repère curviligne.
$\vec{\xi}(t)$	-	Variable aléatoire.
Π	-	Fonction <i>Exner</i> .
ρ	$kg\ m^{-3}$	Densité de l'air.
ϱ	-	Densité de probabilité de <i>grains fines</i> .
$\sigma_{\tilde{W}}^2$	$m^2\ s^{-2}$	Ecart-type des fluctuations de la composante verticale de la vitesse Lagrangienne.

Symbole	Unité	Définition
τ	s	Intervalle infinitésimale de temps.
τ_c	s	Temps de collision des molécules dans un écoulement turbulent.
\mathcal{T}_{ij}	$kg\ m^{-1}\ s^{-2}$	Tenseur de contraintes visqueuses.
$\mathcal{T}_{13} _p$	$kg\ m^{-1}\ s^{-2}$	Composante dans le plane (x, z) du tenseur de contraintes visqueuses de l'écoulement exercé sur la paroi.
$\mathcal{T}_{23} _p$	$kg\ m^{-1}\ s^{-2}$	Composante dans le plane (y, z) du tenseur de contraintes visqueuses de l'écoulement exercé sur la paroi.
ϕ	-	Grandeur scalaire.
φ	rad	Angle formé par la direction de la composante horizontale du vecteur vitesse et la direction axiale.
χ	-	Variable aléatoire gaussienne.
Ψ_h	-	Paramètre de stabilité atmosphérique pour un grandeur scalaire.
Ψ_m	-	Paramètre de stabilité atmosphérique pour un grandeur dynamique.
Ω	$rad\ s^{-1}$	Vitesse angulaire de rotation de la terre.

Introduction

Depuis plusieurs décennies, la question de la réduction de la pollution dans les zones urbaines est très importante d'un point de vue environnemental et de la protection de la santé aux échelles locale, régionale et globale. Dans les zones urbaines, on distingue environ 150 espèces chimiques principales en phases gazeuses, liquides et solides qui se mélangent, se transforment et interagissent à l'aide des phénomènes de transport turbulente. Ainsi, plusieurs milliers de réactions peuvent avoir lieu.

Cependant, on peut considérer six familles de polluants dans la canopée urbaine (SEINFELD (1986)) :

Dioxyde de soufre (SO_2) : Il est principalement dans les combustibles soufrés comme le fuel, le charbon ou le gasoil. Est généré lors de la combustion du pétrole et de la houille grasse, entre autres, au cours du raffinage du pétrole, pendant la combustion de moteurs et lors des transformations de minéraux métalliques en fonderie.

Oxydes d'azote (NO_x) : Il est produit par les centrales énergétiques et lors des combustions de carburants fossiles dans les moteurs automobiles. Les oxydes ainsi formés sont à la base de nouvelles réactions conduisant à la formation de polluants secondaires comme l'ozone (O_3).

Composés organiques volatiles (COV) : On appelle *composé organique* toute substance qui contient au moins un atome de carbone. Les composés organiques sont constitués des hydrocarbures et de leurs dérivés chimiques. Ils sont dits *volatiles* parce qu'ils émettent des vapeurs à température ambiante. Le méthane (CH_4) est un COV naturellement présent dans l'air ambiant, c'est pourquoi on le distingue des autres composés organiques volatiles dits *non méthaniques* ($COVNM$).

Les COV sont des substances organiques très légères et ont une réactivité photochimique. Ils comprennent une longue liste de substances individuelles dont plusieurs sont classifiées en tant que toxique par la Chambre du Commerce et d'Industrie de Paris *CCIP* dans la directive N° 99/13 du 11 mars 1999 relative aux émissions de COV dues à l'utilisation des solvants. Cette directive a imposé des valeurs limites par secteur d'activité pour les émissions canalisées et diffuses de COV et des obligations particulières concernant les solvants les plus toxiques (réduction, substitution). Au Canada, la Loi Canadienne sur la Protection de l'environnement *LCPE (1999)* a

aussi classifié ces composants dans son Annexe 1.

Les composés organiques tels que les aromatiques et les oléfines provoquent des irritations des yeux. Les aldéhydes irritent les muqueuses. Certains *COV* sont cancérigènes (benzène), d'autres sont toxiques. Sur la sécurité, au contact d'une source de chaleur, les *COV* présentent des risques importants d'incendie et d'explosion.

Ils constituent donc la principale source des problèmes de la qualité de l'air et de la pollution oxydante photochimique qui est responsable de la production d'ozone (O_3) troposphérique et des particules secondaires fines.

Les *COV* comprennent les hydrocarbures issus de l'évaporation de bacs de stockage pétroliers et les composés organiques provenant de procédés industrielles de combustion et de solvants. Les sources d'émission de *COV* se trouvent principalement dans les installations de génie des procédés et elles sont classifiées en émissions directes (telles celles produites par les cheminées) ou diffuses (comme les fuites d'équipement dans les opérations de chargement, les effluents, etc).

Ozone (O_3) : L'ozone est une variété allotropique de l'oxygène (O_2), oxidant très fort et plus lourd que l'air, il est instable chimiquement et il est le produit de la réaction entre molécules des composantes organiques volatiles (*COV*), oxides d'azote (NO_x), minoritairement hydroxiles (HO_x) et divers hydrocarbures (*HC*) catalysés par la lumière solaire.

L'ozone produit dans la stratosphère protège la terre contre les rayons ultraviolets, tandis que celui produit dans la troposphère a plusieurs effets pervers comme par exemple l'irritation des voies respiratoires, la diminution des récoltes céréalières, l'accélération de la corrosion de métaux, l'accélération du vieillissement des plastiques. L'ozone troposphérique est un polluant toxique, il est aussi le composant majeur du smog et un des gaz à effet de serre qui emprisonne le rayonnement thermique renvoyé par la surface de la terre et empêche ainsi de s'échapper.

Même si les précurseurs de la pollution par les NO_x proviennent principalement des régions urbaines, ils sont transportés sur des grandes distances par le vent et entraînent une production significative de O_3 troposphérique à l'échelle régionale et continentale (Figure 1).

Les plus fortes concentrations de O_3 troposphérique sont produites lors des chaudes journées ensoleillées et relativement calmes, du milieu à la fin de l'été, en fin de matinée et en début d'après-midi, notamment dans les régions soumises à une inversion de température où les phénomènes de convection (mouvement vertical des masses d'air par réchauffement du sol) sont inhibés par cette inversion en confinant la couche basse de la troposphère près du sol.

Les radicaux libres qui sont produits à l'aide de l'ozone troposphérique, sont responsables des effets toxiques sur les arbres. Ils freinent leur croissance et provoquent des lésions foliaires. Ces phénomènes ont une intensité qui est corrélée au taux d'exposition. Dans les feuilles bien développées, l'ozone provoque une augmentation des zones de nécroses (LAPIERRE *et al* (2003)) et rendent les arbres plus fragiles aux insectes et aux germes pathogènes en affaiblissant les systèmes racinaires et en les rendant plus

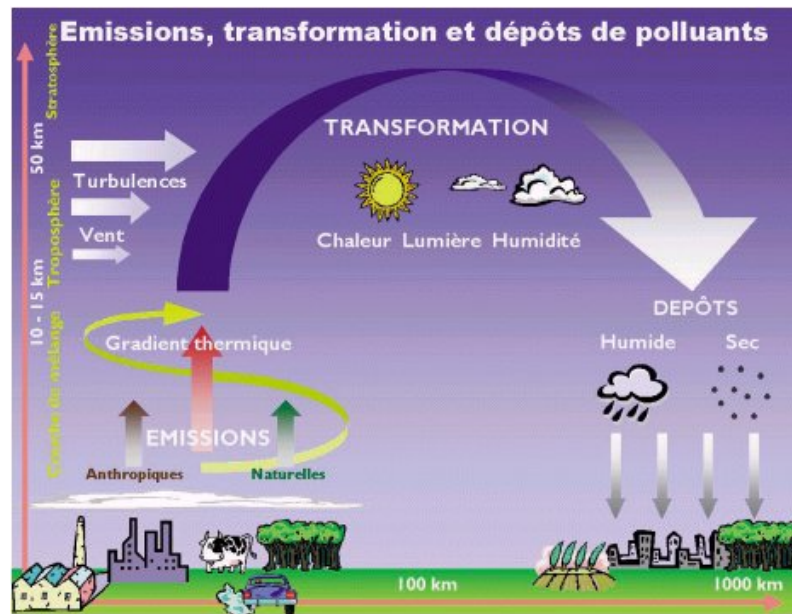


FIG. 1 – Sources d'émission de polluant et les phénomènes associés à sa transformation et dispersion dans l'atmosphère.

fragiles face au gel et aux champignons.

Oxides de carbone (CO_x) : Ils sont produits par la combustion des combustibles fossiles (moteurs, chauffages, incinérateurs). Le CO est transformé lors de l'oxydation en CO_2 qui est dissolu dans l'eau et absorbé par la végétation. Cependant, des taux importants de CO_2 sont responsables du phénomène d'effet de serre qui emprisonne les radiations émises par la terre vers l'espace en altérant le bilan radiatif du système *terre-atmosphère* et en provoquant une augmentation de la température moyenne annuelle normale responsable du changement climatique.

Le CO est un gaz très dangereux lors de sa respiration. Il se fixe sur l'hémoglobine du sang à la place de l'oxygène et conduit à une diminution de l'oxygénation du système nerveux. Cela peut être mortel en cas d'exposition prolongée.

Particules fines : Les particules fines sont celles qui se trouvent en suspension, organiques ou minéraux, naturelles (volcans, sel en suspension dans les mers) ou anthropiques (résidus de combustion) et qui ont des diamètres inférieurs à $10 \mu m$. Ces particules pénètrent au fond des voies respiratoires et contribuent aux irritations des bronches.

Une décroissance des niveaux de pollution peut être en principe atteinte par le contrôle des sources d'émission de NO_x et des COV . Cependant, l'efficacité de ce contrôle est dépendant des relations entre les polluants primaires (émissions directes produites par l'activité

antropogénique : NO_x , COV , SO_2 , CO , CH_4) et secondaires (produits de la réaction chimique des polluantes primaires (O_3 , NO_2 , CO_2) entre autres). SILLMAN *et al* (1990) montre que la production photochimique de O_3 troposphérique, en zones rurales, augmente avec les émissions des NO_x mais qu'elle est moins sensible aux émissions de COV . Par contre, en zones urbaines, les niveaux de O_3 peuvent être limités en diminuant les émissions de NO_x et des COV selon la situation météorologique (SILLMAN (1995)). Ces différences de comportement permettent de définir deux régimes photochimiques connus comme les régimes bas et haut de NO_x (KLEIMAN (1994)). Dans la région de transition entre ces deux régimes, la présence de multiples stades de comportement oscillatoire ont été étudiés par WHITE & DIETZ (1984), STEWART (1993) et (1995), POPPE & LUSTFELD (1996), HESS & MADRONICH (1997).

L'impact de la qualité de l'air à l'échelle régionale peut être mise en évidence par une description spatio-temporelle de la distribution des sources d'émission de polluants primaires, des données des variables météorologiques nécessaires pour pouvoir obtenir une description de la thermodynamique de l'atmosphère et d'une représentation correcte des phénomènes de transport/diffusion et des réactions chimiques des espèces dans la troposphère.

Actuellement, des modèles tri-dimensionnels sont utilisés pour mettre en évidence la dynamique et la distribution spatiale des espèces polluantes. La simulation des phénomènes de transport vertical (convection), horizontal (advection), de la diffusion turbulente, des transformations chimiques, des dépôt et des émissions des polluants est très complexe. Du fait de la non-linéarité, des couplages et de la quantité des espèces et des réactions à simuler, de tels modèles sont particulièrement coûteux en temps de calcul et en place mémoire. Le compromis entre le besoin de disposer des modèles de plus en plus précis, les contraintes informatiques et les incertitudes sur les données, constituent le défi majeur de la modélisation de la pollution atmosphérique.

Dans la plupart des cas, les modèles utilisés pour la simulation des épisodes de pollution permettent d'obtenir une description spatiale du flux de concentration des espèces à différentes échelles à partir du couplage des modèles de transport et des modèles de réactions chimiques.

La tâche principale de l'utilisation de cet outil est d'indiquer géographiquement les niveaux des retombées des polluants, à la hauteur de l'homme (risque par inhalation) ou au sol (risque par ingestion).

Il existent des modèles de dispersion assez simples, dits *gaussiens*, qui tiennent compte essentiellement du vent. Bien utilisés, ces modèles sont souvent suffisants pour un suivi sur le long terme en zones homogènes, mais en milieux accidentés, une modélisation tri-dimensionnelle (3D) plus sophistiquée s'impose. Ces modèles doivent prendre en compte le relief, la couverture du sol, des obstacles divers, la couverture nuageuse, le déclin du soleil, la distribution des sources de pollution ponctuelles et diffuses, etc.

Dans la catégorie des modèles 3D on peut faire une différence entre les modèles *hydro-*

statiques et *non-hydrostatiques*. Pour les premiers, on a le droit d'appliquer l'équation hydrostatique aux points situés sur une même verticale dans la troposphère, autrement dit, on est fondé de supposer qu'à tout instant, les forces s'exerçant verticalement sur une parcelle d'air donnée, sont pratiquement identiques à celles auxquelles elle serait soumise si à ce même instant elle se trouvait à l'état de repos. Le champ de pression est donc entièrement donné par la gravité. Cette hypothèse peut être applicable pour les échelles très grandes comme les échelles synoptiques allant de quelques centaines à quelques milliers de kilomètres et se prolongeant quelques jours en moyenne. Ces échelles ne sont pas appropriées pour étudier des phénomènes météorologiques locaux comme l'apparition, l'évolution et la disparition des tempêtes et des orages, les phénomènes de brises de mer, la convection, le transport et la précipitation des substances aqueuses, gazeuses ou solides (pluie, neige, particules solides ou gaz lourds) qui se produisent à une échelle plus petite, appelée *meso-échelle* et qui est de l'ordre des quelques centaines de kilomètres dans la direction horizontale et de l'ordre des quelques jours de vie en moyenne. Pour pouvoir modéliser ces échelles, on doit utiliser des modèles *non-hydrostatiques* qui tiennent compte des forces d'advection dans le bilan de masse, et de quantité de mouvement. Dans ce cas, les accélérations verticales qui se développent sont trop importantes pour accepter l'hypothèse hydrostatique.

Nous pouvons citer quelques travaux qui ont été faits avec des modèles 3D *non-hydrostatiques* couplés aux algorithmes de modélisation des réactions chimiques. TULET *et al* (1998) utilisent le modèle MESO-NH-C (LAFORE *et al* (1998)) pour simuler un épisode de pollution de NO_x , CO et O_3 sur la ville de Paris en août 1997. L'initialisation des grandeurs météorologiques a été faite à partir des données spatiales réelles et prédites. Ce modèle atmosphérique est couplé aux modules chimiques comportant 35 espèces et 126 réactions.

CALORI *et al* (1998) ont réalisé une étude des phénomènes de pollution d'ozone troposphérique dans la région de Lombardie (Italie) qui a eu lieu pendant l'été 1996. Pour cette simulation, ils ont utilisé le modèle CALGRID pour le transport et STEM-II pour la modélisation des réactions chimiques. L'inventaire d'émissions spatiales et temporelles a été collecté dans la base de données CORINAIR. Ils ont trouvé un bon accord entre les résultats de la modélisation et les données mesurées *in-situ*.

Ces modèles ont besoin des études expérimentales de la dynamique de l'écoulement et de la chimie pour pouvoir donner des résultats satisfaisants. Les données issues de ces études permettent de caler les différentes constantes des modèles et de comprendre les différents mécanismes physiques et chimiques contenus dans ces phénomènes. La littérature montre qu'il existe un nombre important de travaux expérimentaux en laboratoire et *in-situ* sur la dispersion de la pollution atmosphérique. Ces mesures portent essentiellement sur les valeurs de la vitesse moyenne de l'écoulement et sur leurs fluctuations, les flux de masse, la concentration moyenne des espèces chimiques et leurs fluctuations à différentes positions et avec différents types de relief et de caractéristiques de couverture du sol. La dispersion d'un scalaire passif issu de sources ponctuelles surélevées et près du sol sur un terrain plat

rugueu a été faite par FACKRELL & ROBINS (1982). Le même type d'expérience mais avec la présence d'une colline gaussienne de faible pente (sans la présence d'une zone de recirculation de l'écoulement en aval de la colline) a été étudié par GONG & IBBETSON (1989), GONG (1991) et ZEGADI *et al* (1994) en atmosphère neutre et stable entant que ARYA *et al* (1987) a fait des expériences avec une colline à forte pente. Ils montrent que plus les collines sont étroites, plus la concentration au sol diminue tandis que le panache s'étend verticalement. La dispersion du panache sur une colline de forte pente est favorisée par la présence de la zone de recirculation. La position de la source qui produit une dispersion la plus efficace est celle située à l'intérieur de la zone de recirculation.

AYRAULT & SIMOËNS (1995) et AYRAULT *et al* (1995) ont étudié la dispersion de gaz neutre et lourd ejectés depuis une source placée au sol et en aval d'un obstacle. SIMOËNS *et al* (1995), VINÇONT (1999), VINÇONT *et al* (2000) ont fait des mesures de concentration et de flux turbulents d'un scalaire passif issue d'une source linéaire entre deux obstacles.

Sur le transport des particules solides, on peut citer les travaux expérimentaux de SNYDER & LUMLEY (1971) sur la dispersion des particules fines de différentes tailles et densités, rejetées verticalement. TANIÈRE *et al* (1997) mesurent les propriétés statistiques de l'écoulement et des particules solides ejectées horizontalement par rapport au sol. ROGERS & EATON (1990) montrent les résultats de l'expérience du rejet de deux différentes tailles de particules solides fines ($50\mu m$ et $90\mu m$) dans un écoulement turbulent vertical avec une charge de seulement 2% de la masse. Les effets de l'interaction des particules sur les propriétés statistiques de l'écoulement comme sa vitesse moyenne et ses fluctuations ne sont pas affectées par la présence des particules.

Sur la modélisation de ces phénomènes, nous adoptons la philosophie de travail de ZHUANG *et al* (1989), SAWFORD & GUEST (1991), POZORSKI & MINIER (1998). Ils prennent l'équation de mouvement des particules fluides le long de la trajectoire des particules solides et la décomposent en une partie déterministe, qui tient compte des effets d'inertie et de la gravité, et une partie aléatoire, qui modélise les phénomènes d'agitation moléculaire. Les vitesses et les trajectoires des particules solides sont liées à celles des particules fluides obtenues par modélisation. Récemment, AGUIRRE *et al* (2002) montrent les résultats de cette technique appliquée à la simulation de l'expérience de SNYDER & LUMLEY (1971) en turbulence homogène isotrope et AGUIRRE *et al* (2004) pour les particules lourdes dans une couche limite turbulente.

La technique de suivi des particules fluides peut-être aussi utilisée pour appliquer des modèles de mélange et de réactions chimiques d'espèces. AGUIRRE *et al* (2003) et VINKOVIC *et al* (2005b) utilisent cette approche pour modéliser la réaction qui a lieu dans un panache de NO développé au sein d'une couche limite turbulente de O_3 de faible concentration. VINKOVIC *et al* (2005c) montre les résultats de ce modèle appliqué à la dispersion des panaches de gouttelettes dans une couche limite turbulente.

Nous allons adopter le modèle méso-échelle *non-hydrostatique* ARPS (Advanced Regional Predictions System) développé par l'Université d'Oklahoma (USA) pour la simulation des grandes échelles atmosphériques. Ce modèle est couplé avec un modèle de type stochastique lagrangien de suivi des particules et un modèle de diffusion et de réaction chimique.

- Le premier chapitre de ce rapport décrit le modèle de simulation des grandes échelles ARPS. Nous allons nous apercevoir qu'il est nécessaire d'adopter un critère de sélection des tailles des échelles destinées à être résolues par cette approche. On devra de plus tenir compte des effets des plus petites sur les grandes échelles avec des modèles de fermeture. Les effets dynamiques à la paroi sont expliqués ainsi que les différents choix des modèles possibles.
- Le second chapitre est dédié à la méthode stochastique adoptée pour le suivi des particules fluides porteuses d'espèces. Le système d'équations qui résout la cinématique des particules dans l'écoulement selon les hypothèses données par la turbulence est proposé en suivant la théorie du mouvement *brownien*.
- Le troisième chapitre permet d'approfondir les détails de calcul numérique, les caractéristiques du code ARPS, ses limitations et les modèles proposés pour la simulation des effets des petites échelles sur les grosses structures. Nous proposons ici d'autres modèles plus performants et des solutions aux problèmes rencontrés dans l'utilisation du code pour simuler des écoulements développés dans les souffleries atmosphériques qui sont nécessaires pour valider le code.
- Le quatrième chapitre présente les résultats obtenus par le code de la dynamique des écoulements développés dans les souffleries de laboratoire pour deux cas tests. Le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) et celui de GONG & IBBETSON (1989). Le premier est une couche limite neutre développée sur un sol plat rugueux. Le second est une couche limite neutre développée en présence d'une colline gaussienne de faible pente de paroi rugueuse.
- Le cinquième chapitre porte sur le couplage du code ARPS et le modèle stochastique lagrangien de suivi des particules fluides. On montre les résultats de concentration de la dispersion du scalaire passif en comparaison à des mesures expérimentales de rejet de gaz propane faites par FACKRELL & ROBINS (1982) et de dioxyde de carbone faites par GONG (1991) pour les deux cas test décrits dans le chapitre précédent.
- Le sixième chapitre présente les modèles de mélange et de réaction chimique des espèces. Nous montrons les résultats des statistiques de la concentration et des flux turbulents de la *fraction de mélange des espèces chimiques réactives* qui se comporte comme un scalaire passif. Cela permet de faire des comparaisons avec les mesures expérimentales de FACKRELL & ROBINS (1982).

- Le dernier chapitre montre un exemple de calcul de rejet de monoxyde d'azote issue d'une cheminée autour d'un village situé dans la campagne Argentine qui s'appelle "*Las Masitas*" et se trouve sur la côte du fleuve "*Paraná*". On montre dans cette simulation la zone de pollution du panache, les niveaux de concentration de gaz et son évolution spatiale pour une situation météorologique particulière.

Chapitre 1

MODÈLE ATMOSPHERIQUE

1.1 Introduction

Dans ce chapitre nous décrivons les *équations de Navier-Stokes* qui déterminent le comportement d'un écoulement fluide développé dans l'atmosphère. Pour simuler un couche limite atmosphérique, on peut admettre que l'écoulement se comporte comme un fluide newtonien dont l'état moyen dans le sens horizontal satisfait la loi hydrostatique. On peut faire aussi l'approximation du milieu continu qui présume que la plus petite échelle dl du mouvement de la matière est beaucoup plus important que les échelles moléculaires, définis par le libre parcours moyen. On va donc s'intéresser aux échelles de taille plus grandes que dl et aux échelles moléculaires qui n'interviennent que par leurs effets cumulés aux contraintes visqueuses. Cependant, dans les écoulements turbulents à grand nombre de *Reynolds* (Re), comme dans la plupart des couches limites atmosphériques, on va utiliser un approche par *Simulation des Grandes Échelles* (LES) pour résoudre les équations de *Navier-Stokes* et un modèle de sous-maille qui permet de tenir compte des effets des petites échelles sur les grosses structures turbulentes.

1.2 Les grandeurs thermodynamiques

La détermination de l'écoulement atmosphérique à l'instant t dans l'espace $\Omega(x, y, z)$ est obtenue à partir de la résolution des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement pour le champ de vitesse $\vec{V}(x, y, z, t)$ et pour les grandeurs thermodynamiques comme la température potentielle $\theta(x, y, z, t)$, la pression $p(x, y, z, t)$, la relation de mélange de la vapeur d'eau $q_v(x, y, z, t)$, d'eau liquide $q_l(x, y, z, t)$ et en fin, avec l'équation d'état de l'air humide pour obtenir la densité $\rho(x, y, z, t)$.

Dans un repère spatial tridimensionnel ($Oxyz$) on va définir le champ de vitesse de l'écoulement $\vec{V}(x, y, z, t)$ et ses trois composantes $u(x, y, z, t)$, $v(x, y, z, t)$, $w(x, y, z, t)$. Pour tenir compte des variations topographiques du terrain, on peut choisir une coordonnée verticale z dont sa valeur zero dans toute position (x, y) va suivre ces variations. Il convient dans ce cas d'imaginer les champs dynamiques et thermodynamiques comme composés

d'un champ de référence, qui change seulement avec la coordonnée z et d'une fluctuation. L'ensemble des moyennes pour toutes les grandeurs décrivent l'état de base ou l'état de référence :

$$\begin{aligned}
u(x, y, z, t) &= \bar{u}(z) + u'(x, y, z, t), \\
v(x, y, z, t) &= \bar{v}(z) + v'(x, y, z, t), \\
w(x, y, z, t) &= w'(x, y, z, t), \\
\theta(x, y, z, t) &= \bar{\theta}(z) + \theta'(x, y, z, t), \\
p(x, y, z, t) &= \bar{p}(z) + p'(x, y, z, t), \\
\rho(x, y, z, t) &= \bar{\rho}(z) + \rho'(x, y, z, t), \\
q_v(x, y, z, t) &= \bar{q}_v(z) + q'_v(x, y, z, t), \\
q_i(x, y, z, t) &= q'_i(x, y, z, t).
\end{aligned} \tag{1.1}$$

Nous appelons cette décomposition, la *décomposition de Reynolds* dans le sens horizontal.

Ici, nous supposons que ces valeurs moyennes sont invariables temporellement et hydrostatiquement stables.

Nous pouvons faire l'hypothèse que l'état moyen horizontal de la pression suit la relation hydrostatique :

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} = -\bar{\rho}g. \tag{1.2}$$

Cependant, nous utiliserons un *modèle non-hydrostatique* dans le sens où l'on va résoudre l'équation de la quantité de mouvement pour le champ de vitesse vertical en considérant tous les termes sans négliger l'advection. C'est à comparer aux modèles appelées *hydrostatiques* qui font un bilan entre la pression et la force de gravité (comme si le champ de pression était déterminé seulement par le poids de l'air).

L'hypothèse *d'équilibre hydrostatique* est utilisée dans les cas des échelles synoptiques ou *meso-échelles*. Si l'échelle horizontale est plus petite que $10km$ il est conseillé d'utiliser des modèles *non-hydrostatiques* (CLARK (1977), DUDHIA (1993)).

1.3 Les équations du modèle

Pour simplifier l'écriture des expressions, on va utiliser la notation indicielle. Les équations de conservation de la masse et de quantité de mouvement s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (1.3)$$

$$\rho \left[\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i + 2\rho \epsilon_{ijk} \Omega_j u_k + \frac{\partial \mathcal{T}_{ij}}{\partial x_j}, \quad (1.4)$$

où le deuxième, troisième et quatrième termes de (1.4) représentent respectivement, les forces de gravité, de Coriolis et des contraintes visqueuses.

1.3.1 Bilan de masse

Dans un modèle de type compressible, l'équation de conservation de la masse devient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1.5)$$

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (1.6)$$

Si l'on veut tenir compte du fait que la moyenne horizontale de la densité est invariante temporellement :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = 0. \quad (1.7)$$

Cette dernière hypothèse est appelée *anélastique*.

Si l'on exprime la relation (1.5) pour l'état de base de la densité et que l'on tient compte de (1.7), on peut réécrire l'hypothèse anélastique :

$$\frac{\partial(\bar{\rho} u_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (1.8)$$

1.3.2 Bilan de quantité de mouvement

Si le premier membre de l'équation de quantité de mouvement (1.4) est multiplié par le facteur $\frac{\bar{\rho}}{\rho}$, on obtient :

$$\bar{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \bar{\rho} u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial(\bar{\rho} u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} u_i u_j)}{\partial x_j} - u_i \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} - u_i \frac{\partial(\bar{\rho} u_j)}{\partial x_j}. \quad (1.9)$$

En tenant compte de (1.7) et (1.8) les derniers termes de (1.9) sont nuls. L'équation de quantité de mouvement devient :

$$\frac{\partial(\bar{\rho} u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i + 2\bar{\rho} \epsilon_{ijk} \Omega_j u_k + \frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\partial \mathcal{T}_{ij}}{\partial x_j}. \quad (1.10)$$

Pour un fluide Newtonien, le tenseur des contraintes visqueuses \mathcal{T}_{ij} exprime les effets dus à la viscosité moléculaire. Cette dernière est prépondérante à bas nombre de Reynolds. Pour une couche limite turbulente, on trouve ce comportement dans la sous-couche visqueuse proche de la paroi (SCHLICHTING (1978)).

Le tenseur de contraintes visqueuses est représenté en termes du tenseur de déformation pour un fluide Newtonien (WHITAKER (1968)) :

$$\mathcal{T}_{ij} = 2\mu S_{ij} + \left(\mathcal{K} - \frac{2}{3}\mu S_{kk} \right) \delta_{ij}, \quad (1.11)$$

où le tenseur S_{ij} est appelé *Tenseur de déformation* :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad (1.12)$$

et \mathcal{K} est connu comme *coefficient de masse (bulk coefficient)* et représente les changements de volume d'un corps solide par rapport aux changements de la pression. On peut donc le négliger vis à vis de la viscosité dynamique du fluide μ :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{ij} &= 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \delta_{ij} \right), \\ \mathcal{T}_{ij} &= 2\mu S_{ij}^a, \end{aligned} \quad (1.13)$$

Les équations (1.4) et (1.13) sont appelées *équations de Navier-Stokes* pour un fluide Newtonien compressible.

On peut exprimer ensemble les termes de pression et de gravité de l'équation (1.10). Si on tient compte de la décomposition du champ de pression (1.1) :

$$\begin{aligned} -\frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i &= -\frac{\bar{\rho}}{\rho} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right) + \bar{\rho} g_i, \\ &= -\bar{\rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - g_i \right) - \frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

La relation hydrostatique (1.2) en notation indicielle s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = \bar{\rho} g_i, \quad (1.15)$$

avec

$$g_i \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -g \end{bmatrix}.$$

En substituant (1.15) dans (1.14) on obtient :

$$\begin{aligned} -\frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i &= -\bar{\rho} \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho} g_i - g_i \right) - \frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i}, \\ &= \bar{\rho} g_i \left(\frac{\rho'}{\rho} \right) - \frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (1.16)$$

où le premier terme est appelé *terme de gravité*. Il est non nul pour la composante verticale de l'équation de quantité de mouvement (1.10) :

$$\frac{\partial(\bar{\rho} u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} u_i u_j)}{\partial x_j} = \bar{\rho} g_i \left(\frac{\rho'}{\rho} \right) - \frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} + 2\bar{\rho} \epsilon_{ijk} \Omega_j u_k + 2\frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\partial(\mu S_{ij}^a)}{\partial x_j}. \quad (1.17)$$

On s'aperçoit que l'on doit résoudre les fluctuations du champ de pression.

1.3.3 Bilan de pression

Pour l'équation relative au bilan de pression on va utiliser d'une part l'équation de conservation de la masse (1.6) et d'autre part l'équation d'état des gaz parfait pour l'air humide :

$$p = \rho R_w T, \quad (1.18)$$

où R_w est la constante de gaz pour l'air humide et peut s'exprimer en fonction de la constante de gaz pour l'air sec R_d , les relations de mélange de la vapeur d'eau q_v et d'eau liquide q_{li} . Selon PROCTOR (1987) on a :

$$A = \frac{R_d}{R_w} = \left(1 - \frac{q_v}{e + q_v}\right) (1 + q_v + q_{li}). \quad (1.19)$$

Dans la plupart des modèles atmosphériques au lieu d'utiliser la température absolue T comme grandeur de l'état thermique, il est plus pratique d'utiliser la température potentielle θ qui représente la température d'une parcelle d'air en descendant adiabatiquement jusqu'à la pression de référence. En utilisant θ , on peut rapidement classifier le mouvement de convection de l'air en *nonadiabatiques* et *adiabatiques*. Dans le cas des mouvements adiabatiques, la température potentielle ne change pas avec les changements de la pression :

$$\theta = T \left(\frac{p}{p_0}\right)^{-\frac{R_d}{C_p}}, \quad (1.20)$$

où p_0 est la valeur de la pression de référence et C_p est la chaleur spécifique de l'air à pression constante.

On peut aussi utiliser une *pression adimensionnelle* :

$$\Pi = \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{C_p}}, \quad (1.21)$$

qui est appelée *fonction Exner* et qui lie la température absolue T avec la température potentielle θ :

$$T = \theta \Pi. \quad (1.22)$$

La *température potentielle virtuelle* permet de tenir compte des effets de l'humidité de l'air :

$$\theta_v = \frac{\theta}{A}, \quad (1.23)$$

où A est la relation entre la constante de gaz pour l'air humide et sec (1.19).

On peut réécrire l'équation d'état de gaz parfait pour l'air humide (1.18) :

$$p = \rho R_d \Pi \theta_v. \quad (1.24)$$

Dans l'expression (1.24), la densité de l'air est fonction de la pression p (à travers de la *fonction Exner* (Π)) et de la température potentielle virtuelle θ_v . Si l'on fait la dérivée totale de la densité par rapport au temps :

$$\frac{d\rho}{dt} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{\theta_v} \frac{dp}{dt} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \theta_v} \right)_p \frac{d\theta_v}{dt} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{\theta, A} \frac{dp}{dt} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \theta} \right)_{p, A} \frac{d\theta}{dt} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial A} \right)_{p, \theta} \frac{dA}{dt}. \quad (1.25)$$

La variation de la pression par rapport à la densité de l'air dans un processus isentropique est égal à :

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{\theta, A} = \frac{1}{V_s^2}, \quad (1.26)$$

où V_s est la vitesse du son.

La dérivée partielle de la densité par rapport à la température potentielle dans un processus à pression constante peut être obtenue en dérivant l'équation d'état (1.24) :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \rho}{\partial \theta} \right)_{p, A} &= \frac{pA}{R_d \Pi} \left(-\frac{1}{\theta^2} \right), \\ \left(\frac{\partial \rho}{\partial \theta} \right)_{p, A} &= -\frac{\rho}{\theta}. \end{aligned} \quad (1.27)$$

De même, la variation de la densité de l'air par rapport au paramètre d'humidité est donnée par :

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \rho}{\partial A}\right)_{p,\theta} &= \frac{p}{R_d \theta \Pi}, \\ \left(\frac{\partial \rho}{\partial A}\right)_{p,\theta} &= \frac{\rho}{A}.\end{aligned}\tag{1.28}$$

Si l'on revient à la dérivée totale de la densité par rapport au temps (1.25), en tenant compte des relations (1.26), (1.27) et (1.28), on a :

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{V_s^2} \frac{dp}{dt} - \frac{\rho}{\theta} \frac{d\theta}{dt} + \frac{\rho}{A} \frac{dA}{dt}.\tag{1.29}$$

On peut obtenir la dérivée totale de la pression par rapport au temps :

$$\frac{dp}{dt} = V_s^2 \left(\frac{d\rho}{dt} + \frac{\rho}{\theta} \frac{d\theta}{dt} - \frac{\rho}{A} \frac{dA}{dt} \right).$$

Avec l'équation de conservation de la masse (1.6), on peut écrire la dernière expression :

$$\frac{dp}{dt} = V_s^2 \left(-\rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\rho}{\theta} \frac{d\theta}{dt} - \frac{\rho}{A} \frac{dA}{dt} \right).\tag{1.30}$$

Si l'on décompose la pression en sa moyenne horizontale invariante temporellement (état de base) et sa fluctuation selon (1.1) on a :

$$\frac{dp}{dt} = \frac{d\bar{p}}{dt} + \frac{dp'}{dt} = u_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial p'}{\partial t} + u_i \frac{\partial p'}{\partial x_i}.\tag{1.31}$$

Si l'on prend (1.30), (1.31) et la relation hydrostatique (1.15) on peut obtenir la dérivée partielle de la pression par rapport au temps :

$$\frac{\partial p'}{\partial t} = -u_i \frac{\partial p'}{\partial x_i} - \bar{\rho} g_i u_i - V_s^2 \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + V_s^2 \rho \left(\frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dt} - \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \right).$$

Le dernier terme est appelé *terme non-adiabatique*. Selon KLEMP & WILHELMSON (1978), le terme de divergence de la vitesse est prépondérant devant lui et il est négligé par la plupart de codes atmosphériques.

1.3.4 Quelques approximations dans l'équation de la quantité de mouvement

Dans l'équation de la quantité de mouvement (1.17), on peut considérer que pour la troposphère (première couche de l'atmosphère qui va jusqu'à la tropopause), les fluctuations de la densité de l'air sont négligeables par rapport à sa valeur moyenne horizontale :

$$\rho'(x, y, z, t) \ll \bar{\rho}(z). \quad (1.32)$$

Cette hypothèse permet de faire des simplifications importantes en ce qui concerne les termes de gravité et de pression. En effet nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} &= \frac{\bar{\rho} - \rho'}{(\bar{\rho} + \rho')(\bar{\rho} - \rho')} \frac{\partial p'}{\partial x_i}, \\ &= \frac{1}{\bar{\rho}^2 - \rho'^2} \left(\bar{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} - \rho' \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right), \end{aligned}$$

et avec l'hypothèse précédente (1.32) on obtient :

$$\bar{\rho}^2 - \rho'^2 \simeq \bar{\rho}^2 \quad \text{et} \quad \rho' \frac{\partial p'}{\partial x_i} \simeq 0.$$

Ce qui nous donne :

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \simeq \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial x_i}. \quad (1.33)$$

Si l'on suppose que les fluctuations sont négligeables par rapport à sa valeur moyenne, on peut exprimer la densité de l'air en *Séries de Taylor* au voisinage de $\bar{\rho}(z)$ avec l'équation d'état pour l'air humide (1.24) et la relation (1.23). On obtient ainsi à l'ordre 1 pour chaque variable p , θ et A :

$$\rho = \bar{\rho} + \underbrace{\left(\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)_{\theta,A}}_{\frac{1}{V_s^2}} (p - \bar{p}) + \underbrace{\left(\frac{\partial\rho}{\partial\theta}\right)_{p,A}}_{-\frac{\rho}{\theta}} (\theta - \bar{\theta}) + \underbrace{\left(\frac{\partial\rho}{\partial A}\right)_{p,\theta}}_{\frac{\rho}{A}} (A - \bar{A}).$$

Les dérivées sont prises au voisinage de $\bar{\rho}(z)$, pourtant dans les derniers termes on peut remplacer ρ , θ et A par leurs valeurs moyennes :

$$\rho = \bar{\rho} + \underbrace{\frac{p'}{V_s^2} - \frac{\bar{\rho}}{\theta'}\theta' + \frac{\bar{\rho}}{A}A'}_{\rho'}.$$

Le terme de gravité devient :

$$\begin{aligned} g_i \frac{\rho'}{\rho} &\simeq g_i \frac{\rho'}{\bar{\rho}}, \\ g_i \frac{\rho'}{\rho} &\simeq g_i \underbrace{\left(\frac{p'}{\bar{\rho}V_s^2} - \frac{\theta'}{\bar{\theta}} + \frac{A'}{\bar{A}}\right)}_B. \end{aligned} \quad (1.34)$$

On peut donc réécrire l'équation de la quantité de mouvement (1.17) avec les approximations faites pour les termes de pression et de gravité (1.33) et (1.34). On obtient :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_i u_j)}{\partial x_j} = \bar{\rho}g_i B - \frac{\partial p'}{\partial x_i} + 2\bar{\rho}\epsilon_{ijk}\Omega_j u_k + 2\frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\partial(\mu S_{ij}^a)}{\partial x_j}. \quad (1.35)$$

1.3.5 Bilan des autres grandeurs thermodynamiques

On va écrire l'équation d'évolution de la température potentielle θ en tenant compte que l'état de base est invariant temporellement et que la seule variation de $\bar{\theta}$ est dans le sens vertical, soit :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\theta')}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_j\bar{\theta})}{\partial x_j}\delta_{j3} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_j\theta')}{\partial x_j} = \mathcal{S}_\theta, \quad (1.36)$$

où \mathcal{S}_θ représente les termes sources ou des pertes de chaleur.

L'équation d'évolution de mélange de la vapeur d'eau et de l'eau à l'état liquide peut s'écrire de façon similaire :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}q_\psi)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_jq_\psi)}{\partial x_j} = \frac{\partial(\bar{\rho}V_{q_\psi}q_\psi)}{\partial x_i}\delta_{i3} + \mathcal{S}_{q_\psi}, \quad (1.37)$$

où q_ψ représente toutes les relations de mélanges de l'eau avec l'air, V_{q_ψ} est la vitesse terminale des hydrométéores (toute forme de précipitation de l'eau dans la troposphère) et \mathcal{S}_{q_ψ} représente tous les processus microphysiques.

1.4 Modèle de turbulence

Dans un écoulement à nombre de Re suffisamment grand, la turbulence est caractérisée par un certain nombre des propriétés observables. SCHIESTEL (1993) mentionne les suivantes :

- Signal irrégulier dans l'espace et dans le temps : Les grandeurs physiques telles que la vitesse et la pression varient de façon aléatoire.
- Écoulement rotationnel : Le mouvement turbulent présente des fluctuations du rotationnel de vitesse.
- Diffusivité élevée : Un écoulement turbulent diffuse fortement toute quantité transportable comme la température, gaz, etc.
- Phénomène tridimensionnel : Les mouvement turbulents fluctuants sont toujours tridimensionnels et instationnaires.
- Caractère imprévisible des trajectoires des lignes de courant.

- Coexistence des tourbillons des tailles diverses.
- Dissipation à cause des forts gradients de vitesse instantanés.

La résolution des équations de *Navier-Stokes* appliquées à un écoulement, donne une description complète de son comportement. Cependant, un fluide turbulent présente une large gamme d'échelles de longueur et de temps qui interagissent entre elles et qu'il faut résoudre numériquement. Cela est loin de pouvoir se faire avec les capacités de calcul et de stockage actuelles.

La turbulence d'un écoulement peut être considérée comme composée de structures tourbillonnaires de différentes tailles. Les structures de taille l ont une vitesse caractéristique u_l et une échelle de temps $t_l = l/u_l$. Cependant, la région occupée par une grande structure peut contenir des plus petites structures. La théorie de cascade d'énergie de Kolmogorov affirme que les grandes structures lorsque elles se cassent, transfèrent leur énergie aux structures plus petites. Ainsi, l'énergie est transférée successivement depuis les plus grandes structures vers les plus petites. Ce processus est continu jusqu'à la taille de la plus petite structure possible. Cela signifie une taille à partir de laquelle la viscosité moléculaire est prépondérante par rapport à l'énergie cinétique. Ces plus petites échelles sont appelées *échelles de Kolmogorov*.

On peut considérer que ces petites échelles sont dans un état statistiquement isotrope puisque la direction privilégiée des grandes structures est perdue quand l'énergie passe vers les petites structures. Toute information par rapport à sa géométrie est perdue aussi.

La séparation des tailles entre les grosses et les petites structures d'un écoulement turbulent varie comme $Re^{3/4}$ et pour une résolution tridimensionnelle on aura besoin d'environ $Re^{9/4}$ nœuds de maillage afin de résoudre les plus grosses structures jusqu'aux plus petites. Grâce à l'hypothèse d'universalité et d'isotropie statistique, on peut modéliser le comportement des petites échelles. Ainsi, on va utiliser les équations de *Navier-Stokes* pour ne résoudre que les grandes échelles et tenir compte des effets des petites échelles sur les grandes avec un *modèle de sous-maille* qui puisse tenir compte de l'échelle spatiale (SMAGORINSKY (1963)) ou spectrale (CHOLLET & LESIEUR (1981)). Cette stratégie permet de considérer la résolution des écoulements turbulents à grand nombre de Re comme c'est le cas dans la plupart des applications en ingénierie. C'est généralement connue sous le nom de *Simulation des Grandes Échelles* (LES).

1.4.1 La Simulation des Grandes Échelles (LES)

Les premières applications de LES ont été faites par DEARDORFF (1970). Il a simulé un écoulement dans un canal turbulent pour un grand nombre de Re . En utilisant un maillage de 6720 nœuds de calcul. SCHUMANN (1975) a travaillé avec cette technique pour une géométrie cylindrique.

DEARDORFF (1973) a été motivé par les applications atmosphériques dans la couche limite. Il a utilisé des modèles de fermeture pour l'équation de transport du tenseur Reynolds de sous-maille afin de simuler une région de 8 km^2 de surface horizontale et 2 km de hauteur avec des mailles de 200 m dans la direction horizontale de 50 m dans la direction vertical.

MOIN & KIM (1982) ont fait des études numériques en appliquant cette approche à un fluide turbulent incompressible dans un canal. Ils ont utilisé un maillage de 546096 nœuds et ont comparé leurs résultats avec des mesures expérimentales faites par HUSSAIN & REYNOLDS (1975) pour le champ de vitesse, COMPTE-BELLOT (1963), SABOT & COMPTE-BELLOT (1976), KREPLIN & ECKELMAN (1979), CLARK (1968) pour les coefficients de corrélation des fluctuations de vitesse résolues (grandes échelles) et aussi pour les contraintes turbulentes avec une bonne approximation. Cependant, les auteurs ont utilisé un modèle de sous-maille qui n'est pas en accord avec la condition d'invariance Galiléenne (SPEZIALE (1985)).

ESMAILI & PIOMELLI (1993) ont étudié les phénomènes de relaminarisation dans les couches limites qui sont soumis à un champ de pression horizontal forcé. L'approche LES donne l'information détaillée et instantanée des stades du flux et des structures turbulentes pendant ce processus. Cela faite de ce méthode un outil puissant pour les études de stabilisation et de contrôl de la turbulence.

Des travaux plus récents pour des applications à géométrie complexe ont été faits par AKSELVOLL & MOIN (1995), HAWORTH & JANSEN (1999).

La technique LES est basée sur la décomposition des champs dynamiques instantanés de l'écoulement étudié en un champ grandes échelles ou champ résolu $(.)^\oplus$ et un champ petites échelles ou champ non résolu $(.)^\ominus$.

Pour la vitesse on peut donc écrire :

$$\vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{u}^\oplus(\vec{x}, t) + \vec{u}^\ominus(\vec{x}, t). \quad (1.38)$$

Le champ résolu est obtenu en appliquant une opération de filtrage spatial (LEONARD (1974)), au champ de vitesse instantané :

$$u_i^\oplus(\vec{x}, t) = \int_V u_i(\vec{x} - \vec{r}, t) G(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (1.39)$$

où l'intégrale est évaluée sur tout le domaine de l'écoulement. La fonction du filtrage $G(\vec{r})$ satisfait la condition de normalisation :

$$\int_V G(\vec{r}) d\vec{r} = 1, \quad (1.40)$$

$|\vec{r}^*|$ est le vecteur position qui correspond au centre de la maille. Dans ce cas, il est indépendant de la coordonnée \vec{x} (filtrage homogène).

Il y a plusieurs fonctions de filtrage. La plus simple est la fonction *moyenne* où les valeurs du champ à filtrer, qui sont comprises dans le rayon du filtre, sont moyennées entre elles pour donner la nouvelle valeur :

$$G(\vec{r}^*) = \begin{cases} 1/\Delta & \text{si } |\vec{x} - \vec{r}^*| < \Delta/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.41)$$

où Δ est la taille caractéristique du filtrage.

Il est important de noter que, en général, l'opération de filtrage appliquée au champ des petites échelles n'est pas nulle :

$$\begin{aligned} (u_i^\ominus)^\oplus &= (u_i - u_i^\oplus)^\oplus, \\ (u_i^\ominus)^\oplus &= u_i^\oplus - (u_i^\oplus)^\oplus, \\ (u_i^\ominus)^\oplus &\neq 0. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Les méthodologies LES ont été développées en fonction du type de flux considéré et de la méthode numérique utilisée. POPE (2000) a décrit de façon détaillée ces caractéristiques et il présente une classification de cette approche. On peut citer par exemple la *Simulation des Grandes Échelles avec résolution de l'écoulement de proche paroi* (LES-NWR), *Simulation des Grandes Échelles avec un modèle pour l'écoulement de proche paroi* (LES-NWM), la *Simulation des Très Grandes Échelles* (VLES) où le filtre est assez grand (résoudre 80% de l'énergie turbulente).

Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement pour les grandes échelles sont obtenues en appliquant l'opération de filtrage (1.39) aux équations (1.8) et (1.35) en tenant compte de la propriété de commutativité entre l'intégrale et la dérivée temporelle et spatiale. On va faire aussi la supposition que la taille du filtre est petite afin de considérer que le gradient de la densité de l'état de base est négligeable à l'intérieur du filtre.

Pour le bilan de la masse on a :

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial(\bar{\rho}u_i)}{\partial x_i} \right]^\oplus &= \frac{\partial(\bar{\rho}u_i^\oplus)}{\partial x_i}, \\ \frac{\partial(\bar{\rho}u_i^\oplus)}{\partial x_i} &= 0. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, la viscosité moléculaire (μ) d'un écoulement compressible devrait être vue comme dépendante de l'espace et du temps puisque μ varie avec la température et les changements de vitesse et de pression. Cependant, dans le cas de la couche limite atmosphérique les variations de viscosité moléculaire sont négligeables par rapport aux effets de viscosité turbulente sauf proche de la paroi, où on va utiliser un modèle de paroi (LES-NWM). L'expression (1.35) devient :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}u_i^\oplus)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_i u_j^\oplus)}{\partial x_j} = \bar{\rho}g_i B^\oplus - \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\oplus + 2\epsilon_{ijk}\Omega_j \bar{\rho}u_k^\oplus + 2\frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\nu}S_{ij}^{a\oplus})}{\partial x_j}. \quad (1.44)$$

On a utilisé (1.13) pour le tenseur \mathcal{T}_{ij} . $\bar{\nu}$ est la viscosité cinématique moyenne de l'air dans la zone de proche paroi.

L'expression $(\bar{\rho}u_i u_j)^\oplus$ de (1.44) peut être décomposé selon (1.38) :

$$[\bar{\rho}(u_i^\oplus + u_i^\ominus)(u_j^\oplus + u_j^\ominus)]^\oplus = [(\bar{\rho}u_i^\oplus + \bar{\rho}u_i^\ominus)(u_j^\oplus + u_j^\ominus)]^\oplus. \quad (1.45)$$

Pour les termes $\bar{\rho}u_i^\oplus$ et $\bar{\rho}u_i^\ominus$ on utilisera la notation :

$$\begin{cases} \bar{\rho}u_i^\oplus \equiv \tilde{u}_i^\oplus, \\ \bar{\rho}u_i^\ominus \equiv \tilde{u}_i^\ominus. \end{cases}$$

ce qui permet de modifier (1.45) sous la forme :

$$\begin{aligned} [\bar{\rho}(u_i^\oplus + u_i^\ominus)(u_j^\oplus + u_j^\ominus)]^\oplus &= (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus)^\oplus + (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\ominus + \tilde{u}_i^\ominus u_j^\oplus)^\oplus + (\tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus, \\ &= \tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus + \tilde{\mathcal{L}}_{ij} + \tilde{\mathcal{C}}_{ij} + \tilde{\mathcal{R}}_{ij}, \end{aligned} \quad (1.46)$$

où $\tilde{\mathcal{L}}_{ij}$ est le tenseur de *Leonard*, $\tilde{\mathcal{C}}_{ij}$ est le tenseur *Croisés* et $\tilde{\mathcal{R}}_{ij}$ est le tenseur de *Reynolds*

de sous-maille, tous multipliés par la moyenne horizontale de la densité $\bar{\rho}$:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{L}}_{ij} &= \bar{\rho}\mathcal{L}_{ij}, \\ &= \bar{\rho}[(u_i^\oplus u_j^\oplus)^\oplus - u_i^\oplus u_j^\oplus], \\ &= (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus)^\oplus - \tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus,\end{aligned}\tag{1.47}$$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{C}}_{ij} &= \bar{\rho}\mathcal{C}_{ij}, \\ &= \bar{\rho}(u_i^\oplus u_j^\ominus + u_i^\ominus u_j^\oplus)^\oplus, \\ &= (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\ominus + \tilde{u}_i^\ominus u_j^\oplus)^\oplus,\end{aligned}\tag{1.48}$$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{R}}_{ij} &= \bar{\rho}\mathcal{R}_{ij}, \\ &= \bar{\rho}(u_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus, \\ &= (\tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus.\end{aligned}\tag{1.49}$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.44) devient :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus)}{\partial x_j} &= \bar{\rho}g_i B^\oplus - \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i}\right)^\oplus + 2\epsilon_{ijk}\Omega_j \tilde{u}_k^\oplus \\ &\quad - \frac{\partial (\tilde{\mathcal{L}}_{ij} + \tilde{\mathcal{C}}_{ij} + \tilde{\mathcal{R}}_{ij})}{\partial x_j} + 2\frac{\partial (\bar{\rho}\bar{v}S_{ij}^{a\oplus})}{\partial x_j}.\end{aligned}\tag{1.50}$$

Si l'on applique l'opération de filtrage (1.39) à l'équation d'évolution de la température potentielle (1.36) :

$$\frac{\partial (\bar{\rho}\theta'^\oplus)}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_j^\oplus \bar{\theta})}{\partial x_j} \delta_{j3} + \frac{\partial (\tilde{u}_j \theta')^\oplus}{\partial x_j} = \mathcal{S}_\theta,\tag{1.51}$$

où on a considéré que :

$$\begin{cases} (\tilde{u}_j \bar{\theta})^\oplus = \tilde{u}_j^\oplus \bar{\theta}, \\ (\bar{\rho}\theta')^\oplus = \bar{\rho}\theta'^\oplus, \end{cases}$$

car l'état de base est invariant temporellement et la variation verticale de $\bar{\theta}$ à l'intérieur d'une maille (taille du filtre) est négligeable par rapport à la hauteur de la couche limite.

Maintenant, on va utiliser la relation suivante :

$$(\tilde{u}_j \theta')^\oplus = \tilde{u}_j^\oplus \theta'^\oplus + h_{\theta_j},\tag{1.52}$$

où h_{θ_j} est appelé *flux turbulent de température* (XUE, *et al* (2000)). L'équation (1.51) devient :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\theta^\oplus)}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_j^\oplus\bar{\theta})}{\partial x_j}\delta_{j3} + \frac{\partial(\tilde{u}_j^\oplus\theta^\oplus)}{\partial x_j} = \mathcal{S}_\theta - \frac{\partial h_{\theta_j}}{\partial x_j}. \quad (1.53)$$

De même, l'équation de résolution des mélanges de la vapeur d'eau et de l'eau à l'état liquide (1.37) peut aussi s'écrire :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}q_\psi)^\oplus}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_j q_\psi)^\oplus}{\partial x_j} + \frac{\partial(\bar{\rho}V_{q_\psi} q_\psi)^\oplus}{\partial x_j}\delta_{j3} = \mathcal{S}_{q_\psi} - \frac{\partial h_{q_j}}{\partial x_j}. \quad (1.54)$$

1.4.2 Les modèles de sous-maille pour la fermeture de l'équation de quantité de mouvement

Dans l'équation (1.50) les tenseurs $\tilde{\mathcal{L}}_{ij}$, $\tilde{\mathcal{C}}_{ij}$ et $\tilde{\mathcal{R}}_{ij}$ doivent être modélés puisqu'ils contiennent l'apport de la quantité de mouvement des petites échelles. SPEZIALE (1985) montre que les tenseurs $\tilde{\mathcal{L}}_{ij}$ et $\tilde{\mathcal{C}}_{ij}$ ne sont pas invariants Galiléens, par contre le tenseur qui résulte de leur addition est invariant Galiléen. DEARDORFF (1970) utilise un modèle où l'addition de ces tenseurs donne un tenseur nul :

$$\tilde{\mathcal{L}}_{ij} + \tilde{\mathcal{C}}_{ij} = 0, \quad (1.55)$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_{ij} = (\tilde{u}_i u_j)^\oplus - \tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus,$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_{ij} = (\tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus. \quad (1.56)$$

Ce modèle a été aussi utilisé par GERMANO *et al* (1991), LILLY (1992), VREMAN *et al* (1994), LUND *et al* (1998), CARATI *et al* (2002).

Afin de modéliser les termes de sous-maille, presque tous les modèles font appel au concept de viscosité turbulente. Ces modèles n'essaient pas de calculer avec précision la valeur du tenseur de Reynolds de sous-maille mais seulement de tenir compte de ces effets dans un sens statistique. En moyenne, l'action des petites échelles sur les grosses ressemble à l'apparition d'une viscosité supplémentaire qui prend de l'énergie cinétique pour la dissiper à l'échelle moléculaire.

La viscosité turbulente est une grandeur scalaire que l'on peut modeler sous la forme de *l'approximation de Boussinesq* comme on l'a fait en (1.13) :

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{R}}_{ij} - \frac{1}{3}\tilde{\mathcal{R}}_{kk}\delta_{ij} &= \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^a, \\ \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^a &= -2\bar{\rho}k_m S_{ij}^{a\oplus},\end{aligned}\tag{1.57}$$

où k_m est appelé *coefficient de diffusion turbulent dynamique*.

De même, le modèle pour la diffusion turbulente h_j d'une grandeur scalaire ϕ s'écrit :

$$h_j = -\bar{\rho}k_h \frac{\partial \phi^\oplus}{\partial x_j},\tag{1.58}$$

où k_h est le *coefficient de diffusion turbulent scalaire*.

D'autres types de décomposition qui respectent aussi la propriété d'invariance Galiléenne sont possibles. Par exemple la décomposition :

$$\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)} = (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus)^\oplus - \tilde{u}_i^{\oplus\oplus} u_j^{\oplus\oplus},\tag{1.59}$$

$$\tilde{\mathcal{C}}_{ij}^{(M)} = (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\ominus)^\oplus + (u_j^\oplus \tilde{u}_i^\ominus)^\oplus - [\tilde{u}_i^{\oplus\oplus} u_j^{\ominus\oplus} + u_j^{\oplus\oplus} \tilde{u}_i^{\ominus\oplus}],\tag{1.60}$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M)} = (\tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus - \tilde{u}_i^{\ominus\oplus} u_j^{\ominus\oplus},\tag{1.61}$$

où le tenseur de Leonard modifié $\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)}$ peut être calculé directement en filtrant le champ de vitesse. Les autres deux tenseurs sont modélés par :

$$\tilde{\mathcal{C}}_{ij}^{(M)a} + \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M)a} = -2\bar{\rho}k_m S_{ij}^{a\oplus}.\tag{1.62}$$

Ce modèle a été utilisé par BARDINA (1983), PIOMELLI *et al* (1989), ZANG *et al* (1993), FEVRIER (2000) qui semble être un meilleur choix car on a tous les éléments pour calculer le tenseur $\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)}$ et on a besoin de modeler seulement la somme des tenseurs inconnus restants.

Cependant, dans le code ARPS (Advanced Regional Prediction System) développé par l'Université d'Oklahoma - États Unis (XUE *et al* (2000)), dont on dispose des sources, il est utilisé la décomposition de Leonard selon les hypothèses faites (1.55), (1.56), avec le modèle (1.57) pour la fermeture du tenseur Reynolds de sous-maille.

1.4.3 Fermeture de type Smagorinsky

Les travaux de SMAGORINSKY (1963) et LILLY (1967) ont montré qu'il est proportionnel au taux de déformation local lié au champ grandes échelles. Comme k_m est un scalaire, il ne dépend que des invariants de ce tenseur et de l'échelle de longueur caractéristique Δ :

$$k_m = (C_s \Delta)^2 |\underline{S}^\oplus|, \quad (1.63)$$

$$|\underline{S}^\oplus| = (2S_{ij}^\oplus S_{ij}^\oplus)^{1/2}, \quad (1.64)$$

où C_s est appelée *constante de Smagorinsky* et Δ est la taille du filtre.

LILLY (1967) détermine que pour une turbulence homogène et isotrope avec une coupure des échelles dans la zone inertielle, la valeur de la constante C_s est de l'ordre de 0,23. Cependant, dans le cas des écoulements cisailés, cette valeur cause un excès d'amortissement des fluctuations des grandes échelles. Par exemple, dans les simulations des écoulements de conduite, DEARDORFF (1970) a trouvé que $C_s = 0,1$ donne de meilleurs résultats. MASON & CALLEN (1986) trouvent $C_s = 0,2$ pour une simulation avec un maillage de calcul suffisamment fin pour le même type d'écoulement. MOIN & KIM (1982) ont utilisé la fonction d'amortissement de VAN DRIEST (1956) pour tenir compte du fait que la viscosité turbulente devient négligeable dans la zone de proche paroi. PIOMELLI *et al* (1988) proposent encore la valeur de 0,1 pour C_s et ils utilisent aussi une fonction d'amortissement différente pour la zone de proche paroi. GERMANO *et al* (1991) concluent qu'il est impossible de trouver une valeur universelle de C_s pour tous les écoulements turbulents. Ils proposent un calcul dynamique local de ce coefficient en utilisant les échelles résolues pendant la simulation. Ce coefficient est donc déterminé à tout moment et dans tout le domaine.

La détermination dynamique de la constante de Smagorinsky

GERMANO *et al* (1991) proposent un modèle dynamique pour la détermination de la constante de Smagorinsky, c'est à dire que C_s est calculé localement et à tout instant. Pour diagnostiquer cet état, ils utilisent un filtre test de taille supérieur à Δ . Les auteurs affirment que ce modèle donne pour lui même le comportement asymptotique vers des valeurs négligeables de la viscosité turbulente dans la zone de proche paroi et pour tant, n'est pas nécessaire d'appliquer une fonction d'amortissement. Il est capable de tenir compte du phénomène de retour d'énergie depuis les petites échelles vers les plus grandes (*backscatter*) car C_s peut prendre des valeurs négatives.

Pour trouver la constante de Smagorinsky dynamiquement, il faut prendre l'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.50), avec (1.55) et (1.56) pour les termes de sous-maille, et la filtrer encore avec un filtre du même type et de taille supérieure à

Δ . Le rapport entre les deux tailles du filtre (qu'on va appeler α) est l'unique paramètre à régler dans cette modélisation. GERMANO *et al* (1991) ont utilisé différents rapports de tailles dans le cas d'une simulation à l'aide de ce modèle en comparant avec des calculs DNS (KIM *et al* (1987)) pour un écoulement de conduite. Ils ont trouvé que pour $\alpha = 2$ ce sont les meilleurs résultats mais ils affirment que ce paramètre est peu sensible. LUND *et al* (1993) recommandent que la taille du filtre test soit égale à $\sqrt{6}\Delta$. Par conséquent α peut être pris entre 2 où 3.

Soit donc l'équation (1.50) sur laquelle on applique le filtre test $(.)^\top$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}_i^{\oplus\top}}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_i^{\oplus} u_j^{\oplus})^\top}{\partial x_j} &= \bar{\rho} g_i B^{\oplus\top} - \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^{\oplus\top} + 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \tilde{u}_k^{\oplus\top} \\ &- \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^\top}{\partial x_j} + 2 \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{\nu} S_{ij}^{a\oplus\top})}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (1.65)$$

l'équivalente de l'expression (1.56) est :

$$\tilde{\mathcal{R}}_{ij}^\top = (\tilde{u}_i u_j)^{\oplus\top} - (\tilde{u}_i^{\oplus} u_j^{\oplus})^\top = (\tilde{u}_i^{\ominus} u_j^{\ominus})^{\oplus\top}. \quad (1.66)$$

Si l'on prend l'équation de transport de la quantité de mouvement (1.44) sur laquelle on l'applique un double filtrage, avec un filtre de taille Δ puis de taille $\alpha\Delta$ ($\alpha \in \mathbf{R}$ et $2 \leq \alpha \leq 3$) alors :

$$\frac{\partial \tilde{u}_i^{\oplus\top}}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_i u_j)^{\oplus\top}}{\partial x_j} = \bar{\rho} g_i B^{\oplus\top} - \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^{\oplus\top} + 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \tilde{u}_k^{\oplus\top} + 2 \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{\nu} S_{ij}^{a\oplus\top})}{\partial x_j}. \quad (1.67)$$

Après avoir appliqué le double filtrage, on peut décomposer la corrélation des vitesses dans le terme de convection en deux champs : Le champ résolu et le champ non résolu. La démarche à suivre est la suivante :

Pour le premier filtrage, d'après (1.38) $u_i = u_i^{\oplus} + u_i^{\ominus}$ on a :

$$(\tilde{u}_i u_j)^{\oplus\top} = [(\tilde{u}_i^{\oplus} + \tilde{u}_i^{\ominus})(u_j^{\oplus} + u_j^{\ominus})]^\top. \quad (1.68)$$

Le deuxième filtre est appliqué aux échelles résolues $(.)^\oplus$ après avoir appliqué le premier filtre, c'est la raison pour laquelle ces échelles seront décomposés à nouveau en un champ résolu $(.)^\top$ et non résolu $(.)^\perp$ à l'aide du filtre test :

$$u_i^\oplus = u_i^{\oplus\top} + u_i^{\oplus\perp}.$$

La décomposition de la corrélation des vitesses (1.68) donne alors :

$$\begin{aligned} (\tilde{u}_i u_j)^{\oplus\top} &= [(\tilde{u}_i^{\oplus\top} + \tilde{u}_i^{\oplus\perp} + \tilde{u}_i^\ominus) (u_j^{\oplus\top} + u_j^{\oplus\perp} + u_j^\ominus)]^\top, \\ &= (\tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^{\oplus\top} + \tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^{\oplus\perp} + \tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^\ominus + \tilde{u}_i^{\oplus\perp} u_j^{\oplus\top} + \tilde{u}_i^{\oplus\perp} u_j^{\oplus\perp} \\ &\quad + \tilde{u}_i^{\oplus\perp} u_j^\ominus + \tilde{u}_i^\ominus u_j^{\oplus\top} + \tilde{u}_i^\ominus u_j^{\oplus\perp} + \tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus)^\top. \end{aligned}$$

On pose :

$$(\tilde{u}_i u_j)^{\oplus\top} = \tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^{\oplus\top} + \tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M\top)} + \tilde{\mathcal{C}}_{ij}^{(M\top)} + \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M\top)}, \quad (1.69)$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M\top)} = (\tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^{\oplus\top})^\top - \tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^{\oplus\top}, \\ \tilde{\mathcal{C}}_{ij}^{(M\top)} = (\tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^{\oplus\perp} + \tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^\ominus + \tilde{u}_i^{\oplus\perp} u_j^{\oplus\top} + \tilde{u}_i^\ominus u_j^{\oplus\top})^\top, \\ \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M\top)} = (\tilde{u}_i^{\oplus\perp} u_j^{\oplus\perp} + \tilde{u}_i^{\oplus\perp} u_j^\ominus + \tilde{u}_i^\ominus u_j^{\oplus\perp} + \tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus)^\top. \end{array} \right.$$

Le terme de Leonard sera la différence entre le filtre test de la corrélation des vitesses doublement filtrées $(.)^{\oplus\top}$ et la corrélation des vitesses doublement filtrées. Le terme Croisé est le filtre test de tous les termes qui représentent la corrélation entre les échelles résolues et non résolues après l'application de double filtrage. Le terme de Reynolds sera le filtre test de toutes les interactions entre les échelles non résolues après de l'opération de double filtrage.

On pose encore ici la condition (1.55) pour les tenseurs de Leonard $\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M\top)}$ et Croisé $\tilde{\mathcal{C}}_{ij}^{(M\top)}$:

$$\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M\top)} + \tilde{\mathcal{C}}_{ij}^{(M\top)} = 0.$$

Cela fournit le double filtrage de la corrélation des vitesses (1.69) de la façon suivante :

$$(\tilde{u}_i u_j)^{\oplus\top} = \tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^{\oplus\top} + \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M\top)}. \quad (1.70)$$

On peut, de même, décomposer la relation (1.66) :

$$\tilde{\mathcal{R}}_{ij}^\top = \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M\top)} + \tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^{\oplus\top} - (\tilde{u}_i^{\oplus} u_j^{\oplus})^\top,$$

ce qui donne la différence des tenseurs :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M\top)} - \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^\top &= (\tilde{u}_i^{\oplus} u_j^{\oplus})^\top - \tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^{\oplus\top}, \\ \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M\top)} - \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^\top &= \tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)}, \end{aligned} \quad (1.71)$$

qui est le tenseur de Leonard modifié (1.59). La seule différence est la taille du filtre test.

De la même façon que pour (1.57), on modélise le déviateur du tenseur $\tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M\top)^\alpha}$, à l'aide de *l'approximation de Boussinesq* :

$$\tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M\top)} - \frac{1}{3} \tilde{\mathcal{R}}_{kk}^{(M\top)} \delta_{ij} = \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M\top)^\alpha} = -2\bar{\rho}(C_s \alpha \Delta)^2 |\underline{S}^\oplus|^\top S_{ij}^{\alpha\oplus\top}. \quad (1.72)$$

Dans cette dernière relation, on a supposé que le coefficient de Smagorinsky C_s ne dépend pas de la taille caractéristique de la maille Δ . Cette hypothèse appelé *invariance d'échelle* peut ne pas donner des résultats suffisamment acceptables dans la zone de proche paroi où le maillage est raffiné pour la direction verticale.

Différentes solutions sont alors proposées pour tenir compte de la variation de la taille caractéristique du maillage en proche paroi. MASON (1989), MASON & THOMSON (1992) utilisent une fonction d'amortissement de C_s pour cette zone tandis que PORTE-AGEL *et al* (2000) proposent un modèle d'échelle dépendante dynamiquement, en utilisant un deuxième filtre test qui permet de déterminer la fonction $C_s = f(\Delta)$.

Dans la suite, on va adopter la première solution, c'est à dire que l'on suppose l'invariance d'échelle pour la constante de Smagorinsky C_s et on va appliquer une fonction d'amortissement pour les mailles de proche paroi de type VAN DRIEST (1956).

En suivant l'analyse précédente, on a d'une part, un modèle pour le tenseur de Leonard modifié $\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)}$ qui est construit avec la différence des tenseurs $\tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M^\top)}$ et $\tilde{\mathcal{R}}_{ij}^\top$ et d'autre part on peut calculer sa valeur à partir des corrélations des vitesses (1.72) :

$$\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)^a} = -2\bar{\rho}(C_s\Delta)^2 \left[\alpha^2 |\underline{S}^\oplus|^\top S_{ij}^{a\oplus\top} - (|\underline{S}^\oplus| S_{ij}^{a\oplus})^\top \right], \quad (1.73)$$

$$\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)^a} = (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus)^\top - \tilde{u}_i^{\oplus\top} u_j^{\oplus\top} - \frac{1}{3} [(\tilde{u}_k^\oplus u_k^\oplus)^\top - \tilde{u}_k^{\oplus\top} u_k^{\oplus\top}] \delta_{ij}. \quad (1.74)$$

$(C_s\Delta)^2$ va dépendre maintenant de (x, y, z, t) . On peut déterminer ce paramètre à partir des deux dernières équations. Cependant, ce paramètre a une valeur unique pour toutes les composantes, on aura un système d'équations "sur-déterminé". Pour résoudre ce problème, LILLY (1992) prend l'équation (1.72) sous la forme :

$$\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)^a} = 2C\mathcal{M}_{ij},$$

où $C = \bar{\rho}(C_s\Delta)^2$ et \mathcal{M}_{ij} vaut :

$$\mathcal{M}_{ij} = (|\underline{S}^\oplus| S_{ij}^{a\oplus})^\top - \alpha^2 |\underline{S}^\oplus|^\top S_{ij}^{a\oplus\top}. \quad (1.75)$$

Il propose d'utiliser une analyse des moindres carrés avec une fonction erreur $\mathcal{E}rr$ qui exprime le carré de la différence entre $\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)^a}$ et $2C\mathcal{M}_{ij}$:

$$\mathcal{E}rr = \left[\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)^a} - 2C\mathcal{M}_{ij} \right]^2.$$

La valeur minimale se trouve en prenant $\frac{\partial \mathcal{E}rr}{\partial C} = 0$ et $\frac{\partial^2 \mathcal{E}rr}{\partial C^2} > 0$. La première donne le paramètre C :

$$\begin{aligned} -\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)^a} \mathcal{M}_{ij} + 2C\mathcal{M}_{ij}^2 &= 0, \\ C &= \frac{1}{2} \frac{\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)^a} \mathcal{M}_{ij}}{\mathcal{M}_{ij}^2}, \end{aligned} \quad (1.76)$$

et on voit que la deuxième dérivée est positive puisque on a toujours le tenseur \mathcal{M}_{ij}^2 positif.

Le paramètre $(C_s \Delta)^2$ est donc donnée par :

$$(C_s \Delta)^2 = \frac{1}{2\bar{\rho}} \frac{\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)^a} \mathcal{M}_{ij}}{\mathcal{M}_{ij}^2}.$$

On applique maintenant à cette relation la fonction d'amortissement de type VAN DRIEST (1956) pour tenir compte de la variation de taille des mailles dans la zone de proche paroi :

$$(C_s \Delta)^2 = \frac{1}{2\bar{\rho}} \frac{\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)^a} \mathcal{M}_{ij}}{\mathcal{M}_{ij}^2} \left[1 - e^{-z^+/25} \right]^2, \quad (1.77)$$

où

$$z^+ = \frac{zu_*}{\nu}.$$

Si on fait une extension de ce modèle dynamique pour les équations de conservation des grandeurs thermodynamiques, on peut utiliser le nombre de *Prandtl* pour lier le coefficient de diffusion turbulente dynamique au coefficient de diffusion turbulente scalaire.

$$k_h = \frac{k_m}{Pr}, \quad (1.78)$$

où le nombre de Prandtl varie entre $\frac{1}{3}$ et 1.

On applique le filtre test à l'équation de résolution de la température potentielle (1.53) :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\theta'^{\oplus\top})}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_j^{\oplus\top}\bar{\theta})}{\partial x_j^{\oplus}} \delta_{j3} + \frac{\partial(\tilde{u}_j^{\oplus}\theta'^{\oplus\top})}{\partial x_j^{\oplus}} = \mathcal{S}_\theta - \frac{\partial h_{\theta_j}^\top}{\partial x_j^{\oplus}}, \quad (1.79)$$

et on considère l'équivalence :

$$(\tilde{u}_j^{\oplus}\theta'^{\oplus\top})^\top + h_{\theta_j}^\top = \tilde{u}_j^{\oplus\top}\theta'^{\oplus\top} + H_{\theta_j}.$$

On exprime la différence des flux turbulents de la température :

$$H_{\theta_j} - h_{\theta_j}^\top = (\tilde{u}_j^\oplus \theta'^\oplus)^\top - \tilde{u}_j^{\oplus\top} \theta'^{\oplus\top}. \quad (1.80)$$

Ces flux peuvent être obtenues avec le modèle de diffusion turbulente (1.58) et la relation (1.78) :

$$\begin{aligned} h_{\theta_j} &= -\bar{\rho} \frac{k_m}{Pr} \frac{\partial \theta'^\oplus}{\partial x_j^\oplus}, \\ &= -\bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} |S^\oplus| \frac{\partial \theta'^\oplus}{\partial x_j^\oplus}, \end{aligned} \quad (1.81)$$

$$\begin{aligned} H_{\theta_j} &= -\bar{\rho} \frac{k_m^\top}{Pr} \frac{\partial \theta'^{\oplus\top}}{\partial x_j^{\oplus\top}}, \\ &= -\bar{\rho} \frac{(C_s \alpha \Delta)^2}{Pr} |S^\oplus|^\top \frac{\partial \theta'^{\oplus\top}}{\partial x_j^{\oplus\top}}. \end{aligned} \quad (1.82)$$

On a encore un système d'équations "sur-déterminé". En appliquant la procédure des moindres carrés on peut trouver le *nombre de Prandtl* (Pr). Si on appelle \mathcal{Q}_j la différence de la corrélation vitesse - température et \mathcal{N}_j la différence de corrélation déformation - gradient de température, on a :

$$\mathcal{Q}_j = (\tilde{u}_j^\oplus \theta'^\oplus)^\top - \tilde{u}_j^{\oplus\top} \theta'^{\oplus\top}, \quad (1.83)$$

$$\mathcal{N}_j = \left(|S^\oplus| \frac{\partial \theta'^\oplus}{\partial x_j^\oplus} \right)^\top - \alpha^2 |S^\oplus|^\top \frac{\partial \theta'^{\oplus\top}}{\partial x_j^{\oplus\top}}. \quad (1.84)$$

On peut écrire :

$$\mathcal{Q}_j = C \mathcal{N}_j.$$

L'inverse du *nombre de Prandtl* sera alors :

$$\frac{1}{Pr} = \frac{1}{\bar{\rho}(C_s\Delta)^2} \frac{Q_j \mathcal{N}_j}{\mathcal{N}_j^2}. \quad (1.85)$$

Dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.50) et les considérations prises pour les tenseurs de sous-maille (1.55), on a besoin d'obtenir le tenseur $\tilde{\mathcal{R}}_{ij}$. On a modélisé le déviateur de ce tenseur et il faut aussi calculer sa trace. Ceci est justement le double de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille selon (1.56) :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_{kk} &= (\tilde{u}_k^\ominus u_k^\ominus)^\oplus, \\ \tilde{\mathcal{R}}_{kk} &= 2\bar{\rho}E^\ominus. \end{aligned} \quad (1.86)$$

Ainsi, le tenseur de Reynolds de sous-maille est décomposé en deux parties. Son déviateur est modélisé sous la forme de *l'approximation de Boussinesq* et sa trace sera calculée en ajoutant une équation de transport pour l'énergie cinétique turbulente de sous-maille :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_{ij} &= \tilde{\mathcal{R}}_{ij}^a + \frac{1}{3}\tilde{\mathcal{R}}_{kk}\delta_{ij}, \\ \tilde{\mathcal{R}}_{ij} &= -2\bar{\rho}k_m S_{ij}^a + \frac{2}{3}\bar{\rho}E^\ominus\delta_{ij}. \end{aligned} \quad (1.87)$$

On peut utiliser un modèle de type Smagorinsky pour obtenir le coefficient de viscosité turbulente k_m ou bien utiliser d'autres modèles comme, par exemple, le modèle de type *longueur de mélange* où ce coefficient est proportionnel à une taille caractéristique de mélange turbulent et à l'énergie cinétique turbulente de sous-maille.

ARPS propose comme alternative de calcul pour le coefficient de viscosité turbulente, le modèle Smagorinsky Standard avec une constante $C_s = 2, 1$ ou le modèle de longueur de mélange turbulente. On a ajouté à ces choix la détermination dynamique du coefficient C_s de Smagorinsky. Ce type de procédure peut donner des valeurs $(C_s\Delta)^2$ négatives. Bien que cette caractéristique est considéré par Germano comme favorable car il prend en compte le phénomène de retour de l'énergie des petites échelles vers les grosses structures (*phénomène de backscatter*), quand l'amplitude de ces valeurs négatives est élevée, le coefficient dynamique présente des oscillations importantes qui provoquent des instabilités numériques

dans les simulations. Pour améliorer la stabilité, LILLY (1992), ESMAILI & PIOMELLI (1993), PIOMELLI (1993) proposent de calculer les moyennes $\langle \tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)^a} \mathcal{M}_{ij} \rangle$, et $\langle \mathcal{M}_{ij}^2 \rangle$ sur les plans parallèles à la paroi dans le cas d'une simulation de canal, c'est à dire, sur les plans où la turbulence peut être considérée comme homogène. D'autres techniques sont proposées quand la géométrie de la surface ne présente pas des directions homogènes. Dans le code ARPS la technique utilisée est de supprimer les valeurs négatives.

Nous sommes ici conscient de ce problème plus fréquents à la paroi qui provoque certainement un défaut dans le calcul de la turbulence.

1.4.4 L'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille

On définit l'énergie cinétique turbulente du champ de vitesse résiduel (1.86) de la façon suivante :

$$E^\ominus = \frac{1}{2} (u_i^\ominus u_i^\ominus)^\oplus.$$

Pour trouver l'équation de transport, il faut prendre le bilan de la quantité de mouvement (1.35) et le décomposer en grandes et petites échelles :

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\tilde{u}_i^\oplus + \tilde{u}_i^\ominus)}{\partial t} + \frac{\partial [(\tilde{u}_i^\oplus + \tilde{u}_i^\ominus) (u_j^\oplus + u_j^\ominus)]}{\partial x_j} &= \bar{\rho} g_i (B^\oplus + B^\ominus) - \left(\frac{\partial p'^\oplus}{\partial x_i} + \frac{\partial p'^\ominus}{\partial x_i} \right) \\ &+ 2\epsilon_{ijk} \Omega_j (\tilde{u}_k^\oplus + \tilde{u}_k^\ominus) + 2 \frac{\partial [\bar{\rho} \bar{v} (S_{ij}^{a\oplus} + S_{ij}^{a\ominus})]}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (1.88)$$

Si on fait la soustraction de (1.44) à l'équation (1.88) il reste l'équation de transport des fluctuations petites échelles :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}_i^\ominus}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_i^\oplus u_j^\ominus)}{\partial x_j} + \frac{\partial (u_j^\oplus \tilde{u}_i^\ominus)}{\partial x_j} + \frac{\partial (\tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus)}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{ij}}{\partial x_j} &= \bar{\rho} g_i B^\ominus - \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\ominus \\ &+ 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \tilde{u}_k^\ominus + 2 \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{v} S_{ij}^{a\ominus})}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (1.89)$$

Pour le champ des petites échelles on peut négliger la force de Coriolis.

On va déterminer d'abord l'équation de transport du tenseur de Reynolds de sous-maille $\frac{\partial (\tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus}{\partial t}$. En suite, pour $i = j$ on obtient la dérivée totale de l'énergie cinétique turbulente

résiduelle $\frac{\partial(\bar{\rho}E^\ominus)}{\partial t}$ et par conséquence :

$$\frac{(\tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus}{\partial t} = \left(u_j^\ominus \frac{\partial \tilde{u}_i^\ominus}{\partial t} + u_i^\ominus \frac{\partial \tilde{u}_j^\ominus}{\partial t} \right)^\oplus. \quad (1.90)$$

On change l'indice j par k dans l'équation (1.89) et on la multiplie par u_j^\ominus :

$$\begin{aligned} u_j^\ominus \frac{\partial \tilde{u}_i^\ominus}{\partial t} + u_j^\ominus \frac{\partial(\tilde{u}_i^\oplus u_k^\ominus)}{\partial x_k} + u_j^\ominus \frac{\partial(u_k^\oplus \tilde{u}_i^\ominus)}{\partial x_k} + u_j^\ominus \frac{\partial(\tilde{u}_i^\ominus u_k^\ominus)}{\partial x_k} - u_j^\ominus \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{ik}}{\partial x_k} &= u_j^\ominus \bar{\rho} g_i B^\ominus \\ &- u_j^\ominus \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\ominus + 2u_j^\ominus \frac{\partial(\bar{\rho} \nu S_{ik}^{a\ominus})}{\partial x_k}. \end{aligned} \quad (1.91)$$

En suite, on change i par j de façon à obtenir :

$$\begin{aligned} u_i^\ominus \frac{\partial \tilde{u}_j^\ominus}{\partial t} + u_i^\ominus \frac{\partial(\tilde{u}_j^\oplus u_k^\ominus)}{\partial x_k} + u_i^\ominus \frac{\partial(u_k^\oplus \tilde{u}_j^\ominus)}{\partial x_k} + u_i^\ominus \frac{\partial(\tilde{u}_j^\ominus u_k^\ominus)}{\partial x_k} - u_i^\ominus \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{jk}}{\partial x_k} &= u_i^\ominus \bar{\rho} g_j B^\ominus \\ &- u_i^\ominus \left(\frac{\partial p'}{\partial x_j} \right)^\ominus + 2u_i^\ominus \frac{\partial(\bar{\rho} \nu S_{jk}^{a\ominus})}{\partial x_k}. \end{aligned} \quad (1.92)$$

On filtre l'addition des deux dernières équations (1.91) et (1.92) en sachant que :

$$\begin{aligned} u_i^\ominus \tilde{u}_j^\ominus &= \tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus, \\ u_i^\oplus \tilde{u}_j^\oplus &= \tilde{u}_i^\oplus u_j^\oplus, \\ u_i^\oplus \tilde{u}_j^\ominus &= \tilde{u}_i^\oplus u_j^\ominus, \end{aligned}$$

et on obtient :

$$\begin{aligned} \left(u_j^\ominus \frac{\partial(\tilde{u}_i^\oplus u_k^\ominus)}{\partial x_k} + u_i^\ominus \frac{\partial(\tilde{u}_j^\oplus u_k^\ominus)}{\partial x_k} \right)^\oplus &= \left(u_j^\ominus u_k^\ominus \frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_k} + u_j^\ominus u_i^\oplus \underbrace{\frac{\partial \tilde{u}_k^\ominus}{\partial x_k}}_0 + u_i^\ominus u_k^\ominus \frac{\partial \tilde{u}_k^\oplus}{\partial x_k} + u_i^\ominus u_j^\oplus \underbrace{\frac{\partial \tilde{u}_k^\ominus}{\partial x_k}}_0 \right)^\oplus, \\ &= (u_j^\ominus u_k^\ominus)^\oplus \frac{\tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_k} + (u_i^\ominus u_k^\ominus)^\oplus \frac{\partial \tilde{u}_j^\oplus}{\partial x_k}, \end{aligned} \quad (1.93)$$

$$\begin{aligned} \left(u_j^\ominus \frac{\partial(u_k^\oplus \tilde{u}_i^\ominus)}{\partial x_k} + u_i^\ominus \frac{\partial(u_k^\oplus \tilde{u}_j^\ominus)}{\partial x_k} \right)^\oplus &= \left(u_j^\ominus \tilde{u}_k^\oplus \frac{\partial u_i^\ominus}{\partial x_k} + u_j^\ominus u_i^\oplus \underbrace{\frac{\partial \tilde{u}_k^\oplus}{\partial x_k}}_0 + u_i^\ominus \tilde{u}_k^\oplus \frac{\partial u_j^\ominus}{\partial x_k} + u_i^\ominus u_j^\oplus \underbrace{\frac{\partial \tilde{u}_k^\oplus}{\partial x_k}}_0 \right)^\oplus, \\ &= \tilde{u}_k^\oplus \frac{\partial(u_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus}{\partial x_k}, \end{aligned} \quad (1.94)$$

$$\begin{aligned}
\left(u_j^\ominus \frac{\partial(\tilde{u}_i^\ominus u_k^\ominus)}{\partial x_k} + u_i^\ominus \frac{\partial(\tilde{u}_j^\ominus u_k^\ominus)}{\partial x_k} \right)^\oplus &= \left(u_j^\ominus \tilde{u}_k^\ominus \frac{\partial u_i^\ominus}{\partial x_k} + u_j^\ominus u_i^\ominus \underbrace{\frac{\partial \tilde{u}_k^\ominus}{\partial x_k}}_0 + u_i^\ominus \tilde{u}_k^\ominus \frac{\partial u_j^\ominus}{\partial x_k} + u_i^\ominus u_j^\ominus \underbrace{\frac{\partial \tilde{u}_k^\ominus}{\partial x_k}}_0 \right)^\oplus, \\
&= \left[\tilde{u}_k^\ominus \left(u_j^\ominus \frac{\partial u_i^\ominus}{\partial x_k} + u_i^\ominus \frac{\partial u_j^\ominus}{\partial x_k} \right) \right]^\oplus, \\
&= \left(\tilde{u}_k^\ominus \frac{\partial(u_i^\ominus u_j^\ominus)}{\partial x_k} \right)^\oplus, \\
&= \frac{\partial(u_i^\ominus u_j^\ominus \tilde{u}_k^\ominus)^\oplus}{\partial x_k}, \tag{1.95}
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
-\left(u_j^\ominus \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{ik}}{\partial x_k} + u_i^\ominus \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{jk}}{\partial x_k} \right)^\oplus &= -\left(u_j^\ominus \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{ik}}{\partial x_k} \right)^\oplus - \left(u_i^\ominus \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{jk}}{\partial x_k} \right)^\oplus, \\
&= -\frac{\partial(u_j^\ominus \tilde{\mathcal{R}}_{ik})^\oplus}{\partial x_k} + \left(\tilde{\mathcal{R}}_{ik} \frac{\partial u_j^\ominus}{\partial x_k} \right)^\oplus - \frac{\partial(u_i^\ominus \tilde{\mathcal{R}}_{jk})^\oplus}{\partial x_k} + \left(\tilde{\mathcal{R}}_{jk} \frac{\partial u_i^\ominus}{\partial x_k} \right)^\oplus, \\
&= -\frac{\partial(u_j^\ominus \tilde{\mathcal{R}}_{ik})^\oplus}{\partial x_k} - \frac{\partial(u_i^\ominus \tilde{\mathcal{R}}_{jk})^\oplus}{\partial x_k} + (\tilde{\mathcal{R}}_{ik} S_{jk}^\ominus)^\oplus + (\tilde{\mathcal{R}}_{jk} S_{ik}^\ominus)^\oplus. \tag{1.96}
\end{aligned}$$

Pour les termes du deuxième membre de (1.91) et (1.92) on a :

$$\left[u_j^\ominus g_i B^\ominus + u_i^\ominus g_j B^\ominus \right]^\oplus = -g \left[\delta_{i3} \frac{\tilde{u}_j^\ominus}{\bar{\rho}} B^\ominus + \delta_{j3} \frac{\tilde{u}_i^\ominus}{\bar{\rho}} B^\ominus \right]^\oplus, \tag{1.97}$$

et

$$\begin{aligned}
\left[-u_j^\ominus \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)^\ominus - u_i^\ominus \left(\frac{\partial p'}{\partial x_j} \right)^\ominus \right]^\oplus &= -\left(\frac{\tilde{u}_j^\ominus}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'^\ominus}{\partial x_i} + \frac{\tilde{u}_i^\ominus}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'^\ominus}{\partial x_j} \right)^\oplus, \\
&= -\left(\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial(\tilde{u}_j^\ominus p'^\ominus)}{\partial x_i} - \frac{p'^\ominus}{\bar{\rho}} \frac{\partial \tilde{u}_j^\ominus}{\partial x_i} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial(\tilde{u}_i^\ominus p'^\ominus)}{\partial x_j} - \frac{p'^\ominus}{\bar{\rho}} \frac{\partial \tilde{u}_i^\ominus}{\partial x_j} \right)^\oplus, \\
&= \left[\frac{p'^\ominus}{\bar{\rho}} \left(\frac{\tilde{u}_j^\ominus}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i^\ominus}{\partial x_j} \right) \right]^\oplus - \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial(\tilde{u}_j^\ominus p'^\ominus)}{\partial x_i} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial(\tilde{u}_i^\ominus p'^\ominus)}{\partial x_k} \right)^\oplus. \tag{1.98}
\end{aligned}$$

Les derniers termes de (1.91) et (1.92) représentent la dissipation visqueuse que l'on va appeler $\varepsilon_{v_{ij}}$. Les deux derniers termes de (1.96) représentent la dissipation de sous-maille $\varepsilon_{SGS_{ij}}$. Ces termes sont tous négatifs puisqu'ils prennent de l'énergie des grosses structures pour la dissiper aux petites échelles.

L'équation de transport du tenseur de Reynolds de sous-maille est alors :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\tilde{u}_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus}{\partial t} = & - (u_j^\ominus u_k^\ominus)^\oplus \frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_k} - (u_i^\ominus u_k^\ominus)^\oplus \frac{\partial \tilde{u}_j^\oplus}{\partial x_k} - \tilde{u}_k^\oplus \frac{\partial(u_i^\ominus u_j^\ominus)}{\partial x_k} - \frac{\partial(u_i^\ominus u_j^\ominus \tilde{u}_k^\ominus)^\oplus}{\partial x_k} \\
& - g \left[\delta_{i3} \frac{\tilde{u}_j^\ominus}{\bar{\rho}} B^\ominus + \delta_{j3} \frac{\tilde{u}_i^\ominus}{\bar{\rho}} B^\ominus \right]^\oplus + \left[\frac{p'^\ominus}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j^\ominus}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i^\ominus}{\partial x_j} \right) \right]^\oplus - \varepsilon_{ij} \\
& - \frac{\partial(u_j^\ominus \tilde{\mathcal{R}}_{ik})^\oplus}{\partial x_k} - \frac{\partial(u_i^\ominus \tilde{\mathcal{R}}_{jk})^\oplus}{\partial x_k} - \left[\frac{1}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial(\tilde{u}_j^\ominus p'^\ominus)}{\partial x_i} + \frac{\partial(\tilde{u}_i^\ominus p'^\ominus)}{\partial x_j} \right) \right]^\oplus \quad (1.99)
\end{aligned}$$

Dans la dernière équation, nous avons mis $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{v_{ij}} + \varepsilon_{SGS_{ij}}$ comme le taux de dissipation total de l'énergie.

Pour trouver l'énergie cinétique turbulente résiduelle pondérée par la densité moyenne, on prend $i = j$ dans la dernière expression :

$$\begin{aligned}
2 \frac{\partial(\bar{\rho} E^\ominus)}{\partial t} = & - 2(u_i^\ominus u_k^\ominus)^\oplus \frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_k} - 2\tilde{u}_k^\oplus \frac{\partial E^\ominus}{\partial x_k} - 2 \frac{\partial(\tilde{u}_k^\ominus E^\ominus)^\oplus}{\partial x_k} - 2 \left(u_i^\ominus \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{ik}}{\partial x_k} \right)^\oplus \\
& - 2g \left[\delta_{i3} \frac{\tilde{u}_i^\ominus}{\bar{\rho}} B^\ominus \right]^\oplus + 2 \left[\frac{p'^\ominus}{\bar{\rho}} \frac{\partial \tilde{u}_i^\ominus}{\partial x_i} \right]^\oplus - 2 \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial(\tilde{u}_i^\ominus p'^\ominus)}{\partial x_i} \right)^\oplus - \varepsilon_{ii}, \\
\underbrace{\frac{\partial(\bar{\rho} E^\ominus)}{\partial t} + \tilde{u}_k^\oplus \frac{\partial E^\ominus}{\partial x_k}}_{\frac{d(\bar{\rho} E^\ominus)}{dt}} = & - \underbrace{(u_i^\ominus u_k^\ominus)^\oplus \frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_k}}_{Production} - \underbrace{\frac{\partial(\tilde{u}_k^\ominus E^\ominus)^\oplus}{\partial x_k}}_{Diff. turbulente} + \underbrace{\frac{\partial(u_i^\ominus \tilde{\mathcal{R}}_{ik})^\oplus}{\partial x_k}}_{Diff. SGS} \\
& - \underbrace{g \left[\delta_{i3} \frac{\tilde{u}_i^\ominus}{\bar{\rho}} B^\ominus \right]^\oplus}_{Gravité} - \underbrace{\left(\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial(\tilde{u}_i^\ominus p'^\ominus)}{\partial x_i} \right)^\oplus}_{Diff. par les fluc. pression} - \underbrace{\frac{1}{2} \varepsilon_{ii}}_{Dissip.} \quad (1.100)
\end{aligned}$$

On peut réunir les termes de diffusion pour les modéliser ensemble (DEARDORFF (1979)) :

$$\begin{aligned} \frac{d(\bar{\rho}E^\ominus)}{dt} = & - (u_i^\ominus u_k^\ominus)^\oplus \frac{\partial \tilde{u}_i^\oplus}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\tilde{u}_i^\ominus \left(E^\ominus + \mathcal{R}_{ik} + \frac{p'^\ominus}{\bar{\rho}} \right) \right]^\oplus - g \left[\delta_{i3} \frac{\tilde{u}_i^\ominus}{\bar{\rho}} B^\ominus \right]^\oplus \\ & - \frac{1}{2} \varepsilon_{ii}. \end{aligned} \quad (1.101)$$

L'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente résiduelle peut être résolue en utilisant des modèles de fermeture pour les termes inconnus.

DEARDORFF (1979) propose des modèles de fermeture pour les termes inconnus de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente :

$$(u_i^\ominus u_k^\ominus)^\oplus = -k_m \left(\frac{\partial u_i^\oplus}{\partial x_k^\oplus} + \frac{\partial u_k^\oplus}{\partial x_i^\oplus} \right) + \frac{2}{3} E^\ominus \delta_{ij}, \quad (1.102)$$

$$\left[\tilde{u}_i^\ominus \left(E^\ominus + \mathcal{R}_{ik} + \frac{p'^\ominus}{\rho} \right) \right]^\oplus = -2k_m \frac{\partial(\bar{\rho}E^\ominus)}{\partial x_i}, \quad (1.103)$$

où le premier modèle est celui du tenseur de Reynolds de sous-maille (1.87).

Selon (1.34), l'expression du terme de gravité :

$$g \left[\delta_{i3} \frac{\tilde{u}_i^\ominus}{\bar{\rho}} B^\ominus \right]^\oplus = g \delta_{i3} \left[\tilde{u}_i^\ominus \left(\frac{p'^\ominus}{\bar{\rho}V_s^2} - \frac{\theta'_v}{\bar{\theta}_v} \right) \right]^\oplus, \quad (1.104)$$

où on a utilisé directement la température potentielle virtuelle.

DEARDORFF (1979) néglige les fluctuations de la pression par rapport à celles de la température potentielle virtuelle et modélise le terme de corrélation vitesse-température potentielle virtuelle en fonction de la quantité de la vapeur d'eau dans l'air par rapport à celle de la saturation q_s :

$$(\tilde{u}_i^\ominus \theta_v^\ominus)^\oplus = \mathcal{A}(\tilde{u}_i^\ominus \theta^\ominus)^\oplus + \mathcal{B}\bar{\theta}(\tilde{u}_i^\ominus q_v^\ominus)^\oplus, \quad (1.105)$$

$$(\tilde{u}_i^\ominus \theta^\ominus)^\oplus = -k_h \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i}, \quad (1.106)$$

$$(\tilde{u}_i^\ominus q_v^\ominus)^\oplus = -k_h \frac{\partial \bar{q}_v}{\partial x_i}. \quad (1.107)$$

Si :

$$\begin{cases} q_v \leq q_s : \mathcal{A} = 1 + 0,61\bar{q}_v, & \mathcal{B} = 0,61. \\ q_v > q_s : \mathcal{A} = (1 + 0,61\bar{q}_v) - \mathcal{C}_3 \left[\frac{L}{C_p T} (1 + 0,61\bar{q}_v) - 1,61 \right], & \mathcal{B} = \frac{L}{C_p T} - 1, \end{cases} \quad (1.108)$$

$$\mathcal{C}_3 = \frac{0,622 \frac{L}{R_d T} q_s}{\left[1 + 0,622 \frac{L}{R_d T} \frac{L}{C_p T} q_s \right]}.$$

Le terme de dissipation est modelé par :

$$\frac{1}{2} \varepsilon_{ii} = \bar{\rho} \frac{C_\varepsilon}{l} (E^\ominus)^{3/2}, \quad (1.109)$$

où l est une échelle de longueur de mélange qui dépend de l'instabilité de l'écoulement et C_ε est la constante de dissipation visqueuse.

$$C_\varepsilon = \begin{cases} 3,9 & \text{pour les boites du maillage adyacentes à la paroi,} \\ 0,19 + 0,51 \frac{l}{\Delta} & \text{sinon,} \end{cases} \quad (1.110)$$

$$l = \begin{cases} 0,76 (E^\ominus)^{1/2} \delta_{i3} \left(\frac{g}{\theta} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i^\oplus} \right)^{-1/2} & \text{si } l < \Delta \text{ et } \delta_{i3} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i^\oplus} > 0, \\ \Delta & \text{sinon,} \end{cases} \quad (1.111)$$

où Δ est une échelle caractéristique du maillage :

$$\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{\frac{1}{3}}. \quad (1.112)$$

L'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille (1.101) avec les modèles de fermeture pour obtenir les termes inconnus, permettront de trouver la trace du tenseur de Reynolds de sous-maille. Cependant, dans cette procédure on a besoin de connaître la valeur du coefficient de diffusion turbulente k_m dans (1.102). On est donc obligé de proposer des valeurs initiales pour k_m et E^\ominus . ARPS utilise au premier pas de calcul le modèle Smagorinsky Standard en négligeant l'apporte des petites échelles ($E_{t=0}^\ominus = 0$) :

$$k_{m_{t=0}} = (C_s \Delta)^2 |S^\oplus|,$$

avec $C_s = 2,1$. Cela nous semble effectivement la meilleur solution et nous ne l'avons pas modifié.

1.4.5 Fermeture d'ordre 1,5 avec l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille

On peut relier les coefficients de mélanges turbulents k_m et k_h à l'énergie cinétique turbulente (SCHUMANN (1975)) et fermer l'équation de quantité de mouvement.

Ces coefficients sont proportionnels à l'énergie cinétique turbulente et à l'échelle de longueur de mélange :

$$k_m = 0,1l(E^\ominus)^{1/2}, \quad (1.113)$$

$$k_h = \frac{k_m}{Pr} = \frac{1}{1 + \frac{2l}{\Delta}}. \quad (1.114)$$

Comme dans le cas précédent, il est nécessaire de démarrer le calcul avec une valeur initiale pour le coefficient de diffusion turbulent k_m . Ce dernier est obtenu avec l'application du modèle Smagorinsky Standard et $E_{t=0}^\ominus = 0$. De même, cela nous semble la meilleur solution.

1.5 Modèles de paroi

Dans les couches limites turbulentes à grand nombre de Re , la sous-couche visqueuse est très mince et le nombre de nœuds du maillage exigé pour résoudre numériquement les échelles turbulentes croît dramatiquement.

Dans les simulations d'écoulements de canal turbulent, DEARDORFF (1970) a utilisé un modèle de paroi sans résolution de l'écoulement dans cette zone. Le premier point de résolution du maillage a été placé dehors et éloigné de la zone de sous-couche visqueuse, ce qui fait que la valeur calculée de la contrainte de paroi était inexacte. Pour arranger cette erreur, DEARDORFF (1970) a forcé la deuxième dérivée de la vitesse horizontale du premier point de maillage de façon à obtenir la loi logarithmique de couche limite. Les conditions aux limites qu'il a utilisé sont :

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u^\oplus}{\partial z \partial z} &= \frac{\partial^2 \langle u^\oplus \rangle}{\partial z \partial z} + \frac{\partial^2 u^\oplus}{\partial y \partial y} = -k_v^{-1} \left(\frac{1}{2} \Delta z \right) + \frac{\partial^2 u^\oplus}{\partial y \partial y}, \\ \frac{\partial^2 v^\oplus}{\partial z \partial z} &= \frac{\partial^2 v^\oplus}{\partial x \partial x},\end{aligned}\tag{1.115}$$

où $z = \frac{1}{2} \Delta z$ (limite inférieur) et $z = z_{top} - \frac{1}{2} \Delta z$ (limite supérieur).
et z_{top} est la valeur limite supérieure de la coordonnée verticale.

$$w^\oplus = 0,\tag{1.116}$$

pour $z = 0$ et $z = z_{top}$. k_v est la constante de *Von-Kármán* et Δz est la taille verticale de la maille de calcul. Ces conditions ne prennent en compte ni la rugosité superficielle z_0 ni la vitesse de frottement u_* . Cela permet une simple intégration numérique et peut être appliqué de façon générale mais c'est justifié si on place le premier point du maillage éloigné de la paroi. La condition d'imperméabilité (1.116) implique que les composantes des contraintes de Re : $u^\oplus w^\oplus$, $w^{\oplus 2}$ et $w^\oplus v^\oplus$, soient nulles à la paroi et cela suppose que, proche de la paroi, le tenseur des contraintes est dû entièrement aux échelles de sous-maille (PIOMELLI *et al* (1989)).

Quand le flux est résolu proche de la paroi, le modèle de Smagorinsky dynamique (GERMANO *et al* (1991)) ne peut pas prédire avec une bonne précision le tenseur des contraintes de Reynolds puisque la taille du maillage est très grand par rapport à celles des structures turbulentes prédominantes. Si on utilise un maillage où l'écart vertical diminue dans la zone de proche paroi pour tenir compte des échelles turbulentes, les tailles de maille Δx et Δy restent encore très grands et il sera difficile de calculer la structure turbulente dans cette zone. Comme conséquence, la valeur de la contrainte à la paroi qui est calculée par le modèle Smagorinsky dynamique devient trop petit (KALTENBACH (1998)). BAGGETT *et*

al (1997), JIMENEZ & MOSER (1998) affirment que le modèle de Smagorinsky dynamique est incapable d'apporter une solution adaptée à ce problème et il est nécessaire d'ajouter la partie manquante aux valeurs des contraintes de paroi calculées.

L'intérêt de regarder de plus près les phénomènes de la zone de proche paroi a motivé à proposer des modèles de paroi plus sophistiqués que celui de DEARDORFF (1970). BAGGETT (1997) les a classifiés en trois types :

- 1) Le premier utilise une loi de paroi logarithmique qui est appliquée localement pour relier la vitesse horizontale correspondant au premier nœud du maillage au dessus de la zone de paroi, au tenseur des contraintes à la paroi. Il est admis que dans la sous-couche visqueuse existe pratiquement un équilibre entre la production d'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation. Cette approche est normalement appliquée en LES pour les couches limites planétaires (MASON (1989), SCHMIDT & SCHUMANN (1989)) et pour les simples applications d'ingénierie (PIOMELLI *et al* (1989)). Cela donne une relation algébrique entre la valeur de la contrainte instantanée de paroi et la vitesse horizontale extérieure à cette zone. Ce type de méthode est appliquée comme *condition aux limites approximatives* pour représenter les effets de la paroi et ne pas calculer directement le tenseur des contraintes de paroi mais l'estimer en fonction de la vitesse au cœur de l'écoulement.

En particulier, MASON & CALLEN (1986) ont proposé aussi la condition d'imperméabilité pour la vitesse normale à la paroi mais ils ont spécifié la contrainte de paroi en disant que la loi logarithmique pour le champ de vitesse longitudinale et transversale est obtenue localement et instantanément :

$$u_A^\oplus = \frac{u_*}{k_v} \cos \varphi \ln \left(1 + \frac{\Delta_A}{z_0} \right), \quad (1.117)$$

$$v_A^\oplus = \frac{u_*}{k_v} \sin \varphi \ln \left(1 + \frac{\Delta_A}{z_0} \right), \quad (1.118)$$

$$u_*^2 = \frac{1}{M} \left| \vec{V}_A^\oplus \right| \cdot \vec{V}_A^\oplus, \quad (1.119)$$

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{k_v^2} \ln^2 \left(1 + \frac{\Delta_A}{z_0} \right), \quad (1.120)$$

$$\left| \vec{V}_A^\oplus \right| = \sqrt{u_A^2 + v_A^2}, \quad (1.121)$$

où u_A^\oplus et v_A^\oplus sont les composantes de la vitesse dans les directions (x, y) respectivement et \vec{V}_A^\oplus est le vecteur vitesse au point le plus bas du maillage. La grandeur φ est

l'angle formé entre le vecteur \vec{V}_A et sa composante dans la direction (x).

Ces équations peuvent être utilisées pour calculer le tenseur de paroi en fonction de deux composantes de vitesse.

$$\mathcal{T}_{13}|_p = \bar{\rho} (\overline{u'w'})|_p = -\bar{\rho}u_*^2 \cos \varphi \quad (1.122)$$

$$\mathcal{T}_{23}|_p = \bar{\rho} (\overline{v'w'})|_p = -\bar{\rho}u_*^2 \sin \varphi \quad (1.123)$$

Pour appliquer des telles conditions, l'accélération du flux dans le plan $z = \Delta_A$ doit être négligeable pour que la solution tende vers la valeur locale et instantanée des contraintes de paroi $\mathcal{T}_{13}|_p$ et $\mathcal{T}_{23}|_p$ cherchées. Les accélérations de l'écoulement sont de l'ordre de $\frac{T_p}{\delta}$, où δ est l'épaisseur de la couche limite. Pour cela donc, il faut que $\Delta_A \ll 0, 2\delta$ (MASON & CALLEN (1986)).

- 2) Un deuxième type de modèle utilise les *techniques de décomposition du maillage*. Cela permet de ressoudre les équations de Navier-Stokes tridimensionnelles au cœur de l'écoulement avec la technique LES et un deuxième maillage plus fin est résolu dans la zone de proche paroi où s'appliquent les équations simplifiées de Navier-Stokes en 2D pour résoudre les composants horizontaux du champ de vitesse et les contraintes à la paroi. La composante verticale de la vitesse est calculée avec l'équation de continuité. Les conditions aux limites pour la vitesse à la paroi sont non-glissantes. La viscosité turbulente, par contre, est calculée avec un modèle de type RANS (Reynolds Average Naviers-Stokes) de longueur de mélange qui s'amortisse à la paroi (CABOT (1995, 1996, 1997), BALARAS *et al* (1996), CABOT & MOIN (2000), WANG & MOIN (2002)). Les équations utilisées pour la zone de proche paroi sont alors :

$$\frac{\partial}{\partial x_3} \left[(\nu + \nu_t) \frac{\partial u_i}{\partial x_3} \right] = F_i \quad , \text{pour } i = 1; 2, \quad (1.124)$$

$$F_i = \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_i u_j)}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i}, \quad (1.125)$$

où ν_t est la viscosité turbulente obtenue en prenant un modèle RANS de longueur de mélange avec une fonction d'amortissement à la paroi (CABOT & MOIN (2000), TEMPLETON *et al* (2002)) :

$$\frac{\nu_t}{\nu} = k_v z^+ \left(1 - e^{-z^+/A} \right)^2 \quad (1.126)$$

où $z^+ = zu_*/\nu$ est la distance à la paroi en unités de paroi (basées sur la vitesse de friction locale et instantanée u_*) et $\mathcal{A} = 19$ est une constante du modèle.

WANG (2000) applique ce modèle à un flux turbulent complexe au long d'une surface de bord de fuite. Il propose de résoudre les équations au dessus avec l'hypothèse d'équilibre des forces $F_i = 0$ (sans gradient de pression) et $F_i = \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i}$ (avec gradient de pression). Le modèle avec cette hypothèse implique l'utilisation d'une loi logarithmique de paroi pour les vitesses à $z^+ \gg 1$ et linéaire pour $z^+ < 1$. Le choix de la distance à partir de laquelle on définit la zone du raffinement du maillage z_F^+ n'est pas simple. KALTENBACH (1998) a utilisé $z_F^+ = 70$, CABOT (1995) propose $z_F^+ = 40$ et un peu plus tard, CABOT (1997) utilise $z_F^+ = 50$. Il indique qu'il est nécessaire de relier z_F^+ à la valeur de la vitesse calculée au cœur de l'écoulement dans la zone $50 > z^+ > 75$ pour amortir les instabilités d'interface entre les conditions aux limites de la zone de proche paroi et dans la zone au cœur de l'écoulement.

- 3) Un troisième type de modèle a été développé pour être appliqué à des écoulements arbitraires. Dans cette approche, une méthode stochastique linéaire des moindres carrés est utilisée pour trouver la meilleure estimation de la valeur du tenseur des contraintes à la paroi en prenant les vitesses calculées par la LES dans les plans parallèles. Cette valeur est donnée comme condition aux limites pour le calcul LES (BAGWELL *et al* (1993) et BAGWELL (1994)).

Une variante par rapport aux premier et second type de modèles est proposée par SPALART *et al* (1998). Ils utilisent une modification dans le calcul de la viscosité turbulente de sous-maille LES. Ils apportent un terme de façon à supplir la partie manquante de la valeur de la contrainte de proche paroi (dans le sens de la moyenne temporelle). Ce terme de type RANS a une fonction d'amortissement de façon à devenir négligeable dans la zone au cœur de l'écoulement. L'avantage par rapport aux modèles de type décomposition du domaine est que la formulation néglige les pics de l'interface entre le domaine au cœur de l'écoulement et celui de proche paroi. Cela améliore la prédiction au cœur de l'écoulement puisque le terme additionnel peut devenir graduellement négligeable au fur et à mesure que on s'éloigne de la paroi (KALTENBACH (1998)).

Dans le code ARPS, il est proposé un modèle de paroi avec des *conditions aux limites approximatives* (premier type selon la classification de BAGGETT (1997)) avec les équations (1.117) à (1.121) et pour les contraintes à la paroi il existent deux choix de calcul. Le premier consiste à utiliser des coefficients de frottement C_{dm} et de mélange turbulent C_{dh} constants. Pour la deuxième possibilité, il faut les calculer en fonction de la stabilité thermique de la couche limite (BYUN (1990)). Dans le premier cas, pour les contraintes turbulentes à la paroi on impose :

$$\mathcal{T}_{13}|_p = \bar{\rho} (\overline{u'w'})|_p = -\bar{\rho}C_{dm} \left(\max \left[\left| \vec{V}_{\oplus A} \right|, \left| \vec{V}_{\oplus Amin} \right| \right] \right) u_A^{\oplus}, \quad (1.127)$$

$$\mathcal{T}_{23}|_p = \bar{\rho} (\overline{v'w'})|_p = -\bar{\rho}C_{dm} \left(\max \left[\left| \vec{V}_{\oplus A} \right|, \left| \vec{V}_{\oplus Amin} \right| \right] \right) v_A^{\oplus}, \quad (1.128)$$

où u_A^{\oplus} et v_A^{\oplus} sont les composantes de la vitesse aux nœuds plus bas du maillage dans les directions (x) et (y) respectivement, $\left| \vec{V}_{Amin} \right|$ est la limite inférieure de $\left| \vec{V}_A \right|$ et ne permet pas que les flux turbulents soient nuls.

Cependant, au contraire de MASON & CALLEN (1986), la condition au limite inférieur de la zone de proche paroi est de type glissant et on impose la loi logarithmique sans la nécessité d'ajouter la valeur 1 dans l'argument de la fonction logarithmique. Les valeurs de la vitesse pour la première maille sont calculées selon cette loi :

$$u_A^{\oplus} = \frac{u_*}{k_v} \ln \left(\frac{\Delta_A}{z_0} \right) \cos \varphi, \quad (1.129)$$

$$v_A^{\oplus} = \frac{u_*}{k_v} \ln \left(\frac{\Delta_A}{z_0} \right) \sin \varphi. \quad (1.130)$$

Si l'on élève au carré chacun de ces dernières équations et si l'on fait l'addition, on obtient :

$$\left| \vec{V}_{\oplus A} \right|^2 = u_A^{\oplus 2} + v_A^{\oplus 2} = \frac{u_*^2}{k_v^2} \ln^2 \left(\frac{\Delta_A}{z_0} \right) = \frac{u_*^2}{C_{dm}}, \quad (1.131)$$

et la vitesse de friction peut être remplacée dans les équations (1.122) et (1.123) et l'on a :

$$\mathcal{T}_{13}|_p = -\bar{\rho}C_{dm} \left| \vec{V}_{\oplus A} \right|^2 \cos \varphi = -\bar{\rho}C_{dm} \left| \vec{V}_{\oplus A} \right| u_A^{\oplus}, \quad (1.132)$$

$$\mathcal{T}_{23}|_p = -\bar{\rho}C_{dm} \left| \vec{V}_{\oplus A} \right|^2 \sin \varphi = -\bar{\rho}C_{dm} \left| \vec{V}_{\oplus A} \right| v_A^{\oplus}. \quad (1.133)$$

On peut alors calculer le coefficient de frottement en fonction de la disposition du maillage et de la rugosité.

$$C_{dm} = \frac{k_v^2}{\ln^2 \left(\frac{\Delta_A}{z_0} \right)}. \quad (1.134)$$

Le flux de chaleur sensible est défini par :

$$h_{\theta}|_p = \bar{\rho} (\overline{\theta w'})|_p = -\bar{\rho} C_{dh} \left(\max \left[\left| \vec{V}_{\oplus A} \right|, \left| \vec{V}_{\oplus Amin} \right| \right] \right) (\theta^{\oplus} - \theta_0), \quad (1.135)$$

où θ_0 est la température potentielle de surface et $C_{dh} = C_{dm}/Pr$.

La deuxième alternative est tenir compte de la stabilité thermique de l'atmosphère pour calculer les coefficients C_{dm} et C_{dh} .

Un des paramètres de stabilité est le nombre de *Richardson* défini par :

$$\mathcal{R}i_b = \frac{g}{\bar{\theta}} \frac{\Delta\theta(z - z_0)}{U^2}, \quad (1.136)$$

où z_0 est la hauteur caractéristique de la rugosité superficielle, $\Delta\theta = \theta_A - \theta_s$ est la différence de température potentielle entre la position au premier nœud du maillage et la surface. Si l'atmosphère est instable : $\mathcal{R}i_b < 0$, est neutre : $\mathcal{R}i_b = 0$ ou est stable : $\mathcal{R}i_b > 0$.

Les coefficients C_{dm} et C_{dh} sont fonctions de la rugosité superficielle et des paramètres de stabilité Ψ_m et Ψ_h , on a alors :

$$C_{dm} = \left[\frac{k_v}{\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L}, \frac{z_0}{L} \right)} \right]^2, \quad (1.137)$$

$$C_{dh} = \left[\frac{k_v}{Pr \left(\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_h \left(\frac{z}{L}, \frac{z_0}{L} \right) \right)} \right] C_{dm}^{1/2}. \quad (1.138)$$

BYUN (1990) exprime ces paramètres au travers des relations empiriques à partir de mesures réalisées par BUSINGER *et al.* (1971) et qui sont fonction de la rugosité superficielle, de la température de la surface, du nombre de Richardson et de la hauteur de la couche limite.

Chapitre 2

MODÈLE STOCHASTIQUE

2.1 Introduction

Le chapitre précédent a été dédié à la description de la résolution des équations de *Navier-Stokes* afin de prédire l'évolution d'écoulements turbulents avec l'approche LES. Pour suivre l'évolution des polluants et de leur dispersion dans l'atmosphère, d'espèces chimiques réactives ou de particules solides, il va falloir coupler cette approche à un modèle de suivi des particules dans la maille de calcul. Dans ce chapitre nous allons nous intéresser à de tels modèles, à la démarche générale et aux différents types de variantes en fonction des hypothèses proposées pour l'écoulement turbulent.

2.2 Modèle Lagrangien

Le modèle lagrangien permet de connaître les trajectoires des particules dans un écoulement turbulent. Il est conçu en analogie avec les hypothèses du modèle de déplacement microscopique d'une molécule suivant la théorie du mouvement *brownien*. Une particule microscopique de taille suffisamment petite trouve dans son parcours des molécules qui la percutent, de fait elle suivra une trajectoire aléatoire très irrégulière. Cette trajectoire est d'autant plus chaotique que l'agitation moléculaire l'est et nous pouvons attendre 10^{21} collisions par seconde dans un liquide soumis à des conditions normales de température et de pression. Il est donc impossible de connaître exactement la trajectoire réelle d'une particule immergée dans un écoulement turbulent. Les outils statistiques permettront de caractériser quelques propriétés de sa trajectoire afin de la modéliser. Une particule est en mouvement *brownien* lorsque le rapport entre sa masse et la masse des molécules du fluide est grand devant l'unité. BACHELIER (1900) a obtenu la loi du mouvement *brownien* dans sa thèse intitulée *La théorie de la spéculation*, EINSTEIN (1905) et SMOLUCHOWSKI (1906) ont donné les premières explications de ce type de mouvement. LANGEVIN (1908) a conçu un modèle en tenant compte des effets d'inertie des particules. WIENER (1923) a construit un processus stochastique pour représenter la position d'une particule soumise à ce type de mouvement. Pour simplifier, en raisonnant sur une dimension, on repère la position de la particule par

une abscisse x . Deux forces, caractérisent toutes les deux l'effet du fluide, agissant sur la particule de masse m , une force de frottement visqueux $-m\mu(dx/dt)$, caractérisée par le coefficient de frottement, et une force fluctuante $F(t)$, qui représente les impacts incessants des molécules du fluide sur la particule. La force $F(t)$ est supposée indépendante de la vitesse de la particule, elle est donc une force extérieure, appelée *force de Langevin*. S'il n'y a pas d'autre force extérieure appliquée, la particule est dite "libre". L'équation du mouvement pour la position de la particule libre est donnée par la loi de Newton :

$$m \frac{d\vec{U}}{dt} = -m\mu\vec{U} + F(t), \quad (2.1)$$

où \vec{U} est le vecteur vitesse Lagrangienne. Cette équation est aussi appelée *équation de Langevin*.

C'est le premier exemple d'une équation différentielle stochastique (qui contient un terme aléatoire). La force de frottement et la force fluctuante représentent deux conséquences du même phénomène physique, les collisions de la particule avec les molécules du fluide.

La plupart des modèles utilisent l'hypothèse que la position de la particule évolue de façon *markovienne*, c'est-à-dire que la position future ne dépend que de son état présent et non de ses états antérieurs. Cela implique que le temps intégral de l'accélération T_a est beaucoup plus petit que le temps intégral de la vitesse T_L . MONIN & YAGLOM (1975) montrent que le rapport entre les deux temps est fonction du nombre de Re . La condition $T_a \ll T_L$ ne sera donc vérifiée que pour un grand nombre de Re . Cela n'est pas strictement certain dans la zone proche paroi.

DURBIN (1983) a fait une étude détaillée des phénomènes de transport, dispersion et contamination par convection turbulente avec l'utilisation de ces processus *markoviens* pour le mouvement des particules à l'aide de l'équation de *Langevin*.

2.2.1 L'équation de Langevin classique

Afin de déterminer les coefficients mis en jeu dans l'équation de Langevin (2.1), nous allons se placer dans le cas le plus simple d'un écoulement turbulente : la turbulence homogène isotrope stationnaire sans gradient de vitesse moyenne. Nous allons utiliser l'approche discrète de TAYLOR (1921).

D'abord, on va poser l'équation de Langevin sous la forme :

$$\frac{d\vec{U}}{dt} = -\alpha_u\vec{U} + \vec{A}(t). \quad (2.2)$$

Les conditions de l'écoulement peuvent alors se résumer par :

$$\begin{cases} u(x, y, z, t) = \bar{u}, & \text{est constante,} \\ v(x, y, z, t) = 0, \\ w(x, y, z, t) = w'(x, y, z, t), \end{cases} \quad (2.3)$$

où l'on a fait la décomposition du champ de vitesse eulérienne u_i en sa moyenne \bar{u}_i et sa fluctuation u'_i (décomposition Reynolds).

On considère un écoulement bidimensionnel et les fluctuations dans la direction de convection ($x'x$) sont négligeables devant les fluctuations dans la direction perpendiculaire ($z'z$).

On considère une source S relachant des particules fluides porteuses ou non du scalaire. Elles sont injectées de façon passive (sans rajout de quantité de mouvement).

Une particule sortie de la source S , est convectée selon ($x'x$) pour le champ moyen et dans la direction ($z'z$) pour le champ fluctuant. Si on lance depuis la source plusieurs particules à l'instant t_0 , à l'instant $t = t_0 + \tau$ toutes les particules seront au même abscisse x mais à différentes altitudes z selon le processus stochastique que gère leurs trajectoires. Cela se traduit par le système d'équations :

$$\begin{cases} x(t) = x_S + \bar{u}t, \\ z(t) = \int_0^t \hat{W}(t') dt', \end{cases} \quad (2.4)$$

où la vitesse lagrangienne de la particule est exprimée par :

$$\hat{U}_i \equiv \begin{bmatrix} \hat{U} \\ \hat{V} \\ \hat{W} \end{bmatrix}.$$

Nous allons nous intéresser à la position d'une particule fluide et à la vitesse du champ fluctuant. Comme la turbulence est supposée homogène isotrope stationnaire, le champ lagrangien de vitesse turbulent $\hat{W}(t)$ vérifie les hypothèses suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} (h1) \quad \hat{W}(t), \quad \text{est une fonction aléatoire gaussienne.} \\ (h2) \quad \langle \hat{W}^2(t) \rangle = \sigma_{\hat{W}}^2, \quad \text{est constante.} \\ (h3) \quad T_L = \int_0^\infty \langle \frac{\hat{W}(t)\hat{W}(t+\tau)}{\sigma_{\hat{W}}^2} \rangle d\tau, \quad \text{est constant.} \end{array} \right.$$

Dans les hypothèses ci-dessus, T_L est le *temps de cohérence Lagrangien*.

On a introduit l'opérateur de moyenne lagrangienne $\langle . \rangle$ pour exprimer que la moyenne est fait en suivant la trajectoire de la particule fluide et on fait la différence avec la moyenne eulérienne $\langle \cdot \rangle$, qui est une moyenne temporelle à une position ou zone de l'espace fluide fixée.

Pour discrétiser l'équation (2.2) il va falloir choisir un pas de temps Δt . Ils existent deux temps caractéristiques dans la dynamique des fluctuations de la vitesse de la particule libre, l'un très court est le temps de collisions τ_c , l'autre beaucoup plus long est le temps de relaxation de la vitesse moyenne T_R . On a la relation :

$$\tau_c \ll T_R.$$

La valeur du pas de temps Δt doit être plus long que le temps de collisions τ_c puisque l'évolution de la vitesse de la particule découle de nombreux chocs qu'elle subit de la part des molécules. Si on doit décrire l'évolution de la vitesse, Δt doit rester petit par rapport au temps de relaxation de la vitesse moyenne T_R .

Si à l'instant $t = 0$ la vitesse de la particule est $\hat{W}(t_0) = \hat{W}_0$, la solution de l'équation de Langevin (2.2) pour cette condition initiale s'écrit :

$$\hat{W}(t) = \hat{W}_0 e^{-\gamma t} + \int_0^t \mathcal{A}(t') e^{-\gamma(t-t')} dt'.$$

En moyenne, la force fluctuante est nulle. La vitesse moyenne lagrangienne est :

$$\langle \hat{W}(t) \rangle = \hat{W}_0 e^{-\gamma t}.$$

La vitesse moyenne lagrangienne s'amortit avec le temps de relaxation :

$$T_R = \gamma^{-1}.$$

L'équation de Langevin décrit une évolution de la vitesse de la particule sur une échelle de temps intermédiaire Δt comprise entre τ_c et T_R :

$$\tau_c \ll \Delta t \ll T_R. \quad (2.5)$$

Si l'indice n dénote la valeur de la vitesse au pas de temps n , le temps parcouru sera $t = n\Delta t$ et la vitesse :

$$\hat{W}(t) = \hat{W}(n\Delta t) = \hat{W}_n. \quad (2.6)$$

On écrit alors la vitesse du prochain pas de temps \hat{W}_{n+1} sous la forme de la somme d'une partie linéaire déterministe $a\hat{W}_n$ et d'un processus de Wiener $b\chi_{n+1}$ où les χ_n sont des variables aléatoires suivant la loi normale et non corrélées entre elles.

$$\hat{W}_{n+1} = a\hat{W}_n + b\chi_{n+1}. \quad (2.7)$$

Pour un processus de *Markov*, χ_n doit être une variable aléatoire gaussienne de moyenne nulle pour qu'à l'équilibre, la valeur moyenne de la vitesse de la particule soit nulle puisque n'y a pas d'autre force extérieure appliquée dans la direction de la fluctuation ($z'z$), donc :

$$\langle b\chi_{n+1} \rangle = 0. \quad (2.8)$$

Les variables χ_n doivent être aussi non corrélées puisqu'elles représentent les phénomènes aléatoires des chocs entre les particules et les molécules de l'écoulement :

$$\langle \chi_p \chi_q \rangle = \delta_{pq}. \quad (2.9)$$

La corrélation est assimilée à la fonction de *Dirac* car le temps caractéristique de corrélation du phénomène des chocs τ_c est beaucoup plus court que le pas de temps Δt qu'on utilise pour discrétiser l'équation de Langevin.

Maintenant, il faut calculer les coefficients a et b de l'équation (2.7). On sait que pour la condition de stationnarité du flux :

$$\langle \hat{W}^2(t) \rangle = \sigma_{\hat{W}}^2, \forall t,$$

$$\langle \hat{W}_n^2 \rangle = \sigma_{\hat{W}}^2, \forall n,$$

Or, nous avons :

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle \hat{W}_{n+1}^2 \rangle}_{\sigma_{\hat{W}}^2} &= a^2 \underbrace{\langle \hat{W}_n^2 \rangle}_{\sigma_{\hat{W}}^2} + b^2 \underbrace{\langle \chi_{n+1}^2 \rangle}_1 + 2ab \underbrace{\langle \hat{W}_n \chi_{n+1} \rangle}_0, \\ \sigma_{\hat{W}}^2 &= a^2 \sigma_{\hat{W}}^2 + b^2, \\ b &= \pm \sigma_{\hat{W}} \sqrt{1 - a^2}, \end{aligned} \tag{2.10}$$

Si l'on fait une discrétisation du temps sous la forme :

$$\begin{cases} \hat{W}(t) & \simeq \hat{W}_n, \\ \hat{W}(t + \tau) & \simeq \hat{W}_{n+p}, \end{cases}$$

où $\tau = p\Delta t$ est le temps parcouru après l'instant t .

On réécrit l'hypothèse (h3) avec la discrétisation du processus ci-dessus :

$$T_L = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\langle \hat{W}_n \hat{W}_{n+p} \rangle}{\sigma_{\hat{W}}^2} \Delta t. \tag{2.11}$$

Or

$$\begin{aligned} \langle \hat{W}_n \hat{W}_{n+1} \rangle &= a \underbrace{\langle \hat{W}_n^2 \rangle}_{\sigma_{\hat{W}}^2} + b \underbrace{\langle \chi_{n+1} \hat{W}_n \rangle}_0, \\ \langle \hat{W}_n \hat{W}_{n+1} \rangle &= a \sigma_{\hat{W}}^2. \end{aligned}$$

On peut aussi écrire \hat{W}_{n+2} d'après (2.7) :

$$\begin{aligned}\hat{W}_{n+2} &= a\hat{W}_{n+1} + b\chi_{n+2}, \\ \langle \hat{W}_n \hat{W}_{n+2} \rangle &= a \underbrace{\langle \hat{W}_n \hat{W}_{n+1} \rangle}_{\sigma_{\hat{W}}^2} + b \underbrace{\langle \hat{W}_n \chi_{n+2} \rangle}_0, \\ \langle \hat{W}_n \hat{W}_{n+2} \rangle &= a^2 \sigma_{\hat{W}}^2, \\ \langle \hat{W}_n \hat{W}_{n+p} \rangle &= a^p \sigma_{\hat{W}}^2, \\ \frac{\langle \hat{W}_n \hat{W}_{n+p} \rangle}{\sigma_{\hat{W}}^2} &= a^p,\end{aligned}$$

peut être remplacée dans (2.11) pour trouver le temps caractéristique lagrangien :

$$T_L = \sum_{p=0}^{\infty} a^p \Delta t, \quad (2.12)$$

c'est la somme de la série géométrique a^p . Pour $a < 1$ on a :

$$\begin{aligned}T_L &= \frac{\Delta t}{1-a}, \\ a &= 1 - \frac{\Delta t}{T_L},\end{aligned} \quad (2.13)$$

et $\Delta t < T_L$.

Avec les équations (2.10) et (2.13) on a :

$$\begin{aligned}b &= \sigma_{\hat{W}} \sqrt{1-a^2}, \\ &= \sigma_{\hat{W}} \sqrt{1 - \left(1 - \frac{\Delta t}{T_L}\right)^2}, \\ &= \sigma_{\hat{W}} \sqrt{\frac{\Delta t}{T_L} \left(2 - \frac{\Delta t}{T_L}\right)}.\end{aligned} \quad (2.14)$$

Le système d'équations discrètes qui gère la vitesse et la position des particules immergées dans un écoulement turbulent homogène, statistiquement isotrope et stationnaire avec les conditions (2.3) pour la vitesse eulérienne est donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{n+1} = x_s + \bar{u}(n\Delta t), \\ z_{n+1} = z_n + \frac{\hat{W}_n + \hat{W}_{n+1}}{2} \Delta t, \\ \hat{U}_{n+1} = \bar{u}, \\ \hat{W}_{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{T_L}\right) \hat{W}_n + \sigma_{\hat{W}} \sqrt{\frac{\Delta t}{T_L} \left(2 - \frac{\Delta t}{T_L}\right)} \chi_{n+1}, \end{array} \right.$$

avec χ_p gaussien, $\langle \chi_p \rangle = 0$, $\langle \chi_p \chi_q \rangle = \delta_{pq}$.

On peut assimiler ces équations discrètes à un système d'équations continues en faisant tendre Δt vers 0 :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx}{dt} = \bar{u}, \\ \frac{dz}{dt} = \hat{W}, \\ \frac{d\hat{W}}{dt} = -\frac{\hat{W}}{T_L} + \sigma_{\hat{W}} \sqrt{\frac{2}{T_L}} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\chi_{n+1}}{\sqrt{\Delta t}}. \end{array} \right.$$

Dans la dernière équation, on a négligé les termes d'ordre $O(\Delta t^2)$.

Si l'on appelle :

$$\eta(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\chi_{n+1}}{\sqrt{\Delta t}},$$

on peut vérifier que :

$$\frac{\langle \chi_p \chi_q \rangle}{\Delta t} = \frac{\delta_{pq}}{\Delta t},$$

$$\langle \eta(t') \eta(t'') \rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\delta_{pq}}{\Delta t} = \delta(t' - t''), \quad (2.15)$$

$$\langle \eta(t) \rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \chi_p \rangle}{\Delta t} = 0, \quad (2.16)$$

est la définition discrète d'un bruit blanc gaussien. La fonction $\eta(t)$ est décorrélée d'un instant à l'autre et sa moyenne statistique est nulle.

L'évolution de la vitesse dans la direction de la fluctuation est alors donné par l'équation :

$$d\hat{W} = -\frac{\hat{W}}{T_L}dt + \sigma_{\hat{W}}\sqrt{\frac{2}{T_L}}\eta(t)dt. \quad (2.17)$$

Si nous voulons tenir compte, de manière générale, des fluctuations dans les trois directions, l'équation de Langevin peut s'écrire :

$$d\hat{U}_i = \alpha_u\hat{U}_i dt + \beta_u\eta(t)dt, \quad (2.18)$$

et avec (2.17) on a :

$$\alpha_{u_i} = -\frac{1}{T_{L_{u_i}}}, \quad (2.19)$$

$$\beta_{u_i} = \sigma_{\hat{U}_i}\sqrt{\frac{2}{T_{L_{u_i}}}}. \quad (2.20)$$

2.2.2 Les effets de non-stationnarité de la turbulence

Dans les hypothèses précédentes, on a considéré la turbulence comme stationnaire (*h2*) :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\langle \hat{W}^2(t) \rangle \right) &= \frac{d}{dt} \sigma_{\hat{W}}^2, \\ \frac{d}{dt} \left(\langle \hat{W}^2(t) \rangle \right) &= 0. \end{aligned} \quad (2.21)$$

L'équation (2.17) modifiée pour tenir compte des effets due à la non-stationnarité de la turbulence s'obtient en ajoutant un terme supplémentaire dans la partie déterministe (THOMSON (1987)) :

$$d\hat{U}_i(t) = \left(-\frac{1}{T_L} + \frac{1}{2\sigma_{\hat{U}_i}^2(t)} \frac{d\sigma_{\hat{U}_i}^2(t)}{dt} \right) \hat{U}_i(t)dt + \sigma_{\hat{U}_i}(t) \sqrt{\frac{2}{T_L}} \eta(t)dt. \quad (2.22)$$

Si nous voulons exprimer cette équation en termes d'énergie cinétique turbulente de sous-maille (E^\ominus) et de taux de dissipation de l'énergie sous-maille (ε), d'après la définition du temps caractéristique lagrangien dans une turbulence statistiquement isotrope (POPE (1994)) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{\hat{U}_i}^2 = \langle \hat{U}_i \hat{U}_i \rangle = \frac{2}{3} E^\ominus, \\ T_L = \frac{2\sigma_{\hat{U}_i}^2}{C_0 \varepsilon} = \frac{4}{3} \frac{E^\ominus}{C_0 \varepsilon}. \end{array} \right. \quad (2.23)$$

Ce qui donne pour (2.22) :

$$d\hat{U}_i = \left(-\frac{3}{4} \frac{C_0 \varepsilon}{E^\ominus} + \frac{1}{2E^\ominus} \frac{dE^\ominus}{dt} \right) \hat{U}_i dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} \eta(t) dt. \quad (2.24)$$

Si nous considérons que la turbulence est aussi statistiquement homogène, la variation temporelle de l'énergie cinétique turbulente est uniquement due au taux de dissipation visqueuse :

$$\frac{dE^\ominus}{dt} = -\varepsilon. \quad (2.25)$$

Pourtant, dans le cas d'une turbulence statistiquement homogène, isotrope et non-stationnaire, l'équation d'évolution de la vitesse lagrangienne peut s'écrire :

$$d\hat{U}_i = - \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \frac{\varepsilon}{E^\ominus} \hat{U}_i dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} \eta(t) dt. \quad (2.26)$$

2.2.3 L'équation de Fokker-Planck

Une forme alternative afin d'étudier les processus stochastiques est la fonction *distribution de Probabilité* (ddP). POPE (1985) décrit les méthodes ddP pour calculer les propriétés

de la turbulence dans les écoulements réactif. Nous utiliseront l'équation de *Fokker-Planck*, qui est l'équation d'évolution de la ddP, pour obtenir une description statistique de la couple "position-vitesse" lagrangiennes d'une particule au sein d'une maille de calcul.

Si l'on pose $\mathcal{P}(\vec{s}(t), t | \vec{s}(t_0), t_0)$ la fonction de distribution de probabilité de trouver une particule dans l'état $\vec{s}(t)$ à l'instant t sachant qu'elle était dans l'état $\vec{s}(t_0)$ à l'instant t_0 , il est possible de démontrer que cette fonction satisfait l'équation de *Fokker-Planck* si la vitesse de cette particule est régie par une évolution markovienne (GENCE (1990), MICHELOT (1996)) :

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t}(\vec{s}(t), t) = -\frac{\partial (D_i(\vec{s}(t), t)\mathcal{P})}{\partial s_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 (D_{ij}(\vec{s}(t), t)\mathcal{P})}{\partial s_i \partial s_j}, \quad (2.27)$$

où $\vec{s}(t) = \{s(t_1), s(t_2), \dots, s(t_i), \dots, s(t_n)\}$ sont des variables d'état lagrangien pour la particule. Généralement, on s'intéresse à la position et à la vitesse. Par exemple, dans le cas d'un écoulement bidimensionnelle où les fluctuations verticales sont prépondérantes face aux fluctuations horizontales, le vecteur d'état lagrangien sera $\vec{s}(t) = (z(t), w(t))$ qui sont respectivement la position et vitesse verticale des particules.

Pour interpréter les tenseurs D_i , D_{ij} , nous allons exprimer les moments pour une variable aléatoire $\vec{\xi}(t) = f(\vec{s}(t))$ donnée qui suit un processus de Markov. Si pour un petit intervalle de temps τ la variable prend la valeur $\vec{\xi}(t + \tau)$ qui ne dépend que de $\vec{s}(t + \tau)$ et des mécanismes aléatoires non corrélées entre t et $t + \tau$, les moments d'ordre 1 et 2 relatifs au passage de l'état lagrangien $\vec{s}(t)$, en t , à l'état lagrangien $\vec{s}(t + \tau)$, en $t + \tau$ sont :

$$M_1(\vec{s}(t), t, \tau) = \langle (\xi_i(t + \tau) - s_i) |_{\vec{\xi}(t) = \vec{s}(t)} \rangle, \quad (2.28)$$

$$M_2(\vec{s}(t), t, \tau) = \langle (\xi_i(t + \tau) - s_i) |_{\vec{\xi}(t) = \vec{s}(t)} (\xi_j(t + \tau) - s_j) |_{\vec{\xi}(t) = \vec{s}(t)} \rangle. \quad (2.29)$$

On peut faire un développement limité pour les moments au voisinage de τ :

$$M_n(\vec{s}(t), t, \tau) = \underbrace{M_n(\vec{s}(t), t, 0)}_0 + \tau \left. \frac{\partial M_n}{\partial \tau} \right|_{\tau=0} + O(\tau^2). \quad (2.30)$$

On défini donc, les tenseurs $D_i(\vec{s}(t), t)$ et $D_{ij}(\vec{s}(t), t)$ comme :

$$D_i(\vec{s}(t), t) = \left. \frac{\partial M_1(\vec{s}(t), t, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0}, \quad (2.31)$$

$$D_{ij}(\vec{s}(t), t) = \left. \frac{\partial M_2(\vec{s}(t), t, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0}. \quad (2.32)$$

Les équations lagrangiennes couplées des variables aléatoires $\vec{\xi}(t) = f(\vec{s}(t))$ qui suivent un processus de *Markov* peuvent s'exprimer par :

$$\begin{cases} \frac{d\xi_i}{dt} = h_i(\vec{s}(t), t) + g_{ij}(\vec{s}(t), t)\eta_j(t), \\ \langle \eta_i(t')\eta_j(t'') \rangle = \delta_{ij}\delta(t' - t''). \end{cases} \quad (2.33)$$

On trouve les tenseurs $D_i(\vec{s}(t), t)$ et $D_{ij}(\vec{s}(t), t)$ (Annexe A) pour que la fonction de probabilité $\mathcal{P}(\vec{s}(t), t)$ satisfasse l'équation de *Fokker-Planck* :

$$\begin{cases} D_i(\vec{s}(t), t) = h_i(\vec{s}(t), t), \\ D_{ij}(\vec{s}(t), t) = g_{ik}(\vec{s}(t), t)g_{jk}(\vec{s}(t), t). \end{cases} \quad (2.34)$$

Si l'on revient au modèle de Langevin classique (2.17), on déduit que :

$$\begin{aligned} h_i(\vec{s}(t), t) &= -\frac{\hat{W}}{T_L}, \\ g_{ij}(\vec{s}(t), t) &= \sigma_{\hat{W}}\sqrt{\frac{2}{T_L}}. \end{aligned}$$

2.3 Modèle stochastique lagrangien

Dans le chapitre précédent, il a été développé une approche LES pour simuler les écoulements à grand nombre de Reynolds. Les grandes échelles du champ de vitesse sont résolues et on a pris en compte les effets des petites échelles avec un modèle de sous-maille. Dans ce chapitre on a vu qu'il est nécessaire de suivre l'évolution des particules fluides pour simuler

des phénomènes de diffusion et de réactions chimiques d'espèces variées. L'évolution de ces particules fluides est bien évidemment liée au champ grandes échelles mais aussi dans la maille de calcul, à l'évolution des petites échelles non résolues par LES. Les modèles stochastiques permettront de simuler cette évolution au sein d'une maille avec des outils statistiques afin de connaître les trajectoires des particules et de modéliser les phénomènes de mélange, de diffusion et de réaction chimique.

Pour modéliser le mouvement d'une particule fluide à l'intérieur d'une maille de calcul, VINKOVIC *et al* (2005a) utilisent un modèle de Langevin tridimensionnel où l'équation de transport de la vitesse lagrangienne est obtenue comme somme d'un terme déterministe qui prend en compte les effets d'accélération et la valeur de la vitesse au pas de temps précédent et un terme aléatoire propre du mouvement brownien. Les coefficients de ces termes sont trouvés à partir des propriétés statistiques de la fonction de densité de probabilité locale $\mathcal{P}_{\mathcal{L}}$ associée au sein d'une maille. En intégrant l'équation de transport de cette fonction, on obtient l'évolution des moments statistiques de la vitesse lagrangienne selon la procédure proposée par VAN DOP *et al* (1985). En supposant que ces moments sont égaux à ceux calculés avec LES, on peut trouver les coefficients recherchés.

Une autre méthode fait appel à la *Fonction de densité filtrée* (FDF) qui a été proposée par GAO & O'BRIEN (1993) et approfondie par COLUCCI *et al* (1998) pour obtenir une description des phénomènes transitoires produits à l'échelle de sous-maille dans une LES. Ces auteurs ont développé l'équation de transport de la FDF à densité constante pour les flux réactif. JABERI *et al* (1999) se sont intéressés au régime de la flamme réactive avec espèces non pré-mélangées en utilisant l'approche LES. Pour cela, ils ont ajouté les effets de la variabilité de la densité de masse ou *Fonction de densité filtrée pondérée par la masse* (FMDF).

L'approche FDF tient compte des phénomènes aux échelles de sous-maille décrits avec la méthode lagrangienne et a été validée par CHA & TROUILLET (2003) avec des résultats de Simulations Numériques Directes (DNS) (BOERSMA (1999)). GICQUEL & GIVI (2002) ont montré l'utilisation de la FDF au champ de vitesse de sous-maille *fonction de densité filtrée du champs de vitesse* (VFDF). Ils montrent que cette procédure est bien adaptée en comparant les deux premiers moments de la VFDF avec celles obtenues par la solution eulérienne de l'équation de transport du champ de vitesse. Ces résultats ont été validés avec les calculs par DNS tridimensionnelles de couches de mélange réalisées par VERMAN *et al* (1997).

Nous allons décrire cette méthode pour trouver les coefficients de l'équation stochastique de transport des particules à l'intérieur d'une maille. En suite, nous allons appliquer cette méthode au champ de vitesse pour pouvoir décrire les trajectoires des particules fluides et appliquer les modèles de mélange et réaction chimique.

2.3.1 Fonction de densité filtrée du champ de vitesse (VFDF)

GICQUEL & GIVI (2002) ont défini la fonction de densité filtrée du champ de vitesse VFDF ($\mathcal{P}_{\mathcal{L}}$) comme :

$$\mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}_{(m)}) d\vec{x}', \quad (2.35)$$

où $\vec{x}_{(m)}$ est le vecteur position du centre de la maille (m), \vec{x}' est la position relative d'un point à l'intérieur de cette maille par rapport à la position de son centre et \vec{v} est une valeur particulière de la vitesse $\vec{u}(\vec{x}, t)$.

On remarque que la fonction de densité filtrée du champ de vitesse est bien dépendante de la position de la maille (m) puisque l'intégrale (2.35) est une opération de convolution.

$\varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}, t)]$ est la densité de probabilité de "grains fins" (ddPGF), POPE (1985).

$$\varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}, t)] = \delta[\vec{v} - \vec{u}(\vec{x}, t)] \equiv \prod_{i=1}^3 \delta[v_i - u_i(\vec{x}, t)], \quad (2.36)$$

où δ est la fonction de Dirac et comme \vec{v} est une valeur particulière du champ de vitesse, $\varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}, t)]$ représente une fonction de probabilité conditionnée.

L'équation (2.35) est le filtrage spatial de la ddPGF.

Avec la condition $G(\vec{x}) = G(-\vec{x})$ et $G(\vec{x}) > 0$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\vec{x})^m G(\vec{x}) d\vec{x} \quad \text{existe } \forall m \geq 0.$$

$\mathcal{P}_{\mathcal{L}}$ a toutes les propriétés d'une fonction de densité de probabilité.

On peut définir ainsi la valeur conditionnée filtrée d'une fonction de vitesse variable comme par exemple la dérivée temporelle locale :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}(\vec{x}, t) \equiv Q(\vec{x}, t), \quad (2.37)$$

$$(Q(\vec{x}, t) | \vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{v})^{\oplus} \equiv (Q | \vec{v})^{\oplus},$$

$$(Q | \vec{v})^{\oplus} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} Q(\vec{x}', t) \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}'}{\mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t)}, \quad (2.38)$$

où $(Q|\vec{v})^\oplus$ est la valeur filtrée de la fonction Q conditionnée par une valeur particulière \vec{v} du champ de vitesse.

2.3.2 L'équation de transport de la VFDF

On va considérer la dérivée temporelle de l'équation (2.35) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial t}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} (\varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]) G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}', \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\frac{\partial \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial u_i}}_{(a)} \frac{\partial u_i(\vec{x}', t)}{\partial t} G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}'. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Le terme signalé (a) peut être résumé en :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial u_i} &= \frac{\partial \delta[\vec{v} - \vec{u}(\vec{x}, t)]}{\partial u_i} \\ \frac{\partial \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial u_i} &\neq 0, \quad \text{si } \vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{v}. \end{aligned}$$

On peut remplacer la dérivée par rapport à u_i par la dérivée par rapport à v_i :

$$\frac{\partial \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial u_i} = -\frac{\partial \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial v_i},$$

ce qui donne (2.39) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial t}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t) &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u_i}{\partial t}(\vec{x}', t) \frac{\partial \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)]}{\partial v_i} G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}', \\ &= -\frac{\partial}{\partial v_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u_i}{\partial t}(\vec{x}', t) \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}'. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Si l'on utilise l'équation (2.38) avec (2.37), on obtient :

$$\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}(\vec{x}, t) \middle| \vec{v} \right)^\oplus \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u_i}{\partial t}(\vec{x}', t) \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}',$$

qu'on compare avec (2.40) :

$$\frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial t}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t) = -\frac{\partial}{\partial v_i} \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}(\vec{x}, t) \middle| \vec{v} \right)^\oplus \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t) \right]. \quad (2.41)$$

On va maintenant substituer l'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.35) au sein de l'équation (2.41) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial t}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t) &= -\frac{\partial}{\partial v_i} \left\{ \left[-\left(\frac{\partial u_i u_k}{\partial x_k} \middle| \vec{v} \right)^\oplus + (g_i B | \vec{v})^\oplus - \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \middle| \vec{v} \right)^\oplus + 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \underbrace{(u_k | \vec{v})^\oplus}_{v_k} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 2 \left(\frac{\partial (\bar{v} S_{ik}^a)}{\partial x_k} \middle| \vec{v} \right)^\oplus \right] \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t) \right\}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

La dérivée convective de la quantité de mouvement peut être exprimée selon :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\left(\frac{\partial u_i u_k}{\partial x_k} \middle| \vec{v} \right)^\oplus \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t) \right] &= \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u_i u_k}{\partial x_k} \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}' \right], \\ &= -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\frac{\partial u_i u_k}{\partial x_k} \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] \right) G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}', \\ &= -\frac{\partial}{\partial x_k} \int_{-\infty}^{+\infty} u_k \varrho[\vec{v}, \vec{u}(\vec{x}', t)] G(\vec{x}' - \vec{x}) d\vec{x}', \\ &= -\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\underbrace{(u_k | \vec{v})^\oplus}_{v_k} \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t) \right], \\ &= -\frac{\partial}{\partial x_k} [v_k \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}_{(m)}, t)]. \end{aligned} \quad (2.43)$$

De plus, on va utiliser les décompositions suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} v_k \mathcal{P}_{\mathcal{L}} = u_k^{\oplus} \mathcal{P}_{\mathcal{L}} + [v_k - u_k^{\oplus}] \mathcal{P}_{\mathcal{L}}, \\ (g_i B | \vec{v})^{\oplus} \mathcal{P}_{\mathcal{L}} = g_i B^{\oplus} \mathcal{P}_{\mathcal{L}} + [(g_i B | \vec{v})^{\oplus} - g_i B^{\oplus}] \mathcal{P}_{\mathcal{L}}, \\ \left(\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \middle| \vec{v} \right)^{\oplus} \mathcal{P}_{\mathcal{L}} = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'^{\oplus}}{\partial x_i} \mathcal{P}_{\mathcal{L}} + \frac{1}{\bar{\rho}} \left[\left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \middle| \vec{v} \right)^{\oplus} - \frac{\partial p'^{\oplus}}{\partial x_i} \right] \mathcal{P}_{\mathcal{L}}, \\ \left(\frac{\partial(\bar{\nu} S_{ik}^a)}{\partial x_k} \middle| \vec{v} \right)^{\oplus} \mathcal{P}_{\mathcal{L}} = \frac{\partial(\bar{\nu} S_{ik}^a)^{\oplus}}{\partial x_k} \mathcal{P}_{\mathcal{L}} + \left[\left(\frac{\partial(\bar{\nu} S_{ik}^a)}{\partial x_k} \middle| \vec{v} \right)^{\oplus} - \frac{\partial(\bar{\nu} S_{ik}^a)^{\oplus}}{\partial x_k} \right] \mathcal{P}_{\mathcal{L}}. \end{array} \right. \quad (2.44)$$

L'équation de transport VFDV devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial t} &= -u_k^{\oplus} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} ([v_k - u_k^{\oplus}] \mathcal{P}_{\mathcal{L}}) - g_i B^{\oplus} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial v_i} \\ &+ \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'^{\oplus}}{\partial x_i} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial v_i} - 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \frac{\partial(u_k^{\oplus} \mathcal{P}_{\mathcal{L}})}{\partial v_i} - 2\bar{\nu} \frac{\partial(S_{ik}^a)^{\oplus}}{\partial x_k} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial v_i} \\ &- \frac{\partial}{\partial v_i} \left\{ [(g_i B | \vec{v})^{\oplus} - g_i B^{\oplus}] \mathcal{P}_{\mathcal{L}} \right\} + \frac{\partial}{\partial v_i} \left\{ \frac{1}{\bar{\rho}} \left[\left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \middle| \vec{v} \right)^{\oplus} - \frac{\partial p'^{\oplus}}{\partial x_i} \right] \mathcal{P}_{\mathcal{L}} \right\} \\ &- 2 \frac{\partial}{\partial v_i} \left\{ \left[\left(\frac{\partial(\bar{\nu} S_{ik}^a)}{\partial x_k} \middle| \vec{v} \right)^{\oplus} - \frac{\partial(\bar{\nu} S_{ik}^a)^{\oplus}}{\partial x_k} \right] \mathcal{P}_{\mathcal{L}} \right\}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

L'équation (2.45) est une équation exacte de transport de VFDF et elle est similaire à l'équation trouvée par GICQUEL & GIVI (2002).

Le premier et le deuxième termes du membre de droite représentent respectivement la convection des grandes échelles et de sous-maille de la VFDF dans l'espace physique et ils sont fermés.

Le troisième, quatrième, cinquième et sixième termes représentent la gravité, la convection de la vitesse due au gradient de pression, la force de Coriolis et la convection de la vitesse due à la diffusion moléculaire, tous dans l'espace physique et ils sont aussi fermés.

Les trois derniers termes ne sont pas fermés et ils contiennent les effets convectifs en sous-maille de la gravité, des gradients de la pression et de la diffusion moléculaire. L'effet du terme de *Coriolis* de sous-maille est négligé par rapport aux autres termes.

2.3.3 Fermeture de l'équation de transport de la VFDF

On peut fermer les trois derniers termes de l'équation de transport VFDF en utilisant le modèle de Langevin Généralisé (HAWORTH & POPE (1986), POPE (1994)).

La fermeture de l'équation de transport de la VFDF peut s'écrire comme :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial t} &= -u_k^{\oplus} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} ([v_k - u_k^{\oplus}] \mathcal{P}_{\mathcal{L}}) - g_i B^{\oplus} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial v_i} \\
&+ \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial p^{\oplus}}{\partial x_i} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial v_i} - 2\epsilon_{ijk} \Omega_j \frac{\partial (u_k^{\oplus} \mathcal{P}_{\mathcal{L}})}{\partial v_i} - 2 \frac{\partial (\bar{\nu} S_{ik}^a)^{\oplus}}{\partial x_k} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial v_i} \\
&- \frac{\partial}{\partial v_i} [\mathcal{G}_{ij} (v_j - u_j^{\oplus}) \mathcal{P}_{\mathcal{L}}] + \frac{1}{2} C_0 \epsilon \frac{\partial^2 \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial v_i \partial v_j}.
\end{aligned} \tag{2.46}$$

Dans la suite, on va expliquer comme l'expression du tenseur \mathcal{G}_{ij} va être liée au système d'équations lagrangien proposé pour la fermeture au sein d'une maille de calcul (m) :

- Soit $\hat{X}_{i(m,t)}$ la position d'une particule dans le repère du domaine de calcul, $x_{i(m)}$ la position du centre de la maille (m) où est placée la particule et $\hat{x}'_{i(t)}$ la position relative de cette particule par rapport au centre de la maille (m) :

$$\hat{X}_{i(m,t)} = x_{i(m)} + \hat{x}'_{i(t)}. \tag{2.47}$$

- De même, la vitesse de cette particule dans le repère du domaine de calcul $\hat{U}_{i(m,t)}$ est :

$$\hat{U}_{i(m,t)} = u_{i(m,t)}^{\oplus} + \hat{u}'_{i(t)}, \tag{2.48}$$

où $u_{i(m,t)}^{\oplus}$ est la vitesse eulérienne grandes échelles au temps (t) correspondant à la maille (m) et $\hat{u}'_{i(t)}$ est la fluctuation lagrangienne autour de $u_{i(m,t)}^{\oplus}$ au sein de la maille (m).

La figure 2.1 montre un schéma de cette décomposition.

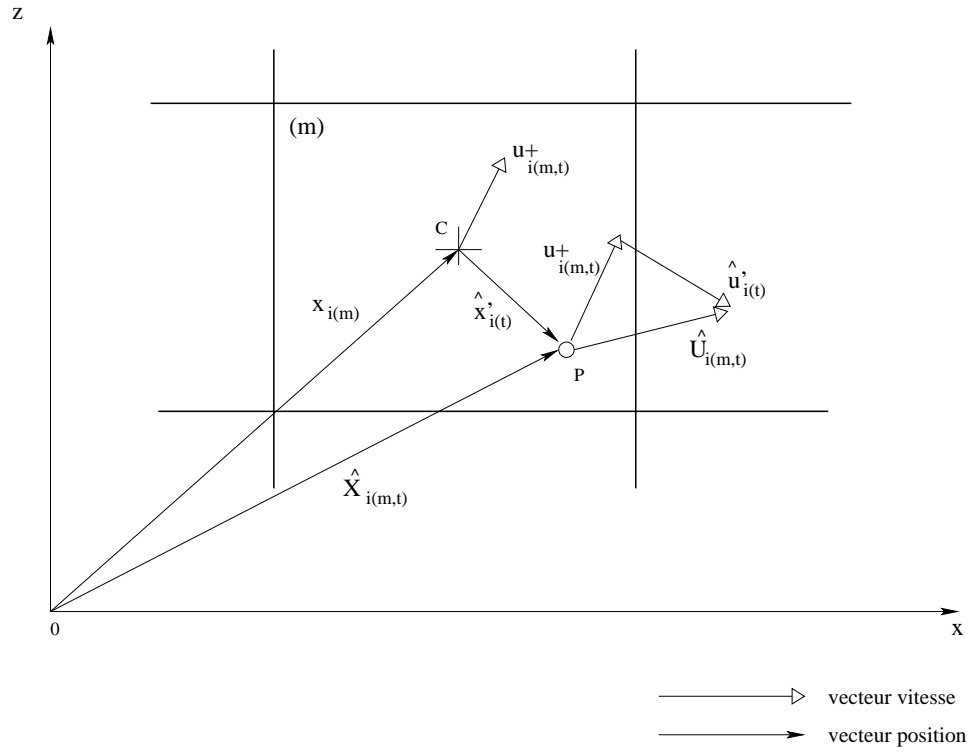


FIG. 2.1 – Position d'une particule fluide (P) au sein d'une maille de calcul (m) de centre (C).

– On prendra le système *Markovien* (2.33) au sein de la maille (m) :

$$\begin{cases} d\vec{\xi}(m, t) = h_i(\vec{s}_{(m,t)}, t)dt + g_{ij}(\vec{s}_{(m,t)}, t)\eta_j dt, \\ \langle \eta_i(t')\eta_j(t'') \rangle = \delta_{ij}\delta(t' - t''), \end{cases}$$

et le système lagrangien suivant avec $\vec{s}_{(m,t)} = \{\hat{x}'_{i(t)}, \hat{U}_{i(m,t)}\}$:

$$\begin{cases} d\hat{x}'_{i(t)} = \hat{U}_{i(m,t)}dt, \\ d\hat{U}_{i(m,t)} = h_i(\hat{U}_{i(m,t)}, t)dt + g_{ij}(\hat{U}_{i(m,t)}, t)\eta_j(t)dt. \end{cases} \quad (2.49)$$

– Il sera associé à l'équation de *Fokker-Planck* (2.27) appliquée au sein de la maille (m). Si l'on prend en compte les équivalences (2.34) pour les tenseurs D_i et D_{ij} associés aux système (2.33) et (2.49), on peut écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} D_i(\hat{x}'_{i(t)}, t) = h_i(\hat{x}'_{i(t)}, t), \\ D_i(\hat{x}'_{i(t)}, t) = \hat{U}_{i(m,t)}, \\ \\ D_{ij}(\hat{x}'_{i(t)}, t) = 0, \\ \\ D_i(\hat{U}_{i(m,t)}, t) = h_i(\hat{U}_{i(m,t)}, t), \\ \\ D_{ij}(\hat{U}_{i(m,t)}, t) = g_{ik}(\hat{U}_{i(m,t)}, t)g_{jk}(\hat{U}_{i(m,t)}, t). \end{array} \right. \quad (2.50)$$

– Ces équivalences permettent d'écrire l'équation de *Fokker-Planck* (2.27) sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}}{\partial t}(\hat{x}'_{i(t)}, \hat{U}_{i(m,t)}, t) &= -\frac{\partial}{\partial x_i}[\hat{U}_{i(m,t)}\mathcal{P}_{\mathcal{L}}] - \frac{\partial}{\partial v_i}[h_i(\hat{U}_{i(m,t)})\mathcal{P}_{\mathcal{L}}] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} [g_{ik}(\hat{U}_{i(m,t)})g_{jk}(\hat{U}_{i(m,t)})\mathcal{P}_{\mathcal{L}}]. \end{aligned} \quad (2.51)$$

– En comparant celle-ci avec l'équation de transport de la VFDF (2.46) on trouve les équivalences suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{x}'_{i(t)} = \hat{X}_{i(m,t)} - x_{i(m)}, \quad m \text{ est la même maille pour } \hat{X}_i \text{ et } x_i, \\ \hat{U}_{i(m,t)} = v_{i(m,t)} = u_{i(m,t)}^{\oplus} + (v_{i(m,t)} - u_{i(m,t)}^{\oplus}), \\ h_i(\hat{U}_{i(m,t)}, t) = g_i B^{\oplus} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{\oplus}}{\partial x_i} + 2\epsilon_{ijk} \Omega_j u_k^{\oplus} + 2 \frac{\partial(\bar{\nu} S_{ik}^a)^{\oplus}}{\partial x_k} + \mathcal{G}_{ij}(v_j - u_j^{\oplus}), \\ g_{ij}(\hat{U}_{i(m,t)}, t) = \sqrt{C_0 \varepsilon} \delta_{ij}, \end{array} \right. \quad (2.52)$$

où $h_i(\hat{U}_{i(m,t)}, t)$ est le terme déterministe dans l'équation stochastique du système lagrangien (2.49). Il est composé de cinq termes. Les quatre premiers sont résolus par la LES avec (1.50) et (1.55) :

$$\begin{aligned}
g_i B^\oplus - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p'^{\oplus}}{\partial x_i} + 2\epsilon_{ijk} \Omega_j u_k^\oplus + 2 \frac{\partial(\bar{\nu} S_{ik}^a)^\oplus}{\partial x_k} &= \frac{\partial u_i^\oplus}{\partial t} + \frac{\partial(u_i^\oplus u_j^\oplus)}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathcal{R}_{ij}}{\partial x_j}, \\
&= \frac{du_i^\oplus}{dt} + \frac{\partial \mathcal{R}_{ij}}{\partial x_j}, \tag{2.53}
\end{aligned}$$

et le dernier terme \mathcal{G}_{ij} reste à déterminer.

- Le système d'équations lagrangien qui décrit le mouvement des particules fluides dans l'écoulement est exprimé par :

$$\left\{ \begin{array}{l}
d\hat{X}_{i(m,t)} = \underbrace{u_{i(m,t)}^\oplus dt}_{LES} + \underbrace{(\hat{U}_{i(m,t)} - u_{i(m,t)}^\oplus) dt}_{\text{Modèle stoch.}}, \\
d\hat{U}_{i(m,t)} = \underbrace{\frac{du_{i(m,t)}^\oplus}{dt} dt}_{LES} + \underbrace{\frac{\partial \mathcal{R}_{ij(m,t)}}{\partial x_j} dt}_{\text{Modèle SGS}} + \underbrace{\left[\mathcal{G}_{ij} (\hat{U}_{j(m,t)} - u_{j(m,t)}^\oplus) \right] dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} \delta_{ij} \eta_j(t) dt}_{\text{Modèle stoch.}}. \tag{2.54}
\end{array} \right.$$

Le modèle du tenseur \mathcal{G}_{ij} en turbulence homogène isotrope non-stationnaire de sous-maille

HAWORTH & POPE (1986) proposent un modèle complet pour le terme \mathcal{G}_{ij} en tenant compte des effets d'anisotropie, d'inhomogénéité et de non stationnarité de la turbulence pour un écoulement traité avec une décomposition de *Reynolds*. GICQUEL & GIVI (2002) utilisent l'expression du premier terme de l'équation (2.26) pour le calcul du tenseur \mathcal{G}_{ij} dans le cas d'une approche LES en turbulence isotrope et homogène non-stationnaire :

$$\mathcal{G}_{ij} = -\frac{\varepsilon}{E^\ominus} \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \delta_{ij}, \tag{2.55}$$

où E^\ominus est l'énergie cinétique turbulente de sous-maille et ε est son taux de dissipation d'énergie.

Le modèle du tenseur \mathcal{G}_{ij} en turbulence inhomogène isotrope non-stationnaire de sous-maille

Dans le cas de l'inhomogénéité de la turbulence de sous-maille, on doit prendre le terme entre parenthèse de l'équation (2.24) pour le tenseur \mathcal{G}_{ij} et le modèle de fermeture 1.5 de l'équation de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille $\frac{dE^\ominus}{dt}$:

$$\mathcal{G}_{ij} = \left(\frac{1}{2E^\ominus} \frac{dE^\ominus}{dt} - \frac{3}{4} \frac{C_0 \varepsilon}{E^\ominus} \right) \delta_{ij} = \frac{3}{2E^\ominus} \left(\frac{1}{3} \frac{dE^\ominus}{dt} - \frac{C_0 \varepsilon}{2} \right) \delta_{ij}. \quad (2.56)$$

Il manque alors l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente résiduelle. Cette équation est résolue dans le code ARPS comme une alternative parmi les modèles de sous-maille proposés. Dans le chapitre précédent, on l'a exprimée sous la forme de la décomposition du champ de vitesse eulérienne en grandes et petites échelles (1.107). Dans ce cas, on a besoin de la dérivée totale de l'énergie cinétique turbulente sans pondérer par la densité moyenne $\bar{\rho}$:

$$\frac{dE^\ominus}{dt} = \underbrace{-(u_i^\ominus u_k^\ominus)^\oplus \frac{\partial u_i^\oplus}{\partial x_k}}_{Production} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left[u_k^\ominus \left(E + \frac{p'}{\bar{\rho}} \right) \right]^\oplus}_{Diffusion} - \underbrace{g \left[\delta_{i3} \frac{u_i^\ominus}{\bar{\rho}} B^\ominus \right]^\oplus}_{Gravit} \underbrace{-\varepsilon}_{Dissipation}, \quad (2.57)$$

avec les fermetures (1.108), (1.109), (1.110) et (1.115).

Le modèle du tenseur \mathcal{G}_{ij} en turbulence inhomogène, anisotrope et non-stationnaire de sous-maille

On va prendre en compte les effets de l'anisotropie de la turbulence à l'échelle de sous-maille pour tenir compte de la contrainte qu'exerce la paroi dans la direction perpendiculaire.

HAWORTH & POPE (1986) ont considéré pour le modèle complet du tenseur \mathcal{G}_{ij} les principes d'invariance, de consistance dimensionnelle et d'indépendance du système de coordonnées. Ils les expriment comme une fonctionnelle générale sous la forme :

$$\mathcal{G}_{ij} = \left(\overline{u_k u_l}, \frac{\partial \bar{U}_p}{\partial x_q}, \varepsilon \right),$$

où la dépendance de \bar{U}_i n'est pas conforme au principe d'invariance Galiléenne.

La forme générale de cette fonctionnelle est proposée sous une dépendance linéaire de ces grandeurs :

$$\mathcal{G}_{ij} = \alpha_1 \frac{\varepsilon}{E} \delta_{ij} + \alpha_2 \frac{\varepsilon}{E} b_{ij} + H_{ijkl} \frac{\partial \bar{U}_k}{\partial x_l}.$$

Dans le cas d'une décomposition en grandes et petites échelles, la dernière équation peut s'écrire :

$$\mathcal{G}_{ij} = \alpha_1 \frac{\varepsilon}{E^\ominus} \delta_{ij} + \alpha_2 \frac{\varepsilon}{E^\ominus} b_{ij} + H_{ijkl} \frac{\partial U_k^\oplus}{\partial x_l^\oplus}, \quad (2.58)$$

où

$$\alpha_1 = - \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right),$$

est l'expression (2.55), c'est à dire, le terme qui traduit l'effet d'isotropie en turbulence homogène.

Le deuxième terme (2.58) représente les effets d'anisotropie et il est lié au déviateur du tenseur de *Reynolds de sous-maille* b_{ij} :

$$\begin{aligned} b_{ij} &= \frac{(u_i^\ominus u_j^\ominus)^\oplus}{(u_i^\ominus u_i^\ominus)^\oplus} - \frac{\delta_{ij}}{3}, \\ b_{ij} &= \frac{\mathcal{R}_{ij}}{2E^\ominus} - \frac{\delta_{ij}}{3}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Le troisième terme exprime la dépendance avec les gradients des composantes grandes échelles du champ de vitesse.

On peut reprendre l'équation (2.56) sous sa première forme pour ajouter les effets de l'anisotropie :

$$\mathcal{G}_{ij} = \underbrace{\frac{1}{2E^\ominus} \frac{dE^\ominus}{dt} \delta_{ij}}_{\text{non-stationnairété}} - \underbrace{\left(\frac{3}{4} C_0 \right) \frac{\varepsilon}{E^\ominus} \delta_{ij}}_{\text{terme isotrope}} + \alpha_2 \underbrace{\left(\frac{\mathcal{R}_{ij}}{2E^\ominus} - \frac{\delta_{ij}}{3} \right) \frac{\varepsilon}{E^\ominus}}_{\text{terme anisotrope}}. \quad (2.60)$$

Le tenseur \mathcal{R}_{ij} est obtenu à partir du modèle de viscosité turbulente (1.57) (déviateur) plus sa partie isotrope :

$$\mathcal{R}_{ij} = \mathcal{R}_{ij}^a + \frac{2}{3}E^\ominus\delta_{ij} = -2k_m S_{ij}^a + \frac{2}{3}E^\ominus\delta_{ij} \quad (2.61)$$

Chapitre 3

MÉTHODES NUMÉRIQUES

3.1 Introduction

Dans ce chapitre on va faire une description plus détaillée des caractéristiques et performances du code ARPS *Advanced Regional Prediction System* développé par le *Center of Analysis and Predictions Storm* (CAPS) de l'Université de Oklahoma U.S. que nous avons utilisé pour la simulation des grands échelles atmosphériques et que nous avons modifié. En particulier nous avons apporté la modélisation sous-maille stochastique pour le transport scalaire, le modèle de Smagorinsky dynamique pour la fermeture du tenseur Reynolds de sous-maille et le forçage du champ de vitesse en conditions d'entrée pour pouvoir simuler des écoulements en conditions dynamiques établis.

3.2 Les principales caractéristiques du code ARPS

On utilisera le code ARPS pour la simulation des grands échelles. Ce code a été développé pour CAPS pour des applications météorologiques de méso-échelles atmosphériques. ARPS est un code non-hydrostatique, compressible et les équations sont appliquées sur une maille de type *Arakawa C-grid* en utilisant un système de coordonnées qui suit les ondulations du terrain.

3.2.1 Schéma numérique

Le modèle atmosphérique qui a été décrit dans le premier chapitre tient compte de la compressibilité du flux. La présence d'ondes acoustiques due à la variation de la densité, limite le pas de temps pour un schéma de résolution de type explicite. ARPS intègre l'équation d'onde acoustique sur petits pas de temps et les autres variables sur un grand pas de temps pour rendre plus efficace la résolution numérique du modèle. Le schéma numérique utilisé pour obtenir la solution des équations différentielles discrétisées avec le grand pas de temps est du 4ème ordre centré de type explicite tandis que celui utilisé pour les équations de la pression et de la vitesse vertical est de type *Crank-Nicolson* de façon

que l'on puisse choisir la taille verticale du maillage sans tenir compte de la valeur imposée au petit pas de temps.

3.2.2 Modèles

La turbulence peut être résolue par un modèle de sous-maille 1,5 TKE ou un modèle *Smagorinsky Standard*. ARPS prend aussi en compte des modèles qui permettent de simuler les processus microphysiques de nuages, de la convection, des transferts radiatifs, des changements de phases et des modèles de simulation des interactions entre les éléments de la surface du terrain et la couche limite atmosphérique comme la végétation, différents types de sol, la mer.

Sont simulés les processus de transfert radiatif et les transferts turbulents de chaleur et de vapeur d'eau entre la canopée et la couche limite extérieure. Le flux de l'eau provenant des végétaux est gouverné par les différences entre l'eau potentiellement évaporable du sol et de l'air. La résistance à l'évaporation et la transpiration des plantes est fonction de l'indice d'aire foliaire et l'eau potentielle de la feuille. Un schéma de calcul de l'évapotranspiration potentielle est disponible à l'aide des données météorologiques comme la vitesse de vents, la température, l'humidité de l'air et de la surface du sol, les flux radiatifs et de l'intensité de la précipitation. On peut calculer ainsi les flux turbulents de chaleur sensible et latente, les flux de chaleur dans la zone proche au sol et l'équilibre radiatif.

3.2.3 Conditions aux limites

Les équations qui sont résolues dans ARPS ont été détaillées dans le Chapitre 1 de ce rapport. Le code est doté de cinq différents types de conditions aux limites latérales : Parois rigides (ou miroirs), périodiques, flux latéral nul (condition de *Neumann*), convection avec une fonction d'amortissement des ondes acoustiques et une option qui permet à l'utilisateur du code de les spécifier à partir d'un fichier de données.

Trois types de conditions aux limites sont possibles pour les limites inférieures et supérieures du domaine : rigide, périodique et *Neumann*. La réflexion qui se produit quand on utilise la condition rigide à la limite supérieure du domaine peut être supprimée avec un amortisseur d'ondes de type *Rayleigh*.

3.2.4 Conditions initiales

Pour les conditions initiales, ARPS propose, soit de prendre les valeurs à l'instant initial de calcul depuis un fichier des données tridimensionnelles apportées par l'utilisateur, soit à l'aide d'un profil vertical des grandeurs dont les valeurs sont prises horizontalement homogènes dans tout le domaine de calcul.

Dans le deuxième cas, on peut initialiser le calcul avec des profils verticaux obtenus à partir des mesures réalisées par radiosonde (instrument de mesure des données météorologiques emporté dans l'atmosphère par ballon et équipé d'un système de radio transmission) ou selon différents choix des profils analytiques suivants :

– Atmosphère isentropique :

Pour une atmosphère isentropique avec une température potentielle constante θ_0 , les variables d'état de base peuvent être exprimées comme fonction de la hauteur en utilisant la relation hydrostatique :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_p \theta_0 \frac{\partial \bar{\Pi}}{\partial z} = -g, \\ \bar{p} = p_0 (\bar{\Pi})^{\frac{C_p}{R_d}}, \\ \bar{\rho} = \frac{\bar{p}}{R_d \theta_0 \bar{\Pi}}. \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Les grandeurs de l'état de base pour les relations de mélange de la vapeur d'eau sont prises égaux à zéro.

– Atmosphère isothermique :

Pour une atmosphère isothermique avec une température constante T_0 , les formulations des autres grandeurs de l'état de base sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{p} = p_0 e^{\left(-\frac{gz}{R_d T_0}\right)}, \\ \bar{\Pi} = \left(\frac{\bar{p}}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{C_p}}, \\ \bar{\theta} = T_0 / \bar{\Pi}, \\ \bar{\rho} = \frac{\bar{p}}{(R_d T_0)}. \end{array} \right. \quad (3.2)$$

Ici encore les grandeurs de l'état de base pour les relations de mélange de la vapeur d'eau sont nulles.

- Atmosphère avec une constante de stabilité thermique :
On peut choisir de prendre un degré de stabilité thermique constante N :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\theta} = \theta_0 e^{\left(\frac{N^2 z}{g}\right)}, \\ \frac{\partial \bar{\Pi}}{\partial z} = -\frac{g}{C_p \theta}, \\ \bar{p} = p_0 (\bar{\Pi})^{\frac{C_p}{R_d}}, \\ \bar{\rho} = \frac{\bar{p}}{R_d \theta_0 \bar{\Pi}}. \end{array} \right. \quad (3.3)$$

Comme dans les deux cas précédents, les relations de mélange de la vapeur d'eau sont nulles.

- Sondage analytique d'humidité thermodynamique :
On peut considérer une atmosphère humide standard (WEISMAN & KLEMP (1982)) si on ne dispose pas de mesures par radiosonde.

On considère ici la hauteur de la tropopause $z_{tr} = 12000 \text{ m}$, les températures à ce niveau $\theta_{tr} = 213^\circ K$ et $T_{tr} = 343^\circ K$, la température potentielle au niveau du sol $\theta_0 = 300^\circ K$. La relation de mélange de la vapeur d'eau au dessous de 1200 m est prise en compte. Elle est constante et égale à $\bar{q}_v = 0,015 \text{ kg/kg}$.

Les relations de température potentielle $\bar{\theta}$ et d'humidité relative \overline{RH} de l'état de base sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\theta} = \theta_0 + (\theta_{tr} - \theta_0) \left(\frac{z}{z_{tr}}\right)^{5/4}, \quad z \leq z_{tr}, \\ \bar{\theta} = \theta_{tr} e^{\frac{g}{C_p T_{tr}}(z - z_{tr})}, \quad z > z_{tr}, \\ \overline{RH} = 1 - \frac{3}{4} \left(\frac{z}{z_{tr}}\right)^{5/4}, \quad z \leq z_{tr}, \\ \overline{RH} = 0,25, \quad z > z_{tr}, \end{array} \right. \quad (3.4)$$

Les profils de vitesse peuvent être introduits comme conditions initiales dans le code ARPS à partir d'une fonction analytique. Ces profils seront considérés comme des valeurs de l'état de base.

Les fluctuations autour des valeurs moyennes sont générées par différentes techniques : Un réchauffement situé à un endroit précis ou la simple radiation solaire selon l'angle d'inclinaison des rayons par apport à la surface du sol.

3.2.5 Le maillage de calcul et le système de coordonnées

Les coordonnées du système d'équations sont curvilignes dans l'espace physique pour tenir compte des élévations du terrain. Ce système permet de suivre les imperfections du sol sauf quand la pente est infinie (parois verticales). Le code utilise une transformation de coordonnées entre l'espace physique (ξ, η, ζ) et l'espace de calcul numérique (x, y, z) pour résoudre les équations dans un maillage rectangulaire régulier. ARPS a la possibilité d'utiliser un maillage plus raffiné près du sol pour augmenter la précision du calcul dans l'interface air-sol où les phénomènes de flux de chaleur, de la quantité de mouvement, de la vapeur d'eau et des changements de phase sont très actifs et ont besoin de plus de précision.

On peut choisir entre deux types de fonctions analytiques de contraction du maillage : cubique et tangente hyperbolique. La plus petite taille de la boîte qui est placée près du sol ne conditionne pas le pas de temps de calcul puisque ARPS résout la composante verticale de la vitesse de façon implicite. Pour plus de détails sur ces caractéristiques voir THOMPSON *et al.* (1985), SHARMAN *et al.* (1988) ou le manuel du code ARPS.

La maille de calcul numérique

Le code ARPS résout numériquement les équations décrites dans le premier chapitre en utilisant la méthode de différences finies centrées sur une maille rectangulaire. Les variables de calcul sont placées sur une maille de type *Arakawa C-grid* (Figure 3.1) :

- Les scalaires et les tenseurs d'indices répétés sont placés au centre de la maille.
- Les coordonnées spatiales, les trois composantes du champ de vitesse et les grandeurs du flux turbulent pour les scalaires sont placés au centre des faces correspondantes.
- Les Jacobiens de transformations de coordonnées et les tenseurs des contraintes turbulentes d'indices croisés sont placés sur l'intersection des faces correspondantes à leurs coordonnées spatiales qu'ils doivent représenter.

La Figure 3.1 montre la position des grandeurs par rapport à la boîte de calcul.

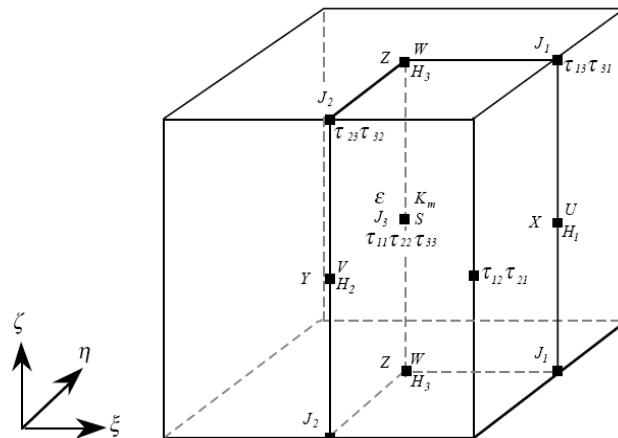


FIG. 3.1 – Position des grandeurs de calcul sur une maille de type Arakawa C-grid.

Le système de coordonnées

Les équations de la mécanique des fluides sont écrites en coordonnées curvilignes (ξ, η, ζ) pour tenir compte des élévations du terrain par rapport à une surface plane de référence. La coordonnée z est la seule à varier selon la topographie.

$$\begin{cases} \xi = x, \\ \eta = y, \\ \zeta = \zeta(x, y, z), \end{cases} \quad (3.5)$$

On peut définir l'espace physique avec le repère (ξ, η, ζ) et l'espace de calcul (x, y, z) . Les données des conditions initiales et des conditions aux limites sont transformées depuis l'espace physique vers l'espace de calcul pour résoudre numériquement les équations dans un maillage régulier de repère Cartésien. Cela implique que la déformation dans la région physique va être transposée sur un espace régulier. Il existe donc une transformation conforme entre les deux espaces. L'espace Cartésien est orthogonal sur tout point. Les vecteurs de la base restent de même longueur et parallèles aux axes du repère d'un point à l'autre du maillage. Dans l'espace curviligne par contre, les vecteurs de base changent de direction (Figure 3.2).

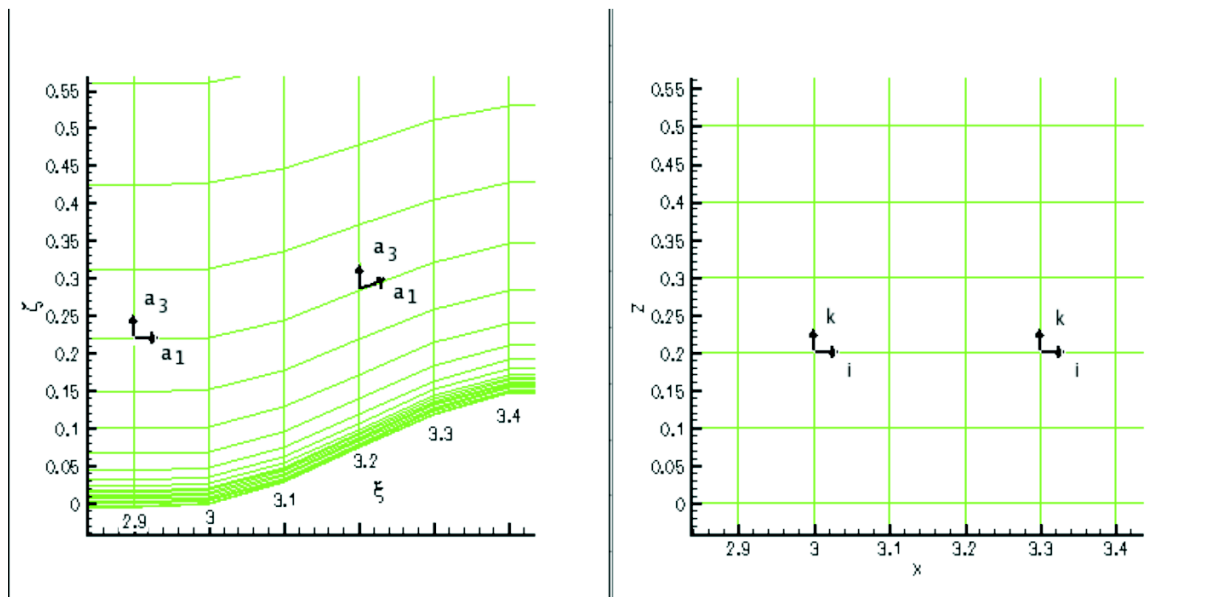


FIG. 3.2 – Maillage physique et maillage de calcul.

Cependant, la position d'un point dans l'espace est indépendante du repère utilisé pour la représenter. On doit être capable de passer d'un système de coordonnées à l'autre avec des équations de transformation.

Dans le repère Cartésien, on va définir un vecteur selon ses composantes dans les trois directions orthogonales :

$$\vec{u} = u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k},$$

où $(\hat{\cdot})$ indique qu'il s'agit d'un vecteur de magnitude unitaire et $[\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}]$ est la base Cartésienne. Ce même vecteur peut être défini dans la base curviligne par :

$$\vec{u} = u^c \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} + v^c \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} + w^c \frac{\partial \vec{r}}{\partial \zeta},$$

où les vecteurs $\left[\frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi}, \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta}, \frac{\partial \vec{r}}{\partial \zeta} \right] \equiv [\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3]$ sont tangentes aux lignes du maillage (on montre $[\hat{a}_1, \hat{a}_3]$ dans la Figure 3.2) et pour tant, servent de vecteurs de base dans le système curviligne. Ils ne sont pas normalisés car ils changent de direction d'un point à l'autre de l'espace. Les composantes (u^c, v^c, w^c) s'appellent *contravariantes* du vecteur \vec{u} .

THOMPSON *et al.* (1985) et SHARMAN *et al.* (1988) montrent que l'on peut exprimer les composantes de la vitesse (u, v, w) dans le système Cartésien (x, y, z) en fonction des contra-

variantes de vitesse (u^c, v^c, w^c) dans le système curviligne (ξ, η, ζ) :

$$\vec{u} = \sum_{i=1}^3 (\hat{a}_i^c \cdot \vec{u}) \hat{a}_i = u^c \hat{a}_1 + v^c \hat{a}_2 + w^c \hat{a}_3, \quad (3.6)$$

où \hat{a}_i est le vecteur orthonormé tangent aux coordonnées curvilignes (ξ, η, ζ) :

$$\hat{a}_i = \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi_i} = \begin{cases} \hat{a}_1 = \frac{\partial x}{\partial \xi} \hat{i} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \hat{j} + \frac{\partial z}{\partial \xi} \hat{k}, \\ \hat{a}_2 = \frac{\partial x}{\partial \eta} \hat{i} + \frac{\partial y}{\partial \eta} \hat{j} + \frac{\partial z}{\partial \eta} \hat{k}, \\ \hat{a}_3 = \frac{\partial x}{\partial \zeta} \hat{i} + \frac{\partial y}{\partial \zeta} \hat{j} + \frac{\partial z}{\partial \zeta} \hat{k}. \end{cases} \quad (3.7)$$

En appliquant (3.7) dans (3.6) on trouve les composantes du champ de vitesse (u, v, w) dans le repère Cartésien exprimé en fonction des contravariantes (u^c, v^c, w^c) dans le repère curviligne :

$$\vec{u} = \sum_{i=1}^3 (\hat{a}_i^c \cdot \vec{u}) \hat{a}_i = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u^c \frac{\partial x}{\partial \xi} + v^c \frac{\partial x}{\partial \eta} + w^c \frac{\partial x}{\partial \zeta} \\ u^c \frac{\partial y}{\partial \xi} + v^c \frac{\partial y}{\partial \eta} + w^c \frac{\partial y}{\partial \zeta} \\ u^c \frac{\partial z}{\partial \xi} + v^c \frac{\partial z}{\partial \eta} + w^c \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix}. \quad (3.8)$$

Les contravariantes de vitesse \vec{u} sont :

$$\begin{cases} u^c = \hat{a}_1^c \cdot \vec{u} = \frac{\partial \xi}{\partial x} u + \frac{\partial \xi}{\partial y} v + \frac{\partial \xi}{\partial z} w, \\ v^c = \hat{a}_2^c \cdot \vec{u} = \frac{\partial \eta}{\partial x} u + \frac{\partial \eta}{\partial y} v + \frac{\partial \eta}{\partial z} w, \\ w^c = \hat{a}_3^c \cdot \vec{u} = \frac{\partial \zeta}{\partial x} u + \frac{\partial \zeta}{\partial y} v + \frac{\partial \zeta}{\partial z} w, \end{cases} \quad (3.9)$$

où \hat{a}_i^c est le vecteur orthonormé perpendiculaire aux coordonnées curvilignes (ξ, η, ζ) :

$$\hat{a}_i^c = \begin{cases} \hat{a}_1^c = \frac{\partial \xi}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial \xi}{\partial z} \hat{k} = \frac{1}{\sqrt{G}} \left(J_{\eta\zeta}^{yz} \hat{i} + J_{\eta\zeta}^{zx} \hat{j} + J_{\eta\zeta}^{xy} \hat{k} \right), \\ \hat{a}_2^c = \frac{\partial \eta}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial \eta}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial \eta}{\partial z} \hat{k} = \frac{1}{\sqrt{G}} \left(J_{\zeta\xi}^{yz} \hat{i} + J_{\zeta\xi}^{zx} \hat{j} + J_{\zeta\xi}^{xy} \hat{k} \right), \\ \hat{a}_3^c = \frac{\partial \zeta}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial \zeta}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial \zeta}{\partial z} \hat{k} = \frac{1}{\sqrt{G}} \left(J_{\xi\eta}^{yz} \hat{i} + v J_{\xi\eta}^{zx} \hat{j} + J_{\xi\eta}^{xy} \hat{k} \right). \end{cases} \quad (3.10)$$

On a utilisé les Jacobiens de transformation des coordonnées pour le calcul de \hat{a}_i^c afin de rendre indépendants les coordonnées curvilignes (ξ, η, ζ) . Ils sont définis par :

$$J_{\eta\zeta}^{yz} \equiv \frac{\partial(y, z)}{\partial(\eta, \zeta)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{vmatrix}. \quad (3.11)$$

Si \sqrt{G} est le déterminant des Jacobiens de la matrice de transformation du repère (ξ, η, ζ) vers le repère (x, y, z) alors :

$$\sqrt{G} \equiv \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(\xi, \eta, \zeta)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{vmatrix}. \quad (3.12)$$

Les contravariantes du champ de vitesse (3.9) sont finalement définies par :

$$\begin{cases} u^c = \hat{a}_1^c \cdot \vec{u} = \frac{1}{\sqrt{G}} (u J_{\eta\zeta}^{yz} + v J_{\eta\zeta}^{zx} + w J_{\eta\zeta}^{xy}), \\ v^c = \hat{a}_2^c \cdot \vec{u} = \frac{1}{\sqrt{G}} (u J_{\zeta\xi}^{yz} + v J_{\zeta\xi}^{zx} + w J_{\zeta\xi}^{xy}), \\ w^c = \hat{a}_3^c \cdot \vec{u} = \frac{1}{\sqrt{G}} (u J_{\xi\eta}^{yz} + v J_{\xi\eta}^{zx} + w J_{\xi\eta}^{xy}). \end{cases} \quad (3.13)$$

Avec le choix de transformation des coordonnées (3.5), les Jacobiens dans l'expression (3.10) et le déterminant de la matrice de transformation inverse prennent les valeurs particulières suivantes :

$$\hat{a}_i^c = \begin{cases} \hat{a}_1^c = \frac{1}{\sqrt{G}} \left(\frac{\partial z}{\partial \zeta} \hat{i} + 0\hat{j} + 0\hat{k} \right), \\ \hat{a}_2^c = \frac{1}{\sqrt{G}} \left(0\hat{i} + \frac{\partial z}{\partial \zeta} \hat{j} + 0\hat{k} \right), \\ \hat{a}_3^c = \frac{1}{\sqrt{G}} \left(-\frac{\partial z}{\partial \xi} \hat{i} - \frac{\partial z}{\partial \eta} \hat{j} + \hat{k} \right), \end{cases} \quad (3.14)$$

$$\sqrt{G} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{vmatrix}.$$

Dans ce cas, les Jacobiens non nuls sont écrits avec la notation suivante :

$$\begin{cases} J_1 \equiv J_{\xi\eta}^{yz} \quad \left(= -\frac{\partial z}{\partial \xi} \right), \\ J_2 \equiv J_{\xi\eta}^{zx} \quad \left(= -\frac{\partial z}{\partial \eta} \right), \\ J_3 \equiv J_{\zeta\xi}^{zx} \quad \left(= +\frac{\partial z}{\partial \zeta} \right), \end{cases} \quad (3.15)$$

$$\sqrt{G} = |J_3|,$$

de même, les covariantes de la vitesse (3.13) sont écrits sous la forme :

$$\hat{a}_i^c \cdot \vec{u} = \begin{cases} u^c = \frac{1}{\sqrt{G}} u J_3, \\ v^c = \frac{1}{\sqrt{G}} v J_3, \\ w^c = \frac{1}{\sqrt{G}} (u J_1 + v J_2 + w). \end{cases} \quad (3.16)$$

Raffinement vertical du maillage

Dans la Figure 3.2 on peut voir les deux effets sur le maillage de calcul, l'effet de contraction verticale près du sol et le suivi de la topographie du terrain. Pour obtenir cette contraction verticale, on applique une fonction de variation de taille selon la hauteur sur le terrain. Deux choix sont disponibles dans le code. L'un utilise une fonction cubique de transformation, l'autre fait appel à la fonction tangente hyperbolique.

Ainsi, la verticale du domaine est composée de trois sous-domaines :

D_1 : Une zone proche à la paroi où la taille verticale des mailles est la même et égale à une valeur minimale Δz_{min} .

D_2 : La zone au dessus de D_1 où on applique la fonction de variation de taille verticale du maillage.

D_3 : La dernière zone est placée généralement au dessus de l'épaisseur de la couche limite δ . Elle sert à amortir les ondes de *Rayleigh* produites par la condition à la limite supérieure du domaine. Sa taille est prise généralement $D_3 = \frac{1}{3}\delta$ et est suffisante pour obtenir l'atténuation de ces ondes (XUE *et al*, (1995)). Les tailles verticales des mailles comprises dans cette zone sont tous égales à une valeur maximale préétablie Δz_{max} .

La Figure (3.3) montre l'agencement vertical du domaine.

On peut déduire les relations suivantes :

$$D_T = D_1 + D_2 + D_3 = (nz - 3)\Delta z_m, \quad (3.17)$$

$$n_1 + n_2 + n_3 = \frac{D_1}{\Delta z_{min}} + \frac{D_2}{\Delta z_2} + \frac{D_3}{\Delta z_{max}} = nz - 3, \quad (3.18)$$

où :

D_T est la hauteur totale du domaine de calcul.

nz est le nombre total des mailles dans la direction verticale.

Δz_m est la taille verticale moyenne des mailles dans le domaine total D_T .

Δz_2 est la taille verticale moyenne des mailles qui se trouvent dans le sous-domaine D_2 .

n_1, n_2, n_3 sont les nombres des mailles qui composent les sous-domaines D_1, D_2 et D_3 respectivement.

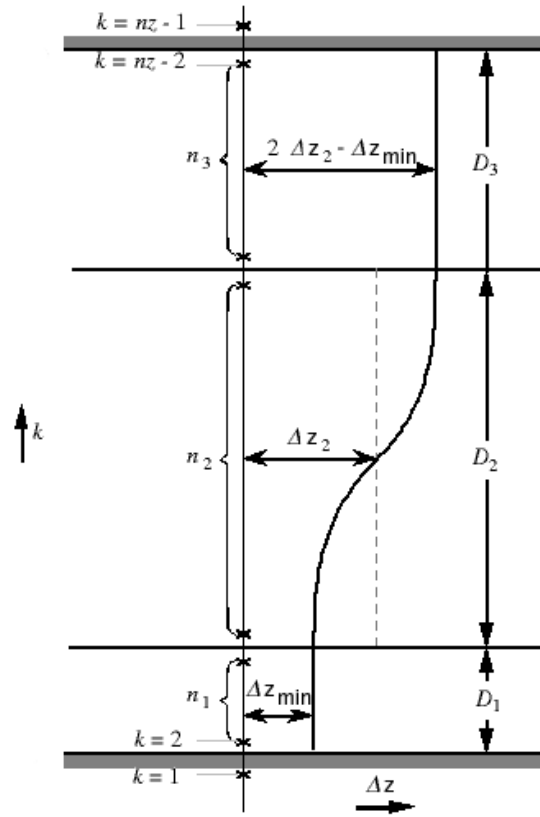


FIG. 3.3 – Agencement vertical du maillage de calcul.

On peut vérifier que la taille moyenne des mailles placées dans le sous-domaine D_2 est conditionnée par les tailles des mailles fixées dans les deux autres sous-domaines :

$$\begin{aligned}\Delta z_2 &= \Delta z_{min} + (\Delta z_{max} - \Delta z_{min})/2, \\ \Delta z_{max} &= 2\Delta z_2 - \Delta z_{min}.\end{aligned}\tag{3.19}$$

La fonction de contraction du maillage est appliquée entre Δz_{min} et Δz_{max} . Cette fonction peut être de type cubique ou tangente hyperbolique. Dans la deuxième alternative, un paramètre supplémentaire est à régler pour que le rythme de variation des tailles soit

plus ou moins rapide dans les extrémités du sous-domaine D_2 . Par plus de détails voir XUE *et al.* 1995).

3.2.6 Les équations de Navier-Stokes en coordonnées curvilignes

Dans cette section, nous allons présenter les principales équations développées dans le Chapitre 1 en coordonnées curvilignes.

La déformation qui transpose l'espace physique vers l'espace régulier est exprimée par les opérateurs contravariants des variables dans le repère curviligne. Cependant, les grandeurs à transporter doivent être exprimées dans le repère régulier pour assurer les propriétés conservatives des équations.

Ainsi, dans le repère curviligne, le gradient s'exprime par :

$$\nabla\phi = \frac{1}{\sqrt{G}} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\sqrt{G} \hat{a}_i^c \phi \right). \quad (3.20)$$

Pour notre choix de transformation (3.5), le vecteur contravariant orthonormé \hat{a}_i^c appliqué au scalaire ϕ en tenant compte de (3.14) et (3.15) est :

$$\hat{a}_i^c \phi = \begin{cases} \hat{a}_1^c \phi = \frac{1}{\sqrt{G}} J_3 \phi \hat{i}, \\ \hat{a}_2^c \phi = \frac{1}{\sqrt{G}} J_3 \phi \hat{j}, \\ \hat{a}_3^c \phi = \frac{1}{\sqrt{G}} \left(J_1 \phi \hat{i} + J_2 \phi \hat{j} + \phi \hat{k} \right), \end{cases} \quad (3.21)$$

ce qui donne pour l'expression du gradient (3.20) :

$$\nabla\phi = \frac{1}{\sqrt{G}} \left[\left(\frac{\partial J_3 \phi}{\partial \xi} + \frac{\partial J_1 \phi}{\partial \zeta} \right) \hat{i} + \left(\frac{\partial J_3 \phi}{\partial \eta} + \frac{\partial J_2 \phi}{\partial \zeta} \right) \hat{j} + \frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \hat{k} \right]. \quad (3.22)$$

L'expression hydrostatique (1.2) en coordonnées curvilignes est déterminée en appliquant :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} &= \frac{\partial \bar{p}}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial z} \\ \frac{\partial \bar{p}}{\partial z} &= -\bar{\rho}g,\end{aligned}$$

sachant que $z = f(\xi, \eta, \zeta)$.

Pour la transformation (3.5) on a :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \xi}{\partial z} &= \frac{1}{\sqrt{G}} J_{\eta\zeta}^{xy} = \frac{1}{\sqrt{G}} \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{G}} \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = 0, \\ \frac{\partial \eta}{\partial z} &= \frac{1}{\sqrt{G}} J_{\zeta\xi}^{xy} = \frac{1}{\sqrt{G}} \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \\ \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{G}} \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} = 0, \\ \frac{\partial \zeta}{\partial z} &= \frac{1}{\sqrt{G}} J_{\xi\eta}^{xy} = \frac{1}{\sqrt{G}} \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{G}} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{G}},\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial \zeta} = -\sqrt{G}\bar{\rho}g. \quad (3.23)$$

La divergence de la vitesse en coordonnées curvilignes est obtenue de la façon suivante :

$$\nabla \cdot \vec{u} = \frac{1}{\sqrt{G}} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\sqrt{G} \hat{a}_i^c \cdot \vec{u} \right), \quad (3.24)$$

où $\hat{a}_i^c \cdot \vec{u}$ sont les contravariantes du champ de vitesse (3.16). Pour la transformation des

coordonnées choisie (3.5), la divergence du champ de vitesse devient :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{u} &= \frac{1}{\sqrt{G}} \left[\frac{\partial (\sqrt{G}u^c)}{\partial \xi} + \frac{\partial (\sqrt{G}v^c)}{\partial \eta} + \frac{\partial (\sqrt{G}w^c)}{\partial \zeta} \right], \\ \nabla \cdot \vec{u} &= \frac{1}{\sqrt{G}} \left[\frac{\partial (J_3 u)}{\partial \xi} + \frac{\partial (J_3 v)}{\partial \eta} + \frac{\partial (J_1 u + J_2 v + w)}{\partial \zeta} \right].\end{aligned}\tag{3.25}$$

L'équation de transport pour un scalaire ϕ est écrite :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \phi) = \mathcal{S}.$$

Dans un repère curviligne, elle doit être exprimée en fonction des contravariantes du champs de vitesse (SHARMAN *et al.* (1988)). Selon (3.24) et (3.25) cela rendre :

$$\frac{\partial (\sqrt{G}\phi)}{\partial t} + \frac{\partial (\sqrt{G}u^c \phi)}{\partial \xi} + \frac{\partial (\sqrt{G}v^c \phi)}{\partial \eta} + \frac{\partial (\sqrt{G}w^c \phi)}{\partial \zeta} = \mathcal{S}\sqrt{G},\tag{3.26}$$

où \mathcal{S} représente le terme source ou puit et nous supposons qu'il n'existe pas des réactions chimiques.

D'après (3.26), l'équation de conservation de la masse (1.8) avec l'hypothèse anélastique devient :

$$\frac{\partial (\sqrt{G}\tilde{u}^c)}{\partial \xi} + \frac{\partial (\sqrt{G}\tilde{v}^c)}{\partial \eta} + \frac{\partial (\sqrt{G}\tilde{w}^c)}{\partial \zeta} = 0,$$

où on a noté $\bar{\rho}u = \tilde{u}$.

Pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement, on va prendre l'expression donnée pour les grandes échelles (1.50) et les considérations faites pour les tenseurs de Leonard et Corisé (1.55). Pour le terme de convection du champ de vitesse on a :

$$\nabla \cdot (\vec{u}^\oplus \vec{u}^\oplus) = \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left[\sqrt{G} (\hat{a}_i^c \cdot \vec{u}^\oplus) \vec{u}^\oplus \right],\tag{3.27}$$

avec

$$\vec{u}^\oplus = u^\oplus \hat{i} + v^\oplus \hat{j} + w^\oplus \hat{k},$$

$$\nabla \cdot (\vec{u}^\oplus \vec{u}^\oplus) = \frac{1}{\sqrt{G}} \begin{bmatrix} \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{u}^{c^\oplus} u^\oplus)}{\partial\xi} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{v}^{c^\oplus} u^\oplus)}{\partial\eta} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{w}^{c^\oplus} u^\oplus)}{\partial\zeta} \\ \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{u}^{c^\oplus} v^\oplus)}{\partial\xi} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{v}^{c^\oplus} v^\oplus)}{\partial\eta} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{w}^{c^\oplus} v^\oplus)}{\partial\zeta} \\ \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{u}^{c^\oplus} w^\oplus)}{\partial\xi} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{v}^{c^\oplus} w^\oplus)}{\partial\eta} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{w}^{c^\oplus} w^\oplus)}{\partial\zeta} \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

Ce qui donne pour chacune des composantes de l'équation de la quantité de mouvement la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\sqrt{G}u^\oplus)}{\partial t} = & - \left[\frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{u}^{c^\oplus} u^\oplus)}{\partial\xi} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{v}^{c^\oplus} u^\oplus)}{\partial\eta} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{w}^{c^\oplus} u^\oplus)}{\partial\zeta} \right] \\ & - \left(\frac{\partial(J_3 p')}{\partial\xi} + \frac{\partial(J_1 p')}{\partial\zeta} \right)^\oplus + 2\Omega [\tilde{v}^\oplus \sin\varphi - \tilde{w}^\oplus \cos\varphi] \\ & + \sqrt{G}D_u, \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\sqrt{G}v^\oplus)}{\partial t} = & - \left[\frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{u}^{c^\oplus} v^\oplus)}{\partial\xi} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{v}^{c^\oplus} v^\oplus)}{\partial\eta} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{w}^{c^\oplus} v^\oplus)}{\partial\zeta} \right] \\ & - \left(\frac{\partial(J_3 p')}{\partial\eta} + \frac{\partial(J_2 p')}{\partial\zeta} \right)^\oplus - 2\Omega\tilde{u}^\oplus \sin\varphi + \sqrt{G}D_v, \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\sqrt{G}w^\oplus)}{\partial t} = & - \left[\frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{u}^{c^\oplus} w^\oplus)}{\partial\xi} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{v}^{c^\oplus} w^\oplus)}{\partial\eta} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{w}^{c^\oplus} w^\oplus)}{\partial\zeta} \right] \\ & + \sqrt{G}\bar{\rho}gB^\oplus - \left(\frac{\partial p'}{\partial\zeta} \right)^\oplus + 2\Omega\tilde{u}^\oplus \cos\varphi + \sqrt{G}D_w. \end{aligned} \quad (3.31)$$

L'équation de transport de la température potentielle (1.53) en coordonnées curvilignes, à l'aide de (3.26), s'exprime par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\sqrt{G}\bar{\rho}\theta^\oplus)}{\partial t} = & - \left[\frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{u}^{c^\oplus}\theta^\oplus)}{\partial\xi} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{v}^{c^\oplus}\theta^\oplus)}{\partial\eta} + \frac{\partial(\sqrt{G}\tilde{w}^{c^\oplus}\theta^\oplus)}{\partial\zeta} \right] \\ & + \sqrt{G}S_\theta - \sqrt{G}D_\theta. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Cette équation peut aussi s'appliquer de façon générale pour un scalaire passif quelconque (ϕ).

Les derniers termes des expressions ci-dessus représentent les effets dûs à la viscosité turbulente et moléculaire de l'écoulement :

$$\begin{aligned} \sqrt{G}D_u = & - \sqrt{G} \left(\frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{12}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{13}}{\partial z} \right) \\ & + 2\sqrt{G} \left(\frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\nu}S_{11}^{a\oplus})}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\nu}S_{12}^{a\oplus})}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\nu}S_{13}^{a\oplus})}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{G}D_v = & - \sqrt{G} \left(\frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{21}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{22}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{23}}{\partial z} \right) \\ & + 2\sqrt{G} \left(\frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\nu}S_{21}^{a\oplus})}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\nu}S_{22}^{a\oplus})}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\nu}S_{23}^{a\oplus})}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{G}D_w = & - \sqrt{G} \left(\frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{31}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{32}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}_{33}}{\partial z} \right) \\ & + 2\sqrt{G} \left(\frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\nu}S_{31}^{a\oplus})}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\nu}S_{32}^{a\oplus})}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\nu}S_{33}^{a\oplus})}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (3.35)$$

La partie asymétrique du tenseur $\tilde{\mathcal{R}}_{ij}$ est modée sous la forme de l'approximation de *Boussinesq* et sa trace est proportionnelle à l'énergie cinétique turbulente de sous-maille. Cela permet de regrouper les termes de viscosité turbulente et moléculaire :

$$\begin{aligned} \sqrt{G}D_u = & 2\sqrt{G} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{\nu})S_{11}^{a\oplus} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{\nu})S_{12}^{a\oplus} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{\nu})S_{13}^{a\oplus} \right] \right) \\ & + \frac{2}{3}\sqrt{G}\bar{\rho}E^\ominus, \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned}\sqrt{G}D_v &= 2\sqrt{G} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})S_{21}^{a\oplus} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})S_{22}^{a\oplus} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})S_{23}^{a\oplus} \right] \right) \\ &+ \frac{2}{3}\sqrt{G}\bar{\rho}E^\ominus,\end{aligned}\quad (3.37)$$

$$\begin{aligned}\sqrt{G}D_w &= 2\sqrt{G} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})S_{31}^{a\oplus} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})S_{32}^{a\oplus} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})S_{33}^{a\oplus} \right] \right) \\ &+ \frac{2}{3}\sqrt{G}\bar{\rho}E^\ominus,\end{aligned}\quad (3.38)$$

où E^\ominus est l'énergie cinétique turbulente de sous-maille :

$$E^\ominus = \frac{1}{2}(u^\ominus u^\ominus + v^\ominus v^\ominus + w^\ominus w^\ominus)^\oplus.$$

La divergence des tenseurs dans le repère Cartésien s'exprime dans le repère curviligne à l'aide de (3.25) de la façon suivante :

$$\begin{aligned}\sqrt{G}D_u &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})J_3\mathcal{D}_{11}^{a\oplus} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})J_3\mathcal{D}_{12}^{a\oplus} \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \zeta} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})(J_1\mathcal{D}_{11}^{a\oplus} + J_2\mathcal{D}_{12}^{a\oplus} + \mathcal{D}_{13}^{a\oplus}) \right] + \frac{2}{3}\sqrt{G}\bar{\rho}E^\ominus,\end{aligned}\quad (3.39)$$

$$\begin{aligned}\sqrt{G}D_v &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})J_3\mathcal{D}_{21}^{a\oplus} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})J_3\mathcal{D}_{22}^{a\oplus} \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \zeta} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})(J_1\mathcal{D}_{21}^{a\oplus} + J_2\mathcal{D}_{22}^{a\oplus} + \mathcal{D}_{23}^{a\oplus}) \right] + \frac{2}{3}\sqrt{G}\bar{\rho}E^\ominus,\end{aligned}\quad (3.40)$$

$$\begin{aligned}\sqrt{G}D_w &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})J_3\mathcal{D}_{31}^{a\oplus} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})J_3\mathcal{D}_{32}^{a\oplus} \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \zeta} \left[\bar{\rho}(k_m + \bar{v})(J_1\mathcal{D}_{31}^{a\oplus} + J_2\mathcal{D}_{32}^{a\oplus} + \mathcal{D}_{33}^{a\oplus}) \right] + \frac{2}{3}\sqrt{G}\bar{\rho}E^\ominus.\end{aligned}\quad (3.41)$$

Les tenseurs $\mathcal{D}_{ij}^{a\oplus} = 2S_{ij}^{a\oplus}$ sont aussi déterminés dans le repère curviligne :

$$\left. \begin{aligned}
\mathcal{D}_{11}^{a^\oplus} &= 2\frac{\partial u^\oplus}{\partial x} - \frac{2}{3}\mathcal{D}iv, \\
&= \frac{2}{\sqrt{G}} \left[\frac{\partial(J_3 u^\oplus)}{\partial \xi} + \frac{\partial(J_1 u^\oplus)}{\partial \zeta} \right] - \frac{2}{3\sqrt{G}}\mathcal{D}iv, \\
\mathcal{D}_{12}^{a^\oplus} &= \left(\frac{\partial u^\oplus}{\partial y} + \frac{\partial v^\oplus}{\partial x} \right), \\
&= \frac{1}{\sqrt{G}} \left[\frac{\partial(J_3 u^\oplus)}{\partial \eta} + \frac{\partial(J_3 v^\oplus)}{\partial \xi} + \frac{\partial(J_2 u^\oplus + J_1 v^\oplus)}{\partial \zeta} \right], \\
\mathcal{D}_{13}^{a^\oplus} &= \left(\frac{\partial u^\oplus}{\partial z} + \frac{\partial w^\oplus}{\partial x} \right), \\
&= \frac{1}{\sqrt{G}} \left[\frac{\partial(J_3 w^\oplus)}{\partial \xi} + \frac{\partial(u^\oplus + J_1 w^\oplus)}{\partial \zeta} \right], \\
\mathcal{D}_{21}^{a^\oplus} &= \mathcal{D}_{12}^{a^\oplus}, \\
\mathcal{D}_{22}^{a^\oplus} &= 2\frac{\partial v^\oplus}{\partial y} - \frac{2}{3}\mathcal{D}iv, \\
&= \frac{2}{\sqrt{G}} \left[\frac{\partial(J_3 v^\oplus)}{\partial \eta} + \frac{\partial(J_2 v^\oplus)}{\partial \zeta} \right] - \frac{2}{3\sqrt{G}}\mathcal{D}iv, \\
\mathcal{D}_{23}^{a^\oplus} &= \left(\frac{\partial v^\oplus}{\partial z} + \frac{\partial w^\oplus}{\partial y} \right), \\
&= \frac{1}{\sqrt{G}} \left[\frac{\partial(J_3 w^\oplus)}{\partial \eta} + \frac{\partial(v^\oplus + J_2 w^\oplus)}{\partial \zeta} \right], \\
\mathcal{D}_{31}^{a^\oplus} &= \mathcal{D}_{13}^{a^\oplus}, \\
\mathcal{D}_{32}^{a^\oplus} &= \mathcal{D}_{23}^{a^\oplus}, \\
\mathcal{D}_{33}^{a^\oplus} &= 2\frac{\partial w^\oplus}{\partial z} - \frac{2}{3}\mathcal{D}iv, \\
&= \frac{2}{\sqrt{G}} \frac{\partial w^\oplus}{\partial \zeta} - \frac{2}{3\sqrt{G}}\mathcal{D}iv,
\end{aligned} \right\} \mathcal{D}_{ij}^{a^\oplus} \tag{3.42}$$

où Div est la divergence dans le repère curviligne :

$$\begin{aligned} Div = \nabla \cdot \vec{u} &= \frac{\partial(\sqrt{G}u^{c\oplus})}{\partial\xi} + \frac{\partial(\sqrt{G}v^{c\oplus})}{\partial\eta} + \frac{\partial(\sqrt{G}w^{c\oplus})}{\partial\zeta}, \\ &= \frac{\partial(J_3u^\oplus)}{\partial\xi} + \frac{\partial(J_3v^\oplus)}{\partial\eta} + \frac{\partial(J_1u^\oplus + J_2v^\oplus + w^\oplus)}{\partial\zeta}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Le terme de mélange turbulent dans l'équation de transport de la température potentielle (3.32) en coordonnées curvilignes est :

$$\begin{aligned} \sqrt{G}D_\theta &= -\sqrt{G} \left(\frac{\partial h_1}{\partial x} + \frac{\partial h_2}{\partial y} + \frac{\partial h_3}{\partial z} \right) \\ &= - \left[\frac{\partial(J_3h_1)}{\partial\xi} + \frac{\partial(J_3h_2)}{\partial\eta} + \frac{\partial(J_1h_1 + J_2h_2 + h_3)}{\partial\zeta} \right]. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Les flux turbulents des scalaires sont modélés sous la forme de l'approximation de *Boussinesq* comme on l'a montré en (1.58). Pour une grandeur scalaire ϕ quelconque, les dérivées Cartésiennes s'expriment en coordonnées curvilignes :

$$\left\{ \begin{array}{l} h_1 = -\bar{\rho}k_h \frac{\partial\phi^\oplus}{\partial x}, \\ \quad = -\bar{\rho}k_h \frac{1}{\sqrt{G}} \left[\frac{\partial(J_3\phi^\oplus)}{\partial\xi} + \frac{\partial(J_1\phi^\oplus)}{\partial\zeta} \right], \\ h_2 = -\bar{\rho}k_h \frac{\partial\phi^\oplus}{\partial y}, \\ \quad = -\bar{\rho}k_h \frac{1}{\sqrt{G}} \left[\frac{\partial(J_3\phi^\oplus)}{\partial\eta} + \frac{\partial(J_2\phi^\oplus)}{\partial\zeta} \right], \\ h_3 = -\bar{\rho}k_h \frac{\partial\phi^\oplus}{\partial z}, \\ \quad = -\bar{\rho}k_h \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial\phi^\oplus}{\partial\zeta}. \end{array} \right. \quad (3.45)$$

On est arrivé à exprimer l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans le repère curviligne. Le coefficient de viscosité turbulente k_m peut être calculé avec une fermeture de type *Smagorinsky* (1.63) ou avec une fermeture d'ordre 1,5 en utilisant l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille (1.113). Dans le code ARPS il est proposé pour le premier cas une fermeture de type *Smagorinsky Standard* avec un coefficient constant $C_s = 2,1$.

Dans l'équation de conservation de l'énergie, on utilise la température potentielle. La résolution de l'équation de transport entraîne l'estimation du coefficient de mélange turbulent lié au coefficient dynamique à travers le nombre de *Prandtl*.

Dans la suite, on va présenter les modifications et apports introduits dans le code ARPS pour pouvoir obtenir le coefficient de viscosité turbulente avec le modèle *Smagorinsky dynamique* dans le repère curviligne.

On va décrire aussi les modifications des conditions initiales et des conditions aux limites pour pouvoir simuler des écoulements soumis à un régime de vitesse stationnaire.

3.3 Apports et modifications du code ARPS pour la Simulation des Grandes Échelles

Dans cette section, on va présenter les apports que nous avons introduits dans le code ARPS pour tenir compte des modifications nécessaires sur les conditions initiales, les conditions aux limites ou les fermetures du tenseur *Reynolds* de sous-maille. Cela va permettre, par exemple, de forcer à l'aide des profils de vitesse moyenne et de l'énergie cinétique turbulente, les conditions initiales et les conditions aux limites afin de simuler numériquement les écoulements générés dans les souffleries de laboratoire. Ces simulations seront nécessaires pour permettre d'ajuster ou de confirmer les paramètres du code afin de valider son utilisation globale avec dispersion turbulente des scalaires passifs, réactifs etc.

3.3.1 Le modèle de fermeture "Smagorinsky Dynamique"

Afin d'améliorer la précision des résultats de la Simulation Grandes Échelles (LES), on a ajouté la détermination dynamique de la constante de *Smagorinsky* dans le code ARPS. Le développement théorique a été présenté dans le Chapitre 1 (§ 1.4.3). Dans la suite, on va montrer la transformation du tenseur de *Leonard* modifié $\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)a}$ et du tenseur \mathcal{M}_{ij} dans le repère curviligne pour le champ de vitesse ainsi que le calcul des tenseurs \mathcal{Q}_j et \mathcal{N}_j pour les grandeurs scalaires.

Le tenseur de Leonard modifié en coordonnées curvilignes

Le tenseur de *Leonard* modifié est calculé à l'aide de (1.74). Pour l'exprimer en coordonnées curvilignes, il faut d'abord appliquer le filtre test (comme on l'a fait pour l'équation (1.65)) aux équations de transport de la quantité de mouvement (3.29), (3.30), (3.31). Selon (3.16), les corrélations de la vitesse pour chacune des composantes sont :

$$\sqrt{G} \begin{bmatrix} \tilde{u}^{c\oplus} \\ \tilde{v}^{c\oplus} \\ \tilde{w}^{c\oplus} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u^\oplus \\ v^\oplus \\ w^\oplus \end{bmatrix} = J_3 \begin{bmatrix} \tilde{u}^\oplus \\ \tilde{v}^\oplus \\ \tilde{w}^{c\oplus} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u^\oplus \\ v^\oplus \\ w^\oplus \end{bmatrix}.$$

Dans la dernière composante, on a utilisé (3.15) :

$$\begin{aligned} \sqrt{G} &= |J_3|, \\ &= \left| \frac{\partial z}{\partial \zeta} \right|, \\ &= \frac{\partial z}{\partial \zeta}, \\ &= J_3, \end{aligned}$$

puisque la coordonnée verticale dans le repère Cartésien croît monotonement avec celle dans le repère curviligne.

Chacune des composantes du tenseur de *Leonard* s'exprime de la façon suivante :

$$\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)a} \left\{ \begin{array}{l}
 \tilde{\mathcal{L}}_{11}^{(M)a} = (J_3 \tilde{u}^\oplus u^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{u}^\oplus)^\top u^{\oplus\top} - \frac{1}{3} \tilde{\mathcal{L}}_{kk}^0, \\
 \tilde{\mathcal{L}}_{12}^{(M)a} = (J_3 \tilde{v}^\oplus u^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{v}^\oplus)^\top u^{\oplus\top}, \\
 \tilde{\mathcal{L}}_{13}^{(M)a} = (J_3 \tilde{w}^{c\oplus} u^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{w}^{c\oplus})^\top u^{\oplus\top}, \\
 \\
 \tilde{\mathcal{L}}_{21}^{(M)a} = (J_3 \tilde{u}^\oplus v^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{u}^\oplus)^\top v^{\oplus\top}, \\
 \tilde{\mathcal{L}}_{22}^{(M)a} = (J_3 \tilde{v}^\oplus v^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{v}^\oplus)^\top v^{\oplus\top} - \frac{1}{3} \tilde{\mathcal{L}}_{kk}^0, \\
 \tilde{\mathcal{L}}_{23}^{(M)a} = (J_3 \tilde{w}^{c\oplus} v^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{w}^{c\oplus})^\top v^{\oplus\top}, \\
 \\
 \tilde{\mathcal{L}}_{31}^{(M)a} = (J_3 \tilde{u}^\oplus w^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{u}^\oplus)^\top w^{\oplus\top}, \\
 \tilde{\mathcal{L}}_{32}^{(M)a} = (J_3 \tilde{v}^\oplus w^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{v}^\oplus)^\top w^{\oplus\top}, \\
 \tilde{\mathcal{L}}_{33}^{(M)a} = (J_3 \tilde{w}^{c\oplus} w^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{w}^{c\oplus})^\top w^{\oplus\top} - \frac{1}{3} \tilde{\mathcal{L}}_{kk}^0.
 \end{array} \right. \quad (3.46)$$

La traçe de ce tenseur $\tilde{\mathcal{L}}_{kk}^0$ est :

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{L}}_{kk}^0 &= (J_3 \tilde{u}^\oplus u^\oplus)^\top + (J_3 \tilde{v}^\oplus v^\oplus)^\top + (J_3 \tilde{w}^{c\oplus} w^\oplus)^\top \\
 &\quad - \left[(J_3 \tilde{u}^\oplus)^\top u^{\oplus\top} + (J_3 \tilde{v}^\oplus)^\top v^{\oplus\top} + (J_3 \tilde{w}^{c\oplus})^\top w^{\oplus\top} \right].
 \end{aligned}$$

Le tenseur de *Leonard* modifié peut être aussi calculé à l'aide de la différence des tenseurs des contraintes $\tilde{\mathcal{R}}_{ij}^{(M\top)}$ et $(\tilde{\mathcal{R}}_{ij})^\top$ comme on l'a montré dans l'expression (1.71). Ces tenseurs sont modélés sous la forme de l'approximation de *Boussinesq* et exprimés en coordonnées curvilignes pour chacune de ses composantes dans l'équation de la quantité de mouvement (3.39), (3.40) et (3.41). Les coefficients $(k_m + \bar{\nu})$ de ces tenseurs sont modélés à l'aide du modèle *Smagorinsky* selon l'équation (1.72) ce qui permet d'exprimer les tenseurs $2\mathcal{M}_{ij}$ (1.75) en coordonnées curvilignes :

$$\left. \begin{aligned}
2\mathcal{M}_{11} &= \left\{ \left[\underline{S}^\oplus | J_3 \mathcal{D}_{11}^{a^\oplus} \right]^\top - \alpha^2 | \underline{S}^\oplus |^\top J_3^\top \mathcal{D}_{11}^{a^\oplus \top} \right\}, \\
2\mathcal{M}_{12} &= \left\{ \left[\underline{S}^\oplus | J_3 \mathcal{D}_{12}^{a^\oplus} \right]^\top - \alpha^2 | \underline{S}^\oplus |^\top J_3^\top \mathcal{D}_{12}^{a^\oplus \top} \right\}, \\
2\mathcal{M}_{13} &= \left\{ \left[\underline{S}^\oplus | (J_1 \mathcal{D}_{11}^{a^\oplus} + J_2 \mathcal{D}_{12}^{a^\oplus} + \mathcal{D}_{13}^{a^\oplus}) \right]^\top \right. \\
&\quad \left. - \alpha^2 | \underline{S}^\oplus |^\top \left[J_1^\top \mathcal{D}_{11}^{a^\oplus \top} + J_2^\top \mathcal{D}_{12}^{a^\oplus \top} + \mathcal{D}_{13}^{a^\oplus \top} \right] \right\}, \\
2\mathcal{M}_{21} &= \left\{ \left[\underline{S}^\oplus | J_3 \mathcal{D}_{21}^{a^\oplus} \right]^\top - \alpha^2 | \underline{S}^\oplus |^\top J_3^\top \mathcal{D}_{21}^{a^\oplus \top} \right\}, \\
2\mathcal{M}_{22} &= \left\{ \left[\underline{S}^\oplus | J_3 \mathcal{D}_{22}^{a^\oplus} \right]^\top - \alpha^2 | \underline{S}^\oplus |^\top J_3^\top \mathcal{D}_{22}^{a^\oplus \top} \right\}, \\
2\mathcal{M}_{23} &= \left\{ \left[\underline{S}^\oplus | (J_1 \mathcal{D}_{21}^{a^\oplus} + J_2 \mathcal{D}_{22}^{a^\oplus} + \mathcal{D}_{23}^{a^\oplus}) \right]^\top \right. \\
&\quad \left. - \alpha^2 | \underline{S}^\oplus |^\top \left[J_1^\top \mathcal{D}_{21}^{a^\oplus \top} + J_2^\top \mathcal{D}_{22}^{a^\oplus \top} + \mathcal{D}_{23}^{a^\oplus \top} \right] \right\}, \\
2\mathcal{M}_{31} &= \left\{ \left[\underline{S}^\oplus | J_3 \mathcal{D}_{31}^{a^\oplus} \right]^\top - \alpha^2 | \underline{S}^\oplus |^\top J_3^\top \mathcal{D}_{31}^{a^\oplus \top} \right\}, \\
2\mathcal{M}_{32} &= \left\{ \left[\underline{S}^\oplus | J_3 \mathcal{D}_{32}^{a^\oplus} \right]^\top - \alpha^2 | \underline{S}^\oplus |^\top J_3^\top \mathcal{D}_{32}^{a^\oplus \top} \right\}, \\
2\mathcal{M}_{33} &= \left\{ \left[\underline{S}^\oplus | (J_1 \mathcal{D}_{13}^{a^\oplus} + J_2 \mathcal{D}_{23}^{a^\oplus} + \mathcal{D}_{33}^{a^\oplus}) \right]^\top \right. \\
&\quad \left. - \alpha^2 | \underline{S}^\oplus |^\top \left[J_1^\top \mathcal{D}_{31}^{a^\oplus \top} + J_2^\top \mathcal{D}_{32}^{a^\oplus \top} + \mathcal{D}_{33}^{a^\oplus \top} \right] \right\}.
\end{aligned} \right. \quad (3.47)$$

Enfin, la constante de *Smagorinsky* est calculée dynamiquement à partir des tenseurs $\tilde{\mathcal{L}}_{ij}^{(M)a}$ et \mathcal{M}_{ij} (1.77) et on obtient :

$$(C_s \Delta)^2 = \frac{1}{2\bar{\rho}} \frac{\tilde{\mathcal{L}}_{11}^{(M)a} \mathcal{M}_{11} + \tilde{\mathcal{L}}_{12}^{(M)a} \mathcal{M}_{12} + \cdots + \tilde{\mathcal{L}}_{33}^{(M)a} \mathcal{M}_{33}}{\mathcal{M}_{11}^2 + \mathcal{M}_{12}^2 + \cdots + \mathcal{M}_{33}^2}. \quad (3.48)$$

Dans toutes les expressions précédentes, le tenseur de déformation $|\underline{S}^\oplus|$ est calculé en accord avec (1.64) :

$$\begin{aligned}
 |\underline{S}^\oplus| &= (2S_{ij}^\oplus S_{ij}^\oplus)^{1/2}, \\
 &= \left(\frac{1}{2} \mathcal{D}_{ij}^\oplus \mathcal{D}_{ij}^\oplus \right)^{1/2}, \\
 &= \left[\frac{1}{2} \left(\mathcal{D}_{11}^{\oplus 2} + \mathcal{D}_{12}^{\oplus 2} + \dots + \mathcal{D}_{33}^{\oplus 2} \right) \right]^{1/2}, \\
 &= \left[\frac{1}{2} \left(\mathcal{D}_{11}^{\oplus 2} + \mathcal{D}_{22}^{\oplus 2} + \mathcal{D}_{33}^{\oplus 2} \right) + \left(\mathcal{D}_{12}^{\oplus 2} + \mathcal{D}_{23}^{\oplus 2} + \mathcal{D}_{13}^{\oplus 2} \right) \right]^{1/2}.
 \end{aligned} \tag{3.49}$$

Le coefficient de diffusion turbulente scalaire k_h est proportionnel au coefficient de diffusion turbulente dynamique k_m (1.78). Le nombre de *Prandtl* peut être calculé aussi dynamiquement (1.85). Il faut ainsi obtenir les tenseurs \mathcal{Q}_j et \mathcal{N}_j (1.83) et (1.84) en coordonnées curvilignes. Pour cela, on applique le filtre test décrit dans le Chapitre 1 (§ 1.4.3) sur l'expression (3.32) et on cherche à exprimer les corrélations vitesse-température et les tenseurs de contraintes de la même façon que pour obtenir l'équation (1.80). Cela, en coordonnées curvilignes, donne le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 (J_3 \tilde{u}^\oplus \theta^\oplus)^\top + (J_3 h_1)^\top = (J_3 \tilde{u}^\oplus)^\top \theta^{\oplus \top} + J_3^\top H_1, \\
 (J_3 \tilde{v}^\oplus \theta^\oplus)^\top + (J_3 h_2)^\top = (J_3 \tilde{v}^\oplus)^\top \theta^{\oplus \top} + J_3^\top H_2, \\
 (J_3 \tilde{w}^{c^\oplus} \theta^\oplus)^\top + (J_1 h_1 + J_2 h_2 + h_3)^\top = (J_3 \tilde{w}^{c^\oplus})^\top \theta^{\oplus \top} + J_1^\top H_1 + J_2^\top H_2 + H_3,
 \end{array} \right. \tag{3.50}$$

en considérant (3.15) pour les jacobiens et (3.16) pour les contravariantes du champ de vitesse.

Les jacobiens J_1^\top , J_2^\top et J_3^\top expriment la variation de la coordonnée cartésienne z par rapport à ξ , η et ζ respectivement selon la taille du filtre test.

Le tenseur \mathcal{Q}_{ij} est la différence des tenseurs $H_j - (h_j)^\top$ exprimée dans (1.80) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{Q}_1 = J_3^\top H_1 - (J_3 h_1)^\top, \\ \quad = (J_3 \tilde{u}^\oplus \theta^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{u}^\oplus)^\top \theta^{\oplus\top}, \\ \mathcal{Q}_2 = J_3^\top H_2 - (J_3 h_2)^\top, \\ \quad = (J_3 \tilde{v}^\oplus \theta^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{v}^\oplus)^\top \theta^{\oplus\top}, \\ \mathcal{Q}_3 = J_1^\top H_1 + J_2^\top H_2 + H_3 - (J_1 h_1 + J_2 h_2 + h_3)^\top, \\ \quad = (J_3 \tilde{w}^{c^\oplus} \theta^\oplus)^\top - (J_3 \tilde{w}^{c^\oplus})^\top \theta^{\oplus\top}. \end{array} \right. \quad (3.51)$$

On peut calculer d'abord les tenseurs \mathcal{Q}_j avec les termes de corrélation vitesse-température. Ensuite, on utilise la première égalité du système (3.51) pour obtenir le nombre de *Prandtl*. Dans cette démarche, les tenseurs H_j et h_j sont modélés selon (3.45) et on peut exprimer k_h en fonction de k_m et du nombre de *Prandtl*. Pour un scalaire ϕ on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} H_i = -\bar{\rho} \frac{(C_s \alpha \Delta)^2}{Pr} |\underline{S}^\oplus|^\top \left(\frac{\partial \phi^\oplus}{\partial x_i} \right)^\top, \\ h_i = -\bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} |\underline{S}^\oplus| \left(\frac{\partial \phi^\oplus}{\partial x_i} \right). \end{array} \right. \quad (3.52)$$

Dans le cas de la température potentielle, le système d'équations (3.51) donne alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{Q}_1 = -J_3^\top \bar{\rho} \frac{(C_s \alpha \Delta)^2}{Pr} |\underline{S}^\oplus|^\top \left(\frac{\partial \theta^\oplus}{\partial x} \right)^\top + \left(J_3 \bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} |\underline{S}^\oplus| \frac{\partial \theta^\oplus}{\partial x} \right)^\top, \\ \mathcal{Q}_2 = -J_3^\top \bar{\rho} \frac{(C_s \alpha \Delta)^2}{Pr} |\underline{S}^\oplus|^\top \left(\frac{\partial \theta^\oplus}{\partial y} \right)^\top + \left(J_3 \bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} |\underline{S}^\oplus| \frac{\partial \theta^\oplus}{\partial y} \right)^\top, \\ \mathcal{Q}_3 = -\bar{\rho} \frac{(C_s \alpha \Delta)^2}{Pr} |\underline{S}^\oplus|^\top \left[J_1^\top \left(\frac{\partial \theta^\oplus}{\partial x} \right)^\top + J_2^\top \left(\frac{\partial \theta^\oplus}{\partial y} \right)^\top + \left(\frac{\partial \theta^\oplus}{\partial z} \right)^\top \right] \\ + \left[\bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} |\underline{S}^\oplus| \left(J_1 \frac{\partial \theta^\oplus}{\partial x} + J_2 \frac{\partial \theta^\oplus}{\partial y} + \frac{\partial \theta^\oplus}{\partial z} \right) \right]^\top. \end{array} \right.$$

Si on considère que la variation de $\bar{\rho}$ est négligeable parmi les mailles prises en compte dans le filtre test on a :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{Q}_1 = \bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} \left\{ \left[|\underline{S}^\oplus| J_3 \frac{\partial \theta^\oplus}{\partial x} \right]^\top - \alpha^2 |\underline{S}^\oplus|^\top J_3^\top \left(\frac{\partial \theta^\oplus}{\partial x} \right)^\top \right\}, \\ = \bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} \mathcal{N}_1, \\ \mathcal{Q}_2 = \bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} \left\{ \left[|\underline{S}^\oplus| J_3 \frac{\partial \theta^\oplus}{\partial y} \right]^\top - \alpha^2 |\underline{S}^\oplus|^\top J_3^\top \left(\frac{\partial \theta^\oplus}{\partial y} \right)^\top \right\}, \\ = \bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} \mathcal{N}_2, \\ \mathcal{Q}_3 = \bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} \left\{ \left[|\underline{S}^\oplus| \left(J_1 \frac{\partial \theta^\oplus}{\partial x} + J_2 \frac{\partial \theta^\oplus}{\partial y} + \frac{\partial \theta^\oplus}{\partial z} \right) \right]^\top \right. \\ \left. - \alpha^2 |\underline{S}^\oplus|^\top \left[J_1^\top \left(\frac{\partial \theta^\oplus}{\partial x} \right)^\top + J_2^\top \left(\frac{\partial \theta^\oplus}{\partial y} \right)^\top + \left(\frac{\partial \theta^\oplus}{\partial z} \right)^\top \right] \right\}, \\ = \bar{\rho} \frac{(C_s \Delta)^2}{Pr} \mathcal{N}_3. \end{array} \right. \quad (3.53)$$

La technique de moindres carrés appliquée au système (3.53) permet de trouver l'inverse du nombre de *Prandtl* de la même façon que pour (1.85) :

$$\frac{1}{Pr} = \frac{1}{\bar{\rho}(C_s\Delta)^2} \frac{Q_1\mathcal{N}_1 + Q_2\mathcal{N}_2 + Q_3\mathcal{N}_3}{\mathcal{N}_1^2 + \mathcal{N}_2^2 + \mathcal{N}_3^2}. \quad (3.54)$$

3.3.2 Conditions initiales et conditions aux limites

Si on veut valider les résultats des calculs LES avec des données expérimentales obtenues dans les conditions contrôlées de laboratoire, on peut prendre des mesures faites dans les souffleries atmosphériques.

Dans la plupart des travaux expérimentaux, les résultats des différentes grandeurs mesurées sont présentés sous la forme des profils moyens pour différentes sections, c'est à dire, pour des positions le long de la soufflerie.

Pour simuler numériquement ces expériences, il faut donner des conditions initiales et aux limites selon ces profils. Pour une simulation tridimensionnelle, cela implique d'une part, d'imposer au code un champ de vitesse tridimensionnelle comme condition initiale et d'autre part, qu'au bout d'un certain temps de calcul, les résultats de la simulation convergent vers ceux des mesures expérimentales.

Pour obtenir un champ tridimensionnel à partir des profils moyens expérimentaux bidimensionnels, une technique utilisée est d'appliquer le profil moyen du champ de vitesse dans tout le domaine de calcul et d'ajouter une fluctuation tridimensionnelle de moyenne transversale nulle et d'écart-type en accord avec les profils expérimentaux de la fluctuation. Dans la suite, on va décrire cette procédure :

Soit le profil moyen dans le sens de la décomposition de Reynolds du champ de vitesse $\vec{u}_{(z)} = \bar{u}_{(z)}\hat{i} + \bar{v}_{(z)}\hat{j} + \bar{w}_{(z)}\hat{k}$. On se place dans le cas d'une expérience de laboratoire où le système de coordonnées orthogonales est orienté dans la direction du flux principal selon la coordonnée spatiale x . Cela implique que le profil du champ de vitesse aura seulement des valeurs non nulles dans la composante longitudinale. Pour une section x_s particulière, la vitesse moyenne aura un profil :

$$\vec{u}_{(x_s,z)} = \bar{u}_{(x_s,z)}^{y,t}\hat{i}. \quad (3.55)$$

Les profils de la fluctuation du champ de vitesse obtenus à partir des mesures expérimentales dans une section x_s sont exprimés généralement comme

la moyenne des carrés de ses fluctuations adimensionnalisées par la vitesse de frottement au carré :

$$\frac{\overline{u'^2}^{y,t}}{u_*^2}(x_s, z), \quad \frac{\overline{v'^2}^{y,t}}{u_*^2}(x_s, z), \quad \frac{\overline{w'^2}^{y,t}}{u_*^2}(x_s, z). \quad (3.56)$$

Dans tous les cas, la notation $\overline{(\cdot)}^{y,t}$ indique que les grandeurs ont été obtenues en moyennant dans le sens de la largeur de la soufflerie (direction y) et dans le temps.

Ces profils seront utilisés comme conditions aux limites en amont du flux pour le champ de vitesse. Cela implique qu'on doit imposer à l'écoulement des conditions aux limites forcées en permanence. ARPS permet d'initialiser avec un profil moyen de vitesse dans la direction horizontale ($\overline{u}_{(z)}$, $\overline{v}_{(z)}$) mais il ne permet pas de forcer un champ tridimensionnel à l'ordre de fluctuations de vitesse qui respecte les profils des écart-types demandés. Pour cela, on va appliquer une méthode proposée par TAMURA *et al.* (2003). Ils utilisent la première partie du domaine (ou "*domaine de pré-calcul*") pour produire des fluctuations de vitesse qui sont injectées comme conditions aux limites en amont pour la deuxième partie du domaine (ou "*domaine utile de calcul*"). Pour générer la turbulence dans le domaine de pré-calcul, TAMURA *et al.* (2003) utilisent des obstacles placés au niveau du sol. Nous choisissons une méthode de génération aléatoire des fluctuations instantanées de vitesse dont les profils moyens et les profils d'énergie cinétique turbulente sont ceux des mesures expérimentales.

Dans le domaine de pré-calcul, il faut tenir compte de l'épaississement de la couche limite. Cela ne rend pas applicable les conditions aux limites périodiques dans la direction du flux. Pour résoudre ce problème, on a pris la méthode proposée par LUND *et al.* (1998). Ils ont fait une modification de la méthode de SPALART (1988) qui applique une transformation de coordonnées pour tenir compte de l'inhomogénéité due à l'épaississement de la couche limite dans la direction du flux. Cela introduit de nouveaux termes dans les équations de Navier-Stokes. Ces termes, appelées "*termes de croissance*", sont nombreux et de formes compliquées. SPALART (1988) montre que certains de ces termes peuvent être négligeables sous conditions de stationnarité mais il reste encore d'autres termes à résoudre. Cette méthode est élégante et très précise mais difficile à appliquer. LUND *et al.* (1998) propose de laisser inchangée l'équation de la quantité de mouvement mais d'utiliser des conditions aux limites quasi-périodiques pour tenir compte de l'épaississement de la couche limite. Comme à la sortie du domaine de pré-calcul (sous-indice p) on doit respecter le profil de la vitesse moyenne et de l'énergie cinétique turbulente, la procédure est d'estimer

le profil moyen correspondant à l'entrée du domaine de pré-calcul (sous-indice 1). Cela peut être accompli en utilisant la loi d'épaississement pour une couche limite turbulente (SCHLICHTING (1979)) :

$$\frac{\delta}{l} = 0,37 \left(\frac{U_e l}{\nu} \right)^{-1/5}, \quad (3.57)$$

où l est la longueur nécessaire pour générer une couche limite d'épaisseur δ avec une vitesse extérieure U_e et une viscosité cinématique ν .

LUND *et al.* (1998), d'après SPALART & LEONARD (1985) ont décomposé le champ de vitesse en sa moyenne horizontale et sa fluctuation. Leur modification a consisté à appliquer la loi d'épaississement de la couche limite sur la moyenne du champ de vitesse et sur l'énergie cinétique turbulente séparément pour les conditions aux limites.

En utilisant une partie du domaine pour le pré-calcul du champ de vitesse tridimensionnelle (Figure 3.4), on permet que les équations de Navier-Stokes agissent sur le flux qui a été généré initialement de façon artificielle avec des fluctuations aléatoires. On peut ainsi obtenir en aval du domaine de pré-calcul un champ de vitesse qui respecte le profil moyen et les profils des écart-types des fluctuations demandés avec une certaine continuité physique.

En aval du domaine utile de calcul on applique les conditions de convection.

Dans la suite, on va détailler la procédure nécessaire pour appliquer ces conditions à la Simulation des Grandes Échelles.

Conditions initiales

Pour le champ de vitesse moyenne, on va introduire les fonctions qui représentent le profil issu des mesures expérimentales. Dans la plupart des couches limites turbulentes de paroi rugueuse, on peut utiliser la loi logarithmique comme valable à partir d'une certaine hauteur. Au dessous, on utilise un raccordement de type linéaire. Dans les fonctions utilisées pour représenter ce profil, il faut tenir compte de l'épaississement de la couche limite. La démarche proposée est la suivante :

- Pour un domaine de pré-calcul de longueur x_p on détermine la longueur nécessaire pour générer une couche limite d'épaisseur $\delta_{(x_p)}$ avec une vitesse extérieure U_e dans un écoulement de viscosité cinématique ν à partir de l'équation (3.57) :

$$l_0 = \left(\frac{\delta_{(x_p)}}{0,37} \right)^{5/4} \left(\frac{U_e}{\nu} \right)^{1/4} - x_p. \quad (3.58)$$

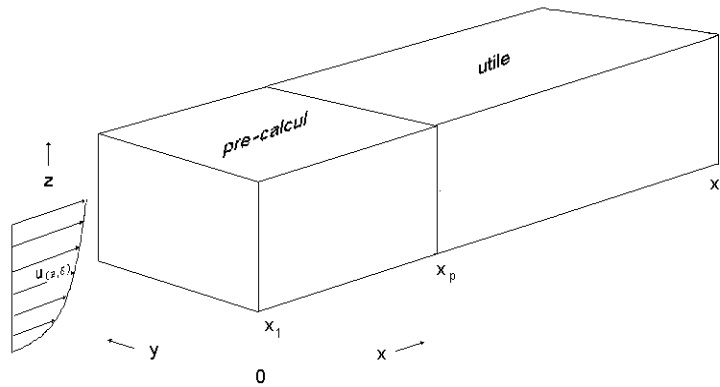


FIG. 3.4 – Division du domaine : *domaine de pre-calcul* et *domaine utile de calcul*.

- On calcule maintenant l'épaisseur de la couche limite et la vitesse de frottement correspondante pour tout le domaine de calcul numérique selon la loi logarithmique :

$$\delta_{(x)} = 0,37(l_0 + x) \left[\frac{U_e(l_0 + x)}{\nu} \right]^{-0,2}, \quad (3.59)$$

$$u_{*(x)} = 0,99U_e \frac{k_v}{\ln\left(\frac{\delta_{(x)}}{z_0}\right)}. \quad (3.60)$$

- Ensuite, on applique les profils de vitesse moyenne pour la composante longitudinale de vitesse.

Généralement, les profils de vitesse montrent, dans la région de proche paroi rugueuse, un comportement logarithmique à partir de $z = 10z_0$ (GARRATT(1992)).

$$\begin{cases} \bar{u}_{(x,z,0)}^y = \frac{u_{*(x)}}{k_v} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) & \text{si } z/z_0 > 10, \\ \bar{u}_{(x,z,0)}^y = \frac{z}{10z_0} \frac{u_{*(x)}}{k_v} \ln(10), & \text{si } z/z_0 \leq 10 \\ \bar{u}_{(x,z,0)}^y = U_e & \text{si } \bar{u}_{(x,z,0)}^y \geq U_e. \end{cases} \quad (3.61)$$

- Pour les conditions initiales des fluctuations de vitesse, on doit construire un champ tridimensionnelle en respectant les profils moyens des écart-types des fluctuations. Les écart-types des vitesses sont obtenus en multipliant les expressions (3.56) par $u_*(x)$ qui est calculé selon (3.60). La racine carrée de ces écart-types sera multiplié par une fonction de type gaussienne qui génère des nombres aléatoires χ . Cette fonction a les propriétés statistiques suivantes :

$$\begin{cases} \bar{\chi} &= 0, \\ \overline{\chi^2} &= 1. \end{cases} \quad (3.62)$$

La première assure que la moyenne des fluctuations est nulle et la deuxième permet de respecter les profils des écart-types des données expérimentales.

La Figure 3.5 montre un schéma qui représente les deux aspects de l'initialisation des conditions pour le champ de vitesse.

La Figure 3.6 montre le champ de vitesse sur un plane (x, z) particulier à l'instant $t = 0$:

- de l'état base (a) .
- des fluctuations aléatoires calculées selon la méthode aléatoire (b) .
- de vitesse totale $(c) = (a) + (b)$.

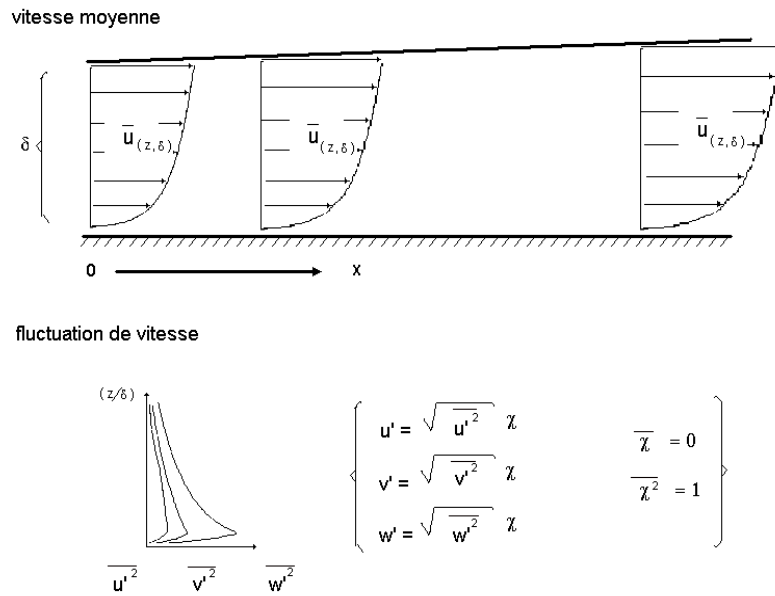


FIG. 3.5 – Conditions initiales de calcul.

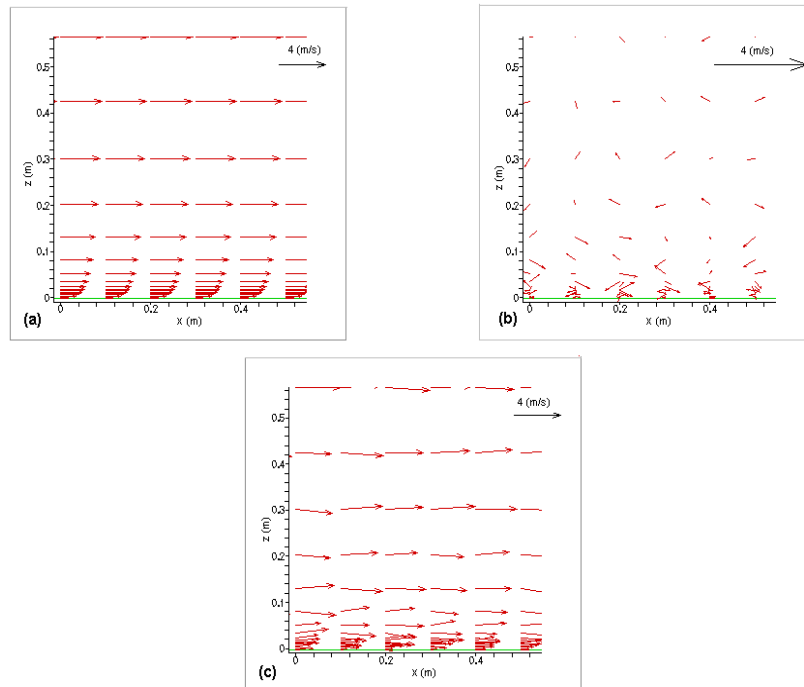


FIG. 3.6 – Champ de vitesse instantanée à $t = t_0$ sur un plan vertical du domaine. (a) État de base. (b) Fluctuations aléatoires. (c) (= (a) + (b)) Champ total.

Conditions aux limites du champ de vitesse

Dans le sens de la direction de l'écoulement, on applique les conditions aux limites différemment dans le domaine de pré-calcul et dans le domaine utile de calcul.

Pour le domaine de pré-calcul, on force l'épaisseur de la couche limite selon l'expression (3.57) et pour obtenir à la sortie du domaine un champ des fluctuations de vitesse tridimensionnelle qui soit en accord avec les profils mesurés expérimentalement, on va aussi forcer ces fluctuations.

On utilise le champ de vitesse à la fin du domaine de pré-calcul comme condition d'entrée pour le domaine utile de calcul.

En aval, on applique les conditions de convection.

Domaine de pré-calcul :

- On va récupérer le champ de vitesse à la fin du domaine de pré-calcul (sous-indice p) et on le décompose en sa moyenne (profil moyenné sur la largeur $\overline{(\cdot)}^y$) et sa fluctuation :

$$\begin{cases} u_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus'} &= u_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus} - \overline{u_{(x_p,z,t)}^{\oplus}}^y, \\ v_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus'} &= v_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus} - \overline{v_{(x_p,z,t)}^{\oplus}}^y, \\ w_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus'} &= w_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus} - \overline{w_{(x_p,z,t)}^{\oplus}}^y. \end{cases} \quad (3.63)$$

- On calcule les profils moyens des carrés des fluctuations sur la largeur du domaine $\overline{(u^{\oplus'})^2}_{(x_p,z,t)}^y$, $\overline{(v^{\oplus'})^2}_{(x_p,z,t)}^y$, $\overline{(w^{\oplus'})^2}_{(x_p,z,t)}^y$ et on les compare avec les écart-types des fluctuations données comme conditions de forçage à cette abscisse $\overline{u'^2}_{(x_p,z)}^{y,t}$, $\overline{v'^2}_{(x_p,z)}^{y,t}$, $\overline{w'^2}_{(x_p,z)}^{y,t}$.
On obtient ainsi le carré d'un facteur de correction des fluctuations $(C_u)_{(x_p,z,t)}^2$, $(C_v)_{(x_p,z,t)}^2$, $(C_w)_{(x_p,z,t)}^2$:

$$\left\{ \begin{array}{l} (C_u)_{(x_p,z,t)}^2 = \frac{\overline{u'^2}^{y,t}(x_p,z)}{(u^{\oplus'})_{(x_p,z,t)}^2}, \\ (C_v)_{(x_p,z,t)}^2 = \frac{\overline{v'^2}^{y,t}(x_p,z)}{(v^{\oplus'})_{(x_p,z,t)}^2}, \\ (C_w)_{(x_p,z,t)}^2 = \frac{\overline{w'^2}^{y,t}(x_p,z)}{(w^{\oplus'})_{(x_p,z,t)}^2}. \end{array} \right. \quad (3.64)$$

- La nouvelle valeur du champ de vitesse à la fin du domaine de pré-calcul (qui est aussi la condition à la limite en amont pour le domaine utile de calcul) sera :

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus} = \overline{u^{\oplus}}^y_{(x_p,z,t)} + u_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus'} C_{u(x_p,z,t)}, \\ v_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus} = \overline{v^{\oplus}}^y_{(x_p,z,t)} + v_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus'} C_{v(x_p,z,t)}, \\ w_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus} = \overline{w^{\oplus}}^y_{(x_p,z,t)} + w_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus'} C_{w(x_p,z,t)}. \end{array} \right. \quad (3.65)$$

- La fluctuation corrigée du champ de vitesse, obtenue à $x = x_p$, est rapportée au début du domaine de pré-calcul en $x = x_1$, en tenant compte de l'épaississement de la couche limite (condition de quasi-périodicité de la fluctuation) pour l'utiliser comme condition à la limite avec la valeur de la moyenne du champ de vitesse de l'état de base (à $t=0$).

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{(x_1,y,z,t)}^{\oplus} = \overline{u^{\oplus}}^y_{(x_1,z,0)} + \frac{\delta_{(x_1)}}{\delta_{(x_p)}} u_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus'} C_{u(x_p,z,t)}, \\ v_{(x_1,y,z,t)}^{\oplus} = \overline{v^{\oplus}}^y_{(x_1,z,0)} + \frac{\delta_{(x_1)}}{\delta_{(x_p)}} v_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus'} C_{v(x_p,z,t)}, \\ w_{(x_1,y,z,t)}^{\oplus} = \overline{w^{\oplus}}^y_{(x_1,z,0)} + \frac{\delta_{(x_1)}}{\delta_{(x_p)}} w_{(x_p,y,z,t)}^{\oplus'} C_{w(x_p,z,t)}. \end{array} \right. \quad (3.66)$$

La finalité de cette technique est d'obtenir en quelques pas de temps un champ de vitesse tridimensionnelle en accord avec les équations de Navier-Stockes et qui respecte les profils moyens des écart-types donnés au début du domaine utile de calcul.

Domaine utile de calcul :

La condition à la limite utilisée à l'entrée du domaine utile de calcul est le champ de vitesse forcé qui sort du domaine de pré-calcul. A la fin du domaine utile de calcul, on va utiliser les conditions aux limites de type convectives (appelées aussi "*radiation condition*" puisqu'elles laissent passer les ondes dues aux effets de compressibilité du fluide). Cette condition est proposée par KLEMP & WILHELMSON (1978) pour permettre une relaxation du champ de vitesse vers l'état de base dehors du domaine utile de calcul et afin d'empêcher le rebondissement des ondes acoustiques. Elle se traduit par :

$$\frac{\partial u_i^\oplus}{\partial t} + (u_i^\oplus + C_g) \frac{\partial u_i^\oplus}{\partial x_i} = 0, \quad (3.67)$$

où C_g est la vitesse de propagation de l'onde de gravité provoquée par les variations de la densité de l'air. C_g peut être estimé par :

$$C_g = z_T \frac{N}{\pi}, \quad (3.68)$$

et z_T est la hauteur totale du domaine et $N = g \frac{\partial \ln \theta}{\partial z}$ est la fréquence de *Brunt-Väisälä*.

La condition aux limites utilisée dans la largeur du domaine est de type périodique.

La condition à la limite inférieur et au sommet du domaine est de type "*glissante*" pour les composantes horizontales de la vitesse. En particulier, pour le sommet du domaine, on a incorporé un amortisseur de type "*Rayleigh*" afin d'empêcher le plus possible le rebond des ondes de pression.

Pour la composante verticale de vitesse, les conditions à la limite inférieur est de type "*non pénétrant*" et au sommet de type "*miroir*" (KLEMP & LILLY (1978)).

3.3.3 Modèle de paroi pour le terme de dissipation dans l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille

Dans l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille (1.101), DEARDORFF (1979) a proposé des modèles de fermeture pour les différents termes qui la composent. Particulièrement, le terme de dissipation est calculé à l'aide d'un modèle de longueur de mélange (1.109). La constante de ce modèle (C_ε) change radicalement sa valeur. Si l'on se place dans les boîtes du maillage adjacentes à la paroi elle est : $C_\varepsilon = 3,9$ et pour tous les autres mailles du domaine : $C_\varepsilon = 0,7$ dans le cas d'une couche limite neutre où on considère que la taille caractéristique de la maille est identique à la taille de longueur de mélange turbulente ($\Delta = l$).

Cette proposition s'explique par le fait que tous les phénomènes de dissipation moléculaire se sont produits dans la sous-couche visqueuse dont la hauteur est inférieure à la hauteur de la première maille au dessus du sol. La dissipation turbulente devient négligeable à bas nombre de Reynolds et la dissipation moléculaire croit dans cette zone.

Il existe quand même une discontinuité importante de la valeur de cette constante qui peut entraîner des oscillations numériques dans le cas de l'utilisation des mailles raffinées pour la zone de proche paroi.

On propose une modification de la relation (1.110) en ajoutant un modèle de paroi qui permet de faire tendre plus doucement la valeur de cette constante depuis la couche limite extérieur vers la zone de proche paroi :

$$C_\varepsilon = \left(0, 19 + 0, 51 \frac{l}{\Delta} \right) \left[4, 57 e^{\left(-\frac{z - \Delta z_{min}}{30 z_0} \right)} + 1, 0 \right], \quad (3.69)$$

où Δz_{min} est la hauteur des mailles adjacentes à la paroi, z_0 est la hauteur de la rugosité du sol et z est la position verticale d'une maille ($z \geq \Delta z_{min}$).

Chapitre 4

VALIDATION DYNAMIQUE DU CODE LES

4.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats de validation du champ dynamique grandes échelles en prenant comme référence deux expériences de laboratoire pour la couche limite. Cela est nécessaire car le code ARPS a été conçu pour résoudre les écoulements qui sont développés dans l'atmosphère de manière dimensionnelle. Par conséquent nous avons dû tester la robustesse du code sur des domaines beaucoup plus petits. En effet, notre modélisation pour l'étude de la dispersion scalaire nécessite des validations et seules les données de laboratoire sont assez complètes pour les fournir.

Pour la première expérience de laboratoire, on se place dans un cas de couche limite neutre développée sur un terrain plat rugueux. L'expérience a été menée par FACKRELL & ROBINS (1982). Des comparaisons entre les mesures effectuées du profil de vitesse et de l'énergie cinétique turbulente avec les résultats du calcul numérique seront présentées.

Un deuxième cas de validation pour une couche limite neutre développée sur un terrain rugueux sera ensuite traité. L'expérience a été menée par GONG & IBBETSON (1989) en présence d'une colline Gaussienne de faible pente.

4.2 Validation dans le cas de l'expérience de Fackrell & Robins (1982)

Des mesures de concentration d'un gaz passif issue d'une source ponctuelle surélevée et placée dans une couche limite neutre ont été faites par FACKRELL & ROBINS (1982). L'expérience a été faite dans le tunnel du Laboratoire *Marchwood Engineering* (US) dont

les dimensions sont $24,0 \text{ m} \times 9,1 \text{ m} \times 2,7 \text{ m}$ en circuit ouvert avec la méthode de génération de la couche limite de COUNIHAN (1969).

4.2.1 Données de l'expérience

Les données caractéristiques de la couche limite et le diamètre de la source sont :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \delta = 1,2 \text{ m} & \text{épaisseur de la couche limite.} \\ U_e = 4 \text{ m/s} & \text{vitesse extérieure à la couche.} \\ u_* = 0,047U_e & \text{vitesse de frottement.} \\ z_0 = 2,4 \cdot 10^{-4} \delta & \text{rugosité.} \\ z_s = 0,19\delta & \text{hauteur d'emplacement de la source.} \\ d_s = 7,08 \cdot 10^{-3} \delta & \text{diamètre de la source.} \end{array} \right. \quad (4.1)$$

Les auteurs ont mesuré des profils verticaux de vitesse moyenne et les écart-types des fluctuations de la vitesse. Ces profils sont reportés sur les Figures 4.1 et 4.2.

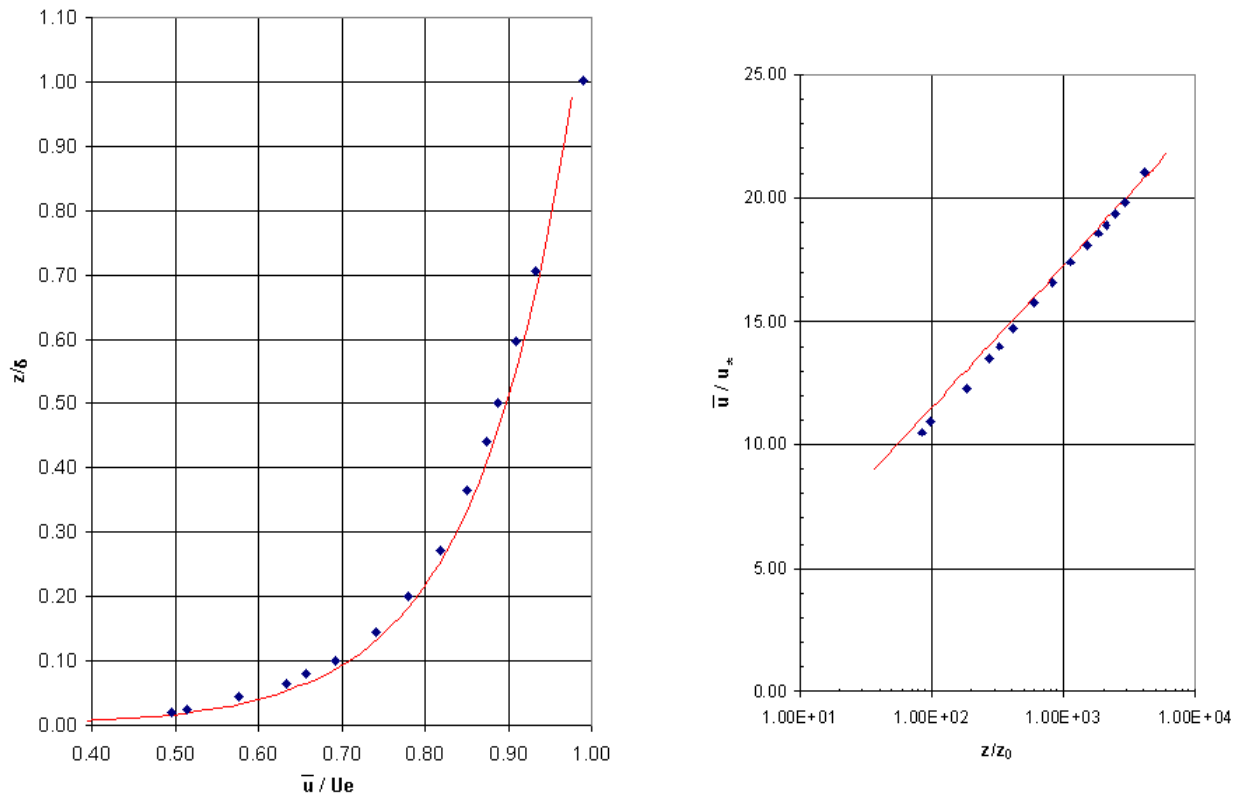


FIG. 4.1 – Profils expérimentaux et loi logarithmique de $\frac{\bar{u}}{U_e}$ (FACKRELL & ROBINS (1982)).
 ◆ : mesurés. — : loi logarithmique.

Les expressions analytiques pour les profils de vitesse moyenne et les écart types des fluctuations sont :

$$\begin{cases} \bar{u} &= \frac{u_*}{k_v} \ln \left(\frac{z}{z_0} \right), \\ \bar{v} &= 0, \\ \bar{w} &= 0, \end{cases} \quad (4.2)$$

$$\frac{\overline{u'^2}}{u_*^2} = \begin{cases} 0,5203 & , \quad \frac{z}{\delta} \geq 1. \\ -1,4631 \ln \left(\frac{z}{\delta} \right) + 0,5203 & , \quad 0,6 \leq \frac{z}{\delta} < 1. \\ -1,7088 \ln \left(\frac{z}{\delta} \right) + 0,4753 & , \quad 0,05 \leq \frac{z}{\delta} < 0,6. \\ -2703,4 \left(\frac{z}{\delta} \right)^2 + 241,61 \frac{z}{\delta} & , \quad \frac{z}{\delta} < 0,05. \end{cases} \quad (4.3)$$

$$\frac{\overline{v'^2}}{u_*^2} = \begin{cases} 0,3917 & , \quad \frac{z}{\delta} \geq 1. \\ -0,9644 \ln \left(\frac{z}{\delta} \right) + 0,3917 & , \quad 0,6 \leq \frac{z}{\delta} < 1. \\ 2,8947 e^{-1,9634 \left(\frac{z}{\delta} \right)} & , \quad 0,05 \leq \frac{z}{\delta} < 0,6. \\ -1332,9 \left(\frac{z}{\delta} \right)^2 + 119,12 \frac{z}{\delta} & , \quad \frac{z}{\delta} < 0,05. \end{cases} \quad (4.4)$$

$$\frac{\overline{w'^2}}{u_*^2} = \begin{cases} 0,2464 & , \quad \frac{z}{\delta} \geq 1. \\ -0,7591 \ln \left(\frac{z}{\delta} \right) + 0,2464 & , \quad 0,6 \leq \frac{z}{\delta} < 1. \\ 5,0514 \left(\frac{z}{\delta} \right)^3 - 6,8353 \left(\frac{z}{\delta} \right)^2 + 1,0199 \frac{z}{\delta} + 1,4058 & , \quad 0,05 \leq \frac{z}{\delta} < 0,6. \\ -723,02 \left(\frac{z}{\delta} \right)^2 + 64,617 \frac{z}{\delta} & , \quad \frac{z}{\delta} < 0,05. \end{cases} \quad (4.5)$$

Ces profils seront utilisés comme conditions aux limites en amont en suivant la technique présentée dans le Chapitre 3 (§ 3.3.2).

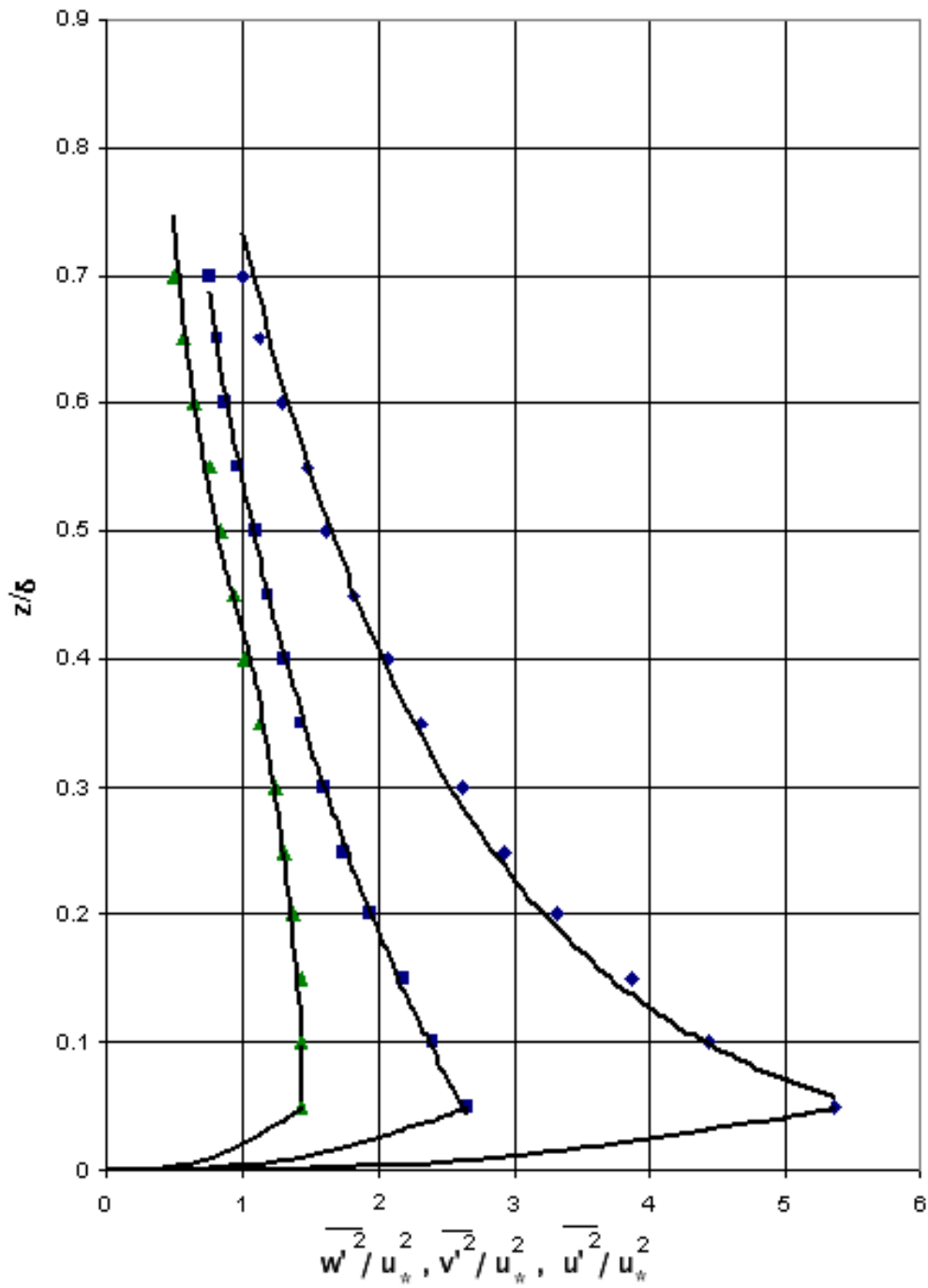


FIG. 4.2 – Profils expérimentaux et analytiques des fluctuations de la vitesse (FACKRELL & ROBINS (1982)). \blacklozenge : $\frac{\overline{u'^2}}{u_*^2}$, \blacksquare : $\frac{\overline{v'^2}}{u_*^2}$, \blacktriangle : $\frac{\overline{w'^2}}{u_*^2}$ mesurés. — : analytiques.

4.2.2 Les grandeurs caractéristiques de la turbulence

Dans ce paragraphe on va considérer certaines caractéristiques du régime turbulent pour obtenir les ordres de grandeurs des paramètres de discrétisation numérique nécessaires dans une LES.

Dans une couche limite atmosphérique, l'échelle de *Kolmogorov* η_K est de l'ordre de 1 mm ce qui rend impossible de résoudre à l'heure actuelle les équations de Navier-Stokes pour toutes les échelles plus grandes que η_K à grand nombre de Reynolds. La question est de savoir quelle est la dimension qu'on va adopter pour la taille des mailles dans une LES ou à l'inverse, pour une taille de maille de calcul donnée, jusqu'à quelle échelle on peut résoudre numériquement.

Soit Re_t le nombre de Reynolds caractéristique de la turbulence :

$$Re_t = \frac{L_l \sqrt{E}}{\nu}, \quad (4.6)$$

où L_l est la dimension moyenne des plus gros tourbillons énergétiques :

$$L_l = E^{3/2} \varepsilon, \quad (4.7)$$

E est l'énergie cinétique turbulente et ε son taux de dissipation :

$$E = \frac{1}{2} \overline{(u'_i u'_i)}. \quad (4.8)$$

Soit u'_t une échelle caractéristique de la vitesse turbulente donnée par :

$$u'_t = \sqrt{\frac{2}{3} E}. \quad (4.9)$$

Soit λ l'échelle de *Taylor*, définie comme la taille des structures jusqu'à laquelle l'énergie est transmise sans dissipation appréciable :

$$\varepsilon = 15\nu \frac{u'^2_t}{\lambda^2}. \quad (4.10)$$

On peut alors estimer le taux de dissipation de l'énergie (SCHIESTEL (1993)) de la façon suivante :

$$\varepsilon \approx \frac{u_t^3}{L_l}. \quad (4.11)$$

L'ordre de grandeur de l'échelle de Taylor en fonction du nombre de Reynolds de la turbulence peut être exprimé en considérant (4.10), (4.11) et (4.6) :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\lambda}{L_l}\right)^2 &\approx \frac{15\nu}{u_t' L_l}, \\ \left(\frac{\lambda}{L_l}\right)^2 &\approx \frac{15}{Re_t}, \\ \lambda &\approx \frac{\sqrt{15}L_l}{Re_t^{1/2}}, \\ \lambda &\approx \frac{4L_l}{Re_t^{1/2}}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

L'échelle de *Taylor* est une bonne grandeur caractéristique comme taille des mailles du maillage puisqu'elle prend en compte entièrement la zone inertielle du spectre d'énergie. Des modèles stochastiques lagrangiens seront chargés de simuler les échelles plus petites.

On prend $L_l = \delta$ comme la taille de la plus grosse structure porteuse de l'énergie et $u_t' = \sqrt{(2/3)E_{max}}$ la valeur de l'échelle caractéristique de la vitesse turbulente dans la couche limite. Les valeurs des fluctuations maximales de la vitesse pour le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) sont :

$$\frac{u_{max}'^2}{u_*^2} = 5, 5; \quad \frac{v_{max}'^2}{u_*^2} = 2, 8; \quad \frac{w_{max}'^2}{u_*^2} = 1, 4;$$

avec une vitesse de frottement $u_* = 0,188 \text{ m/s}$, l'échelle caractéristique de la vitesse turbulente est :

$$u_y' = \sqrt{\frac{1}{3}(u_{max}'^2 + v_{max}'^2 + w_{max}'^2)} (= 0,3381 \text{ m/s}),$$

le nombre de *Reynolds* caractéristique de la turbulence est :

$$Re_t \approx \frac{u'_t \delta}{\nu} (\approx 27044),$$

et finalement, la taille de l'échelle de *Taylor* est :

$$\lambda \approx \frac{4\delta}{Re_t^{1/2}} (= 0,029 \text{ m}).$$

Cela donne un ordre de grandeur pour le choix de la taille des mailles.

Le temps caractéristique de la turbulence peut être obtenu comme le quotient entre l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation visqueuse :

$$\begin{aligned} T_t &= \frac{E}{\varepsilon}, \\ &\approx \frac{3}{2} \frac{u_t'^2}{u_t'^3/\delta}, \\ &\approx \frac{3}{2} \frac{\delta}{u_t'} (\approx 5 \text{ s}). \end{aligned} \tag{4.13}$$

Dans la suite, on va présenter la procédure pour obtenir les différents paramètres nécessaires au calcul. Ces paramètres sont réglés à partir des données expérimentales pour le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

4.2.3 Paramètres pour la simulation des Grandes Échelles dans le cas de l'expérience de Fackrell & Robins (1982)

1. Le maillage de calcul numérique

Pour choisir la dimension du domaine de calcul numérique, on a pris en compte la distance nécessaire pour pouvoir comparer les concentrations moyennes de propane mesurées par FACKRELL & ROBINS (1982).

Ils ont fait des mesures de concentration moyenne à différentes abscisses avec un système de détection de flame-ionization :

$$x - x_s = \begin{cases} 0,96\delta, \\ 1,92\delta, \\ 2,88\delta, \\ 3,83\delta, \\ 4,79\delta, \end{cases} \quad (4.14)$$

où x_s est l'abscisse de l'emplacement de la source.

Pour le choix de la taille horizontale des mailles, on va utiliser les relations issues des travaux de MASON & CALLEN (1986). Ils ont étudié le comportement des différentes résolutions spatiales du maillage dans des simulations numériques de *Poiseuille* avec différentes valeurs du coefficient de *Smagorinsky* utilisé pour la fermeture du tenseur de Reynolds.

On va prendre deux configurations du maillage. La différence est donnée par la taille verticale des mailles :

$$\begin{aligned} \text{axiale :} \quad & \frac{\Delta x}{\delta} = 0,15, \\ \text{transversale :} \quad & \frac{\Delta y}{\delta} = 0,094, \\ \text{verticale :} \quad & \begin{cases} \max \frac{\Delta z}{\delta} = 0,066 & \text{maillage fin,} \\ \max \frac{\Delta z}{\delta} = 0,142 & \text{maillage grossier.} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Pour le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982), ces relations donnent :

$$\begin{aligned} \text{axiale :} \quad & \Delta x = 0,18 \text{ m,} \\ \text{transversale :} \quad & \Delta y = 0,113 \text{ m,} \\ \text{verticale :} \quad & \begin{cases} \Delta z_{max} = 0,079 \text{ m : maillage fin,} \\ \Delta z_{max} = 0,170 \text{ m : maillage grossier.} \end{cases} \end{aligned}$$

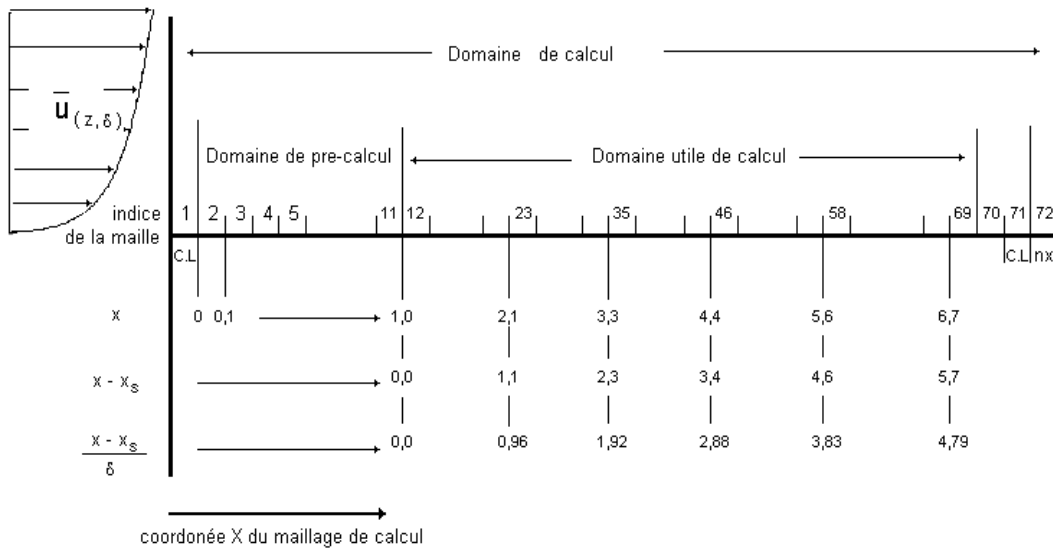


FIG. 4.3 – Disposition des boîtes du maillage de calcul pour la coordonnée axiale.

On va choisir finalement la taille de maille dans la direction longitudinale égale à celle-là dans la direction transversale du flux $\Delta x = \Delta y = 0,1$ m (Figure 4.3).

Le domaine de pré-calcul est composé de 10 boîtes effectives de calcul et de 1 boîte en plus pour la condition à la limite (C.L.) en amont du domaine de pré-calcul. La boîte marquée nx est prise pour la condition à la limite de la vitesse longitudinale à la sortie du domaine utile de calcul. On peut voir aussi sur la Figure 4.3 les indices de la maille où on doit faire le calcul de concentration de particules fluides afin de comparer avec les mesures expérimentales.

La valeur maximale pour la taille verticale du maillage Δz_{max} et sa valeur minimale dans la zone de proche paroi Δz_{min} déterminent la variation verticale selon la fonction de contraction du maillage choisi. La taille verticale minimale de la boîte sera prise de façon à ce que $\Delta z_{min} = 10z_0$ (GARRATT (1992)) où z_0 est la valeur caractéristique de la rugosité du sol. Cela est justifié par le fait que la première maille au dessus du sol sera placée suffisamment loin de la paroi pour appliquer les *conditions aux limites approximatives* où la loi logarithmique peut être considérée valable dès la première maille de calcul au dessus du sol selon les équations (1.117) à (1.121).

Il manque encore à définir les trois sous-domaines verticaux du maillage D_1 , D_2 et D_3 (§ 3.2.5). Cependant, dans le fichier des paramètres du code ARPS il faut indiquer les informations suivantes :

- Δz_m : taille verticale moyenne du domaine.

- Δz_{min} : taille verticale minimale.
- D_1 : taille de sous-domaine proche à la paroi où les tailles verticales des mailles sont toutes égales à (Δz_{min}).
- D_2 : taille de sous-domaine de variation verticale des tailles des mailles de calcul où est appliqué la fonction de contraction verticale du maillage.
- fonction de contraction verticale.
- Le niveaux de référence : z_{ref}
- nx, ny, nz : les nombres des boîtes de calcul dans les trois directions du domaine (sont inclus les boîtes utilisées pour les conditions aux limites).

La taille moyenne du domaine sera conditionnée par D_1, D_2 et D_3 et le nombre de mailles nz qui est aussi inconnue.

La taille D_1 est arbitraire et utilisée pour calculer les équations avec la plus petite taille de maille verticale. On propose $D_1 = 5\Delta z_{min}$.

$$D_1 = \Delta 5z_{min}(= 0,015 \text{ m}), \text{ ce qui donne } n_1 = 5.$$

Pour le paramètre D_2 on prend la hauteur de la couche limite δ .

$$D_2 = \delta(= 1,2 \text{ m}).$$

Pour D_3 XUE *et al.* (1995) recommande de prendre :

$$D_3 \geq \frac{1}{3}\delta(= 0,4 \text{ m}).$$

Pour le maillage fin, la taille verticale maximale est $\Delta z_{max} = 0,079 \text{ m}$, et pour le maillage grossier $\Delta z_{max} = 0,17 \text{ m}$, ce qui donne la quantité des boîtes dans cette zone :

$$n_3 = \frac{D_3}{\Delta z_{max}},$$

$$n_3 \approx 5, \text{ (maillage fine)}$$

$$n_3 = \frac{D_3}{\Delta z_{max}},$$

$n_3 \approx 2$, (maillage grossier).

On propose d'augmenter à 5 la quantité de mailles dans ce sous-domaine car avec seulement deux mailles la fonction d'amortissement d'ondes de pression de type "*Rayleigh*" n'a pas suffisamment des mailles pour agir.

Il reste à connaître n_2 . On prend la relation (3.19) pour obtenir la taille verticale moyenne correspondant au sous-domaine D_2 :

$$\Delta z_2 = 0,041 \text{ m (maillage fin),}$$

$$\Delta z_2 = 0,0865 \text{ m (maillage grossier),}$$

$$n_2 = \frac{D_2}{\Delta z_2} = 29 \text{ mailles (maillage fin),}$$

$$n_2 = \frac{D_2}{\Delta z_2} = 14 \text{ mailles (maillage grossier).}$$

La quantité des mailles n_z dans la direction verticale du domaine n_z est déterminée à l'aide de (3.18) :

$$n_z = n_1 + n_2 + n_3 + 3 = 42 \text{ mailles (maillage fin),}$$

$$n_z = n_1 + n_2 + n_3 + 3 = 27 \text{ mailles (maillage grossier).}$$

La quantité des mailles dans la direction verticale de la dernière configuration du maillage (maillage grossier) n'est pas suffisant pour faire tourner le code. Les discontinuités du champ de vitesse initial étant donné la méthode d'aléatorisation des fluctuations sont amorties à partir d'une quantité minimale des mailles. On va ajouter 5 mailles de plus dans la partie supérieur du maillage de calcul.

Pour le maillage grossier, on propose finalement :

$$n_3 = 10 \text{ mailles et}$$

$$n_z = 32 \text{ mailles.}$$

La taille verticale moyenne du maillage se trouve en utilisant la relation (3.18) :

$$\Delta z_m = \frac{D_1 + D_2 + D_3}{nz - 3} = 0,0414 \text{ m (maillage fin),}$$

$$\Delta z_m = \frac{D_1 + D_2 + D_3}{nz - 3} = 0,1 \text{ m (maillage grossier).}$$

Dans le cas du maillage fin, la taille verticale moyenne dans la région intérieure à la couche limite (Δz_2) est de l'ordre de la taille de l'échelle de *Taylor* tandis que pour le maillage grossier, on a 3 fois cette taille caractéristique.

La Figure 4.4 montre la variation de la taille verticale des mailles en fonction de l'indice vertical des boîtes k et la Figure 4.5 en fonction de l'élévation sur le terrain pour les deux choix de configuration du maillage. La Figure 4.6 montre la variation de l'indice vertical k des boîtes en fonction de l'élévation sur le terrain. La Figure 4.7 montre l'effet de la contraction verticale des mailles qui est régie par la fonction tangente hyperbolique pour le maillage grossier et la Figure 4.8 pour le maillage fin.

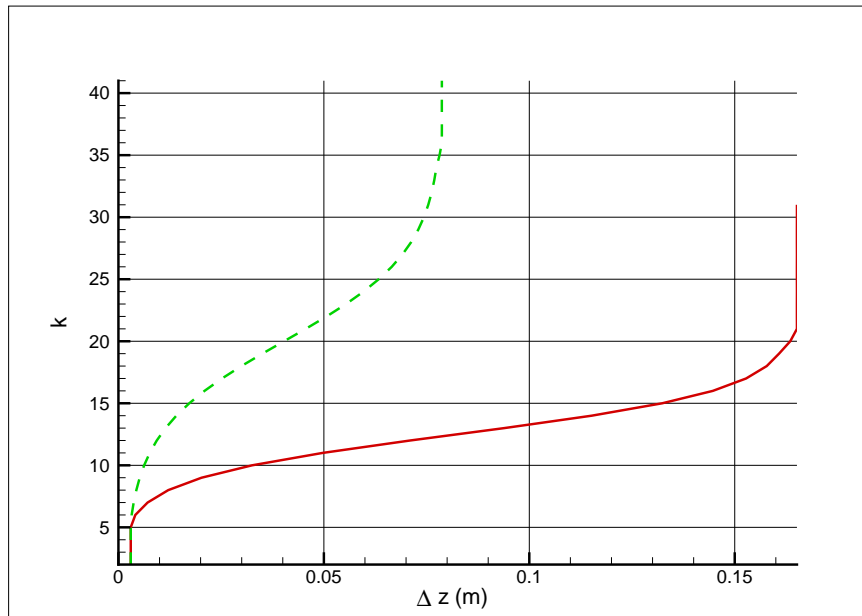


FIG. 4.4 – Variation de la taille verticale des boîtes du maillage (Δz) en fonction de l'indice vertical (k).

— : maillage grossier ; --- : maillage fin.

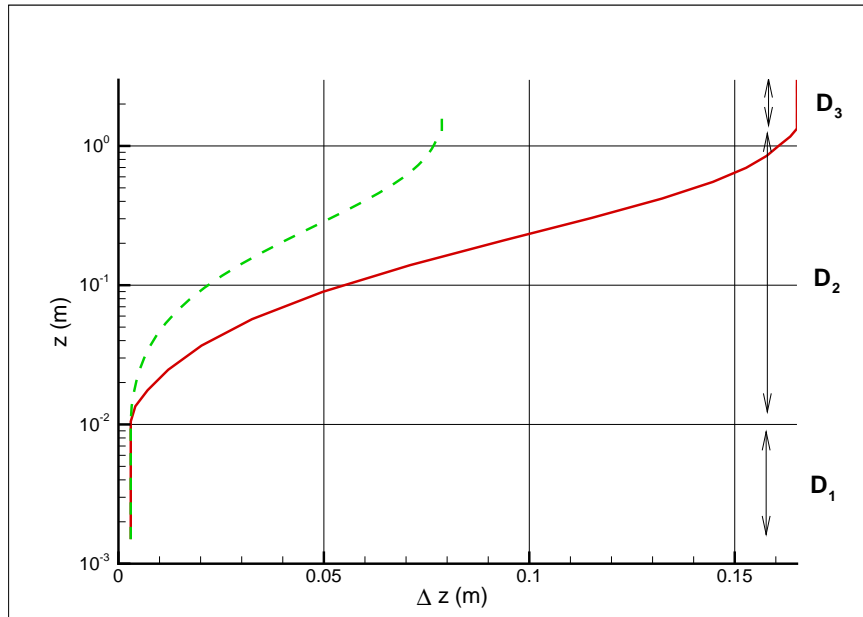


FIG. 4.5 – Variation de la taille verticale des boîtes du maillage (Δ_z) en fonction de l'élévation sur le terrain (z).

— : maillage grossier ; -- : maillage fin.

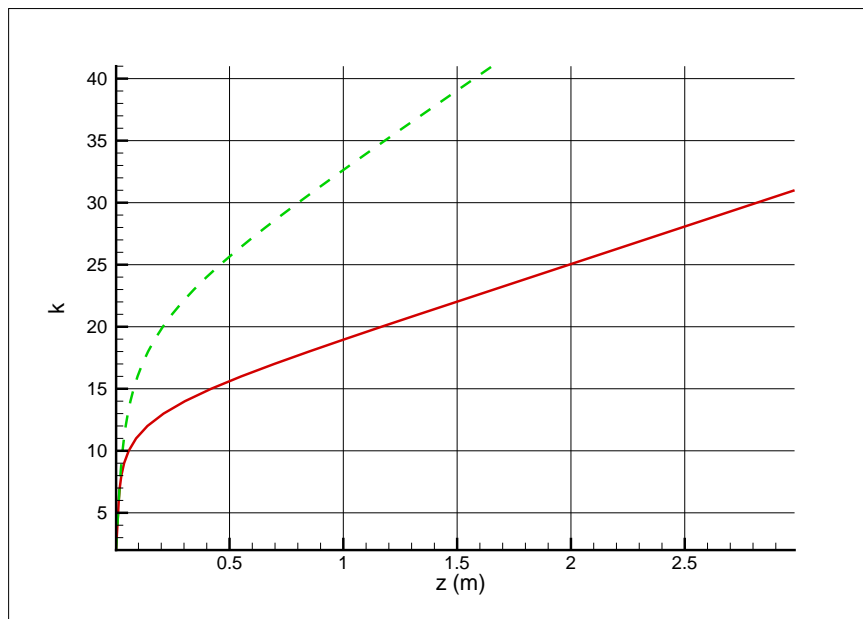


FIG. 4.6 – Variation de l'indice vertical de boîtes du maillage (k) en fonction de l'élévation sur le terrain z .

— : maillage grossier ; -- : maillage fin.

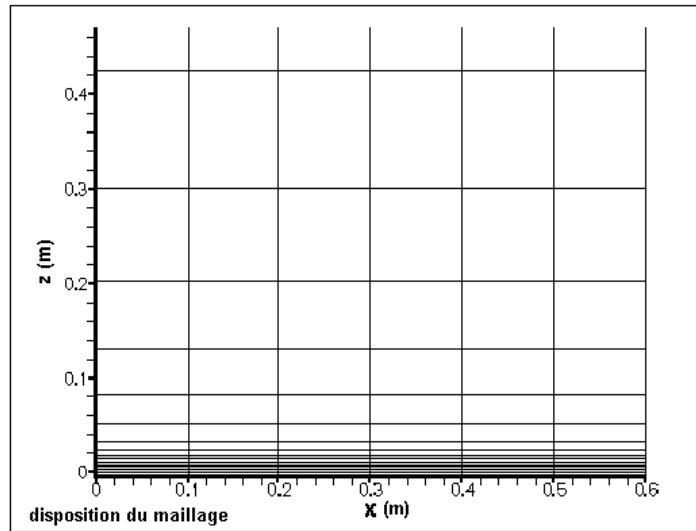


FIG. 4.7 – Contraction verticale des mailles du maillage de calcul pour le choix du maillage grossier.

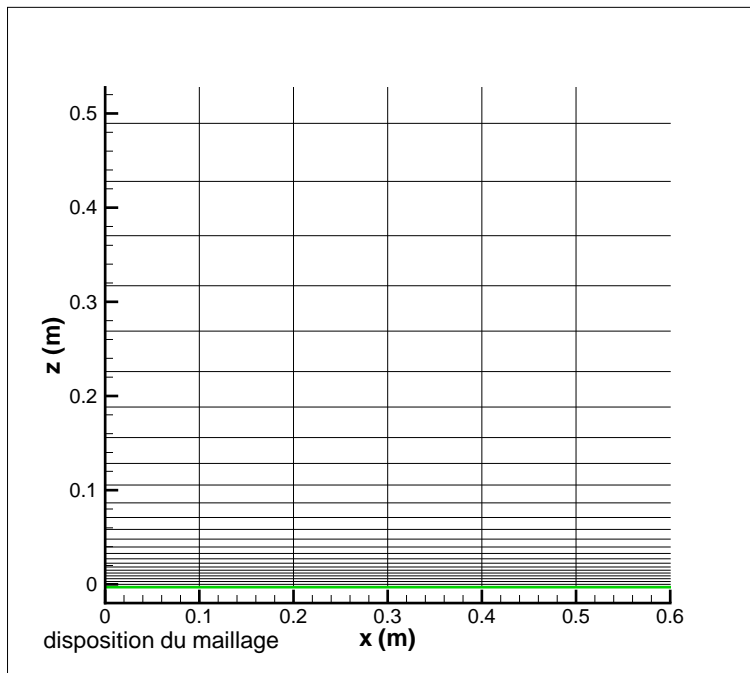


FIG. 4.8 – Contraction verticale des mailles du maillage de calcul pour le choix du maillage raffiné.

2. Conditions initiales du champ de vitesse

On applique les conditions initiales pour tout le domaine de calcul en respectant la loi d'épaississement de la couche limite (3.57). Dans toutes les mailles du domaine de calcul on impose la loi logarithmique (3.61).

Les fluctuations de vitesse tri-dimensionnelles sont générées de façon aléatoire selon les profils des écart-types des trois composantes de la vitesse (Figure 4.2) en suivant la technique exposée dans le chapitre précédent (§ 3.3.2).

3. Conditions aux limites du champ de vitesse

On utilise la technique de division du domaine. On a un domaine de pré-calcul où l'on force la vitesse moyenne et l'énergie cinétique turbulente en amont afin d'obtenir un champ tridimensionnel qui sera utilisé tout de suite comme condition à la limite en amont du deuxième domaine. Cette technique permet d'amortir les discontinuités présentes au démarrage du calcul et qui proviennent du caractère aléatoire des fluctuations de la vitesse. Elle assure aussi que les profils de la vitesse moyenne et de l'énergie cinétique turbulente soient en accord avec les mesures expérimentales par ajustement des coefficients des fluctuations de la vitesse (3.64). En aval du domaine utile de calcul, on impose partout les conditions de convection (3.67).

4. Election du pas de temps

Le schéma de résolution temporel implanté dans le code est de type "leapfrog" (saute à un pas) Il existe deux pas de temps différents : Un grand pas de temps Δt_G qui est utilisé pour les termes non-acoustiques et un petit pas de temps Δt_p pour les modes d'ondes acoustiques.

Si l'on ne tient pas compte de la résolution des ondes acoustiques, la condition de la valeur prise pour le pas de temps peut être calculée par :

$$\Delta t_G \leq \min \left\{ \frac{2}{N}, \frac{1}{|V_{max}|} \left[\left(\frac{1}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta z_m} \right)^2 \right]^{-1/2} \right\}, \quad (4.16)$$

où N est la fréquence de Brunt-Väisälä.

Si, par contre, on a besoin de résoudre les termes caractéristiques des ondes de gravité, Δt_G devient indépendant de la fréquence de Brunt-Väisälä. En prenant la contrainte antérieur dans les petites pas de temps :

$$\Delta t_p \leq \min \left\{ \frac{2}{N}, \frac{1}{V_s} \left[\left(\frac{1}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta z_{min}} \right)^2 \right]^{-1/2} \right\}, \quad (4.17)$$

où $V_s = \sqrt{\frac{C_p}{C_v} T R_d} \simeq 300$ m/s est la vitesse d'onde du son.

Si l'on choisit de résoudre le champ de pression et de la vitesse verticale de façon implicite (schéma de *Crank-Nikolson*), les conditions deviennent indépendantes de la taille verticale du maillage Δz_{min} .

Dans notre cas de la couche limite, on va choisir de calculer l'écoulement avec les deux pas d'intégration temporel. Le schéma de calcul pour la pression et la vitesse verticale sera de type implicite. La valeur pour le grand pas de temps est :

$$\Delta t_G = 3,85 \cdot 10^{-4} \text{ s} ,$$

qui a été calculé avec une vitesse maximale de $|V_{max}| = 150$ m/s.

Pour le petit pas de temps on a :

$$\Delta t_p = 2,35 \cdot 10^{-4} \text{ s} .$$

Cependant, on a dû diminuer les valeurs des pas de temps calculés avec ces relations puisque le champ de la pression devient instable probablement à cause du forçage par les fluctuations aléatoires à l'instant initial de calcul. On verra plus tard que le choix final du pas de temps dépend de la capacité d'adapter le coefficient de diffusion turbulente à l'état de l'écoulement de façon local et instantané pour que la solution finale soit convergente.

5. Critères de stabilité du calcul et des statistiques

Pour pouvoir comparer les résultats de LES avec les profils expérimentaux, il faut donner un critère de stabilisé de calcul. Cela indique le temps nécessaire à partir duquel on considère que tous les phénomènes transitoires et artificiels étant donné la méthode d'initialisation (comme le caractère aléatoire du champ de vitesse initial par exemple) n'ont plus d'incidence dans la résolution numérique et dans les calculs statistiques des grandeurs. Ce temps caractéristique va s'appeler *temps de stabilité* (t_e).

Pour fixer le *temps de stabilité*, on va calculer des profils moyens de la vitesse longitudinale et de l'énergie cinétique turbulente pour un intervalle de temps $2T_t$ (où $T_t \approx 5$ s selon (4.13)) avec des valeurs instantanées obtenues par le calcul à intervalles de temps :

$$Te = \frac{1}{5}T_t = 1 \text{ s.}$$

Les moyens des profils seront calculées avec 6 échantillons à chaque fois en faisant glisser le temps de Te pour regarder si ces profils sont stabilisés. On va donc faire des profils moyens glissants. [1 s – 6 s], [2 s – 7 s], [3 s – 8 s], ... et ainsi successivement.

On a besoin aussi de fixer le temps de calcul numérique nécessaire pour que ces statistiques soient valables. Cela va être dépendant du régime turbulent selon une relation du temps intégral de la turbulence T_t .

On calcule les statistiques des profils instantanés en prenant les résultats depuis le temps de stabilisation et jusqu'à au moins $t = 10T_t$.

6. Coefficient de frottement

Ce paramètre permet de lier la valeur de la vitesse calculée pour la première maille et les composantes du tenseur de contraintes à la paroi selon les relations algébriques (1.127) et (1.128). Ce coefficient peut être estimé en fonction du paramètre de rugosité superficiel z_0 , la taille verticale de la première maille à la paroi $\Delta_A = \Delta z_{min}$ et la constante de *Von Kàrmàn* ($k_v = 0,4$) d'après (1.134) :

$$C_{dm} = \frac{k_v^2}{\ln^2\left(\frac{\Delta_A}{z_0}\right)} (= 0,03). \quad (4.18)$$

7. Conditions initiales des grandeurs scalaires

Pour initialiser les grandeurs scalaires de l'état de base, on a pris en compte une atmosphère isentropique avec une température potentielle $\theta_0 = 294^\circ K$ et la pression au niveau du sol $P_0 = 1000$ hPa.

8. Modèles de sous-maille

On a utilisé trois types de modèles pour comparer leur précision par rapport au coût en temps de calcul et mémoire exigée.

- Le plus simple est le modèle *Smagorinsky Standard* avec une valeur de la constante $C_s = 0.2$ (MASON & CALLEN (1986)) fixée pendant tout le temps de calcul et dans tout le domaine.
- Un deuxième modèle résout l'équation de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille avec les fermetures proposées par DEARDORFF (1979) pour les termes inconnus (*1.5 TKE*). Ce modèle permet d'ajuster le coefficient de diffusion turbulente

k_m en fonction de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille.

- Une variante du modèle de *Smagorinsky Standard* est le modèle de *Smagorinsky dynamique* où la constante de *Smagorinsky* est déterminée à chaque pas de temps et localement en fonction de l'état de l'écoulement. Pour cela il suffit d'utiliser un filtre test de taille supérieure à une maille. Selon LUND *et al.* (1993) le rapport entre la taille du filtre test et la taille d'une maille peut être pris égal à 2 ou 3. Pour ce cas on a pris $\alpha = 3$.

L'adaptation du coefficient de diffusion turbulente dynamiquement nécessite un calcul plus cher par rapport aux autres modèles sous-maille mais par contre, cela a l'avantage d'utiliser un pas de temps plus grand sans compromettre la convergence de la solution numérique. Avec le modèle de *Smagorinsky dynamique*, on a constaté que l'on peut doubler la valeur du pas de temps par rapport aux autres modèles de sous-maille.

La table suivante résume les différentes ressources en taille mémoire et en temps CPU pour les trois modèles sous-maille utilisés dans le serveur de calcul *Mercur*e de l'Ecole Centrale de Lyon (Alpha Server 1280 MARVEL 1,15 GHz) pour le choix des maillages grossier et fin :

Maillage grossier

Modèle SGS	temps physique pour 36000 secondes CPU	Mem max	Δt_G	Δt_p
Smagorinsky Standard	3,74 s	33 MB	$1, 0.10^{-4}$ s	$1, 0.10^{-5}$ s
1.5 TKE	4,18 s	48 MB	$1, 0.10^{-4}$ s	$1, 0.10^{-5}$ s
Smagorinsky Dynamique	3,05 s	63 MB	$2, 0.10^{-4}$ s	$2, 0.10^{-5}$ s

Maillage fin

Modèle SGS	temps physique pour 36000 secondes CPU	Mem max	Δt_G	Δt_p
Smagorinsky Standard	4,38 s	62 MB	$1, 0.10^{-4}$ s	$1, 0.10^{-5}$ s
1.5 TKE	4,77 s	63 MB	$1, 0.10^{-4}$ s	$1, 0.10^{-5}$ s
Smagorinsky Dynamique	3,25 s	96 MB	$2, 0.10^{-4}$ s	$2, 0.10^{-5}$ s

4.2.4 Résultats

On va présenter les résultats de la validation dynamique dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

On montre tout d'abord la convergence du calcul numérique avec les profils de la vitesse moyenne grandes échelles, ainsi que de l'énergie cinétique turbulente pour obtenir le *temps de stabilité* t_e en utilisant les trois types de modèles de fermeture proposés : *Smagorinsky Standard*; *1,5 TKE* et *Smagorinsky dynamique* pour l'abscisse $x = \frac{x-x_s}{\delta} = 2,88$ (la moitié du domaine utile de calcul).

Ensuite, on présente les profils de la vitesse moyenne et de l'énergie cinétique turbulente pour les stations de mesure indiquées (4.14).

Stabilisation du calcul numérique

La Figure 4.9 montre les profils de moyennes glissantes de la vitesse axiale grandes échelles $\overline{u^\oplus}_{(z)}$ adimensionnalisés par la vitesse de frottement u_* , obtenus en utilisant le modèle de fermeture de *Smagorinsky Standard* (gauche); *1,5 TKE* (centre) et *Smagorinsky dynamique* (droite) pour le choix du maillage fin. La Figure 4.10 présente les profils des moyennes glissantes de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse grandes échelles dans la direction axiale $(\overline{u^\oplus'})^2$ (supérieur) et verticale $(\overline{w^\oplus'})^2$ (inférieur) obtenus avec les trois modèles pour le même type de maillage.

On a mis en évidence les quatre premières moyennes glissantes afin d'observer la tendance de la convergence. Dans les Figures 4.11 et 4.12 on montre les mêmes profils pour le choix du maillage grossier.

Dans tous les cas, on a pris comme *temps de stabilité* $t_e = 9 s$.

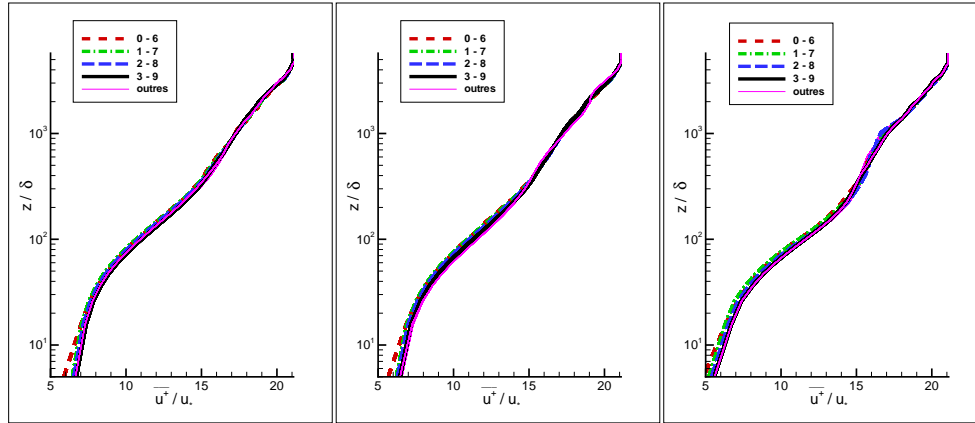


FIG. 4.9 – Profil des moyennes glissantes de la vitesse axiale grandes échelles $\overline{(u^\oplus)}$ adimensionnalisés par la vitesse de frottement (u_*) en utilisant un maillage fin.

Gauche : Smagorinsky Standard ; centre : 1,5 TKE ; droite : Smagorinsky dynamique.

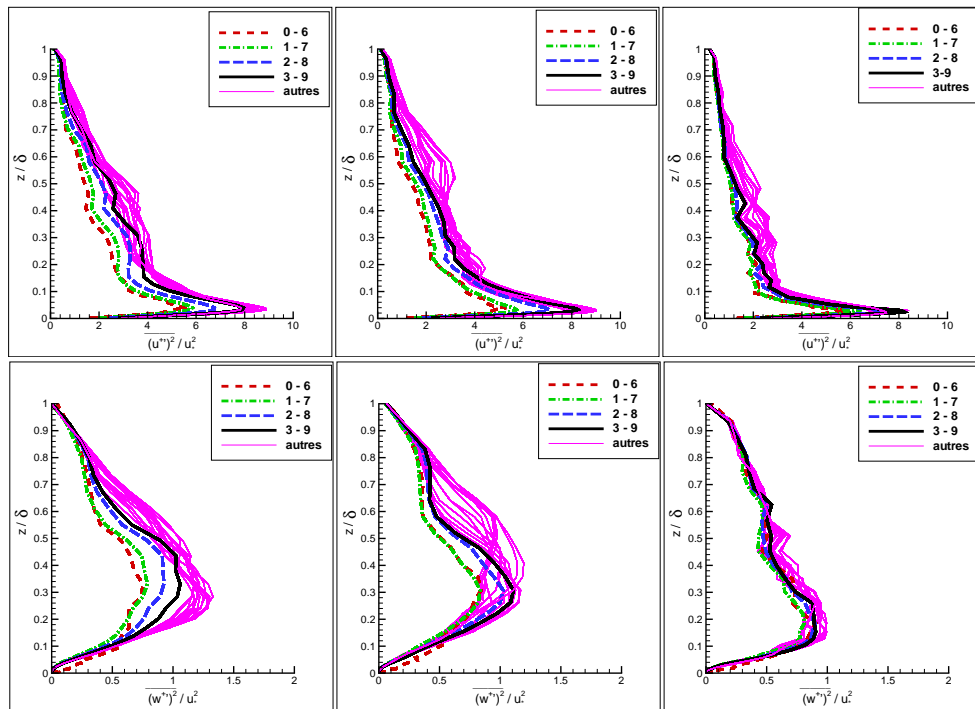


FIG. 4.10 – Profils des moyennes glissantes de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse grandes échelles en utilisant un maillage fin.

Supérieur : vitesse axiale $\overline{(u^\oplus)^2} / u_*^2$. Inférieur : vitesse verticale $\overline{(w^\oplus)^2} / u_*^2$.

Gauche : Smagorinsky Standard ; centre : 1,5 TKE ; droite : Smagorinsky dynamique.

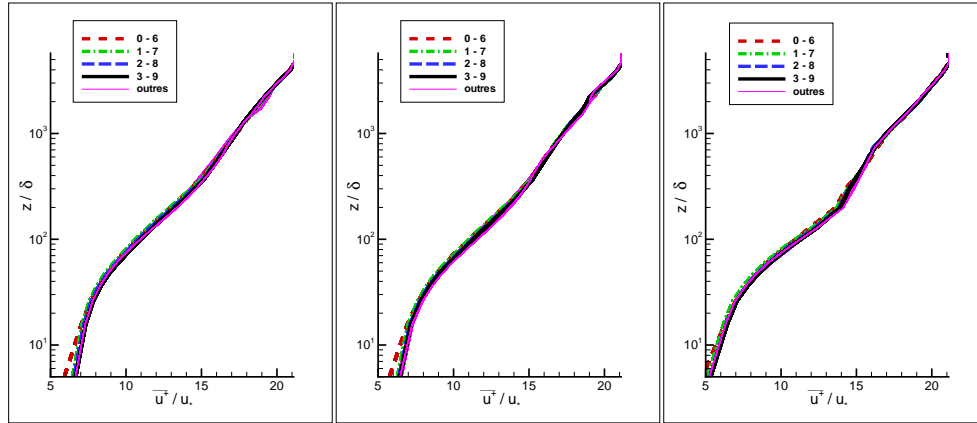


FIG. 4.11 – Profil des moyennes glissantes des grandes échelles de la vitesse axiale $\overline{u^\oplus}$ adimensionalisés par la vitesse de frottement (u_*) en utilisant un maillage grossier.

Gauche : Smagorinsky Standard ; centre : 1,5 TKE ; droite : Smagorinsky dynamique.

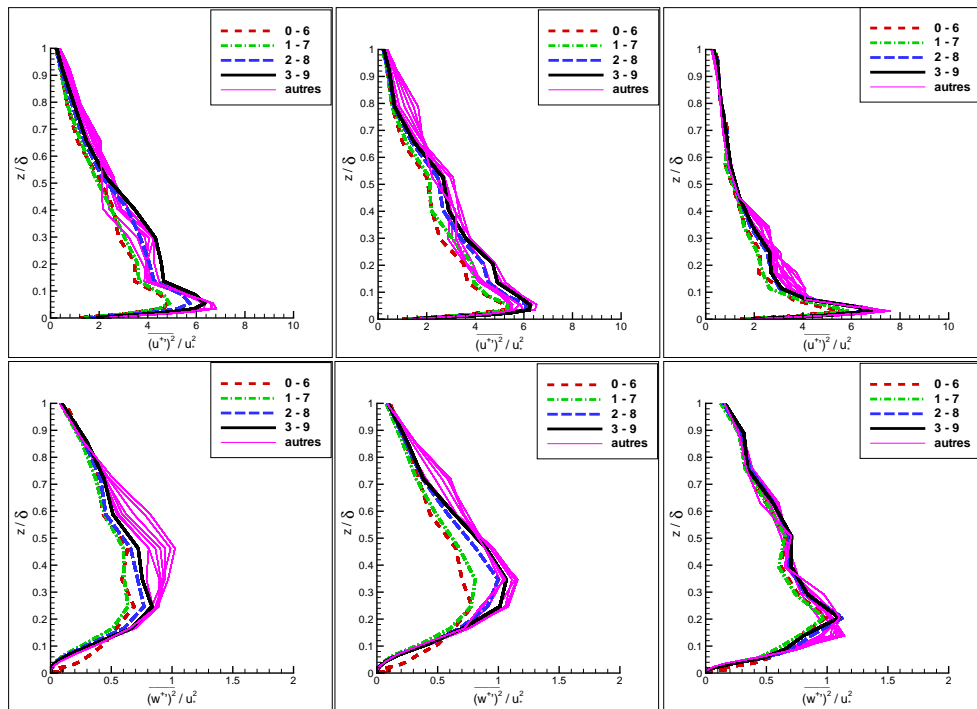


FIG. 4.12 – Profils des moyennes glissantes de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse grandes échelles en utilisant un maillage grossier.

Supérieur : vitesse axiale $\overline{(u^\oplus)^\prime}^2 / u_*^2$. Inférieur : vitesse verticale $\overline{(w^\oplus)^\prime}^2 / u_*^2$.

Gauche : Smagorinsky Standard ; centre : 1,5 TKE ; droite : Smagorinsky dynamique.

Résultats des profils moyens

On présente les résultats issus du calcul avec la configuration du maillage grossier pour les profils du champ dynamique, moyennés dans le temps à partir de la stabilisation ($t_e = 9$ s) et jusqu'à $10T_t = 50$ s. Ceci pour les différentes abscisses indiquées précédemment (4.14). On a ajouté dans les mêmes graphiques les mesures expérimentales de FACKRELL & ROBINS (1982), (FR'82) afin des comparaisons.

Le choix du maillage grossier est dû au fait que la stabilité des profils des moyennes glissantes des fluctuations de la vitesse grandes échelles est meilleur et les pics dans la zone de proche paroi moins prononcés surtout pour les modèles de sous-maille de *Smagorinsky Standard* et *1,5 TKE*.

Les auteurs de l'expérience affirment que l'évolution de la couche limite peut être négligée puisqu'ils ont fait les mesures sur une distance axiale relativement courte par rapport à la hauteur de la couche limite $x = 6\delta$.

La Figure 4.13 montre l'évolution spatiale du profil moyenne de la vitesse axiale grandes échelles en comparaison avec des mesures expérimentales. On a placé les résultats du calcul numérique en utilisant les trois types de modèles de fermeture pour le tenseur de *Reynolds* à chacune des positions axiales dans le même graphique.

Dans la suite, on présente les profils moyens des fluctuations de la vitesse et de l'énergie cinétique turbulente. Pour obtenir les valeurs en moyennées dans le sens de *Reynolds* afin de comparer avec les mesures expérimentales, on a ajouté l'apport des petites échelles modélées à partir de la résolution de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille redistribuée de façon isotrope sur les trois composantes des fluctuations de la vitesse :

$$\begin{cases} \overline{u'^2} &= \overline{(u^{\oplus'})^2} + \frac{2}{3}\overline{E^{\ominus}}, \\ \overline{v'^2} &= \overline{(v^{\oplus'})^2} + \frac{2}{3}\overline{E^{\ominus}}, \\ \overline{w'^2} &= \overline{(w^{\oplus'})^2} + \frac{2}{3}\overline{E^{\ominus}}. \end{cases} \quad (4.19)$$

On aperçoit ainsi la différence entre les valeurs calculées pour les grandes échelles par rapport à celles calculées avec l'apport des petites échelles.

Dans l'équation d'évolution de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille (1.101), le terme de dissipation est obtenu avec un modèle de longueur de mélange (1.109). Le coefficient de ce modèle (C_ε) est calculé différemment pour les boîtes du maillage adjacentes au sol (1.110). On a proposé comme alternative un modèle de paroi qui permet d'ajuster

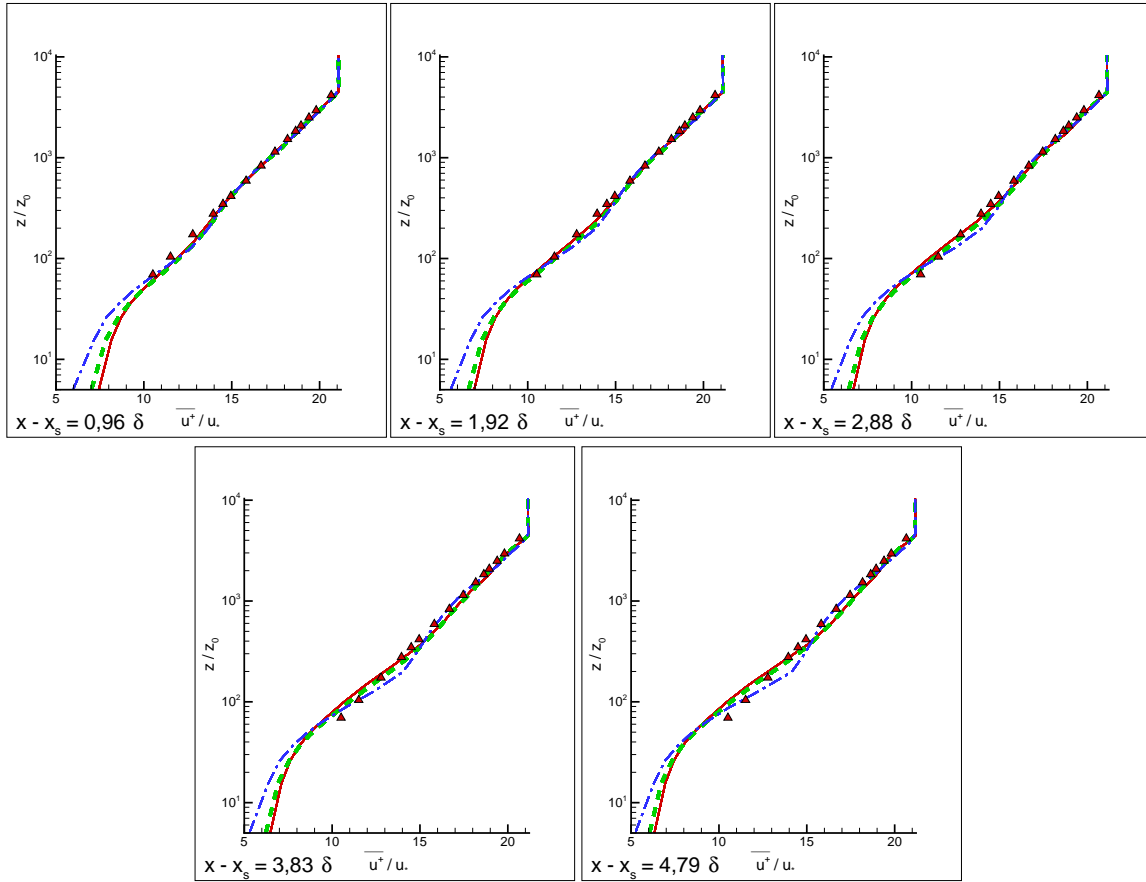


FIG. 4.13 – Profils de la vitesse moyenne axiale grandes échelles.

(—) Smagorinsky Standard; (---) 1,5 TKE; (— · —) Smagorinsky Dynamique; (\blacktriangle) FR'82. Supérieur (gauche) : $x - x_s = 0,96\delta$; (centre) $x - x_s = 1,92\delta$; (droite) $x - x_s = 2,88\delta$. Inférieur : (gauche) $x - x_s = 3,83\delta$; (droite) $x - x_s = 4,79\delta$.

progressivement sa valeur vers les boîtes de proche paroi (3.69). On montrera dans toute la suite les résultats du calcul avec et sans cette modification.

Les grandeurs issues de la résolution des grandes échelles sont indiqués en trait (---), les valeurs totales (résolues “plus” modélées à l'échelle de sous-maille) en utilisant le modèle de paroi sont en ligne pleine (—) et sans le modèle de paroi sont en trait et point (— · —) et enfin les mesures expérimentales faites par FACKRELL & ROBINS (1982) (FR'82) avec les symboles (\blacktriangle). De gauche à droite on a placé les résultats obtenus avec les modèles *Smagorinsky Standard*; *1,5 TKE* et *Smagorinsky Dynamique*.

Les Figures suivantes montrent les profils obtenus à différentes abscisses de mesure : la Figure 4.14 pour $x - x_s = 0,96\delta$, la Figure 4.15 pour $x - x_s = 1,92\delta$, la Figure 4.16 pour $x - x_s = 2,88\delta$, la Figure 4.17 pour $x - x_s = 3,83\delta$ et finalement la Figure 4.18 montre les profils à $x - x_s = 4,79\delta$.

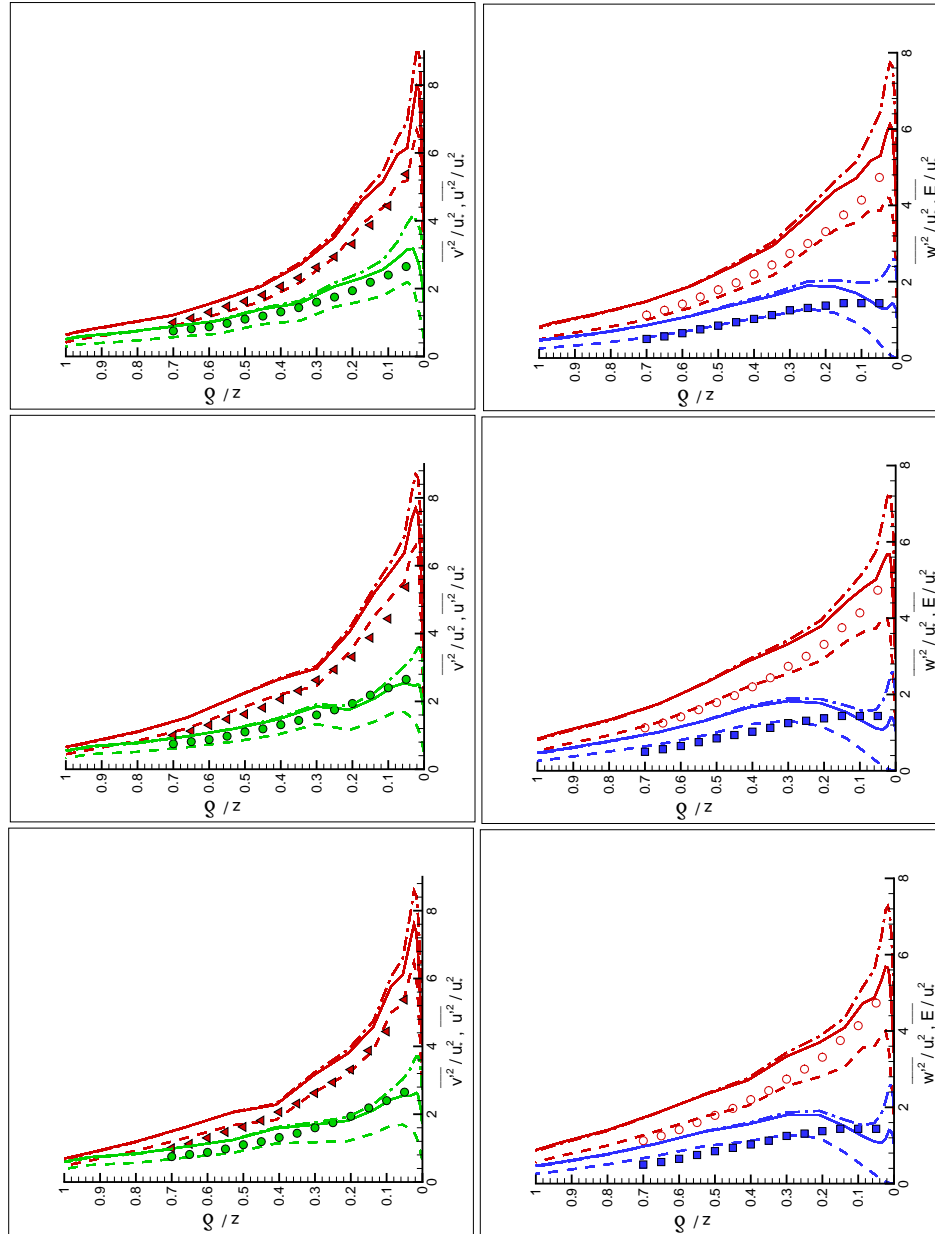


FIG. 4.14 – Profils de l'énergie cinétique turbulente des différents composantes et totale de la vitesse obtenus à $x - x_s = 0,96\delta$.

(--) Grandes échelles ; (—) Total avec modèle de paroi ; (— · —) Total sans modèle de paroi ; (symboles) FR'82.

Gauche : Smagorinsky Standard ; centre : 1,5 TKE ; droite : Smagorinsky Dynamique.

Supérieur : vitesse axiale u'^2/u_*^2 (\blacktriangle) et transversale v'^2/u_*^2 (\bullet).

Inférieur : vitesse verticale w'^2/u_*^2 (\blacksquare) et totale E/u_*^2 (\circ).

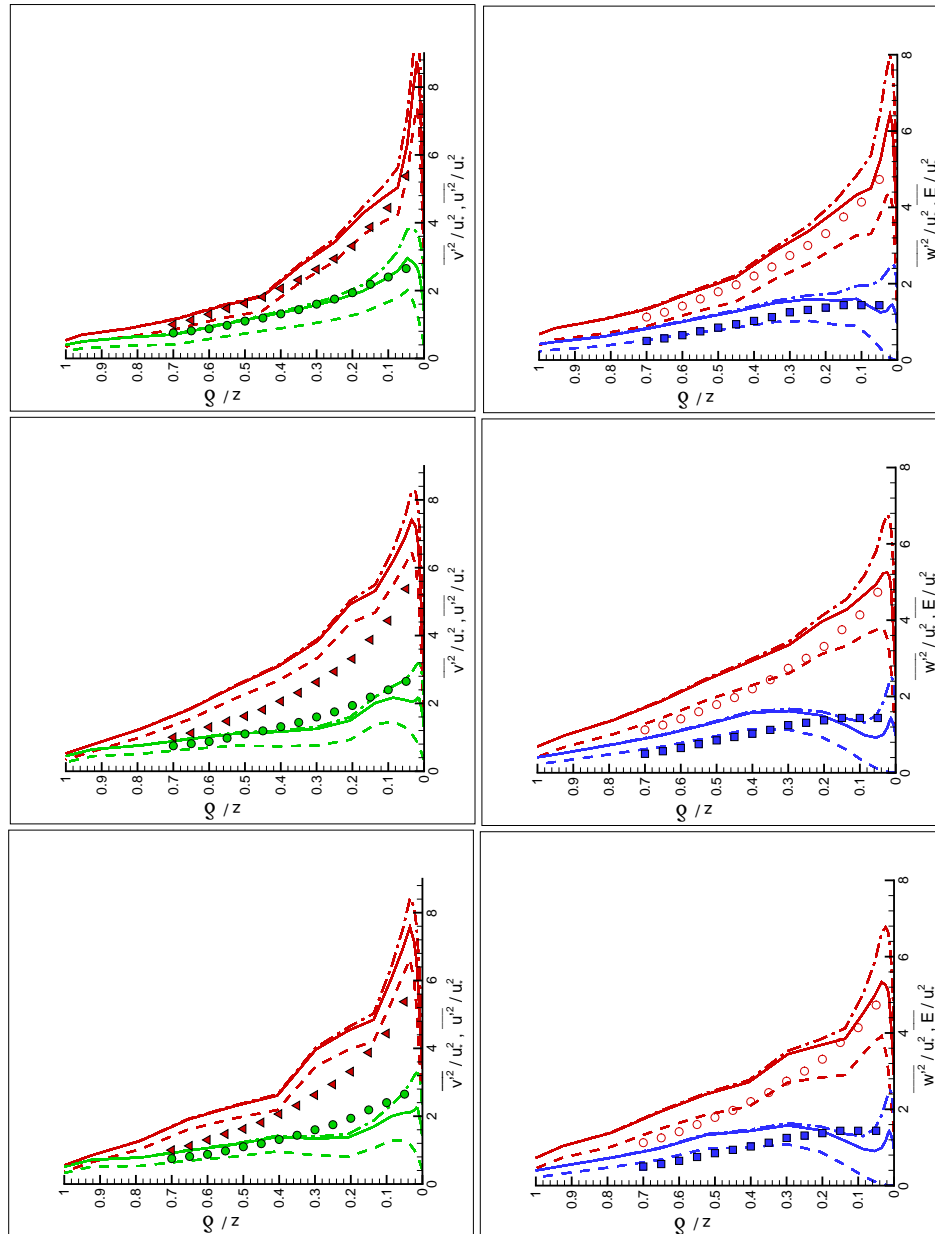


FIG. 4.15 – Profils de l'énergie cinétique turbulente des différents composantes et totale de la vitesse obtenus à $x - x_s = 1,92\delta$.

(—) Grandes échelles; (— · —) Total avec modèle de paroi; (— · —) Total sans modèle de paroi; (symboles) FR'82.

Gauche : Smagorinsky Standard; centre : 1,5 TKE; droite : Smagorinsky Dynamique.

Supérieur : vitesse axiale u'^2/u_*^2 (\blacktriangle) et transversale v'^2/u_*^2 (\bullet).

Inférieur : vitesse verticale w'^2/u_*^2 (\blacksquare) et totale E/u_*^2 (\circ).

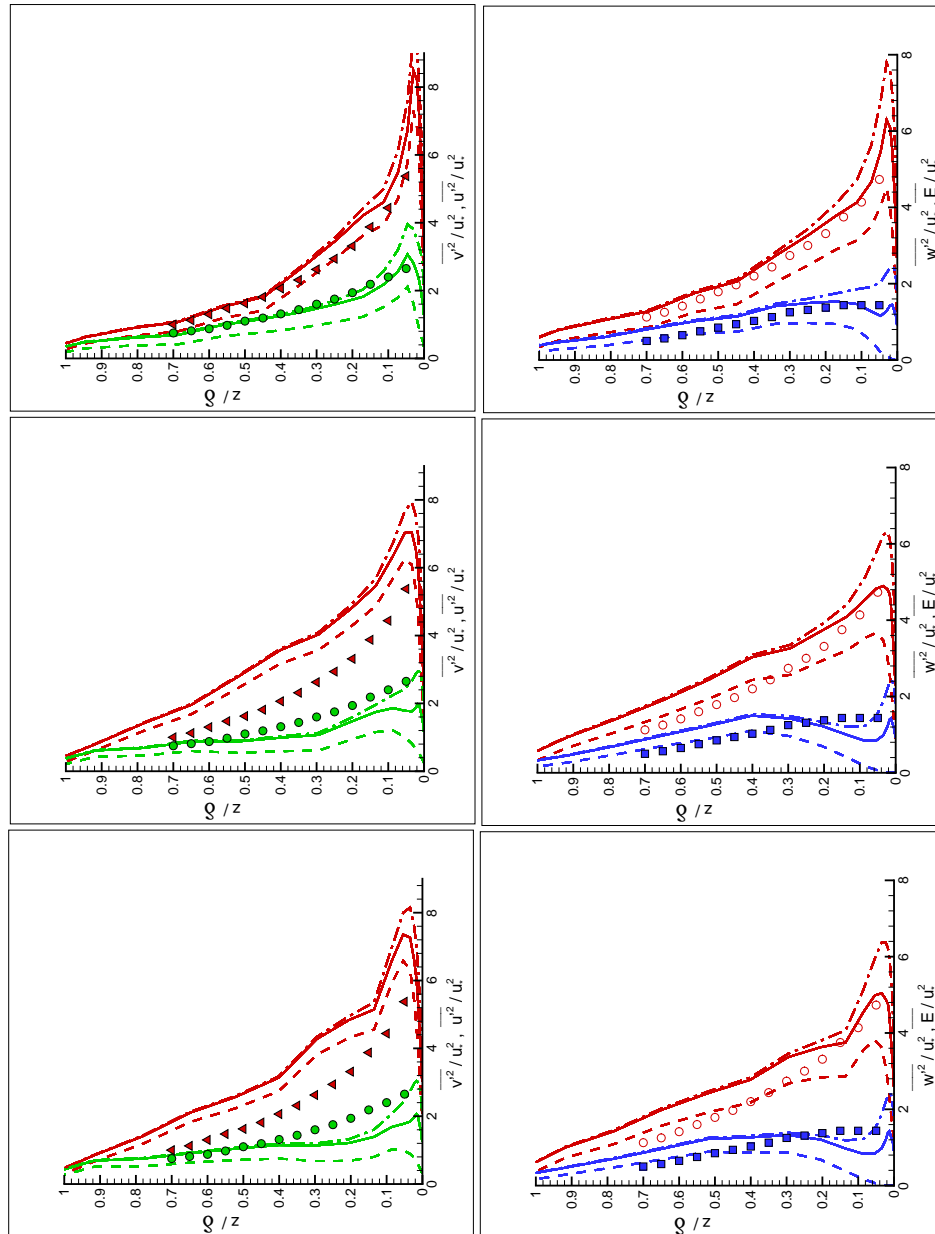


FIG. 4.16 – Profils de l'énergie cinétique turbulente des différents composantes et totale de la vitesse obtenus à $x - x_s = 2,88\delta$.

(---) Grandes échelles; (—) Total avec modèle de paroi; (— · —) Total sans modèle de paroi; (symboles) FR'82.

Gauche : Smagorinsky Standard; centre : 1,5 TKE; droite : Smagorinsky Dynamique.

Supérieur : vitesse axiale u'^2/u_*^2 (▲) et transversale v'^2/u_*^2 (●).

Inférieur : vitesse verticale w'^2/u_*^2 (■) et totale E/u_*^2 (○).

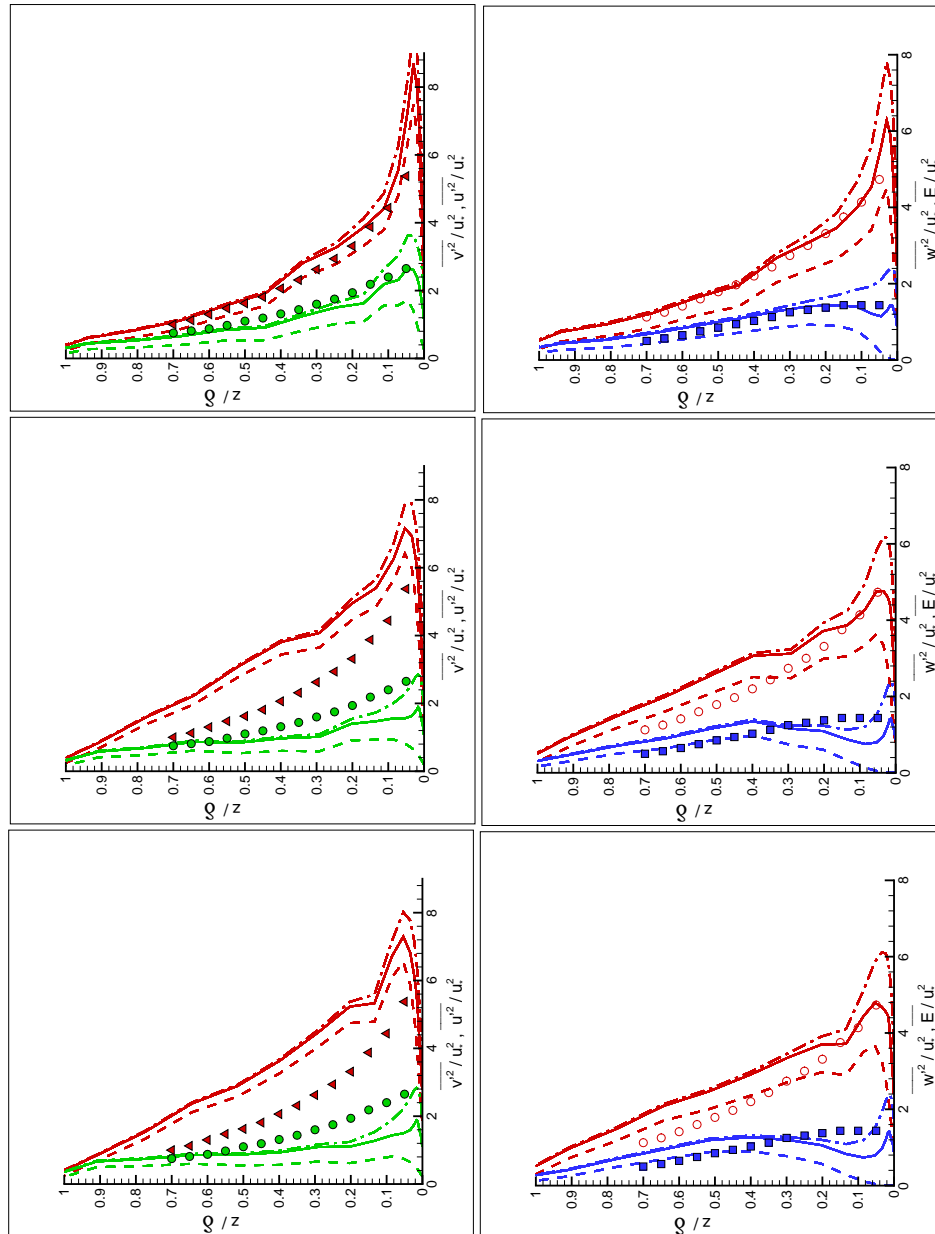


FIG. 4.17 – Profils de l'énergie cinétique turbulente des différents composantes et totale de la vitesse obtenus à $x - x_s = 3,83\delta$.

(---) Grandes échelles; (—) Total avec modèle de paroi; (— · —) Total sans modèle de paroi; (symboles) FR'82.

Gauche : Smagorinsky Standard; centre : 1,5 TKE; droite : Smagorinsky Dynamique.

Supérieur : vitesse axiale u'^2/u_*^2 (\blacktriangle) et transversale v'^2/u_*^2 (\bullet).

Inférieur : vitesse verticale w'^2/u_*^2 (\blacksquare) et totale E/u_*^2 (\circ).

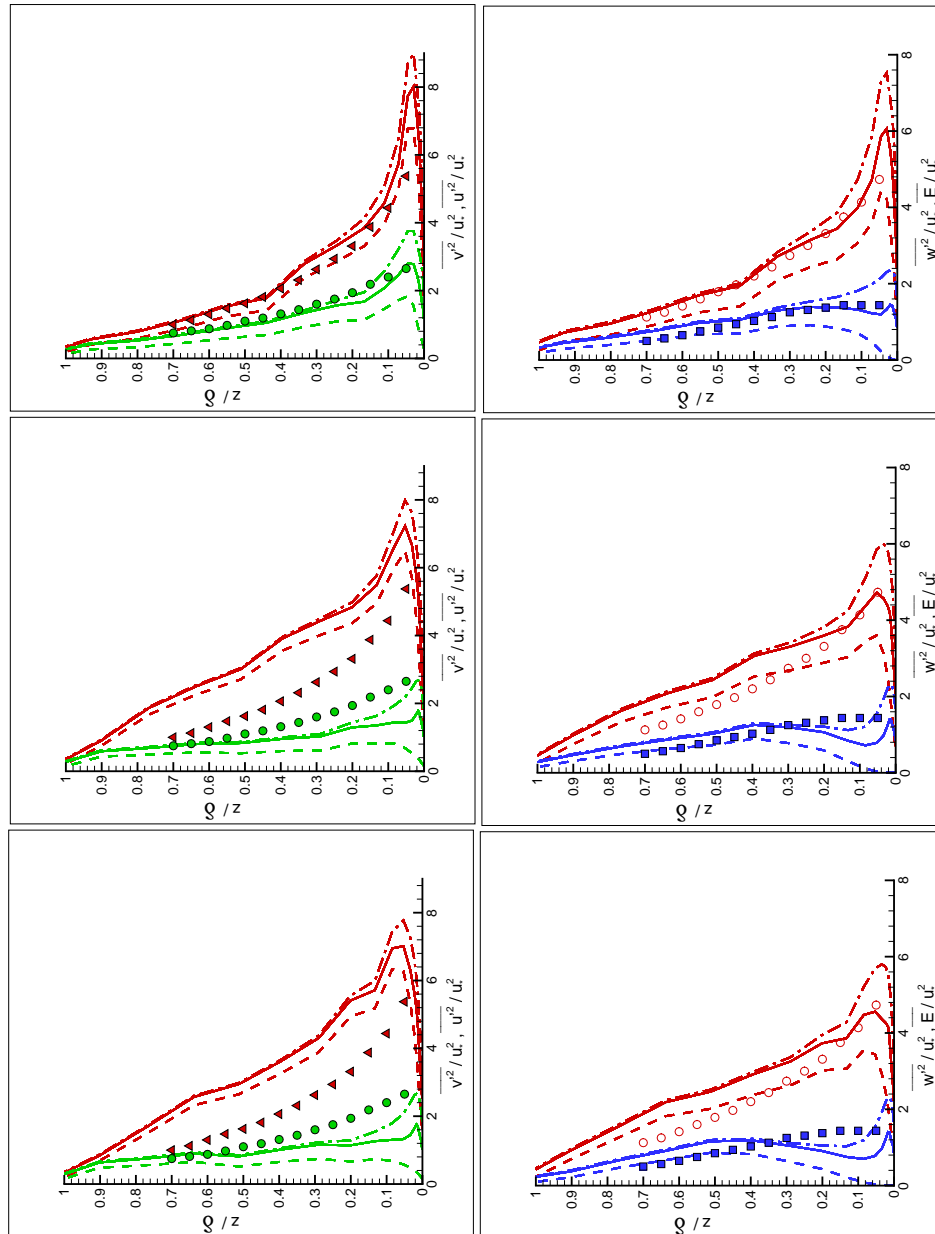


FIG. 4.18 – Profils de l'énergie cinétique turbulente des différents composantes et totale de la vitesse obtenus à $x - x_s = 4,79\delta$.

(---) Grandes échelles; (—) Total avec modèle de paroi; (— · —) Total sans modèle de paroi; (symboles) FR'82.

Gauche : Smagorinsky Standard; centre : 1,5 TKE; droite : Smagorinsky Dynamique.

Supérieur : vitesse axiale u^2/u_*^2 (\blacktriangle) et transversale v^2/u_*^2 (\bullet).

Inférieur : vitesse verticale w^2/u_*^2 (\blacksquare) et totale E/u_*^2 (\circ).

4.2.5 Discussion

Les Figures 4.9, 4.10, 4.11 et 4.12 montrent la convergence du calcul pour LES, en utilisant trois types de modèles de sous-maille et deux configurations de maillage.

En comparant les Figures 4.9 et 4.11 qui montrent la convergence des profils de la vitesse axiale grandes échelles, on note qu'il n'existe pas de différences significatives entre les deux types de configuration du maillage (fin et grossier) et on observe aussi que la convergence du profil calculé avec le modèle sous-maille de *Smagorinsky Dynamique* a une forme un peu plus "ondulée" par rapport aux autres types de modèles de fermeture. La convergence reste bien réussie, même avant le temps de stabilité proposé ($t_e = 9 s$).

Dans le cas de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse grandes échelles, la convergence des profils n'est pas définie par une solution unique, il existe plutôt une zone de convergence où les profils des moyennes glissantes sont compris.

La Figure 4.10 montre les profils de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse axiale et verticale pour les trois types de modèles sous-maille issus du calcul avec un maillage fin. On note que le modèle de *Smagorinsky Dynamique* porte une zone de convergence plus étroite et ses profils sont légèrement différents par rapport aux autres types de fermeture.

Cette situation est aussi observée dans la Figure 4.12 pour le choix du maillage grossier.

Si l'on fait une comparaison entre les deux configurations du maillage, on observe que les pics de turbulence obtenus avec le maillage grossier sont moins prononcés par rapport à ceux du maillage fin. Plus particulièrement, pour la composante verticale de fluctuation de la vitesse, la position du pic de la turbulence est instable dans le cas de l'utilisation des modèles de fermeture *Smagorinsky Standard* et *1,5 TKE*. En plus, le temps de stabilité est difficile à établir tandis que pour le choix de calcul avec le modèle *Smagorinsky Dynamique*, un temps de stabilité de $t_e = 9 s$ est accepté.

Enfin, pour calculer les profils moyens on a utilisé les résultats des grandeurs instantanés calculés à partir de $t_e = 9 s$ et jusqu'à $t = 31 s$.

Les profils moyens de la vitesse axiale grandes échelles pour différentes abscisses sont montrés dans la Figure 4.13 et les profils de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations des trois composantes dans les Figures 4.14 à 4.18.

La Figure 4.13 confirme que les profils moyens de la vitesse axiale grandes échelles obtenus par calcul avec le modèle *Smagorinsky Dynamique* donne des valeurs plus petites dans la zone de proche paroi par rapport aux autres types de modèles de fermeture. A plus haute altitude, la situation est l'inverse. Ce comportement est encore plus marqué au fur et à mesure que l'on s'éloigne en aval.

On ne peut pas encore définir quel modèle sous-maille est le plus performant. Il va falloir faire attention aux profils de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse.

En observant les Figures 4.14 à 4.18, dans tous les profils des fluctuations de la vitesse, on peut noter l'importance de l'apport de l'énergie cinétique turbulente sous-maille selon les relations (4.19) aux échelles résolues par la méthode LES. Cette correction est plus grande dans la zone de proche paroi et encore plus pour la composante verticale de la fluctuation de la vitesse.

Si l'on regarde l'évolution spatiale des profils grandes échelles (traits) pour comparer le comportement des trois types de modèles sous-maille par rapport aux mesures expérimentales, on s'aperçoit que pour les composantes axiales et transversales, les modèles *Smagorinsky Standard* et *1,5 TKE* ont tendance à surestimer, alors que pour la composante verticale, ils sous-estiment. Cette tendance est progressivement plus marquée au fur et à mesure que l'on s'éloigne en aval. Par contre, le modèle *Smagorinsky Dynamique* a un comportement plus stable.

Cet aspect est significatif et on l'avait déjà remarqué au moment d'observer la convergence.

Le modèle de paroi proposé pour le terme de dissipation de l'énergie cinétique turbulente sous-maille réduit le pic d'énergie cinétique turbulente à la paroi de façon à obtenir des profils moyens plus proches des mesures expérimentales.

On peut conclure que même si pour les profils moyens de la vitesse axiale grandes échelles, les modèles *Smagorinsky Standard* et *1,5 TKE* ont un comportement plus stable spatialement que ceux calculés avec le modèle *Smagorinsky Dynamique*, la différence est peu importante par rapport à la stabilité apportée par ce dernier pour les fluctuations de la vitesse et leur énergie cinétique turbulente. En plus, ces profils sont plus proches aux mesures expérimentales que les obtenus avec les modèles de fermeture *1,5 TKE* et *Smagorinsky Standard*.

L'énergie cinétique turbulente de sous-maille issue de la résolution de l'équation de transport (1.101), représente l'apport des petites échelles qu'il faut ajouter aux profils de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse des échelles résolues par l'approche LES (grandes échelles) pour faire des comparaisons avec des mesures expérimentales.

La réduction du pic d'énergie turbulente fournie par le modèle de paroi dans le terme de dissipation de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille est observée dans ce cas comme un aspect favorable.

4.3 Validation dans le cas de l'expérience de Gong & Ibbetson (1989)

Un deuxième cas de validation pour notre modélisation dynamique est présenté dans cette section. Il s'agit de simuler le champ dynamique d'un écoulement de couche limite au dessus d'une colline de faible pente.

On va comparer les résultats des simulations avec les mesures expérimentales menées par GONG & IBBETSON (1989) dans une soufflerie à circuit ouvert du Département d'Agriculture de l'Université de Reading (Grande-Bretagne).

La soufflerie a une section de 1 m de largeur, $0,4\text{ m}$ de hauteur et 3 m de longueur utilisable dans laquelle a été développée une couche limite neutre de $0,3\text{ m}$ de hauteur suivant la méthode décrit par COUNIHAN (1969).

GONG & IBBETSON (1989) ont placé une feuille de caoutchouc sur le sol de la soufflerie avec des cylindres de $h_e = 3\text{ mm}$ de hauteur et de $d_e = 2\text{ mm}$ de diamètre. Ces centres ont été placés de façon uniforme avec une séparation de $s_e = 3,6\text{ mm}$ pour simuler une rugosité. La hauteur de la rugosité caractéristique z_0 est fonction de la hauteur, espacement, forme et diamètre des éléments. RAUPACH *et al.* (1980) montre cette relation sous la forme d'un coefficient de concentration $\lambda_e = \frac{h_e d_e}{s_e^2}$ pour différentes formes géométriques de ces éléments. Dans un travail postérieur, RAUPACH *et al.* (1991) montrent la relation pour plusieurs types d'arbres dans le cas d'un couche limite atmosphérique. Le coefficient de concentration λ_e appliqué au cas de la couche limite de laboratoire pour l'expérience de GONG & IBBETSON (1989) donne la valeur de la hauteur caractéristique de la rugosité $z_0 = 0,17\text{ mm}$.

GONG & IBBETSON (1989) ont fait des mesures du champs de vitesse avec un anémomètre à fil chaud aux différentes positions en suivant la ligne centrale du canal dans une configuration de sol plat, d'abord sans la présence d'une colline gaussienne de faible pente et après avec elle.

La validation du code LES comportera la comparaison des profils de la vitesse moyenne et de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations à différentes stations de mesure sans et avec la présence de la colline.

Comme dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982), GONG (1991) s'est intéressé à la dispersion de CO_2 rejeté depuis une source ponctuelle. Des mesures de concentration du gaz dans les deux configurations (sol plat et avec la présence de la colline) ont été faites.

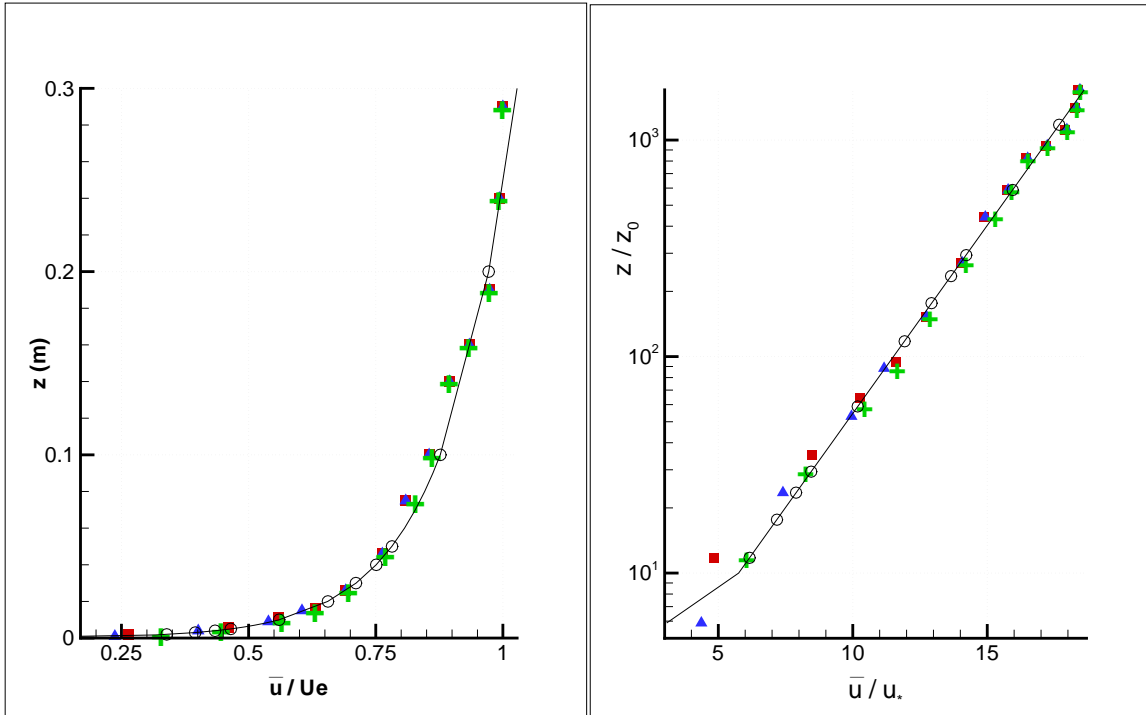


FIG. 4.19 – Profils de la vitesse moyenne axiale.

Symboles : mesures de GONG & IBBETSON (1989) : \circ 1,21 m, \blacksquare 1,51 m; \blacktriangle 1,71 m; $+$ 1,91 m.
Analytique : —

4.3.1 Données de l'expérience

Les caractéristiques de la couche limite générée sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \delta = 0,3 \text{ m} & \text{épaisseur de la couche limite.} \\ U_e = 8 \text{ m/s} & \text{vitesse extérieure.} \\ u_* = 0,055 U_e & \text{vitesse de frottement.} \\ z_0 = 1,7 \cdot 10^{-4} \text{ m} & \text{hauteur de la rugosité caractéristique.} \end{array} \right. \quad (4.20)$$

Cas du sol plat

Des mesures de la vitesse longitudinale et ses fluctuations ont été faites à quatre positions différentes sur l'axe du canal dans le cas du développement de la couche limite sur un sol plat. La Figure 4.19 montre les profils de la vitesse moyenne axiale issus des mesures expérimentales (symboles) et obtenus analytiquement (lignes).

L'équation de la vitesse moyenne dans la direction axiale (3.61) est la même que dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) avec une constante de *Von Kármán* $k_v = 0,4$.

La Figure 4.20 montre les profils moyens de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse mesurées aux mêmes abscisses que la vitesse moyenne (symboles). Les profils analytiques qu'on a obtenu sont représentés en lignes solides :

$$\frac{\overline{u'^2}}{u_*^2} = \begin{cases} 0,009 & , \quad \frac{z}{\delta} > 0,87. \\ -1,7103 \ln\left(\frac{z}{\delta}\right) - 0,2288 & , \quad 0,5 < \frac{z}{\delta} \leq 0,87. \\ -1,3229 \ln\left(\frac{z}{\delta}\right) + 0,0969 & , \quad 0,02 < \frac{z}{\delta} \leq 0,5. \\ 274,21 \left(\frac{z}{\delta}\right) & , \quad \frac{z}{\delta} \leq 0,02. \end{cases} \quad (4.21)$$

$$\frac{\overline{v'^2}}{u_*^2} = \begin{cases} 0,02 & , \quad \frac{z}{\delta} > 0,87. \\ -0,9416 \ln\left(\frac{z}{\delta}\right) - 0,1038 & , \quad 0,5 < \frac{z}{\delta} \leq 0,87. \\ -0,57 \ln\left(\frac{z}{\delta}\right) + 0,2002 & , \quad 0,02 < \frac{z}{\delta} \leq 0,5. \\ 120,43 \left(\frac{z}{\delta}\right) & , \quad \frac{z}{\delta} \leq 0,02. \end{cases} \quad (4.22)$$

$$\frac{\overline{w'^2}}{u_*^2} = \begin{cases} 0,01 & , \quad \frac{z}{\delta} > 0,85. \\ -1,3495 \left(\frac{z}{\delta}\right)^2 + 0,0463 \frac{z}{\delta} + 0,9465 & , \quad 0,01 < \frac{z}{\delta} < 0,85. \\ 94,031 \left(\frac{z}{\delta}\right) & , \quad \frac{z}{\delta} < 0,01. \end{cases} \quad (4.23)$$

Ces profils analytiques seront utilisés pour le forçage des fluctuations de la vitesse.

cas de la présence de la colline

Une colline gaussienne de faible pente bidimensionnelle a été placée au milieu du canal de façon perpendiculaire à la direction du flux.

Il s'agit d'une colline dont la forme est représentée par la fonction analytique suivante :

$$z(x) = h \cos^2\left(\frac{\pi x}{2L_c}\right), \quad (4.24)$$

où $h = 31 \text{ mm}$ est la hauteur du sommet et $L_c = 200 \text{ mm}$ est la demi-longueur, c'est à dire la distance entre les positions axiales correspondantes à la demi-pente des deux côtés

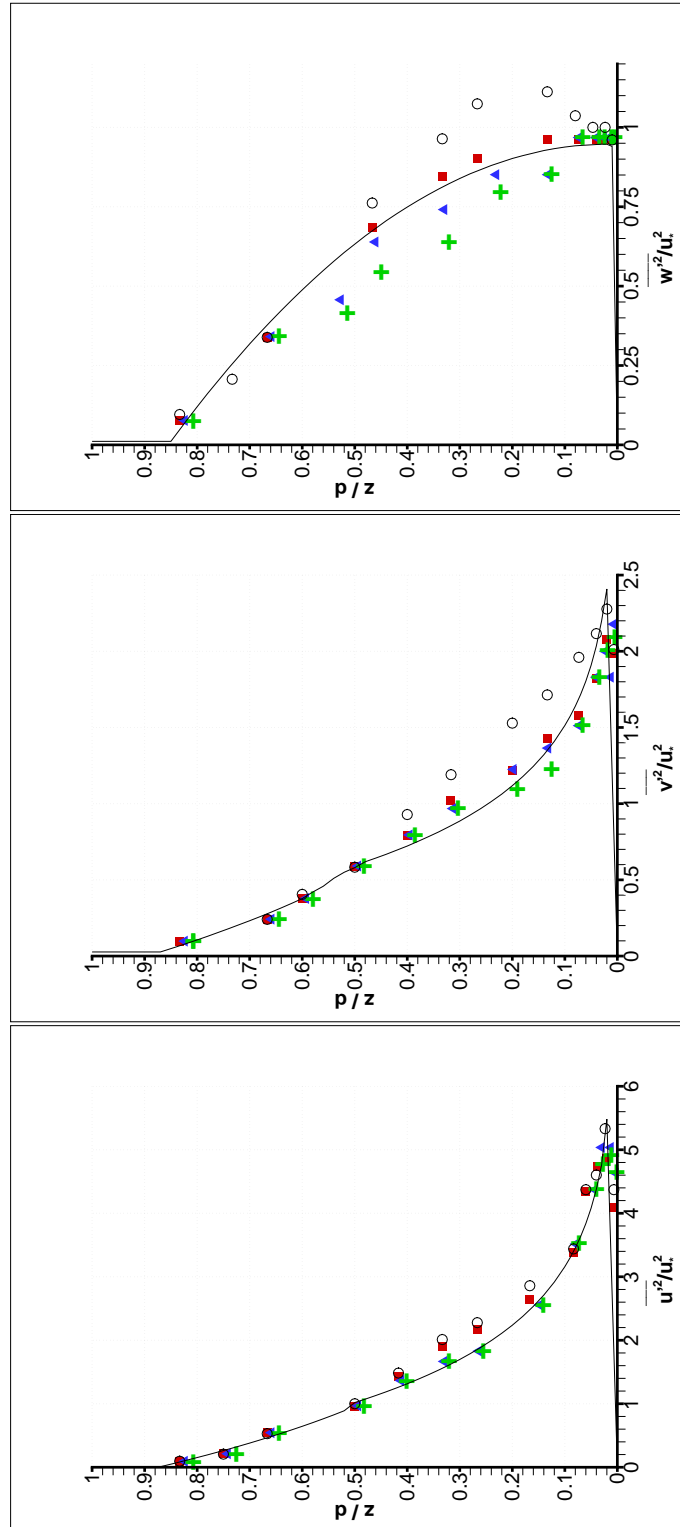


FIG. 4.20 – Profils moyens de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse.
Symboles : mesures GONG & IBBETSON (1989) : \circ 1,21 m ; \blacksquare 1,51 m ; \blacktriangle 1,71 m ; $+$ 1,91 m.
Analytique : —

de la colline. Les pentes maximales reste inférieures à 14 degrés.

Des mesures de la vitesse moyenne axiale et verticale ainsi comme de l'énergie cinétique turbulente dans les trois directions ont été faites à cinq stations sur le centre du canal :

- au pied en amont de la colline,
- à demi-pente en amont de la colline,
- au sommet de la colline,
- à demi-pente en aval de la colline,
- au pied en aval de la colline.

GONG & IBBETSON (1989) ont testé la stabilité latérale du flux à une hauteur de $z = 105 \text{ mm}$. Ils ont trouvé des variations de $\pm 1 \%$ pour la vitesse moyenne axiale et $\pm 10 \%$ pour l'énergie cinétique turbulente.

4.3.2 Grandeurs caractéristiques de la turbulence

Dans ce cas, les valeurs de l'énergie cinétique turbulente maximale des fluctuations de la vitesse sont :

$$\frac{u'_{max}}{u_*^2} = 5,5; \quad \frac{v'_{max}}{u_*^2} = 2,4; \quad \frac{w'_{max}}{u_*^2} = 1.$$

L'échelle caractéristique de la vitesse turbulente est :

$$u'_t = \sqrt{\frac{1}{3} (u'^2_{max} + v'^2_{max} + w'^2_{max})} (= 0,7579 \text{ m/s}).$$

Le nombre de *Reynolds* caractéristique de la turbulence Re_t défini en (4.6) est :

$$Re_t \approx \frac{u'_t \delta}{\nu} (\approx 15157).$$

La taille de l'échelle de *Taylor* (4.12) donne :

$$\lambda \approx \frac{4\delta}{Re_t^{1/2}} (= 0,0097 \text{ m}).$$

Le temps caractéristique de la turbulence à été calculé selon (4.13) :

$$T_t \approx \frac{3}{2} \frac{\delta}{u_t'} (= 0,59 \text{ s}).$$

4.3.3 Choix des paramètres pour la simulation des Grandes Échelles dans le cas de l'expérience de Gong & Ibbetson (1989)

1. Le maillage de calcul numérique

D'après les relations (4.15) (MASON & CALLEN (1986)) pour le cas du maillage fin, les tailles des mailles sont :

$$\Delta x = 0,045 \text{ m}, \quad \Delta y = 0,028 \text{ m}, \quad \Delta z_{max} = 0,0198 \text{ m}.$$

Les calculs numériques issus de ce choix ont donnés de mauvais résultats probablement parce que le code ARPS est un code dimensionnelle et il n'est pas conçu pour simuler des couches limites minces (1/4 de l'épaisseur de couche limite par rapport au cas de FACKRELL & ROBINS (1982)). C'est un code atmosphérique pour la simulation des échelles de l'ordre d'une centaine de mètres à plusieurs kilomètres. Pour ce cas, on trouve des meilleurs résultats en quintupliant toutes les grandeurs dimensionnelles et la viscosité cinématique pour maintenir le nombre de *Reynolds* invariant.

Cela va donner les tailles de maillage suivantes :

$$\Delta x = 0,225 \text{ m}, \quad \Delta y = 0,141 \text{ m}, \quad \Delta z_{max} = 0,099 \text{ m}.$$

Comme dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982), on travaille avec une même taille de maille horizontale :

$$\Delta x = \Delta y = 0,1 \text{ m}.$$

Les dimensions du domaine de calcul seront choisies de manière à prendre en compte la dernière station de mesure expérimentale. Dans le cas du sol plat, cette station est placée à $x = 1,91 \text{ m}$ mais dans le cas de la colline gaussienne, des mesures en aval jusqu'à $x = 2,0 \text{ m}$ ont été faites. Pourtant, on va prolonger le domaine de calcul pour obtenir des résultats de la dynamique du flux et de la dispersion jusqu'à $x = 2,4 \text{ m}$. Comme dans le cas précédent, on utilisera les 10 premières mailles du domaine pour le pré-calcul de forçage des grandeurs dynamiques.

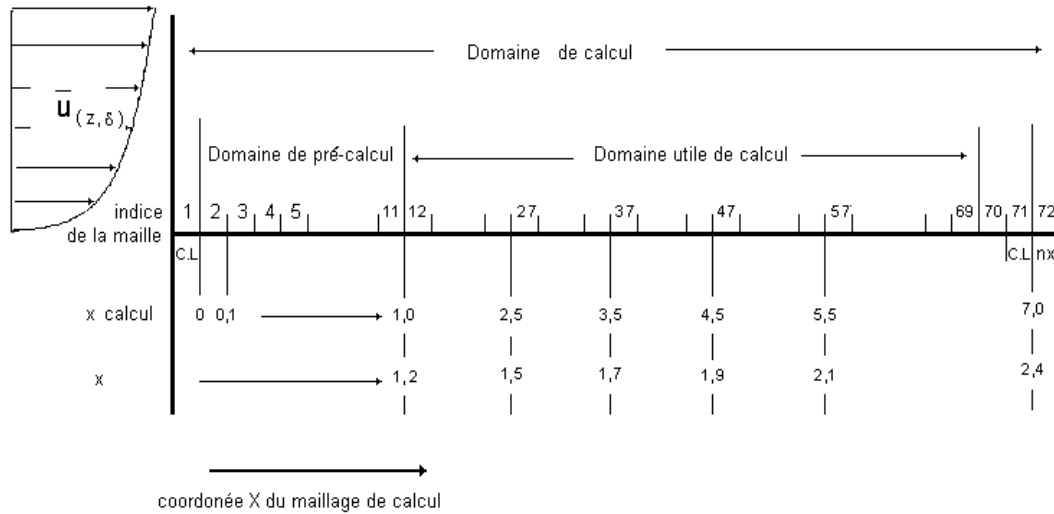


FIG. 4.21 – Disposition des boîtes du maillage de calcul pour la coordonnée axiale dans le cas du sol plat.

La Figure 4.21 montre la disposition du maillage dans la direction axiale. La ligne x_{calcul} indique la coordonnée axiale dans le repère de calcul numérique et x la coordonnée axiale dans le repère physique de l'expérience pour le cas du sol plat. La Figure 4.22 montre les positions des mesures dans le cas de présence de la colline.

Pour terminer de définir les paramètres du maillage, il faut tenir compte que toutes les grandeurs dimensionnelles réelles ont été multipliées par 5 pour le domaine de calcul :

- $\Delta z_{min} = 10z_0 (= 8,5 \cdot 10^{-3} \text{m})$.
- $D_1 = 5z_{min} (= 0,0425 \text{m}, \text{ ce qui donne } n_1 = 5)$.
- $D_2 = \delta (= 1,5 \text{ m})$.
- $D_3 = \frac{1}{3} \delta (= 0,5 \text{ m})$.
- $n_3 = \frac{D_3}{\Delta z_{max}} (\approx 5 \text{ mailles})$.
- $\Delta z_2 = \frac{1}{2}(\Delta z_{max} + \Delta z_{min}) (= 0,05375 \text{ m})$.
- $n_2 = \frac{D_2}{\Delta z_2} (= 27,9 \approx 28 \text{ mailles})$.
- Ce qui donne $D_2 = 1,505 \text{ m}$.

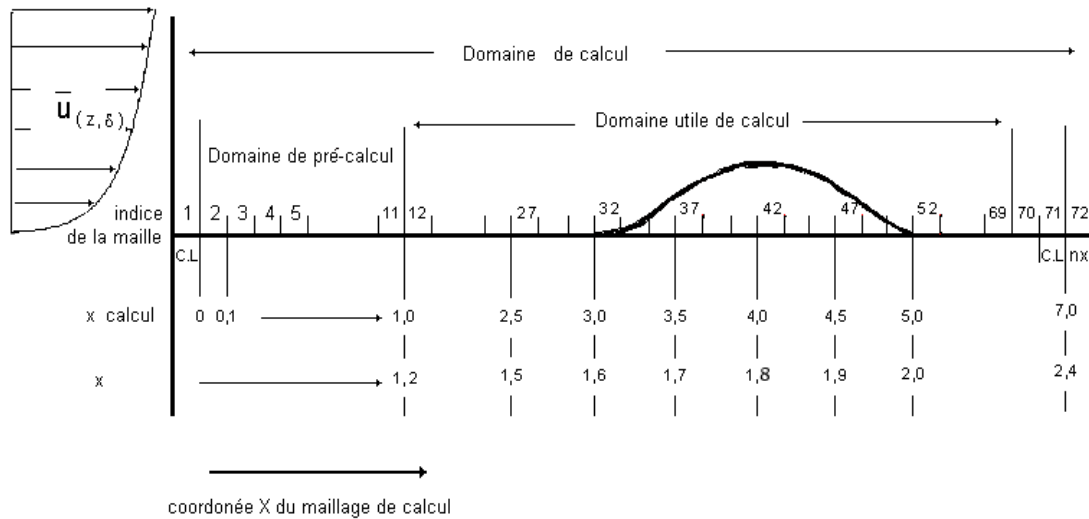


FIG. 4.22 – Disposition des boîtes du maillage de calcul pour la coordonnée axiale dans le cas de la colline.

$$- nz = n_1 + n_2 + n_3 + 3 (= 41 \text{ mailles}).$$

$$- \Delta z_m = \frac{D_1 + D_2 + D_3}{nz - 3} (= 0,05388 \text{ m}).$$

La taille de l'échelle de *Taylor* dans le domaine de calcul est :

$$\lambda \approx \frac{4\delta}{Re_t^{1/2}} (= 0,0487 \text{ m}).$$

C'est à dire que la taille verticale moyenne des mailles du maillage est de l'ordre de l'échelle de *Taylor*.

Dans la Figure 4.23 on peut voir l'effet de contraction verticale du maillage dans le cas du sol plat et la Figure 4.24 celui dans le cas de la colline.

2. Conditions initiales du champ de vitesse

Elles seront du même type que dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

On calcule le paramètre l_0 avec l'équation (3.57) qui est nécessaire pour prendre en compte la loi d'épaississement de la couche limite. Dans cette expression, $x_p = 1,0 \text{ m}$ selon la disposition axiale des mailles du maillage de calcul des Figures 4.21 et 4.22.

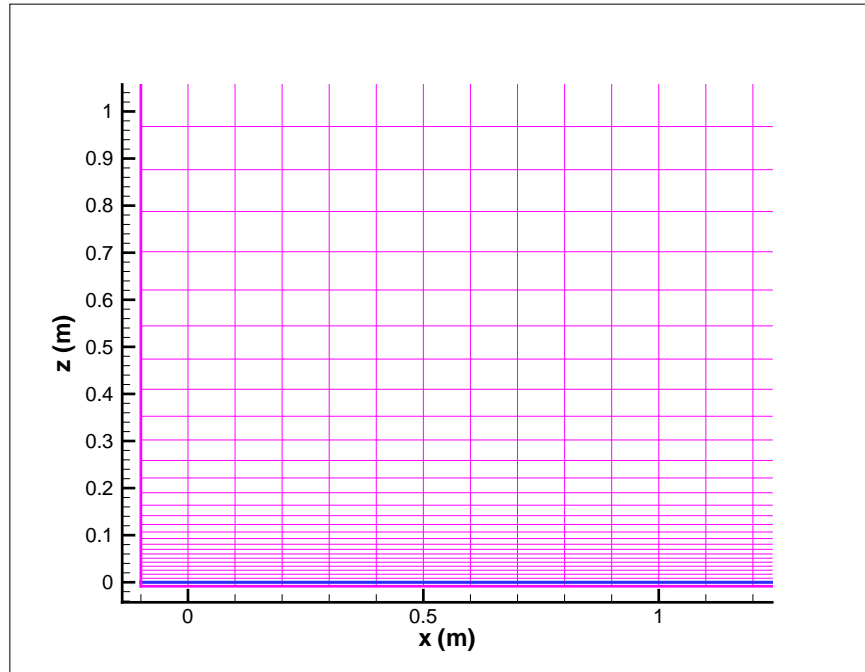


FIG. 4.23 – Contraction verticale des mailles du maillage de calcul dans le cas du sol plat.

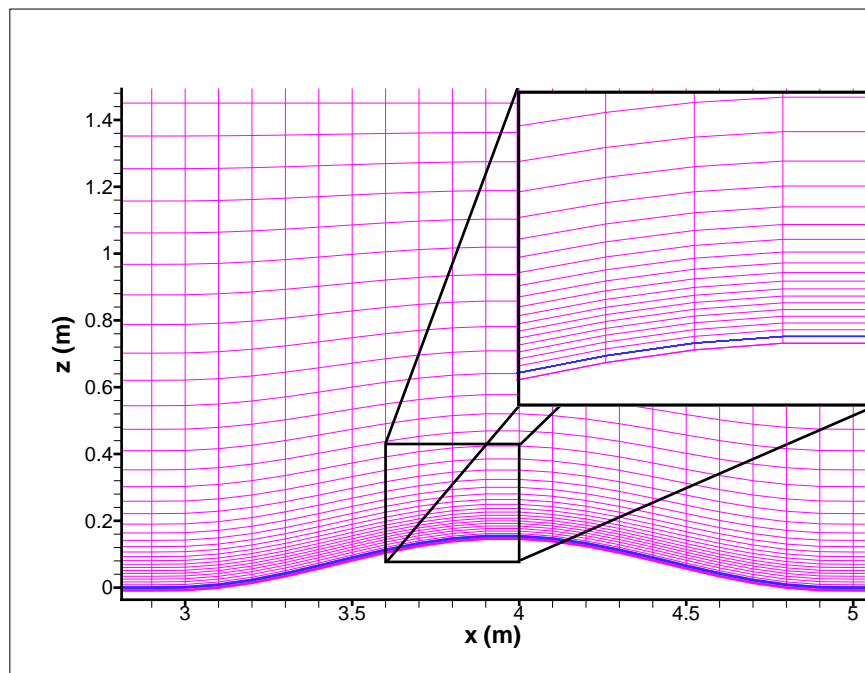


FIG. 4.24 – Contraction verticale des mailles du maillage de calcul dans le cas de la colline.

$$l_0 = \left(\frac{\delta_{(x=1,0)}}{0,37} \right)^{5/4} \left(\frac{U_e}{\nu} \right)^{1/4} - x_p (= 102,96077 \text{ m}),$$

où $\delta_{(x=1,0)} = 1,5 \text{ m}$; $U_e = 8 \text{ m/s}$; $\nu = 7,5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$, pour le calcul.

3. Conditions aux limites du champ de vitesse

Dans le domaine de pré-calcul on applique la méthode de forçage du profil de la vitesse moyenne avec la loi d'épaississement de la couche limite. On travaille avec la condition quasi-périodique pour le champ fluctuant.

Les conditions du champ de vitesse en amont du domaine utile de calcul sont aussi forcées et obtenues à la sortie du domaine de pré-calcul. En aval, on utilise les conditions de convection (3.67).

4. Choix du pas de temps

Comme dans l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982), on travaille avec le grand pas de temps pour résoudre les termes des équations de la quantité de mouvement qui sont indépendantes de la pression et avec un petit pas de temps pour tenir compte des effets de propagation des ondes acoustiques.

Selon l'expression (4.16) pour calculer le grand pas de temps sans tenir compte de la fréquence de *Brunt Väisälä* on a :

$$\Delta t_G < \frac{1}{|V_{max}|} \left[\left(\frac{1}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta z_m} \right)^2 \right]^{-1/2} = 2,86 \cdot 10^{-4} \text{ s}.$$

On a pris

$$\Delta t_G = 2,0 \cdot 10^{-4} \text{ s}.$$

Pour le petit pas de temps, on a choisi une valeur 10 fois plus petite par rapport au grand pas de temps comme dans le cas de la simulation de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982), soit :

$$\Delta t_p = 2,0 \cdot 10^{-5} \text{ s}.$$

5. Critère de stabilisation du calcul et des statistiques

Pour obtenir le temps de stabilité, on calcule les profils moyens de la vitesse dans la direction axiale et ses fluctuations avec des échantillons des résultats des grandeurs instantanées tous les $Te = (1/2)T_t$ pendant un période de temps de $2T_t$ où T_t est le temps caractéristique de la turbulence selon (4.13) :

$$T_t = \frac{2}{3} \frac{\delta}{u'_t} (= 1,32 \text{ s}).$$

On va prendre $T_t = 1 \text{ s}$ pour assurer le passage des gros tourbillons énergétiques :

$$Te = \frac{1}{2} T_t (= 0,5 \text{ s}).$$

Un deuxième ensemble de moyennes est obtenu en faisant glisser le temps de Te , successivement, jusqu'à la fin des échantillons $10T_t$.

On regarde quel est le temps qu'il faut atteindre pour obtenir des profils moyens glissants stables.

6. Coefficient de frottement

Le calcul de ce paramètre en tenant compte de la loi logarithmique est encore valable pour la première maille de calcul. De manière similaire à l'expression (4.18) :

$$C_{dm} = \frac{k_v^2}{\ln^2 \left(\frac{\Delta A}{z_0} \right)} (= 0,03).$$

7. Conditions initiales des grandeurs scalaires

L'expérience a été développée en conditions de stabilité atmosphérique neutre avec une température potentielle $\theta = 294^\circ K$. La pression au niveau du sol a été fixée à 1000 hPa .

8. Modèle de sous-maille

On a utilisé le modèle *Smagorinsky Dynamique* qui est le plus performant pour la stabilité des fluctuations de la vitesse dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

4.3.4 Résultats

Cas du sol plat

D'abord, on présente les profils des moyennes glissantes de la vitesse pendant un intervalle de temps de $2T_t$. La Figure 4.25 montre la convergence du calcul pour la vitesse moyenne. La Figure 4.26 présente les profils de convergence pour l'énergie cinétique turbulente des fluctuations axiales et verticales de la vitesse grandes échelles. On peut voir que pour ces profils le temps de convergence est plus grand. On a mis en évidence les profils initiaux utilisés pour le forçage. L'énergie cinétique turbulente des fluctuations verticales de la vitesse est plus lente à converger. On peut choisir comme *temps de stabilité* : $t_e = 5 \text{ s}$.

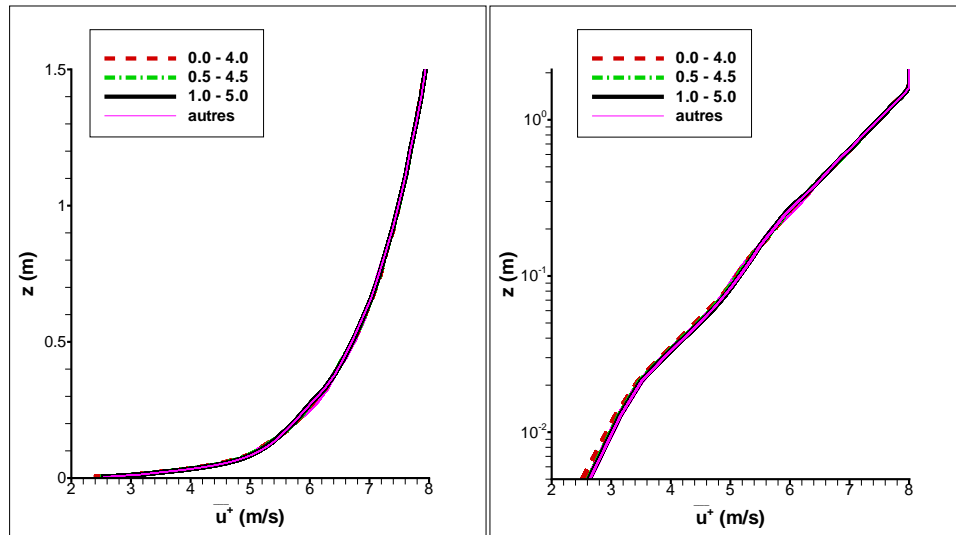


FIG. 4.25 – Profils de moyennes glissantes de la vitesse axiale grandes échelles.

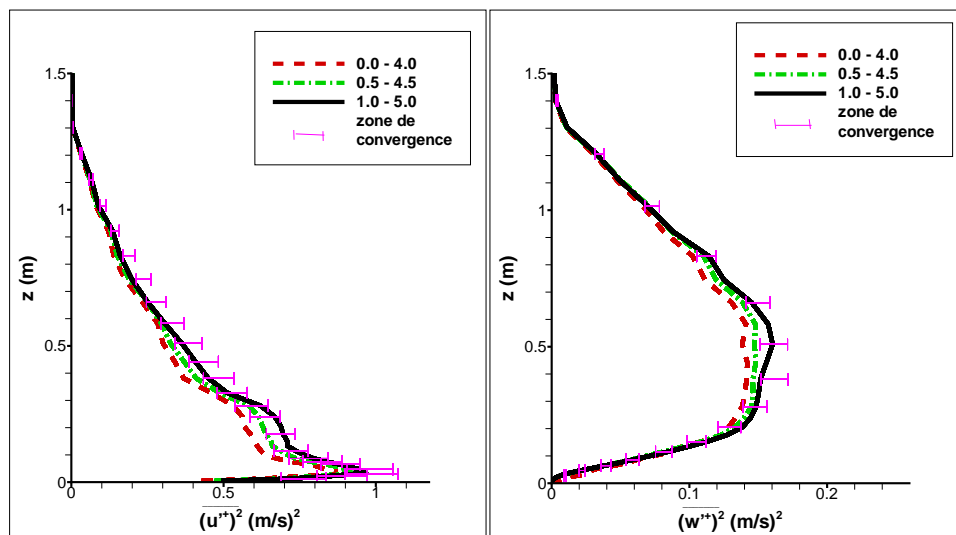


FIG. 4.26 – Profils de moyennes glissantes de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations axiales et verticales de vitesse grandes échelles.

On va maintenant présenter les résultats des grandeurs dynamiques moyens obtenues à partir de $t = 5 s$. Ces profils ont été obtenus en calculant les moyennes des valeurs instantanées avec des échantillons tous les $Te = 0,5 s$ dans l'intervalle de temps : $[5 s - 25 s]$, c'est à dire pendant $10T_t$ à partir du temps de stabilité.

La Figure 4.27 montre les profils de la vitesse moyenne axiale grandes échelles $\overline{u^{\oplus}}(z)$ (ligne) en comparaison avec les mesures de GONG & IBBETSON (1989) (symboles) à l'abscisse $x = 1,51 m$. À gauche la vitesse est adimensionnalisée par sa valeur à l'extérieur de la

couche limite $U_e = 8 \text{ m/s}$ et l'élévation z , par la hauteur de la couche limite $\delta = 1,5 \text{ m}$. À droite, on montre, en échelle logarithmique, l'élévation z adimensionnée par la hauteur de la rugosité du sol $z_0 = 8,5 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ et la vitesse adimensionnée par la vitesse de frottement $u_* = 0,44 \text{ m/s}$.

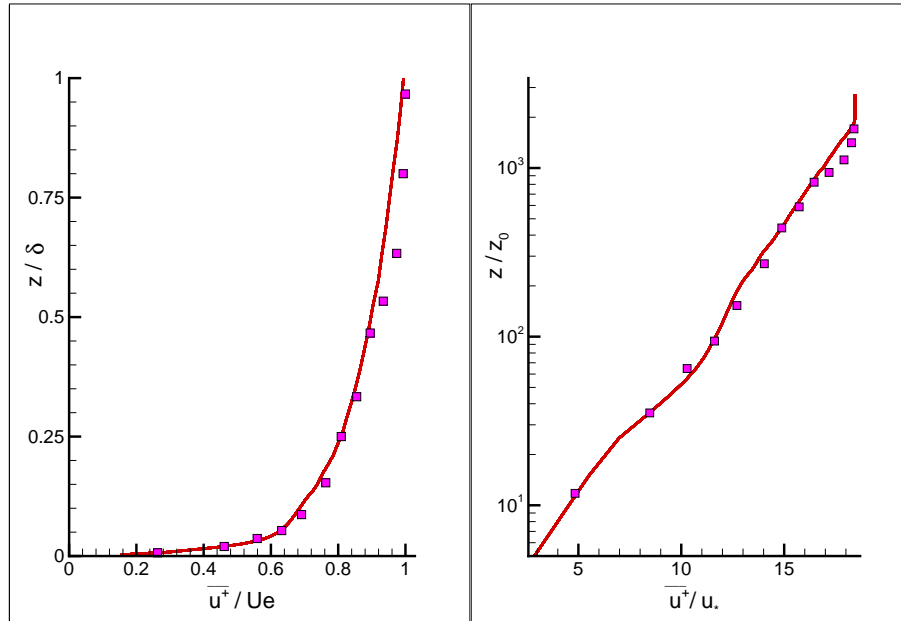


FIG. 4.27 – Vitesse moyenne axiale grandes échelles.

— Calcul numérique; ■ mesurées à $x = 1,51 \text{ m}$.

Dans la partie gauche de la Figure 4.28, on observe le profil de l'énergie cinétique turbulente grandes échelles $\overline{E}^\oplus(z)$ (traits) et totale $\overline{E}(z) = \overline{E}^\oplus(z) + \overline{E}^\ominus(z)$ (lignes) en comparaison avec le profil de forçage analytique (ligne pointillée) calculée avec les équations (4.21), (4.22) et (4.23).

À droite, les profils de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse résolues par LES (traits) et totale (résolues plus modélées (lignes)) pour chacune de leurs composantes sont aussi comparées avec des mesures expérimentales.

Les Figures 4.29 et 4.30 montrent respectivement les profils de la vitesse moyenne axiale grandes échelles pour les abscisses $x = 1,71 \text{ m}$ et $x = 1,91 \text{ m}$.

Dans la Figure 4.31 on présente les profils de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse à $x = 1,71 \text{ m}$ (gauche) et à $x = 1,91 \text{ m}$ (droite).

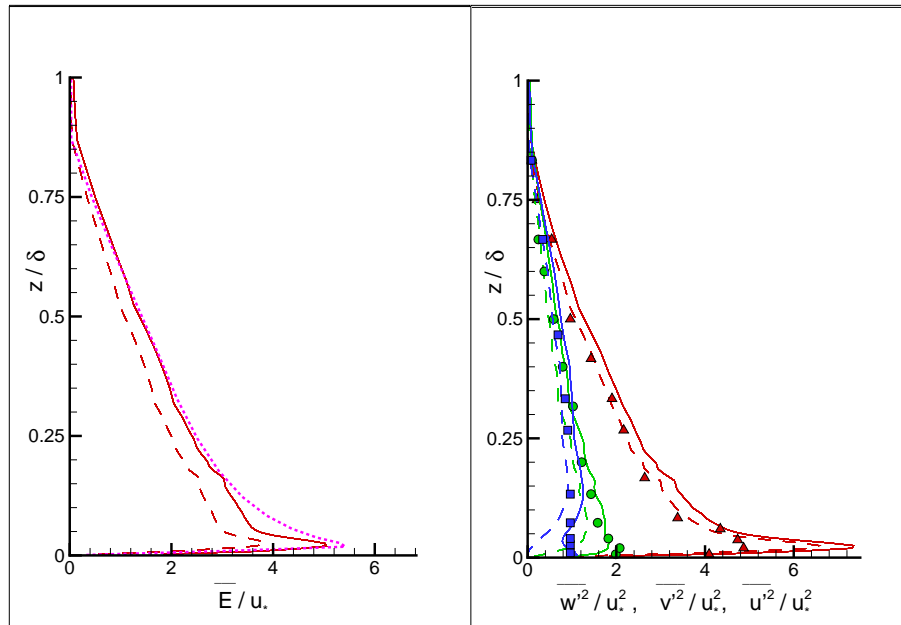


FIG. 4.28 – Profils moyens de l'énergie cinétique turbulente et des fluctuations : $x = 1,51 m$
Grandes échelles (--); Totale (—); Profil analytique (...)

Gauche : Énergie cinétique turbulente.

Droite : Fluctuation de la vitesse (composante verticale w' : ■, transversale v' : ●, axiale u' : ▲).

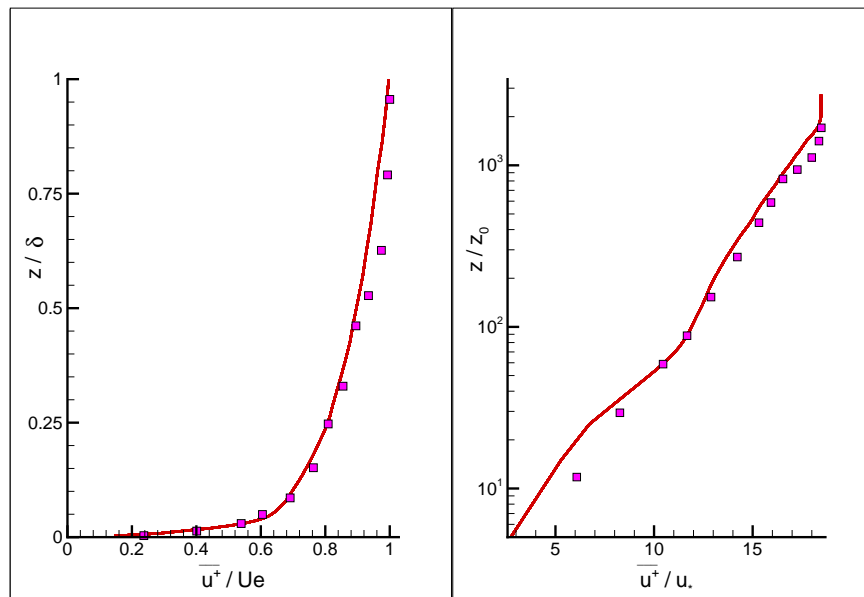


FIG. 4.29 – Vitesse moyenne axiale grandes échelles

— Calcul numérique; ■ mesurées à $x = 1,71 m$.

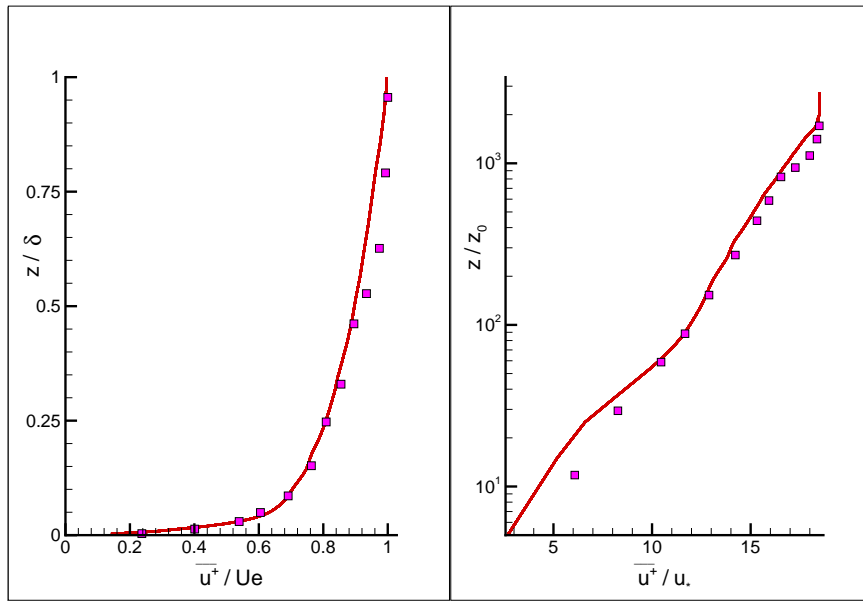


FIG. 4.30 – Vitesse moyenne axiale grandes échelles
 — Calcul numérique; ■ mesurées à $x = 1,91 m$.

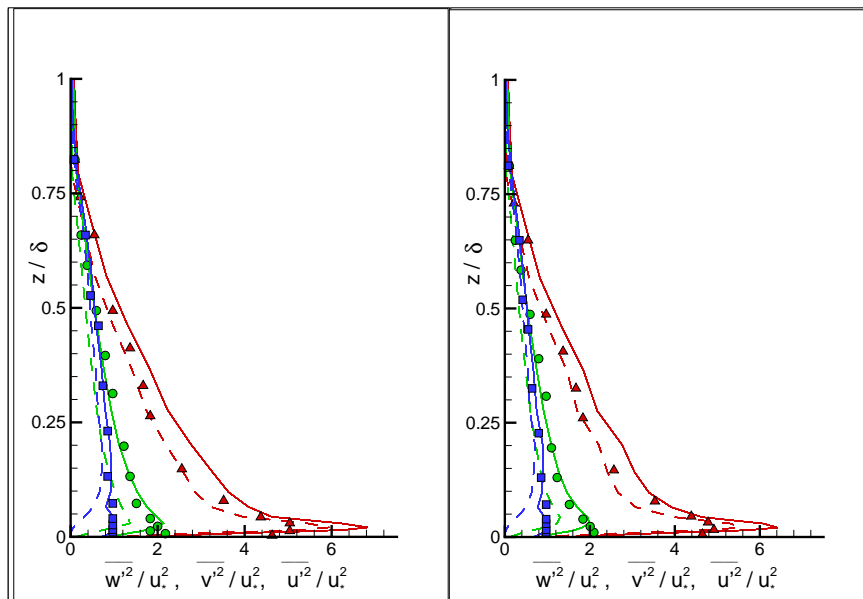


FIG. 4.31 – Profils de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse. Abscisses $x = 1,71 m$ (gauche); $x = 1,91 m$ (droite).
 Grandes échelles (---); Totale (—);
 Composante verticale w' : ■, transversale v' : ●, axiale u' : ▲.

Cas de présence de la colline

On montre dans les Figures 4.32 et 4.33 les profils des moyennes glissantes à trois abscisses : (gauche) au pied en amont de la colline, (centre) au sommet de la colline, (droite) au pied en aval de la colline.

Pour l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse, on peut observer que, en raison de la présence de la colline, le profil moyen calculé avec des échantillons compris entre $[1,0 s - 5,0 s]$ n'est pas encore dans la zone de convergence comme dans le cas du sol plat. Nous devons prendre le *temps de stabilité* un peu plus grand. On choisit $t_e = 6 s$.

On ne peut pas non plus admettre qu'un temps de calcul $t = 20T_t$ est statistiquement représentatif pour obtenir des profils moyens du champ dynamique dans le cas de présence de la colline. Dans la Figure 4.34 on montre la vitesse moyenne axiale à différents intervalles de temps, obtenue à la hauteur de la première maille de calcul $z = 3 mm$ de façon à observer l'effet d'homogénéité transversale.

On n'observe plus de différences entre les moyennes calculées avec des échantillons compris entre $[6 s - 50 s]$ et celles compris entre $[6 s - 60 s]$. Dans la suite, on présente les résultats des profils de vitesse moyenne avec des échantillons compris entre $[6 s - 50 s]$.

GONG & IBBETSON (1989) ont mesuré la vitesse à cinq positions sur l'axe du canal. On montre dans la Figure 4.35 les profils de la vitesse moyenne axiale grandes échelles rapportés à la vitesse extérieure (U_e) en fonction de la hauteur sur le sol rapportée à la hauteur du sommet de la colline h en échelle normale (gauche) et en échelle logarithmique (droite). La Figure 4.36 présente la différence entre la vitesse moyenne perturbée et non perturbée par la présence de la colline $\Delta \overline{u_s^\oplus} = \overline{u^\oplus} - \overline{u_0^\oplus}$ rapportée à la valeur de la vitesse moyenne non perturbée (sol plat).

Les Figures 4.37, 4.38 et 4.39 montrent respectivement les différences entre les valeurs moyennes des énergies cinétiques turbulentes des fluctuations de la vitesse pour les composantes axiales, transversales et verticales et celles des fluctuations non perturbées par la présence de la colline (sol plat) sur les cinq positions. Les calculs sont représentés par les lignes et les mesures par les symboles. Les auteurs de l'expérience montrent seulement deux profils de fluctuation de la vitesse pour la composante transversale, au pied en amont et au sommet de la colline.

4.3.5 Discussion

Dans le cas du sol plat, on observe un bon accord entre les mesures expérimentales et les résultats numériques tant pour la composante axiale de la vitesse moyenne grandes échelles que pour les fluctuations des trois composantes (Figures 4.27, 4.28, 4.29, 4.30 et 4.31). Il existe une petite sous-estimation de la vitesse moyenne très près du sol, $z \approx 2 \text{ mm}$ ($z/z_0 = 10$), pour les positions 1,71 m et 1,91 m de l'ordre de 15 % (Figures 4.29 et 4.30).

Comme dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982), on a ajouté l'énergie cinétique turbulente sous-maille selon (4.19) aux profils calculés avec LES pour obtenir les profils de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations totales de la vitesse. Ces profils sont en accord avec les mesures expérimentales pour les composantes transversales et verticales. Cependant, on trouve une sur-estimation légère pour la composante axiale très près du sol à $z \approx 5 \text{ mm}$, $z/\delta = 0,015$ (Figures 4.28 et 4.31).

La colline est vu par l'écoulement comme un obstacle dont la forme et la hauteur produit des perturbations supplémentaires. La valeur qu'on a estimé pour les temps caractéristique de la turbulence T_t avec des relations de turbulence homogène isotrope (4.13) sont encore plus loin de donner les bons ordres de grandeurs des échelles caractéristiques. On constate dans les profils des moyennes glissantes de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations de la vitesse (Figure 4.33), qu'il faut un temps de convergence plus long. L'effet de la présence de la colline affecte aussi la convergence du calcul vers une solution homogène dans le sens transversale de la vitesse axiale à cause d'une augmentation des fluctuations dans les trois directions. On a observé ce phénomène dans la Figure 4.34 où les valeurs de la vitesse axiale moyenné sur différents intervalles de temps à $z = 3 \text{ mm}$ commencent à présenter une stabilité transversale à partir de $t = 50 \text{ s}$. Il faut donc augmenter le temps de calcul d'un facteur 2 par rapport au cas du sol plat pour obtenir les statistiques du champ dynamique.

Les Figures 4.35 et 4.36 montrent un bon accord entre la vitesse moyenne grandes échelles calculée par l'approche LES et obtenue par les mesures expérimentales pour toutes les positions sur la colline. Il existe une légère sur-estimation au desous de $z = 6 \text{ mm}$ ($z''/h = 20$) pour la position du sommet de la colline qui est presque de 15 % à $z = 2 \text{ mm}$ (première mesure au desus du sol dans la Figure 4.36).

Les profils de la différence entre les moyennes des énergies cinétiques turbulentes des fluctuations totales de la vitesse perturbée et non perturbée par la présence de la colline (Figures 4.37, 4.38 et 4.39) montrent que les valeurs calculées sont légèrement plus faibles par rapport aux mesures expérimentales dans la partie supérieure de la couche limite ($z > 20 \text{ cm}$). Par contre, à cette hauteur il n'existe aucun argument qui permet d'expliquer cette différence. Les auteurs de l'expérience affirment que les fluctuations de la vitesse augmentent à cause de la présence de la colline sur presque toute la couche limite.

On peut observer dans la Figure 4.37 que la tendance des profils de la perturbation de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations axiales de la vitesse à cause de la présence de

la colline rapportées à la valeur moyenne non perturbée est la même que celle trouvée par les expérimentateurs pour les cinq positions sur la colline. Il existe une sous-estimation pour la position au pied en amont de la colline et une sur-estimation pour les autres positions. La dernière devient plus importante dans la zone de proche paroi ($z < 9 \text{ mm}$) pour les deux positions en aval de la colline.

Les profils de perturbation de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations dans la direction transversale à cause de la présence de la colline, rapportées à la valeur moyenne (Figure 4.38) montrent aussi un écart dans cette zone pour la position du sommet de la colline.

Les profils de la perturbation de la colline de même grandeur mais sur la direction verticale (Figure 4.39) montrent que l'on arrive aux mêmes considérations, elles sont sur-estimées pour les positions en aval de la colline par rapport aux mesures expérimentales dans la zone bas de la couche limite ($z < 22 \text{ mm}$) tandis qu'il existe un bon accord pour les positions en amont de celle-ci.

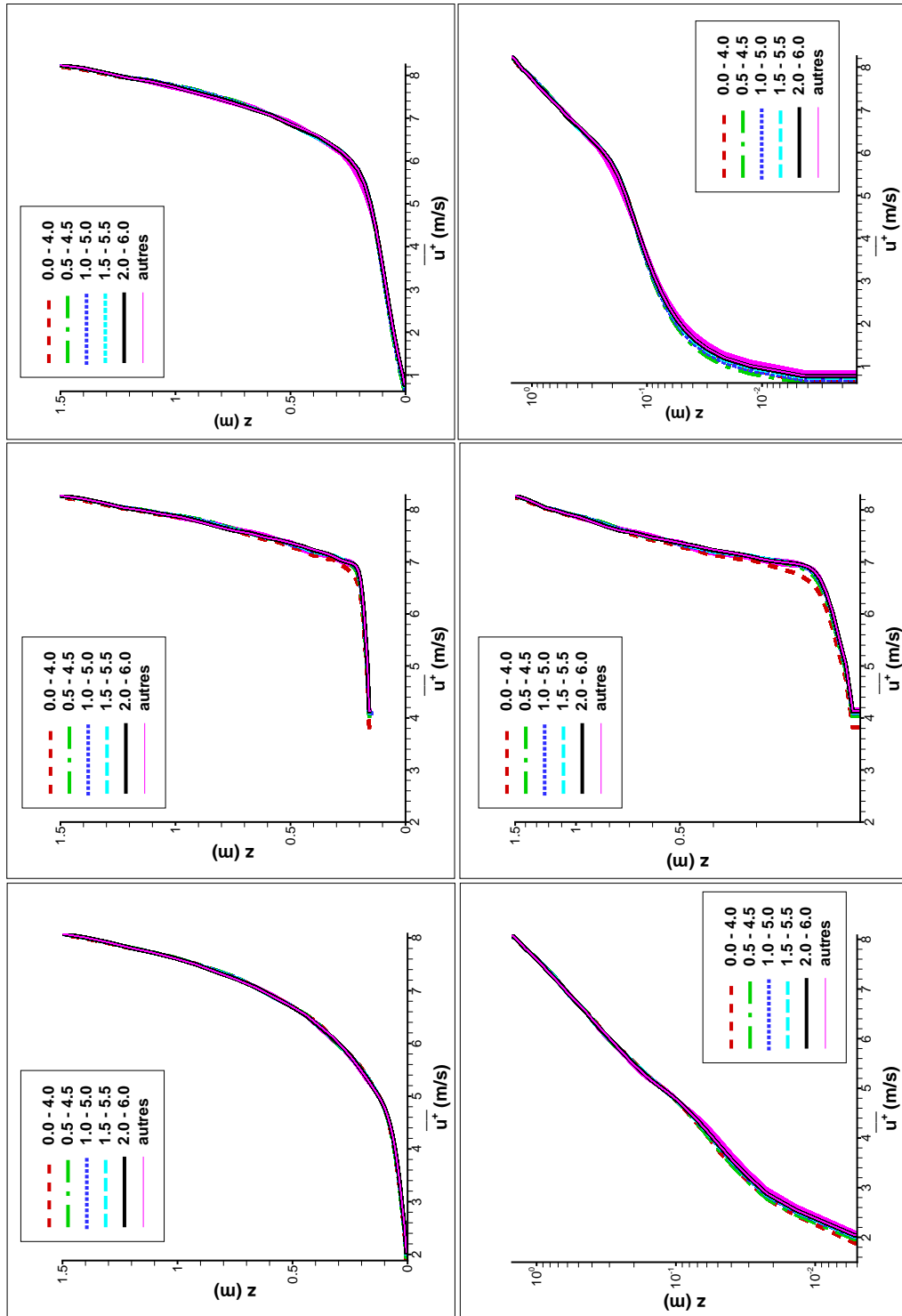


FIG. 4.32 – Profils de moyennes glissantes de la vitesse axiale grandes échelles.

(gauche) : au pied en amont de la colline, (centre) : au sommet de la colline, (droite) : au pied en aval de la colline.

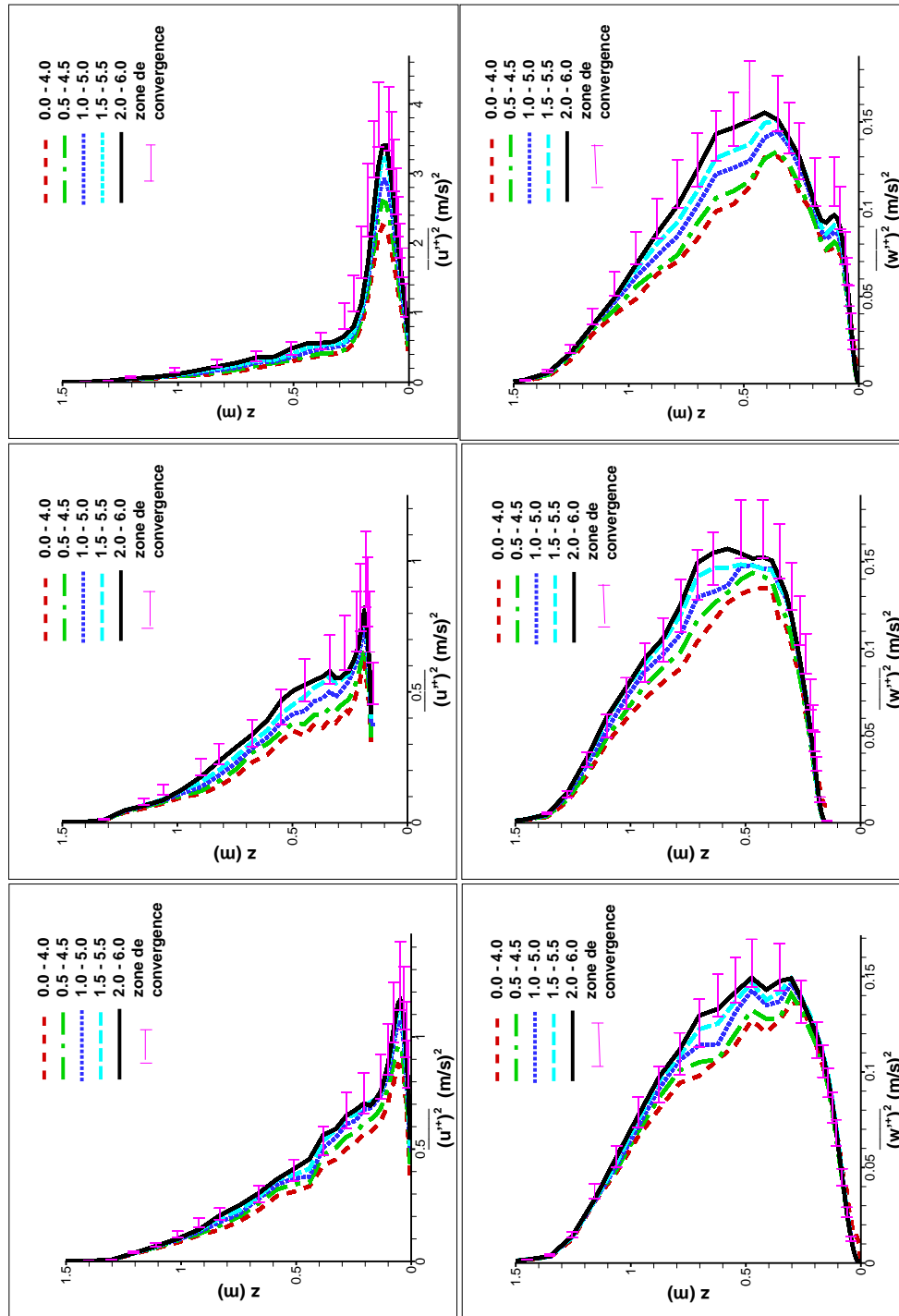


FIG. 4.33 – Profils des moyennes glissantes de l'énergie cinétique turbulente des fluctuations axiales et verticales de la vitesse grandes échelles.

(gauche) : au pied en amont de la colline, (centre) : au sommet, (droite) : au pied en aval de la colline.

(supérieur) : fluctuations axiales, (inférieur) : fluctuations verticales.

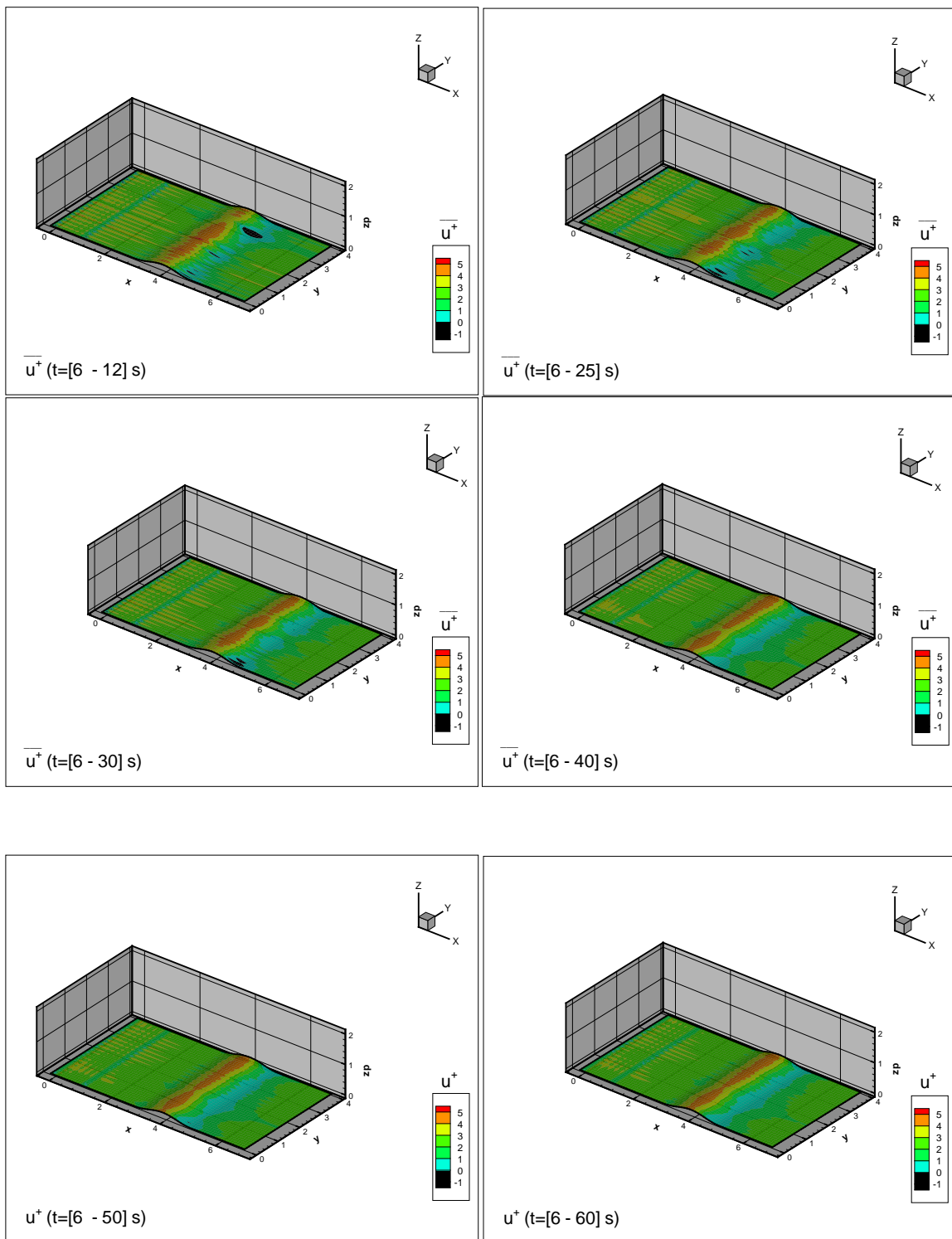


FIG. 4.34 – Vitesse moyenne axiale grandes échelles calculée avec différents intervalles de temps à $z = 3$ mm.

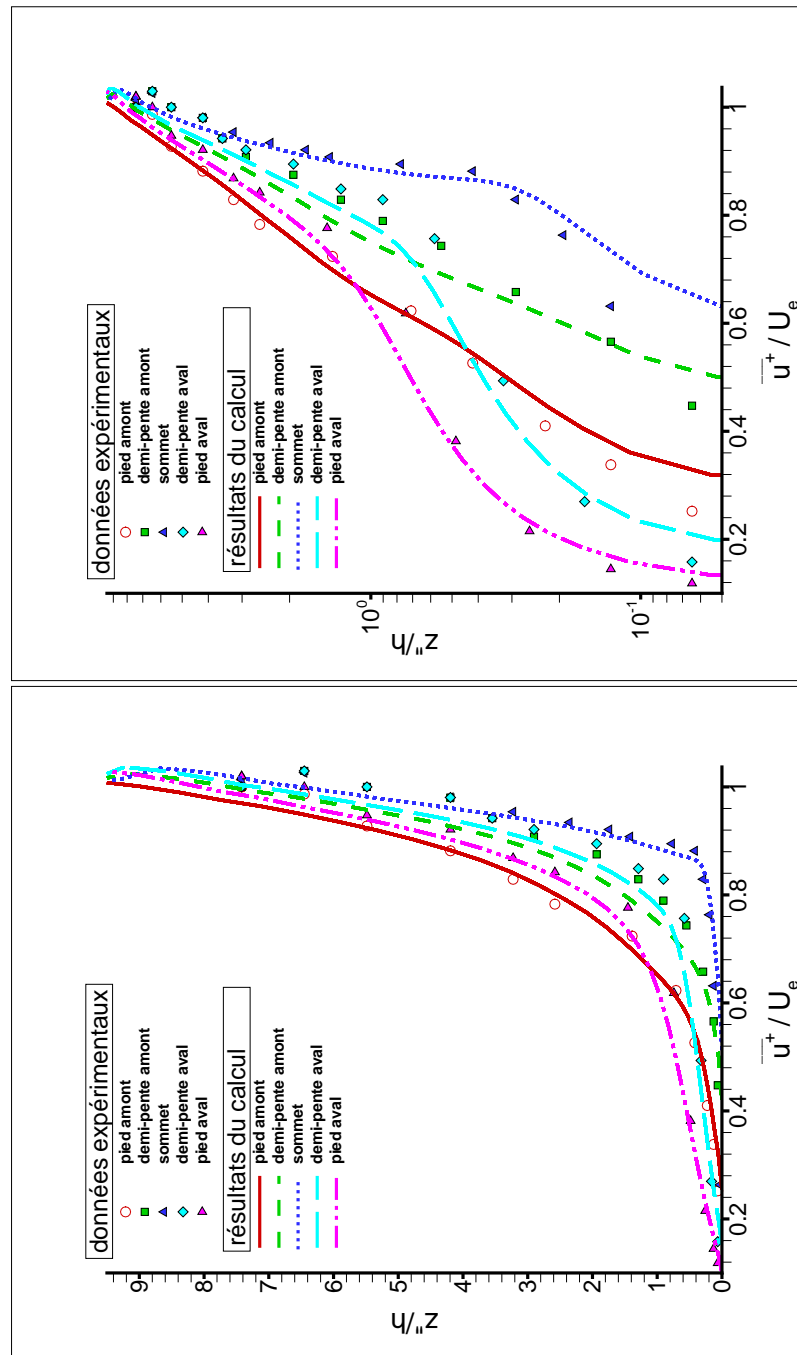


FIG. 4.35 – Vitesse moyenne axiale $\overline{u^+}$ rapportée à la vitesse extérieure U_e pour cinq positions sur la colline en fonction de la hauteur sur le terrain z'' rapportée à la hauteur du sommet h .

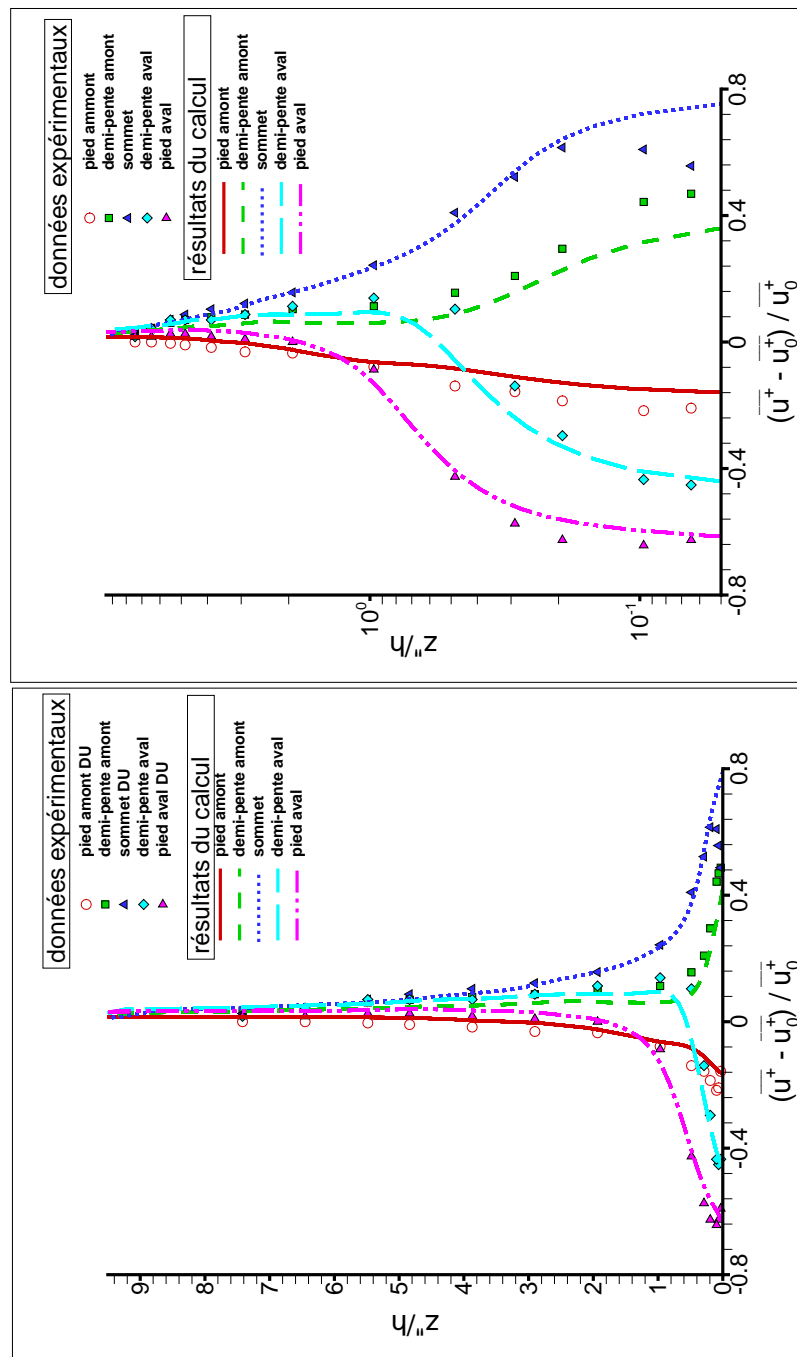


FIG. 4.36 – Différence entre la vitesse moyenne axiale perturbée et non perturbée par la présence de la colline $\overline{u^+} - \overline{u_0^+}$ rapportée à la vitesse moyenne axiale non perturbée $\overline{u_0^+}$ pour cinq positions sur la colline en fonction de la hauteur sur le terrain z'' rapportée à la hauteur du sommet h .

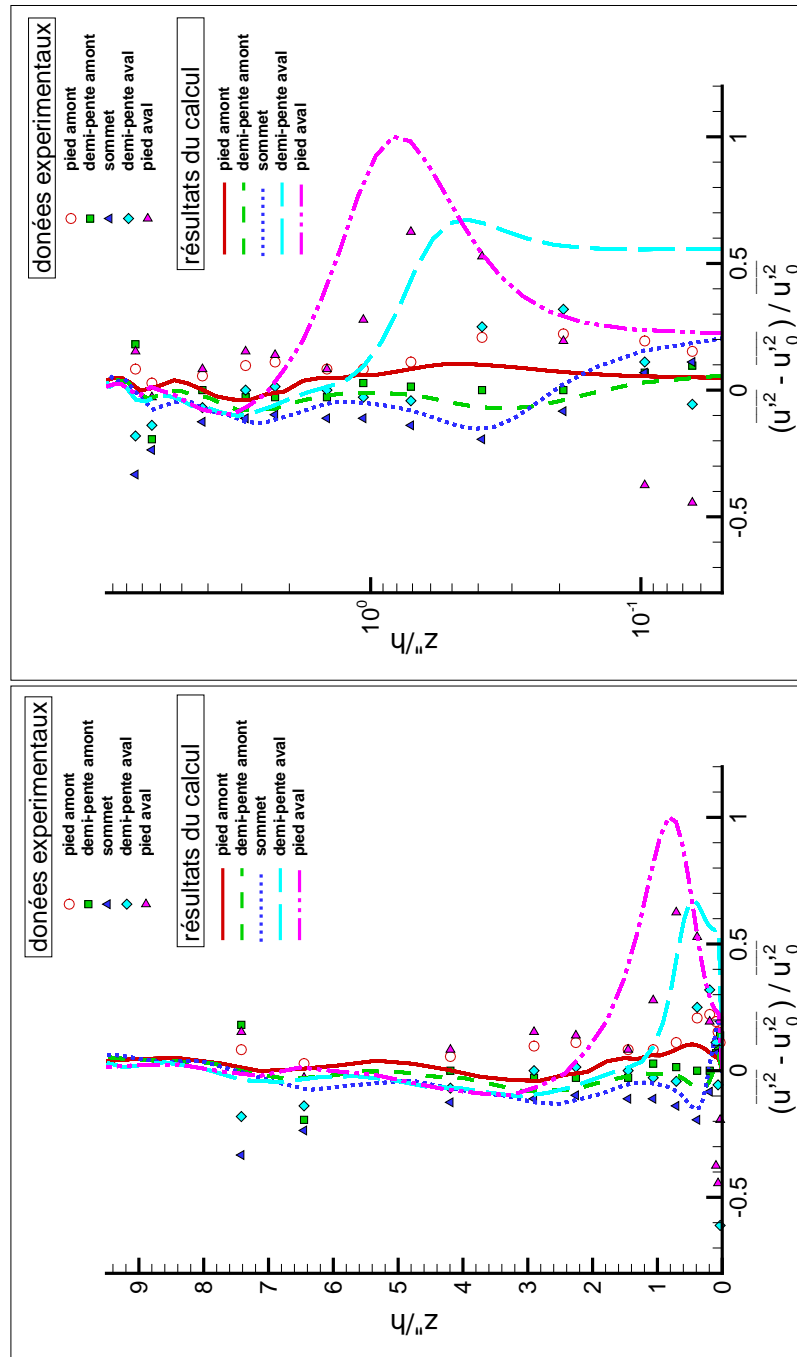


FIG. 4.37 – Différence entre les énergies cinétiques turbulentes des fluctuations de la vitesse axiale perturbée en non perturbée par la présence de la colline $\overline{u'^2} - \overline{u_0'^2}$ rapportée à la moyenne de l'énergie cinétique turbulente de la fluctuation axiale non perturbée $\overline{u_0'^2}$ pour cinq positions comme fonction de la hauteur sur le terrain z'' rapportée à la hauteur du sommet h .

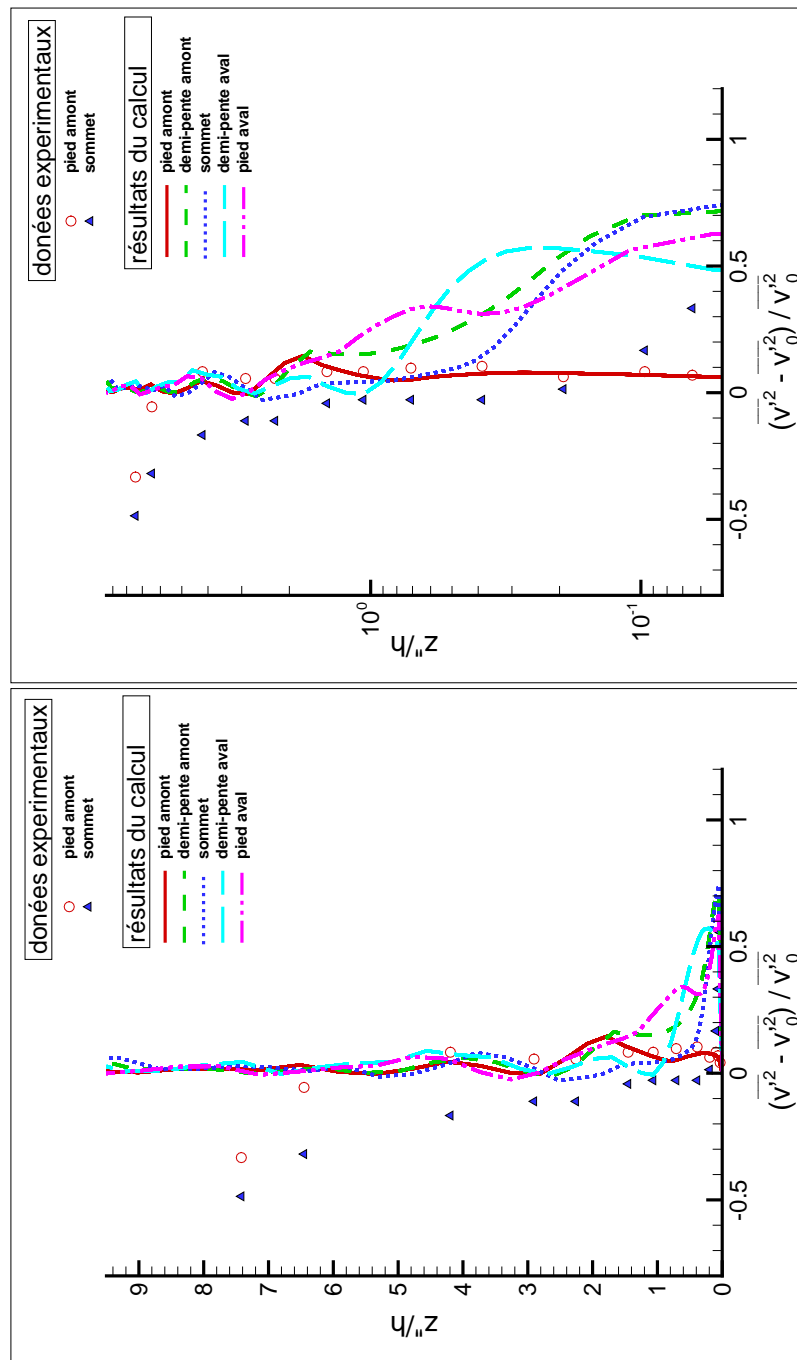


FIG. 4.38 – Différence entre les énergies cinétiques turbulentes des fluctuations de la vitesse transversale perturbée en non perturbée par la présence de la colline $\overline{v'^2} - \overline{v_0'^2}$ rapportée à la moyenne de l'énergie cinétique turbulente de la fluctuation transversale non perturbée $\overline{v_0'^2}$ pour cinq positions comme fonction de la hauteur sur le terrain z'' rapportée à la hauteur du sommet h .

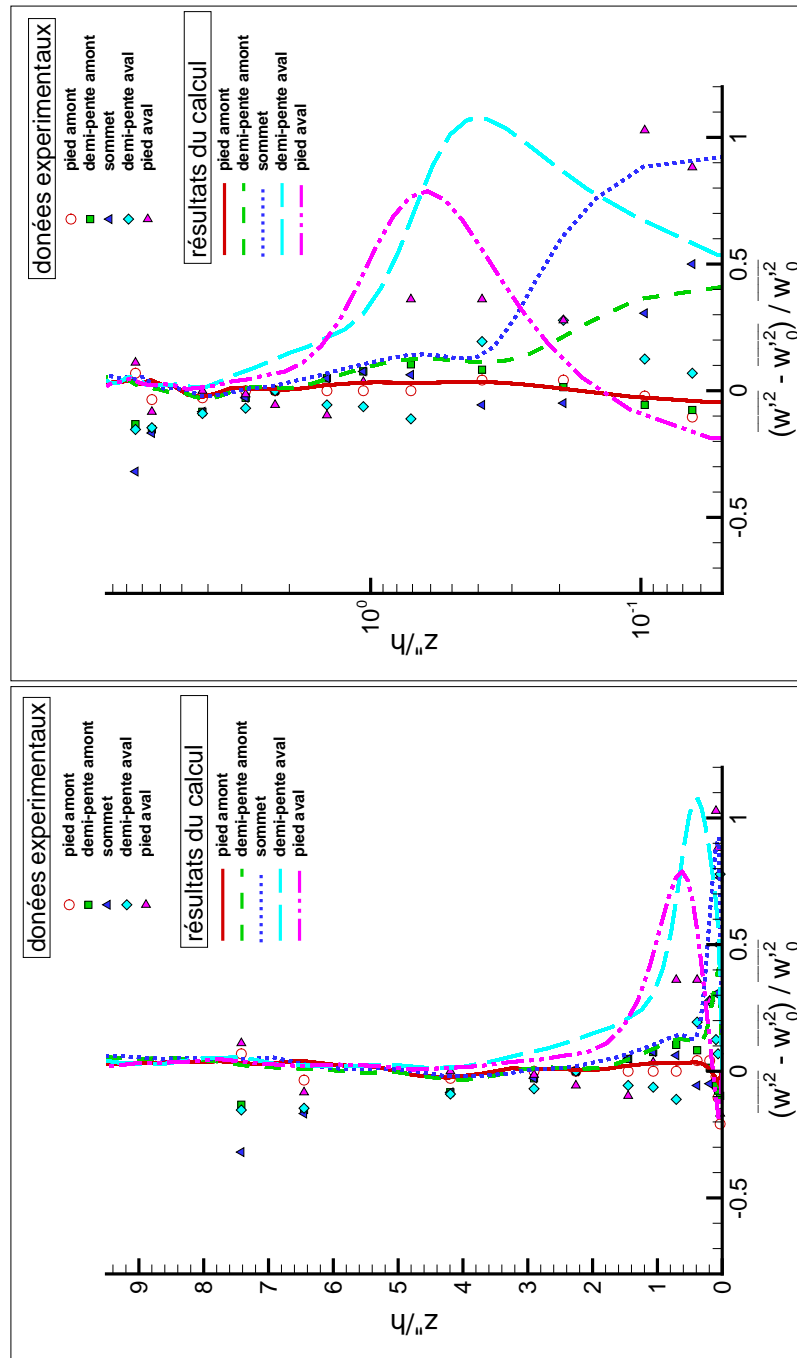


FIG. 4.39 – Différence entre les énergies cinétiques turbulentes des fluctuations de la vitesse verticale perturbée en non perturbée par la présence de la colline $\overline{w'^2} - \overline{w_0'^2}$ rapportée à la moyenne de l'énergie cinétique turbulente de la fluctuation verticale non perturbée $\overline{w_0'^2}$ pour cinq positions comme fonction de la hauteur sur le terrain z'' rapportée à la hauteur du sommet h .

Chapitre 5

LE MODÈLE COUPLÉ LES-STOCHASTIQUE

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, on va introduire le suivi lagrangien des particules fluides, décrit dans le Chapitre 2, couplé avec la simulation des grandes échelles (LES) pour obtenir un modèle complet de dispersion atmosphérique de particules fluides porteuses d'espèces passives ou réactives.

On présentera ensuite les expériences de FACKRELL & ROBINS (1982) et GONG (1991) pour valider ce modèle en ce qui concerne les champs de concentration. Dans la première expérience, il s'agit des mesures de concentration de propane issu d'une source ponctuelle surélevée et placée dans une couche limite neutre sur un sol plat. Pour la deuxième expérience, une source de CO_2 surélevée est placée en amont d'une colline bidimensionnelle de faible pente en atmosphère neutre. Des mesures de concentration ont été faites sur l'axe du canal à différentes positions.

5.2 Description et mise en place du modèle couplé

Dans le chapitre précédent (§ 4.2) nous avons comparé les mesures expérimentales de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) relatives au champ de vitesse avec les résultats numériques de LES et on a pu constater qu'avec le modèle de sous-maille *Smagorinsky Dynamique* les résultats étaient très bons. Dans la suite, on utilisera ce modèle couplé avec le modèle stochastique pour le suivi lagrangien de particules fluides porteuses de scalaire.

5.2.1 Les équations

L'évolution temporelle de la vitesse lagrangienne d'une particule peut être décomposée en une partie qui suit les mouvements des grandes échelles de l'écoulement porteur et une

partie qui représente le mouvement des petites échelles non résolues pour l'approche LES :

$$\frac{d\hat{U}_{i(m,t)}}{dt} = \left(\frac{du_{i(m,t)}}{dt} \right)^\oplus + \frac{d\hat{u}'_{i(t)}}{dt}. \quad (5.1)$$

L'application du filtre sur la dérivée totale donne deux termes selon on a vu dans le Chapitre 1 (§ 1.4.1, § 1.4.2) et la partie non résolue peut être modélisée avec l'équation stochastique (2.54). L'évolution temporelle de la vitesse lagrangienne peut s'écrire donc :

$$\frac{d\hat{U}_{i(m,t)}}{dt} = \underbrace{\frac{du_{i(m,t)}^\oplus}{dt} + \frac{\partial \mathcal{R}_{ij(m,t)}}{\partial x_j}}_{LES} + \underbrace{\frac{d\hat{u}'_{i(t)}}{dt}}_{stochastique}. \quad (5.2)$$

On détermine la vitesse lagrangienne d'une particule fluide en prenant les résultats du champ de vitesse grandes échelles résolu par le code LES ($u_{i(m,t)}^\oplus$) selon l'équation (1.50) avec le modèle de sous-maille (1.57) pour le tenseur de *Reynolds* ($\mathcal{R}_{ij(m,t)}$) et les petites échelles sont obtenues avec l'équation stochastique d'évolution temporelle de la fluctuation de vitesse lagrangienne ($\hat{u}'_{i(t)}$). Cette dernière présente un terme de type déterministe sous la forme du tenseur \mathcal{G}_{ij} qui peut être modélisé en supposant que la turbulence est inhomogène, isotrope, non-stationnaire (2.56). Ainsi, les grandeurs eulériennes obtenues en chaque point du maillage de calcul par le code LES sont utilisées pour calculer le tenseur \mathcal{G}_{ij} dans chaque maille du domaine.

Il suffit donc de connaître ces grandeurs à l'instant (t) et à la position ($\hat{X}_{i(m,t)}$), où se trouve la particule fluide en utilisant une méthode d'interpolation à l'aide des nœuds du maillage où se trouve la particule fluide comme l'on avait proposée dans le Chapitre 2 (§ 2.3.3) (2.48) et Figure 2.1. Les grandeurs eulériennes à interpoler et nécessaires pour résoudre l'équation stochastique relative à l'évolution de la fluctuation de la vitesse lagrangienne sont :

- L'énergie cinétique turbulente du champ résiduel $E_{(\hat{X}_{i,t})}^\ominus$.
- L'évolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente résiduelle modélisée par l'équation (2.57) $\frac{dE_{(\hat{X}_{i,t})}^\ominus}{dt}$.
- La dissipation visqueuse $\varepsilon_{(\hat{X}_{i,t})}$.
- Le tenseur *Reynolds* de sous-maille pour résoudre l'expression $\frac{\partial \mathcal{R}_{ij}}{\partial x_j}_{(\hat{X}_{i,t})}$.
- Le champ de vitesse grandes échelles $u_{i(\hat{X}_{i,t})}^\oplus$.

On a travaillé avec deux méthodes d'interpolation : Celle des polynômes de Lagrange et celle qui interpole les grandeurs en fonction de l'inverse du carré de la distance entre la position de la particule et les nœuds du maillage (dite barycentrique). Ces méthodes sont

décrites dans l'Annexe B.

L'équation différentielle d'évolution de la trajectoire lagrangienne d'une particule fluide à l'aide du modèle choisi pour le tenseur \mathcal{G}_{ij} (2.56) peut s'écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\hat{X}_{i(m,t)}}{dt} = \hat{U}_{i(\hat{X}_i,t)}, \\ \frac{d\hat{U}_{i(\hat{X}_i,t)}}{dt} = \frac{du_{i(\hat{X}_i,t)}^\oplus}{dt} + \frac{\partial \mathcal{R}_{ij}}{\partial x_j}(\hat{X}_i,t) + \frac{3}{2} \frac{\hat{u}'_{i(\hat{X}_i,t)}}{E_{(\hat{X}_i,t)}^\ominus} \left(\frac{1}{3} \frac{dE^\ominus}{dt}(\hat{X}_i,t) - \frac{C_0 \varepsilon(\hat{X}_i,t)}{2} \right) \\ \quad + \sqrt{C_0 \varepsilon(\hat{X}_i,t)} \eta(t). \end{array} \right. \quad (5.3)$$

5.2.2 La discrétisation du modèle

Les équations différentielles lagrangiennes (5.3) sont discrétisées sous leur forme classique (Durbin (1980)) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{u}'_{i(\hat{X}_i,t+\Delta t)} = \hat{u}'_{i(\hat{X}_i,t)} + \left[\gamma_u(\hat{X}_i,t) + \alpha_u(\hat{X}_i,t) \hat{u}'_{i(\hat{X}_i,t)} + \beta_u(\hat{X}_i,t) \eta(t) \right] \Delta t, \\ \hat{U}_{i(\hat{X}_i,t+\Delta t)} = u_{i(\hat{X}_i,t+\Delta t)}^\oplus + \hat{u}'_{i(\hat{X}_i,t+\Delta t)}, \end{array} \right. \quad (5.4)$$

où les paramètres α_u , β_u et γ_u sont :

$$\begin{aligned} \alpha_u(\hat{X}_i,t) &= \frac{3}{2} \frac{1}{E_{(\hat{X}_i,t)}^\ominus} \left(\frac{1}{3} \frac{dE^\ominus}{dt}(\hat{X}_i,t) - \frac{C_0 \varepsilon(\hat{X}_i,t)}{2} \right), \\ \beta_u(\hat{X}_i,t) &= \sqrt{C_0 \varepsilon(\hat{X}_i,t)}, \\ \gamma_u(\hat{X}_i,t) &= \frac{\Delta \mathcal{R}_{ij}}{\Delta x_j}(\hat{X}_i,t). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Et la position future de la particule fluide est donnée par :

$$\hat{X}_{i(m,t+\Delta t)} = \hat{X}_{i(m,t)} + \left[\frac{\hat{U}_{i(\hat{X}_i,t+\Delta t)} + \hat{U}_{i(\hat{X}_i,t)}}{2} \right] \Delta t. \quad (5.6)$$

Ce dernier modèle couplé sera utilisé dans la suite pour simuler la dispersion des particules fluides.

5.2.3 Conditions initiales pour les particules fluides

Initialement, les particules fluides sont placées à la source et sont soumises à un champ de vitesse égal à la vitesse des grandes échelles plus une fluctuation aléatoire dont les caractéristiques statistiques dépendent du champ eulérienne grandes échelles :

$$\begin{cases} \langle \hat{u}'_{i(\hat{X}_i,0)} \rangle = 0, \\ \sigma_{\hat{u}'_{i(\hat{X}_i,0)}} = \sqrt{\langle \hat{u}'^2_{i(\hat{X}_i,0)} \rangle} = \frac{2}{3} \sqrt{E_{(\hat{X}_i,0)}^\ominus}. \end{cases} \quad (5.7)$$

Les valeurs initiales de la position et de la vitesse lagrangienne des particules fluides sont calculées en tenant compte de la position de la source, de son diamètre et des conditions du champ de vitesse :

$$\begin{aligned} \hat{X}_{i(m,0)} &= \begin{cases} x_s + d_s \mathcal{R}_{nd}(0)_p, \\ y_s + d_s \mathcal{R}_{nd}(0)_q, \\ z_s + d_s \mathcal{R}_{nd}(0)_r, \end{cases} \\ \hat{U}_{i(\hat{X}_i,0)} &= u_{i(\hat{X}_i,0)}^\oplus \sigma_{\hat{u}'_{i(\hat{X}_i,0)}} \mathcal{R}_{nd}(0)_n, \end{aligned} \quad (5.8)$$

où x_s, y_s, z_s sont les coordonnées du centre de la source de diamètre d_s et $\mathcal{R}_{nd}(0)_i$ avec $i = p, q, r, n, \dots$ sont des valeurs aléatoires équiprobables sur $[0, 1]$ de moyenne nulle, et non corrélées entre elles.

5.2.4 Conditions aux limites pour les particules fluides

Quand les particules fluides arrivent aux limites du domaine de calcul, il faut leur donner une nouvelle position et une nouvelle vitesse.

- Limites latérales : Quand une particule fluide sort du domaine de calcul par un côté, on va considérer qu'elle est remplacée par une autre particule fluide qui entre dans le domaine à la même vitesse. Cela est en accord avec les conditions aux limites des écoulements de canal.

Une autre façon de voir ce phénomène est de dire que la particule fluide subit un rebond élastique.

- Limite inférieure : Quand une particule fluide arrive au sol, elle subit un rebond élastique.

- Limite en aval de l'écoulement : Quand une particule fluide arrive à la fin du domaine de calcul, on ne la suivra plus.
- Limite supérieure : Il est prévu que le panache n'arrive pas au dessus de cette limite. Si une particule fluide va au delà de la hauteur du domaine de calcul, elle subit un rebond élastique (condition aux limites pour les écoulements de canal).

5.2.5 Méthode de calcul de concentration des particules fluides

Pour calculer la moyenne et l'écart type de la concentration des particules fluides dans le plan axial en aval de la source, on va construire des boîtes de comptage. Les centres des boîtes seront placées sur les abscisses des stations de mesure expérimental et sur le plane axial qui contient à la source.

On compte la quantité de particules fluides qui se trouvent dans chaque boîte de comptage pour calculer les profils moyens et les écart-types.

5.3 Validation dans le cas de l'expérience de Fackrell & Robins (1982)

Dans cette partie, on va appliquer le modèle couplé LES-stochastique (5.3) pour le suivi de particules fluides et comparer les résultats statistiques du champ de concentration avec les mesures expérimentales du gaz propane rejeté depuis une source ponctuelle surélevée sur un sol plat placée à une hauteur de $z_s = 0,19\delta$.

Nous ne tenons pas compte de la diffusion moléculaire car cela est ici négligeable. Dans le prochain chapitre, nous présenterons un modèle de diffusion adapté à la méthode de suivi des particules fluides.

Les mesures ont été faites sur le plan axial où est placée la source à différentes abscisses (4.14). Cela est pris en compte pour construire le maillage de calcul selon la Figure 5.1.

Les données des profils de concentration de propane à différentes stations de mesure, réalisées par FACKRELL & ROBINS (1982), sont comparées avec les résultats de la simulation numérique du modèle couplé LES-stochastique (5.3).

Pour calculer la concentration des particules fluides on a divisé la hauteur de la couche limite en 12 boîtes de comptage de tailles $\Delta b = \Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,1 m$.

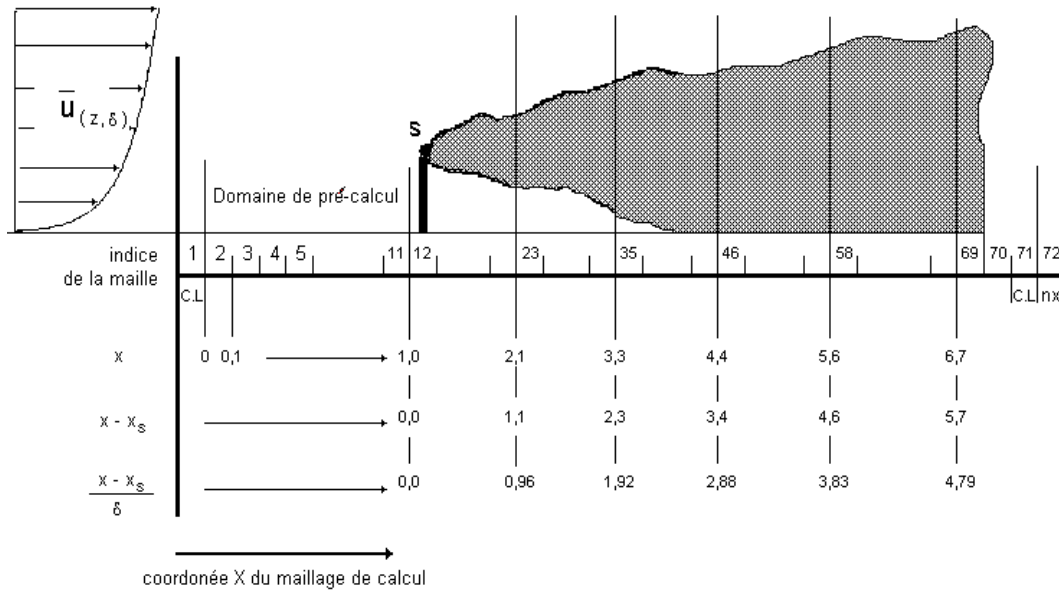


FIG. 5.1 – Disposition des boîtes du maillage de calcul et stations de mesure de la concentration de propane (FACKRELL & ROBINS (1982)).

Selon les résultats de validation dynamique du code LES, on a récupéré tous les grandeurs instantanées calculées par le code à $t_e = 9$ s (temps de stabilité dynamique) afin de commencer à injecter des particules fluides depuis la source. On va présenter les résultats du calcul de la concentration moyenne et de l'écart-type pour trois alternatives :

- C_1 : Pour ce cas on a utilisé une interpolation avec la méthode des Polynômes de Lagrange. On a lancé 10 particules par pas de temps depuis la source, ce qui fait 50.000 particules par seconde avec un pas de temps de calcul $\Delta t_G = 2.10^{-4}$ s.
- C_2 : Dans ce cas on utilise la méthode d'interpolation de type barycentrique. Comme dans le cas précédent, on a lancé 10 particules par pas de temps depuis la source.
- C_3 : On utilise la même méthode d'interpolation qu'en C_2 mais on a doublé le flux de particules à la source. Dans ce cas, on a lancé 20 particules à chaque pas de temps, ce qui fait 100.000 particules par seconde.

Dans tous les cas, le modèle de sous-maille est le modèle *Smagorinsky Dynamique*.

5.3.1 Résultats

Les données de la position et de la vitesse des particules ont été enregistrées tous les 0,25 s après d'avoir attendu 3 s, nécessaires pour obtenir un régime stationnaire du nombre des particules présentes dans le domaine de calcul. La Figure 5.2 montre l'évolution

temporelle de la quantité de particules fluides contenues dans le domaine de calcul pour les trois cas d'étude. Les oscillations dans l'évolution temporelle du nombre de particules

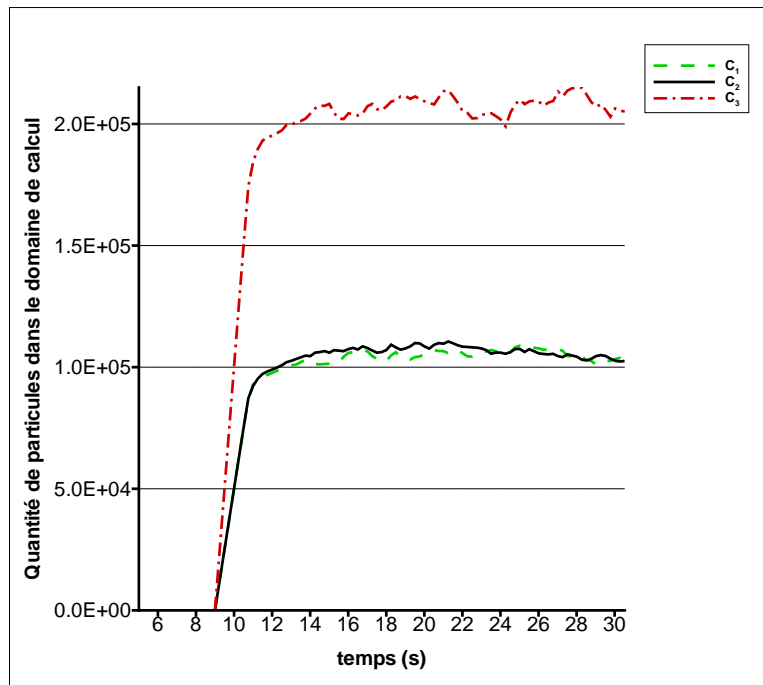


FIG. 5.2 – Evolution de la quantité des particules (NP) dans le domaine de calcul.

C_1 : calcul : méthode d'interpolation des polynômes de Lagrange. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.

C_2 : calcul : méthode d'interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.

C_3 : calcul : méthode d'interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 100.000 p/s.

fluides dans le domaine de calcul (NP) est due au fait que les particules qui sortent du domaine en aval de l'écoulement sont portées par des grosses structures cohérentes et leur nombre n'est pas instantanément compensé par celles qui sont injectées depuis la source à chaque pas du temps.

On s'aperçoit aussi que dans le domaine de calcul, on arrive à suivre plus de 100.000 particules au même instants dans les cas C_1 et C_2 et plus de 200.000 particules pour C_3 .

Le temps physique total de la simulation, pour le suivi des particules, depuis l'instant de rejet ($t - t_e$) a été de 22 s, ce qui a permis d'obtenir 19 s utiles pour le calcul des profils de concentration moyenne. Les temps de calcul pour les cas C_1 , C_2 et C_3 ont été de 525.505 s (6 jours et 2 heures), 182.491 s (2 jours et 3 heures) et 506.235 s (5 jours et 21 heures) respectivement.

On peut en déduire que le temps de calcul avec la méthode d'interpolation des Polynômes de Lagrange est 2,9 fois plus grand que celui pour la méthode barycentrique. Pour cette dernière méthode d'interpolation, si on double la quantité de particules à suivre, le temps de calcul est presque 2,8 fois plus grand.

Dans la totalité de la simulation on a suivi 1.165.390 particules fluides dans le cas C_1 , 1.165.866 pour C_2 et 2.241.014 pour C_3 .

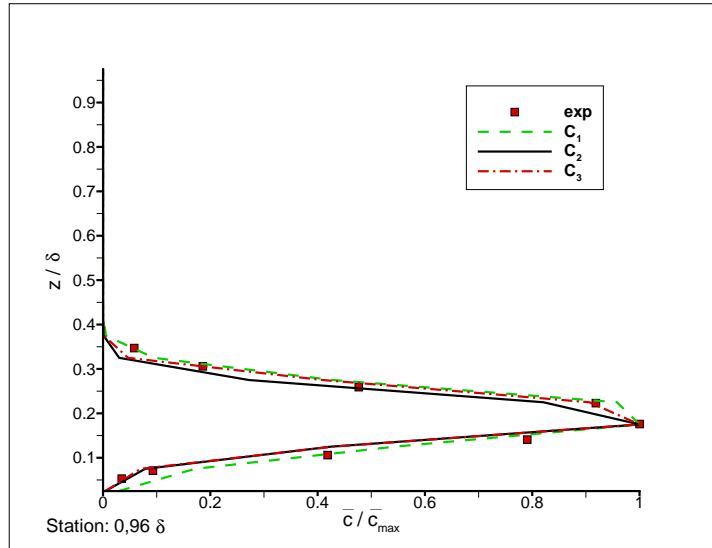
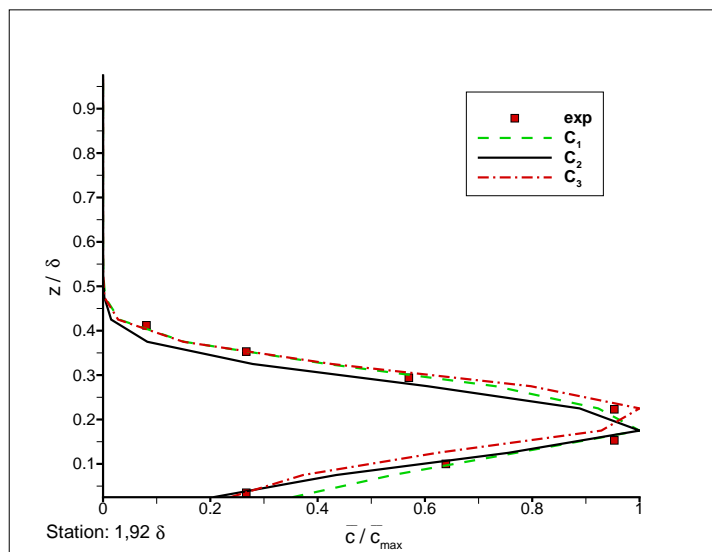
Les profils de la concentration moyenne sont rapportés à leurs valeurs maximales et comparés aux mesures expérimentales.

Les Figures 5.3, 5.4, 5.5, 5.6 et 5.7, montrent les comparaisons entre les profils de la concentration moyenne calculée par le modèle LES-stochastique et mesurée par FACKRELL & ROBINS (1982) aux abscisses $(x - x_s)/\delta = 0,96 ; 1,92 ; 2,88 ; 3,83$ et $4,79$ respectivement.

Les Figures 5.8, 5.9, 5.10, 5.11 et 5.12 présentent les comparaisons des écart-types de la concentration aux mêmes abscisses.

La Figure 5.13 montre des panaches instantanés des particules fluides à $t - t_e = 0,25 s ; 0,50 s ; 0,75 s$ et $1,50 s$ de temps physique.

Les Figures 5.14, 5.15 et 5.16 présentent quelques trajectoires des particules fluides et l'évolution longitudinale et vertical de leur vitesse.

FIG. 5.3 – Abscisse $x - x_s = 0,96\delta$.FIG. 5.4 – Abscisse $x - x_s = 1,92\delta$.

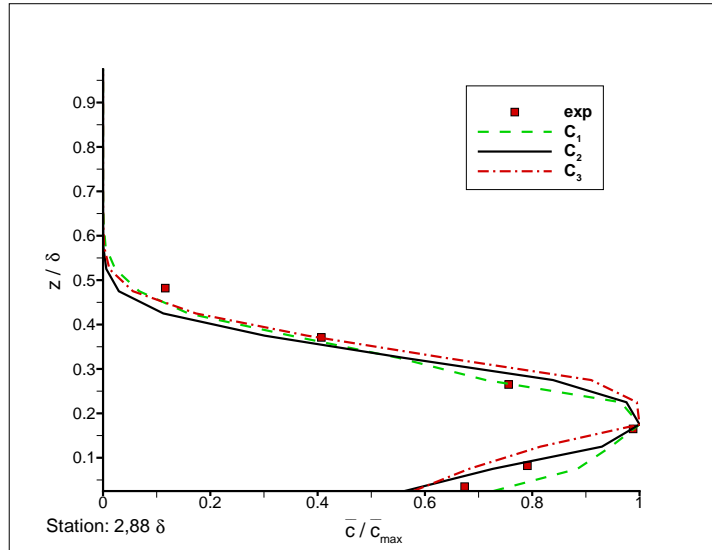
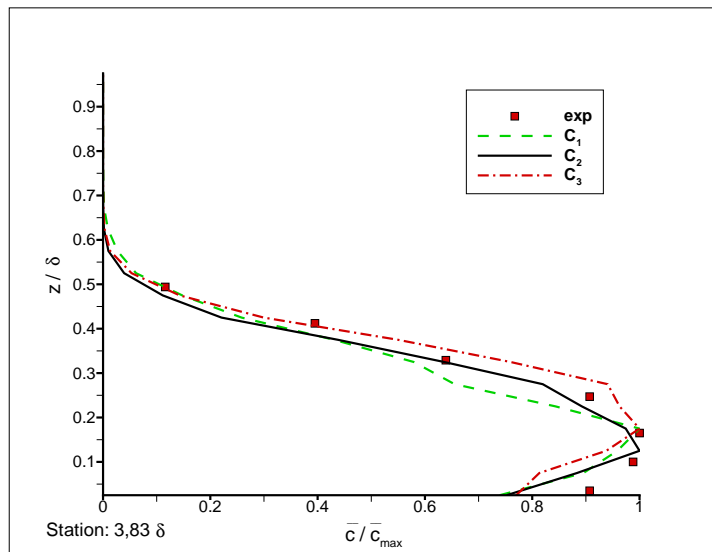
Profils de la concentration moyenne du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapportés à leur valeur maximale.

■ exp : mesures expérimentales.

C_1 : Interpolation des polynômes de Lagrange. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.

C_2 : Interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.

C_3 : Interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 100.000 p/s.

FIG. 5.5 – Abscisse $x - x_s = 2,88\delta$.FIG. 5.6 – Abscisse $x - x_s = 3,83\delta$.

Profils de la concentration moyenne du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapportés à leur valeur maximale.

■ exp : mesures expérimentales.

C_1 : Interpolation des polynômes de Lagrange. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.

C_2 : Interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.

C_3 : Interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 100.000 p/s.

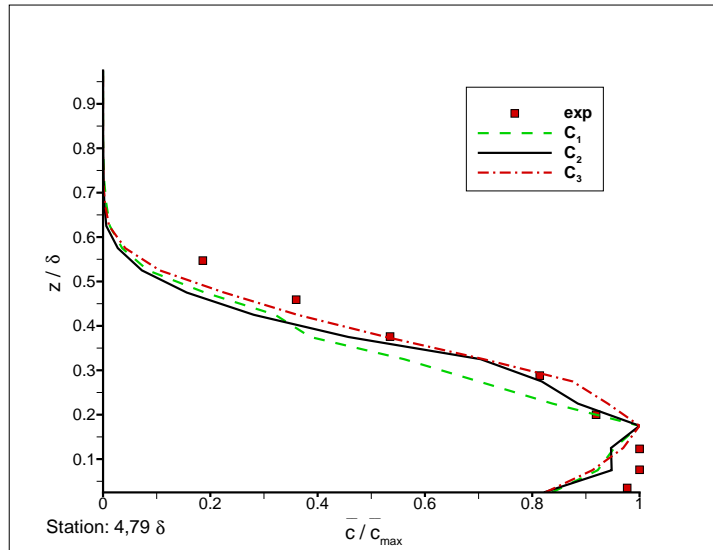


FIG. 5.7 – Profils de la concentration moyenne du gaz passif (propane) issu d’une source ponctuelle rapportés à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 4,79\delta$.

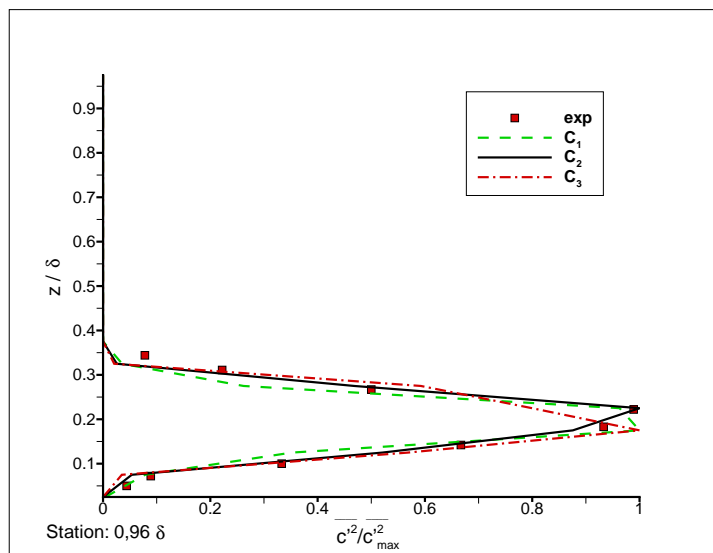
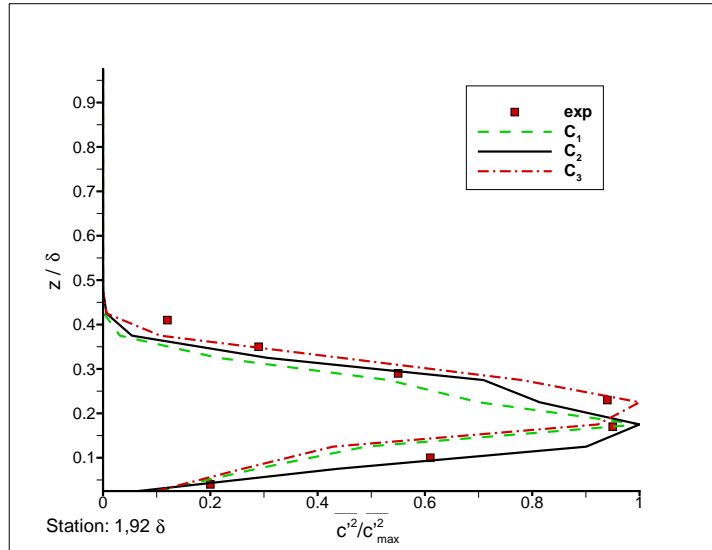
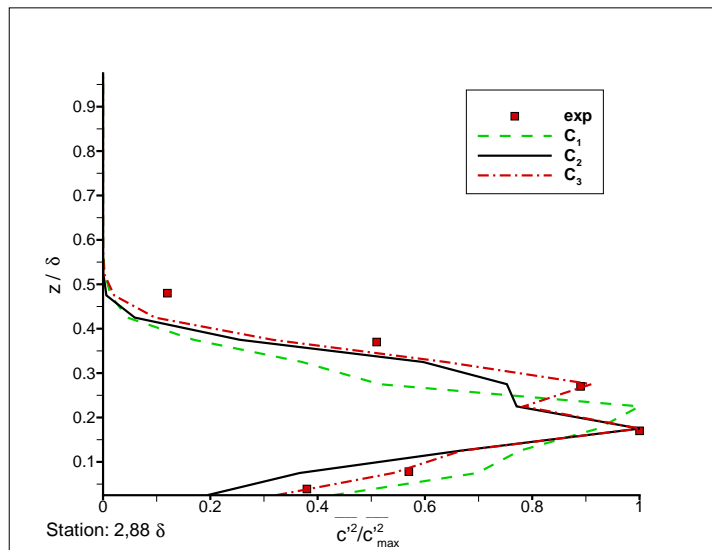


FIG. 5.8 – Profils de l’écart-type de la concentration du gaz passif (propane) issu d’une source ponctuelle rapporté à leur valeur maximale. Abscisse $x - x_s = 0,96\delta$.

- exp : mesures expérimentales.
- C_1 : Interpolation des polynômes de Lagrange. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.
- C_2 : Interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.
- C_3 : Interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 100.000 p/s.

FIG. 5.9 – Abscisse $x - x_s = 1,92\delta$.FIG. 5.10 – Abscisse $x - x_s = 2,88\delta$.

Profils de l'écart-type de la concentration du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapporté à leur valeur maximale.

■ exp : mesures expérimentales.

C_1 : Interpolation des polynômes de Lagrange. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.

C_2 : Interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.

C_3 : Interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 100.000 p/s.

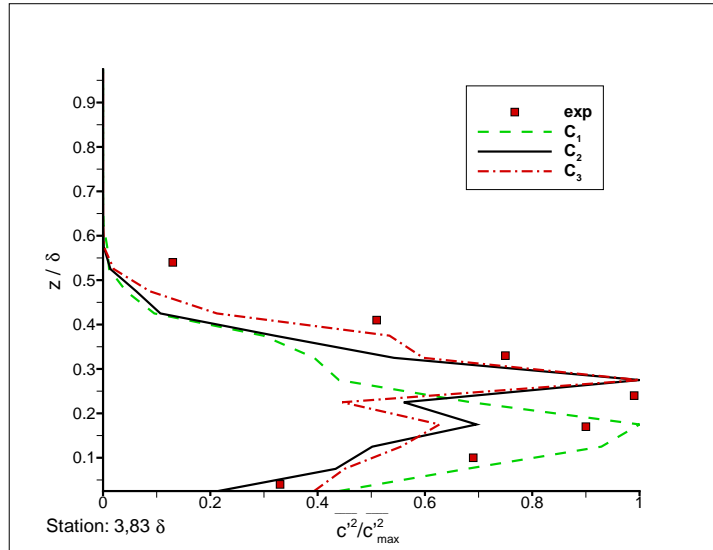


FIG. 5.11 – Abscisse $x - x_s = 3,83\delta$.

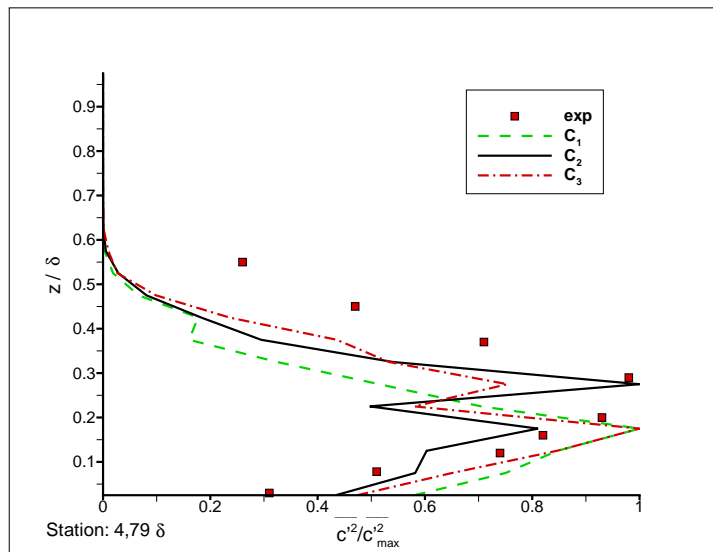


FIG. 5.12 – Abscisse $x - x_s = 4,79\delta$.

Profils de l'écart-type de la concentration du gaz passif (propane) issu d'une source ponctuelle rapporté à leur valeur maximale.

■ exp : mesures expérimentales.

C_1 : Interpolation des polynômes de Lagrange. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.

C_2 : Interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 50.000 p/s.

C_3 : Interpolation barycentrique. Flux de particules à la source : 100.000 p/s.

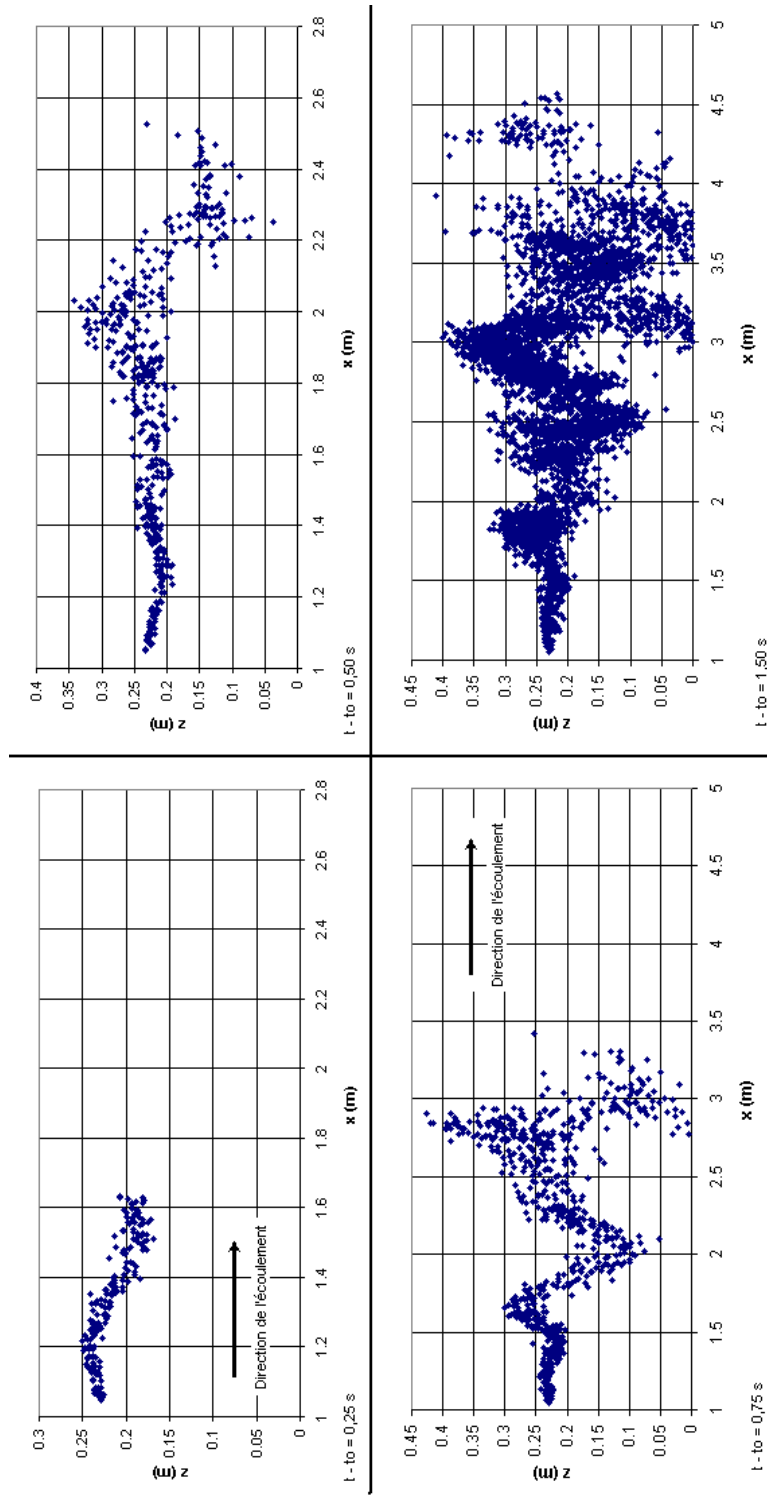


FIG. 5.13 – Panaches instantanés des particules fluides.

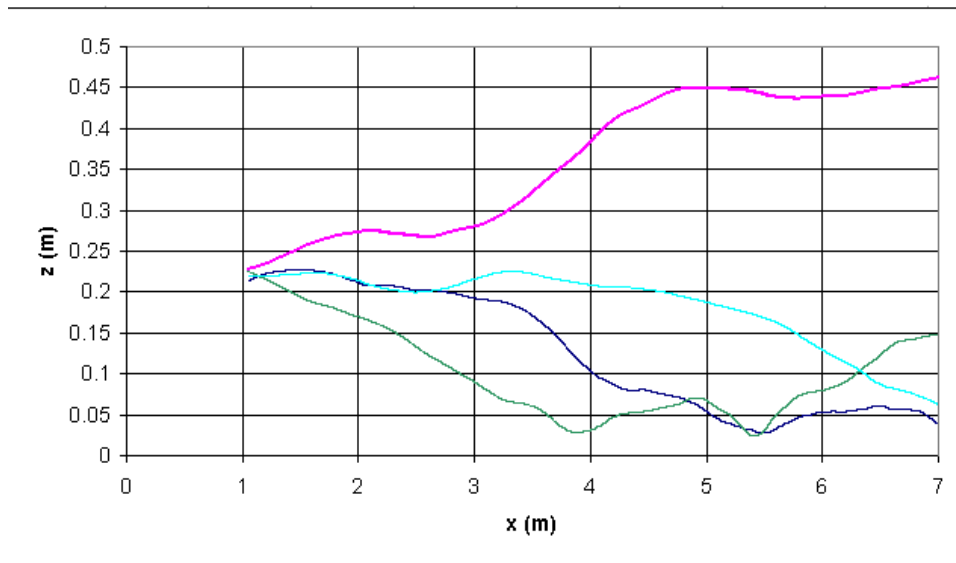


FIG. 5.14 – Trajectoires de particules fluides éjectées de la source.

5.3.2 Discussion

La concentration moyenne des particules fluides est en générale en bon accord avec les mesures expérimentales à toutes les stations de mesure.

Il existe quand même une sous-estimation du niveau de concentration en proche paroi pour tous les cas testés aux deux dernières stations de mesure.

En comparant la technique d'interpolation (cas C_1 et C_2) on s'aperçoit que le panache moyen calculé avec l'interpolation des polynômes de Lagrange est un peu plus bas que dans le cas de l'interpolation barycentrique. La différence est plus marquée pour les dernières stations de mesure et dans la partie supérieure du panache.

Si on compare l'effet de flux de particules éjectées depuis la source (cas C_2 et C_3), le profil vertical de la concentration issu du calcul C_3 s'accorde mieux aux mesures expérimentales surtout dans la partie supérieure du panache.

De la comparaison des écart-types de la concentration, on observe que les profils issus du calcul sous-estiment sensiblement, les valeurs expérimentales à partir de la station $z/\delta = 3,83$. Pour les cas C_2 et C_3 on aperçoit aussi la présence de deux pics pour l'écart-type de la concentration.

On peut voir aussi que le profil calculé avec l'interpolation des polynômes de Lagrange

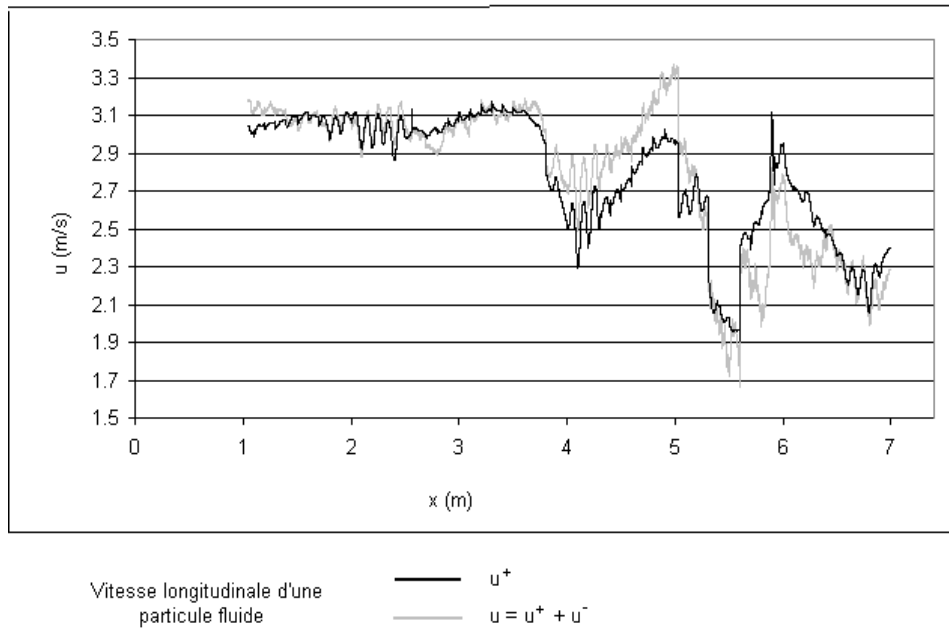


FIG. 5.15 – Evolution de la vitesse longitudinale d'une particule fluide dans son parcours en aval de la source.

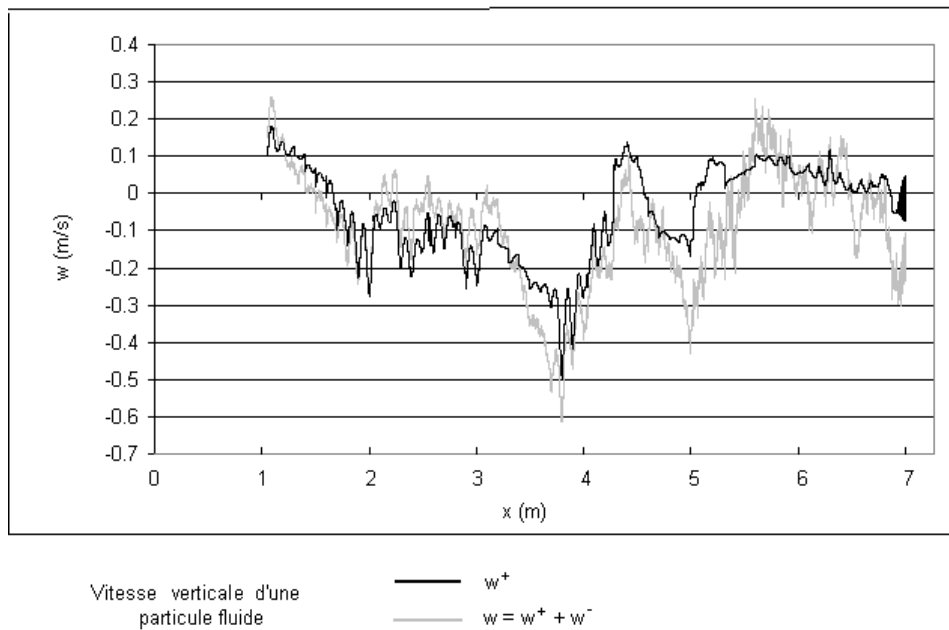


FIG. 5.16 – Evolution de la vitesse verticale d'une particule fluide.

est en général au-dessous des autres profils ainsi que des mesures expérimentales mais il ne présente pas de double pic.

Le cas d'étude le plus proche des mesures expérimentales pour l'écart-type des fluctuations de la concentration est C_3 . Pour les deux dernières abscisses de mesure, les trois cas ont des erreurs maximales de l'ordre de 20 % à 40 % et en moyenne de l'ordre de 2 % à 10 %.

Les panaches instantanés des particules fluides montrent des ondulations bien marquées. Cela est dû à l'effet des grosses structures cohérentes de l'écoulement. Les particules fluides arrivent au sol 0,75 s après avoir été éjectées environ 2,7 m après la source (soit 317,8 fois le diamètre de la source).

L'évolution des vitesses longitudinales, grandes échelles et totale, d'une particule fluide montre aussi des oscillations de basse fréquence dues principalement aux champs moyens et de haute fréquence dues à la turbulence.

On peut constater que la fréquence des oscillations de la vitesse du champ total est un peu plus élevée que pour le champ grandes échelles à cause de la fluctuation additionnelle donnée par le modèle stochastique.

Dans certains endroits, on voit des changements de la vitesse extrêmement forts. Cela est peut-être dû au fait que la particule fluide sort d'une grosse structure pour entrer dans une autre.

Pour la vitesse verticale (Figure 5.16) la différence de fréquence entre les valeurs simulées pour le modèle couplé et celles des grandes échelles est plus marquée surtout à la fin du parcours de la particule fluide.

On s'aperçoit aussi que l'effet de mémoire de la vitesse propre de la méthode stochastique est mis en évidence pour l'évolution croissante de l'écart entre les valeurs de la vitesse totale et celles des échelles résolues par l'approche LES pendant que la particule fluide s'éloigne de la source.

5.4 Validation dans le cas de l'expérience de Gong (1991)

Nous cherchons ici à complexifier notre validation. GONG (1991) a effectué une étude de la dispersion de CO_2 au dessus des collines gaussiennes de faible pente bidimensionnelle et tridimensionnelle.

Il a mesuré les concentrations en utilisant un analyseur de gaz à infra-rouge (IRGA) pour quatre différentes positions d'une source ponctuelle placée en amont de la colline et soumis au même champ dynamique que celle de l'expérience de GONG & IBBETSON (1989).

L'objectif de son étude a été de comprendre l'effet de la présence d'une colline sur les caractéristiques de la dispersion des panaches. Il a comparé des profils de concentration moyenne et d'écart-type de concentration obtenus dans des plans longitudinaux et transversaux à la direction du panache, sur différentes abscisses en sol plat ou avec la colline.

Nous allons montrer les résultats de la simulation numérique pour deux positions de la source. Dans la première expérience, la source est placée à $x_s = 150 \text{ mm}$ en amont du pied de la colline et surélevée de $z_{s1} = 13 \text{ mm}$ (S1), c'est à dire au-dessous de la hauteur de la demi-pente de la colline. Dans l'autre expérience, la source est placée à la même position horizontale par rapport à la colline mais surélevée de $z_{s2} = 21 \text{ mm}$ (S2), au-dessus de la hauteur de la demi-pente.

Le diamètre de la source est, dans tous les cas, de $d_s = 1,35 \text{ mm}$ et le gaz est éjecté dans la direction parallèle au sol à la vitesse de l'écoulement ($U_{s1} = 4,6 \text{ m/s}$ et $U_{s2} = 5,1 \text{ m/s}$).

Le gaz a été prémélangé avec l'air de façon à obtenir un poids moléculaire de $32,0 \text{ g/mol}$, proche du poids moléculaire de l'air ($29,0 \text{ g/mol}$). L'expérimentateur indique que les effets étant donné la gravité par différence de densité du panache par rapport à l'air peuvent être négligés. La concentration initiale de CO_2 prémélangé avec l'air a été réglée à $C_{CO_2}^0 = 400 \text{ ppm}$ et testée avant chaque prise de mesure expérimentale.

GONG (1991) a présenté les profils de concentration rapportés au niveau de concentration à la source pour observer l'évolution spatiale de cette grandeur sur la colline :

$$C_n = \frac{C_{CO_2} \delta^2 U_e}{C_{CO_2}^0 z_s^2 U_s} \quad (5.9)$$

5.4.1 Résultats

On va présenter la comparaison entre les résultats de la simulation numérique et les mesures expérimentales de la dispersion du gaz sur une colline bidimensionnelle dont les dimensions et la position sont celles décrites dans le chapitre précédent (§ 4.3).

Profils de la concentration moyenne

Dans la Figure 5.17 on observe les profils de la concentration moyenne pour la simulation (S1) au pied, à la demi-pente (tous les deux en amont de la colline) et au sommet. La coordonnée verticale (z''/h) représente le rapport entre la hauteur sur le terrain (z'') et la hauteur au sommet (h). On voit clairement qu'il existe une sur-estimation de la concentration de CO_2 au niveau de la hauteur de la source et une sous-estimation proche du sol par rapport aux mesures expérimentales. Cela peut être dû à la sur-estimation de la vitesse en amont de la colline (Figure 4.35). On a essayé d'autres types de conditions de rebond au sol pour les particules sans observer des différences significatives.

Pour le profil au sommet de la colline, on constate qu'il existe un bon accord des concentrations jusqu'à une hauteur de $z'' = 0,3h$. Au-dessous, on trouve une sous-estimation par rapport aux mesures expérimentales.

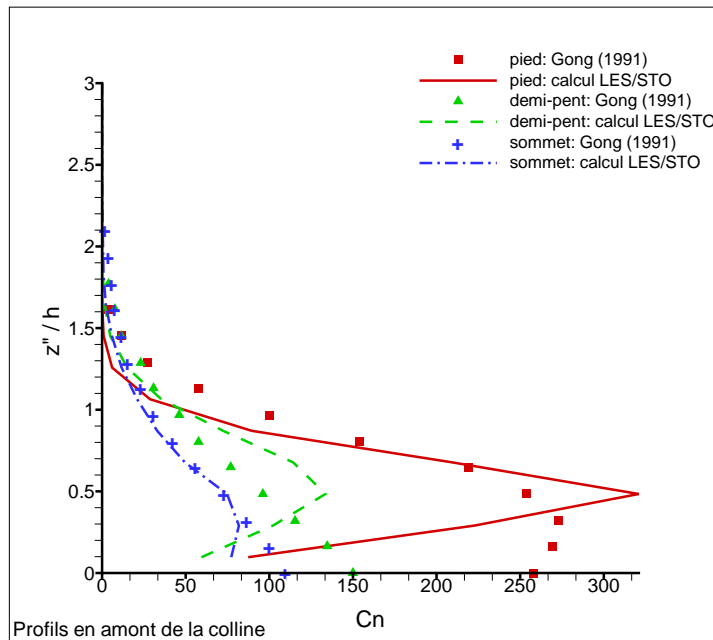


FIG. 5.17 – Profils de concentration de CO_2 en amont de la colline calculés avec le modèle (LES/STO) en comparaison aux mesures expérimentales de GONG (1991).

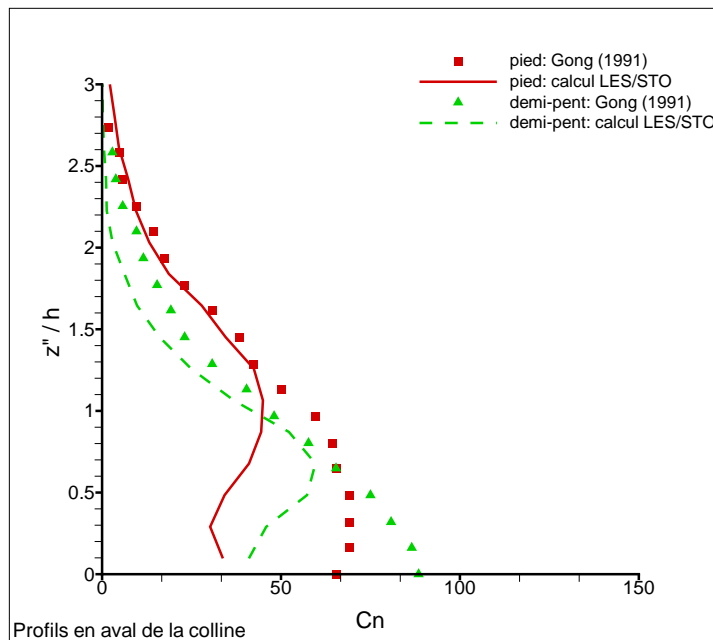


FIG. 5.18 – Profils de concentration de CO_2 en aval de la colline calculés avec le modèle (LES/STO) en comparaison aux mesures expérimentales de GONG (1991).

Dans la Figure 5.18, on montre les profils de la concentration obtenus en aval de la colline. On observe ici encore une sous-estimation importante des niveaux de concentration du gaz par rapport aux mesures expérimentales, même si dans ces deux cas les profils de la vitesse moyenne (Figure 4.35) sont en bon accord à toutes les hauteurs.

En comparant les niveaux de la concentration pour toutes les positions sur la colline (Figures 5.17 et 5.18) on observe qu'au fur et à mesure que nous nous éloignons de la source, les niveaux de concentration diminuent plus rapidement dans la partie inférieure du panache que dans la partie supérieure à cause de la présence de la colline.

Dans le cas de l'expérience (S2) GONG (1991) ne montre que les mesures de concentration de CO_2 faites dans le plan perpendiculaire à la direction de l'écoulement sur l'abscisse correspondante au sommet de la colline. La Figure 5.19 montre les courbes de concentration latérales pour les hauteurs $z'' = 0 \text{ mm}$ (sur le sol), $z'' = 25 \text{ mm}$ et $z'' = 45 \text{ mm}$. On constate qu'il existe un bon accord au centre du panache sauf pour la dernière hauteur où les résultats sont sous-estimés par rapport aux mesures expérimentales. Malheureusement, GONG (1991) ne fournit pas les mesures des profil verticaux de concentration pour cette hauteur d'emplacement de la source.

La Figure 5.20 montre les profils de la concentration moyenne au pied en amont de la

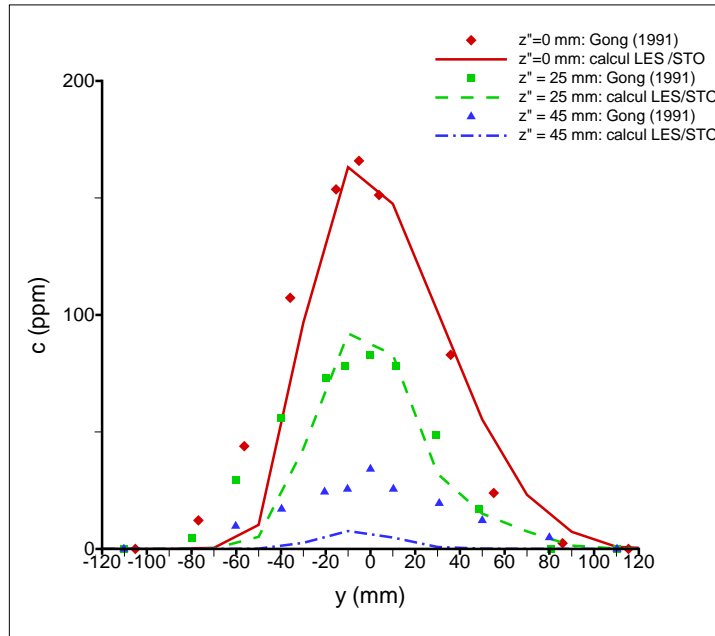


FIG. 5.19 – Courbes de concentration de CO_2 dans le plan perpendiculaire à la direction de l'écoulement sur le sommet de la colline à trois hauteurs différentes. Comparaisons entre les résultats obtenus avec le modèle (LES/STO) et les mesures expérimentales de GONG (1991).

colline ($x - x_s = 150 \text{ mm}$), calculés par le modèle (LES/STO) pour les deux expériences de mesure. On remarque l'effet de la hauteur de la source par rapport à l'élévation du sommet de la colline. Le premier profil (S1) montre une concentration qui se trouve au-dessous de la hauteur correspondante à la demi-pente de la colline et l'autre profil (S2) se trouve au-dessus de ce niveau :

$$z_{s1} = 0,42h,$$

$$z_{s2} = 0,68h.$$

Pour cette abscisse ($x - x_s = 150 \text{ mm}$), la hauteur sur le terrain est en coïncidence avec la coordonnée z car on n'est pas encore au dessus de la colline ($z'' \equiv z$). Dans la Figure 5.20 on a signalé les hauteurs des sources avec une fine ligne horizontelle.

On peut constater que la hauteur correspondante à la concentration maximale dans les cas (S1) n'est pas en coïncidence avec la hauteur de la source (z_{s1}) tandis que dans le cas (S2) on ne observe pas cet effet. Cela indique pour (S1) une perturbation du panache étant donné la présence de la colline.

On observe aussi que les niveaux de concentration pour (S1) sont plus importants dans la zone de proche paroi et inversement sur la partie supérieure du panache.

La Figure 5.21 montre les profils de concentration à demi-pente en amont de la colline. Ici $z'' = z - h/2$ est la coordonnée verticale de la hauteur sur le terrain. Dans cette position, seulement la hauteur de la deuxième expérience (S2) est encore au-dessus de $z'' = 0$.

Les deux profils sont très proches mais les niveaux de concentration pour le cas (S2) sont légèrement plus élevés. Cependant, cette différence dévient négligeable au-dessus de $z'' = h$.

La Figure 5.22 présente les profils de la concentration moyenne au sommet de la colline pour les deux hauteurs de la source. Dans le cas de la source placée au-dessus de la demi-pente de la colline (S2), la concentration est bien supérieure par rapport au cas (S1). Cet écart devient plus petit à une hauteur supérieure. Au-dessus de $z'' = h$ la différence est négligeable.

La Figure 5.23 montre les niveaux de concentration à demi-pente en aval de la colline. Les niveaux de concentration pour le cas (S1) sont presque réduits à la moitié de ceux obtenus pour le cas (S2). Cette observation est ainsi valable pour les profils de concentration obtenus au pied en aval de la colline (Figure 5.24).

Les flux de masse turbulents verticaux deviennent importants dans le cas d'interaction avec le sol car la vitesse moyenne verticale est négligeable dans l'interphase couche

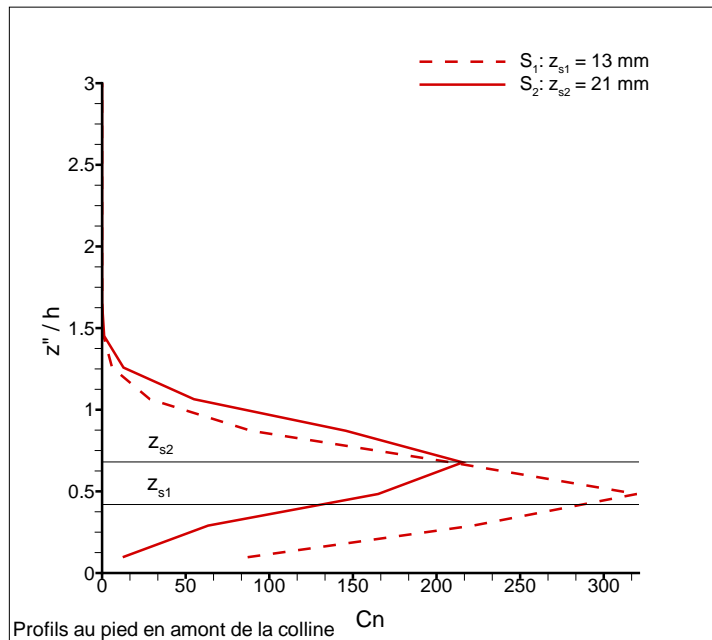


FIG. 5.20 – Profils de concentration de CO_2 au pied en amont de la colline calculés avec le modèle (LES/STO). Comparaisons à deux hauteurs de source différentes.

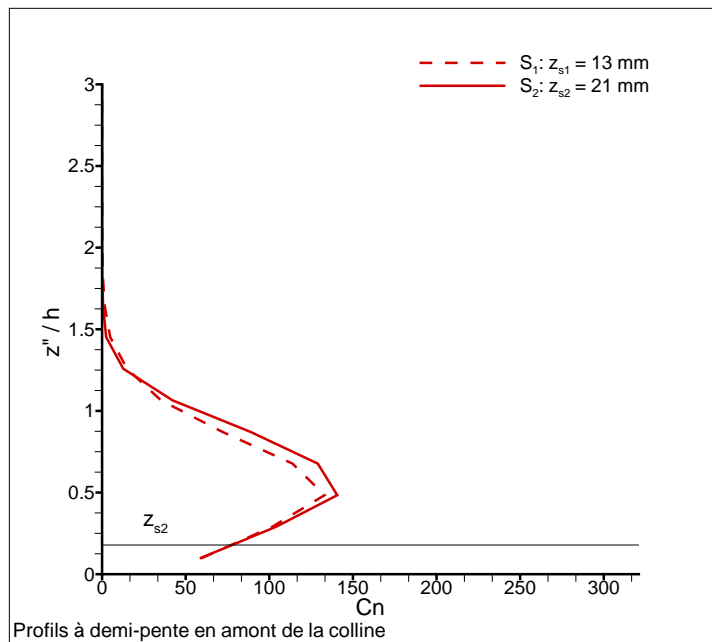


FIG. 5.21 – Profils de concentration de CO_2 à demi-pente en amont de la colline calculés avec le modèle (LES/STO). Comparaisons à deux hauteurs de source différentes.

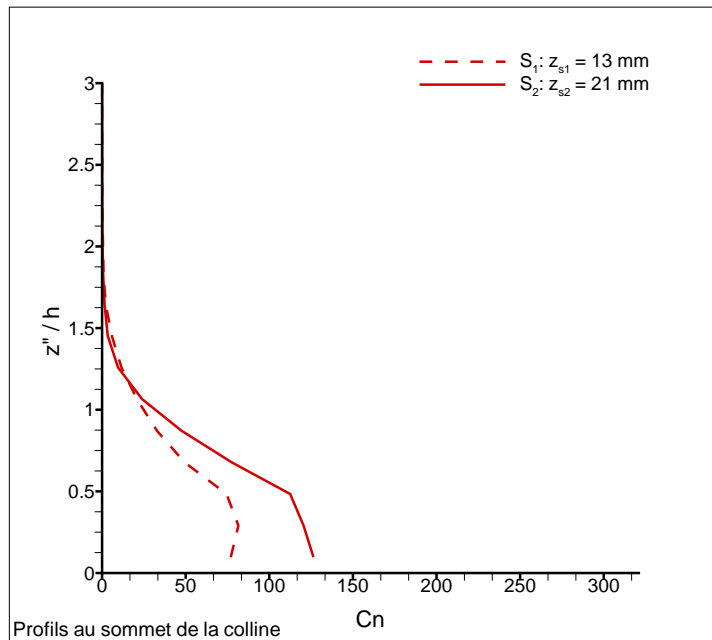


FIG. 5.22 – Profils de concentration de CO_2 au sommet de la colline calculés avec le modèle (LES/STO). Comparaisons à deux hauteurs de source différentes.

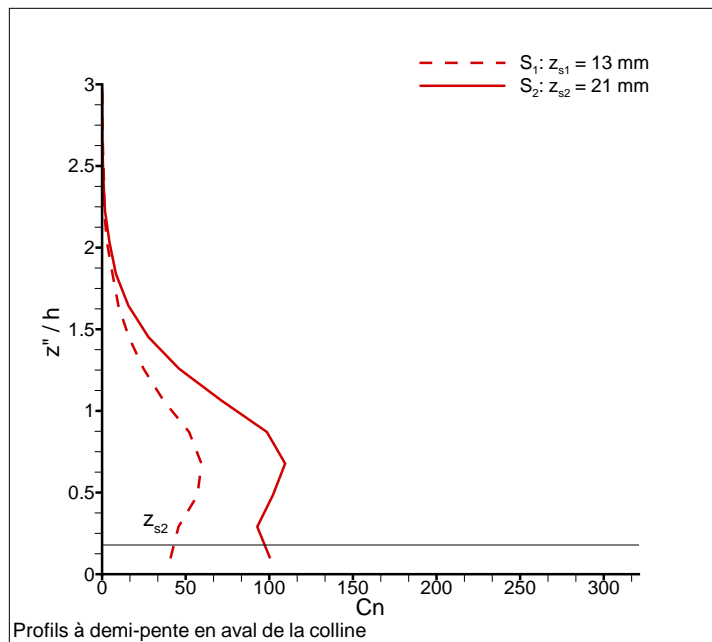


FIG. 5.23 – Profils de concentration de CO_2 à demi-pente en aval de la colline calculés avec le modèle (LES/STO). Comparaisons à deux hauteurs de source différentes.

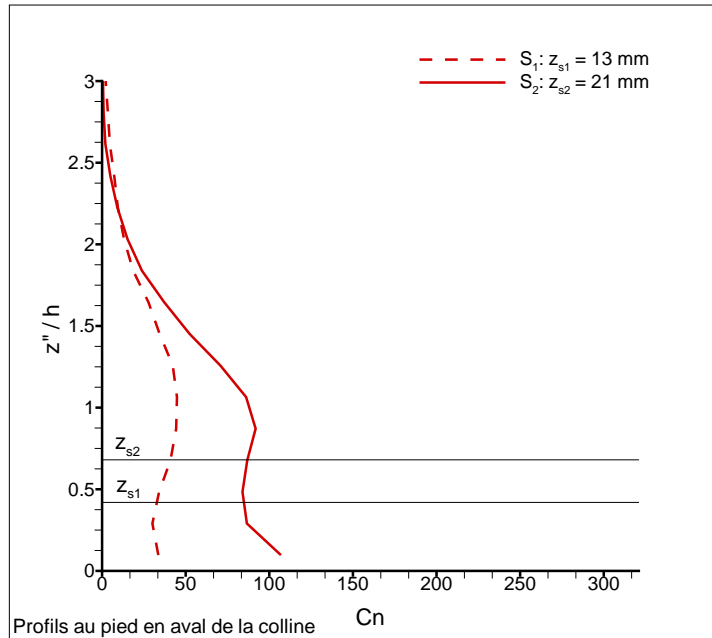


FIG. 5.24 – Profils de concentration de CO_2 au pied en aval de la colline calculés avec le modèle (LES/STO). Comparaisons à deux hauteurs de source différentes.

limite-sol et ce sont les fluctuations de vitesse qui assurent le transport de masse du gaz verticalement. L'expression générale du flux de masse turbulent est par définition :

$$\begin{aligned} \overline{u'_i c'} &= \overline{(u_i - \bar{u}_i)(c - \bar{c})}, \\ &= \overline{u_i c} - \bar{u}_i \bar{c}, \end{aligned} \tag{5.10}$$

dans le cas des flux de masse turbulents verticaux $u_i \equiv w$.

Les Figures 5.25 et 5.26 montrent les flux de masse turbulents verticaux au centre du panache pour les cas (S1) et (S2). En comparant ces deux cas, on peut observer que la forme des profils des flux de masse turbulents verticaux sont très semblables pour toutes les abscisses. Au pied en amont de la colline ils sont décalés selon la hauteur de la source. Cette différence devient négligeable pour les autres positions de mesure (la mémoire de la hauteur de la source est perdue). Les flux turbulents sont positifs en amont de la colline (le gaz s'élève sur la pente de la colline) et ils sont plus importants à demi-pente. Au sommet ils sont petits mais toujours positifs et en aval ils changent de signe signifiant la retombée du gaz.

Les Figures 5.27 et 5.28 montrent les flux de masse axiaux du gaz au centre du panache $\overline{u c}$. Nous pouvons observer les profils de la distribution verticale de la quantité de masse

du gaz qui est transférée dans la direction de l'écoulement.

Tous les flux axiaux sont positifs signifiant qu'il n'existe pas de zone de recirculation. Pour toutes les abscisses sur la colline, les flux de masse sont plus importants dans le cas de la source élevée (S2) que lorsque la source est placée plus bas (S1). Cependant, ces différences dévient petites pour les positions en aval de la colline. On observe aussi que les profils de flux de masse axiaux sont plus étendues dans la direction verticale pour le cas (S1) par rapport à (S2) en signalant que le gaz est plus dispersé verticalement par la colline quand la source est placée un peu plus bas.

Dans les deux cas traités, les flux axiaux en aval de la colline sont moins intenses que ceux en amont mais ils s'étendent plus haut.

Tous les profils montrés ci-dessus sont pris au centre du panache. Nous pouvons calculer le flux de masse axiaux en tenant compte de tout l'aire transverselle du panache (\overline{uc}_T).

$$\overline{uc}_T = \iint_0^\infty uc \, dz \, dy. \quad (5.11)$$

Dans le cas (S1) la valeur du flux de masse doit être de :

$$\overline{uc}_T = C_{CO_2}^0 U_{S1} (= 1840 \text{ ppm } m/s),$$

et dans le cas (S2) :

$$\overline{uc}_T = C_{CO_2}^0 U_{S2} (= 2040 \text{ ppm } m/s).$$

Les écarts par rapport à ces valeur donnent grosso modo les erreurs de calcul.

La Figure 5.29 montre l'évolution des flux de masse axiaux totaux (\overline{uc}_T) au fur et à mesure le gaz traverse la colline pour les cas (S1) et (S2).

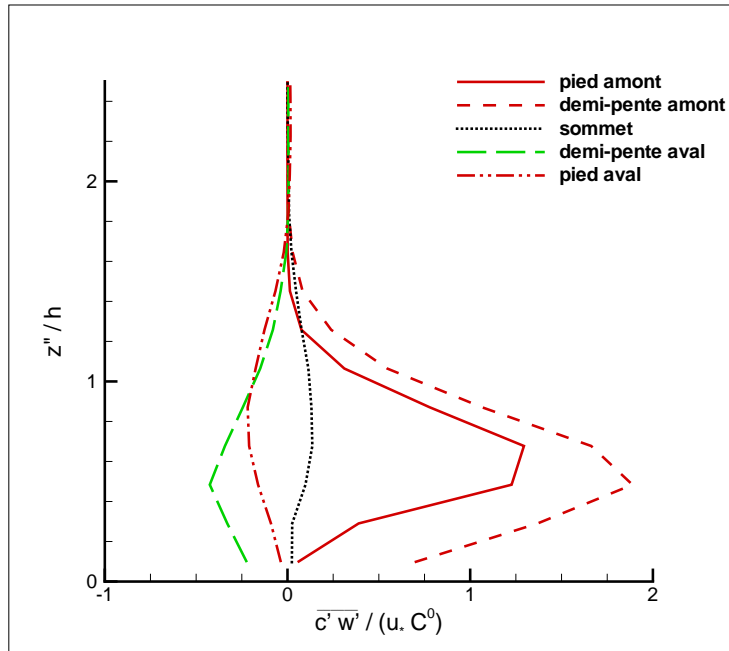


FIG. 5.25 – Profils de flux de masse turbulents verticaux de CO_2 au centre du panache dans le cas S1 ($z_s = 13 \text{ mm}$).

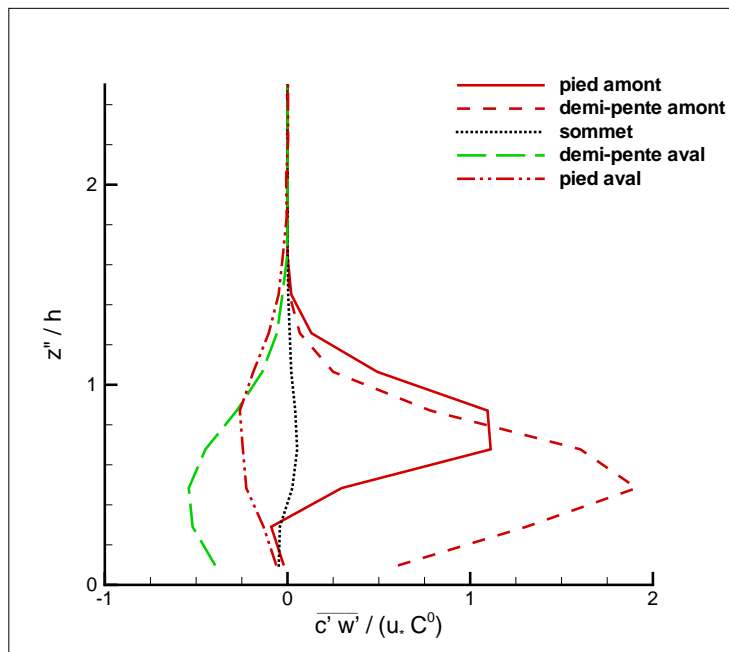


FIG. 5.26 – Profils de flux de masse turbulents verticaux de CO_2 au centre du panache dans le cas S2 ($z_s = 21 \text{ mm}$).

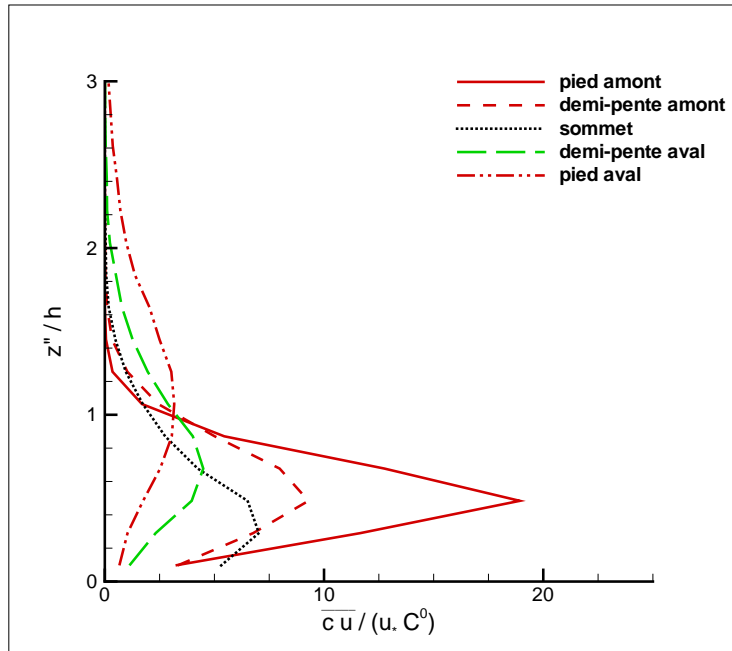


FIG. 5.27 – Profils de flux de masse axiaux de CO_2 au centre du panache dans le cas S1 ($z_s = 13 \text{ mm}$).

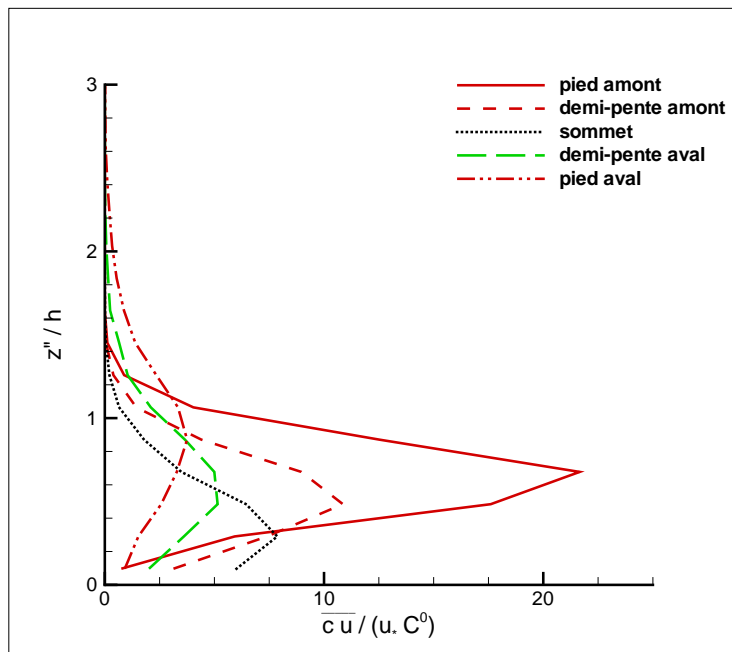


FIG. 5.28 – Profils de flux de masse axiaux de CO_2 au centre du panache dans le cas S2 ($z_s = 21 \text{ mm}$).

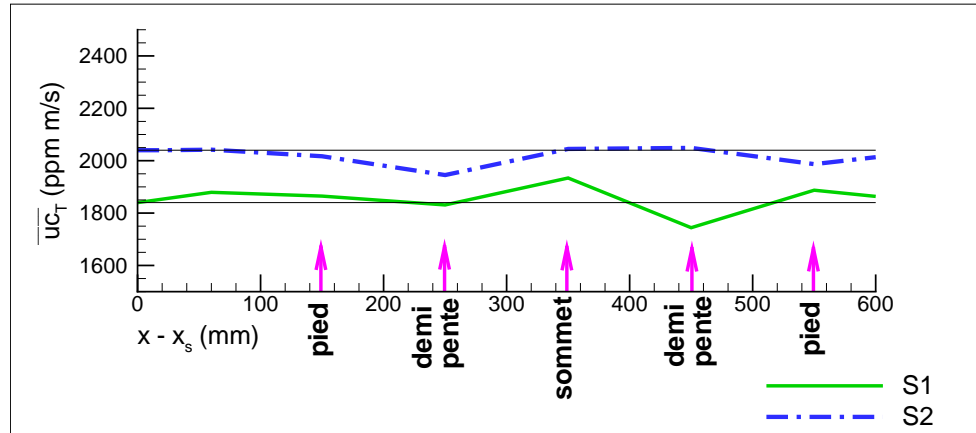


FIG. 5.29 – Evolution des flux de masse axiaux totaux.
Cas S1 : ($z_s = 13 \text{ mm}$), cas S2 : ($z_s = 21 \text{ mm}$).

5.4.2 Discussion

Le modèle LES/STO sous-estime les valeurs de la concentration moyenne de CO_2 par rapport aux mesures expérimentales faites par GONG (1991). Il donne de meilleurs résultats dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982). Si nous cherchons des raisons différentes de celles fournies au paragraphe § 4.3.5 pour expliquer cette différence de qualité, nous allons examiner l'expérience de GONG (1991). Les différences les plus importantes entre ces deux expériences sont : le type de gaz utilisé, la présence de la colline et le rapport entre la hauteur de la source et la hauteur de la couche limite.

Même si le gaz utilisé dans le cas de l'expérience de GONG (1991) est un peu plus lourd (poids moléculaire du mélange $CO_2 + \text{air} = 32 \text{ gr/mol}$) que celui de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) ($\text{propane} + \text{helium} = 29,0 \text{ gr/mol}$), la sous-estimation de la concentration au sol n'est pas dû à cette différence car on n'observe pas de grands écarts entre le calcul et les mesures expérimentales dans la partie supérieure du panache.

Même si dans la partie basse les effets de gravité sont plus importants, l'expérience de GONG (1991) est censée représenter du gaz passif. L'effet de sous-estimation de la partie basse pourrait y être l'objet d'un prochain travail dans lequel nous testerons les effets d'anisotropie dans la zone de proche paroi que n'est pas compris dans notre modèle stochastique. On a constaté que la dynamique de l'écoulement dans les deux cas est bien représenté par le modèle LES/STO (Chapitre 4, § 4.3) ce qui rend difficile d'attribuer les différences des niveaux de concentration calculées et mesurées par GONG (1991) à la présence ou non de la colline.

Le rapport entre la hauteur de la source et l'épaisseur de la couche limite est beaucoup plus petite dans le cas de l'expérience de GONG (1991) que dans celle de FACKRELL & ROBINS (1982). L'hypothèse d'isotropie pour le tenseur \mathcal{G}_{ij} de l'équation stochastique (5.2) (§ 2.3.3, équation (2.56)) peut entraîner des erreurs plus importantes dans la zone de proche paroi par rapport au cœur de l'écoulement. Cet effet est plus évident si la plupart des particules

sont éjectées dans cette zone (cas S1 de l'expérience de GONG (1991)).

Le modèle pour le tenseur \mathcal{G}_{ij} en turbulence inhomogène, anisotrope et non-stationnaire (§ 2.3.3, équation (2.60)) peut être mieux adapté pour ce cas. Il faut trouver la constante α_2 pour le terme anisotrope. Cela sera sûrement l'objet de futurs travaux.

Si l'on place la source plus haut (cas S2) on constate une importante amélioration de la réponse du modèle LES/STO. La Figure 5.19 montre que les profils de concentration obtenus au niveau du sol pour le sommet de la colline sont en bon accord avec les mesures expérimentales sauf à $z'' = 45 \text{ mm}$ où il existe une sous-estimation.

L'effet de la hauteur de la source par rapport à l'élévation de la colline est bien évident dans les simulations S1 et S2. La source placée plus bas que l'élévation correspondant à la demi-pente de la colline présente un panache plus perturbé. On constate un niveau de concentration du gaz en amont de la colline plus important dans le cas de la source la plus basse (S1) (Figure 5.20). À demi-pente en amont, les niveaux de concentration sont égaux (Figure 5.21). Au sommet et en aval de la colline, la source placée la plus haute est celle qui produit les niveaux de concentration les plus importants (Figures 5.22, 5.23 et 5.24). Cela est dû au fait que la colline est un obstacle à franchir pour le gaz et que la vitesse de l'écoulement à la hauteur de la source est plus grande au fur et à mesure que la source est placée plus haute. De même, les flux turbulents verticaux et axiaux sont plus grands dans le cas de la source située la plus haute (Figures 5.25 à 5.28).

L'évolution de flux de masse axiaux totaux (Figure 5.29) montrent que dans le cas (S1) les erreurs de calcul les plus importants sont de l'ordre de 5% au sommet et à demi-pente en aval de la colline et dans le cas (S2) sont de 4, 6% à demi-pente en amont de la colline.

Chapitre 6

MODÈLE DE DIFFUSION ET DES RÉACTIONS CHIMIQUES

6.1 Introduction

Un des avantages de l'utilisation du modèle stochastique de suivi lagrangien des particules est la possibilité d'envisager la prise en compte de la diffusion et des réactions chimiques de façon plus naturelle en prenant en compte le contact et l'échange d'une certaine quantité de concentration des espèces entre particules. C'est ce que nous faisons ici à l'aide de l'appariement des particules.

Dans ce chapitre on va détailler le modèle de diffusion et de réactions chimiques que nous utilisons de façon couplé avec l'approche stochastique lagrangienne.

Ensuite, nous allons valider ce couplage à l'aide de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) de façon indirecte en prenant en compte la *fraction de mélange* car cette grandeur se comporte comme un scalaire passif.

Enfin, nous allons réaliser un analyse des caractéristiques de la réaction à l'aide du coefficient d'intensité de ségrégation et le nombre de *Damköhler*. En particulier on arrivera à obtenir les profils et l'évolution spatiale en aval de la source. Des comparaisons avec d'autres simulations numériques de la même réaction chimique seront traitées.

6.2 Le rôle des modèles

Le modèle de suivi lagrangien à une particule et une échelle de temps décrit dans § 5.2 (5.2) *LES/stochastique* (LES/STO) permet de suivre les trajectoires des particules fluides mais il est incapable de représenter les phénomènes de la diffusion moléculaire et des réactions chimiques.

Pour résoudre ce phénomène, nous avons choisi de coupler le suivi des particules à un modèle de diffusion des constituants réactifs. Ce type d'approche a été utilisé initialement pour des problèmes de combustion ou de génie des procédés.

POPE (1985) a classifié ces approches selon le type de fermeture donné au terme de diffusion :

- Un premier groupe utilise une fermeture de type déterministe DOPAZO (1975), POPE (1976), JANIKA *et al.* (1978) & DOPAZO (1979) qui ne permet pas d'obtenir une relaxation de la distribution de densité de probabilité de la concentration d'un constituant au sein d'une turbulence homogène et isotrope vers une gaussienne.
- Un deuxième groupe utilise un modèle de type *Monte-Carlo* où l'équation de Langevin sert à modéliser l'évolution de la concentration. VALIÑO & DOPAZO (1990) proposent un modèle où la fluctuation aléatoire suit une loi binomiale.
- Le troisième groupe envisage l'interaction directe entre particules suivies. Cette approche a été proposée par CURL (1963) pour modéliser l'interaction des gouttelettes de deux espèces chimiques à l'état liquide. MICHELOT (1996) a utilisé cette approche dans le cas des mélanges réactifs en turbulence homogène et isotrope pour vérifier que la distribution de la concentration relaxe bien vers une courbe gaussienne. Il a pris un modèle stochastique à une particule et une échelle de temps pour simuler les grandeurs turbulentes moyennes de l'écoulement. Il a validé cette approche par comparaison à des résultats expérimentaux d'une couche de mélange réactive de NO et O_3 dans une turbulence de grille, d'une source linéique de NO dans une turbulence porteuse de O_3 et d'une source ponctuelle dans le même cas.

On s'intéresse à ce dernier modèle de diffusion pour le coupler avec le modèle de suivi lagrangien des particules fluides LES/STO. On envisage sa validation avec les mesures expérimentales de FACKRELL & ROBINS (1982) de façon indirecte à travers la *fraction de mélange*.

Dans la suite, on va donner les principales idées de ce modèle. Pour plus de détails on se référera au travail de MICHELOT (1996).

6.3 Le modèle de diffusion

Le modèle de diffusion de CURL (1963) a été repris par POPE (1985), testé et amélioré par MICHELOT (1996) dans le cas du mélange de réactifs NO et O_3 , dans une turbulence de grille de la manière suivante :

Soit N_p le nombre de particules suivies et T_{dif} l'échelle de temps caractéristique du modèle de diffusion.

Le domaine de calcul est découpé en boîtes de mélange dans lesquelles les particules sont sélectionnées aléatoirement par paires (m, n) dont les concentrations en espèces réactives sont respectivement $c_m(t)$, $c_n(t)$.

POPE (1985) propose de calculer l'échelle de temps caractéristique T_{dif} qui est associée à la probabilité $\frac{\Delta t}{T_{dif}}$ du mélange parfait, soit :

$$c_m(t + \Delta t) = c_n(t + \Delta t) = \frac{c_m(t) + c_n(t)}{2},$$

ou de non mélange $\left(1 - \frac{\Delta t}{T_{dif}}\right)$, soit :

$$\begin{cases} c_n(t + \Delta t) = c_n(t), \\ c_m(t + \Delta t) = c_m(t). \end{cases}$$

Ce modèle a l'inconvénient d'être discontinu. HSU & CHEN (1991) proposent un modèle où toutes les paires de particules sélectionnées aléatoirement participent à la diffusion :

$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \frac{\mathcal{R}_{nd}}{T_{dif}} (c_n(t) - c_m(t)), \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \frac{\mathcal{R}_{nd}}{T_{dif}} (c_m(t) - c_n(t)), \end{cases} \quad (6.1)$$

où \mathcal{R}_{nd} est une variable aléatoire équiprobable sur $[0, 1]$ et T_{dif} est le temps caractéristique de la diffusion. SPALDING (1971) montre que T_{dif} est proportionnel au temps caractéristique de la turbulence tel que nous l'avons défini en § 4.4.2 (équation 4.13) $T_t = \frac{E}{\varepsilon}$:

$$T_{dif} = \frac{T_t}{C_{dif}}. \quad (6.2)$$

Pour ce temps, POPE (1985) propose d'utiliser un coefficient de proportionnalité $C_{dif} = 2$. MICHELOT (1996) trouve $C_{dif} = 2,25$ en liant le temps caractéristique de la diffusion et la variance de la concentration $\langle c'^2 \rangle$ en turbulence homogène isotrope. Ce dernier modèle (6.1) et (6.2) conduit à une densité de probabilité de concentration qui ne relaxe pas vers une courbe gaussienne mais a l'avantage d'être continu en temps.

MICHELOT (1996) a testé ce modèle et il a proposé de changer la variable aléatoire \mathcal{R}_{nd} par une constante de valeur $\frac{1}{2}$ (valeur moyenne de la variable aléatoire proposée par HSU & CHEN (1991)). Sur cette hypothèse, MICHELOT (1996) a démontré que ce modèle est équivalent au modèle L.M.S.E. (Linear Mean Square Estimation) de DOPAZO & O'BRIEN (1974). Avec

une constante à la place de \mathcal{R}_{nd} le modèle perd alors son défaut principal qui était de : ne jamais diffuser une distribution de Dirac initiale sur la concentration mais simplement de la déplacer vers une distribution de Dirac de la valeur moyenne.

Il a ainsi démontré que seule une constante permettrait la diffusion des distributions de Dirac vers le bon résultat.

Il a aussi trouvé que le temps de relaxation est plus petit pour le nouveau modèle (avec $\mathcal{R}_{nd} = \frac{1}{2} = \text{constante}$) que pour celui de Hsu & CHEN (1991).

Pour vérifier que la densité de probabilité est une gaussienne, MICHELOT (1996) a tracé l'évolution du coefficient d'applatissage et il a montré qu'il se stabilise autour d'une valeur égale à 3 (valeur que doit prendre ce coefficient dans le cas d'une fonction de densité de probabilité gaussienne) et la variance est beaucoup plus faible qu'avec le modèle de Hsu & CHEN (1992).

MICHELOT (1996) affirme que le modèle de Hsu & CHEN (1992) a un caractère doublement aléatoire à cause du tirage aléatoire de la paire de particules qui échangent de la matière aléatoirement dans l'équation même de l'évolution des concentrations (6.1).

On va prendre le modèle de diffusion proposé par MICHELOT (1996) pour l'évolution des concentrations des espèces chimiques.

Pour chaque paire (m, n) des particules choisies aléatoirement on a ainsi :

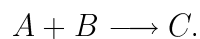
$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \frac{C_{dif}}{2T_t} (c_n(t) - c_m(t)), \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \frac{C_{dif}}{2T_t} (c_m(t) - c_n(t)), \end{cases} \quad (6.3)$$

c'est le modèle de diffusion que nous couplons au modèle LES/STO § 5.2 (5.2).

6.4 Le modèle des réactions chimiques

Couplé au modèle de diffusion, les concentrations des espèces suivies évoluent selon les réactions chimiques qui peuvent avoir lieu.

On considère une réaction chimique réversible du second ordre supposée isotherme :



Les variations de concentration des espèces, étant donné la réaction chimique produite dans la particule fluide m peuvent s'écrire :

$$\begin{cases} \frac{dc_{mA}}{dt} = -K_d c_{mA} c_{mB} + K_i c_{mC}, \\ \frac{dc_{mB}}{dt} = -K_d c_{mA} c_{mB} + K_i c_{mC}, \\ \frac{dc_{mC}}{dt} = K_d c_{mA} c_{mB} - K_i c_{mC}, \end{cases} \quad (6.4)$$

où K_d est la constante cinétique de la réaction directe et K_i celle de la réaction inverse. Elles sont fonctions de la température. On va supposer dans l'expérience que la température de l'écoulement est constante et que la répartition des réactifs est localement homogène. c_{mA} , c_{mB} et c_{mC} sont les valeurs instantanées de la concentration des espèces A , B et C respectivement pour la particule fluide m .

6.5 Application à la dispersion d'un panache réactif de NO dans une atmosphère de O_3

On va ici appliquer le modèle complet (MC) qui comprend les modèles (LES/STO) + diffusion + réaction chimique ((5.2) + (6.3) + (6.4)) dans le cas de la dispersion d'un panache réactif de NO issu d'une source ponctuelle en présence d'une atmosphère de O_3 dans une couche limite turbulente qui a les mêmes caractéristiques que dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982). Les résultats de la simulation de l'évolution des concentrations des espèces chimiques réactives peuvent être comparés avec les mesures expérimentales concernant les statistiques du champ de concentration d'un scalaire passif (Figures 5.3 au 5.12) de façon indirecte au travers de la *fraction de mélange* définie par :

$$FM = \frac{c_{NO} - c_{O_3} + c_{O_3}^0}{c_{NO}^0 + c_{O_3}^0}, \quad (6.5)$$

où $c_{O_3}^0$ et c_{NO}^0 sont les valeurs des concentrations initiales de O_3 et NO respectivement. La fonction de mélange (6.5) prend le valeur 1 dans la région où NO est pur et 0 dans celle où il est absent. MICHELOT (1996) a réalisé des simulations numériques dans le cas d'une couche de mélange et il a comparé les résultats de concentration moyenne avec les mesures expérimentales de LI *et al.* (1992). Il a fait aussi des simulations dans le cas d'une source linéique et ponctuelle en turbulence de grille. L'évolution des profils de concentration des espèces chimiques ont été comparées à celle des expériences de LI & BILGER (1996) et BROWN & BILGER (1996) respectivement.

6.5.1 Conditions initiales de concentration des espèces

On va prendre les mêmes concentrations initiales pour NO et O_3 que celles de l'expérience de BROWN & BILGER (1996) :

$$\begin{cases} c_{NO}^0 = 515 \text{ ppm}, \\ c_{O_3}^0 = 1 \text{ ppm}. \end{cases} \quad (6.6)$$

Le NO est injecté par une source ponctuelle et le O_3 est réparti de façon homogène et uniforme au sein de l'écoulement principal.

6.5.2 Construction des boîtes de mélange

Pour appliquer le modèle de diffusion, il est nécessaire de prendre des boîtes de mélange à l'intérieur desquelles on peut supposer que les particules fluides sont suffisamment proches pour se mélanger.

Cette hypothèse conditionne le fait que la taille Δb de ces boîtes doit être inférieure à l'échelle de longueur caractéristique de l'écoulement (POPE (1985)).

MICHELOT (1996) propose de prendre comme échelle de longueur caractéristique la grandeur $\sigma_w T_L$ dans le cas d'une dispersion turbulente monodimensionnelle selon la direction verticale dont σ_w est l'écart-type de la fluctuation verticale de la vitesse.

On va choisir d'utiliser un maillage régulier des boîtes de mélange de taille :

$$\Delta b = \Delta b_x = \Delta b_y = \Delta b_z < \sqrt{u_{ti}'^2} T_L, \quad (6.7)$$

où $\sqrt{u_{ti}'^2}$ est une échelle caractéristique pour la vitesse turbulente moyenne. On va prendre les profils analytiques obtenus à partir des mesures expérimentales (Figure 4.2) pour calculer :

$$\overline{u_i'^2} = \frac{1}{3} \left(\overline{u_t'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2} \right). \quad (6.8)$$

T_L est une échelle de temps caractéristique lagrangienne de la turbulence (POPE (1994)) qui a été définie en § 2.2.1 (2.12) et § 2.2.2 (2.23). On peut aussi l'exprimer comme :

$$T_L = \frac{4}{3} \frac{\overline{E}}{C_0 \overline{\varepsilon}}, \quad (6.9)$$

où $C_0 = 2,1$ est la constante de *Kolmogorov*, \overline{E} est la moyenne de l'énergie cinétique turbulente et $\overline{\epsilon}$ son taux de dissipation moyen.

La Figure 6.1 présente les profils de l'énergie cinétique turbulente moyenne avec le taux de dissipation moyen et la Figure 6.2 les tailles des boîtes de mélange calculées selon (6.7). Toutes ces grandeurs sont uniquement fonctions de la coordonnée verticale z .

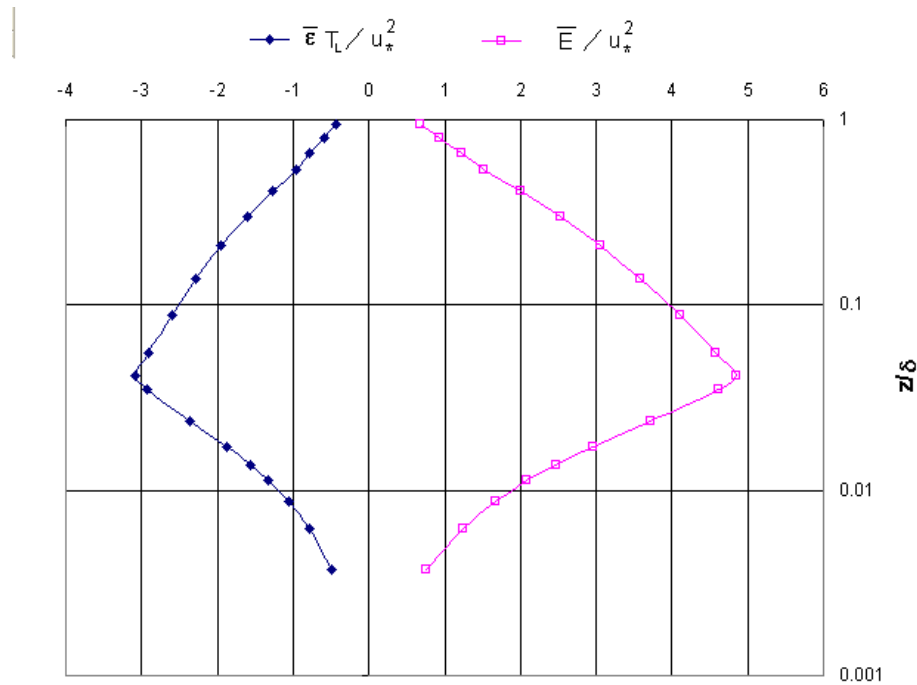


FIG. 6.1 – Couche limite de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).
 Profils moyens de l'énergie cinétique turbulente (\square)
 Profils du taux de dissipation moyenne (\blacklozenge).

Choisir une taille unique de boîtes de mélange est donc un problème de compromis entre les ressources de mémoire, le temps de calcul et la précision.

A l'altitude $z = 0,05 \text{ m}$ la taille de boîte de mélange doit être inférieure à $t_b = 0,157 \text{ m}$, soit :

$$\Delta b = 0,1 \text{ m.}$$

6.5.3 Calcul de concentration volumique des espèces chimiques avec la méthode des particules fluides

Dans le cas de la dispersion d'un gaz passif (§ 5.2.5) on a calculé la concentration volumique avec la méthode des particules fluides en comptabilisant sa quantité dans chaque

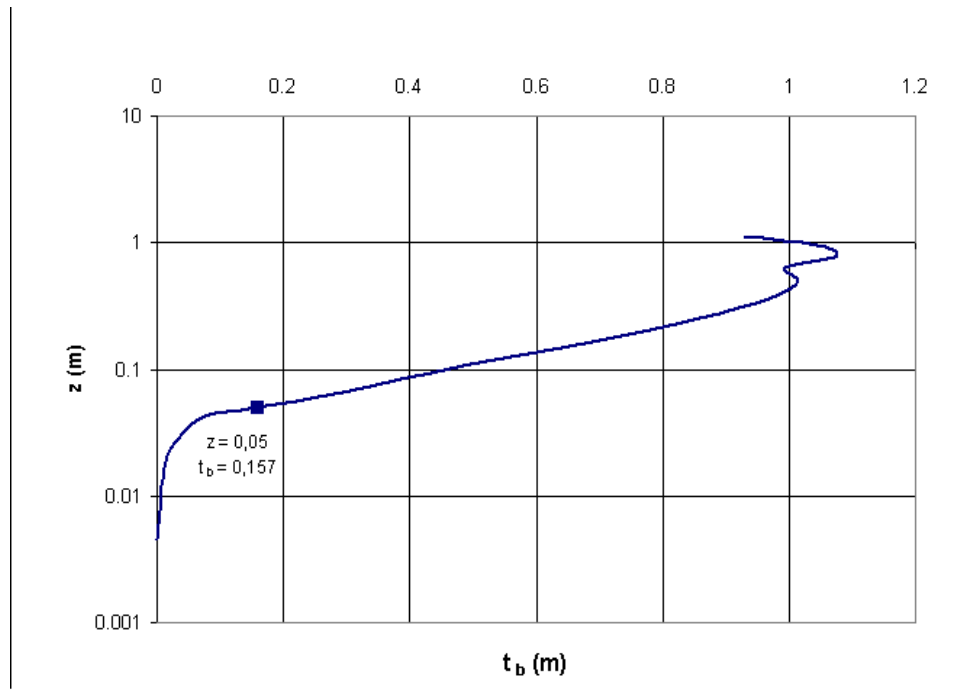


FIG. 6.2 – Profil moyen de la taille d'une boîte de mélange, calculé selon l'équation (6.7).

boîte car chaque particule avait une concentration unique et fixe (0 ou 1).

Cette fois, les particules sont potentiellement porteuses de toutes les espèces avec une concentration variable. Dans l'Anexe C on présente la méthode de calcul de la concentration pour ce cas.

6.5.4 Conditions d'application du modèle de diffusion

Pour appliquer le modèle de diffusion il faut des particules fluides porteuses de O_3 pur en quantité suffisante autour du panache de NO . Au lieu de remplir tout le domaine de calcul avec des particules de O_3 , on a choisi une solution moins chère en temps de calcul et en place de mémoire. On propose de rejeter des particules de O_3 depuis une source de diamètre beaucoup plus grand et dont le centre est placé en coïncidence avec celui de la source de NO .

Les particules fluides porteuses de NO seront rejetées au même temps que les particules fluides porteuses de O_3 . Pour respecter la relation initiale de concentration (6.6) dans la boîte de mélange, on va choisir le diamètre de la source de O_3 de telle façon qu'une particule lancée aie la même probabilité de provenir de l'une ou de l'autre source.

Le diamètre de la source de NO a les mêmes dimensions que celle de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982). La simulation de l'écoulement porteur des particules fluides est aussi pris de cette expérience (§ 4.2).

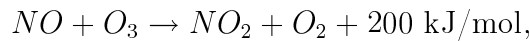
Après le premier pas de temps d'injection des particules, on applique le modèle de la

diffusion dans les boîtes de mélange. Ensuite, on résout le modèle des réactions chimiques pour chacune des particules.

Dans leur parcours, les particules qui sont sorties de la source de NO , peuvent se trouver dans une boîte de mélange en bordure du panache où il n'y a pas assez de particules avec de O_3 pur. Ce problème peut être résolu en injectant des particules de O_3 pur supplémentaires. Dans l'Annexe D nous présentons la technique d'injection des particules supplémentaires que nous avons utilisée dans cette validation.

6.5.5 La réaction chimique entre NO et O_3

Le monoxyde d'azote NO rejeté depuis la source réagit avec l'ozone O_3 . En absence de lumière, la réaction suivante se produit :



avec les constantes de réaction $K_d = K_i = K_0 = 3,7 \cdot 10^{-1} \text{ ppm}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

Le modèle des réactions chimiques pour la particule m peut s'écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc_{mNO}}{dt} = -K_0 c_{mNO} c_{mO_3}, \\ \frac{dc_{mO_3}}{dt} = -K_0 c_{mNO} c_{mO_3}, \\ \frac{dc_{mNO_2+O_2}}{dt} = K_0 c_{mNO} c_{mO_3}. \end{array} \right. \quad (6.10)$$

Le taux de croissance de la concentration du produit de la réaction $NO_2 + O_2$ est donc le même que pour les concentrations des autres espèces. Il suffit donc de suivre le taux de décroissance des espèces chimiques d'origine NO et O_3 , pour connaître le taux de croissance du produit de la réaction.

6.6 Le rôle des flux de masse turbulents

Les flux de masse turbulents verticaux permettent d'étudier les phénomènes de transport vertical des grandeurs physiques. Ils deviennent prépondérants quand la vitesse moyenne verticale est à peu près nulle et ce sont les fluctuations de vitesse verticale qui vont assurer ce transport perpendiculairement au sol (VINÇONT (1999)). Par définition on utilise la relation qui permet de calculer les flux turbulents $\overline{u'_i c'}$ à partir des valeurs moyennes du champ de vitesse \overline{u}_i , de concentration \overline{c} et de la corrélation de leurs valeurs instantanées $\overline{u'_i c'}$:

$$\overline{u'_i c'} = \overline{u_i c} - \overline{u_i} \overline{c}. \quad (6.11)$$

VINKOVIC *et al* (2005b) ont utilisé cette identité dans le même cas de simulation de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) avec le modèle couplé LES/STO (5.2) pour un scalaire passif et ils ont utilisé un modèle à gradient pour le flux vertical de concentration :

$$\overline{w'c'} = -k_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z}, \quad (6.12)$$

où k_z est le coefficient de diffusivité turbulente. Ils proposent pour ce coefficient une valeur $k_z = 0,045 u_* \delta \text{ cm}^2/\text{s}$.

Nous avons calculé les flux de masse turbulent verticaux de la fraction de mélange (FM) (6.5) avec le modèle complet (MC) et appliqué le modèle à gradient (6.12) à la fraction de mélange pour les comparer avec les mesures expérimentales de FACKERLL & ROBINS (1982).

6.7 Mélange turbulent et réactions chimiques

Les niveaux de concentration d'une espèce chimique réactive au cours d'un phénomène de dispersion turbulente sont déterminés par l'influence du mélange turbulent sur le taux de réaction chimique. Cette relation est mis en évidence en comparant les temps caractéristiques de la réaction chimique (T_{ch}) et le temps caractéristique de la turbulence (T_t) que nous avons défini en §4.4.2 (4.13). Le nombre de *Damköhler* (Da) (DAMKÖHLER (1947)) exprime cette relation :

$$Da = \frac{T_t}{T_{ch}}. \quad (6.13)$$

On distingue trois régimes de réaction :

– **$Da \gg 1$: réaction rapide**

Le temps caractéristique de la turbulence est plus grand que le temps de réaction chimique. La turbulence n'a pas le temps de mélanger les espèces réactantes. La chimie a lieu à l'interface des constituants avant qu'elles puissent être bien mélangés.

– **$Da \approx 1$: réaction modérée**

La réaction chimique a lieu à la même vitesse que le micromélange. les fluctuations de concentration des espèces influent sur la vitesse effective de la réaction.

– **$Da \ll 1$: réaction lente**

Le micromélange s'effectue plus rapidement que la réaction chimique. Il conduit à une homogénéité des concentrations des espèces.

L'influence du mélange sur la réaction chimique peut être aussi étudiée à partir du *coefficient d'intensité de ségrégation* (I_s). Ce coefficient représente la relation de la corrélation des fluctuations turbulentes par rapport aux valeurs de concentration moyenne. Il se trouve dans l'équation de résolution de la concentration moyenne des espèces. Si on prend l'espèce rejetée à la source on a :

- La concentration volumique instantanée de l'espèce NO dans un volume fixe j (c_{NO}^j) est définie selon (C.1 - Annexe C) comme la moyenne de la concentration instantanée de l'espèce NO contenue dans toutes les particules m présentes dans le volume j . La concentration moyenne pendant un certain temps \mathcal{T} dans le même volume j sera :

$$\overline{c_{NO}^j} = \frac{1}{\mathcal{T}} \int_{t=t_0}^{t=t_0+\mathcal{T}} c_{NO}^j dt,$$

et dans la forme discrète, on peut calculer cette valeur en prenant des échantillons à intervalles réguliers Δt de sorte que $\mathcal{T} = n\Delta t$.

$$\begin{aligned} \overline{c_{NO}^j} &= \frac{1}{n\Delta t} \sum_{i=1}^n c_{NO}^j \Delta t, \\ \overline{c_{NO}^j} &= \frac{1}{nN_p} \sum_{i=1}^n \sum_{m=1}^N c_{mNO}^j. \end{aligned} \quad (6.14)$$

- La fluctuation de la valeur de concentration instantanée de NO dans ce volume par rapport à sa valeur moyenne est :

$$c'_{NO} = c_{NO}^j - \overline{c_{NO}^j}. \quad (6.15)$$

- L'équation d'évolution de la concentration de NO et O_3 dans le volume j peut être exprimée de la même manière qu'on l'a fait pour une particule m en suivant (6.10) sera donc :

$$\begin{cases} \frac{d c_{NO}^j}{dt} = -K_0 c_{NO}^j c_{O_3}^j, \\ \frac{d c_{O_3}^j}{dt} = -K_0 c_{NO}^j c_{O_3}^j, \end{cases} \quad (6.16)$$

- La décomposition de la valeur de la concentration instantanée \bar{c}_{NO}^j et $\bar{c}_{O_3}^j$ en sa valeur moyenne et sa fluctuation (6.16) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d(\bar{c}_{NO}^j + c'_{NO}{}^j)}{dt} = -K_0(\bar{c}_{NO}^j + c'_{NO}{}^j)(\bar{c}_{O_3}^j + c'_{O_3}{}^j), \\ \frac{d(\bar{c}_{O_3}^j + c'_{O_3}{}^j)}{dt} = -K_0(\bar{c}_{NO}^j + c'_{NO}{}^j)(\bar{c}_{O_3}^j + c'_{O_3}{}^j). \end{array} \right. \quad (6.17)$$

- L'expression de l'équation de transport de la concentration moyenne des espèces est obtenue par la moyenne des équations (6.17). Celle-ci pour l'espèce NO est donc :

$$\frac{d\bar{c}_{NO}^j}{dt} = -K_0 \left(\bar{c}_{NO}^j \bar{c}_{O_3}^j + \overline{c'_{NO}{}^j c'_{O_3}{}^j} \right), \quad (6.18)$$

$$\frac{d\bar{c}_{NO}^j}{dt} = -K_0 \bar{c}_{NO}^j \bar{c}_{O_3}^j \left(1 + \underbrace{\frac{\overline{c'_{NO}{}^j c'_{O_3}{}^j}}{\bar{c}_{NO}^j \bar{c}_{O_3}^j}}_{I_s} \right), \quad (6.19)$$

$$I_s = \frac{\overline{c'_{NO}{}^j c'_{O_3}{}^j}}{\bar{c}_{NO}^j \bar{c}_{O_3}^j}, \quad (6.20)$$

où I_s est le *coefficient d'intensité de ségrégation* cherché. Dans le cas de mélange de deux espèces qui ne sont pas pre-mélangé, les signes des fluctuations dans la relation (6.20) sont opposés. Cependant, si on ajoute une troisième espèce et sous certaines conditions (proximité des sources, concentrations initiales des espèces, régime turbulent) on peut arriver à obtenir une valeur positif pour le coefficient d'intensité de ségrégation. C'est le cas de l'expérience de KOMORI & UEDA (1984). Ils ont obtenues des valeurs positif (de l'ordre de 1,5) dans le cas du mélange, en turbulence de grille, de deux panaches réactifs (NO et O_3) avec une troisième espèce non-réactif placée entre les deux jets.

Dans le cas de deux espèces réactives, on peut relier le coefficient d'intensité de ségrégation au nombre de *Damköhler* :

- Quand $Da \ll 1$ les processus de mélange turbulent sont plus rapides que la réaction chimique. Dans le cas extrême, les deux espèces réactives se sont bien mélangées et ils atteignent ces valeurs moyennes avant d'avoir lieu la réaction chimique. Dans ce

cas, l'équation (6.19) pour NO est réduit à :

$$\frac{d\overline{c_{NO}^j}}{dt} = -K_0 \overline{c_{NO}^j} \overline{c_{O_3}^j},$$

la corrélation des fluctuations de concentration tends vers zéro et pour tant $I_s \rightarrow 0$.

- Quand $Da \gg 1$ les processus de mélange turbulent sont relativement lents par rapport au taux de la réaction chimique. Dans ce cas, le mélange turbulent est assez lent pour suivre la réaction aux échelles moléculaires. La valeur moyenne de la corrélation des fluctuations est négative car le sens des fluctuations est généralement opposé. La valeur minimale que peut prendre le coefficient d'intensité de ségrégation pour la réaction la plus rapide est $I_s = -1$ (MEEDER & NIEUWSTADT (2000)). SIMOËNS (2002) le démontre par l'absurde :

Soit par exemple $I_s = -n$, où n est un réel tel que $n > 1$.

Selon l'identité (6.20) on peut écrire :

$$\overline{c'_{NO}{}^j c'_{O_3}{}^j} + n \left(\overline{c_{NO}^j} \overline{c_{O_3}^j} \right) = 0,$$

Qui peut s'écrire aussi :

$$\overline{c'_{NO}{}^j c'_{O_3}{}^j} + \overline{c_{NO}^j} \overline{c_{O_3}^j} + (n-1) \overline{c_{NO}^j} \overline{c_{O_3}^j} = 0. \quad (6.21)$$

Or, par définition de la décomposition de Reynolds :

$$\begin{aligned} \overline{c_{NO}^j c_{O_3}^j} &= \overline{(\overline{c_{NO}^j} + c'_{NO}{}^j)(\overline{c_{O_3}^j} + c'_{O_3}{}^j)}, \\ \overline{c_{NO}^j c_{O_3}^j} &= \overline{c'_{NO}{}^j c'_{O_3}{}^j} + \overline{c_{NO}^j} \overline{c_{O_3}^j}, \end{aligned} \quad (6.22)$$

qui permet d'écrire (6.21) de la façon suivante :

$$\overline{c'_{NO}{}^j c'_{O_3}{}^j} = -(n-1) \overline{c_{NO}^j} \overline{c_{O_3}^j}, \quad (6.23)$$

ce qui est impossible car le terme $\overline{\dot{c}_{NO}^j \dot{c}_{O_3}^j}$ est toujours positif et par hypothèse : $(n-1)\overline{\dot{c}_{NO}^j} \overline{\dot{c}_{O_3}^j}$ est aussi positif puisque $n > 1$.

- Par contre, on ne peut pas donner une valeur supérieure. KOMORI *et al.* (1991) montrent qu'il est possible d'obtenir des valeurs instantanées positives au centre du panache dans le cas de mélange de trois espèces (deux réactives et l'autre non-réactive) ou comme dans l'expérience de WARHAFT (1984) de mélange des espèces non-réactives.

Cependant, on peut étudier l'évolution du mélange à partir de ce coefficient et le relier à la réaction chimique dans la dispersion d'un panache de NO dans une atmosphère de O_3 .

6.7.1 Modèle à gradient pour la corrélation des fluctuations de concentration des espèces

Lorsque l'on s'intéresse à des écoulements atmosphériques avec réaction chimique, dans la plupart des cas les espèces ne sont pas mélangées a priori. La corrélation de mélange turbulent $\overline{c'_A c'_B}$ (A et B sont les deux espèces chimiques non pré-mélangées) permet d'étudier l'efficacité du mélange. SIMOËNS (2002) a proposé un modèle pour calculer cette grandeur à partir des gradients des concentrations moyennes des espèces chimiques. Ce modèle a été testé par comparaison avec des résultats expérimentaux dans le cas du mélange de un jet de rhodamine et d'un jet de fluorescéine en turbulence de grille (SIMOËNS (2002)) :

$$\overline{c'_A c'_B} \approx D_s \frac{\partial \overline{c_A}}{\partial z} \frac{\partial \overline{c_B}}{\partial z}, \quad (6.24)$$

où D_s est un coefficient à définir.

Le coefficient d'intensité de ségrégation est calculé à l'aide de ce modèle :

$$I_s \approx \frac{D_s}{\overline{c_A} \overline{c_B}} \frac{\partial \overline{c_A}}{\partial z} \frac{\partial \overline{c_B}}{\partial z}. \quad (6.25)$$

Nous allons le vérifier à partir de nos résultats précédents.

6.8 Résultats de la simulation de la dispersion d'un panache réactif de NO dans une atmosphère de O_3

Comme dans le chapitre précédent, on a utilisé les résultats de la simulation numérique de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) obtenus après $t_e = 9$ s de calcul. On a lancé depuis la source 10 particules par pas de temps, soit 50.000 particules par seconde, qui sont réparties de façon équiprobable pour les deux espèces chimiques. On a utilisé la méthode d'interpolation barycentrique (Annexe B) pour toutes les grandeurs eulériennes calculées par l'approche LES.

On a enregistré les données de position, vitesse et concentration des particules fluides toutes les 0,25 s. Le temps total de la simulation numérique depuis le rejet des particules fluides a été de 22 s (le même que dans le cas de simulation de la dispersion d'un gaz passif), soit 19 s pour le calcul des profils moyens de concentration et de la fraction de mélange (6.5). Pour la totalité de la simulation, ont été lancées 2.241.048 particules fluides (presque 2 fois la quantité de particules utilisées pour la simulation du rejet d'un scalaire passif avec le modèle LES/STO (§ 5.3, cas C_2). Le temps de calcul sur un ordinateur PC Pentium IV a été de 878400 s (10 jours et 4 heures), soit 5 fois le temps de calcul pour la simulation du scalaire passif avec le modèle LES/STO (cas C_2).

6.8.1 Profils de la concentration de la Fraction de mélange (FM)

Les Figures 6.3, 6.4, 6.5, 6.6 et 6.7 montrent les comparaisons entre les profils de la concentration moyenne de la dispersion d'un gaz passif mesurées expérimentalement par FACKRELL & ROBINS (1982) (*exp*), ceux issus de la simulation numérique pour le rejet des particules fluides sans le modèle de diffusion et sans la réaction chimique (modèle LES/STO, cas C_2) et enfin ceux obtenus pour la fraction de mélange des espèces chimiques réactives (*FM*) en appliquant le modèle complet (MC) qui comprend les modèles (LES/STO) + diffusion + réaction chimique ((5.2) + (6.3) + (6.4)).

Les profils des écart-types sont aussi montrés dans les Figures 6.8, 6.9, 6.10, 6.11 et 6.12 pour les mêmes abscisses de mesure.

Nous avons calculé les flux de masse turbulents verticaux de la fraction de mélange des espèces $\overline{FM'w'}$ avec l'identité (6.11). Ces profils sont rapportés à la valeur maximale de la concentration de la fraction de mélange \overline{FM}_{max} et à la vitesse de frottement u_* et comparés aux mesures expérimentales de FACKRELL & ROBINS (1982) et aux résultats obtenus en utilisant le modèle à gradient (6.12). Les Figures 6.13, 6.14, 6.15, 6.16 et 6.17 montrent les profils moyens pour les différentes abscisses de mesure.

6.8.2 Profils de la concentration des espèces chimiques

Les profils de la concentration moyenne des espèces chimiques rapportés à la valeur maximale sont montrés dans les Figures 6.18, 6.19, 6.20, 6.21 et 6.22).

La Figure 6.23 montre l'évolution spatiale sur l'axe du panache de la valeur de la concentration moyenne de NO rapportée à sa valeur à la source (C_{NO}^0) et de la concentration moyenne de O_3 rapportée à sa valeur initiale ($C_{O_3}^0$).

L'évolution spatiale de la hauteur du centre du panache de l'espèce NO et les limites inférieure et supérieure de la concentration de $NO = 2 \text{ ppm}$ sont aussi montrées (Figure 6.24).

6.8.3 Profils de l'intensité de ségrégation

Les Figures 6.25, 6.26, 6.27, 6.28 et 6.29 montrent les profils du coefficient de ségrégation (I_s) des espèces chimiques, calculés et modélés (6.25) pour le cas de la simulation de la dispersion réactive dans la couche limite de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

La Figure 6.30 montre l'évolution spatiale du coefficient D_s du modèle à gradient (6.24).

Notons que dans tous les cas, les résultats obtenues sur la (FM) sont en générale meilleures que ceux avec la utilisation du modèle (LES/STO) en scalaire passif (§ 5.3.1).

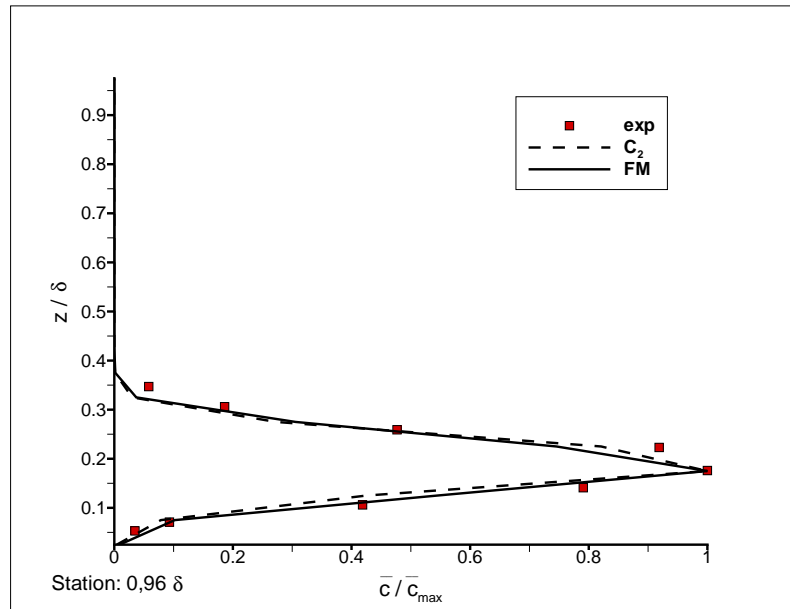


FIG. 6.3 – Profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 0,96\delta$.

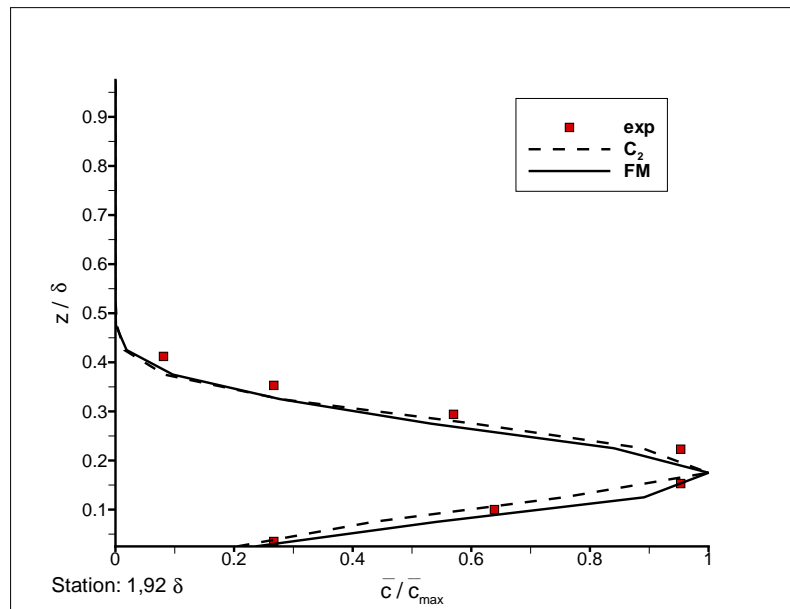


FIG. 6.4 – Profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 1,92\delta$.

■ exp : mesures expérimentales.

C_2 : calcul avec le modèle LES/STO (scalaire passif).

FM : calcul avec MC.

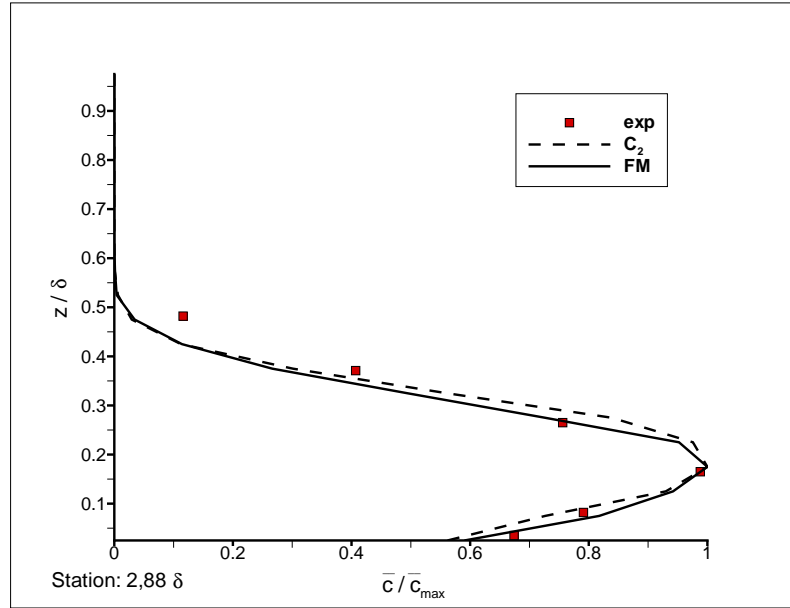


FIG. 6.5 – Profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 2,88\delta$.

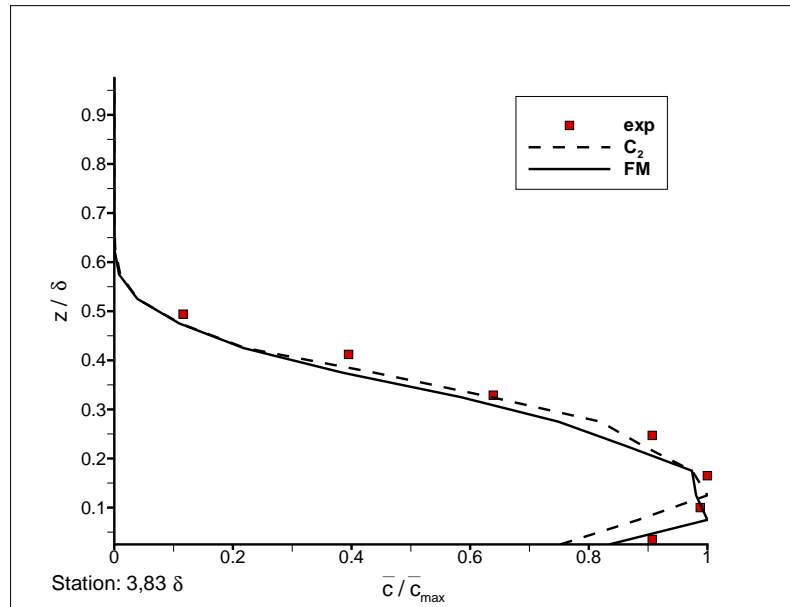


FIG. 6.6 – Profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 3,83\delta$.

■ exp : mesures expérimentales.

C_2 : calcul avec le modèle LES/STO.

FM : calcul avec MC.

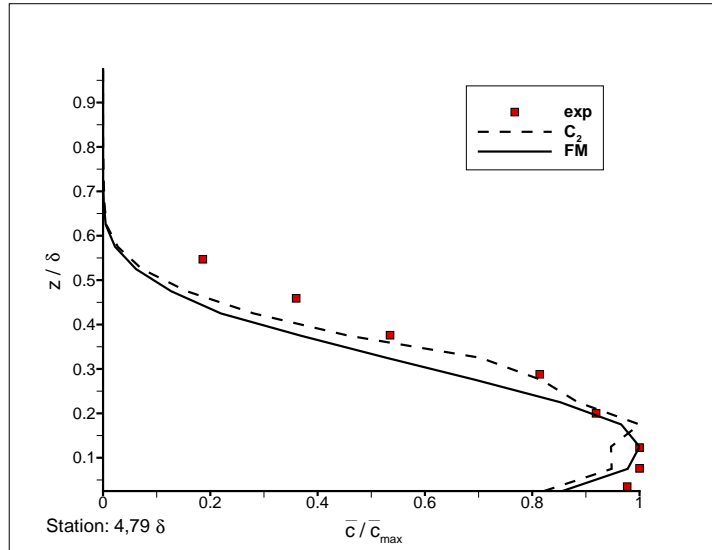


FIG. 6.7 – Profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 4,79\delta$.

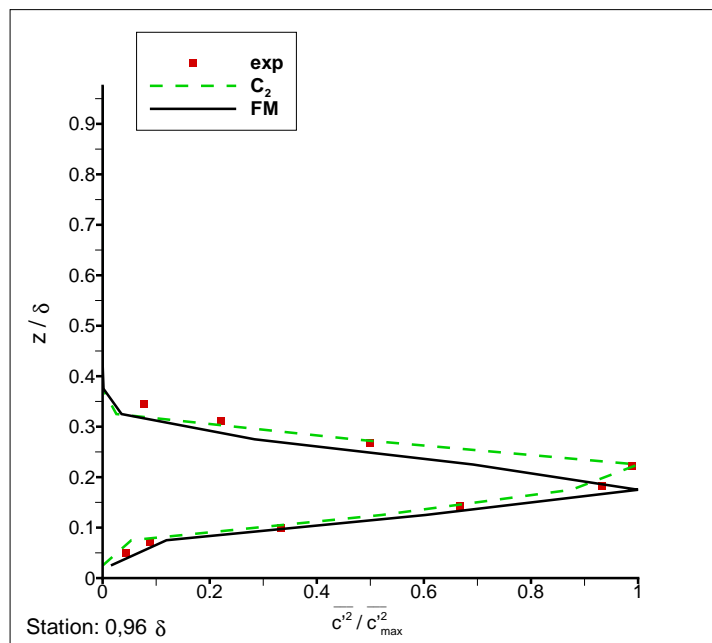


FIG. 6.8 – Profils de l'écart-type de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 0,96\delta$.

- exp : mesures expérimentales.
- C_2 : calcul avec le modèle LES/STO.
- FM : calcul avec le modèle MC.

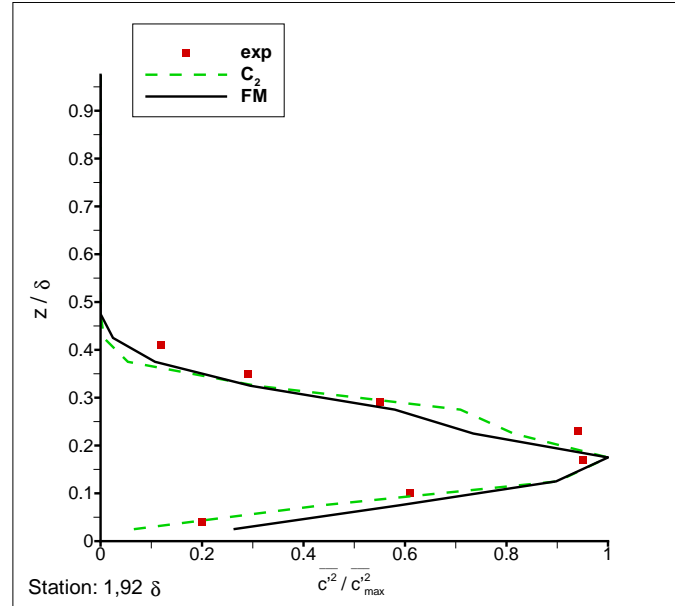


FIG. 6.9 – Profils de l'écart-type de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 1,92\delta$.

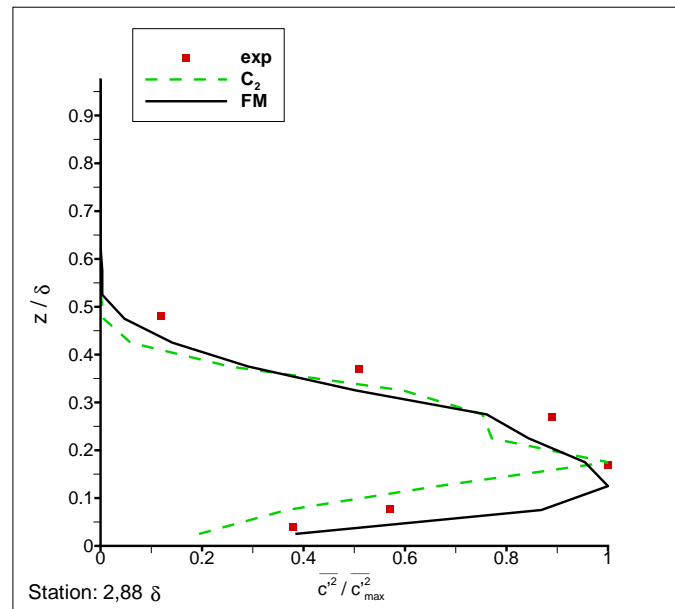


FIG. 6.10 – Profils de l'écart-type de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 2,88\delta$.

■ exp : mesures expérimentales.

C_2 : calcul avec le modèle LES/STO.

FM : calcul avec le modèle MC.

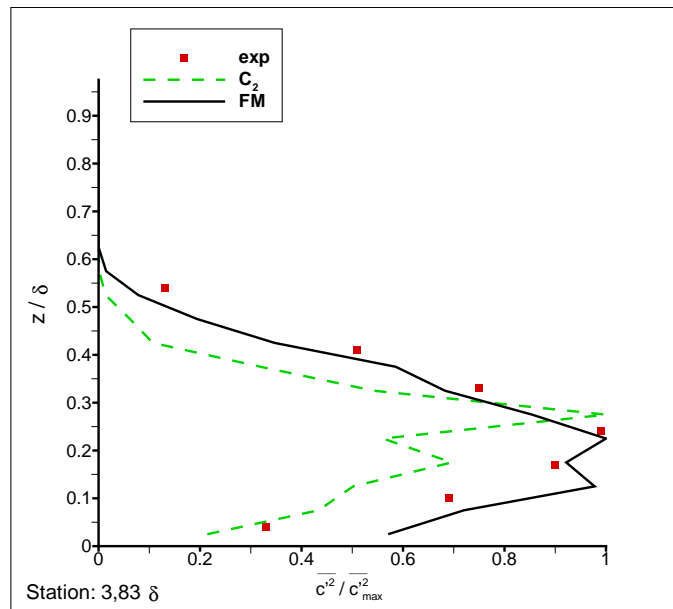


FIG. 6.11 – Profils de l'écart-type de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 3,83\delta$.

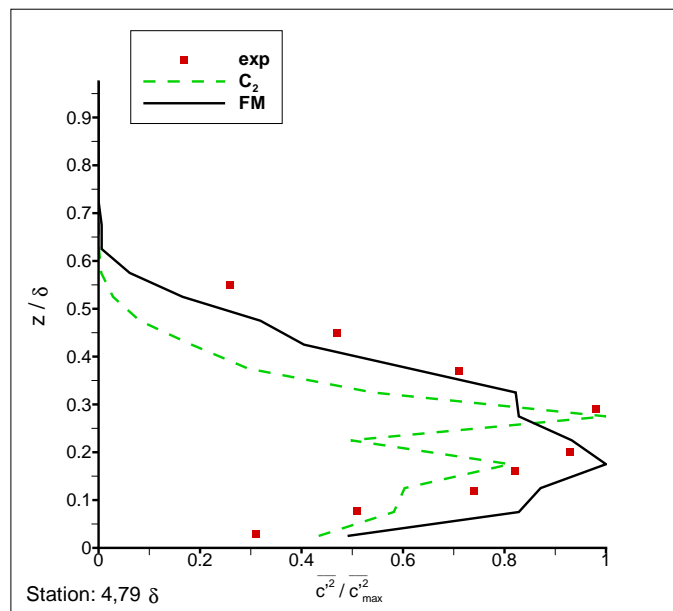
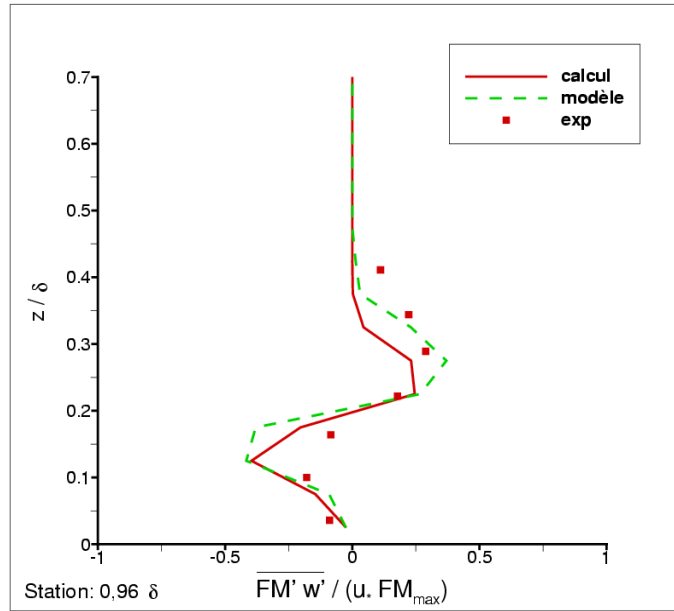
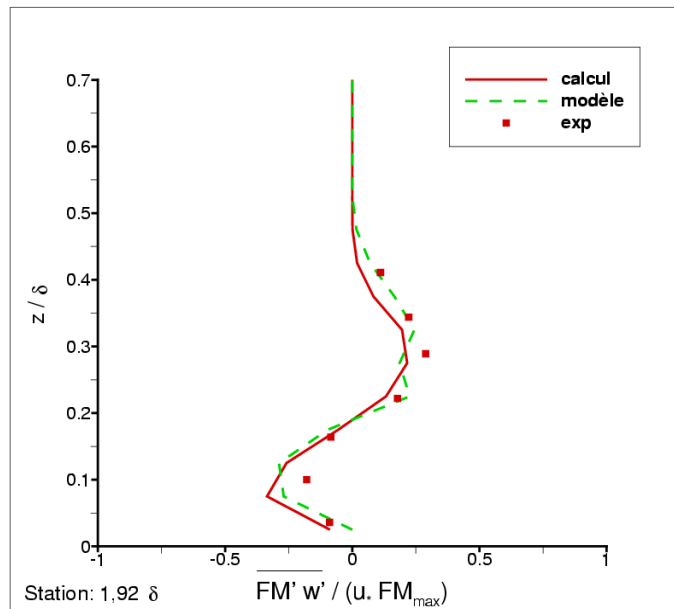


FIG. 6.12 – Profils de l'écart-type de la fraction de mélange des espèces chimiques réactives NO et O_3 à l'abscisse $x - x_s = 4,79\delta$.

- exp : mesures expérimentales.
- C_2 : calcul avec le modèle LES/STO.
- FM : calcul avec le modèle MC.

FIG. 6.13 – Abscisse $x - x_s = 0,96\delta$.FIG. 6.14 – Abscisse $x - x_s = 1,92\delta$.

Profil des flux de masse turbulents verticaux de la fraction de mélange FM' des espèces chimiques réactives NO et O_3 .

■ exp : mesures expérimentales (FACKRELL & ROBINS (1982)).

— : Modèle à gradient (VINKOVIC *et al* (2005b)).

— : calcul avec le modèle MC.

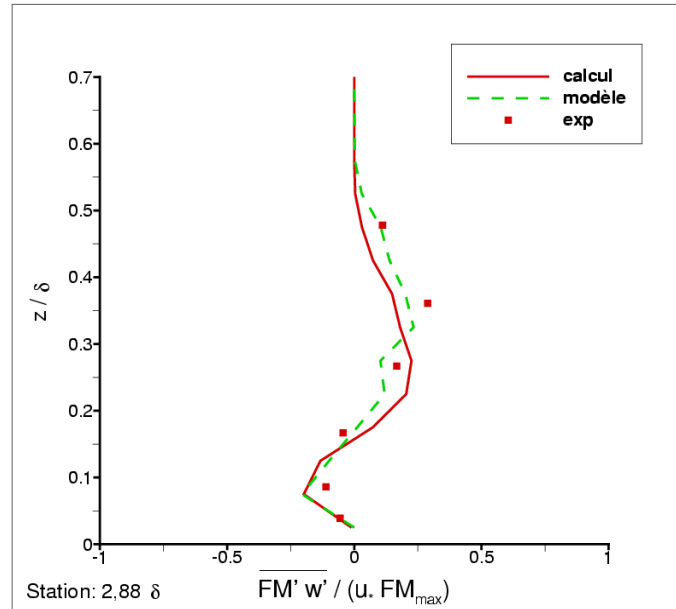


FIG. 6.15 – Abscisse $x - x_s = 2,88\delta$.

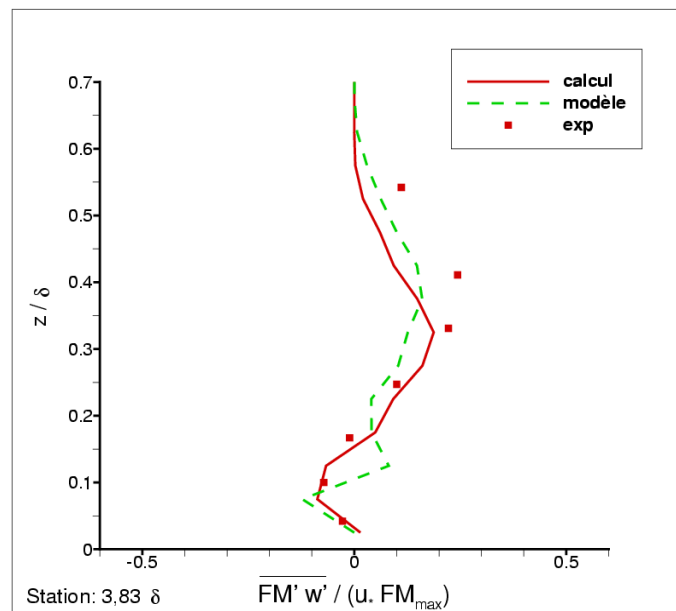


FIG. 6.16 – Abscisse $x - x_s = 3,83\delta$.

Profils des flux de masse turbulents verticaux de la fraction de mélange FM' des espèces chimiques réactives NO et O_3 .

- exp : mesures expérimentales (FACKRELL & ROBINS (1982)).
- : Modèle à gradient (VINKOVIC *et al* (2005b)).
- : calcul avec le modèle MC.

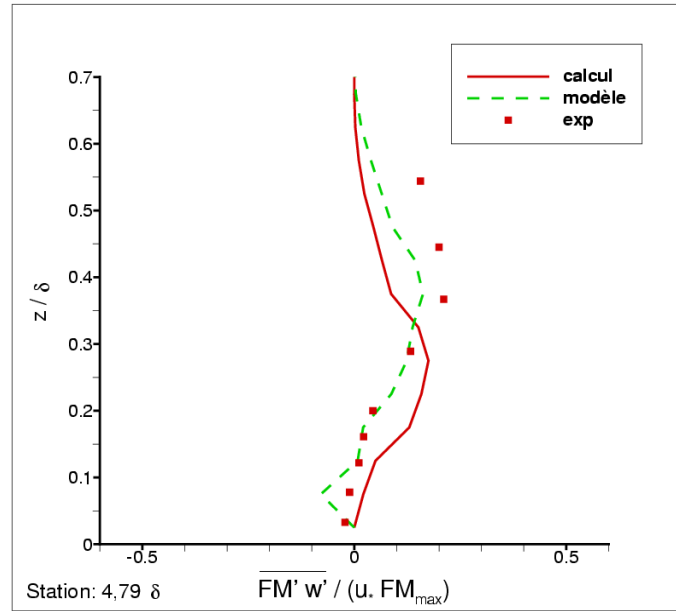


FIG. 6.17 – Profils des flux de masse turbulents verticaux de la fraction de mélange FM' des espèces chimiques réactives NO et O_3 . Abscisse $x - x_s = 4,79\delta$.

■ exp : mesures expérimentales (FACKRELL & ROBINS (1982)).

— : Modèle à gradient (VINKOVIC *et al* (2005b)).

— : calcul avec le modèle MC.

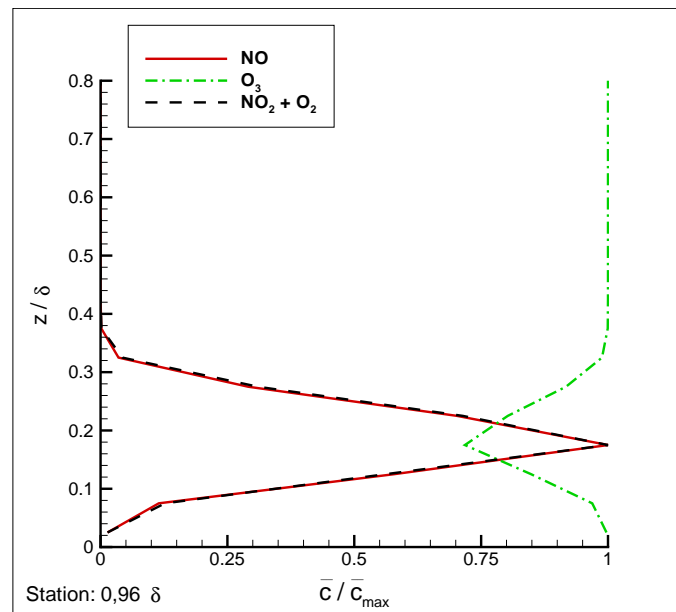


FIG. 6.18 – Profils de la concentration des espèces chimiques réactives NO , O_3 et $NO_2 + O_2$ rapportés à sa valeur maximale obtenues avec MC.

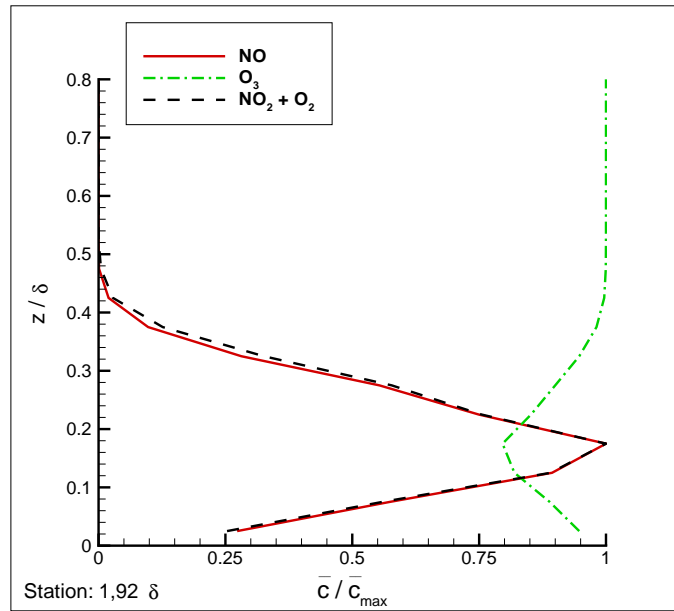


FIG. 6.19 – Profils de la concentration des espèces chimiques réactives NO , O_3 et $NO_2 + O_2$ rapportés à sa valeur maximale obtenues avec MC.

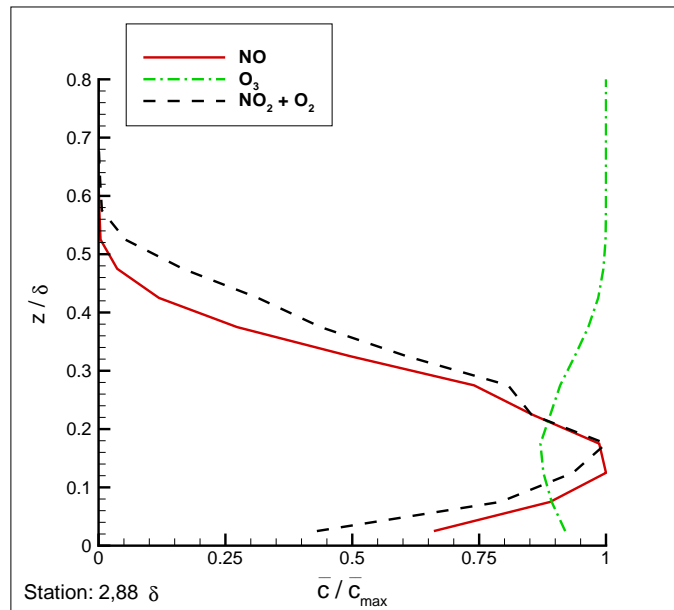


FIG. 6.20 – Profils de la concentration des espèces chimiques réactives NO , O_3 et $NO_2 + O_2$ rapportés à sa valeur maximale obtenues avec MC.

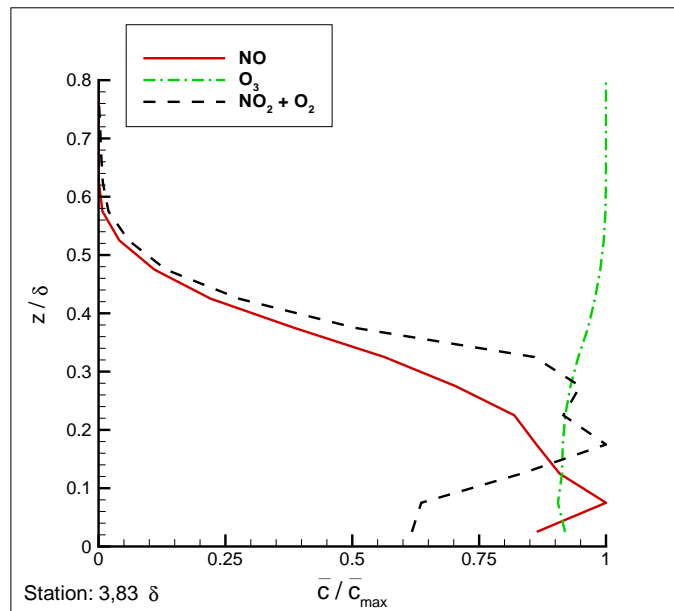


FIG. 6.21 – Profils de la concentration des espèces chimiques réactives NO , O_3 et $NO_2 + O_2$ rapportés à sa valeur maximale obtenues avec MC.

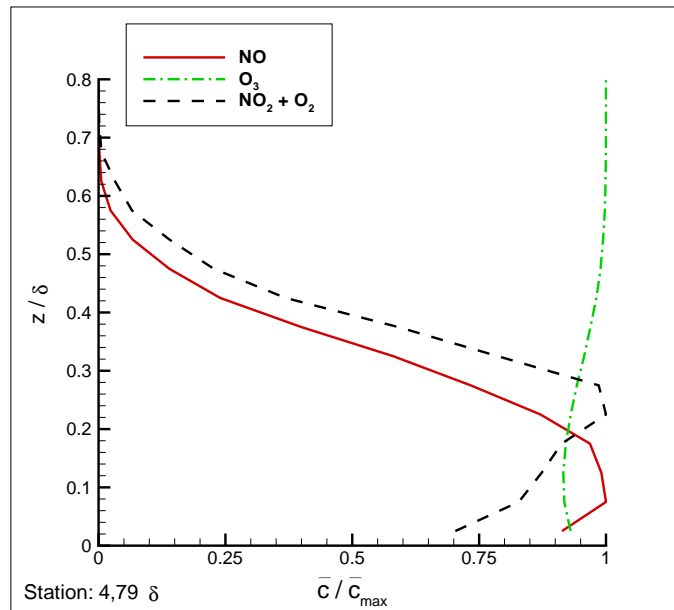


FIG. 6.22 – Profils de la concentration des espèces chimiques réactives NO , O_3 et $NO_2 + O_2$ rapportés à sa valeur maximale obtenues avec MC.

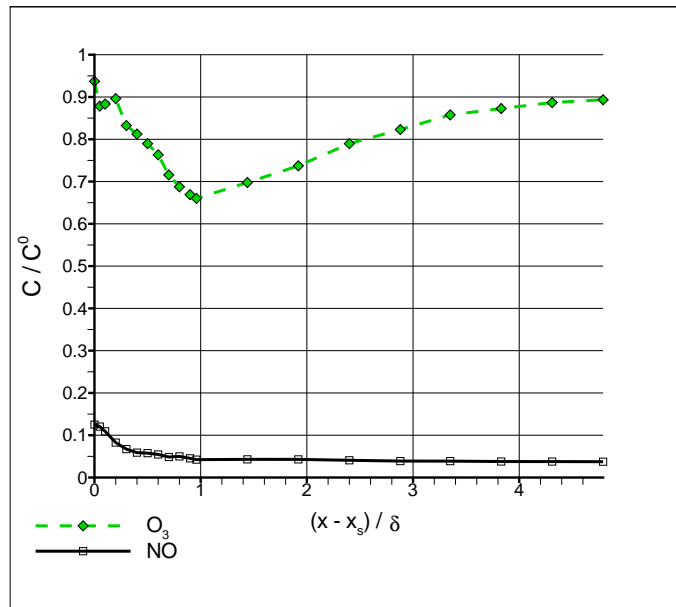


FIG. 6.23 – Evolution spatiale sur l'axe du panache de la concentration moyenne de l'espèce NO rapportée à la valeur de la concentration à la source C_{NO}^0 et de la concentration moyenne de O_3 rapportée à sa valeur initiale $C_{O_3}^0$.

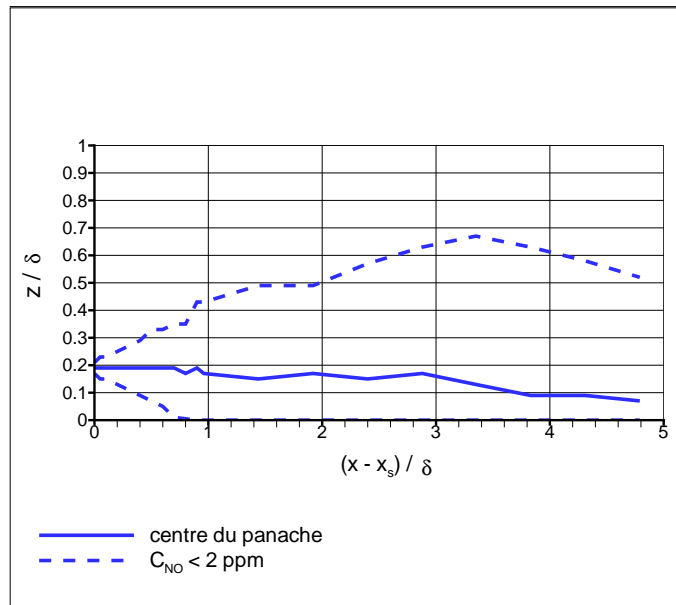
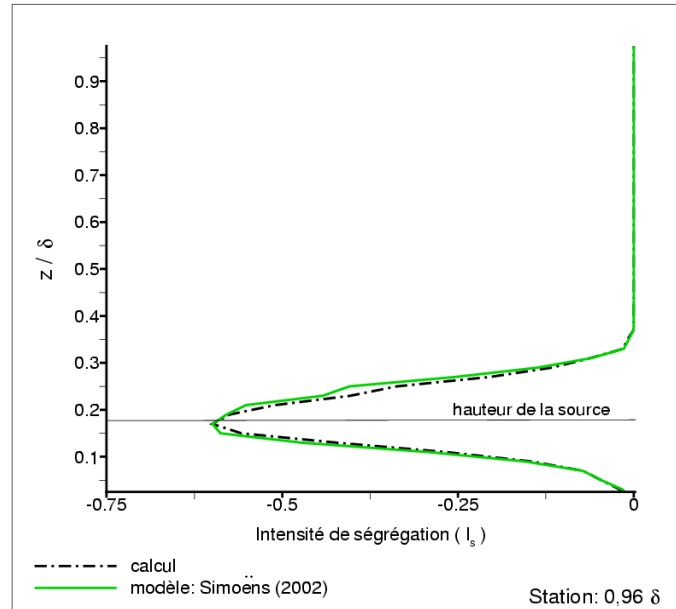
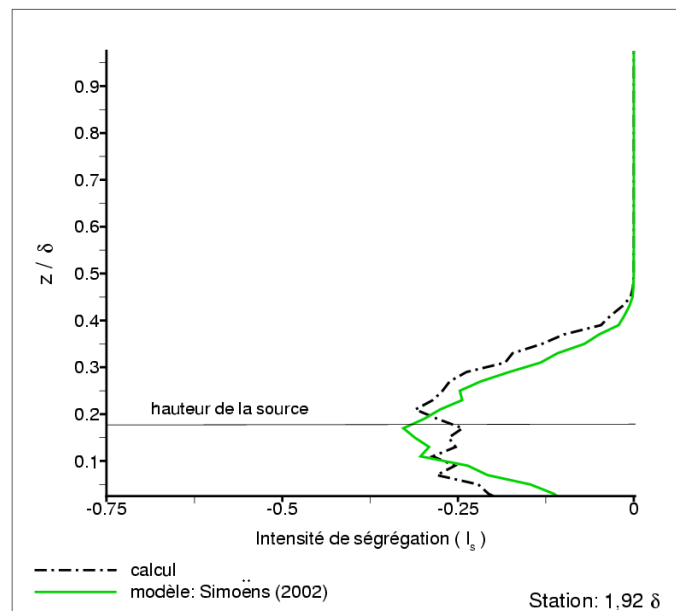


FIG. 6.24 – Evolution de la hauteur du centre du panache et hauteurs maximale et minimale de la concentration ($NO = 2ppm$).

FIG. 6.25 – Abscisse $x - x_s = 0,96\delta$.FIG. 6.26 – Abscisse $x - x_s = 1,92\delta$.

Profils du coefficient d'intensité de ségrégation des espèces chimiques réactives NO et O_3 .

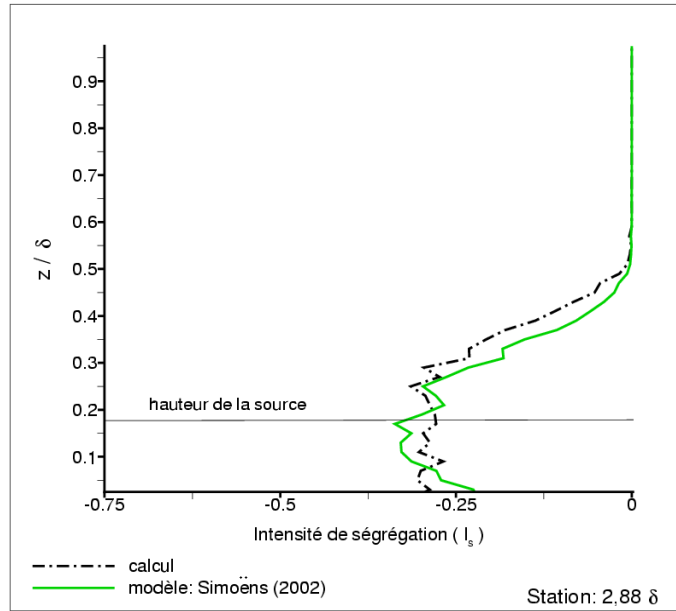


FIG. 6.27 – Abscisse $x - x_s = 2,88\delta$.

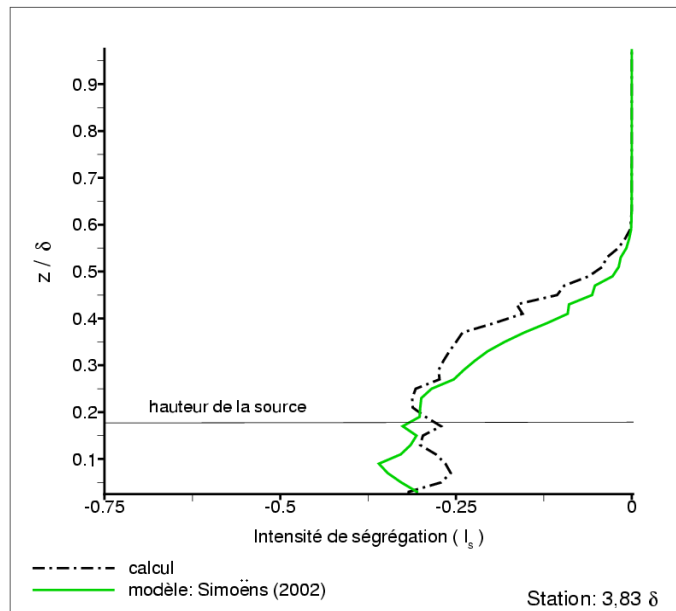


FIG. 6.28 – Abscisse $x - x_s = 3,83\delta$.

Profils du coefficient d'intensité de ségrégation des espèces chimiques réactives NO et O_3 .

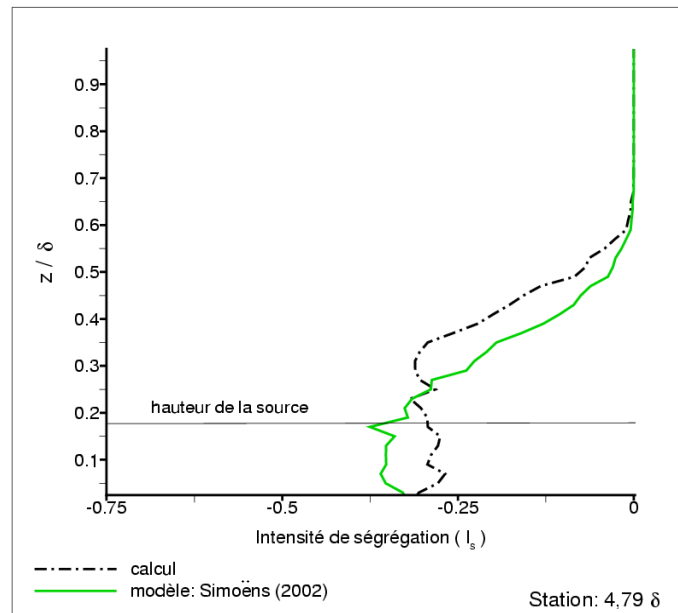


FIG. 6.29 – Abscisse $x - x_s = 4,79\delta$.

Profils du coefficient d'intensité de ségrégation des espèces chimiques réactives NO et O_3 .

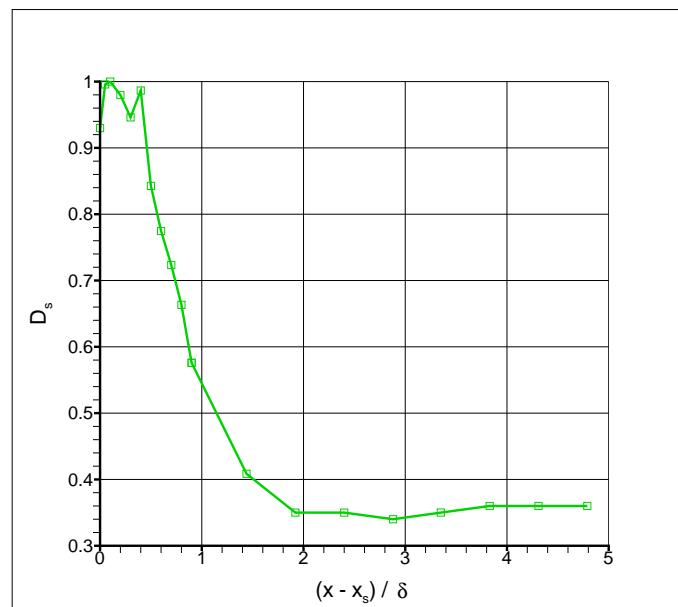


FIG. 6.30 – Evolution spatiale en aval de la source pour le coefficient D_s du modèle de corrélation des fluctuations turbulentes de la concentration des espèces chimiques réactives.

6.8.4 Comparaison avec la simulation de MEEDER & NIEUWSTADT (2000)

Nous allons comparer les résultats de la simulation numérique MC avec celle de MEEDER & NIEUWSTADT (2000). Ils ont réalisé une simulation de la dispersion de NO rejeté depuis une source ponctuelle dans une atmosphère de O_3 (de concentration initiale homogène) en suivant l'expérience de BUILTJES (1983). La technique LES a été utilisée pour simuler les grandes échelles de la turbulence et le transport de la ségrégation. Pour fermer le tenseur de contraintes visqueuses les auteurs ont fait appel à l'approximation de *Boussinesq* où le coefficient de viscosité turbulente est proportionnel à l'énergie cinétique turbulente de sous-maille (modèle 1,5 TKE § 1.4.5). La concentration des espèces chimiques a été obtenue à partir de la résolution de l'équation de transport eulérienne de la concentration d'espèces chimiques. Cette méthode ne permet pas de simuler l'état initial de la dispersion du panache réactif près de la source à cause de la résolution spatiale de la maille avec des particules fluides porteuses d'espèces chimiques réactives car l'évolution de la réaction chimique qui a lieu depuis la position de la source et jusqu'à la taille de la première maille de calcul n'est pas possible à simuler. Par contre, dans le cas de l'utilisation du modèle complet MC de suivi des particules fluides réactives, on peut diminuer les boîtes de calcul j de la concentration des espèces chimiques car il y aura toujours des particules fluides pour calculer la concentration. Cela est une des avantages de notre modèle de suivi des particules.

Dans le cas de la simulation de MEEDER & NIEUWSTADT (2000), la taille et la hauteur de la source, la rugosité du sol et la valeur de la vitesse de convection de l'écoulement ont été augmentées par rapport à celles de l'expérience de BUILTJES (1983) pour arriver à obtenir les mêmes nombres de *Damköhler* des espèces NO et O_3 à l'état initial. Dans le même but, ils ont modifié aussi la concentration initiale de NO et la constante de réaction chimique. Pour calculer le nombre de *Damköhler*, au lieu d'utiliser la définition (6.13) qui entraîne le calcul du temps caractéristique de la turbulence à la position de la source, ils ont proposé les relations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} Da_{NO}^0 = kc_{O_3}^0 \left(\frac{z_s}{U_s} \right), \\ Da_{O_3}^0 = kc_{NO}^0 \left(\frac{A_s}{U_s z_s} \right), \end{array} \right. \quad (6.26)$$

où z_s et A_s sont la hauteur et l'aire de la source respectivement et U_s est la vitesse de l'écoulement à la hauteur de la source.

Le tableau ci-dessous montre les caractéristiques principales de la simulation numérique de MEEDER & NIEUWSTADT (2000) (M&N2000), celles de l'expérience de BUILTJES (1983) (B83) et la simulation avec le modèle complet (MC) pour le cas de rejet dans la couche limite de FACKRELL & ROBINS (1982) :

Tableau 6.1 : Données caractéristiques de l'expérience de BUILTJES (1983) et simulations.

	K_0 $ppm^{-1}s^{-1}$	c_{NO}^0 ppm	$c_{O_3}^0$ ppm	Da_{NO}	Da_{O_3}	A_s mm^2	U_s m/s	z_s m	z_0 m
B83	0,40	3900,0	0,35	0,049	0,196	7,06	0,40	0,140	$9,95 \cdot 10^{-5}$
M&N2000	0,01	55,0	0,35	0,051	0,192	$301,06 \cdot 10^6$	7,70	112,000	$9,97 \cdot 10^{-2}$
MC	0,37	515,0	1,00	0,027	0,015	56,69	3,18	0,228	$2,88 \cdot 10^{-4}$

Comme on peut en constater ci-dessus, les nombres de *Damköhler* pour les espèces *NO* et *O₃* à l'état initial dans l'expérience de BUILTJES (1983) (B83) et dans la simulation de MEEDER & NIEUWSTADT (2000) (M&N2000) sont très proches. Les nombres de *Damköhler* bâtis sur les grandeurs correspondantes à la simulation numérique (MC) de la couche limite de FACKRELL & ROBINS (1982) sont plus bas. Il s'agit donc d'une réaction chimique plus lente. Nous supposons trouver un coefficient d'intensité de ségrégation plus faible dans le cas de la simulation (MC) au début du panache réactif par rapport à celui de (N&M2000) mais cela n'a été pas le cas. Au contraire, les valeur du coefficient de l'intensité de ségrégation à la source sont très proche de -1 ce qui permet d'affirmer qu'il s'agit d'une réaction rapide au moins dans cette partie du panache. Dans les expériences de LI & BILGER (1996) et BROWN & BILGER (1996) on trouve des nombres de *Damköhler* proches de l'unité. Ces derniers auteurs ont travaillé avec les mêmes espèces chimiques, la même constante de réaction K_0 et la même concentration initiale des espèces que dans la simulation (MC) dans une turbulence homogène. MICHELOT (1996) a fait une simulation numérique de cette expérience en utilisant un modèle stochastique lagrangien et les modèles de diffusion et des réactions chimiques décrits en § 6.3 et § 6.4. Il arrive aussi à obtenir un nombre de *Damköhler* proche de l'unité $Da^0 = 1,16$. La différence avec MEEDER & NIEUWSTADT (2000) (M&N2000) est due à la façon de calculer ce nombre. BROWN & BILGER (1996) utilisent la définition donnée par BILGER *et al.* (1991) :

$$Da^0 = \frac{T_t}{T_{ch}} \quad (6.27)$$

$$Da^0 = \frac{K_0 c_{O_3}^0}{U/M}$$

où M est la taille de la maille de la grille utilisée pour générer la turbulence dans l'expérience et U est la vitesse moyenne de l'écoulement.

Le nombre de *Damköhler* dans cette expérience est de l'ordre de l'unité signalant que les temps caractéristiques des échelles de turbulence et de la chimie sont similaires.

KOMORI *et al.* (1991) définent le nombre de *Damköhler* de la réaction selon l'expression suivante :

$$Da^0 = T_L Re_t^{-1/2} K_0 (c_{NO}^0 c_{O_3}^0)^{1/2}. \quad (6.28)$$

Dans le cas de la simulation (MC) on peut utiliser cette définition du nombre de *Damköhler* puisque nous connaissons le temps caractéristique lagrangien à la hauteur de la source (2.23). À partir de l'expression (4.13) (§ 4.2.2) et des profils de la fluctuation de l'énergie cinétique turbulente de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) (Figure 4.2) on obtient :

$$u'_{ts} = \sqrt{\frac{1}{3} (u_s'^2 + v_s'^2 + w_s'^2)} (= 0,281 \text{ m/s}),$$

$$T_{ts} \approx \frac{3}{2} \frac{\delta}{u'_{ts}} (= 6,41 \text{ s}),$$

et T_L à la hauteur de la source est :

$$T_{L_s} = \frac{4}{3} \frac{T_{ts}}{C_0} (= 3,81 \text{ s}).$$

La valeur de nombre de Reynolds turbulent à la hauteur de la source est :

$$Re_{ts} \approx \frac{u'_{ts} \delta}{\nu} (= 22480),$$

ce qui donne un nombre de *Damköhler* pour la simulation (MC) suivant la définition de KOMORI *et al.* (1991) :

$$Da_{(MC)}^0 = 0,21.$$

En utilisant la même définition du nombre de *Damköhler* pour la simulation (M&N2000) on trouve :

$$Da_{(M\&N(2000))}^0 = 0,0014.$$

Dans cette situation, on peut admettre que la simulation (MC) présente une réaction plus rapide que celle de (M&N2000) au moins dans la première partie du panache.

La Figure 6.31 montre l'évolution des profils du coefficient d'intensité de ségrégation obtenus à différentes abscisses calculées avec le modèle (MC), avec le modèle (6.25) (SIMOËNS

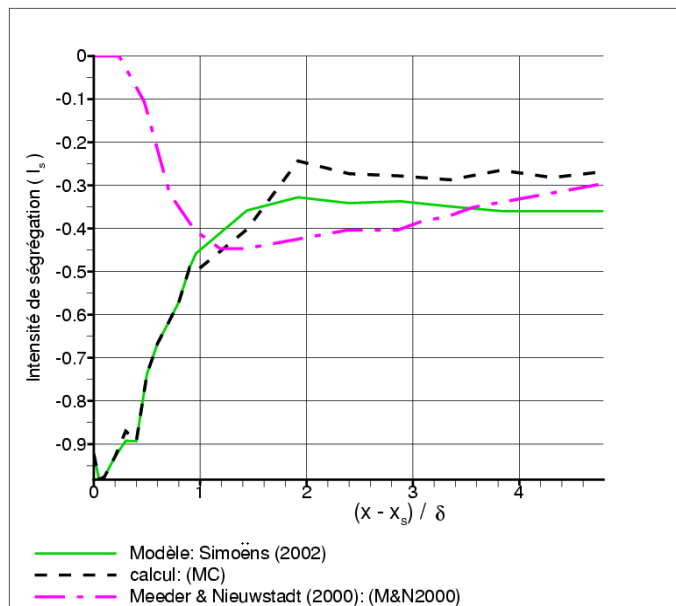


FIG. 6.31 – Evolution spatial du coefficient d'intensité de ségrégation I_s des espèces chimiques réactives NO et O_3 en aval de la source.

(2002)) et celle de la simulation M&N2000. La distance en aval a été normalisée par la hauteur de la source.

6.9 Discussion

Les profils de la concentration moyenne de la fraction de mélange (FM) des espèces chimiques réactives (Figures 6.3 à 6.7) sont en bon accord avec les mesures expérimentales de la dispersion du gaz propane faites par FACKRELL & ROBINS (1982) (*exp*) et avec les résultats du modèle LES/STO (C_2) obtenus à partir de (5.2) et montrés en § 5.2.1, pour toutes les stations de mesure. Cependant, pour les profils des écart-types on observe un meilleur accord entre la fraction de mélange (FM) des espèces réactives et les mesures expérimentales (*exp*) que dans le cas de la simulation LES/STO (C_2) (Figures 6.8 à 6.12). On constate ici la grande sensibilité des fluctuations de la concentration aux phénomènes de diffusion moléculaire.

Les Figures 6.13 à 6.17 montrent un bon accord entre les flux de masse turbulents verticaux de la fraction de mélange ($\overline{FM'w'}$) et les mesures expérimentales de FACKRELL & ROBINS (1982), sauf pour les deux dernières stations (Figures 6.16 et 6.17) à partir d'une hauteur de $z/\delta = 0,3$ où l'on observe une sous-estimation.

Le modèle à gradient de VINKOVIC *et al.* (2005b) pour la *fraction de mélange* (FM) est

aussi en bon accord avec les mesures expérimentales.

Les profils de la concentration moyenne des espèces chimiques réactives rapportées à leur valeurs maximales montrent clairement qu'il existent deux régimes du champ de la concentration. Le champ de la concentration proche de la source (jusqu'à $x - x_s \approx 2\delta$, Figures 6.18 et 6.19) montre que la position verticale de la concentration maximale de l'espèce chimique produit de la réaction ($NO_2 + O_2$) est en coïncidence avec celle issue de la source (NO). À la position $x - x_s = 2,88\delta$ (Figure 6.20) on aperçoit un décollement des profils de la concentration très léger. À $x - x_s = 3,83\delta$ (Figure 6.21) on observe l'apparition d'une valeur maximale de la concentration pour l'espèce $NO_2 + O_2$ placée dans la bordure supérieure du panache de NO et une deuxième valeur maximale décalée un peu plus haute que la hauteur correspondante à la concentration maximale de NO . Plus loin de la source (Figure 6.22), la dynamique de la réaction chimique est plus forte dans la zone limite supérieure du panache de NO car la valeur maximale du produit de la réaction $NO_2 + O_2$ a été décalée sur cette zone.

L'évolution spatiale des valeurs de la concentration moyenne des espèces chimiques sur le centre du panache (Figure 6.23) montre que la concentration de NO diminue fortement jusqu'à une valeur de $C_{NO} = 0,12C_{NO}^0$. Ensuite, la concentration des deux espèces primaires diminuent jusqu'à l'abscisse $x - x_s \approx \delta$. La concentration d'ozone croît ensuite graduellement vers la valeur de sa concentration initiale ($C_{O_3}^0$) lointain de la source tandis que la concentration de NO diminue lentement.

Ce changement de comportement peut être lié au fait que à $x - x_s \approx \delta$ la réaction chimique est plus lente que près de la source (Figure 6.31) et les phénomènes turbulents entraînent de l'ozone à l'intérieur du panache plus rapidement que la réaction chimique ne le transforme.

Les profils de l'intensité de ségrégation des espèces chimiques NO et O_3 , calculés et modélés selon (6.25), montrés dans les Figures 6.25 à 6.29, sont en bon accord si l'on choisit convenablement le coefficient D_s . L'évolution spatiale de ce coefficient, présentée dans la Figure 6.30, montre aussi que la dynamique du mélange est différente si l'on se place proche de la source ou plus loin. Le coefficient D_s diminue rapidement en aval de la source jusqu'à l'abscisse $x - x_s = 1,92\delta$ où il se stabilise, signalant le changement du régime de mélange des espèces.

L'évolution spatiale du coefficient d'intensité de ségrégation est comparée à celle trouvée par MEEDER & NIEUWSTADT (2000) à l'aide de la simulation LES pour l'expérience de BULTJES (1983). Près de la source, on constate la différence du rapport entre le temps caractéristique de la turbulence et de la réaction chimique pour les deux simulations. Dans le cas de la simulation (MC), la réaction chimique est modérée car le coefficient de l'intensité de ségrégation est proche de la valeur -1 . Ensuite, il tend vers zéro rapidement au fur et à mesure que l'on s'éloigne en aval de la source jusqu'à $x - x_s \approx \delta$. À partir de cette abscisse, il continue à tendre vers zéro plus lentement et il se stabilise vers une valeur de $I_s \approx -0,3$ signalant que la réaction chimique est devenue lente.

Dans le cas de la simulation M&N2000, il s'agit au contraire d'une réaction lente près de la source. Le coefficient de l'intensité de ségrégation, de valeur presque zéro à la source, diminue vers une valeur de $I_s \approx -0,45$ à l'abscisse $x - x_s \approx \delta$ pour croître après graduellement vers la valeur $I_s \approx -0,3$.

Le modèle à gradient (6.25) de Simoëns (2002) suit parfaitement les valeurs de I_s calculées avec MC jusqu'à $x - x_s \approx \delta$. Passée cette abscisse en aval de la source, les différences ne sont pas très importantes.

En comparant les deux simulations, on peut conclure que même si près de la source les réactions chimiques sont classées différemment, plus loin on arrive à obtenir une réaction chimique lente par rapport au temps caractéristique de la turbulence ce qui est logique dans le sens où les réactions chimiques seront plus lentes au fur et à mesure que les espèces d'origine s'épuisent et cela est produit plus rapidement que le phénomène de décroissance de la turbulence.

Chapitre 7

SIMULATION DE LA DISPERSION D'UN PANACHE REACTIF SUR UN VILLAGE EN ARGENTINE

7.1 Introduction

Il nous semble intéressant de conclure notre travail par montrer une application de cet outil permettant la prédiction très précise d'un épisode de pollution.

Dans ce chapitre nous allons supposer qu'il est prévu l'installation d'une usine d'incinération des ordures ménagères utilisées comme des déchets combustibles non-recyclables de la capitale du département *Diamante (Province de Entre Ríos) Argentine*. Cette ville a une activité commerciale importante étant donné la situation stratégique de son port. Sa population est de approximativement 20.000 habitants.

On suppose l'installation prévue à 30 km au sud de la ville de *Diamante*, à côté d'un petit village au bord du fleuve *Paraná* appelé *Las Masitas* et dont la plupart de ses habitants ont une activité de pêche côtière. Par contre, ce petit village a une population d'environ 100 habitants.

Nous allons simuler la dispersion d'un panache de monoxyde d'azote issu d'une cheminée de l'usine dans une atmosphère de faible concentration d'ozone.

Des niveaux de concentration moyenne de NO et du produit de la réaction ($NO_2 + O_2$), la hauteur et le largeur du panache sur la zone polluée seront présentés.

7.2 Description de la zone d'étude et situation de la simulation

Le village *Las Masitas* est situé à 30 km au sud de la capitale du département *Diamante* et à 70 km au sud de la capitale de la Province de *Entre Ríos - Argentine*, sur les rives du fleuve *Paraná* qui à cette latitude a une largeur de presque 10 km. La Figure 7.1 signale

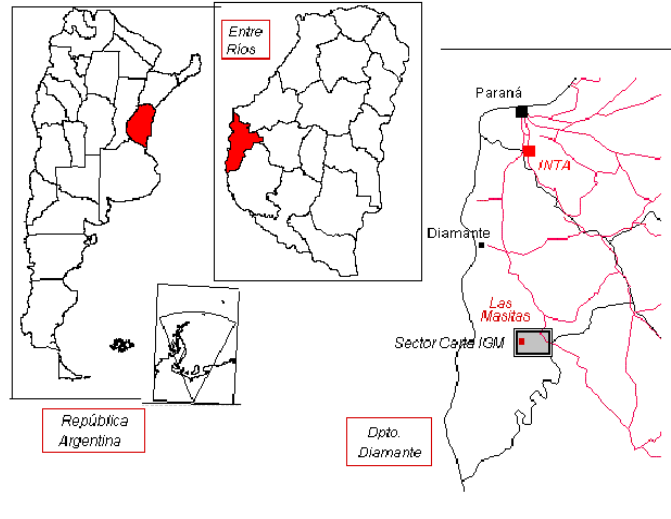


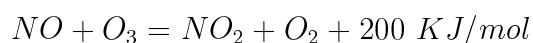
FIG. 7.1 – Situation géographique de la zone d'étude. Diamante - Entre Ríos - Argentine.

le situation du secteur de carte *IGM* (Institut Géographique Militaire) de la zone d'étude. La Figure 7.2 montre la situation du village, les voies principales d'accès et les courbes topographiques tracées tous les 5 *m*.

La direction dominante du vent est le nord-est pendant l'été et le sud pendant l'hiver. La vitesse moyenne annuelle obtenue à 10 *m* de hauteur sur le terrain est de 5 *m/s*. Cependant, il existe une variation de la direction du vent pendant la journée dans des situations météorologiques non-significatives (peu vent, ciel dégagé de nuages) sur les rives du fleuve à cause de la différence de capacité d'absorption de radiation solaire terre-eau qui produit une brise de côte pendant la journée et une brise de terre pendant la soirée et une partie de la nuit.

En été, les niveaux d'ozone troposphérique augmentent à cause de la pollution des villes plus importantes situées au nord. L'ozone est *advecté* (emporté horizontalement par le vent) sur le village.

Si l'on suppose que l'usine sera installée sur la côte, la brise provenant du fleuve pendant la matinée entraîne le panache de la cheminée, contenant de hautes concentrations de *NO*, sur le village. La réaction chimique entre le *O₃* et le *NO* sera l'objet de notre simulation :



Nous allons simuler quelques minutes de cet épisode pendant la matinée d'une journée d'été.

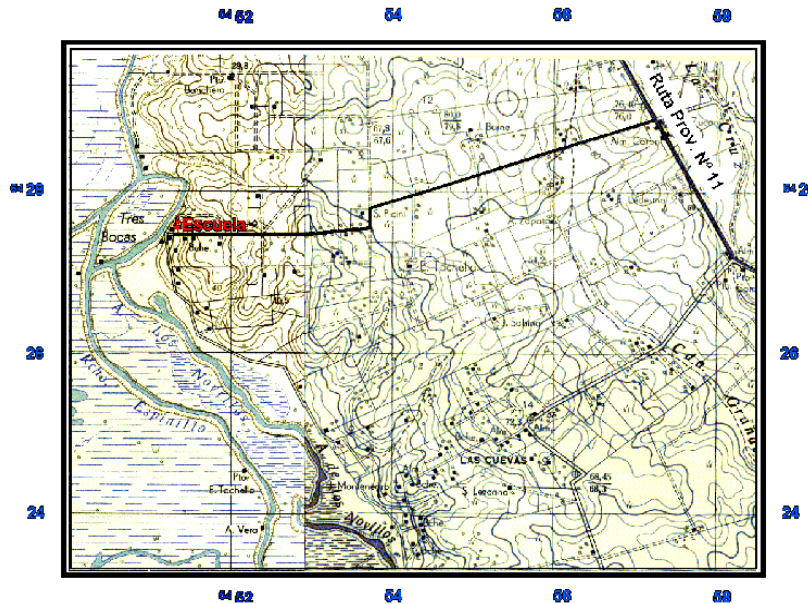


FIG. 7.2 – Secteur de Carte Topographique de la zone d'étude. Village de *Las Masitas*. Diamante - Entre Ríos - Argentine.

La Figure 7.3 montre un secteur réduit de la carte topographique signalant la position hypothétique de la cheminée et de l'école du village où ont été faites des mesures des grandeurs météorologiques.

7.2.1 Modèle digital du terrain

Les courbes de niveau topographique du terrain tracées sur la carte (IGM) ont été traitées numériquement pour obtenir un modèle du terrain à l'aide d'un logiciel de digitalisation. La Figure 7.4 montre une vue aérienne de ce modèle et la Figure 7.5 une vue tridimensionnelle que nous avons introduit dans le code de simulation numérique ARPS.

7.2.2 Données caractéristiques de la surface du terrain

Dans la zone d'étude, on trouve une végétation composée des pelouses et d'arbustes de taille réduite d'une hauteur moyenne de $1,5\text{ m}$ distribués de façon plus ou moins régulière et peu dense. On trouve de petites maisons isolées d'environ 4 m de hauteur. Avec cette information, on a estimée la hauteur caractéristique de la rugosité comme étant de l'ordre de $z_{0T} = 0,05\text{ m}$ à partir des estimations faites par RAUPACH *et al.* (1991) pour une végétation peu dense d'environ 1 m de hauteur. Sur le fleuve, la hauteur de la rugosité

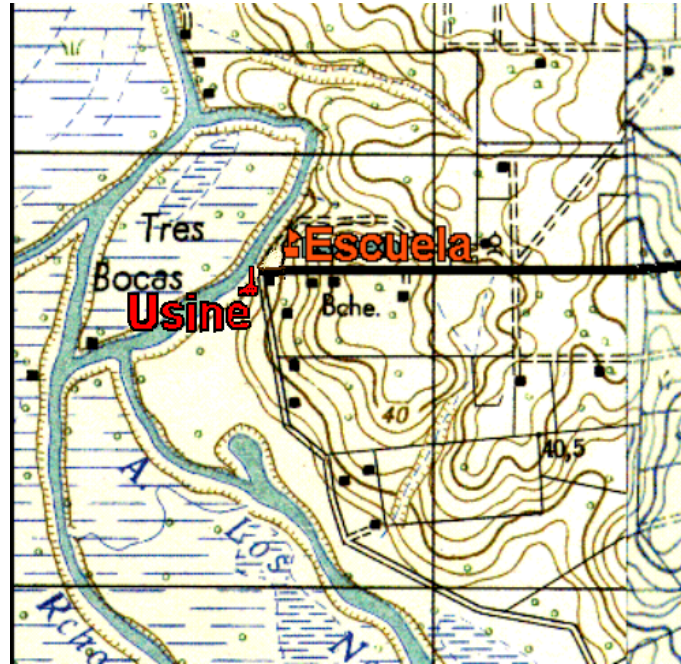


FIG. 7.3 – Site d'installation hypothétique d'une usine près du village de *Las Masitas*.

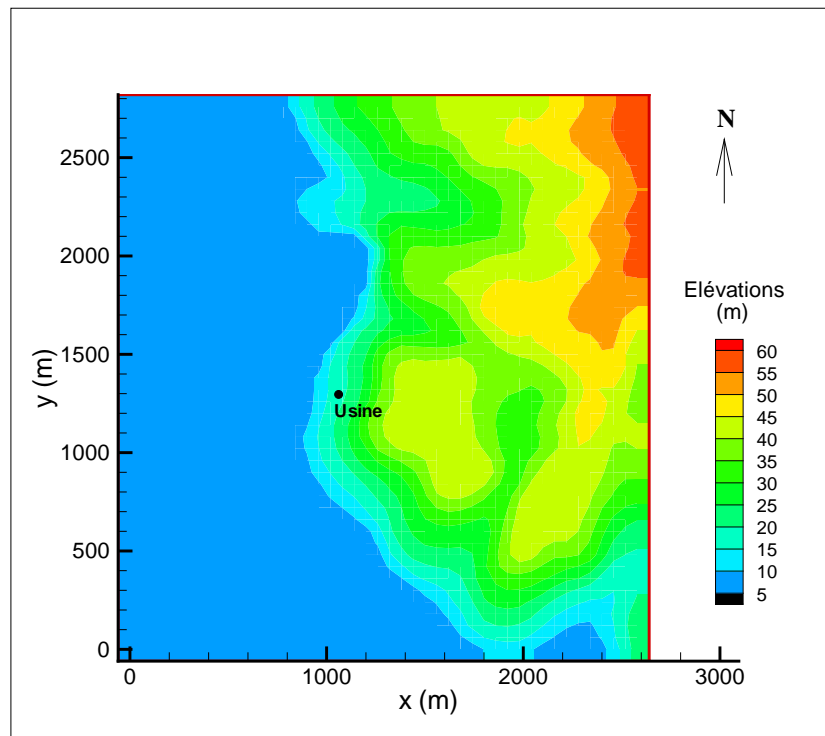


FIG. 7.4 – Modèle topographique du terrain de la zone d'étude. Vue aérienne des niveaux du relief.

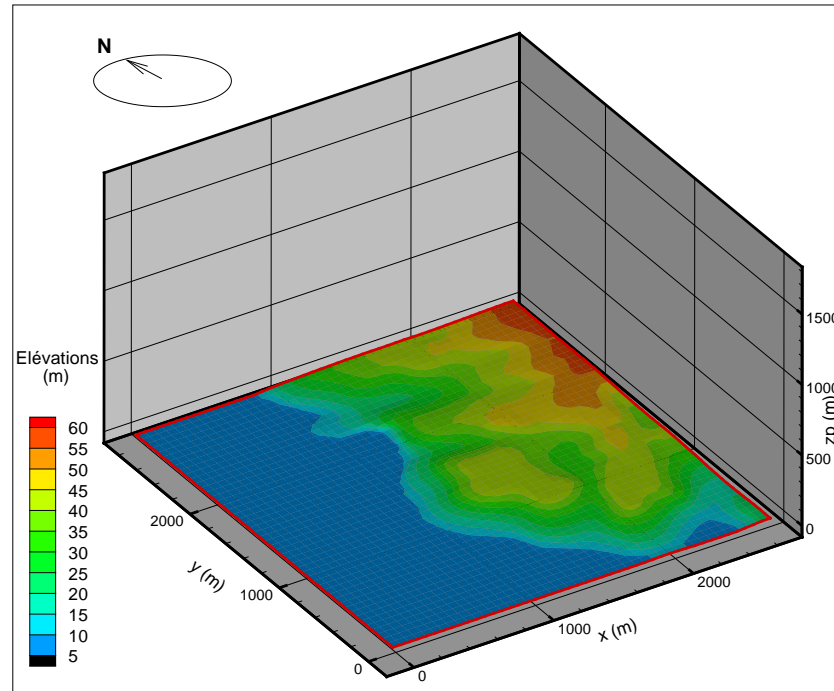


FIG. 7.5 – Modèle topographique du terrain de la zone d'étude. Vue tridimensionnelle des niveaux du relief.

caractéristique a été estimée comme étant de l'ordre de $z_{0F} = 0,005 \text{ m}$.

Ces paramètres seront nécessaires lors de l'initialisation du champ de vitesse dans la simulation numérique. On aura donc deux profils différents selon qu'il s'agit d'une surface d'eau ou de terre. On ne fera pas de différences au niveau des couvertures végétales présentes dans cette étude.

7.2.3 Données météorologiques

Des mesures des grandeurs météorologiques ont été prises pendant les mois de novembre et décembre 1999 avec une station météorologique automatique située dans l'école du village (Figure 7.3) éloigné approximativement 200 m de l'installation de l'usine. Le capteur de la vitesse du vent a été placé à une hauteur de 15 m tandis que les mesures de température, humidité, radiation solaire, pression atmosphérique et précipitation ont été prises à $1,5 \text{ m}$. La station enregistra les valeurs moyennes ainsi que les valeurs maximales et minimales de la vitesse du vent, de l'humidité, de la pression et des valeurs accumulées de radiation solaire ainsi que des précipitations toutes les 30 minutes. La Figure 7.6 montre une partie de ces enregistrements. En ligne bleu a été marquée la période que nous allons utiliser pour cette simulation.

Malheureusement, nous ne disposons pas des mesures de la direction et de la valeur de la vitesse du vent pour d'autres hauteurs afin d'avoir un profil complet. Pour nous affranchir de cet inconvénient, nous allons utiliser un profil logarithmique dont la hauteur de

la couche limite a été estimée à $\delta = 750 \text{ m}$. La vitesse moyenne dans cet épisode est de $u_{15} = 5,4 \text{ m/s}$ et sa direction est d'ouest (Figure 7.6). Nous allons estimer les fluctuations de la vitesse du vent à partir des profils obtenus par FACKRELL & ROBINS (1982).

La constante de *Von-Kármán* prend des valeurs différentes si l'on se place sur le terrain ou sur le fleuve. Pour les profils de la vitesse du vent sur le terrain, la constante de *Von-Kármán* est de : $k_{vT} = 0,4$ et sur le fleuve de : $k_{vF} = 0,35$.

On a considéré à cette heure que l'atmosphère présente un profil de température potentielle constante.

7.3 Obtention des paramètres nécessaires à partir des données disponibles

Dans cette section, nous allons faire une description détaillée de l'obtention des paramètres nécessaires pour le calcul numérique à partir des données disponibles décrites précédemment.

7.3.1 Conditions initiales et aux limites

Nous allons estimer les profils de la vitesse moyenne pendant le temps de la simulation à partir des mesures faites à 15 m et de la loi logarithmique. En considérant les axes des coordonnées cartésiennes de la Figure 7.5 et la direction du vent d'ouest, l'équation (4.2) (§ 4.2) donne le profil de la vitesse moyenne. Dans cette équation, nous allons considérer les altitudes z et les hauteurs sur un plan de référence en $z - z_{ref}$ où z_{ref} est l'élévation du niveau moyen du fleuve par rapport à la mer. Dans ce cas $z_{ref} = 8 \text{ m}$. L'équation (4.2) valide pour le terrain est alors :

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{u_{*T}}{k_{vT}} \ln \left(\frac{z - z_{ref}}{z_{0T}} \right), \\ \bar{v} &= 0, \\ \bar{w} &= 0, \end{aligned} \tag{7.1}$$

Browse data from masitas.

File Edit Help

Date	Time	Air Temp	Hi	Low	ET	Soil Temp	Leaf Temp	Solar Rad	Solar Energy	Deg. Days	Bar	Wind Speed	Hi	Dir	Wind Chill	Wind Run	Rain	Hi Rate
11/01/99	10:30p	15.4	15.4	15.3	--	--	--	0	0.0	0.0	1008.1	3.6	9.8	WNW	12.4	6.6	0.00	0.0
11/01/99	11:00p	15.2	15.3	15.1	.031	--	--	0	0.0	0.0	1008.4	4.0	10.3	WNW	11.6	7.4	0.00	0.0
11/01/99	11:30p	14.9	15.1	14.9	--	--	--	0	0.0	0.0	1008.4	4.5	10.3	WNW	10.7	7.6	0.00	0.0
11/01/99	12:00p	14.9	14.9	14.9	.035	--	--	0	0.0	0.0	1008.5	4.5	11.6	WNW	10.7	7.4	0.00	0.0
11/02/99	12:00a	14.9	14.9	14.9	.035	--	--	0	0.0	0.0	1008.5	4.5	11.6	WNW	10.7	7.4	0.00	0.0
11/02/99	12:30a	14.9	15.0	14.9	--	--	--	0	0.0	0.0	1008.3	4.0	11.2	WNW	11.3	7.1	0.00	0.0
11/02/99	1:00a	15.0	15.1	14.9	.036	--	--	0	0.0	0.0	1008.3	4.5	9.8	WNW	10.7	7.6	0.00	0.0
11/02/99	1:30a	15.1	15.2	15.1	--	--	--	0	0.0	0.0	1008.0	4.5	10.3	WNW	10.8	7.6	0.00	0.0
11/02/99	2:00a	15.1	15.1	15.0	.041	--	--	0	0.0	0.0	1007.7	4.0	12.1	WNW	11.4	7.1	0.00	0.0
11/02/99	2:30a	15.1	15.1	15.0	--	--	--	0	0.0	0.0	1007.7	4.0	9.4	WNW	11.4	6.9	0.00	0.0
11/02/99	3:00a	15.0	15.1	14.9	.039	--	--	0	0.0	0.0	1007.6	3.6	8.9	W	12.0	6.4	0.00	0.0
11/02/99	3:30a	14.9	15.0	14.9	--	--	--	0	0.0	0.0	1007.6	3.1	7.2	W	12.6	5.6	0.00	0.0
11/02/99	4:00a	14.9	14.9	14.9	.035	--	--	0	0.0	0.0	1007.5	3.6	8.0	W	11.9	5.8	0.00	0.0
11/02/99	4:30a	14.9	14.9	14.8	--	--	--	0	0.0	0.0	1007.4	3.1	6.7	W	12.6	5.3	0.00	0.0
11/02/99	5:00a	14.8	14.9	14.8	.032	--	--	0	0.0	0.0	1007.9	3.1	8.5	W	12.5	5.8	0.00	0.0
11/02/99	5:30a	14.9	15.1	14.8	--	--	--	0	0.0	0.0	1008.3	3.1	6.3	W	12.6	6.0	0.00	0.0
11/02/99	6:00a	15.1	15.2	15.1	.040	--	--	0	0.0	0.0	1008.4	3.4	7.6	W	11.5	7.1	0.00	0.0
11/02/99	6:30a	15.2	15.3	15.1	--	--	--	23	1.0	0.0	1008.7	3.1	7.6	W	12.9	5.6	0.00	0.0
11/02/99	7:00a	15.2	15.3	15.1	.056	--	--	57	2.5	0.0	1009.2	2.7	8.0	W	13.6	4.8	0.00	0.0
11/02/99	7:30a	15.6	15.9	15.3	--	--	--	117	5.0	0.0	1009.5	3.6	8.9	W	12.7	6.0	0.00	0.0
11/02/99	8:00a	16.1	16.3	15.9	.132	--	--	182	7.9	0.0	1010.1	6.3	13.0	WSW	10.7	10.6	0.00	0.0
11/02/99	8:30a	16.5	16.7	16.3	--	--	--	284	11.9	0.0	1010.3	8.0	13.9	WSW	10.0	14.5	0.00	0.0
11/02/99	9:00a	16.9	17.4	16.7	.221	--	--	348	14.3	0.0	1010.7	8.9	14.3	SW	9.9	14.3	0.00	0.0
11/02/99	9:30a	17.4	17.5	17.3	--	--	--	324	14.2	0.0	1011.5	9.8	14.8	SW	10.4	15.9	0.00	0.0
11/02/99	10:00a	17.4	17.4	17.3	.274	--	--	239	10.3	0.0	1012.0	8.9	13.9	WSW	10.7	14.5	0.00	0.0
11/02/99	10:30a	17.3	17.4	17.3	--	--	--	204	8.8	0.0	1012.4	8.5	13.4	WSW	10.9	13.8	0.00	0.0
11/02/99	11:00a	17.6	17.9	17.4	.259	--	--	300	12.9	0.0	1012.7	8.5	13.9	WSW	11.3	13.8	0.00	0.0
11/02/99	11:30a	18.2	18.4	17.9	--	--	--	325	14.0	0.0	1012.8	7.6	12.1	WSW	12.6	12.1	0.00	0.0
11/02/99	12:00p	18.6	18.6	18.4	.317	--	--	338	14.6	0.0	1012.8	8.5	12.5	WSW	12.6	13.7	0.00	0.0
11/02/99	12:30p	18.9	19.2	18.6	--	--	--	368	15.9	0.0	1012.6	8.0	12.5	SW	13.4	13.4	0.00	0.0
11/02/99	1:00p	19.5	20.0	19.0	.392	--	--	490	20.9	0.0	1012.2	8.0	12.1	SW	14.2	12.9	0.00	0.0
11/02/99	1:30p	20.3	20.5	20.0	--	--	--	548	23.3	0.0	1012.5	8.0	13.0	SW	15.3	12.7	0.00	0.0
11/02/99	2:00p	20.7	20.8	20.5	.422	--	--	392	17.4	0.0	1012.5	6.3	10.7	WSW	16.7	10.5	0.00	0.0
11/02/99	2:30p	21.1	21.3	20.8	--	--	--	420	18.6	0.0	1012.1	7.2	11.2	SW	16.8	12.1	0.00	0.0
11/02/99	3:00p	21.2	21.3	21.1	.370	--	--	330	14.5	0.0	1011.9	6.7	10.7	SW	17.0	11.3	0.00	0.0

FIG. 7.6 – Extrait du registre des grandeurs météorologiques obtenues par la station automatique installée dans le village.

Sont marquées la date, l'heure et les valeurs du registre utilisé pour la simulation.

et pour la surface de l'eau :

$$\begin{aligned}\bar{u} &= \frac{u_{*F}}{k_{vF}} \ln \left(\frac{z - z_{ref}}{z_{0F}} \right), \\ \bar{v} &= 0, \\ \bar{w} &= 0.\end{aligned}\tag{7.2}$$

Dans les deux dernières équations, on ne connaît pas les vitesses de frottement correspondantes à la surface du terrain (u_{*T}) et de l'eau (u_{*F}). On va les estimer à partir de la loi logarithmique et de la valeur de la vitesse moyenne obtenue à 15 m du sol. L'élévation du terrain par rapport au niveau moyen de la mer sur le site d'installation de la station météorologique est de $z = 23,89$ m. La hauteur du capteur de la station par rapport au niveau de référence est donc :

$$z - z_{ref} = 23,89 \text{ m} + 15 \text{ m} - 8 \text{ m} (= 30,89 \text{ m})$$

La composante axiale de l'équation (7.1) appliquée à $(z - z_{ref}) = 30,89$ m de hauteur peut nous donner la vitesse de frottement sur le terrain :

$$u_{*T} = \frac{k_{vT} \bar{u}_{15}}{\ln \left(\frac{30,89}{z_{0T}} \right)} (= 0,4286 \text{ m/s}).\tag{7.3}$$

La valeur estimée de la vitesse extérieure à la couche limite peut donc s'obtenir en utilisant l'équation (3.60) (§ 3.3.2) :

$$U_e = \frac{u_{*T}}{0,99k_{vT}} \ln \left(\frac{\delta}{z_{0T}} \right) (\approx 10 \text{ m/s}).\tag{7.4}$$

Cette valeur de la vitesse extérieure peut être utilisée pour calculer les paramètres sur la surface de l'eau en supposant que la différence entre la vitesse du vent au dessus de la couche limite correspondante à la surface du terrain et à la surface de l'eau est négligeable. Selon l'équation (3.60), la vitesse de frottement sur cette surface est :

$$u_{*F} = 0,99U_e \frac{k_{vF}}{\ln \left(\frac{\delta}{z_{0F}} \right)} (= 0,2907 \text{ m/s}).\tag{7.5}$$

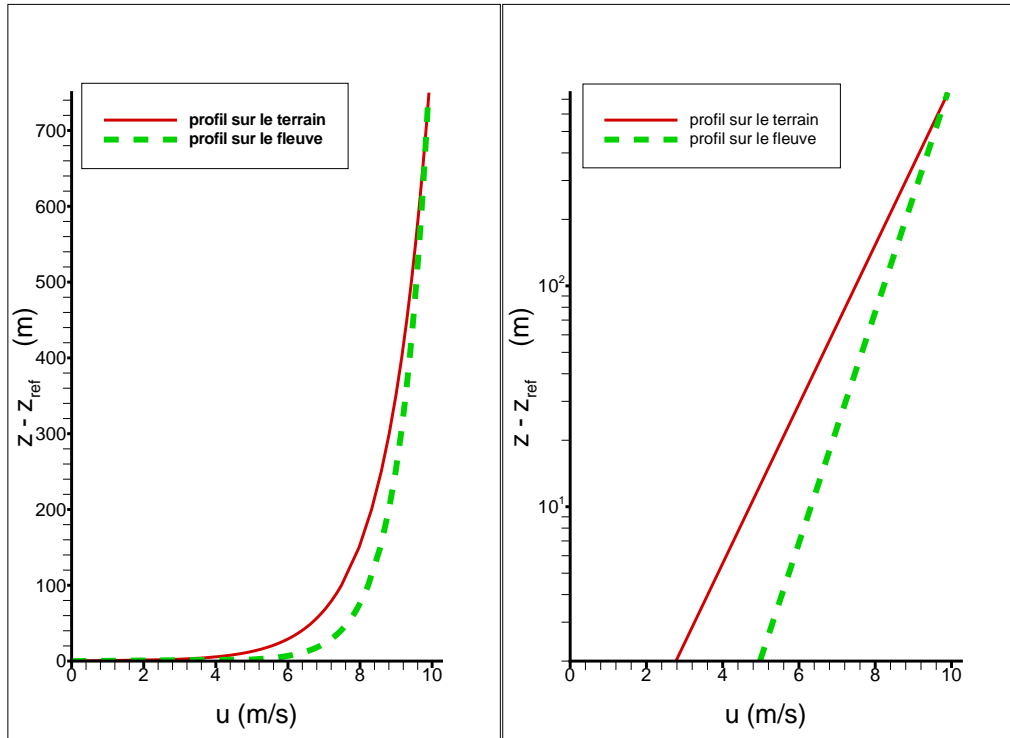


FIG. 7.7 – Profils de la vitesse moyenne du vent sur le terrain et sur le fleuve.

Nous avons obtenus tous les paramètres nécessaires pour les profils de la vitesse moyenne sur les deux types de surface. Ces profils seront utilisés dans les conditions initiales du calcul. La Figure 7.7 montre les deux profils logarithmiques.

Enfin, on va résumer les caractéristiques de la couche limite simulée dans l'expérience :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \delta & = 750 \text{ m} & \text{épaisseur de la couche limite.} \\ U_e & = 10 \text{ m/s} & \text{vitesse extérieure à la couche.} \\ u_{*T} & = 0,4286 \text{ m/s} & \text{vitesse de frottement sur le terrain.} \\ u_{*F} & = 0,2907 \text{ m/s} & \text{vitesse de frottement sur l'eau.} \\ k_{vT} & = 0,4 & \text{constante de Von-Kármán sur le terrain.} \\ k_{vF} & = 0,35 & \text{constante de Von-Kármán sur l'eau.} \\ z_{0T} & = 0,05 \text{ m} & \text{rugosité caractéristique sur le terrain.} \\ z_{0F} & = 0,005 \text{ m} & \text{rugosité caractéristique sur l'eau.} \end{array} \right. \quad (7.6)$$

La condition à la limite ouest sera de type “forcée” pour la vitesse moyenne et ses fluctuations comme dans le cas de la simulation des expériences de laboratoire que nous avons montré dans le Chapitre 4. Nous allons utiliser une zone de forçage de 10 mailles dans le

sens de la direction du vent et pour toute la largeur (de sud au nord). Les conditions aux limites latérales (sud et nord) et à la limite en aval (est) sont de type convection (§ 3.3.2, équation (3.67)).

7.3.2 Paramètres de la simulation numérique des Grandes Echelles

1. Le maillage du calcul

Les tailles des mailles dans la direction horizontale sont prises selon les considérations de MASON & CALLEN (1986) :

$$\begin{aligned}\Delta x &= 0,15\delta \text{ m} \quad (= 112 \text{ m}), \\ \Delta y &= 0,094\delta \text{ m} \quad (= 70,5 \text{ m}), \\ \Delta z_{max} &= 0,142\delta \text{ m} \quad (= 106,5 \text{ m}),\end{aligned}$$

Il est préférable d'utiliser une maille de même taille longitudinale et transversale (sur le plan horizontal) pour pouvoir tenir compte des changements dans la direction du vent sans que cela entraîne un changement du maillage. Nous allons choisir finalement :

$$\Delta x = \Delta y = 60 \text{ m}.$$

Pour obtenir les autres paramètres du maillage, nous allons suivre les relations du maillage grossier utilisé dans la simulation de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) (§ 4.2.3) qui a donné de bons résultats pour la dynamique.

Les paramètres obtenus sont :

$$\begin{aligned}\Delta z_{min} &= 10z_{0T} \quad (= 2 \text{ m}), \\ \Delta z_{max} &= 0,142\delta \quad (\approx 100 \text{ m}), \\ D_1 &= 5\Delta z_{min} \quad (= 105 \text{ m}), \\ D_2 &= \delta \quad (= 750 \text{ m}), \\ n_3 &= 10 \text{ mailles}, \\ D_3 &= n_3\Delta z_{max} \quad (= 1000 \text{ m}),\end{aligned}$$

$$\Delta z_2 = \frac{\Delta z_{max} + \Delta z_{min}}{2} \quad (= 54 \text{ m}),$$

$$n_2 = \frac{D_2}{\Delta z_2} \quad (= 14 \text{ mailles}),$$

$$nz = n_1 + n_2 + n_3 + 3 \quad (= 32 \text{ mailles}),$$

$$\Delta z_m = \frac{D_1 + D_2 + D_3}{nz - 3} \quad (\approx 60 \text{ m}).$$

2. Sélection du pas de temps

L'expression (4.16) pour calculer le grand pas de temps donne :

$$\Delta t_G < \frac{1}{|V_{max}|} \left[\left(\frac{1}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta z_m} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (= 0,2309 \text{ s}).$$

Nous allons prendre finalement :

$$\Delta t_G = 0,2 \text{ s}.$$

Pour le petit pas de temps, on a choisi une valeur 10 fois plus petite que le grand pas de temps comme dans le cas de la simulation de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982), soit :

$$\Delta t_p = 2,0 \cdot 10^{-2} \text{ s}.$$

3. Coefficient de frottement

Le calcul de ce paramètre à été fait en tenant compte que la loi logarithmique est encore valable pour la première maille de calcul. Selon l'expression (4.18) on obtient :

$$C_{dm_T} = \frac{k_{vT}^2}{\ln^2 \left(\frac{\Delta z_{min}}{z_{0T}} \right)} \quad (= 0,012),$$

$$C_{dm_F} = \frac{k_{vF}^2}{\ln^2 \left(\frac{\Delta z_{min}}{z_{0F}} \right)} \quad (= 0,003).$$

4. Conditions initiales des grandeurs scalaires

Pour la période à simuler, les mesures des variables météorologiques prises par la station signalent une température de $T = \theta = 288^\circ K$ et une pression de 1008 hPa .

5. Modèle de sous-maille

On a utilisé le modèle *Smagorinsky Dynamique* qui a donné de bons résultats pour la stabilité des fluctuations de la vitesse dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

7.3.3 Données de la source de pollution

Nous allons simuler la situation de rejet de NO depuis la cheminée de l'usine. Nous supposons que le milieu ambiant aura une concentration initiale de O_3 distribuée de façon homogène.

La cheminée a une hauteur sur le terrain de $z_s'' = 21 \text{ m}$ et le diamètre de rejet est de $d_s = 3 \text{ m}$.

Les niveaux de concentration initiaux d'espèces réactives sont les mêmes que dans le cas de la simulation de BROWN & BILGER (1996) :

$$\begin{cases} c_{NO}^0 = 515 \text{ ppm}, \\ c_{O_3}^0 = 1 \text{ ppm}. \end{cases} \quad (7.7)$$

7.4 Résultats

Nous allons nous intéresser au secteur du village qui est soumis aux effets de la pollution directe par le NO rejeté depuis la source de l'usine et le NO_2 formé lors de la réaction chimique, selon la direction du vent dans la période de temps de la simulation.

La Figure 7.8 montre une vue aérienne et les figures 7.9 et 7.10 des vues depuis le sud. Nous pouvons observer que le panache de pollution arrive sur une colline de faible pente.

On a choisi 9 lieux pour montrer les profils de concentration d'espèces chimiques. Ces emplacements ont été distribués tout au long du centre du panache et on les nommera à l'aide des lettres capitales. La distance entre les emplacements et la position de la cheminée est :

$$A : x - x_s = 140 \text{ m}.$$

$$B : x - x_s = 320 \text{ m}.$$

$$C : x - x_s = 500 \text{ m}.$$

$$D : x - x_s = 680 \text{ m}.$$

$$E : x - x_s = 860 \text{ m}.$$

$$F : x - x_s = 1040 \text{ m}.$$

$$G : x - x_s = 1220 \text{ m}.$$

$$H : x - x_s = 1440 \text{ m}.$$

$$I : x - x_s = 1580 \text{ m}.$$

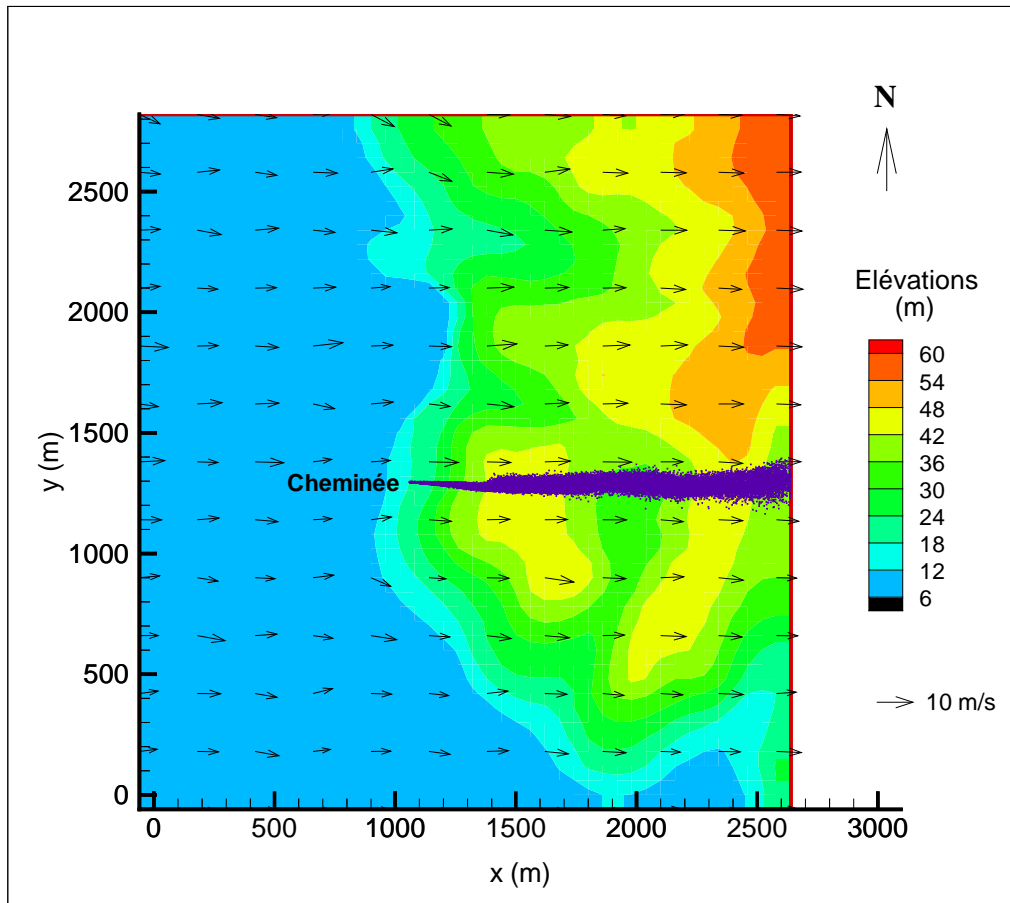


FIG. 7.8 – Vue aérienne du panache de NO sur le village 3,5 minutes après l’initialisation du rejet.

Les flèches signalent la direction et la vitesse du vent à la hauteur de la source ($z_s'' = 21\text{ m}$) soit une altitude de $z = 40\text{ m}$.

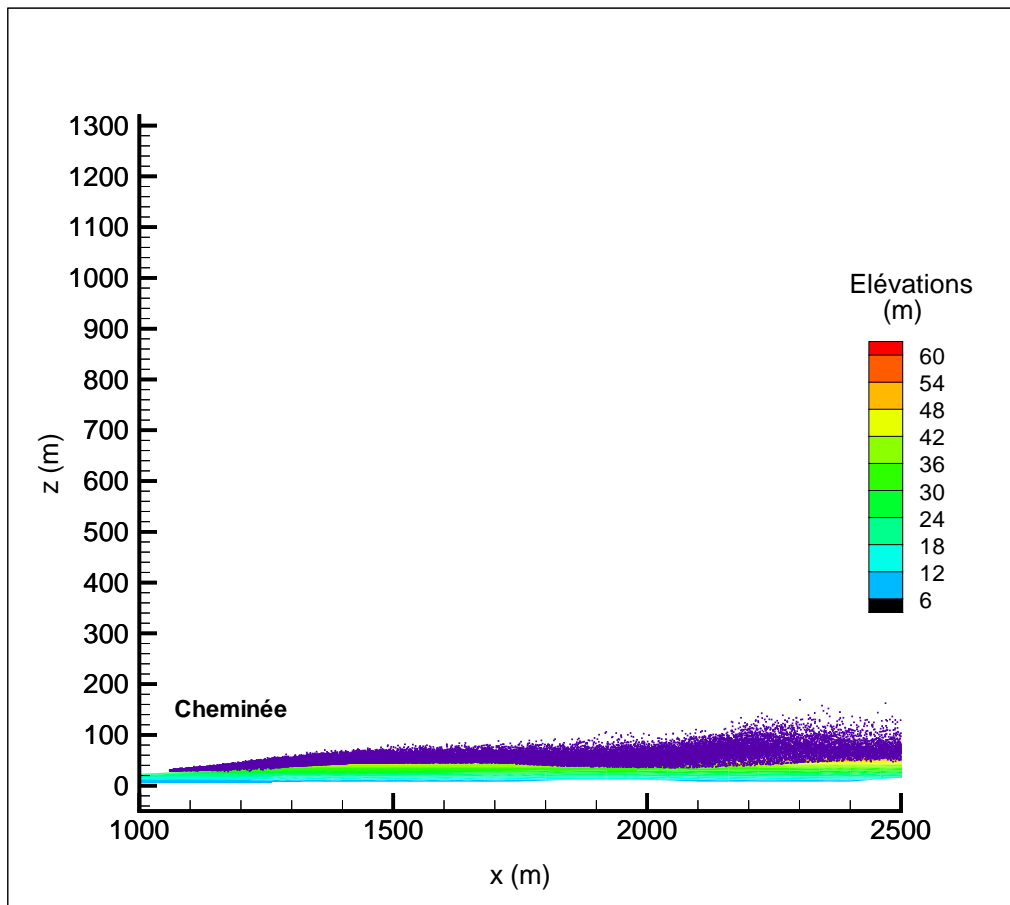


FIG. 7.9 – Vue latérale depuis le sud du panache de NO sur le village 3, 5 minutes après l'initialisation du rejet.

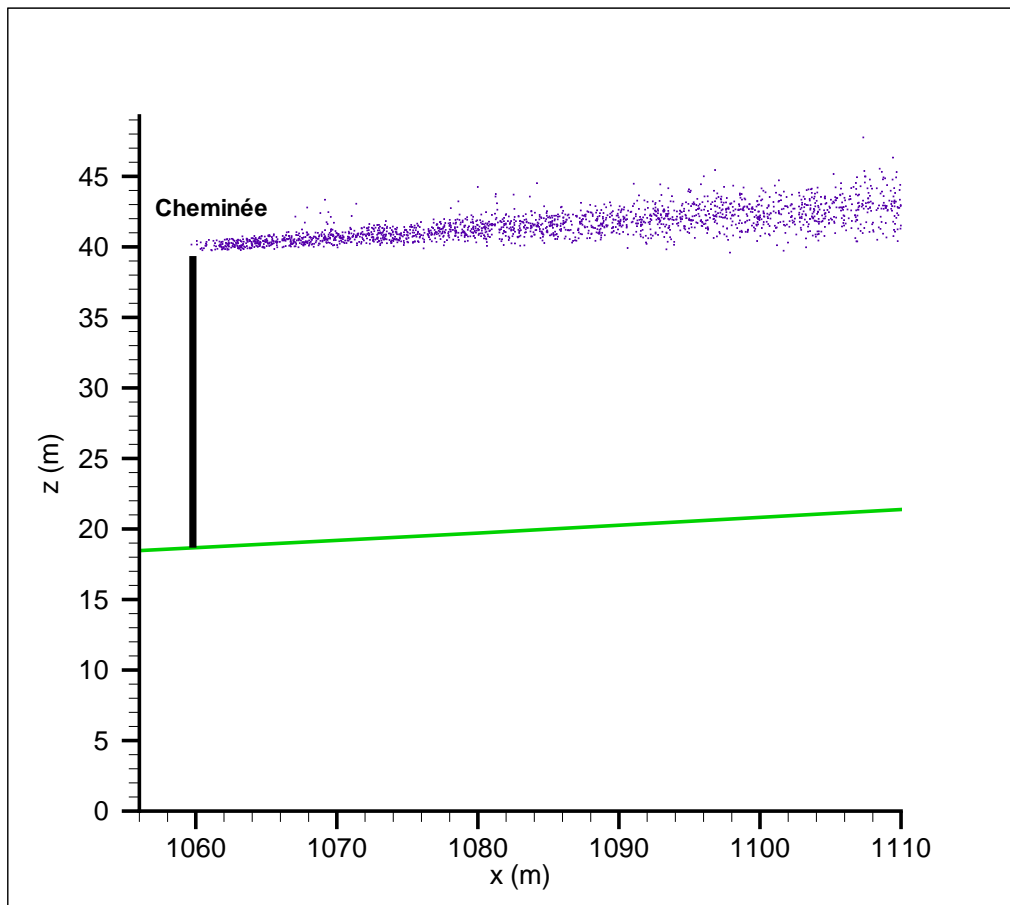


FIG. 7.10 – Zoom de la vue latérale depuis le sud du panache de NO sur le village 3,5 minutes après l'initialisation du rejet.

La Figure 7.11 montre la distribution des emplacements. On peut noter que dans le parcours du panache se trouve une colline de faible pente (emplacements B et C) suivi d'une vallée (E, F) et d'une autre colline similaire (G, H).

Les Figures 7.12 et 7.13 montrent les profils de concentration moyenne calculés pendant la période de 30 minutes correspondantes à la simulation. La coordonnée verticale (z'') signale la hauteur par rapport au sol.

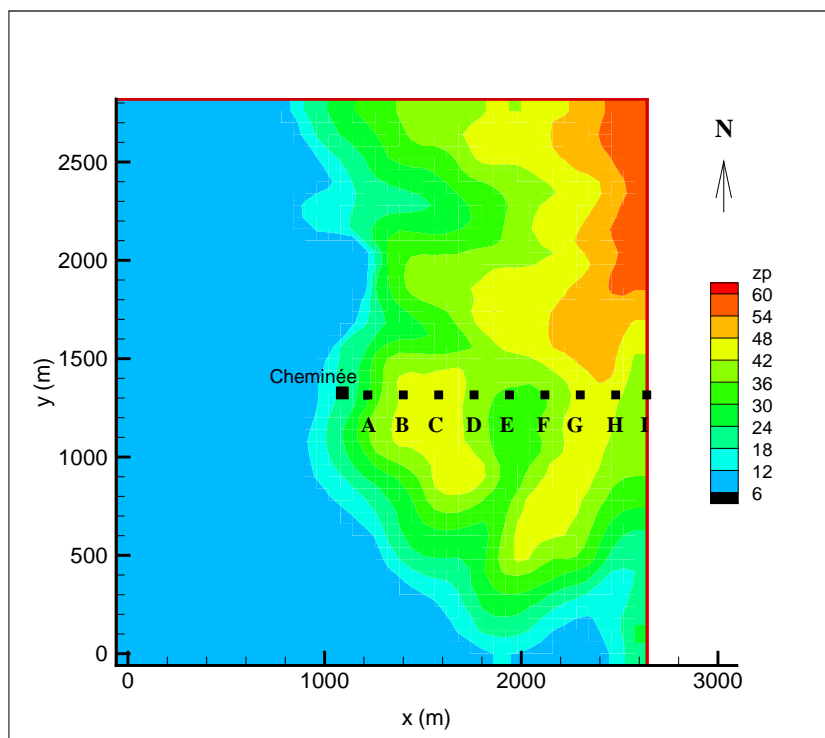
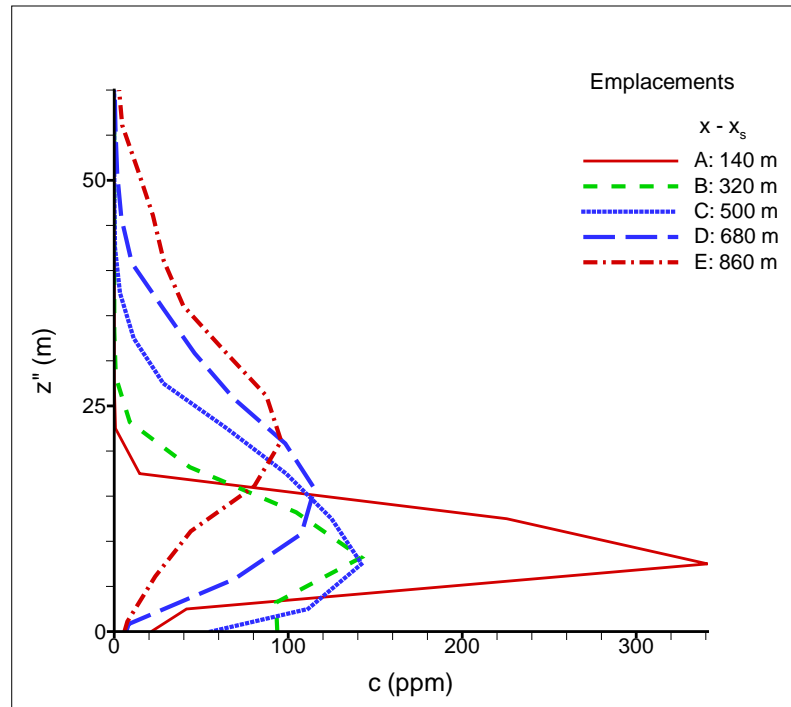
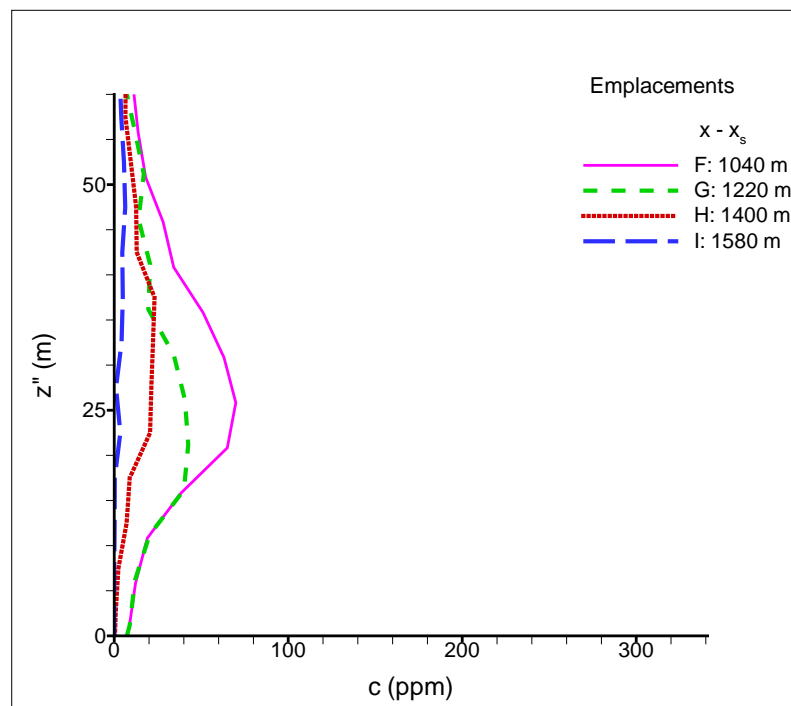


FIG. 7.11 – Emplacements des sites choisis pour obtenir les profils de la concentration des espèces chimiques réactives.

FIG. 7.12 – Profils des concentrations de NO calculées en aval de la source.FIG. 7.13 – Profils des concentration de NO calculées en aval de la source. La coordonnée verticale (z'') représente la hauteur par rapport au sol.

On constate dans la Figure 7.12 que 'a 140 *m* en aval de la source, le panache est déjà arrivé au sol. La valeur de concentration maximale est approximativement de 58 % par rapport à la concentration initiale.

Entre les emplacements B et C, les valeurs maximales de concentration sont très proches. Ce sont des sites au sommet de la première colline en aval de la cheminée. On constate par contre un étirement vertical progressif du panache.

Aux emplacements D, E et F, le panache monte et s'étire encore verticalement. La concentration au sol diminue, nous sommes dans la vallée.

Pour les emplacements G, H et I, il ne reste pas beaucoup de *NO*. Le panache continue à s'étirer verticalement et les niveaux de concentration de *NO* s'affaiblissent. Après 1500 *m* de distance par rapport à la cheminée, la concentration de *NO* est presque nulle.

La Figure 7.14 montre les niveaux de concentration d'espèces réactives rapportées aux valeurs maximales pour l'emplacement située proche de la cheminée.

On constate que le pic de concentration du produit de la réaction est presque 10 *m* au-dessus de celui de *NO*.

La concentration d'ozone a été réduite de 25% par rapport à la valeur de concentration initiale au centre du panache de *NO*.

La Figure 7.15 montre que le pic de concentration de $NO_2 + O_2$ a monté encore d'avantage par rapport à celui de *NO*. La concentration d'ozone commence à croître au centre du panache de *NO* ce qui signale un ralentissement de la réaction chimique.

Dans la Figure 7.16, on observe des pics secondaires de concentration de $NO_2 + O_2$ pour l'emplacement C. La concentration d'ozone est en croissance continue.

À la station D (Figure 7.17), on constate encore une diminution de la concentration de *NO* près du sol. Les pics secondaires de concentration de $NO_2 + O_2$ deviennent importants par rapport à sa valeur maximale. La concentration d'ozone est fortement croissante.

Pour l'emplacement E, on aperçoit deux pics de concentration de $NO_2 + O_2$ bien marqués. L'un est à l'intérieur du panache de *NO* et l'autre au-dessus (Figure 7.18). La concentration d'ozone est arrivée pratiquement à sa valeur initiale.

La Figure 7.19 présente les niveaux de concentration d'espèces à 1040 *m* en aval de la cheminée. On est encore dans la vallée. Le centre du panache de *NO* est situé à 25 *m* de hauteur. La concentration de *NO* au sol est petite par rapport à sa valeur maximale. Le pic de concentration du produit de la réaction est toujours au-dessus du centre du panache. La concentration de O_3 est pratiquement constante et égale à sa valeur initiale.

Les autres emplacements situés plus loin n'apportent pas de changements importants de comportement.

Enfin, les Figures 7.20 à 7.22 montrent l'évolution spatiale en aval de la cheminée du panache de NO .

L'ordonnée de la Figure 7.20, représente l'évolution de la valeur maximale de concentration de NO et aussi l'altitude z du centre du panache et des niveaux de concentration faibles ($C_{NO} = 2 \text{ ppm}$). On peut constater que la valeur maximale de la concentration de NO diminue rapidement près de la cheminée mais qu'elle se stabilise au sommet de la première colline. Ensuite elle continue à diminuer plus doucement.

Dans l'évolution de l'altitude du centre du panache, on peut observer des ondulations en suivant la topographie du terrain. Le panache de NO commence à se raffiner sur la deuxième colline.

La Figure 7.22 montre le parcours suivi par le centre du panache de NO par rapport à la hauteur z'' . Les deux effets des collines et l'effet de la vallée sont bien visibles. Le panache s'aplatit au sol lorsqu'il atteint les collines et s'éloigne du sol dans la vallée.

À partir de 1200 m en aval de la cheminée, les niveaux de concentration de NO près du sol sont inférieurs à 2 ppm .

La Figure 7.23 montre les valeurs instantanées de la concentration de NO au niveau du sol.

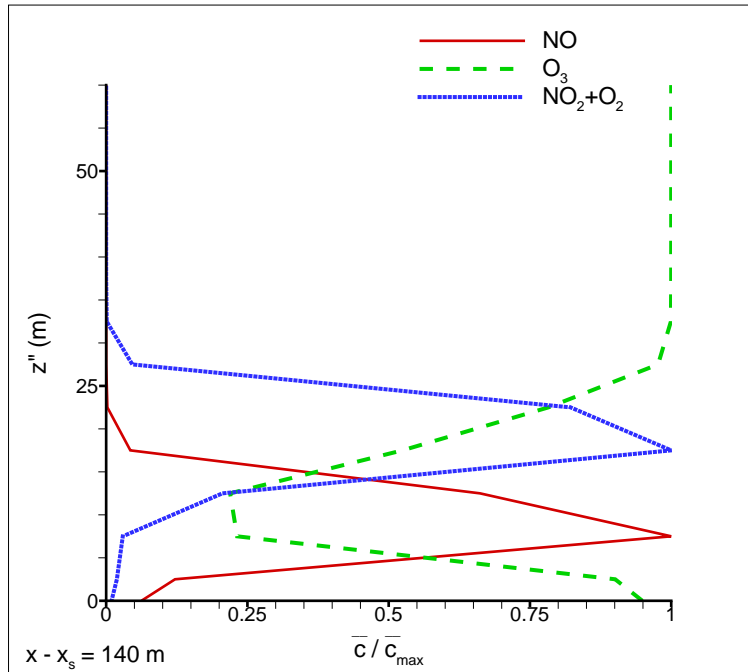


FIG. 7.14 – Station A : $x - x_s = 140 \text{ m}$.

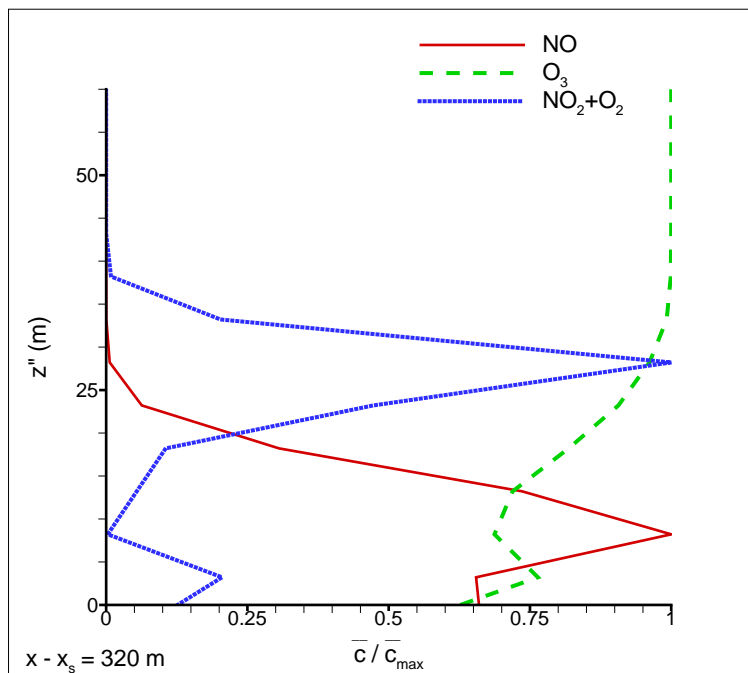
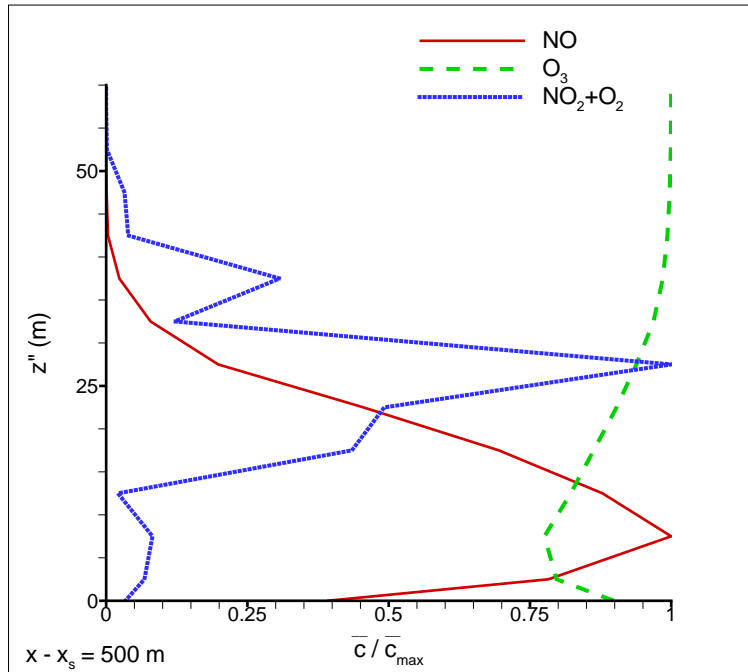
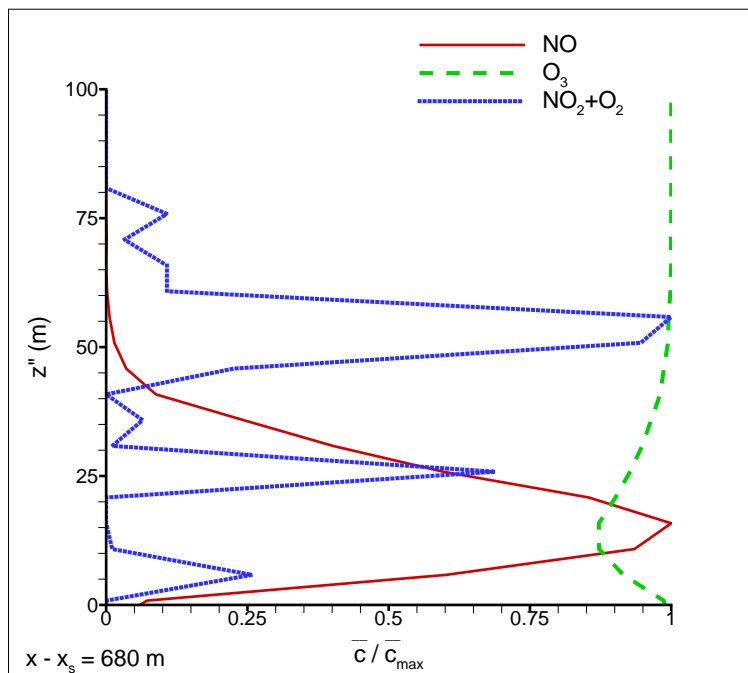


FIG. 7.15 – Station B : $x - x_s = 320 \text{ m}$.

Profils de la concentration d'espèces chimiques réactives rapportées à la valeur maximale.

FIG. 7.16 – Station C : $x - x_s = 500$ m.FIG. 7.17 – Station D : $x - x_s = 680$ m.

Profils de la concentration d'espèces chimiques réactives rapportées à la valeur maximale.

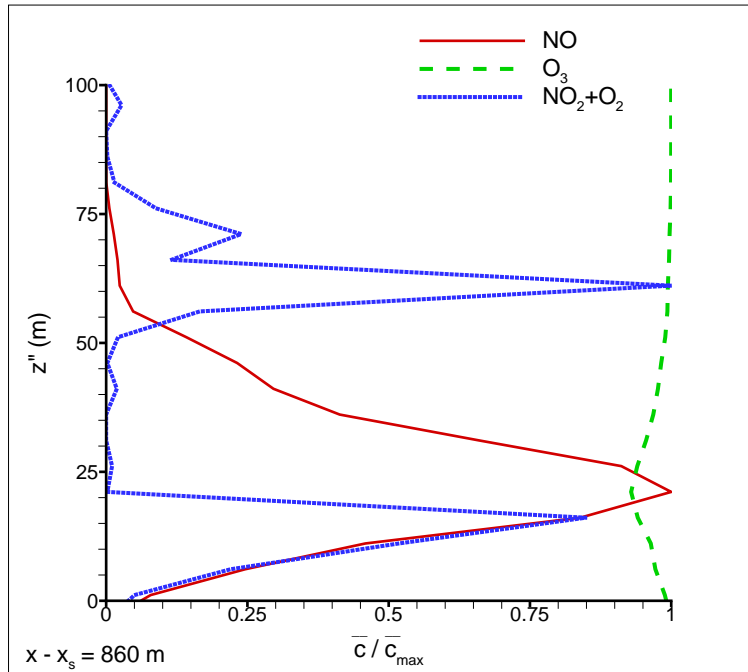


FIG. 7.18 – Station E : $x - x_s = 860 \text{ m}$.

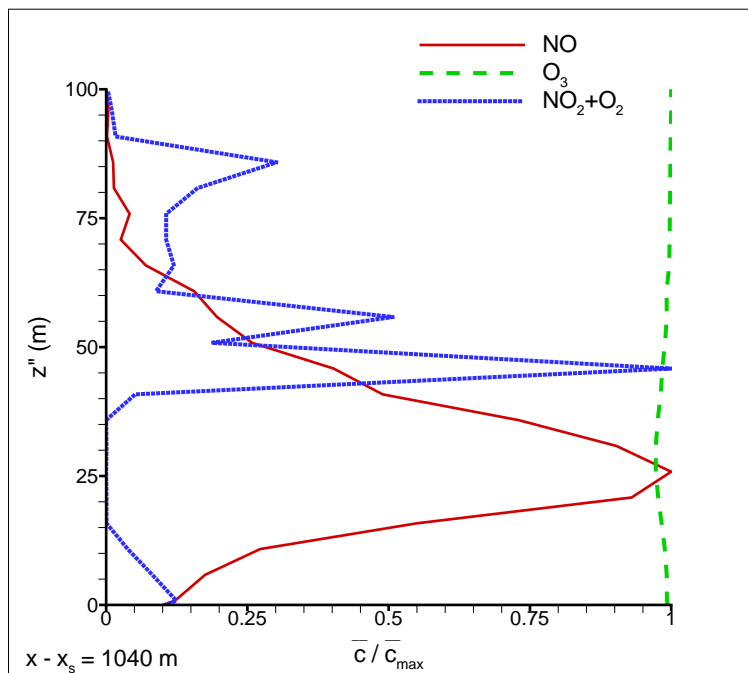


FIG. 7.19 – Station F : $x - x_s = 1040 \text{ m}$.

Profils de la concentration d'espèces chimiques réactives rapportées à la valeur maximale.

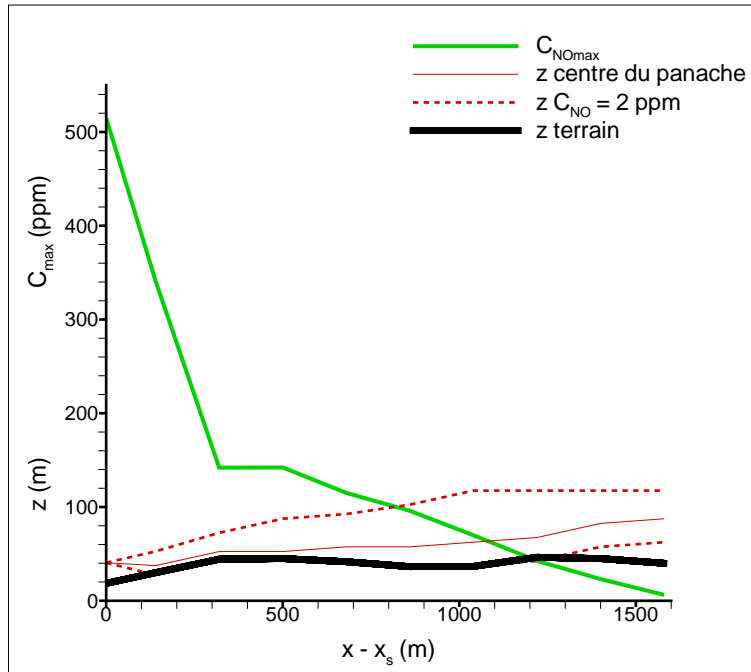


FIG. 7.20 – Profils de l'évolution de la concentration de NO et de l'altitude du centre du panache avec les niveaux de concentration $C_{NO} = 2$ ppm.

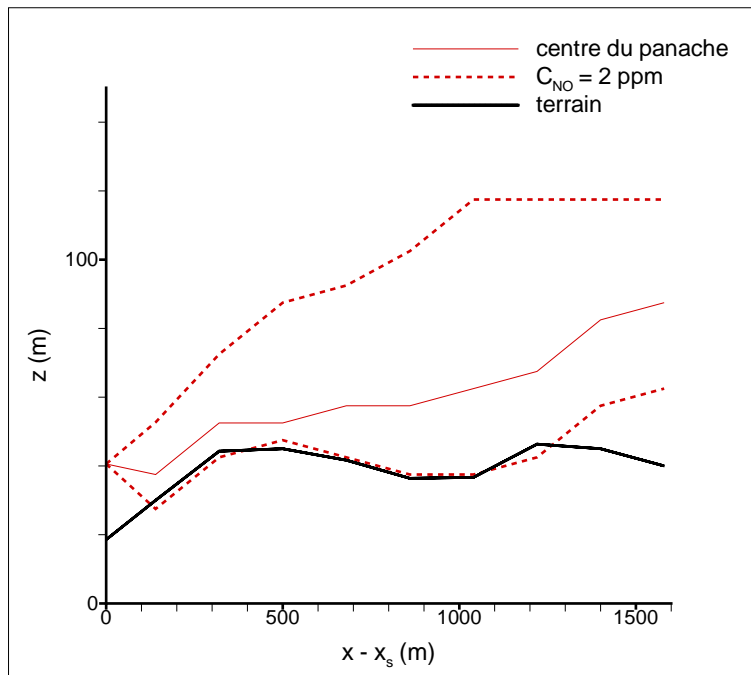


FIG. 7.21 – Evolution de l'altitude du centre du panache de NO et les niveaux de concentration $C_{NO} = 2$ ppm.

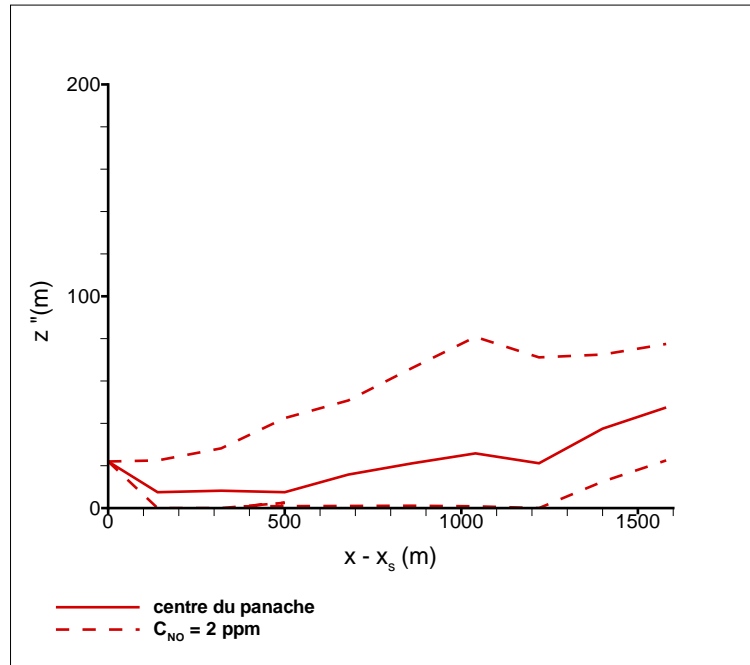


FIG. 7.22 – Profils de l'évolution de la hauteur (par rapport au sol) du panache de NO et les niveaux de concentration $C_{NO} = 2 \text{ ppm}$.

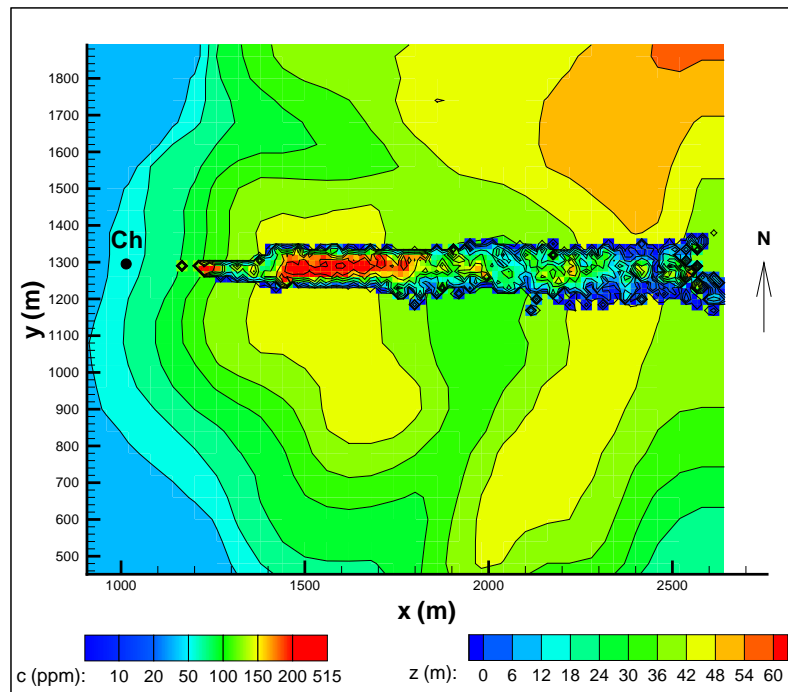


FIG. 7.23 – Concentration instantanée de NO au niveaux du sol à $t = 4 \text{ minutes}$.

7.5 Discussion

La simulation montrée est un cas hypothétique d'installation d'une usine à côté d'un village de quelque dizaines d'habitants (très peu peuplé). Les constructions sont dispersées et l'occupation du terrain n'a pas été fortement modifiée. Cela nous a permis d'utiliser un coefficient de rugosité caractéristique unique pour toute la surface du sol sans introduire une erreur importante. Dans le cas d'un village ou d'une ville plus dense et plus peuplée, avec des bâtiments serrés, ce paramètre doit être variable selon l'occupation du terrain, la densité et les dimensions des bâtiments.

Nous admettons que les mesures météorologiques qui ont été faites ne sont pas adaptées pour obtenir une description suffisante de la couche limite. Elles ont été réalisées dans le but d'estimer l'énergie éolienne susceptible d'être captée par une machine de conversion pour l'école du village. Néanmoins, les estimations faites avec les lois analytiques sont raisonnables.

On constate, Figures 7.14 à 7.19, que les pics de concentration du produit de la réaction $NO_2 + O_2$ se trouvent plus élevés que ceux de NO , au moins à 140 *m* en aval de la cheminée.

Dans cette simulation nous avons constaté que le panache de NO arrive au sol à 120 *m* en aval de la source (Figure 7.22), soit 80 *m* avant de l'école. Cette situation est très mauvaise pour la santé des enfants de courte âge. Les niveaux de concentration de NO diminuent rapidement mais, à cause de la présence d'une colline, ils se stabilisent au sommet (Figure 7.20) pour diminuer ensuite plus doucement.

Le centre du panache suit les ondulations du terrain. Les niveaux de concentration au sol dans la vallée diminuent à cause de la protection de la première colline située en aval de la cheminée. Cela est constaté par l'élévation du centre du panache et des niveaux de concentration $C_{NO} = 2 \text{ ppm}$ dans les Figures 7.21 et 7.22.

Conclusion

Les problèmes de pollution atmosphérique sont l'objet de nombreux travaux de recherche. Les outils numériques ont évolué notamment grâce aux nouvelles technologies en informatique. L'appui des ordinateurs de plus en plus puissants permettant aux chercheurs d'envisager la résolution des écoulements atmosphériques complexes. L'approche des grandes échelles permet de simuler l'évolution temporelle des grandeurs physiques pour aller au-delà des estimations statistiques et envisager l'interaction des variables qui jouent un rôle dans les phénomènes de transport, transformation et dépôt des polluants atmosphériques. C'est le cas des réactions chimiques dans l'atmosphère où la simulation numérique apporte des réponses de plus en plus efficaces.

Nous avons ici concentré notre étude sur les méthodes numériques de résolution des écoulements de méso-échelles. La validation de ces outils a été abordée dans ce travail avec l'appui des expériences de laboratoire. La méthode stochastique de suivi lagrangien de particules permet d'envisager la réaction comme une interaction entre particules porteuses d'espèces chimiques réactives.

La démarche de ce travail a suivi une logique cohérente depuis les grandes échelles du mouvement dans l'atmosphère jusqu'à la simulation de la diffusion moléculaire et des réactions chimiques. Le couplage de ces modèles a été le défi de cette recherche.

La simulation des grandes échelles : Nous avons étudié en détail le modèle de simulation des grandes échelles, ses hypothèses, ses portées et ses limitations. Nous l'avons modifié pour l'adapter aux conditions de simulation nécessaires afin de valider les résultats avec des mesures expérimentales. Plus précisément, nous avons utilisé le code ARPS, développé par l'Université de l'Oklahoma. Nous avons constaté qu'il s'agit d'un modèle de type non-hydrostatique, dimensionnel, qui porte des nombreuses sous-modèles pour tenir compte des phénomènes météorologiques comme la formation de nuages, la précipitation, les flux de la chaleur et de la vapeur d'eau dans l'interface atmosphère-sol, une base des données pour simuler l'interaction des différents types de sol, de la couverture végétale, la mer ou une grande extension de surface d'eau, le déclin solaire et la durée de la journée pour les bilans radiatifs. Par contre, il est moins performant que d'autres codes de la mécanique des fluides pour la simulation des écoulements de canal, où le flux est forcé par un champ de pression établi. Nous

avons besoin des conditions aux limites forcées pour simuler des expériences de laboratoire et nous avons introduit des modifications pertinentes, notamment pour les conditions initiales et aux limites, sans que cela ampute les qualités précitées.

Les modèles de paroi ne sont pas très performants dans ce code. Dans ce travail, on a choisi de ne pas modifier ce module parce que c'est un travail trop long dans le cadre de cette thèse.

Les modèles sous-maille qui prennent en compte l'effet des petites échelles, non calculées directement par le code, a été un des objectifs principaux de cette étude. Nous avons modifié le code afin d'avoir des modèles de fermeture les plus performants. Le modèle de *Smagorinsky dynamique* a été introduit et testé pour répondre à cet objectif.

Modèles stochastiques de suivi lagrangien : Ensuite, nous avons traité le problème de suivi lagrangien des particules fluides avec l'introduction des modèles stochastiques à une particule et une échelle de temps. Le couplage de ce modèle avec la simulation des grandes échelles a été fait avec succès selon l'approche proposée par GICQUEL & GIVI (2002) avec quelques assumptions supplémentaires par rapport à la validité de l'équation de *Fokker-Plank* dans le sein d'une maille de calcul LES.

Validation du code : Nous avons utilisé des expériences de laboratoire qui nous ont permis de valider le champ dynamique, et ensuite le couplage de la simulation des grandes échelles avec le modèle de suivi lagrangien LES/STO. On a comparé les résultats de la simulation numérique avec différents paramètres comme les tailles des mailles de calcul et les modèles de fermeture du tenseur de *Reynolds* de sous-maille. La validation du modèle couplé LES/STO pour des sources surélevées de gaz a donné de bons résultats dans le cas de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) mais on a trouvé des problèmes pour le cas de GONG (1991) dans la zone de proche paroi. Les sources utilisées dans cette dernière expérience ont été placées plus proche du sol. Les phénomènes d'anisotropie dans cette zone liés à des modèles de paroi du code LES peu performants peuvent être la cause de cette différence. Nous avons observé les effets des différents choix de position de la source en amont d'une colline de faible pente, notamment en ce qui concerne le rapport hauteur de la source/élévation de la colline. La colline se comporte comme un obstacle à franchir pour le gaz éjecté depuis la source. Le gaz est mieux dispersé en aval de la colline quand la source est placée plus haut. Nous avons constaté dans cette simulation que les valeurs de la concentration du gaz sont deux fois supérieures au sommet et en aval de la colline si la source est placée deux fois plus haut. Par contre, en amont de la colline, la situation est l'inverse.

Modèle de diffusion et réaction chimique : Afin d'envisager un modèle complet pour simuler les processus à l'échelle moléculaire, on a ajouté au modèle LES/STO des modules de simulation de la diffusion et des réactions chimiques. Ce nouveau modèle a été appelé *Modèle complet* (MC). Ces modules ont été développés par MICHELOT

(1996) pour la réaction des molécules de monoxyde d'azote avec celles d'ozone. On a testé les résultats avec l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) en utilisant la *fraction de mélange* des espèces chimiques réactives qui se comporte comme un scalaire passif. Nous avons comparé les concentrations moyennes et les écart-types ainsi que les flux turbulents avec de bons résultats. Nous avons testé un modèle pour le calcul du flux turbulent (VINKOVIC *et al.* (2005b)) et un modèle pour le calcul du coefficient de ségrégation de la réaction chimique (SIMOËNS (2002)) avec succès. L'évolution spatiale de ce coefficient nous a permis de caractériser le rôle du mélange turbulent dans la réaction chimique en aval de la source. Dans ce cas de simulation, la réaction peut être caractérisée comme rapide par rapport aux temps caractéristiques de la turbulence dans la zone proche de la source. Un peu plus loin en aval, on trouve que la réaction devient lente car une des espèces primaires est épuisée. Une comparaison avec une autre simulation numérique a été faite. Celle de MEEDER & NIEUWSTADT (2000). Il s'agit d'une réaction chimique lente des mêmes espèces primaires. On a constaté que loin en aval de la source, ils ont obtenu un coefficient d'intensité de ségrégation très proche de celui que nous avons trouvé dans notre simulation.

Application dans le cas de la pollution sur un village : Nous avons simulé un cas de pollution d'une usine d'incinération des ordures ménagères dans le cas de déchets combustibles non-recyclables d'un village éloigné des grandes villes. Il s'agit d'un cas de simulation car, bien que le village existe réellement ainsi que les données de topographie du terrain et que les variables météorologiques sont réelles, l'usine n'existe pas. Il nous a semblé utile de montrer ainsi une application dans un épisode plausible de pollution. Nous avons constaté l'effet d'une colline placée en aval de la cheminée. La concentration de monoxyde d'azote diminue rapidement jusqu'à ce que le panache arrive à la colline. Au sommet, la concentration se stabilise pour continuer à diminuer plus doucement en aval de la colline. Les niveaux de concentration de monoxyde d'azote sont faibles en aval de la colline et nous permettent de délimiter une zone de protection de la pollution directe par le panache. Dans son parcours, le panache arrive à une deuxième colline mais il s'épuise rapidement au delà de 1200 m où les niveaux de concentration au sol sont très faibles.

Nous concluons qu'ils existent des travaux à faire pour améliorer, notamment le problème de la simulation des sources proches à la paroi. Dans ce sens, des améliorations peuvent être envisagées dans le code LES et dans le couplage LES/STO.

- Il existent des modèles de paroi plus performants qui peuvent donner des meilleurs résultats que celui utilisé dans cette thèse. Par exemple, les modèles de décomposition du domaine LES/RANS où la constante de *Smagorinsky* est calculée dynamiquement jusqu'à une certaine hauteur. Au-dessous, un modèle de type RANS est appliqué pour déterminer cette constante. D'autres propositions plus récentes seront intéressantes à aborder, comme par exemple calculer de façon dynamique la constante de

Smagorinsky en fonction de la taille de l'échelle caractéristique dans le modèle de sous-maille proposé par GERMANO *et al.* (1991). Cette approche a été envisagée et testée par PORTE-AGEL *et al.* (2000) avec de bons résultats car dans la zone de proche paroi les tailles des mailles deviennent plus petites pour obtenir une meilleure résolution à cause des forts gradients de la vitesse. Le modèle de sous-maille dynamique doit tenir compte de cet effet.

- Pour le modèle couplé LES/STO, l'utilisation d'un terme supplémentaire qui tient compte de l'anisotropie dans la zone de proche paroi est possible. Il faut trouver des expériences en turbulence inhomogène anisotrope pour pouvoir régler la constante de ce terme.
- D'autres réactions chimiques peuvent s'ajouter au modèle pour envisager des phénomènes de pollution plus complet. La formation d'ozone troposphérique à partir du monoxide d'azote et des composés organiques volatiles en est un exemple.
- Enfin, la possibilité d'introduire la géométrie des bâtiments au code est d'une grande utilité pour pouvoir aborder l'étude des phénomènes de pollution en ville. Il faut que le code puisse prendre en compte la présence d'une paroi verticale.

Annexes

Annexe A

Les tenseurs de Fokker-Planck

Soit une variable aléatoire $\vec{\xi}(t) = f(\vec{s}(t))$ où $\vec{s}(t)$ représente l'état lagrangien d'une particule, par exemple sa position et sa vitesse $\vec{s}(t) = \{\hat{X}_{i(t)}, \hat{U}_{i(t)}\}$.

L'équation lagrangienne de cette variable, en satisfaisant un processus de *Markov*, est une équation de *Fokker-Planck* et on peut exprimer les tenseurs $D_i(\vec{s}(t), t)$ et $D_{ij}(\vec{s}(t), t)$, de cette dernière, en fonction des coefficients de la première.

Soit l'équation lagrangienne suivante :

$$d\xi_i(t) = h_i(\vec{s}(t), t)dt + g_{ij}(\vec{s}(t), t)\eta_j(t)dt, \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{cases} \langle \eta_j(t) \rangle & = 0, \\ \langle \eta_i(t')\eta_j(t'') \rangle & = \delta_{ij}\delta(t' - t''), \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

qui doit satisfaire l'équation de *Fokker-Planck* :

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t}(\vec{s}(t), t) = -\frac{\partial (D_i(\vec{s}(t), t)\mathcal{P})}{\partial s_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 (D_{ij}(\vec{s}(t), t)\mathcal{P})}{\partial s_i \partial s_j}. \quad (\text{A.3})$$

La variable aléatoire $\vec{\xi}(t)$ passe de l'état lagrangien $\vec{s}(t)$ à l'état lagrangien $\vec{s}(t+\tau) = \vec{\xi}(t+\tau)$ dans un petit intervalle de temps $\Delta t = \tau$.

Ce changement peut être exprimé en fonction des tenseurs lagrangiens :

$$\xi_i(t+\tau) - \xi_i(t) = h_i(\vec{s}(t+\tau), t+\tau)\tau + g_{ij}(\vec{s}(t+\tau), t+\tau) \int_t^{t+\tau} \eta_j(t')dt'.$$

Le moment d'ordre n de la variable lagrangienne

Le moment d'ordre n relatif au passage d'état lagrangien est donnée par :

$$M_n(\vec{s}(t), t, \tau) = \langle (\xi_i(t + \tau) - s_i)^n |_{\vec{\xi}(t)=\vec{s}(t)} \rangle .$$

Or, si l'on fait le développement limité des moments au voisinage de τ :

$$M_n(\vec{s}(t), t, \tau) = \underbrace{M_n(\vec{s}(t), t, 0)}_0 + \tau \underbrace{\frac{\partial M_n}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0}}_{D_n(\vec{s}(t), t)} + O(\tau^2).$$

On pose :

$$\langle (\xi_i(t + \tau) - s_i)^n |_{\vec{\xi}(t)=\vec{s}(t)} \rangle = D_n(\vec{s}(t), t)\tau + O(\tau^2).$$

Cela donne les tenseurs de *Fokker-Planck* :

$$D_n(\vec{s}(t), t, \tau) = \frac{\partial M_n(\vec{s}(t), t, \tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} . \quad (\text{A.4})$$

Maintenant, on va déterminer les moments de premier et de deuxième ordre.

– Le moment de premier ordre :

Le moment de premier ordre de la variable lagrangienne $\vec{\xi}(t)$ autour de l'état $\vec{s}(t)$ s'exprime en fonction des tenseurs de l'équation de Langevin h_i et g_{ij} :

$$M_1(\vec{s}(t), t, \tau) = \langle (\xi_i(t + \tau) - s_i) |_{\vec{\xi}(t)=\vec{s}(t)} \rangle ,$$

$$M_1(\vec{s}(t), t, \tau) = \langle h_i(\vec{s}(t+\tau), t + \tau)\tau \rangle + \langle g_{ij}(\vec{s}(t+\tau), t + \tau) \int_t^{t+\tau} \eta_j(t') dt' \rangle ,$$

et selon (A.4), le tenseur $D_i(\vec{s}(t), t)$ peut s'exprimer en fonction des tenseurs de l'équation de Langevin :

$$D_i(\vec{s}(t), t) = \frac{\partial M_1(\vec{s}(t), t, \tau)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} = h_i(\vec{s}(t), t) + g_{ij}(\vec{s}(t), t) \underbrace{\langle \eta_j(t) \rangle}_0 ,$$

$$D_i(\vec{s}(t), t) = h_i(\vec{s}(t), t). \quad (\text{A.5})$$

– **Le moment due deuxième ordre :**

Le moment de deuxième ordre de la variable lagrangienne $\vec{\xi}(t)$ autour de l'état $\vec{s}(t)$ s'exprime en suivant la relation :

$$M_2(\vec{s}(t), t, \tau) = \langle (\xi_i(t + \tau) - s_i)|_{\vec{\xi}(t)=\vec{s}(t)} (\xi_j(t + \tau) - s_j)|_{\vec{\xi}(t)=\vec{s}(t)} \rangle,$$

$$M_2(\vec{s}(t), t, \tau) = \langle h_i(\vec{s}(t+\tau), t + \tau) h_j(\vec{s}(t+\tau), t + \tau) \tau^2 \rangle$$

$$+ \langle g_{ik}(\vec{s}(t+\tau), t + \tau) g_{jk}(\vec{s}(t+\tau), t + \tau) \int_t^{t+\tau} \int_t^{t+\tau} \eta_i(t') \eta_j(t'') dt' dt'' \rangle .$$

Le tenseur $D_{ij}(\vec{s}(t), t)$ s'exprime en fonction du moment de deuxième ordre selon (A.4) :

$$D_{ij}(\vec{s}(t), t) = \left. \frac{\partial M_2(\vec{s}(t), t, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=0},$$

$$= 2 \tau h_i(\vec{s}(t+\tau), t + \tau) h_j(\vec{s}(t+\tau), t + \tau) \Big|_{\tau=0}$$

$$+ \left[g_{ik}(\vec{s}(t+\tau), t + \tau) g_{jk}(\vec{s}(t+\tau), t + \tau) \langle \eta_i(t') \eta_j(t'') \rangle \Big] \Big|_{\substack{\tau=0 \\ t'=t''}},$$

$$D_{ij}(\vec{s}(t), t) = 0 + g_{ik}(\vec{s}(t), t) g_{jk}(\vec{s}(t), t) \underbrace{\langle \eta_j(t') \eta_j(t'') \rangle}_{\delta(t' - t'')} \Big|_{t'=t''},$$

$$D_{ij}(\vec{s}(t), t) = g_{ik}(\vec{s}(t), t) g_{jk}(\vec{s}(t), t). \tag{A.6}$$

Les relations (A.5) et (A.6) donnent les tenseurs $D_i(\vec{s}(t), t)$ et $D_{ij}(\vec{s}(t), t)$ de l'équation de *Fokker-Planck* comme fonction de ceux de l'équation de Langevin $h_i(\vec{s}(t), t)$, $g_{ij}(\vec{s}(t), t)$ en respectant les propriétés Markoviennes :

“L'état futur des variables lagrangiennes dépend de ses valeurs à l'état présent mais ne dépend pas de ses états précédents”.

Annexe B

Méthodes d'interpolation

Le modèle stochastique qui gère la dynamique du mouvement des particules dans les boîtes du maillage a besoin des grandeurs eulériennes calculées par le code de simulation des Grandes Échelles (LES) pour tenir compte de la dynamique de ces échelles. Ces grandeurs sont calculées aux points du maillage par le code (LES). Il est donc nécessaire d'utiliser une méthode d'interpolation aux positions des particules fluides.

On va décrire deux méthodes :

- La méthode d'interpolation des Polynômes de Lagrange.
- La méthode d'interpolation barycentrique, dont nous avons montré l'utilisation au chapitre 5 pour le modèle couplé LES-stochastique.

B.1 Méthode d'interpolation tri-linéaire des Polynômes de Lagrange

La méthode d'interpolation tri-linéaire des *polynômes quadratiques de Lagrange* avec 27 nœuds du maillage a été décrite par CASSULLI & CHENG (1992) et utilisée dans le cas de l'interpolation du champ de vitesse d'un courant d'eau peu profonde. Ils ont mis en place une méthode semi-lagrangienne d'advection pour l'écoulement stratifié stable.

Cette méthode prend 8 boîtes du maillage pour simuler les lignes de courant autour de la particule. Les boîtes sont choisies de façon à ce que la particule soit située dans la boîte inférieure et en amont de l'écoulement (Figure B.1).

Par exemple, dans le cas de l'interpolation du champ de vitesse, pour trouver sa composante dans la direction $q = (1, 2, 3) \equiv (x, y, z)$ au point $(x_{(p)}, y_{(p)}, z_{(p)})$ on va calculer d'abord la vitesse correspondante aux 9 lignes verticales situées dans les boîtes du maillage qui sont prises en compte pour le calcul de l'interpolation.

On va ainsi exprimer la vitesse en coordonnées relatives au point (i, j, k) du maillage :

$$u_{(p)}^{\oplus} = u_{(x(p), y(p), z(p))}^{\oplus} = u_{(i-a, j-b, k-d)}^{\oplus},$$

Ce qui nous conviendra pour exprimer formellement le processus d'interpolation.

Les 9 interpolations, en suivant les lignes verticales pour la composante q de la vitesse eulérienne, sont :

$$u_{q(i-\gamma, j-\psi, k-d)}^{\oplus} = \mathcal{L}_{i-\gamma, j-\psi}^0 u_{q(i-\gamma, j-\psi, k)}^{\oplus} + \mathcal{L}_{i-\gamma, j-\psi}^1 u_{q(i-\gamma, j-\psi, k-1)}^{\oplus} + \mathcal{L}_{i-\gamma, j-\psi}^2 u_{q(i-\gamma, j-\psi, k-2)}^{\oplus},$$

où les indices (i, j) désignent la position de la ligne verticale qui va être interpolée, tandis que γ et ψ prennent les valeurs 0, 1, 2.

Les coefficients du polynôme de Lagrange \mathcal{L}^n pour chaque ligne (i, j) sont calculés avec la formule :

$$\mathcal{L}^n = \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{m=2} \frac{z_{(p)} - z_{(k-m)}}{z_{(k-n)} - z_{(k-m)}},$$

où $z_{(p)}$ est la coordonnée verticale de la position de la particule.

L'interpolation verticale est suivie de trois interpolations horizontales sur la direction (y) :

$$u_{q(i-\gamma, j-b, k-d)}^{\oplus} = \mathcal{L}_{i-\gamma, j}^0 u_{q(i-\gamma, j, k-d)}^{\oplus} + \mathcal{L}_{i-\gamma, j-1}^1 u_{q(i-\gamma, j-1, k-d)}^{\oplus} + \mathcal{L}_{i-\gamma, j-2}^2 u_{q(i-\gamma, j-2, k-d)}^{\oplus},$$

avec leurs coefficients :

$$\mathcal{L}^n = \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{m=2} \frac{y_{(p)} - y_{(j-m)}}{y_{(j-n)} - y_{(j-m)}},$$

et une simple interpolation sur la direction (x) :

$$u_{q(i-a, j-b, k-d)}^{\oplus} = \mathcal{L}_i^0 u_{q(i, j-b, k-d)}^{\oplus} + \mathcal{L}_{i-1}^1 u_{q(i-1, j-b, k-d)}^{\oplus} + \mathcal{L}_{i-2}^2 u_{q(i-2, j-b, k-d)}^{\oplus},$$

dont les coefficients de *Lagrange* sont :

$$\mathcal{L}^n = \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{m=2} \frac{x_{(p)} - x_{(i-m)}}{x_{(i-n)} - x_{(i-m)}}.$$

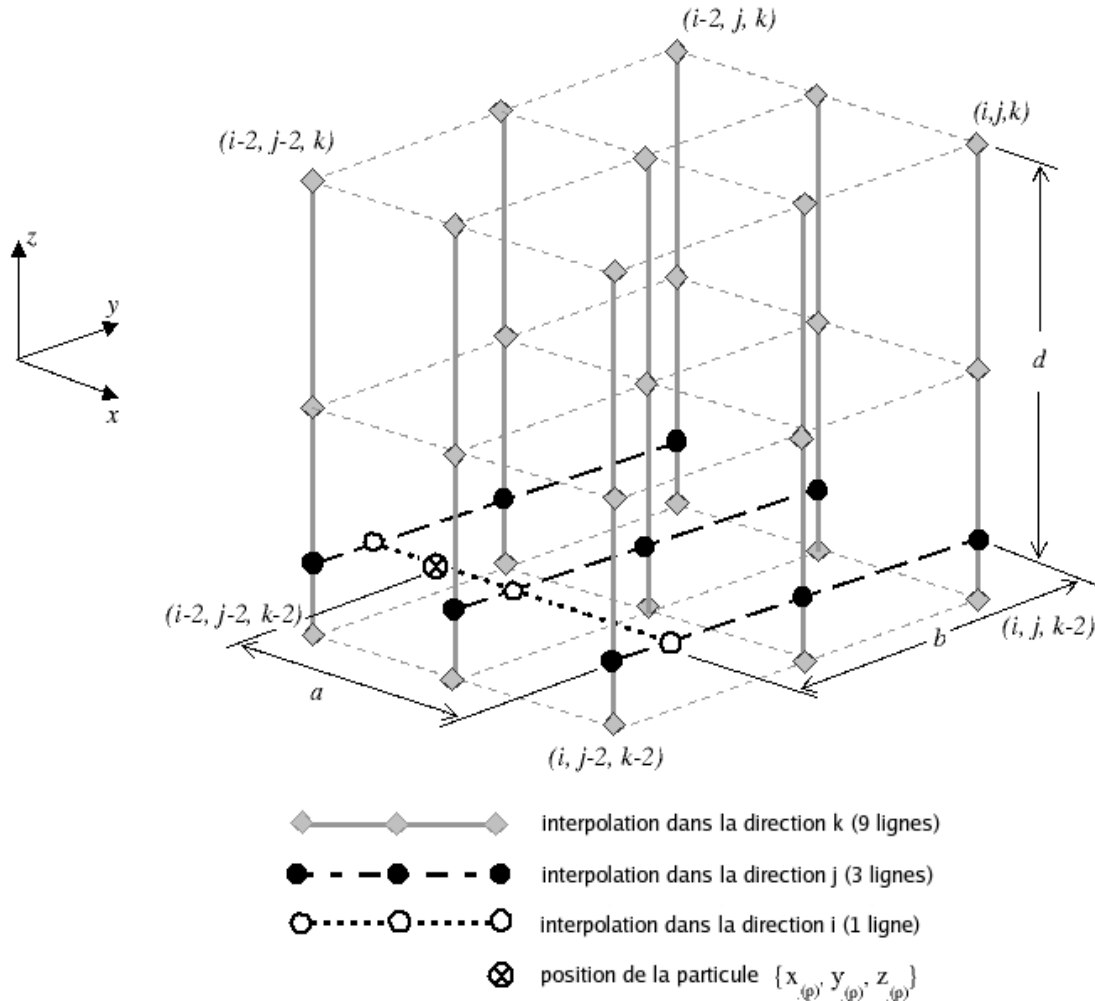


FIG. B.1 – Schéma d'interpolation tri-linéaire des polynômes de Lagrange.

Dans la Figure B.1 on montre les trois séquences d'interpolation : verticale (z), horizontale (x, y).

Ce processus est implémenté pour les trois composantes du champ eulérien de la vitesse $u_q^\oplus = \{u_1^\oplus, u_2^\oplus, u_3^\oplus\}$ et aussi pour E^\ominus , $\frac{dE^\ominus}{dt}$ et ε qui représentent respectivement l'énergie cinétique turbulente du champ résiduel, son évolution temporelle et son taux de dissipation visqueuse.

B.2 Méthode d'interpolation barycentrique

La méthode s'inspire de la loi de la gravité des corps et simplement pondère l'influence de la variable à interpoler aux nœuds du maillage en fonction de l'inverse du carré de la distance qui sépare ces nœuds de la particule.

Par exemple, en suivant le cas de l'interpolation du champs de vitesse :

- Soit $u_{q(p)}^\oplus$ la composante $q = \{1, 2, 3\}$ de la vitesse eulérienne qu'on souhaite interpoler à la position $p = \{x_{(p)}, y_{(p)}, z_{(p)}\}$ de la particule.
- Soit $u_{q(\beta)}^\oplus$ la composante $q = \{1, 2, 3\}$ de la vitesse eulérienne calculée par le code LES à la position du nœud $\beta = \{1, 2, \dots, 8\}$.
- Si on prend les huit nœuds du maillage les plus proches de la position de la particule (figure B.2), on a :

$$u_{q(p)}^\oplus = u_{q(x_{(p)}, y_{(p)}, z_{(p)})}^\oplus, \quad (\text{B.1})$$

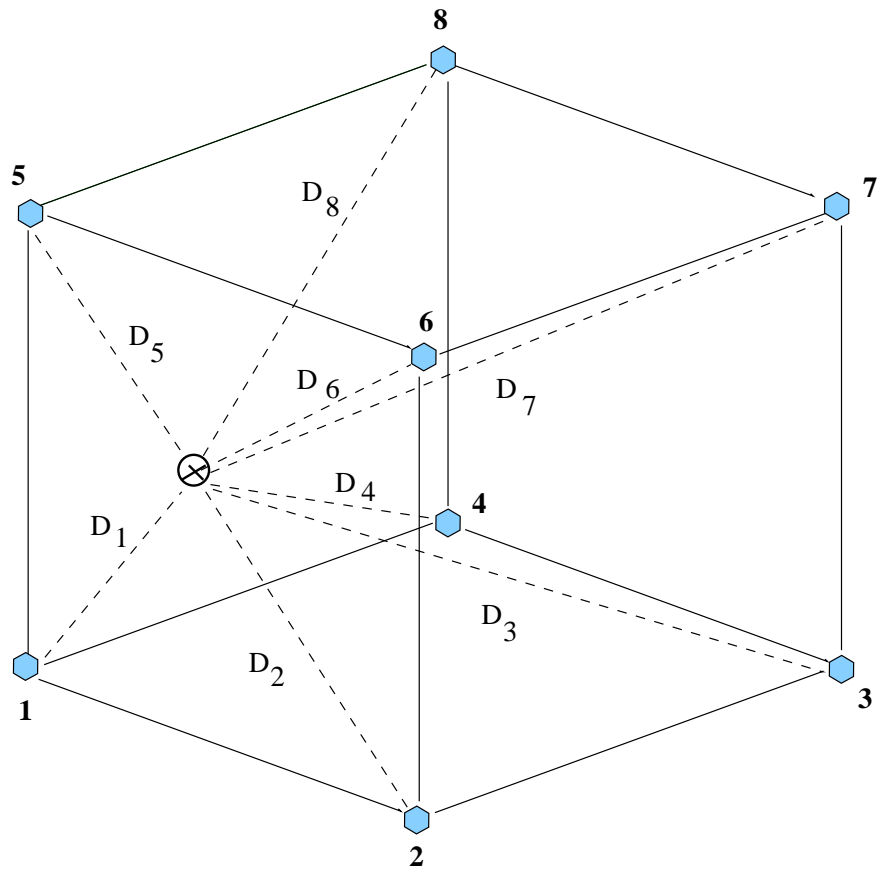
$$u_{q(\beta)}^\oplus = u_{q(x_{(\beta)}, y_{(\beta)}, z_{(\beta)})}^\oplus, \quad (\text{B.2})$$

et on calcule les carrés des distances entre chaque nœud du maillage utilisé pour le calcul de l'interpolation de la position de la particule :

$$\mathcal{D}_\beta = (x_{(p)} - x_{(\beta)})^2 + (y_{(p)} - y_{(\beta)})^2 + (z_{(p)} - z_{(\beta)})^2. \quad (\text{B.3})$$

- Finalement, on calcule la valeur de la composante q de la vitesse interpolée à la position de la particule :

$$u_{q(p)}^\oplus = \frac{\sum_{\beta=1}^8 (u_{q(\beta)}^\oplus / \mathcal{D}_\beta)}{\sum_{\beta=1}^8 (1 / \mathcal{D}_\beta)}. \quad (\text{B.4})$$



⬡ Noeuds du maillage (β)

⊗ Position de la particule (p)

FIG. B.2 – Schéma d'interpolation barycentrique.

Annexe C

Calcul de la concentration d'espèces

Dans le cas de la simulation de la dispersion d'un scalaire passif sans tenir compte de la diffusion moléculaire, le calcul de la concentration volumique avec la méthode des particules fluides se fait simplement en comptabilisant sa quantité dans chaque boîte car chaque particule a une concentration unique et fixe (0 ou 1).

Si, par contre, ces particules sont porteuses d'espèces chimiques en quantité variable, étant donné l'effet de la diffusion et/ou de la réaction chimique, la méthode de calcul de la concentration va être fait différemment.

Pour obtenir la valeur de la concentration d'une espèce à un instant donné, on va calculer dans une boîte de mélange (§ 6.5.2) la concentration moyenne de l'espèce portée par les particules fluides qui sont à l'intérieur de cette boîte. La démarche est alors la suivante :

- Soit le cas du mélange de NO rejeté depuis une source ponctuelle (de diamètre relativement petit par rapport à l'épaisseur de la couche limite) dans une ambiance de O_3 .
- Soit N la quantité de particules fluides dans une boîte de comptage j . N_{NO} particules proviennent de la source de NO et $(N - N_{NO}) = N_{O_3}$ particules proviennent de l'écoulement porteur.
- Soit c_{mNO}^j et $c_{mO_3}^j$ les concentrations de NO et de O_3 respectivement de la particule m placée dans la boîte de comptage j . Les concentrations d'espèces chimiques dans cette boîte sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{NO}^j = \frac{\sum_{m=1}^N c_{mNO}^j}{N}, \\ c_{O_3}^j = \frac{\sum_{m=1}^N c_{mO_3}^j}{N}. \end{array} \right. \quad (C.1)$$

Si, par exemple, ils existent six particules fluides dans la boîte de comptage j à l'instant $t = 0$, trois sont porteuses de NO pur issue de la source ($N_{NO} = 3$) et les trois autres sont porteuses de O_3 pur ($N_{O_3} = 3$), la concentration volumique de NO et de O_3 dans cette boîte sera à cet instant :

$$\begin{cases} c_{NO}^t = \frac{3 c_{NO}^0}{6} = \frac{1}{2} c_{NO}^0, \\ c_{O_3}^t = \frac{3 c_{O_3}^0}{6} = \frac{1}{2} c_{O_3}^0. \end{cases}$$

Il n'y a pas eu encore de processus de diffusion entre elles.

Si on admet qu'il existe un mélange des espèces entre deux de ces particules tel que chacune échange la moitié de leur concentrations, et les quatre autres ne subissent pas ce processus (elles se sont mélangées chacune avec une particule porteuse de même espèce) et restent encore dans la même boîte de comptage à l'instant $t = \Delta t$, la concentration volumique sera :

$$\begin{cases} c_{NO}^{\Delta t} = \frac{\frac{1}{2} c_{NO}^0 + \frac{1}{2} c_{NO}^0 + 2 c_{NO}^0}{6} = \frac{1}{2} c_{NO}^0, \\ c_{O_3}^{\Delta t} = \frac{\frac{1}{2} c_{O_3}^0 + \frac{1}{2} c_{O_3}^0 + 2 c_{O_3}^0}{6} = \frac{1}{2} c_{O_3}^0. \end{cases}$$

C'est la même concentration qu'avant le processus de mélange puisque toutes les particules sont restées dans la même boîte.

Si à l'instant $t = 2\Delta t$ une particule qui contient les deux espèces est conduite vers une autre boîte de comptage et est remplacée par une particule porteuse de O_3 pur, dans la boîte j on aura :

$$\begin{cases} c_{NO}^{2\Delta t} = \frac{\frac{1}{2} c_{NO}^0 + 2 c_{NO}^0}{6} = \frac{5}{12} c_{NO}^0, \\ c_{O_3}^{2\Delta t} = \frac{\frac{1}{2} c_{O_3}^0 + 3 c_{O_3}^0}{6} = \frac{7}{12} c_{O_3}^0. \end{cases}$$

La Figure C.1 montre le processus décrit ci-dessus.

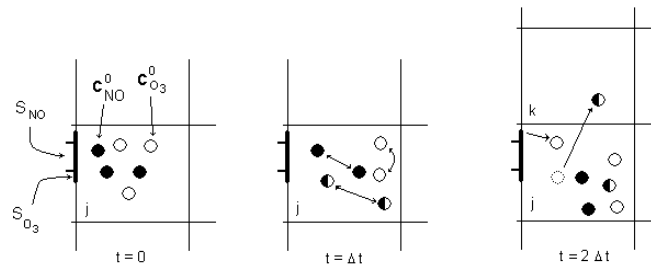


FIG. C.1 – Exemple de calcul de la concentration d'espèces dans une boîte de mélange.

Annexe D

Technique d'injection supplémentaire des particules fluides autour des panaches

Dans le cas de la simulation de la dispersion et mélange d'espèces issues depuis des sources ponctuelles, on peut choisir de rejeter des particules fluides porteuses des espèces de l'ambiance par tout dans le domaine de calcul ou d'utiliser une solution moins chère en place de mémoire et temps de calcul en injectant des particules autour des panaches. Dans cette dernière alternative, on propose de rejeter des particules depuis une source de diamètre beaucoup plus grand et dont le centre est placé en coïncidence avec celui de la source.

Soit le cas plus simple de rejet de NO depuis une source ponctuelle dans une ambiance de O_3 pur.

Les particules fluides porteuses de NO sont rejetées en même temps que les particules fluides porteuses de O_3 . Pour respecter la relation initiale de concentration dans la boîte de mélange, on va choisir le diamètre de la source de O_3 de telle façon qu'une particule lancée aie la même probabilité de provenir de l'une ou de l'autre source.

Dans leur parcours, les particules qui sont sorties de la source de NO , peuvent se trouver dans une boîte de mélange en bordure du panache où il n'y a pas assez de particules avec de O_3 pur. Cette problème peut être résolu en injectant des particules de O_3 pur supplémentaires. On présente une possible solution à ce problème dans la Figure D.1 :

Soit $N_{O_3}^0/N_{NO}^0 = 3$ la relation de la quantité de particules d'ozone pur par rapport à celle de NO pur dans la boîte de mélange (l) qui contient à la source à l'instant t_0 .

Si on ne considère pas les réactions chimiques, on constate que à l'instant $t_0 + \Delta t$ pour la boîte de mélange k , le niveau de concentration de O_3 est nulle puisque il n'y a pas de particules issues de la source de O_3 . Dans ce cas, on rajoute 3 particules fluides porteuses

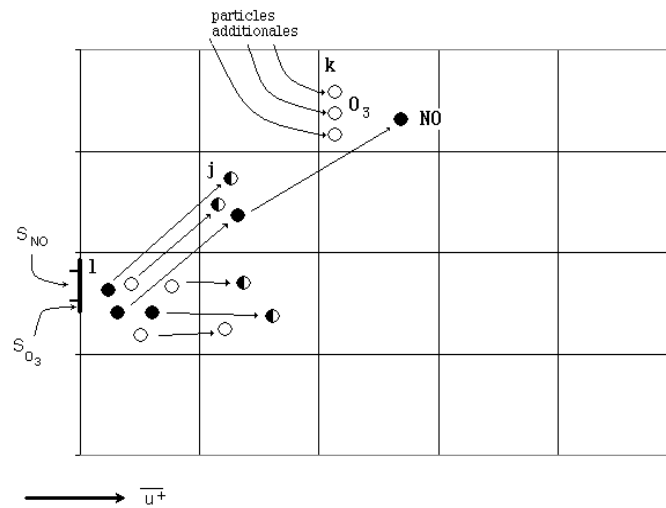


FIG. D.1 – Problème de diffusion avec O_3 appauvri autour du panache de NO et sa solution.

de O_3 pur dans la boîte avant d'appliquer le modèle de mélange.

Si, par exemple, les espèces se sont mélangées en interchangeant la moitié de sa concentration, la concentration d'espèces dans la boîte périphérique k , après le mélange sera :

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{NO}^{k, 2\Delta t} = \frac{\frac{1}{2} c_{NO}^k + \frac{1}{2} c_{NO}^k}{4} = \frac{1}{4} c_{NO}^k, \\ c_{O_3}^{k, 2\Delta t} = \frac{\frac{1}{2} c_{O_3}^k + \frac{1}{2} c_{O_3}^k + 2 c_{O_3}^k}{4} = \frac{3}{4} c_{O_3}^k. \end{array} \right.$$

En résumé, si une ou plusieurs particules fluides sont portées vers une boîte de mélange vide, il faut lancer $N_{O_3}^0/N_{NO}^0$ particules de O_3 pur avant d'appliquer le processus de mélange et de réaction chimique.

Bibliographie

- Aguirre, C., S. Simoëns and M. Ayrault. 2002. Dispersion of solid heavy particles in a homogeneous turbulence. *Proceeding of the International Conference Air Pollution. WIT Press*. Southampton, Boston. UK **X**. ISBN : 1-85312-916-X. ISSN : 1369-5886. pp 591 - 600.
- Aguirre, C.; S. Simoëns and M. Ayrault. 2003. Chemically reactive dispersion into atmospheric boundary layer. *Int. Workshop on Phy. modelling of flow and dispersion Phenomena*. Prato, Italy. pp 154 - 157.
- Aguirre, C., Y. Guo and M. Ayrault. 2004. Dispersion de particules solides en mouvement de saltation dans une écoulement turbulent. *C. R. Mécanique. Académie des Sciences*. Elsevier SAS. **332**. pp 627 - 632.
- Akselvoll, K. and P. Moin, 1995. Large Eddy Simulation of Turbulent Confined Coannular Jets and Turbulent Flow Over a Backward Facing Step. *Dept. Mech. Eng. Tech. Rep.*. **TF-63**, Stanford University.
- Arya, S. P., M. E. Capuno and L. C. Fagen. 1987. Some fluid modelling studies of flow and dispersion over two-dimensional low hills. *Atmospheric Environment*. **21**. pp 753 - 764.
- Ayrault, M. and S. Simoëns. 1995. Turbulent concentration determination in gas flow using multiple CCD cameras. *Journal of Flow Visualisation and Image Processing*. **2 (2)**. pp 195 - 208.
- Ayrault, M., S; Simoëns and P. Méjean. 1998. Negative bouyancy effects on the dispersion of continuous gas plumes downwind solid obstacles. *Journal of Hazardous materials*. **57**. pp 79 - 103.
- Bachelier, L. 1900. Théorie de la spéculation. *Thèse publiée dans les Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure*. **17,21** réédité aux Éditions Jacques Gabay, Paris, 1995.

- Baggett J. S. 1997. Some Modeling Requirements for Wall Models in Large Eddy Simulation. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*. NASA Ames/Stanford Univ. pp 123-134.
- Baggett J. S. ; J. Jiménez and A. G. Kravchenko. 1997. Resolution Requirments in Large-eddy Simulation of Shear Flows. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*. NASA Ames/Stanford Univ. pp 51-66.
- Bagwell, T. G. 1994. Stochastic Estimation of Near Wall Closure in Turbulence Models. Ph.D. thesis, Univ. Illinois Urbana-Champaign.
- Bagwell, T. G. ; R. J. Adrian, R. D. Moser and J. Kim. 1993. Improved Approximation of Wall Shear Stress Boundary Conditions for Large Eddy Simulation. *Near-Wall Turbulent Flow*, eds. R. M. C. So, C. B. Speziale, et B. E. Launder (Elsevier Science Publisher).
- Balaras, E., C. Benocci and U. Piomelli. 1996. Two-layer Approximative Boundary Conditions for Large-eddy Simulations. *AIAA J.* **34**. pp 1111-1119.
- Bardina, J. ; J. H. Ferziger and W. C. Reynolds. 1983. Improved Turbulence Models Based on Large-eddy Simulation of Homogeneous Incompressible Turbulent Flow. *Department of Mechanical Engineering. Report N TF-19*. Stanford Univ.
- Bilger, R. W., L. R. SaeTRAN and L. V. Krishnamoorthy. 1991. Reaction an scalar mixing layer. *J. Fluid Mech.* **233**. pp 211 - 242.
- Brown, R. and R. Bilger. 1996. An experimental study of a reactive plume in grid turbulence. *J. Fluid Mech.* **312**. pp 373-407.
- Builtjes, P. J. H. 1983. A comparaison between chemically reacting plume models wind-tunnel experiments. *Air pollution Modeling and its Application. Plenum Press. Wis-pelaere, C. editions. New York.* **II**. pp 59 - 84.
- Businger, J. A. ; J. C. Wyngaard, Y. Izumi and E. F. Bradley. 1971. Flux-profile Relationships in the Atmospheric Surface Layer. *J. Atmos. Sci.* **28**. pp 181-189.
- Byun, D. W. 1990. On the Analytical Solutions of Flux-Profile Relationships for the Atmospheric Surface Layer. *Journal of Applied Meteorology.* **29**. pp652-657.

- Cabot, W. 1995. Large-eddy Simulation with Wall Models. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*. NASA Ames/Stanford Univ. pp 41-50.
- Cabot, W. 1996. Near-wall Models in Large Eddy Simulation of Flow Behind a Backward-facing Step. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*. NASA Ames/Stanford Univ. pp 199-210.
- Cabot, W. 1997. Wall Models in Large Eddy Simulation of Separated Flow. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*. NASA Ames/Stanford Univ. pp 97-106.
- Cabot W. and P. Moin. 2000. Approximative Wall Boundary Conditions in the Large-eddy Simulations of High Reynolds Number Flow. *Flow Turb. Combust.* **63** pp 269-291.
- Calori, G., C. Silibello, M. L. Volta, G. Brusasca and G. R. Carmichael. 1998. Application of a photochemical modelling system to an intense ozone episode over Northern Italy. *International Conference on Air Pollution Modelling and Simulation Proceeding APMS'98. Part 1*. pp 1 - 12.
- Carati, D. ; M. M. Rogers and A. A. Wray. 2002. Statistical Ensemble of Large-eddy Simulations. *J. Fluid Mech.* **455** pp 195-212.
- Casulli, V. and R. Cheng. 1992. Semi-implicit finite difference methods for three-dimensional shallow water flow. *J. for Numerical Methods in Fluid.* **15**. pp 629-648.
- Chollet, J. P. and M. Lesieur. 1981. Parametrization of small scales of three-dimensional isotropic turbulence utilizing spectral closures. *J. Atmos. Sci.* **38**. pp 2747 - 2757.
- Clark, J. A. 1968. A Study of Incompressible Turbulent Boundary Layers in Channel Flow. *Trans. ASME D. J. Basic Engineering.* **90**. pp 455.
- Clark T. L. 1977. A small-scale dynamic model using a terrain-following coordinate transformation. *J. Comput. Phys.*, **24**, 186-215.
- Colucci, P. ; F. Jaber, P. Givi and S. Pope. 1998. Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flow. *Phys. Fluids.* **10**. pp 499.
- Comte-Bellot, G. 1963. Contribution à l'étude de la turbulence de conduite. *Doctoral thesis*. University de Grenoble. France.

- Counihan, J. 1969. An improved method of simulating an atmospheric boundary layers in a wind tunnel. *Atmos. Environ.* **3**. pp 197 - 214.
- Curl, R. 1963. Dispersed Phase Mixing : I. Theory and effects in Simple Reactors. *A. I. Ch. E. Jpurnal.* **9**,2, pp 175-181.
- Damköhler, G. 1947. The effect of turbulence on the flame velocity in gas mixtures. *NACA TM.1112*.
- Deardorff, J. W. 1970. A Numerical Study Of Three-dimensional Turbulent Channel Flow. *J. Fluid Mech.* **41**, 453-480.
- Deardorff, J. W. 1973. The Use of Subgrid Transport Equations in a Three-Dimensional Model of Atmospheric Turbulence. *J. of Fluid Engineering.* **september 1973**. pp 429-438.
- Dopazo, C. 1975. Probability density function approach for a turbulent axisymmetric heated jet centreline evolution. *Phys. Fluids.* **18(4)**. pp 397-404.
- Dopazo, C. 1979. Relaxation of initial probability density functions in the turbulent convection of scalar fields. *Phys. Fluids.* **22**. pp 20-30.
- Dopazo, C. and E. O'Brien. 1974. An approach to the autoignition of a turbulent mixture. *Acta Astronautica.* **1**. pp 1239-1266.
- Dudhia, J. 1993. A nonhydrostatic version of the Penn State NCAR mesoscale model : Validation test and simulation of an Atlantic cyclone and cold front. *Mon Wea Rev,* **121**, 1493-1513.
- Durbin, P. A. 1980. A random flight model in inhomogeneous turbulent dispersion. *Phys. Fluids.* **23 (11)**. pp 2151 - 2153.
- Durbin, P. A. 1983. Stochastic Differential Equations and Turbulent Dispersion. *Lewis Research Center. NASA.,1103*. Cleveland, Ohio. pp 1-69.
- Esmaili, H and H. Piomelli. 1993. Large Eddy Simulation of Relaminarizing Sink Flow Boundary Layers. *Review Near Wall Turbulent Flow*. Elseiver Science Publishers B. V., 1993. pp 287-346.

- Fackrell, J. E. and A. G. Robins. 1982. Concentration fluctuations and fluxes in plumes from point sources in a turbulent boundary layers. *J. Fluid Mech.* **117**. pp 1 - 26.
- Fevrier, P. 2000. Étude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre des vitesses de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire. *Thèse de doctorat* Institute National Polytechnique de Toulouse.
- Gao, F. and E. O'Brien. 1993. A large-eddy simulation schema for turbulent reacting flow. *Phys. Fluids.* **A5**. pp 1282.
- Garratt, J. R. 1992. The atmospheric boundary layer. *Cambridge University Press*. ISBN 0-521-38052-9
- Gence, J. N. 1990. Cours D.E.A.
- Germano, M. ; U. Piomelli, P. Moin et W. H. Cabot. 1991. A Dynamic Subgrid-scale Eddy Viscosity Model. *Phys. Fluid.* **A 3**. pp 1760-1765.
- Gicquel, L. and P. Givi. 2002. Velocity filtered density function for large eddy simulation of turbulent flows. *Phys. Fluids.* **14(3)**. pp 1196-1213.
- Gong, W. 1991. A wind tunnel study of turbulent dispersion over two - and three- dimensional gentle hills from upwind point sources in neutral flow. *Boundary Layer Meteorology.* **54**. pp 211 - 230.
- Gong, W. and A. Ibbetson. 1989. A wind tunnel study of turbulent flow over model hills. *Boundary Layer Meteorology.* **49**. pp 113 - 148.
- Haworth, D. C. and S. B. Pope. 1986. A Generalized Langevin Model for Turbulent Flow. *Phys. Fluid.* **29** (2). pp 378-405.
- Haworth, D. C. and K. Jasen. 2000. LES On Unstructured Deforming Meshes : Towards Reciprocating IC Engines. *Comput. Fluid..*
- Hess, P. G. and S. Madronich. 1997. On tropospheric chemical oscillation. *Journal of Geophysical Research.* **102 (15)**. 949-965.

- Hsu, A. and J. Chen. 1991. A continuous mixing model for p.d.f. simulations and its applications to combusting shear flows. *Eighth Symposium on turbulent shear flows*. pp 22.4.1-22.4.5.
- Hussain, A. K. M. F. and W. C. Reynolds. 1975. Measurements in Fully Developed Turbulent Channel flow. *ASME I : J. Fluid Engineering*. **97**. pp 568-578.
- Jaberi, F. ; P. Colucci, S. James, P. Givi and S. Pope. 1999. Filtered mass density function for large eddy simulation of turbulent reacting flow. *J. Fluid Mech.*. **401**. pp 85.
- Janicka, J. ; W. Kolbe and W. Kollemann. 1978. Closure of the transport equation for the probability density function of scalar fields. *J. Non-equilib. Thermodyn.* **4**. pp 47 - 66.
- Jiménez, J. and R. Moser. 1998. LES : Where Are We and What Can We Expect ?. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*. NASA Ames/Stanford Univ. pp 255-265.
- Kaltenbach, H. J. 1998. Towards a Near-wall Model for LES of a Separated Diffuser Flow. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*. NASA Ames/Stanford Univ. pp 255-265.
- Kim, J., P. Moin and R. D. Moser. 1987. Turbulence Statistics in Fully Developed Channel Flow at Low Reynolds Number. *J. Fluid Mech.* **177**. pp 133-166.
- Kleinman, L. I. 1994. Low and high NOx tropospheric chemistry. *Journal of Geophysical Research*. **99 (16)**. pp 831-838.
- Klemp, J. B. and D. K. Lilly. 1978. Numerical simulation of hydrostatic mountain waves. *J. Atmos. Sci.* **35**. pp 78-107.
- Klemp, J. B. and R. B. Wilhelmson. 1978. The Simulation of three-dimensional convective storm dynamics. *J. Atmos. Sci.*, **35**. pp 1070-1096.
- Komori, S. and H. Ueda. 1984. Turbulent effects on the chemical reaction for a jet in a nonturbulent stream and for a plume in a grid-generated turbulence. *Phys. Fluids*. **27**. pp 77-86.
- Komori, S., J. Hunt, T. Kanzaki and Y. Murakami. 1991. The effects of turbulent mixing on the correlation between two species and on concentration fluctuation in non-premixed reacting flows. *J. Fluid Mech.* **228**. pp 629-659.

- Kreplin, H. and M. Eckelman. 1979. Behavior of the Three Fluctuating Velocity Components in the Wall Region of a Turbulent Channel Flow. *Phys. Fluid.***22**. pp 1233-1239.
- Lafore, J. P., J. Stein and N. Asencio. 1998. The Meso-NH Atmospheric Simulation System. Part1 : adiabatic formulation and control simulations. *Ann. Geophysicae*. **16**. pp 90 - 109.
- Langevin, P. 1908. On the Theory of Brownian Motion. *C. R. Acad. Sci. Paris*. **146**. pp 530-533.
- Lapierre, C., P. Pollet, J.-C. Pireaux, P. Dizengremel et M. Cabané. 2003. Effet de l'ozone sur la lignification du peuplier. *Les deuxièmes rencontres de l'Institut National d'Agronomie INA. Paris. France? Session multithèmes*. pp 1-2.
- Leonard, A. 1974. Energy Cascade in Large Eddy Simulation of Turbulent Fluid Flow. *Adv. Geophysics*. **18 A**. pp 237-248.
- Li, J. and R. Bilger. 1996. The diffusion of conserved and reactive scalars behind line sources in homogeneous turbulence. *J. of Fluid Mech.*. **318** pp 339 - 372.
- Li, J., R. Brown and R. Bilger. 1992. Experimental study of a scalar mixing layer using reactive and passive scalars. *11th Australasian Fluid Mechanics Conference*. pp 159-162.
- Lilly, D. K.. 1967. The Representation of Small-scale Turbulence in Numerical Simulation Experiments. *In Proc. IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences, IBM Form.* **N 320-1951**. pp 195-210.
- Lilly, D. K. 1992. A Proposed Modification of the Germano Subgrid-scale Closure Method. *Phys. Fluid.* **A 4**. pp 633-635.
- Lund, T. S. 1993. Large eddy simulation of a boundary layer with concave stream-wise curvature. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*. NASA Ames/Stanford Univ. pp 91 - 100.
- Lund, T. S.; X. Wu and K. D. Squires. 1998. Generation of turbulent inflow data for spatially-developing boundary layers simulation. *J. of Comp. Physics*. **140 (2)**. pp 233 - 258.

- Lund, T. S. ; S. Ghosal et P. Moin. 1993. Numerical Experiments with Highly-variable Eddy-viscosity Models. *Engineering Applications to Large-eddy Simulation* Ed. U. Piomelli and S. Ragab (New York : ASME). pp 7-11.
- Mason, P. J. 1989. Large-eddy simulation of the Convective Atmospheric Boundary Layer. *J. Atmos. Sci.* **46**. pp 1492-1516.
- Mason, P. and N. S. Callen. 1986. On the Magnitude of the Subgrid-scale Eddy Coefficient in Large-eddy Simulation of Turbulent Channel Flow. *J. Fluid Mech.* **162**. pp 439-462.
- Mason, P. J. and D. J. Thomson. 1992. Stochastic backscatter in large-eddy simulation of boundary layers. *J. Fluid Mech.* **242**. pp 51-78.
- Meeder, J. P. and F. T. M. Nieuwstadt. 2000. Large-eddy simulation of the turbulent dispersion of a reactive plume from a point source into a neutral atmospheric boundary layer. *Atm. Environment.* **34**. pp 3563 - 3573.
- Michelot, C. 1996. Développement d'un modèle stochastique lagrangien. Application à la dispersion et à la chimie de l'atmosphère. *Thèse de doctorat. Ecole Centrale de Lyon.* pp 1-180.
- Moin, P. et J. Kim. 1982. Numerical Investigation of Turbulent Channel Flow. *J. Fluid Mech.* **118**, pp 341-377.
- Monin, A. S. and A. M. Yaglom. 1975. *Statistical Fluid Mecanics. MIT, Cambridge Press.,* **2**. pp 359.vers
- Piomelli, U. ; J. Ferziger, P. Moin et J. Kim. 1989. New Approximate Boundary Conditions for Large-eddy Simulation of Wall-bounded Flows. *Phys. of Fluid.* **A 1, N 6**. pp 1061-1068.
- Piomelli, U. ; P. Moin et J. H. Ferziger. 1988. Model Consistency in Large-eddy Simulation of Turbulent Channel Flow. *Phys. Fluid.* **31**. pp 1884-1891.
- Pope, S. B. 1976. The probability approach to the modeling of turbulent reacting flow. *Combust. Flame.* **27**. pp 299.
- Pope, S. B. 1983. Consistent Modeling of Scalars in Tuebulent Flows. *Phys. Fluid.,* **26** (2). pp 404-408.

- Pope, S. B. 1985. PDF Methods for Turbulent Reactive Flows. *Prog. Energy Combust. Sci.*, **11**. pp 119-192.
- Pope, S. B. 1994. Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **26**. pp 23-36.
- Pope, S. B. 2000. Turbulent Flow. Cambridge, UK : Cambridge Univ. Press.
- Poppe, D. and H. Lustfeld. 1996. Nonlinearities in the gas phase chemistry of the troposphere : oscillating concentrations in a simplified mechanism. *Journal of Geophysical Research*. **101 (14)**. pp 373-380.
- Porté-Agel, F., C. Meneveau et M. Parlange. 2000. A scale-dependent dynamic model for large-eddy simulation : application to a neutral atmospheric boundary layer. *J. Fluid Mech.* **415**. pp 261-284.
- Pozorski, J. and J.-P. Minier. 1998. On the lagrangian turbulent dispersion models based on the Langevin equation. *International Journal of Multiphase Flow*. **24**. pp 913 - 945.
- Proctor, F. H. 1987. The Terminal Area Simulation System. *Volume I : Theoretical Formulation*. NASA Contractor Report **CR-4046**, 176 pp.
- Raupach, M. R., A. S. Thom and I. Edwards. 1980. A wind-tunnel study of turbulent flow close to regularly arrayed rough surfaces. *Boundary-Layers Met.* **18**. pp 373-397.
- Raupach, M. R., R. A. Antonia and S. Rajagopalan. 1991. Rough-wall turbulent boundary layers. *Application Mechanic Rev.* ASME Book AMR084. **44 (1)**. pp 1 - 25.
- Rogers, C. B. and J. K. Eaton. 1990. The behavior of solid particles in a vertical turbulent boundary layers in air. *Int. J. Multiphase Flow*. **16 (5)**. pp 819 - 834.
- Sabot, J. and G. Comte-Bellot. 1976. Intermittency of Coherent Structures in the Core Region of Fully Developed Turbulent Pipe Flow. *J. Fluid Mech.* **74**. pp 767-796.
- Sawford, B. L. and F. M. Guest. 1991. Lagrangian statistical simulation of the turbulent motion of heavy particles. *Boundary-Layer Meteorology*. **54**. pp 147 - 166.

- Schiestel, R. 1993. Modélisation et Simulation des écoulements turbulents. *Traité des Nouvelles Technologies - Serie Mécanique*. Editions Hermes. ISBN 2-86601-371-9. ISSN 0986-4873. Paris. France.
- Schlichting H. 1979. Boundary-Layer Theory. *Seven edition McGRAW-HILL*. ISBN 0-07-055334-3.
- Schmidt, H. et U. Schumann. 1989. Coherent Structure of the Convective Boundary Layers Derived From Large-eddy Simulation. *J. Fluid Mech.* **200**. pp 511-562.
- Schumann, U. 1975. Subgrid Scale Model For Finite Difference Simulations Of Turbulent Flow In Plane Channels And Annuli. *J. Comp. Phys.* **18**, 376-404.
- Seinfeld, J. H. 1986. Atmospheric chemistry and Physics of air pollution. *Jhon Wiley and Sons. Editions*.
- Sharman, R. D. ; T. L. Keller and M. G. Wurtele. 1988. Incompressible and anelastic flow simulations on numerically generated grids. *Mon. Wea. Rev.* **116** pp 1124 - 1136.
- Sillman, S. 1995. New developpement in understanding the relation between ozone, NOx and hydrocarbons in urban atmosppheres. *Advanced series in physical chemistry*. pp 145-171.
- Sillman, S., J. A. Logan and S. C. Wofsy. 1990. The sensitivity of ozone to nitrogen oxides and hydrocarbons in regional ozone episodes. *Journal of Geophysical Research.* **95**. pp 1837-1851.
- Simoëns, S. 2002. De la méthode pour l'étude de la dispersion du mélange de scalaire passif ou réactif. *Habilitation à diriger des recherches. Université Claude Bernard. Lyon 1*.
- Smagorinsky, J. 1963. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiments. *Mon. Weather Rev.* **91**. pp 99-164.
- Snyder, W. H. and J. L. Lumley. 1971. Some measurements of particle velocity autocorrelation functions in a turbulent flow. *J. Fluid Mech.* **48**. pp 41-71.
- Spalart, P. R. 1988. Direct simulation of a turbulent boundary layer up to $\Re_{\theta} = 1410$. *J. Fluid Mech.* **187**. pp 61 - 98.

- Spalart, P. R. and A. Leonard. 1985. Direct numerical simulation of equilibrium turbulent boundary layers. *Proc. 5th Symp. on Turbulent Shear Flows* Ithaca, New York. pp 234.
- Spalding, D. 1971. Concentration fluctuations in a round turbulent free jet. *Chem. Engineers Sci.* **26**. pp 95-107.
- Speziale, C. G. 1985. Galilean Invariance of Subgrid-Scale Stress Models in LES of Turbulence. *J. Fluid Mech.* **156**. pp 55-62.
- Stewart, R. W. 1993. Multiple steady states in atmospheric chemistry. *Journal of Geophysical Research.* **98 (20)**. pp 601-611.
- Tamura, T.; H. Nakayama and K. Sada. 2003. A fluctuating dispersion plume and its entrainment in the wake of a normal plate with finite width. *Int. Workshop on Phys. Modelling of Flow and Dispersion Phenomena*. Prato, Italy. pp 235 - 243.
- Taniere, A., B. Oesterlé and J. C. Monnier. 1997. On the behaviour of solid particles in a horizontal boundary layer with turbulence and saltation effects. *Experiments in fluids.* **23**. pp 463 - 471.
- Taylor, G. I. 1921. Diffusion by Continuous Movements. *Proc. London Math. Soc.*, **20**. pp 196-211
- Templeton, J. A., M. Wand and P. Moin. 2002. Towards LES wall models using optimization techniques. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*. NASA Ames/Stanford Univ. pp 189 - 200.
- Thompson, J. F., Z. U. Warsi and C. W. Mastin. 1985. Numerical Grid Generation : Foundations and Applications. North-Holland. pp 483.
- Thomson, D. J. 1987. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *J. Fluid Mech.* **180**. pp 529 - 556.
- Tulet, P., V. Crassier and R. Rosset. 1998. Air Pollution Modelling at a Regional Scale. *International Conference on Air Pollution Modelling and Simulation Proceedings APMS'98. Part 1*. pp 13 - 18.
- Valiño, L. and C. Dopazo. 1990. A binomial sampling model for scalar turbulent mixing. *Phys. Fluids A* **2**,7. pp 1204 - 1212.

- Van Driest, E. R., 1956. On Turbulent Flow Near Wall. *J. Aero Sci.*, **23**. pp 1007-1011.
- Van Dop, H., F. Nieuwstadt, J. Hunt. 1985. Random walk models for particle displacement in inhomogeneous unsteady turbulent flow. *Phys. Fluids*, **28**. pp 1639-1653.
- Vinçont, J.-Y. 1999. Détermination des flux turbulents de masse dans le sillage d'un obstacle : Application à l'écoulement à l'intérieur de la canopée urbaine. *These de doctorat de l'Ecole Centrale de Lyon*.
- Vinçont, J.-Y., S. Simoëns, M. Ayrault and M. Wallace. 2000. Passive scalar dispersion in a turbulent boundary layer from a line source at the wall and downstream of an obstacle. *J. Fluid Mech.*, **424**. pp 127 - 167.
- Vinkovic, I., C. Aguirre, S. Simoëns et J. Gence. 2005a. Couplage d'un modèle lagrangien sous-maille avec une SGE. *Comptes Rendus Mécanique. Académie des Sciences* **333**. Elsevier SAS. pp 325 - 330.
- Vinkovic, I., C. Aguirre and S. Simoëns. 2005b. Large-eddy simulation and Lagrangian stochastic modelling of passive scalar dispersion in a turbulent boundary layer. *Accepted for publication in Journal of Turbulence*.
- Vinkovic, I., C. Aguirre, S. Simoëns and M. Gorokhovski. 2005c. Large-eddy simulation of droplet dispersion for inhomogeneous turbulent wall flow. *submitted for publication to Elsevier Science*.
- Vreman, B. ; B. Geurts and H. Kuerten. 1994. On the Formulation of the Dynamic Mixed Subgrid-scale Model. *Phys. Fluid*, **6**. pp 4057-4059.
- Wang, M. 2000. Dynamic Wall Modeling for LES of Complex Turbulent Flows. *Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs*. NASA Ames/Stanford Univ. pp 241-250.
- Wang, M. et P. Moin. 2002. Dynamic Wall Modeling for LES of Complex Turbulent Flows. *Phys. Fluids*, **14**. pp 2043-2051.
- Warhaft, Z. 1984. The interference of thermal fields from line sources in grid turbulence. *J. Fluid Mech.*, **114**. pp 363-387.
- Weisman, M. L. and J. B. Klemp. 1982. The dependency of numerically simulated convective storms on vertical wind shear and buoyancy. *Mon. Wea. Rev.* **110**. pp 504 - 520.

- Whitaker S. 1968. Introduction to Fluid Mechanics. *Prentice-Hall International, Inc. Englewood Cliffs, N. J.*. Library of Congress Catalog Card Number 68-10169. United States of America.
- White, W. H. and D. Dietz. 1984. Does the photochemistry of the troposphere admit more than one steady state? *Nature*. **309**. pp 242-244.
- Wiener, N. 1923. Differential space. *J. Math. Phys.*. **58**. pp 131-174.
- Xue, M.; K. K. Droegemeier et V. Wong. 1995. The advanced regional prediction system and real-time storm weather prediction. *International Workshop on Limited-area and Variable Resolution Models*. Beijing, China World Meteor. Org.
- Xue, M.; K. K. Droegemeier et V. Wong. 2000. The Advanced Regional Prediction System (ARPS). A Multi-scale Nonhydrostatic Atmospheric Simulation and Prediction Model. Part I : Model Dynamics and Verification. *Meteorol. Atmos. Phys.* **75**. pp 161-193.
- Zang, Y.; R. L. Street and J. R. Koseff. 1993. A Dynamic Mixed Subgrid-scale Model and its Applications to Turbulent Recirculating Flows. *Phys. Fluid*. **A 5**. pp 3186.
- Zegadi, R., M. Ayrault and P. Mejean. 1994. Effects of a two-dimensional low hill in a thermally neutral and stably stratified turbulent boundary layer. *Atmospheric Environment*. **28**. pp 1871 - 1878.
- Zhuang, Y., J. D. Wilson and E. P. Lozowski. 1989. A trajectory-simulation model for heavy particle motion in turbulent flow. *Transaction of the ASME*. **111**. pp 492 - 494.

RESUME : L'environnement atmosphérique est un sujet crucial qui regroupe des domaines de compétences variées. Des outils de prédiction des phénomènes de la dispersion de polluants dans l'atmosphère ont été développés ces dernières années dans le but de protéger la population et de prévoir les dommages dans l'environnement. Cette étude s'intéresse au problème plus particulier du transport turbulent des particules fluides porteuses d'espèces chimiques réactives ou non, rencontrées dans l'atmosphère. Pour la simulation de la turbulence atmosphérique nous utilisons un code Eulérien global de simulation LES (Simulation des Grandes Echelles) couplé avec un modèle stochastique lagrangien pour les petites échelles. Pour le mélange ultime (diffusion) et la réaction chimique, nous avons utilisé un modèle de coalescence/dispersion. L'originalité de cette étude est le couplage Euléro-Lagrangien pour les particules fluides porteuses d'espèces chimiques réactives ou non, ainsi que son application à la dispersion des polluants. Une analyse et la proposition d'un modèle original de ségrégation d'espèces chimiques est ainsi validé et confirmé. Des cas de validation des géométries simples et complexes sont présentés, couches limites, colline gaussienne et de sites sur un village en Argentine.

*Dispersion and eulero-lagrangian atmospheric mixture
of reactive fluid particles.
Application to simple and complex cases*

ABSTRACT : The atmospheric environment is a crucial subject which gathers fields of varied competences. Tools for predicting the dispersion of pollutants in the atmosphere were developed in these last years with an aim of protecting populations and preventing environmental problems. The aim of this study is the more particular problem of the turbulent transport of the fluid particles which contain passive or reactive chemical species met in the atmosphere. For the simulation of atmospheric turbulent we use the Large Eddy Simulations (LES) coupled with a Lagrangian stochastic model for the small scales. For the ultimate mixture (diffusion) and chemical reaction, we use a coalescence/dispersion model. The originality of the study resides in the Eulero-Lagrangian coupling for the fluid particles containing passive or reactive chemical species like its application to the dispersion of the pollutants. An analysis and the proposal for a original model of segregation of the chemical species is thus validated and confirmed. Validations cases of simple and complex geometry are presented, boundary layers, gaussian hill and sites on a village in Argentina.

DISCIPLINE : MECANIQUE DES FLUIDES

MOTS-CLES : Dispersion et chimie atmosphérique, Simulation des grandes échelles - modèles stochastiques.

Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique - Ecole Centrale de Lyon
UMR CNRS 5509. 36 Av. Guy de Collongue BP 163 - 69131 Ecully Cedex (France).