

N° d'ordre: 96-57

Année 1996

## THESE DE DOCTORAT

présentée devant

L'ECOLE CENTRALE DE LYON  
ECOLE DOCTORALE: MECANIQUE

pour obtenir le titre de DOCTEUR

Spécialité: MECANIQUE

par

Christophe MICHELOT

---

*Développement d'un modèle stochastique lagrangien  
Application à la dispersion et à la chimie de l'atmosphère*

---

Soutenue le vendredi 13 décembre 1996

Jury: MM.

AYRAULT M., Maître de Conférence, Université Jean Monnet, Saint-Etienne  
CHOLLET J.-P., Professeur, Université Joseph Fourier, Grenoble I  
GENCE J.-N., Professeur, Université Claude Bernard, Lyon I  
HODIN A., Ingénieur de Recherche, Sechaud & Metz  
JEANDEL D., Professeur, Ecole Centrale de Lyon  
SABELNIKOV V., Professeur, TsAGI, Zhukovsky (Russie)  
SERO-GUILLAUME O., Directeur de Recherche CNRS, LEMTA, Nancy  
SIMOËNS S., Chargé de Recherche CNRS, Ecole Centrale de Lyon



**LISTE DES PERSONNES HABILITEES A ENCADRER DES THESES**

A. du 30.03.82 Art. 21 et A. du 23.11.88

Directeur : Etienne PASCAUD  
 Directeur Adjoint : Léo VINCENT  
 Directeur des Etudes : Jean ROZINOER  
 Directeur Administration de la Recherche : Francis LEBOEUF

| DEPARTEMENT                | NOM-PRENOM   | FONCTION  |
|----------------------------|--|---|
| ACOUSTIQUE                 | COMTE-BELLOT Geneviève<br>JUVE Daniel<br>ROGER Michel      | PROFESSEUR<br>...<br>...                          |
|                            | GALLAND Marie-Annick                                       | MAITRE DE CONFERENCES                             |
|                            | BLANC-BENON Philippe<br>SUNYACH Michel                     | CHARGE DE RECHERCHE CNRS<br>PROFESSEUR IUT LYON I |
| ELECTRONIQUE<br>LEAME      | BLANCHET Robert<br>LE HELLEY Michel                        | PROFESSEUR<br>...                                 |
|                            | HELLOUIN Yves  | MAITRE DE CONFERENCES                             |
|                            | VIKTOROVITCH Pierre<br>HOLLINGER Guy                       | DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS<br>...                |
|                            | GENDRY Michel<br>KRAWCZYK Stanislas<br>TARDY Jacques       | CHARGE DE RECHERCHE CNRS<br>...<br>...            |
| ELECTROTECHNIQUE<br>CEGELY | AURIOL Philippe<br>NICOLAS Alain                           | PROFESSEUR<br>...                                 |
|                            | BEROUAL Abderrahmane<br>ROJAT Gérard                       | MAITRE DE CONFERENCES<br>...                      |
|                            | NICOLAS Laurent  | CHARGE DE RECHERCHE CNRS                          |
| MACHINES THERMIQUES        | ARQUES Philippe<br>BRUN Maurice<br>CHAMPOUSSIN Jean-Claude | PROFESSEUR<br>...<br>...                          |



|  |   |   |
|--|---|---|
| <p>MATERIAUX MECANIQUE<br/>PHYSIQUE</p>        | <p>GUIRALDENQ Pierre<br/>TREHEUX Daniel<br/>VANNES Bernard<br/>VINCENT Léo</p> <p>BLANC-BENON Jean<br/>BRUGIRARD Jean</p> <p>NGUYEN Du</p> <p>FAYEULLE Serge<br/>JUVE Denyse</p>  | <p>- 2 -</p> <p>PROFESSEUR<br/>---<br/>---<br/>---</p> <p>PROFESSEUR LYON I<br/>---</p> <p>MAITRE DE CONFERENCES</p> <p>CHARGE DE RECHERCHE CNRS<br/>INGENIEUR D'ETUDES</p>   |
| <p>MATHEMATIQUES<br/>INFORMATIQUE SYSTEMES</p> | <p>DAVID Bertrand<br/>MARION Martine<br/>MAITRE Jean-François<br/>MOUSSAOUI Mohand Arezki<br/>THOMAS Gérard</p> <p>MUSY François<br/>ROZINOER Jean</p>  | <p>PROFESSEUR<br/>---<br/>---<br/>---<br/>---</p> <p>MAITRE DE CONFERENCES<br/>---</p>  |
| <p>MECANIQUE DES FLUIDES</p>                   | <p>MATHIEU Jean<br/>ALCARAZ Emilio<br/>JEANDEL Denis<br/>LEBOEUF Francis<br/>SCOTT Jean</p> <p>BATAILLE Jean<br/>BUFFAT Marc<br/>GAY Bernard<br/>GENCE Jean-Noël<br/>LANCE Michel</p> <p>BEN HADID Hamda<br/>HAMADICHE Mahmoud</p> <p>MOREL Robert</p> <p>CAMBON Claude</p> <p>BERTOGLIO Jean-Pierre<br/>ESCUDIE Dany<br/>FERRAND Pascal<br/>HENRY Daniel</p> | <p>PROFESSEUR EMERITE<br/>PROFESSEUR<br/>---<br/>---<br/>---</p> <p>PROFESSEUR LYON I<br/>---<br/>---<br/>---<br/>---</p> <p>MAITRE DE CONFERENCES LYON I<br/>---</p> <p>PROFESSEUR INSA</p> <p>DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS</p> <p>CHARGE DE RECHERCHE CNRS<br/>---<br/>---<br/>---<br/>---</p> |

|   |  |  |
|---|--|--|
| <p>MECANIQUE DES SOLIDES</p>                    | <p>CAMBOU Bernard<br/>JEZEQUEL Louis<br/>SIDOROFF François</p> <p>SURRY Claude</p>   | <p>- 3 -</p> <p>PROFESSEUR<br/>...<br/>...</p> <p>PROFESSEUR ENISE</p>   |
| <p>PHYSICOCHIMIE DES<br/>INTERFACES</p>         | <p>CLECHET Paul<br/>JOSEPH Jacques<br/>MARTELET Claude<br/>MARTIN Jean-René<br/>PORTE Louis</p> <p>ROBACH Yves<br/>STREMSDOERFER Guy</p> <p>JAFFREZIC Nicole</p> <p>SOUTEYRAND Elyane</p>  | <p>PROFESSEUR<br/>...<br/>...<br/>...<br/>...</p> <p>MAITRE DE CONFERENCES<br/>...</p> <p>DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS</p> <p>CHARGE DE RECHERCHE CNRS</p>  |
| <p>PHOTACATALYSE</p>                            | <p>PICHAT Pierre<br/>HERRMANN Jean-Marie<br/>HOANG-VAN Can</p>   | <p>DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS<br/>...</p>   |
| <p>TRIBOLOGIE ET DYNAMIQUE DES<br/>SYSTEMES</p> | <p>GEORGES Jean-Marie<br/>SABOT Jean<br/>MARTIN Jean-Michel</p> <p>DONNET Christophe</p> <p>MATHIA Thomas<br/>KAPSA Philippe</p> <p>LOUBET Jean-Luc<br/>MAZUYER Denis</p> <p>LE BOSSE Jean-Claude</p> <p>LOPEZ Jacques</p> <p>ROUSSEAU Jacques</p> | <p>PROFESSEUR<br/>...<br/>...</p> <p>MAITRE DE CONFERENCES</p> <p>DIRECTEUR DE RECHERCHE CNRS<br/>...</p> <p>CHARGE DE RECHERCHE CNRS<br/>...</p> <p>MAITRE DE CONFERENCES INSA</p> <p>MAITRE DE CONFERENCES UCB</p> <p>PROFESSEUR ENISE</p> |

*"La causalité est un principe commode, honorable, mais qui ne fournit pas toutes les réponses. Si nous voulons trouver un sens aux choses, il nous faut aller plus loin. Il nous faut admettre que nombre de phénomènes importants refusent de se laisser enfermer dans les beaux cartonnages de la causalité, ne pouvant être interprétés qu'au moyen des méthodes stochastiques."*

ROBERT SILVERBERG, L'homme stochastique

Cette thèse de Doctorat s'inscrit dans la continuité du programme de recherche entrepris par le C.L.I., filiale d'E.D.F., et le L.M.F.A. de l'E.C.L., en particulier par l'intermédiaire de la soufflerie atmosphérique de diffusion E.C.L.-E.D.F.. Je remercie à cet égard Monsieur Hodin, Ingénieur de Recherche, pour avoir soutenu ma candidature auprès de la direction du C.L.I. et pour avoir suivi ce travail.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur le Professeur D. Jeandel, directeur du L.M.F.A., pour avoir accepté de diriger ce travail. Ses compétences en analyse numérique et sa vision globale des problèmes de mécanique des fluides m'ont été très profitables.

Je tiens à remercier Monsieur M. Ayrault, Maître de Conférence, et Monsieur S. Simoëns, Chargé de Recherche C.N.R.S., qui ont su m'apporter les soutiens scientifique et humain dont j'ai eu besoin au cours de ces trois années, toujours avec beaucoup de pertinence.

J'adresse mes plus vifs remerciements à Monsieur le Professeur V. Sabelnikov et Monsieur le Professeur J.-N. Gence pour l'écoute qu'ils m'ont accordée et pour les nombreux conseils qu'ils m'ont donnés. Je les remercie en outre d'avoir accepté d'être rapporteur de cette thèse et membre du jury, respectivement.

Je remercie Monsieur le Professeur J.-P. Chollet d'avoir accepté d'être rapporteur de cette thèse et Monsieur O. Sero-Guillaume, Directeur de Recherche C.N.R.S., d'avoir accepté de juger ce travail.

Mes remerciements vont également à Messieurs les Professeurs R. W. Bilger et J. D. Li pour m'avoir fait parvenir toutes les données expérimentales relatives aux expériences qu'ils ont menées et qui m'ont permis de valider le modèle élaboré dans cette étude.

Je souhaite remercier les doctorants du laboratoire. Je pense notamment à G. Fauchet et I. Yudiana pour leurs compétences et leur chaleur humaine, et pour l'indispensable pause café qui n'aurait pas existé sans eux.

Je remercie très chaleureusement ma famille et mes amis qui ont su me reconforter dans les moments difficiles.

Enfin, j'exprime ma gratitude aux personnels du laboratoire et de Metraflu pour leurs conseils et leur aide.

## RESUME

L'objectif de ce travail est de construire un modèle stochastique lagrangien de suivi de particules prenant en compte les réactions chimiques entre les constituants présents dans l'écoulement considéré.

Une présentation succincte de différents modèles cinématiques existants fait l'objet du premier chapitre. La complexité des réactions chimiques atmosphériques est mise en évidence avec l'exemple de celles concernant les oxydes d'azote. L'approche lagrangienne est ici choisie parce qu'elle semble plus appropriée que l'approche eulérienne aux phénomènes locaux que sont la diffusion moléculaire et les réactions chimiques.

La modélisation de la convection en turbulence isotrope par des modèles stochastiques lagrangiens s'appuyant sur une équation de Langevin est présentée dans le second chapitre. Afin d'établir le lien entre les formulations lagrangienne et eulérienne, l'équation de Fokker-Planck déduite du modèle à une particule et une échelle de temps sera établie. Ce modèle est appliqué au cas d'une source linéique de température placée dans une turbulence de grille. La validation est obtenue par la comparaison des résultats numériques à des données expérimentales.

Le troisième chapitre commence par un résumé des différentes extensions du modèle stochastique à une particule et une échelle de temps aux écoulements turbulents inhomogènes. Le modèle de Thomson (1987) sera retenu car il apparaîtra comme le plus rigoureux moyennant les hypothèses faites. De nombreux cas de rejets non réactifs en turbulence inhomogène sont simulés, ce qui permettra de mesurer l'influence de divers paramètres sur les résultats numériques. Ce chapitre se terminera par la présentation d'un nouveau modèle prenant en compte les effets de flottabilité; il sera ici appliqué au cas d'une source au sol placée dans une couche limite neutre.

Le dernier chapitre est consacré aux écoulements réactifs. L'approche lagrangienne à une particule a nécessité l'utilisation d'un modèle de mélange au niveau des particules suivies. La condition que le nouveau modèle doit satisfaire pour que la densité de probabilité de la concentration relaxe vers une gaussienne en turbulence isotrope, conformément aux observations expérimentales, est établie. Le nouveau modèle à une particule et une échelle de temps prenant en compte les processus de mélange est appliqué à différents cas expérimentaux de mélange entre espèces réactantes en turbulence de grille, à savoir:

- une couche de mélange réactive entre ozone et monoxyde d'azote;
- une source linéique de monoxyde d'azote dans un écoulement principal d'ozone;
- une source ponctuelle de monoxyde d'azote dans un écoulement principal d'ozone.

## ABSTRACT

The aim of this work is to build a stochastic Lagrangian model of particles tracking which takes into account chemical reactions between the different species encountered in the flow.

The first chapter briefly deals with different kinematic existing models. The complexity of atmospheric chemical reactions is then highlighted through the example of nitrogen oxides ones. Lagrangian approach is chosen to consider reacting flows, as it seems more appropriate than Eulerian approach to local phenomena such as diffusion and chemical reactions.

The modeling of the convection in isotropic turbulence by stochastic Lagrangian models based on a Langevin equation is presented in the second chapter. In order to establish the link between Lagrangian and Eulerian formulations, the Fokker-Planck equation deduced from the one particle one time scale stochastic model is determined. This model is applied to the case of a temperature source line seeding a grid generated turbulence. The validation is performed by comparisons of the numerical results to experimental data.

The third chapter begins with a summary of the different extensions of the one particle one time scale stochastic model to inhomogeneous turbulent flows. The model of Thomson (1987) will be retained as it appears to be the more rigorous relatively to the hypothesis. Many types of rejections in inhomogeneous turbulence are simulated, which will allow to check the influence of different parameters on numerical results. To end with this chapter, a model including buoyancy effects is presented and tested in the case of a ground level source in a neutral boundary layer.

The last chapter is devoted to reacting flows. The one particle Lagrangian approach has needed the use of a mixing model within the tracked particles. Starting from a more general formulation than the diffusion model of Hsu & Chen (1991), the condition it has to satisfy for the concentration probability density function to relax towards a Gaussian shape in isotropic turbulence is established. The new one particle one time scale stochastic model including mixing process is successfully applied to different cases of reacting species mixing experiments in grid generated turbulence which are:

- a turbulent mixing layer between ozone and nitrogen monoxide;
- a line source of nitrogen monoxide in a main flow of ozone;
- a point source of nitrogen monoxide in a main flow of ozone.

# Table des matières

|   |           |
|---|-----------|
| Notations   | 3         |
| Introduction  | 9         |
| <b>1 Notions de dispersion et de chimie atmosphérique</b>   | <b>11</b> |
| 1.1 Modèles cinématiques  | 11        |
| 1.2 Chimie atmosphérique des oxydes d'azote   | 16        |
| 1.2.1 Oxydes d'azote mis en présence de monoxyde de carbone   | 17        |
| 1.2.2 Oxydes d'azote mis en présence de formaldéhyde  | 18        |
| 1.2.3 Oxydes d'azote mis en présence de méthane   | 19        |
| 1.2.4 Les brouillards photochimiques  | 20        |
| <b>2 Modèles stochastiques en turbulence homogène isotrope</b>  | <b>22</b> |
| 2.1 Introduction et démarche générale   | 22        |
| 2.1.1 Obtention de la densité de probabilité de présence à partir des trajectoires  | 23        |
| 2.1.2 Obtention des concentrations moyennes et des corrélations de concentration à partir des d.d.p.  | 24        |
| 2.2 Modèle à une particule  | 25        |
| 2.2.1 Problème modèle de dispersion monodimensionnelle en turbulence homogène isotrope stationnaire; Approche discrète  | 26        |
| 2.2.2 Lien entre les approches lagrangienne et eulérienne: équation de Fokker-Planck  | 34        |
| 2.2.3 Approche continue en turbulence homogène isotrope   | 39        |
| 2.2.4 Simulation numérique d'une source linéique transversale dans une turbulence de grille par un modèle stochastique lagrangien à une particule et une échelle de temps | 44        |
| 2.3 Modèle à deux particules  | 50        |
| <b>3 Modèles stochastiques à une particule et une échelle de temps en turbulence inhomogène</b>   | <b>56</b> |
| 3.1 Etat de l'art avant 1987  | 56        |
| 3.2 Modèle de THOMSON (1987)  | 59        |
| 3.2.1 Choix de $\vec{a}$ et $\mathbf{B}$  | 61        |
| 3.2.2 Modélisation de la fonction de densité de distribution $g_E$  | 63        |
| 3.3 Tests de validation du modèle de THOMSON (1987) moyennant le calcul de la fonction de densité de distribution "m.m.i.", et comparaison à des modèles antérieurs       | 65        |
| 3.3.1 Couche limite neutre  | 65        |
| 3.3.2 Couche limite convective  | 69        |

|            |   |            |
|------------|---|------------|
| 3.4        | Validation dans le cas de rejets ponctuels de l'utilisation de profils de concentration obtenus à partir du modèle bidimensionnel . . . . . | 72         |
| 3.5        | Introduction de la flottabilité dans le modèle à une particule et une échelle de temps . . . . .  | 79         |
| <b>4</b>   | <b>Modèle de dispersion turbulente avec réactions chimiques</b>   | <b>89</b>  |
| 4.1        | Problème et ligne directrice de la résolution . . . . .   | 89         |
| 4.2        | Traitement des phénomènes convectif, diffusif et réactif . . . . .  | 89         |
| 4.2.1      | Influence de la convection . . . . .  | 89         |
| 4.2.2      | Influence de la diffusion . . . . .   | 90         |
| 4.2.3      | Influence de la réaction chimique . . . . .   | 92         |
| 4.3        | Etude de la densité de probabilité de la concentration relative au modèle de diffusion de HSU & CHEN (1991) . . . . .                       | 93         |
| 4.3.1      | Etude théorique . . . . .   | 93         |
| 4.3.2      | Validation numérique . . . . .  | 102        |
| 4.4        | Application à la réaction entre $NO$ et $O_3$ sans mélange initial dans une turbulence de grille . . . . .                                  | 107        |
| 4.4.1      | Couche de mélange dans une turbulence de grille . . . . .   | 108        |
| 4.4.2      | Source linéique dans une turbulence de grille . . . . .   | 119        |
| 4.4.3      | Source ponctuelle dans une turbulence de grille . . . . .   | 138        |
|            | <b>Conclusion</b>   | <b>144</b> |
|            | <b>Annexes</b>  | <b>146</b> |
| <b>I</b>   | <b>Modèles de fermeture des équations de la mécanique des fluides</b>   | <b>147</b> |
| I.1        | Traitement statistique des équations . . . . .  | 147        |
| I.2        | Hypothèses de fermeture . . . . .   | 149        |
| I.3        | Modélisation des équations sur $k$ et $\epsilon$ . . . . .  | 149        |
| I.4        | Modèle avec lois "de proches parois" . . . . .  | 151        |
| I.5        | Modèle "bas REYNOLDS" . . . . .   | 152        |
| <b>II</b>  | <b>Constantes de réactions</b>  | <b>154</b> |
| <b>III</b> | <b>Signification de l'expression "même structure locale qu'un processus à incréments indépendants"</b>                                      | <b>155</b> |
| <b>IV</b>  | <b>Exemple de processus itératif pour la détermination de la fonction de densité de distribution "mmi"</b>                                  | <b>157</b> |
| <b>V</b>   | <b>Méthodes numériques utilisées</b>  | <b>162</b> |
| V.1        | Construction d'une variable aléatoire de densité de probabilité gaussienne . . . . .  | 162        |
| V.2        | Construction des "boîtes de mélange" . . . . .  | 165        |
| V.3        | Algorithme utilisé pour le suivi avec réactions chimiques . . . . .   | 166        |
| V.4        | Schémas numériques utilisés . . . . .   | 167        |
|            | <b>Bibliographie</b>  | <b>170</b> |

# Notations

## Indices et exposants

| Indices et exposants          | Définition   |
|-------------------------------|--|
| $\mathcal{G}^*$               | état atomique excité de l'atome $\mathcal{G}$  |
| $\mathcal{G}^\bullet$         | état radicalaire du composé chimique $\mathcal{G}$   |
| $\mathcal{G}'$                | fluctuation associée à la moyenne d'ensemble de la grandeur $\mathcal{G}$                            |
| $\mathcal{G}^{HC}$            | expression de la grandeur $\mathcal{G}$ avec le modèle diffusif de HSU & CHEN (1991)                 |
| $\mathcal{G}^0$               | valeur initiale de la grandeur $\mathcal{G}$   |
| $\langle \mathcal{G} \rangle$ | moyenne d'ensemble de la grandeur $\mathcal{G}$  |
| $\mathcal{G}_c$               | valeur prise par $\mathcal{G}$ au centre du panache  |
| $\mathcal{G}_i$               | $i^{\text{ième}}$ composante du vecteur $\vec{\mathcal{G}}$  |
| $\mathcal{G}_{ij}$            | composante du tenseur $\mathcal{G}$ située à la $i^{\text{ième}}$ ligne et $j^{\text{ième}}$ colonne |

## Lettres latines

| Symbole    | Unité           | Définition  |
|------------|-----------------|---|
| $A$        | $m s^{-2}$      | composante verticale de l'accélération lagrangienne   |
| $A_{R_w}$  | $s$             | constante intervenant dans la détermination de la fonction de corrélation temporelle de la vitesse pour le modèle discret à une particule et deux échelles de temps |
| $\vec{A}$  | $\sim m s^{-2}$ | partie aléatoire dans l'équation de LANGEVIN type   |
| $a$        | —               | fonction intervenant dans l'équation d'évolution de la vitesse du modèle discret à une particule et une échelle de temps  |
| $\vec{a}$  | $m s^{-2}$      | vecteur intervenant dans le modèle continu de THOMSON (1987)  |
| $a_0$      | —               | constante intervenant dans le modèle de SAWFORD (1991)  |
| $a_1^{VD}$ | $m s^{-2}$      | fonction intervenant dans le modèle de VAN DOP et al. (1985)  |
| $a_2$      | —               | fonction intervenant dans le modèle discret à une particule et deux échelles de temps d'évolution de la vitesse   |
| $a_2^{VD}$ | $m s^{-3/2}$    | fonction intervenant dans le modèle de VAN DOP et al. (1985)  |

| Symbole             | Unité               | Définition  |
|---------------------|---------------------|---|
| $\mathbf{B}$        | $m^2 s^{-3}$        | tenseur intervenant dans le modèle continu de THOMSON (1987)  |
| $B_{R_w}$           | $s$                 | constante intervenant dans la détermination de la fonction de corrélation temporelle de la vitesse pour le modèle discret à une particule et deux échelles de temps |
| $\mathbf{b}$        | $m s^{-3/2}$        | tenseur intervenant dans le modèle continu de THOMSON (1987)  |
| $b$                 | $m s^{-1}$          | fonction intervenant dans le modèle discret à une particule et une échelle de temps d'évolution de la vitesse   |
| $b_2$               | —                   | fonction intervenant dans le modèle discret à une particule et deux échelles de temps d'évolution de la vitesse   |
| $C_{dif}, C'_{dif}$ | —                   | constantes intervenant dans le modèle diffusif  |
| $C'_j$              | $sm^{-2}$           | grandeur proportionnelle à la concentration molaire surfacique  |
| $\dot{C}_A$         | $mol m^{-3} s^{-1}$ | taux de variation molaire volumique du constituant $A$ par réaction chimique  |
| $c$                 | $mol m^{-3}$        | concentration molaire volumique du fluide dense   |
| $c_A$               | $mol m^{-3}$        | concentration molaire volumique en espèce $A$ ; dans le texte on utilise comme unité la "partie par million" (ou <i>ppm</i> ) reliée à l'unité S.I. par             |
|                     |                     | $c_{A_{ppm}} = \frac{c_A}{c_P} 10^6$  |
|                     |                     | où $c_P$ est la concentration molaire volumique du fluide porteur au point considéré  |
| $c_F$               | $mol m^{-3}$        | concentration molaire volumique globale du fluide   |
| $c_m$               | $mol m^{-3}$        | concentration molaire volumique de la $m^{i\text{ème}}$ particule   |
| $c_P$               | $mol m^{-3}$        | concentration molaire volumique du fluide porteur   |
| $c_2$               | $m s^{-1}$          | fonction intervenant dans le modèle discret à une particule et deux échelles de temps d'évolution de la vitesse   |
| $D$                 | $m^2 s^{-2}$        | fonction de structure temporelle du champ de vitesse  |
| $D_p$               | $m$                 | déplacement de paroi  |
| $\dot{D}_A$         | $kg m^{-3} s^{-1}$  | taux de variation de masse volumique du constituant $A$ par réaction chimique   |
| $d_s$               | $m$                 | diamètre de la source   |
| $d\zeta, d\zeta_j$  | $s^{1/2}$           | processus aléatoires centrés, suivant une loi gaussienne de variance $dt$   |
| $e$                 | $m$                 | épaisseur du panache  |
| $e_2$               | —                   | écart type caractéristique  |
| $F$                 | —                   | fraction de mélange   |
| $G$                 | —                   | fonction de corrélation spatiale de la vitesse  |
| $\bar{g}$           | $m s^{-2}$          | accélération de pesanteur   |
| $g$                 | —                   | solution de similitude de $p_c$   |
| $g_E$               | $kg m^{-4} s$       | fonction de distribution des particules fluides dans l'espace des phases  |
| $g_L$               | $mol m^{-4} s$      | fonction de distribution des particules marquées dans l'espace des phases   |

| Symbole       | Unité                   | Définition   |
|---------------|-------------------------|--|
| $H, H^*$      | –                       | fonctions utilisées dans la théorie de JAYNES (1957)   |
| $h$           | $J s$                   | constante de PLANCK  |
| $\vec{j}_A$   | $\sim kg m^{-2} s^{-1}$ | vecteur flux de diffusion du constituant $A$   |
| $K$           | –                       | coefficient d'aplatissement  |
| $\vec{K}$     | $rad m^{-2} s$          | vecteur de l'espace sur lequel est définie la fonction caractéristique de transition monodimensionnelle                                  |
| $k$           | $m^2 s^{-2}$            | moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique turbulente   |
| $k_i$         | dépend de la réaction   | constante de réaction relative à la $i^{ème}$ réaction   |
| $L$           | $m$                     | longueur intégrale   |
| $L_r$         | $m$                     | longueur du panache réactif  |
| $M$           | $m$                     | maille de la grille  |
| $M_A$         | $kg mol^{-1}$           | masse molaire du constituant $A$   |
| $M_c^n$       | $mol m^{n-2} s$         | moment $n^{ème}$ , relatif à la cote pondérée par la concentration, construit sur la hauteur du panache                                  |
| $M_d$         | $kg mol^{-1}$           | masse molaire du fluide dense  |
| $M_{j(n-j)}$  | –                       | dérivée partielle à l'origine de la fonction caractéristique de transition monodimensionnelle divisée par $i^n$ , avec $i^2 = -1$        |
| $M_k$         | $mol^k m^{-3k}$         | moment d'ordre $k$ de la concentration relative  |
| $M_0$         | $kg mol^{-1}$           | masse molaire du fluide porteur  |
| $m_a, m_b$    | $m s^{-1}$              | paramètres du modèle de LUHAR & BRITTER (1989)   |
| $N$           | –                       | nombre de réalisations du processus turbulent étudié   |
| $N_D$         | –                       | nombre de DAMKHÖLER  |
| $N_{max}$     | nombre $m^{-3}$         | nombre maximal de particules par boîte à l'instant initial   |
| $N_p$         | –                       | nombre de particules suivies   |
| $\mathcal{N}$ | $s^{-1}$                | fréquence  |
| $n_{ij}$      | nombre $m^{-3}$         | nombre de particules dans la boîte considérée  |
| $n_0$         | $mol$                   | nombre de molécules transportées par chaque particule marquée  |
| $\tilde{n}_0$ | $mol s^{-1}$            | nombre de molécules issues de la source par unité de temps   |
| $p$           | $Pa$                    | pression   |
| $p_c$         | $m^3 mol^{-1}$          | densité de probabilité associée à la concentration   |
| $p_L$         | $m^{-6} s^3$            | densité de probabilité de présence dans l'espace des phases d'une particule marquée  |
| $p_{L1}$      | $m^{-3}$                | densité de probabilité de présence d'une particule marquée   |
| $p_{L2}$      | $m^{-6}$                | densité de probabilité de présence d'un couple de particules   |
| $p_r$         | $s$                     | densité de probabilité associée à la variable aléatoire $\psi$   |
| $q$           | –                       | nombre de particules issues de la source en $t_0$ se trouvant dans le volume élémentaire $[\vec{x}, \vec{x} + d\vec{x}]$ à l'instant $t$ |
| $\mathbf{R}$  | –                       | ensemble des réels   |
| $R$           | –                       | fonction de structure spatiale de la vitesse rapportée à la variance de la vitesse   |
| $R_a$         | –                       | fonction de corrélation temporelle de l'accélération   |
| $R_w$         | –                       | fonction de corrélation temporelle de la vitesse   |
| $Re$          | –                       | nombre de REYNOLDS   |
| $Re_L$        | –                       | nombre de REYNOLDS construit sur l'écart type de la vitesse  |
| $Re^*$        | –                       | nombre de REYNOLDS dans le modèle de SAWFORD (1991)  |

| Symbole           | Unité             | Définition   |
|-------------------|-------------------|--|
| $r$               | $m$               | coordonnée cylindrique telle que $r^2 = x^2 + y^2$   |
| $r_1, r_2$        | $s^{-1}$          | fonction intervenant dans la détermination de la fonction de corrélation temporelle de la vitesse pour le modèle discret à une particule et une échelle de temps |
| $S$               | —                 | coefficient d'asymétrie  |
| $\mathcal{S}$     | $kg\ m^{-6}\ s^2$ | la masse par unité de volume dans l'espace des phases et par unité de temps  |
| $Sc$              | —                 | nombre de SCHMIDT  |
| $s$               | —                 | concentration relative mise sous forme sans dimension  |
| $T_a$             | $s$               | échelle de temps intégrale de l'accélération   |
| $T_{ch}$          | $s$               | échelle de temps caractéristique de la réaction chimique   |
| $T_{dif}$         | $s$               | échelle de temps du modèle diffusif  |
| $T_L$             | $s$               | échelle de temps intégrale de la vitesse   |
| $T_L^{(\infty)}$  | $s$               | échelle de temps intégrale de la vitesse pour le modèle à une particule et une échelle de temps  |
| $T_{N_p}$         | $s$               | échelle de temps du modèle diffusif de POPE (1985)   |
| $T_\lambda$       | $s$               | échelle de temps de TAYLOR   |
| $t$               | $s$               | variable temporelle  |
| $t_r$             | $s$               | instant à partir duquel commence le rejet  |
| $t_\eta$          | $s$               | échelle de temps de KOLMOGOROV   |
| $U$               | $m\ s^{-1}$       | vitesse moyenne suivant l'axe des abscisses  |
| $U_e$             | $m\ s^{-1}$       | vitesse extérieure à la couche limite  |
| $U_j$             | $m\ s^{-1}$       | vitesse de la $j^{ième}$ particule   |
| $U_1, U_2$        | $m\ s^{-1}$       | processus aléatoires solutions du modèle continu de THOMSON (1987)   |
| $\mathcal{U}$     | $m\ s^{-1}$       | échelle de grandeur de la vitesse moyenne  |
| $\vec{u}$         | $\sim m\ s^{-1}$  | vecteur vitesse eulérienne   |
| $\vec{\tilde{u}}$ | $\sim m\ s^{-1}$  | vecteur vitesse modélisée  |
| $u_*$             | $m\ s^{-1}$       | vitesse de frottement  |
| $\vec{v}_L$       | $\sim m\ s^{-1}$  | vecteur vitesse lagrangienne   |
| $w$ ou $w_L$      | $m\ s^{-1}$       | composante verticale de la vitesse lagrangienne  |
| $w_n$             | $m\ s^{-1}$       | composante verticale de la vitesse lagrangienne à la $n^{ième}$ itération suivant l'approche discrète  |
| $w_1, w_2$        | $m\ s^{-1}$       | composantes verticales des vitesses lagrangiennes du modèle à deux particules  |
| $w_*$             | $m\ s^{-1}$       | vitesse verticale caractéristique de la couche convective  |
| $X$               | —                 | abscisse divisée par la maille de la grille  |
| $X_1, X_2$        | —                 | abscisses mises sous forme sans dimension où est successivement placée la source   |
| $x$               | $m$               | abscisse   |
| $x_n$             | $m$               | abscisse de la particule à la $n^{ième}$ itération suivant l'approche discrète   |
| $x'$              | $m$               | distance de la source à la station de mesure   |
| $\vec{x}$         | $\sim m$          | vecteur variable spatiale  |
| $\vec{x}_L$       | $\sim m$          | vecteur position lagrangienne  |
| $\vec{x}_0$       | $\sim m$          | vecteur joignant l'origine du repère au point source   |
| $y$               | $m$               | ordonnée   |

| Symbole    | Unité | Définition   |
|------------|-------|--|
| $Z_m$      | $m$   | somme des cotes des deux particules dans le modèle à deux particules       |
| $Z$        | —     | cote rapportée à l'épaisseur de la couche limite                           |
| $z$        | $m$   | cote   |
| $z_1, z_2$ | $m$   | cotes des particules du modèle à deux particules                           |
| $z_i$      | $m$   | cote du milieu du $i^{ième}$ segment de comptage                           |
| $z_n$      | $m$   | cote de la particule à la $n^{ième}$ itération suivant l'approche discrète |
| $z_s$      | $m$   | cote de la source  |
| $1_q$      | —     | variable aléatoire valant 1 avec une probabilité $q$ et 0 sinon            |

## Lettres grecques

| Symbole            | Unité                   | Définition   |
|--------------------|-------------------------|--|
| $\alpha$           | $rad\ m^{-1}$           | première composante du vecteur $\vec{K}$   |
| $\alpha_d$         | —                       | coefficient intervenant dans le modèle continu à deux particules                 |
| $\alpha_{ij}$      | —                       | concentration en particules rapportée à sa valeur initiale                       |
| $\alpha_\psi$      | —                       | fonction de la variable $\psi$ dont dépend le nouveau modèle diffusif            |
| $\alpha_u$         | $s^{-1}$                | coefficient intervenant dans l'équation de LANGEVIN sur la vitesse               |
| $\alpha_0$         | —                       | constante du modèle à deux particules  |
| $\alpha_1$         | $s^{-1}$                | coefficient intervenant dans le modèle continu de SAWFORD (1991)                 |
| $\alpha_2$         | $s^{-2}$                | coefficient intervenant dans le modèle continu de SAWFORD (1991)                 |
| $\beta$            | $rad\ m^{-1}\ s$        | deuxième composante du vecteur $\vec{K}$   |
| $\beta_d$          | —                       | coefficient intervenant dans le modèle continu à deux particules                 |
| $\beta_0$          | $s^{-1}$                | variable de l'équation du second degré ayant pour racines $\beta_1$ et $\beta_2$ |
| $\beta_1, \beta_2$ | $s^{-1}$                | coefficients intervenant dans le modèle continu de SAWFORD (1991)                |
| $\Gamma_A$         | $mol\ m^{-3}$           | concentration molaire volumique de l'espèce A                                    |
| $\gamma_0$         | $mol\ m^{-3}\ s^{-1}$   | concentration molaire volumique par unité de temps                               |
| $\Delta$           | $m$                     | distance entre les deux particules du modèle à deux particules                   |
| $\Delta t$         | $s$                     | incrément de temps   |
| $\varepsilon$      | $m^2\ s^{-3}$           | moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente      |
| $\varepsilon_c$    | $mol^2\ m^{-3}\ s^{-1}$ | moyenne d'ensemble du taux de dissipation de la variance de la concentration     |
| $\eta$             | $m$                     | longueur de KOLMOGOROV   |

| Symbole                        | Unité                | Définition  |
|--------------------------------|----------------------|---|
| $\Theta$                       | –                    | fonction caractéristique de transition  |
| $\theta$                       | $K$                  | température absolue   |
| $\kappa_A$                     | $kg\ m^{-1}\ s^{-1}$ | diffusivité moléculaire du constituant $A$  |
| $\lambda$                      | $kg\ m^{-1}\ s^{-1}$ | viscosité dynamique   |
| $\tilde{\lambda}$              | $m$                  | longueur d'onde d'un photon   |
| $\mu$                          | $kg\ m^{-1}\ s^{-1}$ | viscosité dynamique   |
| $\mu_j$                        | $m^j\ s^{-j}$        | $j^{ième}$ moment de la turbulence  |
| $\nu$                          | $m^2\ s^{-1}$        | viscosité cinématique   |
| $\tilde{\nu}$                  | $s^{-1}$             | fréquence d'un photon   |
| $\xi$                          | –                    | variable aléatoire  |
| $\xi_w$                        | $m$                  | variable aléatoire relative à la vitesse verticale de la particule                            |
| $\xi_z$                        | $m$                  | variable aléatoire relative à la cote de la particule   |
| $\Pi$                          | –                    | densité de probabilité de transition  |
| $\rho$                         | $kg\ m^{-3}$         | masse volumique   |
| $\rho_d$                       | $kg\ m^{-3}$         | masse volumique du fluide dense pur   |
| $\rho_0$                       | $kg\ m^{-3}$         | masse volumique du fluide porteur pur   |
| $\sigma_a, \sigma_b$           | $m\ s^{-1}$          | paramètres du modèle de LUHAR & BRITTER (1989)  |
| $\sigma_c$                     | $mol\ m^{-3}$        | écart type des fluctuations de concentration  |
| $\sigma_F$                     | –                    | écart type des fluctuations de la fraction de mélange   |
| $\sigma_u$                     | $m\ s^{-1}$          | écart type des fluctuations de vitesse suivant l'axe des abscisses                            |
| $\sigma_v$                     | $m\ s^{-1}$          | écart type des fluctuations de vitesse suivant l'axe des ordonnées                            |
| $\sigma_w$ , ou $\sigma_{wL}$  | $m\ s^{-1}$          | écart type des fluctuations de vitesse des particules marquées suivant la direction verticale |
| $\sigma_{wE}$                  | $m\ s^{-1}$          | écart type des fluctuations de vitesse des particules fluides suivant la direction verticale  |
| $\tau$                         | $s$                  | intervalle de temps   |
| $\tau_L$                       | $s$                  | échelle de temps  |
| $\hat{\tau}$                   | $Pa$                 | tenseur des contraintes visqueuses  |
| $\Phi$                         | $kg\ m^{-2}\ s^{-2}$ | fonction intervenant dans le modèle continu de THOMSON (1987)                                 |
| $\chi_A$                       | –                    | fraction massique du constituant $A$  |
| $\chi_n$                       | –                    | variable aléatoire à la $n^{ième}$ itération  |
| $\chi_{G(m_i,  m_i )_{i=1,2}}$ | $m\ s^{-1}$          | variables aléatoires gaussiennes dans le modèle de DE BAAS et al. (1986)                      |
| $\psi$                         | $s^{-1}$             | variable aléatoire intervenant dans le modèle diffusif  |
| $\Omega$                       | $rad\ s^{-1}$        | pulsation   |

# Introduction

La pollution atmosphérique a principalement commencé au *XIX<sup>ème</sup>* siècle avec la révolution industrielle et l'apparition de grosses unités de production. Le développement des transports aidant, elle n'a cessé de croître et de se mondialiser pour devenir un véritable problème de société. De nombreux états et entreprises ont alors engagé des fonds dans des programmes de mesures, d'études et de préventions.

On a pu ainsi répertorier un grand nombre de substances chimiques polluantes (SEINFELD (1986)). Les composés soufrés par exemple ( $CO_2$ ,  $CS_2$ ,  $(CH_3)_2S$ ,  $SO_2$ ,  $SO_4^{2-}$ , ...) sont issus de la combustion des hydrocarbures, mais aussi de sources naturelles telles que les sédiments. Les composés à base d'azote ( $N_2O$ ,  $NO$ ,  $NO_2$ ,  $NH_3$ ,  $NO_3^-$ , ...) proviennent principalement de la combustion d'hydrocarbures à haute température. Les composés carbonés (alcane, alcène, ...) sont libérés par les raffineries de produits pétroliers et les automobiles. Les composés halogénés (chloro-fluoro-carbone, ...) sont dans leur majorité issus des produits de consommation courante (cosmétiques, produits d'entretien, ...).

Un grand nombre de ces substances va pouvoir subir des oxydations ménagées; on observera des chaînes de décomposition telles que:

hydrocarbures  $\rightarrow$  aldéhydes  $\rightarrow$  acides  $\rightarrow CO_2$

composés soufrés  $\rightarrow (H_2S, CH_3SCH_3) \rightarrow SO_2 \rightarrow H_2SO_4$

composés azotés  $\rightarrow NO \rightarrow NO_2 \rightarrow HNO_3$ .

L'oxydant est l'oxygène moléculaire, mais le mécanisme réactionnel est très complexe et met en jeu une multitude d'étapes catalytiques et radicalaires intermédiaires, majoritairement initialisées par le radical  $OH^\bullet$ .

Ces différents constituants vont agir sur l'écosystème dans sa globalité. On note ainsi une sensibilité des propriétés de la couche atmosphérique à certaines substances chimiques: les gouttelettes d'acide sulfurique ( $H_2SO_4$ ) obtenues par oxydation du dioxyde de soufre ( $SO_2$ ) rendent les brouillards plus fréquents en ville qu'en campagne, les précipitations augmentent avec la concentration en aérosols et la radiation solaire diminue lorsque la pollution augmente. D'autre part, l'influence des composants soufrés et azotés ainsi que celle de l'ozone sur la santé des populations, notamment en milieu urbain, a été établie. On a pu montrer que le dioxyde de soufre entraîne des bronchites chroniques et que le dioxyde d'azote ( $NO_2$ ) et l'ozone ( $O_3$ ), peu solubles, pénètrent loin dans le système respiratoire et peuvent conduire à des œdèmes pulmonaires. La végétation subit également des dommages par les

pluies acides qui contribuent à la destruction de nombreuses espèces d'arbres. Enfin, les matériaux sont également exposés à la pollution, les sulfures endommageant les bâtiments, l'ozone le caoutchouc,...

Devant ces constats préoccupants, il est aujourd'hui urgent de développer des modèles capables de prédire de manière aussi précise que possible l'évolution de corps nocifs à partir de sources prédéterminées.

Dans le cas général, les réactifs sont souvent convectés et réagissent simultanément. Il sera alors nécessaire d'analyser à la fois les phénomènes convectifs et les réactions chimiques.

- On présente dans le premier chapitre différents modèles cinématiques existants. La complexité des réactions chimiques atmosphériques est ensuite mise en évidence à travers l'exemple de celles où interviennent les oxydes d'azote. On choisira de traiter le cas d'écoulements réactifs par une approche lagrangienne, celle-ci nous paraissant plus adaptée que l'approche eulérienne aux phénomènes locaux que sont la diffusion et les réactions chimiques.
- Le second chapitre fait le point sur la modélisation de la convection par modèles stochastiques lagrangiens en turbulence homogène isotrope. Afin d'établir le lien entre les approches lagrangienne et eulérienne, on déterminera l'équation de FOKKER-PLANCK relative au modèle qui sera retenu pour la suite de l'étude, à savoir le modèle à une particule et une échelle de temps. Ce dernier sera validé par la simulation numérique d'une source linéique de température dans une turbulence de grille et la comparaison des résultats à des données expérimentales.
- Nous présentons dans le troisième chapitre les différentes extensions du modèle à une particule et une échelle de temps au cas d'une turbulence inhomogène. Cette étude approfondie nous mènera à retenir le modèle de THOMSON (1987) qui apparaîtra comme étant le plus rigoureux compte tenu des hypothèses faites. On effectuera en outre de nombreuses simulations de rejets en turbulence inhomogène, ce qui permettra de tester l'influence de différents paramètres sur les résultats numériques. Pour clore ce chapitre, un modèle incluant l'action de la flottabilité sur les trajectoires des particules sera proposé et testé dans le cas d'un rejet au sol.
- Le quatrième et dernier chapitre sera consacré aux rejets de constituants réactifs. L'approche lagrangienne envisagée a nécessité l'utilisation d'un modèle de mélange au sein même des particules suivies. Partant d'un modèle dont la formulation recouvre celle de HSU & CHEN (1991), on démontre quelle est la condition nécessaire et suffisante pour qu'il conduise à une densité de probabilité de la concentration relaxant vers une gaussienne dans le cas d'un mélange non réactif en turbulence homogène isotrope stationnaire, conformément aux observations expérimentales. Le nouveau modèle stochastique lagrangien de suivi de particules avec prise en compte des réactions chimiques sera alors validé par les simulations numériques de plusieurs expériences dans une turbulence de grille, à savoir:
  - comportement d'une couche de mélange entre l'ozone et le monoxyde d'azote;
  - cas d'une source linéique de monoxyde d'azote dans un écoulement principal dopé en ozone;
  - cas d'une source ponctuelle de monoxyde d'azote dans un écoulement principal dopé en ozone.

## Chapitre 1

# Notions de dispersion et de chimie atmosphérique

Lorsque l'on souhaite simuler l'évolution d'un fluide, il est nécessaire de modéliser le champ cinématique porteur, que l'écoulement soit réactif ou non. Nous allons présenter dans un premier temps différentes approches existant actuellement pour mener à bien la résolution de ce problème. A travers l'exemple des réactions concernant les oxydes d'azote dans la troposphère<sup>1</sup>, nous mettrons en évidence la complexité des réactions dans l'atmosphère, et ainsi l'intérêt de présenter un modèle approchant le plus rigoureusement possible la physique des processus réactifs.

### 1.1 Modèles cinématiques

Pour fixer les idées, considérons un mélange isotherme de deux constituants, conduisant éventuellement à un troisième lors d'une réaction chimique. L'état du fluide est donné à l'instant  $t$  en tout point  $M(\vec{x})$  du domaine d'étude par:

- sa densité  $\rho(\vec{x}, t)$ ;
- sa vitesse  $\vec{u}(\vec{x}, t)$ ;
- sa pression  $p(\vec{x}, t)$ ;
- les fractions massiques  $\chi_1(\vec{x}, t)$ ,  $\chi_2(\vec{x}, t)$  et  $\chi_3(\vec{x}, t)$  des trois constituants considérés.

Son évolution est régie par:

- l'équation de continuité:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

- l'équation de conservation de la fraction massique du constituant  $i$  (de concentration molaire volumique  $c_i$ <sup>2</sup>):

$$\frac{\partial(\rho \chi_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \chi_i \vec{u}) = -\nabla \cdot \vec{j}_i + \dot{D}_i$$

---

1. couche de l'atmosphère la plus proche du sol jusqu'à une altitude d'une dizaine de kilomètres.

2. la fraction massique  $\chi_i$  et la concentration molaire volumique  $c_i$  du constituant  $i$  de masse molaire  $M_i$  sont reliées directement par:

$$c_i = \frac{\rho \chi_i}{M_i}$$

où  $\rho$  est la densité du fluide.

avec

$$\chi_1 + \chi_2 + \chi_3 = 1,$$

$\vec{j}_i$  le vecteur flux de diffusion du constituant  $i$  et  $\dot{D}_i$  le taux de variation massique du constituant  $i$  du fait de la réaction chimique. On supposera par la suite  $\dot{D}_i$  connu exactement.

– l'équation de conservation de la quantité de mouvement:

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \hat{\nabla}(\rho\vec{u} * \vec{u}) = -\nabla p + \rho\vec{g} + \hat{\nabla}\hat{\tau} \quad (1.1)$$

$\hat{\tau}$  est le tenseur des contraintes visqueuses et  $\vec{g}$  l'accélération de pesanteur.  $\nabla$  et  $\hat{\nabla}$  représentent les opérateurs

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

et

$$\hat{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Si le fluide est newtonien, le tenseur des contraintes visqueuses est donné par:

$$\hat{\tau} = \lambda(\nabla \cdot \vec{u})\hat{I} + \mu(\hat{\nabla}\vec{u} + \hat{\nabla}^t\vec{u}) \quad (1.2)$$

où  $\mu$  et  $\lambda$  sont les viscosités dynamiques et  $\hat{I}$  le tenseur identité (en reportant (1.2) dans (1.1), on obtient l'équation de NAVIER-STOKES). Si l'on suppose l'hypothèse de STOKES vérifiée, on aura:

$$3\lambda + 2\mu = 0$$

Dans ce qui suit, on utilisera en outre la loi de FICK:

$$\vec{j}_i = -\kappa_i \nabla \chi_i$$

dans laquelle  $\kappa_i$  représente la diffusivité moléculaire du constituant  $i$  dans le fluide porteur.

Viendront se joindre aux équations précédentes des équations d'état reliant les différentes variables thermodynamiques entre elles, et les lois de comportement liant les grandeurs  $\kappa_i$  à ces variables. Elles sont obtenues à partir de l'expérience et permettent de fermer le système d'équations aux inconnues  $(p, \rho, \vec{u}, \chi_1, \chi_2, \chi_3)$ .

L'idéal serait de résoudre ce système d'équations de manière exacte. Malheureusement, il n'admet pas de solution analytique en général. On peut néanmoins espérer approcher la solution par une résolution numérique.

Soit alors le nombre de REYNOLDS  $Re$  défini par:

$$Re = \frac{UL}{\nu}$$

où  $U$ ,  $L$  et  $\nu$  sont respectivement les échelles de vitesse et de longueur de l'écoulement considéré et la viscosité cinématique du fluide. Ce nombre sans dimension est un paramètre important lorsque l'on envisage la résolution numérique d'un écoulement fluide. En effet, il caractérise le rapport des forces d'inertie aux forces de viscosité. Plus le nombre de REYNOLDS sera grand, plus le nombre de points de calcul nécessaire sera important. Suivant l'ordinateur utilisé, il existera donc une valeur de  $Re$  au-delà de laquelle la résolution numérique directe ne sera plus réalisable. La simulation directe au sens strict (Direct Numerical Simulation ou DNS) se trouve donc limitée par la capacité des ordinateurs qui impose une borne maximale au nombre de REYNOLDS. Néanmoins, bien que l'application de ce type de simulation à des écoulements industriels se trouve inadaptée pour le moment, elle demeure un outil de référence pour la recherche permettant de mieux comprendre la dynamique de la turbulence et de valider ou espérer améliorer les modèles existants. On peut citer par exemple les travaux de ORSZAG & PATTERSON (1972), RAI & MOIN (1991) et EGGEL et al. (1994).

Afin d'envisager des écoulements à nombres de REYNOLDS importants tout en conservant une description quasi instantanée de l'essentiel du champ turbulent, la simulation numérique des grandes échelles (Large Eddy Simulation ou LES) a été introduite (LEONARD (1974)). Seuls les tourbillons de grandes tailles sont pris en compte directement par la simulation, l'hypothèse d' "universalité et isotropie des petites échelles" permettant de modéliser l'action des petites échelles sur les grandes (CHOLLET & LESIEUR (1981)). La simulation des grandes échelles commence à être envisagée pour des écoulements proches de ceux rencontrés en milieu industriel. En effet, si les premières tentatives d'application à des écoulements en géométries complexes ont pu se révéler décevantes, tout porte à croire que ces déconvenues sont dues à un maillage trop grossier, problème qui devrait disparaître avec l'apparition d'ordinateurs toujours plus puissants.

En pratique, les méthodes les plus utilisées jusqu'à présent font appel à la description statistique des écoulements, pour laquelle chaque champ instantané est décomposé en la somme de sa moyenne statistique et de sa fluctuation par rapport à cette moyenne. Les non-linéarités inhérentes aux équations de la mécanique des fluides introduisent des corrélations d'ordre deux que l'on reliera aux champs moyens par des hypothèses de fermeture (Annexe I). Il existe également des modélisations à l'ordre  $n$  qui lient les corrélations d'ordre  $(n + 1)$  à celles d'ordres inférieurs, mais compte tenu des limitations informatiques, on se borne généralement à des lois de fermeture du premier ordre.

Compte tenu de l'importance vouée à la chimie dans le travail qui va suivre, regardons ce que devient l'équation d'évolution de la concentration molaire volumique  $c_i$  du constituant  $i$  lorsqu'on l'aborde suivant la description statistique. L'équation d'évolution de  $c_i$  s'écrit, en supposant le coefficient de diffusivité moléculaire  $\kappa_i$  constant

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (c_i \vec{u}) = \kappa_i \Delta c_i + \dot{C}_i$$

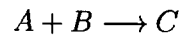
où  $\dot{C}_i$  est le taux de variation molaire volumique du constituant  $i$  du fait de la réaction chimique et où  $\Delta$  représente l'opérateur laplacien défini par

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

On obtient alors l'équation d'évolution de la moyenne d'ensemble<sup>3</sup>  $\langle c_i \rangle$  de la concentration molaire volumique du constituant  $i$

$$\frac{\partial \langle c_i \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_i \vec{u} \rangle = \kappa_i \Delta \langle c_i \rangle + \langle \dot{c}_i \rangle \quad (1.3)$$

Plaçons-nous par exemple dans le cas d'une réaction irréversible isotherme du second ordre entre deux constituants  $A$  et  $B$  conduisant au produit  $C$



Le taux de variation molaire volumique du constituant  $A$  s'écrit

$$\dot{C}_A = -k_0 c_A c_B$$

où  $k_0$  est la constante de réaction.

On peut définir un temps de décroissance relatif au constituant  $A$  par  $\frac{1}{k_0 c_B}$ . En prenant pour  $c_B$  sa valeur initiale  $c_B^0$ , on définira un temps caractéristique de la réaction chimique concernant le réactif  $A$  par

$$T_{ch} = \frac{1}{k_0 c_B^0}$$

Cette échelle de temps est à comparer à l'échelle de temps intégrale  $T_L$  de la turbulence pour savoir de quel type de réaction il s'agit. On définit alors le nombre de DAMKÖHLER  $N_D$  par

$$N_D = \frac{T_L}{T_{ch}}$$

Suivant les valeurs de ce nombre sans dimension, on distingue trois types de réactions:

- $N_D \ll 1$ : la turbulence induit une homogénéité des constituants avant que la réaction chimique agisse: la réaction est dite lente. Les fluctuations de concentration auront une influence très limitée sur la vitesse de la réaction;
- $N_D \sim 1$ : les constituants sont mis en présence et réagissent suivant des échelles de temps équivalentes. Le couplage entre la turbulence et la chimie est complexe: on parle d'une réaction rapide;
- $N_D \gg 1$ : les espèces réactantes ne peuvent coexister sans réagir que pendant un temps beaucoup plus petit que l'échelle de temps de la turbulence. Les produits forment alors des interfaces séparant les différents réactifs. La réaction chimique sera alors limitée par la diffusion des différents constituants à travers ces interfaces: la réaction est dite très rapide.

L'équation (1.3) devient pour le constituant  $A$ :

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_A \vec{u} \rangle = \kappa_i \Delta \langle c_A \rangle - k_0 \langle c_A c_B \rangle$$

Tout le problème va être la fermeture des termes de corrélation  $\langle c_A \vec{u} \rangle$  et surtout  $\langle c_A c_B \rangle$  qui s'avère être le plus délicat à modéliser.

3. Par la suite,  $\langle f \rangle$  représentera la moyenne d'ensemble de la grandeur  $f$ .

Les méthodes s'appuyant sur une description statistique ont initialement été appliquées à des écoulements chimiquement passifs. Pour envisager le cas réactif, des modèles ont été développés ces vingt dernières années, notamment pour des sources ponctuelles de constituants réactifs en couche limite atmosphérique, afin de simuler par exemple des rejets de cheminées d'usines ou de centrales thermiques. LUSIS (1976) propose de modéliser les panaches réactifs en faisant l'hypothèse qu'ils évoluent transversalement suivant des profils gaussiens dont les caractéristiques sont déduites du champ turbulent. Dans chaque section orthogonale à la direction principale de l'écoulement, le profil est découpé en couronnes concentriques à l'intérieur desquelles le mélange est supposé parfait. On considère alors une réaction suffisamment lente pour pouvoir négliger l'influence des fluctuations de concentration sur le taux de variation par réaction chimique; seules les valeurs moyennes interviennent dans ce modèle. MELO et al. (1978) appliquent ce modèle à un rejet d'oxydes d'azote en couche limite atmosphérique. De même, PETERS & RICHARDS (1977) donnent une extension de ce type de modèle pour des réactions très rapides. Néanmoins, pour les réactions rapides et très rapides, DONALDSON & HILST (1972) mettent en évidence l'influence très sensible des fluctuations de concentration sur le taux de variation de la concentration par réaction chimique. Ils montrent en particulier que l'inhomogénéité des réactifs tend généralement à ralentir le taux de réaction. LAMB & SHU (1978) proposent un modèle tenant compte de ces fluctuations, mais pas du gradient moyen de concentration. DONALDSON & VARMA (1976) donnent un modèle incluant ces deux effets, mais la formulation est complexe et n'est valable que dans des conditions bien spécifiques. GEORGOPOULOS & SEINFELD (1986) obtiennent un modèle plus général où la dispersion et les termes d'évolution par réaction chimique sont traités séparément.

Ces modèles restent toutefois très empiriques et nécessitent des hypothèses de fermeture pour les taux de variation de concentrations par réactions chimiques d'autant plus discutables que l'ordre des réactions croît.

Pour pallier à ce problème, notamment lorsque l'on s'intéresse à des réactions complexes, il est souhaitable d'utiliser une méthode qui traite les termes chimiques de manière exacte. C'est le cas de la résolution par les densités de probabilité. Ainsi, si l'on considère la densité de probabilité  $p_c(\Gamma; \vec{x}, t)$  de la concentration  $c$  d'un constituant définie par

$$p_c(\Gamma; \vec{x}, t) d\Gamma = \text{Proba}(\Gamma \leq c(\vec{x}, t) < \Gamma + d\Gamma)$$

on peut montrer que son évolution est régie par (GENCE (1994)):

$$\frac{\partial p_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \vec{u} | \Gamma \rangle p_c) = - \frac{\partial}{\partial \Gamma} (\kappa \langle \Delta c | \Gamma \rangle p_c) - \frac{\partial}{\partial \Gamma} (\dot{c}(\Gamma) p_c)$$

On voit que toute l'indétermination est reportée sur les moyennes conditionnelles  $\langle \vec{u} | \Gamma \rangle$  et  $\langle \Delta c | \Gamma \rangle$ , représentant respectivement la moyenne d'ensemble du champ de vitesse et celle du laplacien de la concentration sachant que la concentration est comprise entre  $\Gamma$  et  $\Gamma + d\Gamma$ . Les études la concernant, qu'elles soient numériques (ESWARAN & POPE (1988)) ou expérimentales (JAYESH & WARHAFT (1992)), ont pour but de déterminer l'évolution de  $p_c$  à travers des cas simples, afin de déduire des lois de comportement propres à ces moyennes conditionnelles.

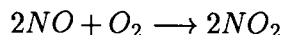
Si cette approche semble prometteuse, l'application à des écoulements complexes n'est pas envisageable à l'heure actuelle.

En résumé, ces différentes approches ne sont susceptibles de donner des résultats fiables que dans le cas de réactions chimiques simples ou lentes (afin de pouvoir négliger les fluctuations de concentration face aux concentrations moyennes). Or comme nous allons le voir dans le paragraphe suivant, les réactions dans la troposphère, qui nous intéressent à terme, sont très complexes.

## 1.2 Chimie atmosphérique des oxydes d'azote

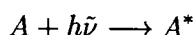
On estime à environ 150 le nombre d'espèces chimiques présentes dans la couche atmosphérique. Ces constituants sont susceptibles de réagir entre eux. Ainsi, plusieurs milliers de réactions peuvent éventuellement avoir lieu. Afin de montrer la complexité des processus chimiques observés, considérons par exemple certaines transformations auxquelles sont soumis les oxydes d'azote (SEINFELD (1986), AUMONT (1994)).

Les gaz de combustion sont la principale source de monoxyde d'azote. Une faible quantité réagit avec l'oxygène pour donner du dioxyde d'azote selon:

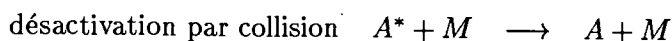


$NO_2$ , même sous forme de traces, mène à des réactions avec des composés organiques pour former un brouillard photochimique.

Les réactions photochimiques prennent naissance suite à l'excitation d'un atome  $A$  par un photon selon la réaction générique:

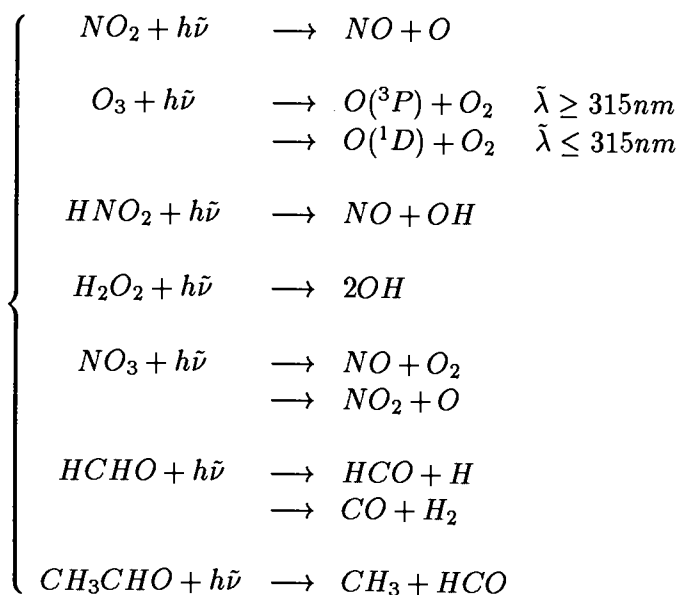


où  $h$  est la constante de PLANCK et  $\nu$  la fréquence du photon. Le signe \* signifie que la particule se trouve à un état excité. On peut alors observer différents chemins réactifs:



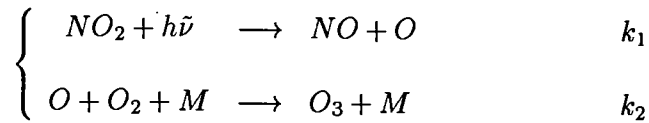
où  $B$ ,  $B_1$ , ...,  $B_m$ ,  $C_1$ , ...,  $C_n$  et  $M$  sont des constituants chimiques.

Dans la troposphère, les longueurs d'onde intervenant dans les réactions photochimiques se situent dans l'intervalle  $[280nm, 730nm]$ . On observera par exemple:

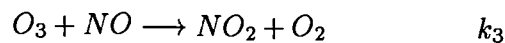


où  $O(^3P)$  et  $O(^1D)$  est l'atome d'oxygène à l'état fondamental et à l'état excité respectivement.

Ainsi, si le dioxyde d'azote est mis en présence d'air pur, les réactions diurnes sont:



où  $M$  est une molécule de dioxygène, de diazote ou tout autre constituant capable d'absorber le surplus d'énergie vibratoire et de stabiliser l'ozone  $O_3$  formé;  $k_1$  et  $k_2$  sont les constantes de réaction (dans la suite,  $k_i$  sera la constante de réaction de la  $i^{\text{ième}}$  réaction; les valeurs de ces constantes sont répertoriées dans l'Annexe II). Cette dernière réaction constitue la principale source d'ozone dans la troposphère. Cette production d'ozone sera a priori limitée par la réaction



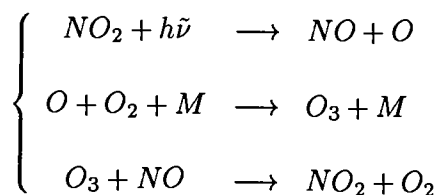
$M$  et  $O_2$  ont des niveaux de concentration  $c_M$  et  $c_{O_2}$  donnés, non perturbés par le processus réactionnel. Les concentrations de ces deux constituants n'évolueront donc pas par réactions chimiques. L'évolution des concentrations des autres composés est régie par le système d'équations suivant:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc_{NO_2}}{dt} = -k_1 c_{NO_2} + k_3 c_{O_3} c_{NO} \\ \frac{dc_{NO}}{dt} = k_1 c_{NO_2} - k_3 c_{O_3} c_{NO} \\ \frac{dc_O}{dt} = k_1 c_{NO_2} - k_2 c_O c_{O_2} c_M \\ \frac{dc_{O_3}}{dt} = k_2 c_O c_{O_2} c_M - k_3 c_{O_3} c_{NO} \end{array} \right.$$

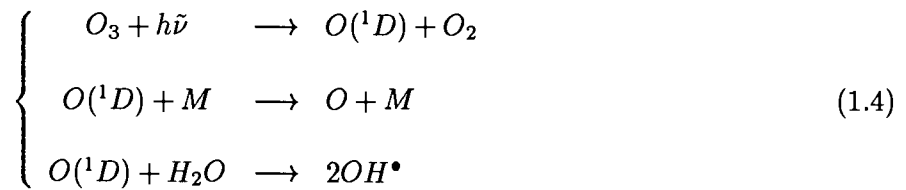
où  $c_A$  est la concentration instantanée en espèce  $A$ . L'étude de l'état d'équilibre (SEINFELD (1986)) montre que la production d'ozone est d'autant plus forte que le rapport  $\frac{c_{NO_2}}{c_{NO}}$  est grand. Or, la majeure partie des oxydes d'azote émise dans la troposphère l'est sous forme de monoxyde d'azote. Les fortes concentrations en ozone observées in situ impliquent donc que d'autres réactions, avec d'autres constituants, interviennent dans la production de  $O_3$ . On présente ici en guise d'exemple l'influence du monoxyde de carbone, du formaldéhyde, du méthane et des hydrocarbures en général sur ces réactions de base, et on va montrer comment l'équilibre entre l'ozone et les oxydes d'azote va être modifié.

### 1.2.1 Oxydes d'azote mis en présence de monoxyde de carbone

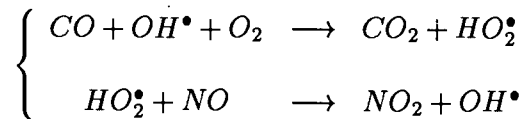
On retrouve les trois réactions de base



mais maintenant d'autres constituants vont également réagir; une faible quantité d'ozone va subir une photo-dissociation et participer ainsi à la formation du radical hydroxyl  $OH^\bullet$ :

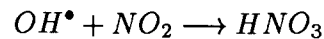


Cette réaction est la principale source du radical hydroxyl, qui va alors donner lieu aux réactions en chaîne suivantes:



$HO_2^\bullet$  est le radical hydroperoxyl.

Une réaction de terminaison sera:



L'effet du cycle de  $CO$  est alors de convertir lentement  $NO$  en  $NO_2$  et d'augmenter ainsi la concentration de l'ozone à l'état d'équilibre (figure (1.1)).

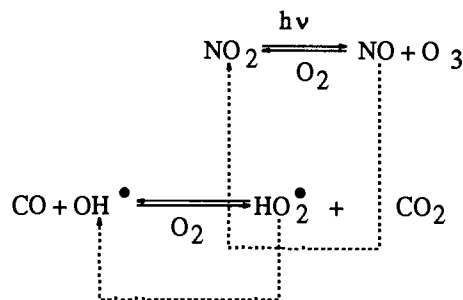
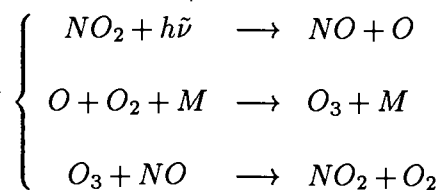


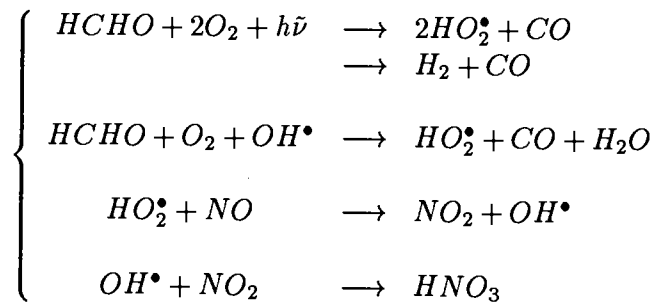
FIG. 1.1 - Schéma simplifié des réactions simultanées faisant intervenir les oxydes d'azote et le monoxyde de carbone

### 1.2.2 Oxydes d'azote mis en présence de formaldéhyde

Le formaldéhyde ( $HCHO$ ) est un oxydant produit par la combustion des hydrocarbures. Aux trois réactions initiales



viennent se joindre les réactions



Le schéma simplifié de ce système d'équations est le suivant:

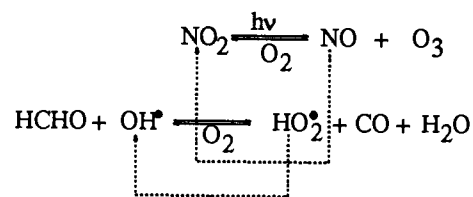
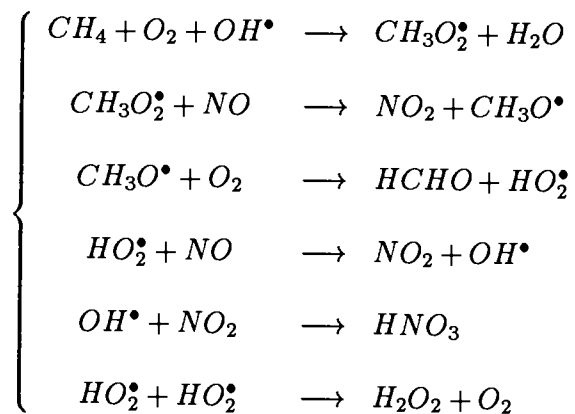


FIG. 1.2 - Schéma simplifié des réactions simultanées faisant intervenir les oxydes d'azote et le formaldéhyde

Les réactions entre les oxydes d'azote seront ici aussi déplacées en faveur du dioxyde d'azote, ce qui augmentera la production d'ozone.

### 1.2.3 Oxydes d'azote mis en présence de méthane

Suite à la formation du radical  $OH^\bullet$  par photo-dissociation de l'ozone (système (1.4)), interviennent en présence de méthane ( $CH_4$ ) les réactions



Le schéma simplifié de ce système est donné figure (1.3). Là encore, la formation d'ozone est favorisée.

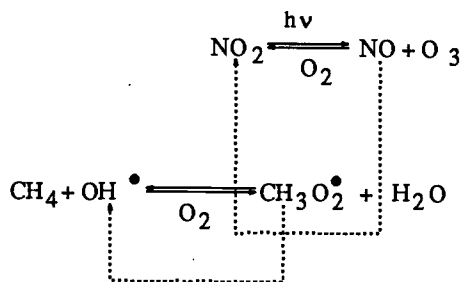
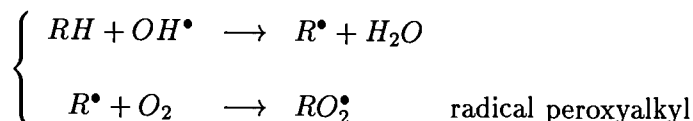


FIG. 1.3 - Schéma simplifié des réactions simultanées faisant intervenir les oxydes d'azote et le méthane

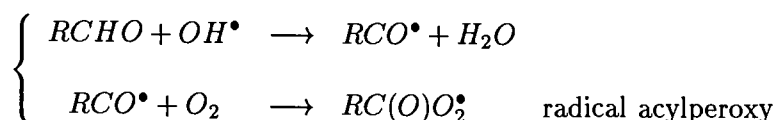
### 1.2.4 Les brouillards photochimiques

On désigne par "brouillard photochimique" le mélange de réactants et de produits résultant de l'interaction entre composés organiques et oxydes d'azote. Ces réactions sont initialisées par le radical  $\text{OH}^\bullet$  qui réagit<sup>4</sup>

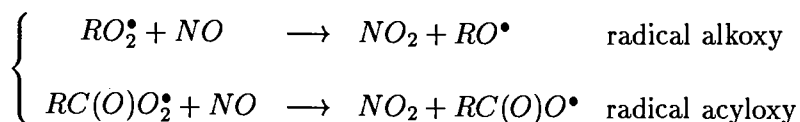
- avec les hydrocarbures:



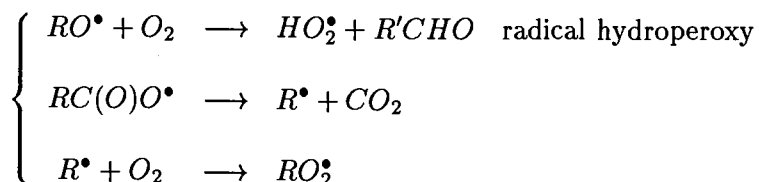
- avec les aldéhydes:



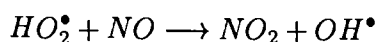
Les radicaux peroxy réagissent rapidement avec  $\text{NO}$ :



Puis:



Ce cycle se termine par une régénération du radical  $\text{OH}^\bullet$ :



Toutes ces réactions ont pour effet d'augmenter la conversion du monoxyde d'azote en dioxyde d'azote, et de favoriser par conséquent la production d'ozone.

4.  $R$  est composé d'atomes de carbone et d'hydrogène

On voit à travers cet exemple que les réactions chimiques au niveau de la troposphère sont nombreuses et complexes. En outre, les constantes de réaction sont établies pour des mélanges stœchiométriques; en dehors de ces conditions de référence, peu de données sont disponibles et on retiendra ici les constantes de réaction obtenues en chimie stœchiométrique, quel que soit l'écoulement considéré. On notera en outre que les échelles de temps de réaction peuvent être considérablement différentes les unes des autres, ce qui nécessitera évidemment un ajustement des schémas discrets de résolution temporelle.

L'approche que nous présentons dans ce travail a pour objectif de concilier au mieux les processus cinématiques et chimiques. La chimie étant un processus local, nous avons choisi d'aborder ce problème par une approche lagrangienne. L'idée est de relâcher un ensemble de particules fluides se déplaçant suivant des trajectoires respectant certaines propriétés statistiques de l'écoulement considéré, et de traiter les phénomènes moléculaires (diffusion et réactions chimiques) pendant le déplacement<sup>5</sup>. Nous allons donc nous intéresser tout d'abord aux modèles lagrangiens de suivi de particules dans le cas d'une turbulence homogène isotrope (chapitre 2), puis dans le cas général (chapitre 3). Les résultats de simulations numériques nous permettront de vérifier le bien fondé de cette approche dans le cas non réactant. Nous considérerons ensuite le mélange et les réactions chimiques entre les particules suivies (chapitre 4). Le terme de diffusion nécessitera une étude particulière. Nous présenterons alors un nouveau modèle de dispersion qui conduira la densité de probabilité de la concentration à relaxer vers une gaussienne dans le cas d'une turbulence isotrope (conformément aux observations numériques et expérimentales). Le modèle, comme la méthode aux densités de probabilité, aura l'avantage de traiter les termes de réactions chimiques de manière exacte (on remarquera que ce modèle peut être utilisé comme méthode de MONTE-CARLO pour déterminer les densités de probabilité de concentrations). Nous terminerons l'étude générale par la simulation dans une turbulence de grille d'une couche de mélange réactive, d'une source linéique réactive et d'une source ponctuelle réactive, et la comparaison avec des résultats expérimentaux.

---

5. On retrouve ce cheminement dans certains travaux (CALLAU (1994)), mais les modélisations sont différentes.

## Chapitre 2

# Modèles stochastiques en turbulence homogène isotrope

### 2.1 Introduction et démarche générale

L'objectif est d'atteindre les concentrations moyennes et les corrélations relatives à divers constituants. On va alors construire les trajectoires de particules de ces constituants, établir leurs densités de probabilité (d.d.p.) de présence en tout point et à tout instant, et en déduire les moyennes statistiques souhaitées. Montrons alors comment passer des trajectoires à la d.d.p. de présence, puis de cette dernière à la concentration moyenne et aux corrélations.

Soit une source ponctuelle située en  $S$  dans le repère spatial tridimensionnel  $(Oxyz)$  telle que

$$\overrightarrow{OS} = \vec{x}_0$$

et émettant à  $t_0$  des particules fluides.

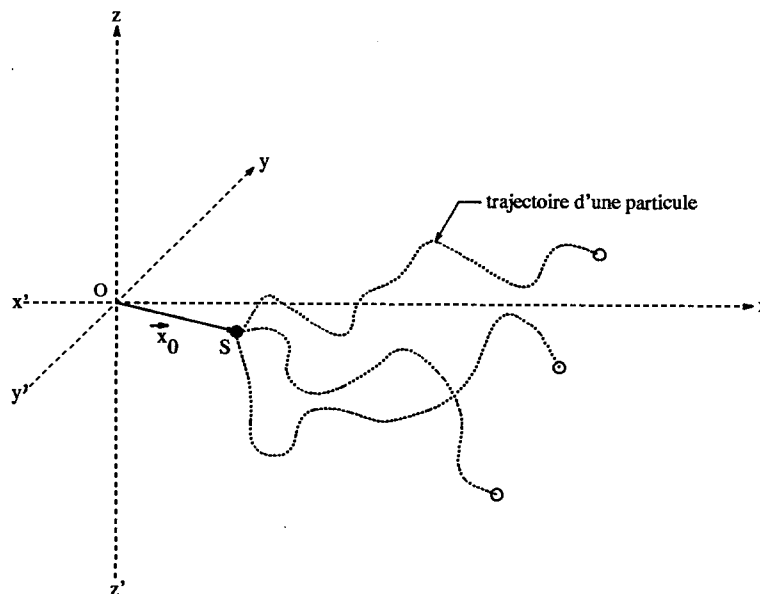


FIG. 2.1 - Croquis d'une source ponctuelle dans le repère  $(Oxyz)$

On fait l'hypothèse que chaque particule suivie est constituée d'un ensemble indissociable de  $n_0$  molécules de l'espèce  $A$ . Ceci revient à supprimer l'effet de la diffusivité moléculaire de l'espèce.

### 2.1.1 Obtention de la densité de probabilité de présence à partir des trajectoires

Soient

- $\vec{x}_L(t|\vec{x}_0; t_0)$  la position au cours du temps d'une particule issue de  $S$  à l'instant  $t_0$ .
- $p_{L1}(\vec{x}; t|\vec{x}_0; t_0)$  la d.d.p. de présence d'une particule définie par

$$p_{L1}(\vec{x}; t|\vec{x}_0; t_0) d\vec{x} = \text{Proba}(\vec{x} \leq \vec{x}_L(t|\vec{x}_0; t_0) < \vec{x} + d\vec{x})$$

c'est-à-dire la probabilité de présence d'une particule dans le volume élémentaire  $d\vec{x}$  autour de  $\vec{x}$  sachant qu'elle se trouvait en  $\vec{x}_0$  à  $t_0$ .

Connaître  $p_{L1}(\vec{x}; t|\vec{x}_0; t_0)$  revient à connaître pour toute réalisation la fonction

$$\vec{x} = \vec{x}_L(t|\vec{x}_0; t_0)$$

solution de

$$\begin{cases} \vec{x}(t_0) = \vec{x}_0 \\ \frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u}(\vec{x}, t) \end{cases}$$

avec  $\vec{u}$  solution de l'équation de NAVIER-STOKES. La connaissance exacte de  $p_{L1}(\vec{x}; t|\vec{x}_0; t_0)$  nécessite donc celle de  $\vec{u}$  sur un nombre infini de réalisations. Or nous savons que dans un écoulement turbulent la valeur instantanée de  $\vec{u}$  est quasiment impossible à calculer (chapitre précédent). Néanmoins, on peut espérer modéliser le déplacement en résolvant

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u}(\vec{x}, t)$$

où  $\vec{u}(\vec{x}, t)$  ne sera plus la solution exacte de l'équation de NAVIER-STOKES, mais solution d'un modèle dynamique respectant certaines propriétés statistiques du champ de vitesse, telles que sa valeur moyenne, son écart type, l'échelle de temps intégrale, ...

C'est cette approche qui est adoptée par les modèles stochastiques lagrangiens, à ceci près qu'ils raisonnent avec la vitesse lagrangienne d'une particule  $\vec{v}_L(t|\vec{x}_0; t_0)$ , reliée à la vitesse eulérienne par:

$$\vec{v}_L(t|\vec{x}_0; t_0) = \vec{u}(\vec{x}_L(t|\vec{x}_0; t_0), t)$$

Il faut alors concevoir un modèle qui engendre  $\vec{v}_L(t|\vec{x}_0; t_0)$ .

Les particules se déplaçant par cette approche indépendamment les unes des autres, ce modèle sera appelé modèle à une particule.

De même, pour déterminer  $p_{L2}(\vec{x}, \vec{x}'; t|\vec{x}_0, t_0, (\vec{x}'_0, t'_0))$ , d.d.p. lagrangienne relative à l'événement " Les particules des espèces  $A$  et  $B$  sont en  $\vec{x}$  et  $\vec{x}'$  à l'instant  $t$  sachant qu'elles étaient en  $\vec{x}_0$  à  $t_0$  et  $\vec{x}'_0$  à  $t'_0$ , respectivement ", une formulation donnant  $\vec{v}_L(t|\vec{x}_0; t_0)$  et  $\vec{v}'_L(t|\vec{x}'_0; t'_0)$  sera nécessaire. Ces deux vitesses pourront être corrélées lorsque les deux particules seront suffisamment proches l'une de l'autre. Ce modèle portera le nom de modèle à deux particules.

On voit ainsi qu'un modèle à  $n$  particules permet d'évaluer a priori toutes les corrélations de concentration jusqu'à l'ordre  $n$ .

### 2.1.2 Obtention des concentrations moyennes et des corrélations de concentration à partir des d.d.p.

Soit, au bout de  $N$  réalisations,  $q(\vec{x}, t | \vec{x}_0; t_0)$  le nombre de particules issues de  $S$  en  $t_0$  se trouvant dans le volume élémentaire  $[\vec{x}, \vec{x} + d\vec{x}]$  à l'instant  $t$ . On a :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{q(\vec{x}, t | \vec{x}_0; t_0)}{N} = p_{L1}(\vec{x}; t | \vec{x}_0; t_0) d\vec{x}$$

Comme chaque particule fluide transporte  $n_0$  molécules, le nombre moyen de molécules marquées dans le volume élémentaire  $d\vec{x}$  entourant  $\vec{x}$  vaut

$$\begin{aligned} \langle c(\vec{x}; t) \rangle d\vec{x} &= n_0 \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{q(\vec{x}, t | \vec{x}_0; t_0)}{N} \\ &= n_0 p_{L1}(\vec{x}; t | \vec{x}_0; t_0) d\vec{x} \end{aligned}$$

Ainsi, la concentration moyenne est reliée à la d.d.p. lagrangienne (conditionnée sur la position initiale) de présence par :

$$\langle c(\vec{x}; t) \rangle = n_0 p_{L1}(\vec{x}; t | \vec{x}_0; t_0)$$

Pour une source ponctuelle située en  $\vec{x}_0$ , à émission continue et dont le rejet a commencé à l'instant  $t_r$ ,  $n_0$  devient  $\tilde{n}_0(t_0) dt_0$  où  $\tilde{n}_0(t_0)$  est le nombre de molécules issues de la source par unité de temps à l'instant  $t_0$ . Le champ moyen de concentration en espèce  $A$  s'écrira :

$$\langle c_A(\vec{x}, t) \rangle = \int_{t_r}^t \tilde{n}_0(t_0) p_{L1}(\vec{x}; t | \vec{x}_0; t_0) dt_0$$

Dans le cas d'une source continue étendue sur un domaine  $D_0$  et dont le rejet a commencé à  $t_r$ , on écrit  $n_0$  sous la forme  $\gamma_0(\vec{x}_0, t_0) d\vec{x}_0 dt_0$  avec  $\gamma_0(\vec{x}_0, t_0)$  la concentration molaire volumique en  $\vec{x}_0$  à  $t_0$  par unité de temps. On aura alors :

$$\langle c_A(\vec{x}, t) \rangle = \int_{t_r}^t \int_{(D_0)} \gamma_0(\vec{x}_0, t_0) p_{L1}(\vec{x}; t | \vec{x}_0; t_0) d\vec{x}_0 dt_0$$

On notera que  $\langle c_A(\vec{x}, t) \rangle$  peut également s'écrire :

$$\langle c_A(\vec{x}, t) \rangle = \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} g_L(\vec{x}, \vec{u}, t) d\vec{u}$$

où  $g_L$  est la fonction de densité de distribution des particules marquées dans l'espace des phases (THOMSON (1987)). Nous verrons l'importance de cette remarque dans le paragraphe **2.2.2**.

De même, dans le cas de deux sources continues étendues  $D_A$  et  $D_B$  d'espèces  $A$  et  $B$  respectivement, on obtient :

$$\langle c_A(\vec{x}, t) c_B(\vec{x}', t) \rangle = \int_{t_r}^t \int_{t_r}^t \int_{(D_A)} \int_{(D_B)} \gamma_A(\vec{x}_0; t_0) \gamma_B(\vec{x}'_0; t'_0) p_{L2}(\vec{x}, \vec{x}'; t | (\vec{x}_0; t_0), (\vec{x}'_0; t'_0)) d\vec{x}_0 d\vec{x}'_0 dt_0 dt'_0$$

où  $\gamma_A(\vec{x}_0; t_0)$  et  $\gamma_B(\vec{x}'_0; t'_0)$  sont les concentrations molaires volumiques par unité de temps en  $\vec{x}_0$  à  $t_0$  du constituant  $A$  et en  $\vec{x}'_0$  à  $t'_0$  du constituant  $B$  respectivement.

On peut de façon identique envisager le même type de relation pour les corrélations d'ordres supérieurs.

Nous venons de montrer dans ce premier paragraphe comment obtenir la concentration moyenne et les corrélations spatiales à partir des trajectoires des particules marquées. Nous allons ici présenter le modèle à une particule et le modèle à deux particules. On se limitera dans ce chapitre au cas de la turbulence homogène isotrope.

## 2.2 Modèle à une particule

Le modèle lagrangien caractérisant la trajectoire aléatoire d'une particule dans un écoulement turbulent est issu d'une analogie avec le modèle de déplacement microscopique d'une molécule suivant la théorie du mouvement brownien.

Lorsqu'une particule de taille microscopique (suffisamment grande pour être suivie au microscope mais suffisamment petite pour avoir une trajectoire sensible au choc de chaque molécule la percutant) se déplace dans un fluide newtonien, elle suit une trajectoire très irrégulière, dont l'irrégularité est le résultat direct de l'agitation moléculaire. Ainsi dans un liquide soumis aux conditions normales de température et de pression, une particule brownienne subit quelques  $10^{21}$  collisions par seconde; par conséquent, on ne peut espérer suivre exactement le déplacement de cette particule (il faudrait connaître le déplacement de chaque molécule, les caractéristiques exactes des chocs moléculaires, les conditions initiales et aux limites du domaine d'étude; il faudrait en quelque sorte un arrêt sur image au niveau moléculaire!). La théorie du mouvement d'une particule brownienne postule alors que sa vitesse  $\vec{u}$  suit, d'un point de vue statistique, l'équation de LANGEVIN, à savoir:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = -\alpha_u \vec{u} + \vec{\mathcal{A}}(t). \quad (2.1)$$

Les variations de vitesse se scindent donc suivant cette approche en deux: une partie déterministe ( $-\alpha_u \vec{u}$ ) représentant le frottement dynamique subi par la particule, et une partie aléatoire ( $\vec{\mathcal{A}}(t)$ ) propre au mouvement brownien (pour plus de détails concernant le mouvement brownien, voir CHANDRASEKHAR (1943) par exemple).

Si maintenant on souhaite suivre une particule fluide dans un écoulement turbulent, des problèmes similaires se posent, dus au caractère aléatoire de la turbulence. L'idée, initialement proposée sous forme discrète par TAYLOR (1921), est alors de représenter le mouvement turbulent d'une particule fluide par l'équation de LANGEVIN.

On pourrait de plus s'interroger sur la pertinence physique d'un tel modèle en remarquant que rien n'empêche deux trajectoires simulées de se couper, le modèle faisant intervenir un processus aléatoire, ce qui contredit a priori un des fondements de la mécanique des milieux continus. Ce serait oublier que le modèle n'a pas la prétention de simuler le champ de vitesse physique, mais un champ de vitesse vérifiant certaines données statistiques du champ réel. C'est donc uniquement au niveau statistique que le modèle peut être jugé.

La plupart des modèles utilisés font l'hypothèse que la position de la particule fluide dans l'espace des phases 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. Il faut alors supposer que les variations de la vitesse à deux instants successifs sont décorréélées, soit en d'autres termes que l'échelle de temps intégrale  $T_a$  de l'accélération est beaucoup plus petite que l'échelle de temps intégrale  $T_L$  de la vitesse.

L'analyse menée par MONIN & YAGLOM (1975) montre que

$$T_a = Re_L^{-1/2} T_L$$

La condition

$$T_a \ll T_L$$

ne sera donc vérifiée que pour un nombre de REYNOLDS grand.

En retenant l'analogie proposée, chaque particule suivie sera entièrement déterminée par le système

markovien d'équations:

$$\begin{cases} \vec{x}(t_0) = \vec{x}_0 \\ \vec{u}(t_0) = \vec{u}_0 \\ \frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u} \\ \frac{d\vec{u}}{dt} = -\alpha_u \vec{u} + \vec{A}(t) \end{cases}$$

Afin de comprendre le raisonnement physique menant à la détermination des coefficients  $\alpha_u$  et  $\vec{A}(t)$  de l'équation (2.1), nous allons commencer par une approche discrète (GENCE (1990)) en faisant l'hypothèse supplémentaire de stationnarité, puis présenterons l'approche continue.

### 2.2.1 Problème modèle de dispersion monodimensionnelle en turbulence homogène isotrope stationnaire; Approche discrète

On supposera dans ce paragraphe la turbulence homogène, isotrope et stationnaire.

On se limite ici à l'analyse du cas idéal de la dispersion turbulente monodimensionnelle suivant la direction verticale (ce qui ne réduit pas la généralité du problème, la turbulence étant supposée isotrope dans ce chapitre).

Dans la suite, les variables eulériennes seront indicées par la lettre  $E$  et les variables lagrangiennes par la lettre  $L$ .

On considère une source linéique  $S$  parallèle à l'axe ( $y'y$ ), à rejet continu, et placée dans un écoulement dirigé suivant l'axe ( $x'x$ ) du repère ( $Oxyz$ ).

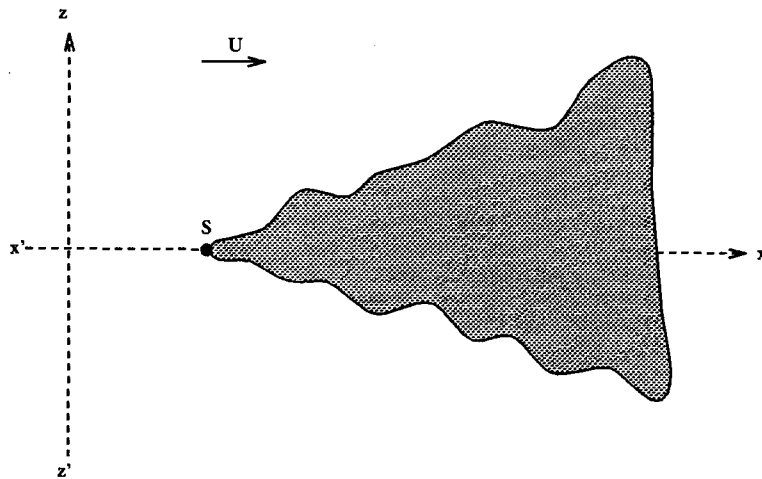


FIG. 2.2.- Schéma de l'expérience

Le champ de vitesse eulérienne s'écrit suivant la décomposition de REYNOLDS en grandeur moyenne et grandeur fluctuante:

$$\begin{cases} u_E(x, y, z, t) = U_E(x, y, z, t) + u'_E(x, y, z, t) \\ v_E(x, y, z, t) = V_E(x, y, z, t) + v'_E(x, y, z, t) \\ w_E(x, y, z, t) = W_E(x, y, z, t) + w'_E(x, y, z, t) \end{cases}$$

Pour le problème modèle de dispersion monodimensionnelle, on fait les hypothèses suivantes:

$$\begin{cases} U_E(x, y, z, t) = U \text{ constante} \\ V_E(x, y, z, t) = 0 \\ W_E(x, y, z, t) = 0 \\ u'_E(x, y, z, t) = 0 \\ v'_E(x, y, z, t) = 0 \end{cases}$$

Celles-ci conduisent au système final:

$$\begin{cases} u_E(x, y, z, t) = U \\ v_E(x, y, z, t) = 0 \\ w_E(x, y, z, t) = w'_E(x, y, z, t) \end{cases}$$

La particule lagrangienne issue de la source sera convectée par le champ moyen suivant l'axe ( $x'x$ ) et par le champ fluctuant suivant la direction ( $z'z$ ). Elle sera déterminée par sa position  $\vec{x}_L(t|\vec{x}_0)$  et sa vitesse  $\vec{u}_L(t|\vec{x}_0)$ .

On s'intéresse dès lors à la détermination du modèle qui va nous donner le champ fluctuant suivant l'axe ( $z'z$ ). La turbulence étant supposée homogène isotrope stationnaire, le champ lagrangien de vitesse turbulente  $w_L(t|\vec{x}_0)$  vérifie les hypothèses suivantes:

- (h1).  $w_L(t|\vec{x}_0)$  est une fonction aléatoire gaussienne;
- (h2).  $\langle w_L^2(t|\vec{x}_0) \rangle = \sigma_{w_L}^2$  est constante;
- (h3).  $T_L = \int_0^\infty \frac{\langle w_L(t|\vec{x}_0)w_L(t+\tau|\vec{x}_0) \rangle}{\sigma_{w_L}^2} d\tau$  est constante;
- (h4).  $R_w(\tau) = \frac{\langle w_L(t|\vec{x}_0)w_L(t+\tau|\vec{x}_0) \rangle}{\sigma_{w_L}^2} \sim 1 - \frac{\tau^2}{T_\lambda^2} + o(\tau^2)$  pour  $\tau$  petit.

On reconnaîtra l'échelle intégrale temporelle lagrangienne de la vitesse  $T_L$ , la fonction de corrélation temporelle lagrangienne de la vitesse  $R_w(\tau)$  et l'échelle de temps lagrangienne de TAYLOR  $T_\lambda$ . L'hypothèse (h1) est vérifiée expérimentalement; (h2), (h3) et (h4) sont des conséquences directes des hypothèses d'homogénéité et de stationnarité de la turbulence.

Moyennant ces hypothèses, le processus régissant l'évolution du couple de variables cote et vitesse verticale de la particule marquée ( $z, w$ ) sera un processus de MARKOV à énergie et échelle de temps de cohérence constantes.

LUMLEY (1962) a montré qu'en turbulence homogène isotrope stationnaire, les écarts types des fluctuations des champs de vitesse lagrangien et eulérien étaient égaux. Nous écrivons donc:

$$\sigma_{w_L} = \sigma_{w_E} = \sigma_w$$

où  $\sigma_{w_E}$  est l'écart type des fluctuations du champ de vitesse eulérien suivant la direction ( $z'z$ ).

Afin de discrétiser en temps, posons, pour toute fonction  $f$  du temps,  $f_n = f(n\Delta t)$ . Les hypothèses (h1)-(h4) deviennent sous forme discrète:

- (h1').  $w_n$  est une fonction aléatoire gaussienne;
- (h2').  $\langle w_n^2 \rangle = \sigma_w^2$  est constante;

$$- (h3'). T_L = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\langle w_n w_{n+p} \rangle}{\sigma_w^2} \Delta t \text{ est constante;}$$

$$- (h4'). \frac{\langle w_n w_{n+1} \rangle}{\sigma_w^2} \sim 1 - \frac{\Delta t^2}{T_\lambda^2} + o(\Delta t^2).$$

En retenant dans un premier temps que les trois premières hypothèses (h1'), (h2') et (h3'), il vient les propositions  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  suivantes:

$\alpha$  • En rappelant que l'on considère ici un processus markovien (TAYLOR (1921)), on écrit  $w_{n+1}$  sous la forme d'une somme d'une partie linéaire déterministe  $aw_n$  (qui conservera la gaussiannité) et d'un processus de WIENER  $b\chi_n$  où les  $\chi_n$  sont des variables aléatoires suivant la loi normale, non corrélées entre elles (l'effet de mémoire a déjà été introduit dans la partie déterministe).

On a ainsi:

$$w_{n+1} = aw_n + b\chi_{n+1} \quad (2.2)$$

avec

$$\langle \chi_p \chi_q \rangle = \delta_{pq}$$

Il reste à déterminer  $a$  et  $b$ .

$\beta$  • En multipliant (2.2) par  $w_{n+p}$  et en moyennant cette nouvelle égalité, on obtient:

$$\langle w_{n+1} w_{n+p} \rangle = a \langle w_n w_{n+p} \rangle = \dots = a^{p+1} \langle w_n^2 \rangle,$$

soit, en utilisant (h2'):

$$\langle w_n w_{n+p} \rangle = a^p \sigma_w^2.$$

En sommant ces termes sur  $p$ , on trouve compte tenu de (h3') la valeur de  $a$ :

$$a = 1 - \frac{\Delta t}{T_L}.$$

$\gamma$  • Si maintenant on élève (2.2) au carré et l'on moyenne cette nouvelle expression, on obtient:

$$b^2 = (1 - a^2) \sigma_w^2,$$

soit:

$$b = \sigma_w \sqrt{\frac{\Delta t}{T_L} \left( 2 - \frac{\Delta t}{T_L} \right)}$$

La formulation discrète du système final d'équations donnant la position de la particule s'écrit alors:

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + U \Delta t \\ z_{n+1} = z_n + \frac{(w_n + w_{n+1})}{2} \Delta t \\ w_{n+1} = \left( 1 - \frac{\Delta t}{T_L} \right) w_n + \sigma_w \sqrt{\frac{\Delta t}{T_L} \left( 2 - \frac{\Delta t}{T_L} \right)} \chi_{n+1} \end{cases}$$

et en faisant tendre  $\Delta t$  vers 0, on trouve l'équivalence continue de ce modèle discret, ce qui est une vérification de la consistance du schéma discret par rapport au problème continu:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = U \\ \frac{dz}{dt} = w \\ \frac{dw}{dt} = -\frac{w}{T_L} + \sigma_w \sqrt{\frac{2}{T_L}} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\chi_{n+1}}{\sqrt{\Delta t}} \end{cases}$$

On trouve dans la littérature (Gence (1990)) l'affirmation que

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

est une variable aléatoire suivant une loi gaussienne centrée et telle que

$$\xi(t)\xi(t') = \delta(t - t')$$

au sens des distributions. L'évolution de la vitesse est alors donnée par l'équation:

$$\frac{dw}{dt} = -\frac{w}{T_L} + \sigma_w \sqrt{\frac{2}{T_L}} \xi(t) \quad (2.3)$$

On trouve bien, moyennant les hypothèses (h1'), (h2') et (h3'), que l'évolution de la vitesse lagrangienne est régie par une équation de LANGEVIN.

En multipliant (2.3) par  $w(t + \tau)$ , en moyennant et en intégrant par rapport au temps, on trouve que la fonction de corrélation temporelle de la vitesse s'écrit:

$$R_w(\tau) = e^{-|\tau|/T_L} \quad (2.4)$$

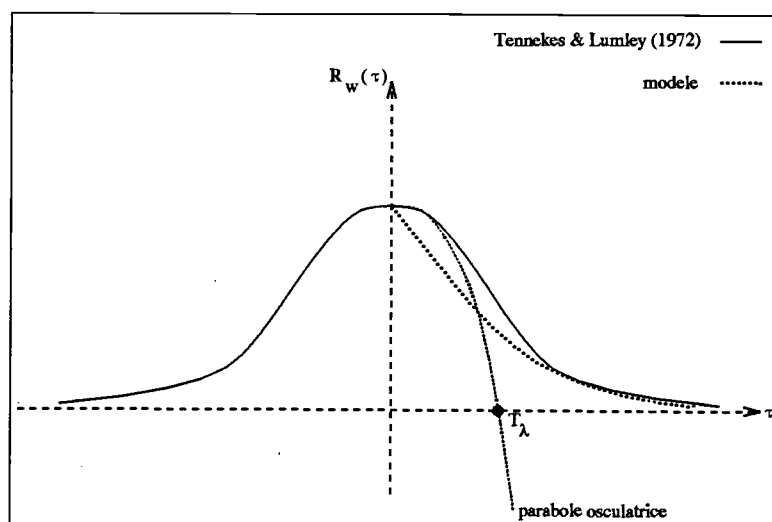


FIG. 2.3 - Forme générale de la corrélation temporelle en un point de la vitesse en turbulence homogène isotrope stationnaire

On voit alors sur la représentation graphique (2.3) que le comportement pour  $\tau$  petit est erroné, ce qui s'explique par le fait que l'hypothèse (h4'), qui relève des petites échelles de temps donc des petites structures, n'a pas été retenue.

Le spectre lagrangien de la corrélation s'obtient de la manière suivante:

$$\begin{aligned} F(\Omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle w(t)w(t+\tau) \rangle e^{-i\Omega\tau} d\tau \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_w^2 R_w(\tau) e^{-i\Omega\tau} d\tau \\ &= \frac{2T_L\sigma_w^2}{1+T_L^2\Omega^2} \end{aligned}$$

avec

$$\Omega = 2\pi\mathcal{N}$$

où  $\mathcal{N}$  est la fréquence.

La courbe  $\log(F(\Omega)) = f(\log \Omega)$  (figure (2.4)) présente donc une asymptote de pente  $(-2)$ , caractéristique de la zone inertielle (YEUNG & POPE (1989)). Le modèle ne laisse donc apparaître dans ce spectre que la zone inertielle, alors qu'une seconde coupure, caractérisant la zone de dissipation moléculaire, doit apparaître lorsque  $\Omega$  devient grand.

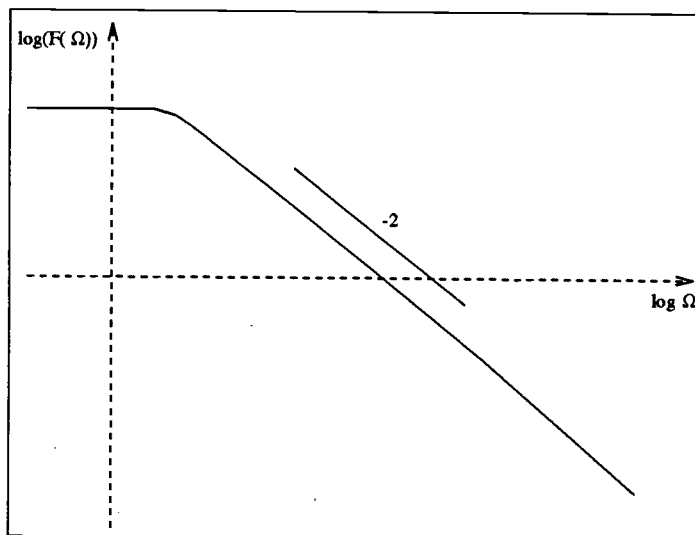


FIG. 2.4 - Spectre lagrangien de la corrélation de vitesse du modèle stochastique à une particule et une échelle de temps en turbulence homogène isotrope stationnaire

Si l'on souhaite construire un modèle tenant compte des effets visqueux, il convient d'étendre le précédent en retenant également l'hypothèse (h4'); on suppose donc ici les quatre hypothèses suivantes vérifiées:

- (h1').  $w_n$  est une fonction aléatoire gaussienne;
- (h2').  $\langle w_n^2 \rangle = \sigma_w^2$  est constante;
- (h3').  $T_L = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\langle w_n w_{n+p} \rangle}{\sigma_w^2} \Delta t$  est constante;

$$- (h4') \cdot \frac{\langle w_n w_{n+1} \rangle}{\sigma_w^2} \sim 1 - \frac{\Delta t^2}{T_\lambda^2} + o(\Delta t^2).$$

on élargit la formulation de  $w_{n+1}$  en écrivant

$$w_{n+1} = a_2 w_n + b_2 w_{n-1} + c_2 \chi_{n+1} \quad (2.5)$$

où les  $\chi_n$  seront des variables aléatoires suivant la loi normale et non corrélées entre elles. Il est clair que l'équation continue que nous allons obtenir ne sera pas une équation de LANGEVIN classique. Le processus  $(z, w)$  ne sera plus markovien, mais  $(z, w, A)$ , avec  $A$  l'accélération de la particule, le sera.

Le raisonnement menant à la construction de ce nouveau modèle est semblable à celui suivi pour obtenir le modèle à une particule et une échelle de temps (RAYNAL (1991)):

$\alpha$  • En multipliant (2.5) par  $w_n$  et en moyennant, on obtient:

$$\langle w_n w_{n+1} \rangle = a_2 \langle w_n^2 \rangle + b_2 \langle w_{n-1} w_n \rangle$$

De même:

$$\begin{cases} \langle w_n w_{n+2} \rangle = a_2 \langle w_n w_{n+1} \rangle + b_2 \langle w_n^2 \rangle \\ \dots \\ \langle w_n w_{n+p} \rangle = a_2 \langle w_n w_{n+p-1} \rangle + b_2 \langle w_n w_{n+p-2} \rangle \end{cases}$$

soit en sommant ces termes pour  $p$  variant de 1 à l'infini, et en posant

$$S_\infty = \sum_{p=0}^{\infty} \langle w_n w_{n+p} \rangle$$

on trouve:

$$S_\infty - \langle w_n w_{n+1} \rangle - \langle w_n^2 \rangle = a_2 (S_\infty - \langle w_n^2 \rangle) + b_2 S_\infty$$

Compte tenu de (h2') et (h4'), cette expression devient au second ordre en  $\frac{\Delta t}{T_\lambda}$ :

$$S_\infty - \sigma_w^2 \left(1 - \frac{\Delta t^2}{T_\lambda^2}\right) - \sigma_w^2 = a_2 (S_\infty - \sigma_w^2) + b_2 S_\infty$$

soit

$$a_2 \left(1 - \frac{\sigma_w^2}{S_\infty}\right) + b_2 = 1 - \frac{\sigma_w^2}{S_\infty} \left(2 - \frac{\Delta t^2}{T_\lambda^2}\right) \quad (2.6)$$

Or, (h3') permet d'écrire  $S_\infty$  suivant la formulation:

$$S_\infty = \sigma_w^2 \frac{T_L}{\Delta t}$$

En reportant cette expression de  $S_\infty$  dans (2.6), on obtient la relation:

$$a_2 \left(1 - \frac{\Delta t}{T_L}\right) + b_2 = 1 - \frac{\Delta t}{T_L} \left(2 - \frac{\Delta t^2}{T_\lambda^2}\right) \quad (2.7)$$

$\beta$  • D'autre part, élever (2.5) au carré et moyennner donne au second ordre en  $\frac{\Delta t}{T_\lambda}$ , compte tenu des hypothèses (h2') et (h4'):

$$a_2^2 \sigma_w^2 + b_2^2 \sigma_w^2 + c_2^2 + 2a_2 b_2 \left(1 - \frac{\Delta t^2}{T_\lambda^2}\right) \sigma_w^2 = \sigma_w^2 \quad (2.8)$$

$\gamma$  • Enfin, en remarquant que

$$\langle w_n w_{n+1} \rangle = a_2 \langle w_n^2 \rangle + b_2 \langle w_{n-1} w_n \rangle$$

peut s'écrire au second ordre en  $\frac{\Delta t}{T_\lambda}$ , moyennant (h2') et (h4'),

$$\sigma_w^2 \left( 1 - \frac{\Delta t^2}{T_\lambda^2} \right) = a_2 \sigma_w^2 + b_2 \sigma_w^2 \left( 1 - \frac{\Delta t^2}{T_\lambda^2} \right)$$

on obtient une troisième équation:

$$(1 - b_2) \left( 1 - \frac{\Delta t^2}{T_\lambda^2} \right) = a_2 \quad (2.9)$$

La résolution du système d'équations formé par (2.7), (2.8) et (2.9) conduit aux expressions suivantes:

$$\begin{cases} a_2 = 2 - 2\frac{T_L}{T_\lambda^2}\Delta t + \frac{2T_L^2 - T_\lambda^2}{T_\lambda^4}\Delta t^2 \\ b_2 = -1 + 2\frac{T_L}{T_\lambda^2}\Delta t - \frac{2T_L^2 + T_\lambda^2}{T_\lambda^4}\Delta t^2 \\ c_2 = \frac{2}{T_\lambda^2}\sigma_w\sqrt{2T_L}\Delta t^{3/2} \end{cases}$$

Le schéma discret donnant  $w_{n+1}$  s'écrit finalement:

$$\begin{aligned} w_{n+1} = & \left( 2 - 2\frac{T_L}{T_\lambda^2}\Delta t + \frac{2T_L^2 - T_\lambda^2}{T_\lambda^4}\Delta t^2 \right) w_n \\ & + \left( -1 + 2\frac{T_L}{T_\lambda^2}\Delta t - \frac{2T_L^2 + T_\lambda^2}{T_\lambda^4}\Delta t^2 \right) w_{n-1} \\ & + \left( \frac{2}{T_\lambda^2}\sigma_w\sqrt{2T_L}\Delta t^{3/2} \right) \chi_{n+1} \end{aligned}$$

En faisant tendre  $\Delta t$  vers 0, on trouve la formulation continue<sup>1</sup>:

$$T_L \frac{d^2 w}{dt^2} = 2\frac{T_L^2}{T_\lambda^2} \left( -\frac{dw}{dt} - \frac{w}{T_L} + \sigma_w \sqrt{\frac{2}{T_L}} \xi(t) \right) \quad (2.10)$$

Pour calculer la fonction de corrélation temporelle de la vitesse, on multiplie (2.10) par  $w(t')$ :

$$T_L \frac{d^2 (w(t)w(t'))}{dt^2} = 2\frac{T_L^2}{T_\lambda^2} \left( -\frac{d(w(t)w(t'))}{dt} - \frac{w(t)w(t')}{T_L} + \sigma_w \sqrt{\frac{2}{T_L}} w(t')\xi(t) \right)$$

1. Avec l'hypothèse  $T_\lambda = Re_L^{-1/4} T_L$  (CORRSIN (1963)), cette équation d'évolution peut encore s'écrire:

$$\frac{d^2 w}{dt^2} = 2\frac{Re_L^{1/2}}{T_L} \left( -\frac{dw}{dt} - \frac{w}{T_L} + \sigma_w \sqrt{\frac{2}{T_L}} \xi(t) \right)$$

Pour  $Re_L$  infini, l'accélération ne pouvant pas être infinie, il faut que l'expression entre parenthèses au second membre soit nulle; la vitesse vérifiera alors l'équation de LANGEVIN du modèle à une échelle de temps précédemment établi.

En posant  $t = t' + \tau$  et en effectuant la moyenne d'ensemble de cette nouvelle expression, apparaît l'équation d'évolution de  $R_w(\tau)$ :

$$T_L \frac{d^2 R_w}{d\tau^2} + 2 \frac{T_L^2}{T_\lambda^2} \frac{dR_w}{d\tau} + 2 \frac{T_L}{T_\lambda^2} R_w = 0 \quad (2.11)$$

La résolution de (2.11) mène à une expression de  $R_w$  de la forme:

$$R_w(\tau) = A_{R_w} e^{r_1|\tau|} + B_{R_w} e^{r_2|\tau|}$$

avec  $A_{R_w}$  et  $B_{R_w}$  constantes, et  $r_1$  et  $r_2$  racines de l'équation:

$$T_L r^2 + 2 \frac{T_L^2}{T_\lambda^2} r + 2 \frac{T_L}{T_\lambda^2} = 0$$

Les conditions initiales  $R_w(0) = 1$  et  $R_w'(0) = 0$  conduisent à la solution:

$$R_w(\tau) = -\frac{T_L - \sqrt{T_L^2 - 2T_\lambda^2}}{2\sqrt{T_L^2 - 2T_\lambda^2}} e^{-\frac{T_L + \sqrt{T_L^2 - 2T_\lambda^2}}{T_\lambda^2}|\tau|} + \frac{T_L + \sqrt{T_L^2 - 2T_\lambda^2}}{2\sqrt{T_L^2 - 2T_\lambda^2}} e^{-\frac{T_L - \sqrt{T_L^2 - 2T_\lambda^2}}{T_\lambda^2}|\tau|}$$

On en déduit le spectre lagrangien associé:

$$\begin{aligned} F(\Omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle w(t)w(t+\tau) \rangle e^{-i\Omega\tau} d\tau \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_w^2 R_w(\tau) e^{-i\Omega\tau} d\tau \\ &= \frac{2T_L \sigma_w^2}{1 + (T_L^2 - T_\lambda^2)\Omega^2 + \frac{T_\lambda^4}{4}\Omega^4} \end{aligned}$$

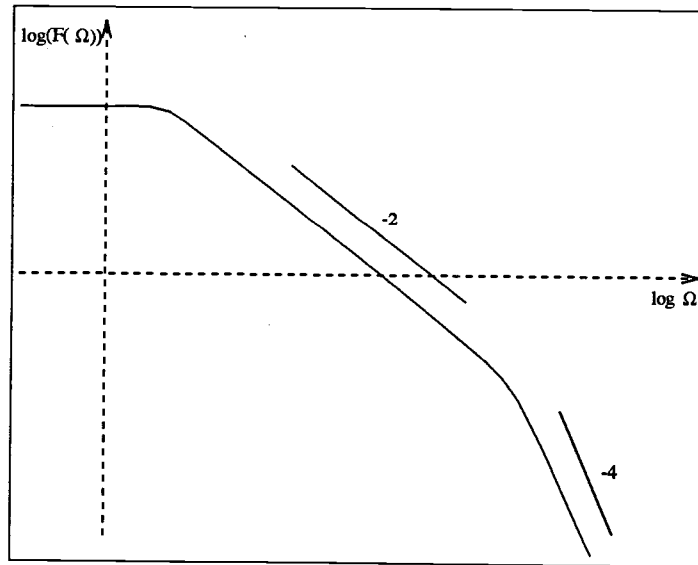


FIG. 2.5 - Spectre lagrangien de la corrélation de vitesse du modèle stochastique à une particule et deux échelles de temps

Le spectre lagrangien (figure (2.5)) présente maintenant deux ruptures de pente: une décroissance de pente  $(-2)$  caractérisant la zone inertielle, suivie d'une décroissance de pente  $(-4)$  caractérisant la zone où la dissipation visqueuse est prédominante. SAWFORD (1991) précise néanmoins que cette pente semble être physiquement fausse.

Le modèle à deux échelles de temps sera donc mieux adapté que le modèle à une échelle de temps pour représenter la dispersion à faible nombre de REYNOLDS. Pour des mesures très proches de la source, le temps écoulé après le rejet étant très petit fera que le modèle à deux échelles de temps sera également privilégié. Sa faiblesse sera sa lenteur au niveau des simulations numériques, puisque le pas en temps devra être petit devant  $T_\lambda$ .

Nous allons voir dans l'approche continue (paragraphe 2.2.3) un second modèle à deux échelles de temps légèrement différent, qui reproduira également un spectre lagrangien présentant deux coupures de pente  $(-2)$  et  $(-4)$  respectivement.

Le paragraphe suivant établit préalablement le lien entre les approches lagrangienne et eulérienne pour le modèle à une particule et une échelle de temps. C'est en outre un passage obligé pour pouvoir exposer le modèle continu de THOMSON (1987).

## 2.2.2 Lien entre les approches lagrangienne et eulérienne: équation de Fokker-Planck

Compte tenu de l'hypothèse d'isotropie de la turbulence faite dans ce chapitre, on se place toujours dans le cas de la dispersion turbulente monodimensionnelle suivant la direction verticale.

Afin de vérifier que le modèle stochastique lagrangien à une particule et une échelle de temps est bien cohérent avec l'approche eulérienne classique donnant l'équation d'évolution de la concentration moyenne, il est intéressant de s'attarder sur le passage de l'un à l'autre. Pour ce faire, il faut trouver une équation d'évolution de la d.d.p. lagrangienne à l'aide des informations que nous possédons sur la variable aléatoire modélisant la position de la particule dans l'espace des phases. Ceci nous permettra de remonter à la fonction de densité de distribution  $g_L$  des particules marquées dans cet espace, et finalement à la concentration moyenne, reliée à  $g_L$  par

$$\langle cw^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} w^n g_L(z, w; t) dw$$

quel que soit  $n$  entier naturel.

Soient

$$\vec{\mathcal{X}} = (z, w)$$

le vecteur position instantanée de la particule marquée dans l'espace des phases, et  $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$  la d.d.p. lagrangienne associée à l'événement "La particule se trouve en  $\vec{\mathcal{X}}$  à l'instant  $t$  sachant qu'elle était initialement en  $\vec{\mathcal{X}}_0$ ".

Afin d'obtenir l'équation d'évolution de  $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$ , on envisage la statistique relative à la transition de l'état lagrangien à l'instant  $t$  à celui à l'instant  $t + \tau$ , où  $\tau$  est un intervalle de temps petit que l'on fera tendre vers 0. Exprimons alors  $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t + \tau | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$  en fonction de  $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$ :

$$p_L(\vec{\mathcal{X}}; t + \tau | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) = \int \int_{-\infty}^{+\infty} p_L(\vec{\mathcal{X}}'; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \Pi(\vec{\mathcal{X}}; t + \tau | \vec{\mathcal{X}}'; t) d\vec{\mathcal{X}}' \quad (2.12)$$

$\Pi(\vec{\mathcal{X}}; t + \tau | \vec{\mathcal{X}}'; t)$  est la d.d.p. relative à l'événement "La particule issue de  $\vec{\mathcal{X}}_0$  à  $t_0$  est en  $\vec{\mathcal{X}}$  à  $t + \tau$  sachant qu'elle se trouvait en  $\vec{\mathcal{X}}'$  à l'instant  $t$ "; elle est appelée d.d.p. de transition.

Soit la fonction caractéristique de transition associée à  $\Pi$ :

$$\Theta(\vec{K}; t + \tau | \vec{X}'; t) = \int \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{K} \cdot (\vec{X} - \vec{X}')} \Pi(\vec{X}; t + \tau | \vec{X}'; t) d\vec{X} \quad (2.13)$$

où  $i^2 = -1$  et

$$\vec{K} = (\alpha, \beta).$$

Ses dérivées partielles successives en  $\vec{K} = \vec{0}$  s'écrivent:

$$\frac{\partial^n \Theta}{\partial \alpha^j \partial \beta^{(n-j)}} \Big|_{\vec{K}=\vec{0}} = i^n \langle (\xi_z - z')^j (\xi_w - w')^{(n-j)} | \vec{X}'; t \rangle = i^n M_{j(n-j)}(\vec{X}', t, \tau) \quad (2.14)$$

$\xi_z$  et  $\xi_w$  sont les variables aléatoires associées à  $z$  et  $w$  respectivement. On reconnaît dans le membre de droite les moments  $M_{j(n-j)}$  d'ordre  $n$  relatifs au passage de l'état lagrangien  $\vec{X}'$  en  $t$  à l'état  $\vec{X}$  en  $(t + \tau)$ . Le développement limité de  $\Theta$  au voisinage de  $\vec{K} = \vec{0}$  s'écrit:

$$\begin{aligned} \Theta(\vec{K}; t + \tau | \vec{X}'; t) &= 1 + \alpha \frac{\partial \Theta}{\partial \alpha} \Big|_{\vec{K}=\vec{0}} + \beta \frac{\partial \Theta}{\partial \beta} \Big|_{\vec{K}=\vec{0}} \\ &+ \frac{1}{2} \left( \alpha^2 \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \alpha^2} \Big|_{\vec{K}=\vec{0}} + 2\alpha\beta \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \alpha \partial \beta} \Big|_{\vec{K}=\vec{0}} + \beta^2 \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \beta^2} \Big|_{\vec{K}=\vec{0}} \right) + \dots \\ &+ \frac{1}{n!} \sum_{j=0}^n C_n^j \alpha^j \beta^{(n-j)} \frac{\partial^n \Theta}{\partial \alpha^j \partial \beta^{(n-j)}} \Big|_{\vec{K}=\vec{0}} + \dots \end{aligned}$$

où

$$C_n^j = \frac{n!}{j!(n-j)!}$$

et s'exprime moyennant (2.14) de la façon suivante:

$$\begin{aligned} \Theta(\vec{K}; t + \tau | \vec{X}'; t) &= 1 + i\alpha M_{10} + i\beta M_{01} - \frac{1}{2}(\alpha^2 M_{20} + 2\alpha\beta M_{11} + \beta^2 M_{02}) + \dots \\ &+ \frac{i^n}{n!} \sum_{j=0}^n C_n^j \alpha^j \beta^{(n-j)} M_{j(n-j)} + \dots \end{aligned} \quad (2.15)$$

Or d'après (2.13), en effectuant la transformée de Fourier inverse,  $\Pi$  peut s'écrire:

$$\Pi(\vec{X}; t + \tau | \vec{X}'; t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\vec{K} \cdot (\vec{X} - \vec{X}')} \Theta(\vec{K}; t + \tau | \vec{X}'; t) d\vec{K} \quad (2.16)$$

soit, en reportant l'expression (2.15) de  $\Theta(\vec{K}; t + \tau | \vec{X}'; t)$  dans le second membre de (2.16):

$$\begin{aligned} \Pi(\vec{X}; t + \tau | \vec{X}'; t) &= \delta(\vec{X} - \vec{X}') - M_{10} \frac{\partial \delta(\vec{X} - \vec{X}')}{\partial z} - M_{01} \frac{\partial \delta(\vec{X} - \vec{X}')}{\partial w} \\ &+ \frac{1}{2} \left[ M_{20} \frac{\partial^2 \delta(\vec{X} - \vec{X}')}{\partial z^2} + 2M_{11} \frac{\partial^2 \delta(\vec{X} - \vec{X}')}{\partial z \partial w} \right. \\ &\left. + M_{02} \frac{\partial^2 \delta(\vec{X} - \vec{X}')}{\partial w^2} \right] + \dots \\ &+ \frac{1}{n!} \left[ \sum_{j=0}^n C_n^j M_{j(n-j)} \frac{\partial^n \delta(\vec{X} - \vec{X}')}{\partial z^j \partial w^{(n-j)}} \right] + \dots \end{aligned}$$

Enfin, d'après (2.12), on obtient:

$$\begin{aligned}
p_L(\vec{X}; t + \tau | \vec{X}_0; t_0) &= p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0) - \frac{\partial}{\partial z} (M_{10} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) - \frac{\partial}{\partial w} (M_{01} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \\
&+ \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} (M_{20} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) + 2 \frac{\partial^2}{\partial z \partial w} (M_{11} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \right. \\
&+ \left. \frac{\partial^2}{\partial w^2} (M_{02} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \right] + \dots \\
&+ \frac{1}{n!} \left[ \sum_{j=0}^n C_n^j \frac{\partial^n}{\partial z^j \partial w^{(n-j)}} (M_{j(n-j)} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \right] + \dots
\end{aligned}$$

Faisons alors l'hypothèse que les moments  $M_{j(n-j)}$  sont linéaires en  $\tau$ :

$$\frac{1}{n!} M_{j(n-j)}(\vec{X}, t, \tau) = B_{j(n-j)}(\vec{X}, t) \tau + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (2.17)$$

L'équation d'évolution de  $p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)$  devient alors, en prenant la limite lorsque  $\tau$  tend vers 0:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} (p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) &= - \frac{\partial}{\partial z} (B_{10} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) - \frac{\partial}{\partial w} (B_{01} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \\
&+ \left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} (B_{20} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) + 2 \frac{\partial^2}{\partial z \partial w} (B_{11} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \right. \\
&+ \left. \frac{\partial^2}{\partial w^2} (B_{02} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \right] + \dots \\
&+ \left[ \sum_{j=0}^n C_n^j \frac{\partial^n}{\partial z^j \partial w^{(n-j)}} (B_{j(n-j)} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \right] + \dots
\end{aligned}$$

Elle est appelée équation de KRAMER-MOYAL.

En outre, faire l'hypothèse que  $\vec{X}(t)$  est un processus de MARKOV de partie aléatoire suivant une loi gaussienne permet d'affirmer:

$$B_{j(n-j)}(\vec{X}, t) = 0 \quad \forall n \geq 3.$$

on en déduit l'équation d'évolution de  $p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)$ , appelée équation de FOKKER-PLANCK:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} (p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) &= - \frac{\partial}{\partial z} (B_{10} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) - \frac{\partial}{\partial w} (B_{01} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \\
&+ \left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} (B_{20} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) + 2 \frac{\partial^2}{\partial z \partial w} (B_{11} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \right. \\
&+ \left. \frac{\partial^2}{\partial w^2} (B_{02} p_L(\vec{X}; t | \vec{X}_0; t_0)) \right]
\end{aligned}$$

Or, d'après (2.17),

$$B_{j(n-j)} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \left( \frac{1}{n! \tau} M_{j(n-j)} \right) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \left( \frac{1}{n! \tau} \langle (\xi_z(t + \tau) - z(t))^j (\xi_w(t + \tau) - w(t))^{(n-j)} | \vec{X}; t \rangle \right)$$

Ici , partant de:

$$\begin{cases} dw = a dt + b d\zeta \\ dz = w dt \end{cases}$$

on écrit les variables aléatoires:

$$\begin{cases} \xi_w(t + \tau) = w(t) + a(t)\tau + b(t)\chi \\ \xi_z(t + \tau) = z(t) + \xi_w(t + \tau)\tau \end{cases}$$

où  $\chi$  est une variable aléatoire suivant une loi gaussienne centrée de variance  $\tau$ . Ce qui conduit à:

$$\begin{cases} B_{10} = w(t) \\ B_{01} = a(t) \\ B_{20} = 0 \\ B_{11} = 0 \\ B_{02} = b^2/2 \end{cases}$$

L'équation d'évolution de  $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$  est donc:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)) &= -\frac{\partial}{\partial z} (w p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)) - \frac{\partial}{\partial w} (a p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)) \\ &+ \frac{\partial^2}{\partial w^2} \left( \frac{b^2}{2} p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Elle porte le nom d'équation de FOKKER-PLANCK.

Or la fonction de densité de distribution  $g_L$  des particules marquées dans l'espace des phases est reliée à  $p_L$  (THOMSON (1987)) par:

$$g_L(\vec{\mathcal{X}}; t) = \int_{t_0=-\infty}^t \int_{z_0=-\infty}^{+\infty} \int_{w_0=-\infty}^{+\infty} p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \frac{g_E(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)}{\langle \rho(z_0; t_0) \rangle} \mathcal{S}(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0) d\vec{\mathcal{X}}_0 dt_0$$

avec  $\mathcal{S}(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$  la masse par unité de volume dans l'espace des phases et par unité de temps en  $(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$ ,  $\langle \rho(z_0; t_0) \rangle$  la moyenne d'ensemble de la masse volumique en  $(z_0; t_0)$  (constante pour les écoulements qui nous intéressent), et  $g_E(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$  la fonction de densité de distribution des particules fluides dans l'espace des phases en  $(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$ . La fonction  $g_E(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$  est telle que

$$\langle \rho w^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} w^n g_E(\vec{\mathcal{X}}; t) dw$$

quel que soit  $n$  entier.

En multipliant (2.18) par  $\frac{g_E(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)}{\langle \rho(z_0; t_0) \rangle} \mathcal{S}(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$  et en intégrant sur l'ensemble des conditions initiales jusqu'à l'instant  $t$ , on obtient:

$$\begin{aligned} \int_{t_0=-\infty}^t \frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_{z_0=-\infty}^{+\infty} \int_{w_0=-\infty}^{+\infty} p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \frac{g_E(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)}{\langle \rho(z_0; t_0) \rangle} \mathcal{S}(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0) d\vec{\mathcal{X}}_0 \right] dt_0 = \\ -\frac{\partial}{\partial z} (w g_L(\vec{\mathcal{X}}; t)) - \frac{\partial}{\partial w} (a g_L(\vec{\mathcal{X}}; t)) + \frac{\partial^2}{\partial w^2} \left( \frac{b^2}{2} g_L(\vec{\mathcal{X}}; t) \right) \end{aligned} \quad (2.19)$$

L'intégrale du membre de gauche peut s'écrire:

$$\begin{aligned} & \int_{t_0=-\infty}^t \frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_{z_0=-\infty}^{+\infty} \int_{w_0=-\infty}^{+\infty} p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \frac{g_E(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)}{\langle \rho(z_0; t_0) \rangle} \mathcal{S}(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0) d\vec{\mathcal{X}}_0 \right] dt = \\ & \frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_{t_0=-\infty}^t \int_{z_0=-\infty}^{+\infty} \int_{w_0=-\infty}^{+\infty} p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \frac{g_E(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)}{\langle \rho(z_0; t_0) \rangle} \mathcal{S}(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0) d\vec{\mathcal{X}}_0 dt_0 \right] \\ & - \int_{z_0=-\infty}^{+\infty} \int_{w_0=-\infty}^{+\infty} p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t) \frac{g_E(\vec{\mathcal{X}}_0; t)}{\langle \rho(z_0; t_0) \rangle} \mathcal{S}(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0) d\vec{\mathcal{X}}_0 \end{aligned}$$

Comme  $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t)$  est nulle partout sauf au point  $\vec{\mathcal{X}}$  de l'espace des phases, on a:

$$\int_{z_0=-\infty}^{+\infty} \int_{w_0=-\infty}^{+\infty} p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t) \frac{g_E(\vec{\mathcal{X}}_0; t)}{\langle \rho(z_0; t_0) \rangle} \mathcal{S}(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0) d\vec{\mathcal{X}}_0 = 0$$

L'équation (2.19) s'écrit finalement:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (g_L(\vec{\mathcal{X}}; t)) &= -\frac{\partial}{\partial z} (w g_L(\vec{\mathcal{X}}; t)) - \frac{\partial}{\partial w} (a g_L(\vec{\mathcal{X}}; t)) \\ &\quad + \frac{\partial^2}{\partial w^2} \left( \frac{b^2}{2} g_L(\vec{\mathcal{X}}; t) \right) \end{aligned} \quad (2.20)$$

En comparant (2.18) et (2.20), on voit que la fonction de densité de distribution des particules fluides dans l'espace des phases vérifie également l'équation de FOKKER-PLANCK.

Or nous savons que

$$\langle c_A w^n \rangle = \int_{w=-\infty}^{+\infty} w^n g_L(\vec{\mathcal{X}}; t) dw$$

où  $c_A$  est la concentration en particules marquées. En intégrant (2.20) en  $w$  sur l'intervalle ouvert  $] -\infty, +\infty[$ , on obtient:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle c_A \rangle = -\frac{\partial}{\partial z} \langle w c_A \rangle - \left[ a g_L(\vec{\mathcal{X}}; t) + \frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{b^2}{2} g_L(\vec{\mathcal{X}}; t) \right) \right]_{w=-\infty}^{+\infty}$$

Nous faisons alors les mêmes hypothèses que THOMSON (1987) pour la fonction de densité de distribution des particules marquées. Ainsi, soit une expression où intervient  $g_L(\vec{\mathcal{X}}; t)$ , ou une de ses dérivées, multipliée par des fonctions linéaires de  $a$ ,  $b$ ,  $w$  ou de leurs dérivées; on supposera alors que  $g_L(\vec{\mathcal{X}}; t)$  tend vers 0 suffisamment vite lorsque  $|w|$  tend vers l'infini pour que les intégrales sur  $w$  convergent. Par conséquent:

$$\left[ a g_L(\vec{\mathcal{X}}; t) + \frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{b^2}{2} g_L(\vec{\mathcal{X}}; t) \right) \right]_{w=-\infty}^{+\infty} = 0$$

et on obtient l'équation d'évolution de la concentration moyenne donnée par le modèle:

$$\frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} = -\frac{\partial \langle w c_A \rangle}{\partial z}$$

On sait par ailleurs que l'équation exacte d'évolution de la concentration en une dimension s'écrit:

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} = -\frac{\partial \langle w c \rangle}{\partial z} - \kappa \frac{\partial^2 \langle c \rangle}{\partial z^2}$$

Il apparaît donc ainsi que le modèle stochastique à une particule conduit à une équation d'évolution de la moyenne d'ensemble de la concentration  $c_A$  consistante avec l'équation d'évolution exacte de la concentration moyenne au terme de diffusivité moléculaire près.

### 2.2.3 Approche continue en turbulence homogène isotrope

Elle est principalement due à THOMSON (1987) qui, souhaitant vérifier la cohérence des différents modèles stochastiques présentés en turbulence inhomogène, obtient un critère rigoureux de sélection pour les modèles stochastiques.

Le travail de THOMSON sera exposé en détail dans la partie traitant des modèles stochastiques en turbulence inhomogène; on se contente ici des résultats directement utilisables en turbulence homogène isotrope.

On part d'une équation différentielle stochastique sur la vitesse

$$dw = a(z, w, t)dt + b(z, w, t)d\zeta \quad (2.21)$$

où  $d\zeta$  est une incrémentation gaussienne centrée de variance  $dt$ .

Le critère de mélange parfait, à savoir qu'une espèce  $A$  mélangée de façon homogène à un instant doit le rester, permet d'affirmer que la fonction de densité de distribution des particules marquées dans l'espace des phases  $g_L(\vec{\mathcal{X}}; t)$  et la fonction de densité de distribution des particules fluides  $g_E(\vec{\mathcal{X}}; t)$  vérifient la même équation d'évolution (l'équation de FOKKER-PLANCK d'après le paragraphe qui précède). L'évolution de  $g_E(\vec{\mathcal{X}}; t)$  sera donc régie par:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (g_E(\vec{\mathcal{X}}; t)) &= -\frac{\partial}{\partial z} (wg_E(\vec{\mathcal{X}}; t)) - \frac{\partial}{\partial w} (ag_E(\vec{\mathcal{X}}; t)) \\ &\quad + \frac{\partial^2}{\partial w^2} \left( \frac{b^2}{2} g_E(\vec{\mathcal{X}}; t) \right) \end{aligned} \quad (2.22)$$

En outre, THOMSON montre que  $b$  doit vérifier

$$b^2 = C_0 \varepsilon \quad (2.23)$$

où  $C_0$  est la constante de KOLMOGOROV et  $\varepsilon$  la moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Cette égalité est nécessaire pour que le modèle soit cohérent avec la théorie de la zone inertielle développée par KOLMOGOROV. En effet, pour un intervalle de temps  $\tau$  tel que  $1/\tau$  soit une fréquence située dans la zone inertielle, la fonction de structure temporelle, dans le cas monodimensionnel, est égale à:

$$\begin{aligned} D(\tau) &= \langle (w(t+\tau) - w(t))^2 \rangle \\ &= C_0 \varepsilon \tau \end{aligned} \quad (2.24)$$

Or, (2.21) conduit à la fonction de structure relative au modèle

$$D^{\text{modèle}}(\tau) = b^2 \tau + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (2.25)$$

En identifiant (2.24) et (2.25), on trouve l'expression de  $b$  souhaitée.

Reporter (2.23) dans (2.22) permet alors de déduire  $a$  moyennant la connaissance de  $g_E$ :

$$a = \frac{1}{g_E} \frac{\partial \left( \frac{C_0}{2} \varepsilon g_E \right)}{\partial w} + \frac{\Phi}{g_E} \quad (2.26)$$

avec  $\Phi$  qui tend vers 0 lorsque  $|w| \rightarrow 0$  et vérifie:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial w} = -\frac{\partial g_E}{\partial t} - \frac{\partial (wg_E)}{\partial z} \quad (2.27)$$

L'intérêt de ce résultat est de pouvoir déterminer le modèle lagrangien à partir de grandeurs eulériennes, plus faciles à obtenir expérimentalement.

Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope stationnaire, la fonction de densité des particules fluides dans l'espace des phases s'écrit

$$g_E(z, w; t) = \frac{\rho_0}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \exp\left(-\frac{w^2}{2\sigma_w^2}\right)$$

avec  $\rho_0$  la masse volumique du fluide (constante dans notre étude).  $g_E(z, w; t)$  ne dépend donc ici ni de  $z$ , ni de  $t$ , ce qui implique moyennant (2.27):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial w} = 0$$

On prendra finalement

$$\Phi = 0$$

et on aura, d'après (2.26):

$$a = -\frac{C_0}{2} \frac{\varepsilon}{\sigma_w^2} w$$

Le système d'équations donnant la variable markovienne  $(z, w)$  sera donc:

$$\begin{cases} \frac{dz}{dt} = w \\ dw = -\frac{C_0}{2} \frac{\varepsilon}{\sigma_w^2} w dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \end{cases}$$

On retrouve bien l'équation de LANGEVIN pour la vitesse.

SAWFORD (1991), en utilisant les résultats des simulations numériques de YEUNG & POPE (1989), trouve que  $C_0$  doit être égale à 7, contredisant alors MONIN & YAGLOM (1975) qui proposent une valeur de 2.1. Mais une récente comparaison menée par DU et al. (1995) entre les courbes de dispersion verticale d'une source ponctuelle dans une turbulence de grille obtenues par le modèle à deux échelles de temps de SAWFORD (1991) (ci-dessous) et des mesures expérimentales conduit à préférer une valeur de  $3.0 \pm 0.5$ . Nous reviendrons sur le problème posé par cette "constante" car, si c'est l'unique paramètre du modèle stochastique à une particule et une échelle de temps, sa valeur exacte en est d'autant plus importante pour la justesse des résultats statistiques par simulations numériques.

On peut aussi s'interroger au sujet de l'influence sur ce modèle du caractère intermittent de la turbulence. BORGAS & SAWFORD (1994) proposent de remplacer l'équation stochastique d'évolution de la vitesse par un système de deux équations stochastiques portant sur la vitesse et le taux de dissipation instantané de l'énergie cinétique turbulente, ce dernier présentant dès lors un comportement statistique multifractal. Néanmoins, ces changements au niveau de la résolution du champ de vitesse ne perturbent pas sensiblement les résultats de dispersion.

Afin de prendre en compte les effets visqueux, SAWFORD (1991) propose de modéliser l'évolution de l'accélération lagrangienne  $A(z, t|z_0)$  en turbulence homogène isotrope stationnaire par l'équation stochastique suivante:

$$dA + \alpha_1 A dt + \alpha_2 \left( \int_0^t A(t') dt' \right) dt = \sqrt{2\alpha_1 \alpha_2 \sigma_w^2} d\zeta \quad (2.28)$$

où  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  sont deux constantes positives et  $d\zeta$  une incrémentation aléatoire gaussienne centrée de variance  $dt$ . Cette expression fut obtenue par PRIESTLEY (1981) en imposant à l'accélération lagrangienne  $A(z, t|z_0)$  d'être un processus asymptotiquement stationnaire (qui devient stationnaire quand  $t$  est suffisamment grand pour que toute condition initiale soit oubliée).

Pour obtenir la fonction de corrélation temporelle de la vitesse, multiplions (2.28) par  $w(t')$  et effectuons la moyenne d'ensemble de cette nouvelle égalité; ceci conduit à:

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle w(t)w(t') \rangle + \alpha_1 \frac{d}{dt}\langle w(t)w(t') \rangle + \alpha_2 \langle w(t)w(t') \rangle = 0 \quad (2.29)$$

Divisons (2.29) par  $\sigma_w^2$  et posons  $t = t' + \tau$ . On trouve alors l'équation d'évolution de la fonction de corrélation temporelle de la vitesse lagrangienne:

$$\frac{d^2}{d\tau^2}R_w(\tau) + \alpha_1 \frac{d}{d\tau}R_w(\tau) + \alpha_2 R_w(\tau) = 0$$

On en déduit la fonction de corrélation de la vitesse:

$$R_w(\tau) = \frac{\beta_2 \exp(\beta_1|\tau|) - \beta_1 \exp(\beta_2|\tau|)}{\beta_2 - \beta_1} \quad (2.30)$$

avec  $\beta_1$  et  $\beta_2$  racines de l'équation du second degré

$$\beta_0^2 + \alpha_1 \beta_0 + \alpha_2 = 0 \quad (2.31)$$

On va alors exprimer  $\beta_1$  et  $\beta_2$  en fonction de grandeurs statistiques de l'écoulement. On aura alors l'expression de  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  (et l'équation d'évolution de  $A(z, t|z_0)$ ) puisque d'après (2.31), on a:

$$\begin{cases} \alpha_1 = -(\beta_1 + \beta_2) \\ \alpha_2 = \beta_1 \beta_2 \end{cases} \quad (2.32)$$

• En effectuant un développement limité au voisinage de 0 de (2.30), la fonction de corrélation temporelle de la vitesse s'écrit:

$$R_w(\tau) \simeq 1 - \beta_1 \beta_2 \frac{\tau^2}{2} \quad (2.33)$$

Or, en turbulence homogène isotrope stationnaire la fonction de structure temporelle s'écrit d'après la théorie de similitude de KOLMOGOROV:

$$D(\tau) = 2\sigma_w^2(1 - R_w(\tau)) \quad (2.34)$$

Le report de (2.33) dans (2.34) conduit à:

$$D(\tau) \simeq \beta_1 \beta_2 \sigma_w^2 \tau^2 \quad (2.35)$$

En outre, une étude dimensionnelle dans la zone dissipative donne (MONIN & YAGLOM (1975)):

$$D(\tau) = a_0 \varepsilon^{3/2} \nu^{-1/2} \tau^2 \quad |\tau| \ll -\frac{1}{\beta_1}, -\frac{1}{\beta_2} \quad (2.36)$$

où  $a_0$  est une nouvelle constante au même titre que  $C_0$ . En comparant (2.35) et (2.36), on trouve:

$$\beta_1 \beta_2 = \frac{a_0 \varepsilon^{3/2} \nu^{-1/2}}{\sigma_w^2} \quad (2.37)$$

• De même, en supposant

$$-\frac{1}{\beta_1} \ll |\tau| \ll -\frac{1}{\beta_2}$$

un développement limité de (2.30) dans cette région conduit à

$$R_w(\tau) \simeq 1 + \beta_1 |\tau| \quad (2.38)$$

En reportant (2.38) dans (2.34), on obtient

$$D(\tau) \simeq -2\beta_1 \sigma_w^2 |\tau| \quad (2.39)$$

La forme de  $D(\tau)$  donnée par la théorie de similitude de KOLMOGOROV dans la zone inertielle est

$$D(\tau) = C_0 \varepsilon |\tau| \quad (2.40)$$

où  $C_0$  est la constante de KOLMOGOROV.

La comparaison de (2.39) et (2.40) donne:

$$\beta_1 = -\frac{C_0}{2} \frac{\varepsilon}{\sigma_w^2} \quad (2.41)$$

(2.37) et (2.41) donnent finalement:

$$\begin{cases} \beta_1 = -\frac{C_0}{2} \frac{\varepsilon}{\sigma_w^2} = -T_L^{(\infty)-1} \\ \beta_2 = -\frac{2a_0}{C_0} \left(\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{1/2} = -\frac{2a_0}{C_0} t_\eta^{-1} \end{cases}$$

où

$$t_\eta = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2}$$

est l'échelle de temps de KOLMOGOROV. L'indice ( $\infty$ ) indique que ce n'est pas la véritable échelle intégrale mais celle qui serait obtenue pour une zone inertielle infinie. En reportant ces valeurs de  $\beta_1$  et  $\beta_2$  dans (2.32), on obtient le système d'égalités:

$$\begin{cases} \alpha_1 = T_L^{(\infty)-1} + \frac{2a_0}{C_0} t_\eta^{-1} \\ \alpha_2 = \frac{2a_0}{C_0} T_L^{(\infty)-1} t_\eta^{-1} \end{cases}$$

L'équation d'évolution de l'accélération (2.28) s'écrit alors:

$$T_L^{(\infty)} dA + (1 + Re^{*1/2}) Adt + \frac{Re^{*1/2}}{T_L^{(\infty)}} \left( \int_0^t A(t') dt' \right) dt = \sqrt{\frac{2\sigma_w^2}{T_L^{(\infty)}} Re^* (1 + Re^{*-1/2})} d\zeta(t) \quad (2.42)$$

avec

$$Re^* = \frac{16a_0^2}{C_0^4} \left(\frac{\sigma_w^4}{\varepsilon\nu}\right)$$

D'après les résultats des simulations numériques directes de YEUNG & POPE (1989),  $a_0$  n'est pas véritablement une constante. Ses variations peuvent être approchées par la formule analytique

$$a_0 = 0.13 Re_\lambda^{0.64}$$

où  $Re_\lambda$  est le nombre de REYNOLDS construit sur l'échelle eulérienne de longueur de TAYLOR

$$\lambda = (15\nu\sigma_w^2/\varepsilon)^{1/2}$$

(TENNEKES & LUMLEY (1972)). Pour les valeurs de  $Re_\lambda$  envisagées dans les simulations de YEUNG & POPE,  $a_0$  est de l'ordre de 2.

Le modèle de SAWFORD donne une fonction de corrélation temporelle de l'accélération égale à

$$R_A(\tau) = \frac{1}{(1 - Re^{*-1/2})} \left[ \exp\left(-\frac{Re^{*1/2}|\tau|}{T_L^{(\infty)}}\right) - Re^{*-1/2} \exp\left(-\frac{|\tau|}{T_L^{(\infty)}}\right) \right]$$

qui n'est pas analytique à l'origine, sa dérivée y étant infinie (ceci vient du fait que l'on modélise la dérivée de l'accélération par un bruit blanc). Etant donné qu'il n'existe aucun processus physique ayant une échelle de temps beaucoup plus petite que l'échelle de temps de KOLMOGOROV  $t_\eta$  et capable d'éliminer ce comportement non analytique, le modèle du second ordre n'est pas physiquement correct mais constitue un outil mathématique permettant d'introduire dans le modèle l'influence de la zone dissipative.

On notera que les plus petites structures interviennent dans le modèle de SAWFORD en retenant l'échelle de temps de KOLMOGOROV  $t_\eta$  comme échelle caractéristique, alors que RAYNAL (1991) propose un modèle avec l'échelle de temps de TAYLOR  $T_\lambda$  (paragraphe 2.2.1).

En résumé:

- Partant du fait que la variable  $(z, w)$ , position et vitesse d'une particule, est markovienne dès lors qu'on se trouve dans la zone inertielle du spectre de corrélation temporelle de la vitesse lagrangienne, l'approche théorique de THOMSON (1987) conduit à un modèle stochastique à une particule et une échelle de temps. Il régit l'évolution de  $(z, w)$  suivant le système d'équations différentielles stochastiques:

$$\begin{cases} \frac{dz}{dt} = w \\ dw = -\frac{C_0}{2} \frac{\varepsilon}{\sigma_w^2} w dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \end{cases}$$

- Afin de considérer l'ensemble du spectre, on fait l'hypothèse que la variable  $(z, w, A)$  est markovienne. SAWFORD (1991) montre que son évolution est donnée en turbulence homogène isotrope

stationnaire par le système d'équations différentielles stochastiques:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dz}{dt} = w \\ \frac{dw}{dt} = A \\ Re_L^{-1/2} dA = \frac{2}{T_L^{(\infty)}} \left[ -\frac{(a_0 + Re_L^{-1/2})}{2} A dt - \frac{a_0}{2T_L^{(\infty)}} \left( \int_0^t A(t') dt' \right) dt \right. \\ \left. + \frac{a_0 \sigma_w}{2} \sqrt{\frac{2}{T_L^{(\infty)}} Re_L^{-1/2} (1 + a_0^{-1} Re_L^{-1/2})} d\zeta(t) \right] \end{array} \right.$$

Néanmoins,  $(z, w, A)$  n'est pas rigoureusement une variable markovienne. Une conséquence soulignée par SAWFORD est que le spectre de corrélation temporelle de la vitesse associé à ce modèle présente une pente en  $(-4)$  alors que la décroissance semble, d'un point de vue physique, beaucoup plus rapide.

- Le modèle à deux échelles de temps sera mieux adapté aux écoulements à faible nombre de REYNOLDS et aux mesures proches de la source, mais nécessitera un temps de calcul beaucoup plus long, la fréquence égale à l'inverse du pas en temps devant se situer dans la zone dissipative du spectre de corrélation temporelle de la vitesse.

Différentes limitations théoriques du modèle à une particule en turbulence homogène isotrope étant dès lors éclairées, il reste à confronter les résultats d'une simulation de dispersion par ce modèle à des données expérimentales. On va en particulier traiter le cas d'une source linéique de température dans une turbulence de grille.

#### 2.2.4 Simulation numérique d'une source linéique transversale dans une turbulence de grille par un modèle stochastique lagrangien à une particule et une échelle de temps

On considère une source linéique de chaleur parallèle à l'axe  $(y'y)$  dans une turbulence de grille (STAPOUNTZIS et al. (1986)), la direction principale de l'écoulement étant l'axe  $(x'x)$ . Le schéma de l'expérience est représenté figure (2.2).

Nous avons a priori le choix entre la simulation d'un panache issu d'une source d'un constituant ou d'une source de chaleur. Comme nos calculs s'appuient sur des profils analytiques des moyennes d'ensemble de l'énergie cinétique de turbulence et de son taux de dissipation en fonction uniquement de l'abscisse, nous devons pouvoir affirmer que ces grandeurs étaient constantes dans tout plan orthogonal à l'axe  $(x'x)$ . La source devait perturber le moins possible l'écoulement. C'est pourquoi nous avons préféré la source de chaleur qui, dans de nombreuses expériences et notamment dans celle de STAPOUNTZIS et al. (1986), a un diamètre inférieur au centième de la maille de grille.

L'expérience est menée dans un canal à air de hauteur  $0.508\text{ m}$ , de largeur  $0.191\text{ m}$  et de longueur  $3.2\text{ m}$ . La vitesse moyenne de l'écoulement principal, la taille de la maille de la grille, le diamètre et

la position de la source valent respectivement:

$$\begin{cases} U &= 4.35 \text{ ms}^{-1} \\ M &= 2.54 \cdot 10^{-2} \text{ m} \\ d_s &= 1.52 \cdot 10^{-4} \text{ m} \\ x_0 &= 19.3M \end{cases}$$

Les profils analytiques approximant les mesures expérimentales des variances des vitesses longitudinale et verticale sont:

$$\begin{cases} \frac{\sigma_u^2}{U^2} &= 0.22 \left(\frac{x}{M}\right)^{-1.42} \\ \frac{\sigma_w^2}{U^2} &= 0.15 \left(\frac{x}{M}\right)^{-1.43} \end{cases} \quad (2.43)$$

En supposant la turbulence homogène isotrope, La moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente est évaluée par (COMTE-BELLOT (1982)):

$$\varepsilon = -\frac{3}{2} \frac{D\sigma_u^2}{Dt} = -\frac{3}{2} U \frac{d\sigma_u^2}{dx}$$

où  $\frac{D}{Dt}$  représente la dérivée particulière en suivant le mouvement moyen. Cette expression devient moyennant (2.43):

$$\varepsilon = 4.69 \cdot 10^{-1} \frac{U^3}{M} \left(\frac{x}{M}\right)^{-2.42}$$

Pour la simulation numérique,  $N_p$  particules sont relâchées en  $x_0$ , leurs cotes étant choisies aléatoirement suivant la loi uniforme sur le segment  $[-d_s/2, d_s/2]$  et leurs vitesses suivant une loi gaussienne centrée d'écart type  $\sigma_w(x_0)$ .

Le déplacement vertical de chaque particule va être régi par le modèle stochastique à une particule et une échelle de temps.

Pour chaque particule, le système d'équations d'évolution donnant la cote

$$\begin{cases} \frac{dz}{dt} &= w \\ dw &= -\frac{C_0}{2} \frac{\varepsilon}{\sigma_w^2} w dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \end{cases}$$

et l'équation donnant la position longitudinale

$$du = U dt$$

sont discrétisés de manière classique (DURBIN (1980a)) suivant le schéma:

$$\begin{cases} x^{n+1} &= x^n + U \Delta t \\ w^{n+1} &= \left(1 - \frac{C_0}{2} \frac{\varepsilon^n}{\sigma_w^{n2}} \Delta t\right) w^n + \sqrt{C_0 \varepsilon^n \Delta t} \chi^{n+1} \\ z^{n+1} &= z^n + \frac{w^n + w^{n+1}}{2} \Delta t \end{cases}$$

Les limitations physiques du modèle imposent

$$t_\eta \ll \Delta t$$

pour pouvoir modéliser la position  $(z, w)$  de la particule dans l'espace des phases par un processus markovien et

$$\Delta t \ll T_L$$

pour justifier la forme des coefficients de l'équation de LANGEVIN donnant l'évolution de la vitesse verticale.

L'évaluation de  $t_\eta$  et  $T_L$  données par

$$\begin{cases} t_\eta = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \\ T_L = \left(\frac{2\sigma_w^2}{C_0\varepsilon}\right) \end{cases}$$

conduit aux valeurs à la source

$$\begin{cases} t_\eta = 3.57 \cdot 10^{-3} \text{ s} \\ T_L = 5.26 \cdot 10^{-2} \text{ s} \end{cases}$$

et à l'extrémité du domaine d'étude, en  $x = 115 M$ ,

$$\begin{cases} t_\eta = 0.0309 \text{ s} \\ T_L = 0.307 \text{ s} \end{cases}$$

On voit donc immédiatement que l'on ne pourra pas respecter simultanément  $t_\eta \ll \Delta t$  et  $\Delta t \ll T_L$ . On choisit de respecter la deuxième inégalité en prenant:

$$\Delta t = 0.05 T_L$$

Ce pas de temps, relativement petit devant l'échelle intégrale du mouvement turbulent, justifie l'utilisation d'un schéma temporel du premier ordre.

La vitesse longitudinale étant la même pour toutes les particules, elles vont rester alignées suivant une droite parallèle à l'axe  $(z'z)$  pendant toute la durée de la simulation. Le calcul de la température moyenne va donc se faire en découpant cette droite à chaque pas de temps en segments de tailles identiques. Le nombre de particules comprises sur chaque segment sera proportionnel à la température moyenne.

La taille des segments de comptage est fixée égale à  $4d$ , et le nombre de particules  $N_p$  à 20000. Nous verrons plus loin l'effet de ces deux paramètres sur le profil de la concentration moyenne. Les particules sont suivies de  $x_0$  égal à  $19.3M$  à  $x_{max}$  valant  $115M$ .

La cote est souvent, dans la littérature spécialisée, divisée par la largeur du panache. Celle-ci est définie comme l'écart type  $\sigma_m$  de la gaussienne approchant le mieux le profil de la température moyenne. Il faut donc à ce niveau déterminer cette longueur. On l'a évaluée par la méthode des moindres carrés, c'est-à-dire par minimisation de la fonction

$$g(\sigma_m) = \sum_{i=1}^{N_p} \left( \frac{\langle \theta(z_i) \rangle}{\langle \theta(0) \rangle} - \exp\left(-\frac{z_i^2}{2\sigma_m^2}\right) \right)^2$$

où  $z_i$  est le milieu du  $i^{\text{ème}}$  segment, comme le proposent LI & BILGER (1995).

Comparons dans un premier temps l'évolution longitudinale de  $\sigma_m$  obtenue numériquement et expérimentalement. Cette évolution est tracée sur la figure (2.6) pour  $C_0$  égale à 2.1, 3 et 7. La première valeur est celle proposée par KOLMOGOROV, la seconde par DU et al. (1995) par comparaison à des mesures expérimentales, et la troisième par SAWFORD (1991) par comparaison aux simulations numériques directes de YEUNG & POPE (1989).

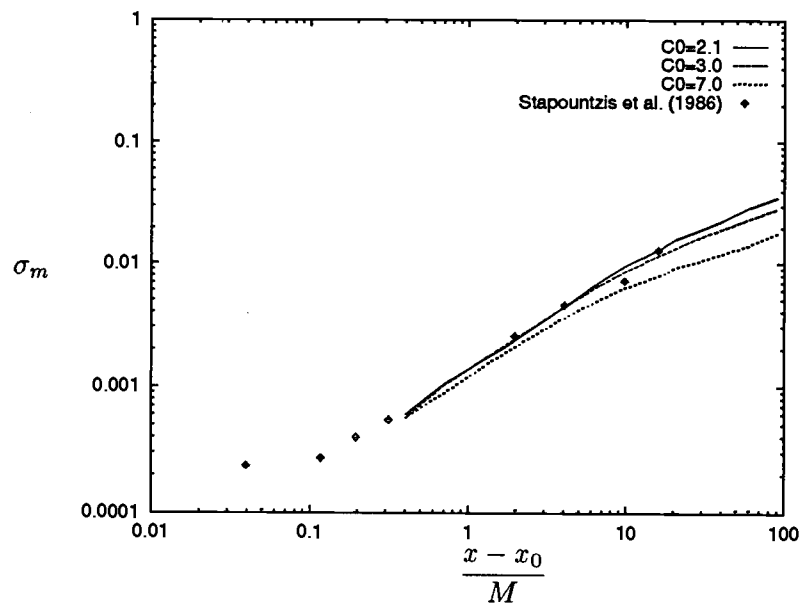


FIG. 2.6 - Largeur du panache pour différentes valeurs de  $C_0$ .

Il apparaît que la valeur la mieux appropriée est celle proposée par DU et al. (1995), soit  $C_0$  égale à 3 et que les simulations menées avec  $C_0$  égale à 7 donnent des résultats médiocres. On prendra donc dorénavant

$$C_0 = 3$$

Les profils verticaux de la température moyenne rapportée à sa valeur sur l'axe obtenus à  $9.7M$  de la source sont tracés sur la figure (2.7). Les résultats numériques et expérimentaux sont proches et voisins de la gaussienne, ce qui est en accord avec la théorie qui prévoit un développement gaussien

du panache.

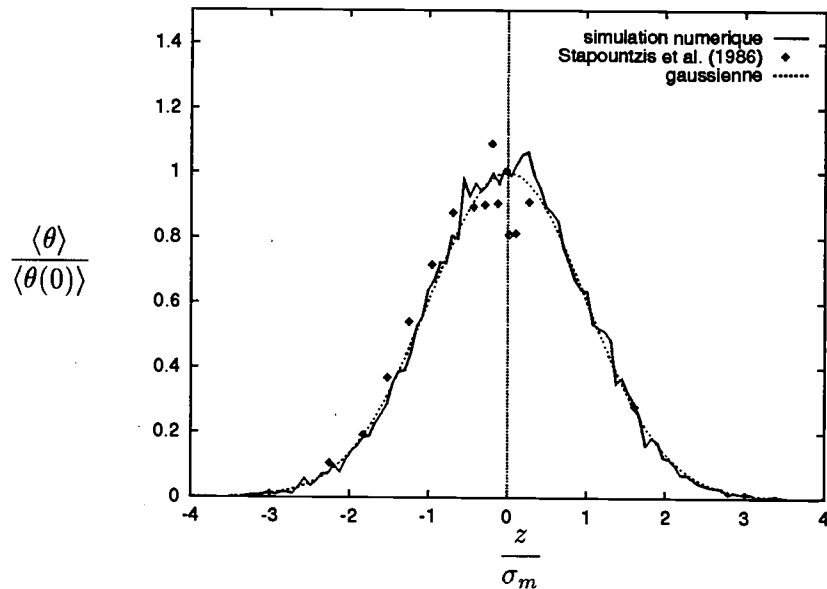


FIG. 2.7 - Profils de la température moyenne rapportée à sa valeur au centre du panache à  $x - x_0 = 9.7M$ .

D'autre part, on doit s'attendre à lisser les profils en augmentant le nombre de particules suivies, la précision statistique du modèle étant bien évidemment directement liée à  $N_p$ . Ceci est confirmé par la figure (2.8) sur laquelle le profil vertical  $\frac{\langle \theta \rangle}{\langle \theta(0) \rangle}$  à  $9.7M$  de la source réalisé avec  $N_p = 50000$  est plus régulier que celui obtenu avec 20000 particules. Néanmoins, 20000 particules suffisent pour obtenir des résultats acceptables.

Enfin, le deuxième et dernier paramètre de la modélisation est la taille des segments. On observe sur la figure (2.9), où sont reportés les profils  $\frac{\langle \theta \rangle}{\langle \theta(0) \rangle}$  pour  $x - x_0 = 9.7M$  avec des segments de longueurs  $4d$  et  $8d$ , que les profils sont d'autant plus lisses que cette taille augmente.

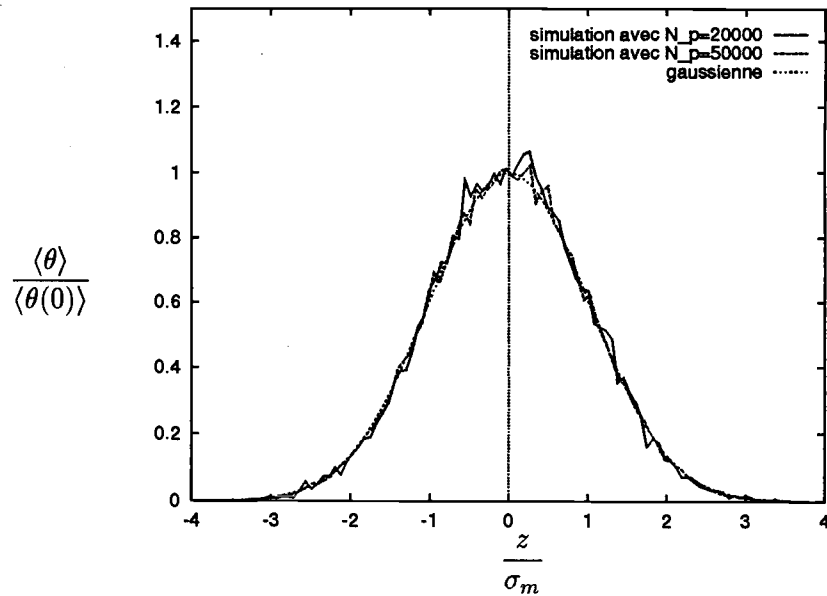


FIG. 2.8 - Profils de la température moyenne rapportée à sa valeur au centre du panache à  $x - x_0 = 9.7M$  pour différents nombres de particules suivies.

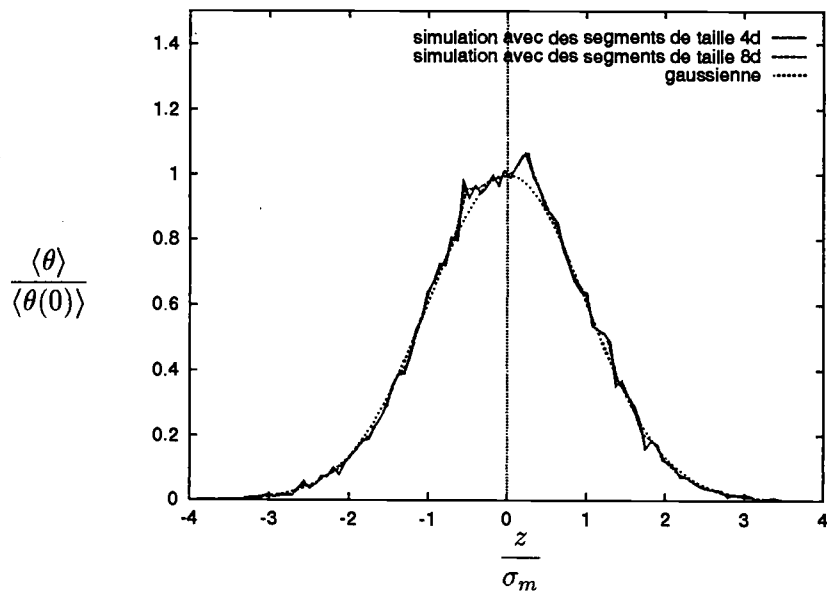


FIG. 2.9 - Profils de la température moyenne rapportée à sa valeur au centre du panache à  $x - x_0 = 9.7M$  pour des segments de comptage de différentes tailles.

Il est important de noter qu'augmenter le nombre de particules lisse les courbes en affinant la statistique alors qu'augmenter la taille des segments les lisse par perte d'information spatiale (la moyenne sera une grandeur d'autant moins locale que le segment sur lequel on la calcule sera conséquent). Il faudra veiller à conserver un compromis entre précision et temps de calcul. On choisira dans le cas

réactif de faire croître la taille des segments avec la largeur du panache.

En ce qui concerne le temps de calcul, le tableau suivant donne à titre indicatif les temps de calcul sur SPARC 5 du suivi de particules pour  $x$  variant de l'abscisse de la source ( $19.3M$ ) à  $115M$ , en fonction de  $C_0$  et du nombre de particules.

| $N_p \setminus C_0$ | 2.1   | 3     | 7      |
|---------------------|-------|-------|--------|
| 20000               | 2'20" | 3'15" | 7'30"  |
| 50000               | 5'40" | 8'10" | 18'50" |

A l'examen général des résultats, on peut donc conclure que le modèle stochastique à une particule et une échelle de temps donne une très bonne évaluation du déplacement des particules dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, moyennant un ajustement à 3 de la "constante" de KOLMOGOROV.

Bien que le modèle à deux particules ne soit pas utilisé directement dans ce travail, il est néanmoins présenté en détail dans le paragraphe suivant, notamment pour les résultats concernant l'approche lagrangienne qui furent obtenus par différents auteurs lors de son développement.

### 2.3 Modèle à deux particules

On a vu en introduction de ce chapitre que l'obtention des corrélations doubles de concentration à partir d'un modèle lagrangien nécessitait le suivi de paires de particules. Compte tenu de l'importance des corrélations de concentration en chimie (chapitre 4), le modèle à deux particules a fait l'objet de plusieurs études théoriques. Néanmoins, s'il a permis d'éclaircir quelques zones d'ombre des modèles lagrangiens, son application pratique reste très limitée.

Nous nous proposons de présenter ici les principaux fondements théoriques et résultats obtenus dans ces études, et de montrer pourquoi ce modèle n'est utilisable que dans des configurations d'écoulement très marginales.

C'est DURBIN (1980b) qui le premier présente ce type d'approche afin d'obtenir une évaluation correcte des fluctuations de concentration. Il postule une forme a priori du modèle à deux particules, semblable à celle du modèle à une particule de TAYLOR (1921), qui conduit à des propriétés statistiques connues de la dispersion relative de deux particules. Retenant l'hypothèse d'une turbulence homogène isotrope stationnaire, les modèles sont ici aussi développés en monodimensionnel.

GENCE (1990) reprend la formulation de ce modèle et aboutit aux mêmes conclusions de manière plus directe. Nous présentons donc ici sa démarche. Soit une paire de particules  $(P_1, P_2)$  ayant comme coordonnées dans l'espace des phases  $((z_1, w_1), (z_2, w_2))$ . Posons

$$\Delta = |z_1 - z_2|$$

On souhaite trouver une formulation qui, partant du modèle à une particule de TAYLOR (1921), impose aux particules  $P_1$  et  $P_2$  de se mouvoir indépendamment l'une de l'autre lorsque  $\Delta$  tend vers l'infini. En d'autres termes, les évolutions de  $w_1$  et  $w_2$  seront, pour  $\Delta$  suffisamment grande, indépendantes et régies par l'équation de LANGEVIN du modèle à une particule et une échelle de temps qui en turbulence homogène isotrope stationnaire s'écrit

$$dw = -\frac{C_0}{2} \frac{\varepsilon}{\sigma_w^2} w dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \quad (2.44)$$

mais les déplacements seront corrélés lorsque  $\Delta$  tendra vers 0. On s'aperçoit immédiatement que ce sera un modèle à deux particules et à une échelle de temps, car on impose à la vitesse de vérifier des critères du modèle à une particule et une échelle de temps. On verra plus loin un modèle plus précis

en découpant la zone où les vitesses sont corrélées en une partie inertielle et une partie visqueuse (SAWFORD & HUNT (1986)).

Utilisant le fait que la combinaison linéaire de deux processus régis par l'équation de LANGEVIN est de même régie par une équation de LANGEVIN, on pose:

$$\begin{cases} w_1 = \alpha_d U_1 + \beta_d U_2 \\ w_2 = \beta_d U_1 + \alpha_d U_2 \end{cases} \quad (2.45)$$

où  $U_1$  et  $U_2$  sont des processus aléatoires solutions de l'équation (2.44), et  $\alpha_d$  et  $\beta_d$  sont des fonctions des positions et des vitesses de la paire de particules, suffisamment indépendantes des grandeurs aléatoires pour pouvoir négliger la corrélation  $\langle \alpha_d \beta_d U_1 U_2 \rangle$ . La symétrie indicelle de cette formulation vient du rôle symétrique joué par les particules  $P_1$  et  $P_2$ .

Le système (2.45) permet de coupler les deux processus aléatoires, initialement indépendants, modélisant les vitesses des particules.

- D'après (2.45), on a:

$$\langle w_1^2 \rangle = \langle w_2^2 \rangle = \sigma_w^2 = (\alpha_d^2 + \beta_d^2) \sigma_w^2$$

qui donne immédiatement:

$$\alpha_d^2 + \beta_d^2 = 1 \quad (2.46)$$

- D'autre part, la fonction de corrélation spatiale  $G(\Delta)$  de la vitesse s'écrit:

$$G(\Delta) = \frac{\langle w_1 w_2 \rangle}{\sigma_w^2} = \alpha_d \beta_d \frac{(\langle U_1^2 \rangle + \langle U_2^2 \rangle)}{\sigma_w^2} = 2\alpha_d \beta_d \quad (2.47)$$

En remarquant que la fonction de structure spatiale

$$R(\Delta) = \frac{\langle (w_1 - w_2)^2 \rangle}{2\sigma_w^2}$$

peut s'écrire en fonction de la fonction de corrélation spatiale de la vitesse en turbulence homogène isotrope stationnaire

$$R(\Delta) = 1 - G(\Delta)$$

on trouve moyennant l'égalité (2.47) que:

$$2\alpha_d \beta_d = 1 - R(\Delta) \quad (2.48)$$

La résolution du système d'équations (2.46)-(2.48) donne finalement:

$$\begin{cases} \alpha_d = \frac{1}{2} \left( (2 - R(\Delta))^{1/2} + R^{1/2}(\Delta) \right) \\ \beta_d = \frac{1}{2} \left( (2 - R(\Delta))^{1/2} - R^{1/2}(\Delta) \right) \end{cases}$$

On notera que l'on peut aisément revenir à la notation de DURBIN en posant:

$$\begin{cases} \Delta = (z_1 - z_2) \\ Z_m = (z_1 + z_2) \end{cases}$$

ce qui conduit à:

$$\begin{cases} \frac{d\Delta}{dt} = R^{1/2}(\Delta)U' \\ \frac{dZ_m}{dt} = (2 - R(\Delta))^{1/2}U'' \end{cases} \quad (2.49)$$

où  $U'$  et  $U''$  vérifient l'équation différentielle (2.44).

La seule fonction à modéliser est la fonction de structure spatiale de vitesse  $R(\Delta)$ , qui vérifie

$$\begin{cases} R(0) = 1 - G(0) = 0 \\ R(\infty) = 1 - G(\infty) = 1 \end{cases}$$

Considérons alors  $\langle (w_1 - w_2)^2 \rangle$ . On peut dire qu'il existe nécessairement une gamme de valeurs de  $\Delta$  en deçà de  $L$  pour lesquelles n'apparaît que le transfert d'énergie des grandes structures vers les plus petites au taux  $\varepsilon$ .  $\langle (w_1 - w_2)^2 \rangle$  sera donc une fonction de  $\Delta$  et  $\varepsilon$ ; ceci conduit par analyse dimensionnelle (MONIN & YAGLOM (1975)) à:

$$\langle (w_1 - w_2)^2 \rangle \sim \varepsilon^{2/3} \Delta^{2/3}$$

par conséquent, la fonction de structure spatiale de la vitesse vérifie:

$$R(\Delta) = \frac{\langle (w_1 - w_2)^2 \rangle}{2\sigma_w^2} \sim \frac{\varepsilon^{2/3} \Delta^{2/3}}{\sigma_w^2} \quad (2.50)$$

On sait d'autre part que

$$\varepsilon \sim \left( \frac{\sigma_w^3}{L} \right)$$

On en déduit, pour  $\frac{\Delta}{L} \ll 1$ :

$$R(\Delta) \sim \left( \frac{\Delta}{L} \right)^{2/3}$$

DURBIN (1980b) propose l'interpolation:

$$R(\Delta) = \left( \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + L^2} \right)^{1/3} \quad (2.51)$$

qui vérifie bien:

$$\begin{cases} R(\Delta) \rightarrow 1 & \text{pour } \frac{\Delta}{L} \rightarrow \infty \\ R(\Delta) \sim \left( \frac{\Delta}{L} \right)^{2/3} & \text{pour } \frac{\Delta}{L} \rightarrow 0 \end{cases}$$

Cette modélisation ne comprend pas de coupure visqueuse, la loi en (2/3) s'étendant jusqu'à  $\Delta = 0$ . Cette formulation de  $R(\Delta)$  fait donc implicitement apparaître l'hypothèse d'un nombre de REYNOLDS infini.

Devant cette "lacune" du modèle de DURBIN (1980b), SAWFORD & HUNT (1986) proposent de l'affiner en prenant en compte les effets moléculaires. Ceci implique naturellement l'introduction de l'échelle de KOLMOGOROV. Ce faisant, le modèle qui va suivre ne sera plus applicable à des particules

fluides, mais aux molécules mêmes. On reprend donc le modèle de DURBIN en ajoutant à la vitesse une composante d'origine brownienne et en modifiant la fonction de structure afin d'y introduire une contribution des effets moléculaires.

Il suffit donc d'écrire pour la paire de molécules suivies:

$$\begin{cases} dz_1 = w_{d1} dt + \sqrt{2\kappa} d\zeta_1(t) \\ dz_2 = w_{d2} dt + \sqrt{2\kappa} d\zeta_2(t) \end{cases}$$

Dans ce système,  $\sqrt{2\kappa} d\zeta_i(t)$ , où  $d\zeta_i(t)$  est un processus aléatoire suivant une loi gaussienne centrée de variance  $dt$ , représente la contribution du mouvement brownien au déplacement de la molécule  $i$ ;  $w_{di} dt$  est celle du déplacement de la particule fluide contenant la molécule  $i$ .  $w_{d1}$  et  $w_{d2}$  seront solutions du modèle à deux particules de DURBIN (1980b) où l'on aura pris soin de corriger la forme de la fonction de structure.

En effet, nous venons de souligner que la fonction de structure, pour que le modèle soit consistant, devait faire apparaître un terme lié aux effets moléculaires. Il reste donc à étudier son comportement pour  $\Delta$  inférieur à  $\eta$ . A cette échelle intervient la viscosité;  $R(\Delta)$  sera donc une fonction de  $\Delta$ ,  $\varepsilon$  et  $\nu$ . De nouveau, une analyse dimensionnelle (MONIN & YAGLOM (1975)) conduit à:

$$R(\Delta) \sim \frac{\varepsilon \Delta^2}{\nu \sigma_w^2}$$

Comme

$$\varepsilon \sim \frac{\sigma_w^3}{L}$$

et

$$\eta^4 = \frac{\nu^3}{\varepsilon}$$

il vient:

$$R(\Delta) \sim \left(\frac{\Delta}{L}\right)^{2/3} \left(\frac{\Delta}{\eta}\right)^{4/3}$$

$R(\Delta)$  devra donc vérifier:

$$\begin{cases} R(\Delta) \sim \left(\frac{\Delta}{L}\right)^{2/3} \left(\frac{\Delta}{\eta}\right)^{4/3} & \text{pour } \Delta \ll \eta \\ R(\Delta) \sim \left(\frac{\Delta}{L}\right)^{2/3} & \text{pour } \eta \ll \Delta \ll L \\ R(\Delta) \rightarrow 1 & \text{pour } \Delta \gg L \end{cases}$$

SAWFORD & HUNT proposèrent l'interpolation:

$$R(\Delta) = \left(\frac{\Delta^2}{\eta^2/\alpha_0^3 + \Delta^2}\right)^{2/3} \left(\frac{\Delta^2}{\Delta^2 + L^2}\right)^{1/3} \quad (2.52)$$

où  $\alpha_0$  est une constante qu'il reste à déterminer.

En comparant pour  $t \ll t_\eta$  l'évolution de  $\langle \Delta^2 \rangle$  donnée par le modèle à celle obtenue par SAFFMAN (1960), SAWFORD & HUNT trouvèrent:

$$\alpha_0^2 = 0.128$$

Les études de DURBIN (1980b) et SAWFORD & HUNT (1986) sont purement théoriques. L'application du modèle à deux particules à un cas test est réalisée par STAPOUNTZIS et al. (1986). Les mesures expérimentales indiquent que la diffusion moléculaire et la viscosité ont une influence sensible sur les fluctuations du scalaire suivi (ici la température) tout au long du développement du panache. Le modèle de SAWFORD & HUNT fait apparaître ce phénomène d'une manière quantitative, l'accord qualitatif étant obtenu en ajustant la constante  $\alpha_0$  du modèle.

KOMORI et al. (1991) utilisent une extension de ce modèle pour étudier les fluctuations de concentration dans le cas du mélange entre deux espèces réactantes non pré-mélangées. Ils utilisent pour la fonction de structure spatiale une formulation tenant compte du cisaillement moyen éventuel et mettent en évidence l'importance relative des différents paramètres intervenant dans ce type d'écoulement.

En fait, pour être complètement cohérent avec la prise en compte des effets moléculaires, il faudrait imposer aux processus  $U'$  et  $U''$  utilisés dans (2.49) de vérifier l'équation stochastique à une particule et deux échelles de temps, afin de faire intervenir l'échelle de KOLMOGOROV dans leur détermination. Par conséquent, l'effet relatif de la viscosité cinématique et de la diffusivité moléculaire, soit en d'autres termes l'effet du nombre de SCHMIDT défini par

$$Sc = \frac{\nu}{\kappa}$$

ne pourra pas être rigoureusement pris en compte par le modèle à deux particules et une échelle de temps.

L'étude de (THOMSON (1990)) sur le modèle à deux particules de DURBIN (1980b) montre très bien les limitations de ce modèle. On remarque d'abord pour le modèle monodimensionnel que la corrélation entre les vitesses  $w_1$  et  $w_2$  d'une paire suivie dépend de la distance  $\Delta$  séparant les deux particules considérées; le champ  $(w_1, w_2)$  du processus de MARKOV associé au vecteur  $(z_1, z_2, w_1, w_2)$  est donc inhomogène, même dans le cas d'une turbulence homogène. D'autre part, les processus de mélange affectant l'écart type du champ de concentration sont essentiellement tridimensionnels. THOMSON propose alors un modèle stochastique tridimensionnel à deux particules obtenu par une approche similaire à celle adoptée pour le modèle à une particule (THOMSON (1987)). Ce modèle permet en particulier, contrairement aux précédents, d'obtenir une d.d.p. relative à l'écart entre les particules en accord avec la théorie de la zone inertielle, et produit une intensité des fluctuations de concentration convergeant vers 0 dans le cas d'une turbulence stationnaire et vers une constante pour une turbulence décroissante.

Qu'il s'agisse du modèle de DURBIN (1980b) ou de celui de THOMSON (1990), le modèle à deux particules est utilisé en remontant le temps. Pour ce faire, on considère des points régulièrement répartis sur la section où l'on souhaite déterminer le profil de la concentration moyenne ou l'écart type des fluctuations de concentration. Pour chacun d'entre eux, on suppose à l'instant considéré que deux particules, de concentrations  $c^{(1)}$  et  $c^{(2)}$  à déterminer, s'y rencontrent. Partant de ce point on suit leurs trajectoires à contre courant. Chaque particule aura une concentration égale à celle de la source si elle en vient, à zéro sinon. En répétant cette opération un nombre  $N'_p$  suffisamment grand,

on obtient en chaque point de la section (DURBIN (1980b)):

$$\begin{cases} \langle c^2 \rangle &= \frac{1}{N'_p} \sum_1^{N'_p} c_n^{(1)} c_n^{(2)} \\ \langle c \rangle &= \frac{1}{2N'_p} \sum_1^{N'_p} (c_n^{(1)} + c_n^{(2)}) \\ \langle c'^2 \rangle &= \langle c^2 \rangle - \frac{1}{N'_p{}^2} \sum_1^{N'_p} c_n^{(1)} \sum_1^{N'_p} c_n^{(2)} \end{cases}$$

ce qui nous fournit les profils souhaités.

Or pour que la dispersion soit symétrique en temps et que l'on puisse par conséquent remonter les trajectoires (CORRSIN (1952)), il faut avoir une turbulence homogène isotrope et stationnaire. En outre, le rôle symétrique joué par les particules dans ces modèles impose également l'isotropie de la turbulence. Ceci limite considérablement le champ d'utilisation pratique.

Un autre point faible de ce modèle à deux particules est son coût en temps. En effet, on devra envisager un pas de temps fonction de la séparation des particules, ce qui risque de devenir très vite prohibitif (annexe de THOMSON (1990)).

Finalement, on s'aperçoit que le modèle à deux particules, s'il est théoriquement plus intéressant que le modèle à une particule, notamment par sa capacité à modéliser les fluctuations de concentration, n'est applicable rigoureusement que dans un nombre de cas très limités.

A travers ce chapitre, les modèles stochastiques ont été introduits dans le cas d'une turbulence homogène isotrope stationnaire ou non. Nous avons présenté:

- le modèle à une particule et une échelle de temps;
- le modèle à une particule et deux échelles de temps;
- le modèle à deux particules.

Ce dernier est apparu incomplet car, pour chaque particule d'une paire suivie, il tente d'introduire les effets moléculaires en ajoutant un terme aléatoire fonction de la diffusivité moléculaire à un modèle à une échelle de temps qui, par construction, ne modélise pas les effets visqueux. Un modèle à deux échelles de temps serait alors mieux adapté. En outre, le modèle à deux particules n'est rigoureusement valable que dans le cas d'une turbulence homogène isotrope stationnaire, ce qui limite considérablement son domaine d'utilisation.

Nous avons simulé une source linéique dans une turbulence de grille avec le modèle à une particule et une échelle de temps, ce qui nous a permis de déterminer la valeur de la "constante" de KOLMOGOROV donnant les meilleurs résultats, à savoir  $C_0$  égale à 3. Compte tenu des excellents résultats relatifs aux profils de concentrations moyennes et au développement du panache, nous avons finalement décidé de continuer notre étude en utilisant ce modèle. Les simulations numériques seront par ailleurs plus rapides avec celui-ci qu'avec le modèle à deux échelles de temps.

Enfin, nous avons montré en établissant l'équation de FOKKER-PLANCK que l'approche lagrangienne moyennant le modèle à une particule et une échelle de temps était bien cohérente avec l'approche eulérienne classique en négligeant les effets moléculaires.

Nous allons dès lors considérer la formulation du modèle à une particule et une échelle de temps dans le cas général d'une turbulence inhomogène.

## Chapitre 3

# Modèles stochastiques à une particule et une échelle de temps en turbulence inhomogène

La forme que devaient prendre les modèles stochastiques à une et deux particules en turbulence homogène isotrope stationnaire vient d'être établie; on a testé le modèle à une particule et une échelle de temps dans le cas d'une source linéique de température située dans une turbulence de grille. On s'est aperçu que le modèle fournissait des profils de température moyenne en parfait accord avec les résultats expérimentaux. Néanmoins, l'hypothèse faite d'une turbulence homogène stationnaire n'est vérifiée que dans le cas d'expériences réalisées en laboratoire. En effet, ceux rencontrés dans la nature sont beaucoup plus complexes. Par exemple, la couche limite atmosphérique est un milieu où la turbulence est rendue très inhomogène par la présence du sol, des obstacles que rencontre le flux d'air, de la stratification thermique,...

Ce chapitre a pour objet d'établir le modèle stochastique à une particule et une échelle de temps en turbulence inhomogène. On verra également comment introduire les phénomènes de flottabilité dans le modèle dans le cas de variations modérées de la masse volumique.

### 3.1 Etat de l'art avant 1987

Avant la présentation par THOMSON (1987) d'une étude générale rigoureuse du modèle à une particule et une échelle de temps, les formulations stochastiques lagrangiennes en turbulence inhomogène se sont principalement inspirées du modèle obtenu en turbulence homogène isotrope stationnaire, et se sont limitées à des écoulement stationnaires. On présente ici les différentes voies proposées avant 1987.

- **Extension au cas inhomogène en rendant  $T_L$  et  $\sigma_w$  fonctions de la position dans le modèle obtenu en turbulence homogène isotrope stationnaire:**

$$w_{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{T_L}\right) w_n + \sigma_w \sqrt{2 \frac{\Delta t}{T_L}} \chi_{n+1}$$

avec  $\chi_n$  variable gaussienne de variance  $\Delta t$ :

---

Afin de calculer la dispersion par un modèle stochastique à une particule et une échelle de temps dans le cas d'une couche limite neutre ou instable, HALL (1975) fait les hypothèses suivantes:

- (i) le mouvement est supposé bidimensionnel dans le plan ( $xOz$ );
- (ii) la vitesse longitudinale  $U(z)$  est une fonction analytique de la cote;
- (iii) l'évolution de la vitesse verticale est régie par l'équation différentielle stochastique:

$$w_{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{T_L}\right) w_n + \sigma_w \sqrt{2 \frac{\Delta t}{T_L}} \chi_{n+1}$$

- (iv) dans le cas neutre,  $T_L$  devient fonction de  $z$ ;
- (v) dans le cas instable,  $T_L$ ,  $\sigma_u$  et  $\sigma_w$  sont fonctions de  $z$ .

Ces modifications permettent d'obtenir des tailles de panaches correctes, mais elles sont très empiriques, ce qui limite leur application à des cas plus généraux.

Quelques années plus tard, REID (1979) et DURBIN (1980a) appliquent le même style de modélisation ( $T_L$  fonction de  $z$ ) pour une couche limite neutre et un écoulement en canal respectivement.

DURBIN & HUNT (1980), suivant toujours la même idée, présentent, pour une source dans une couche limite neutre, une étude asymptotique des champs proche et lointain du modèle inhomogène continu correspondant, à savoir

$$\begin{cases} dx = U(z)dt \\ dz = wdt \\ dw = -\frac{w}{T_L(z)}dt + \sigma_w(z)\sqrt{\frac{2}{T_L(z)}}d\zeta \end{cases}$$

Ils obtiennent les premiers moments  $(M_c^n)_{n=1,2,\dots}$  construits sur l'épaisseur du panache, définis par

$$M_c^n(x) = \int_0^\infty z^n c(x, z) dz$$

où  $c$  la concentration molaire volumique, proches des résultats expérimentaux de SHLIEN & CORRSIN (1976).

**•Extension au cas inhomogène en rendant  $T_L$  et  $\sigma_w$  fonctions de la position dans le modèle obtenu en turbulence homogène isotrope stationnaire et en y rajoutant des termes déterministes:**

---

Suite au travail de WILSON et al. (1981), LEGG & RAUPACH (1982) montrent à partir des équations de NAVIER-STOKES que, si l'on souhaite tenir compte des variations verticales de  $\sigma_w$ , il faut incorporer directement dans le modèle un terme déterministe où intervient explicitement le gradient de la variance de la vitesse.

**•Extension au cas inhomogène en rendant  $T_L$  et  $\sigma_w$  fonctions de la position dans le modèle obtenu en turbulence homogène isotrope stationnaire et en couplant les déplacements dans les différentes directions:**

---

LEY (1982) propose, dans le cas d'une couche limite neutre, une formulation stochastique bidimensionnelle suivant les directions ( $x'x$ ) et ( $z'z$ ). La partie aléatoire de l'équation donnant la vitesse

longitudinale est corrélée à la partie aléatoire portant sur la vitesse verticale, et l'échelle de temps intégrale est fonction de la cote. En outre, LEY & THOMSON (1983) donnent une extension de ce modèle au cas d'une couche limite stable en tenant compte également des variations de  $\sigma_w$  avec  $z$ , et arrivent à la même conclusion que LEGG & RAUPACH (1982), à savoir qu'il faut alors ajouter un terme à l'équation d'évolution de la vitesse verticale où intervient le gradient de la variance de celle-ci.

Ces différents modèles se sont révélés satisfaisants dans le cas d'écoulements où les caractéristiques de la turbulence varient doucement en espace. Par contre, ils semblent inadaptés lorsque la turbulence est très inhomogène, ce qui conduit THOMSON (1984) à présenter un nouveau modèle.

• **Extension au cas inhomogène en partant d'une forme a priori de l'équation d'évolution de la vitesse:**

$$\frac{dw}{dt} = -\frac{w}{\tau_L(z)} + \xi(t)$$

et en reportant ainsi l'indétermination sur  $\xi(t)$ :

On se place de nouveau en turbulence monodimensionnelle suivant la direction verticale. THOMSON (1984) fait l'hypothèse que la partie déterministe garde l'expression littérale qu'elle avait en turbulence homogène isotrope stationnaire et reporte ainsi toute l'indétermination du modèle sur la partie aléatoire. Partant du schéma aux différences finies de l'équation de LANGEVIN:

$$\begin{cases} w_{i+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_L(z_{i+1})}\right) w_i + \chi_{i+1} \\ z_{i+1} = z_i + w_i \Delta t \\ t_{i+1} = t_i + \Delta t, \end{cases}$$

on peut montrer que la subsistance d'un état stationnaire impose à la variable aléatoire  $\chi_i$  de vérifier les conditions sur les différents moments:

$$\begin{cases} \langle \chi_{i+1} \rangle = (\Delta t / \rho) \frac{\partial}{\partial z} (\rho \langle w_a^2 \rangle) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ \langle \chi_{i+1}^2 \rangle = 2(\Delta t / \tau_L) \langle w_a^2 \rangle + (\Delta t / \rho) \frac{\partial}{\partial z} (\rho \langle w_a^3 \rangle) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ \langle \chi_{i+1}^3 \rangle = 3(\Delta t / \tau_L) \langle w_a^3 \rangle + (\Delta t / \rho) \frac{\partial}{\partial z} (\rho \langle w_a^4 \rangle) - 3(\Delta t / \rho) \langle w_a^2 \rangle \frac{\partial}{\partial z} (\rho \langle w_a^2 \rangle) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ \langle \chi_{i+1}^4 \rangle = 4(\Delta t / \tau_L) (\langle w_a^4 \rangle - 3(\langle w_a^2 \rangle)^2) + (\Delta t / \rho) \frac{\partial}{\partial z} (\rho \langle w_a^5 \rangle) \\ \quad - 6(\Delta t / \rho) \langle w_a^2 \rangle \frac{\partial}{\partial z} (\rho \langle w_a^3 \rangle) - 4(\Delta t / \rho) \langle w_a^3 \rangle \frac{\partial}{\partial z} (\rho \langle w_a^2 \rangle) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{cases}$$

où

$$\langle w_a^j \rangle = \frac{\langle \rho w^j \rangle}{\langle \rho \rangle}$$

Pratiquement, on ne retiendra que les trois premières égalités de ce système d'équations.

Les simulations menées avec ce modèle par DE BAAS et al. (1986) dans le cas d'une couche limite instable montrent qu'il conduit à des résultats plus satisfaisants que les modèles antérieurs; néanmoins, l'écart avec les résultats expérimentaux reste sensible.

On notera qu'il est facile d'obtenir une variable aléatoire  $\chi$  dont les trois premiers moments sont donnés. Pour ce faire, on écrit

$$\chi = 1_q \chi_{\mathcal{G}(m_1, |m_1|)} + (1 - 1_q) \chi_{\mathcal{G}(m_2, |m_2|)}$$

où  $1_q$  est une variable aléatoire valant 1 avec une probabilité  $q$  et 0 avec une probabilité  $(1 - q)$ ;  $\chi_{\mathcal{G}(m_1, |m_1|)}$  et  $\chi_{\mathcal{G}(m_2, |m_2|)}$  sont des variables aléatoires suivant respectivement une loi gaussienne de moyenne  $m_1$  et d'écart type  $|m_1|$  et une loi gaussienne de moyenne  $m_2$  et d'écart type  $|m_2|$ .  $q$ ,  $m_1$  et  $m_2$  seront alors donnés par le système d'équations

$$\begin{cases} qm_1 + (1 - q)m_2 & = \langle \chi \rangle \\ 2qm_1^2 + 2(1 - q)m_2^2 & = \langle \chi^2 \rangle \\ 4qm_1^3 + 4(1 - q)m_2^3 & = \langle \chi^3 \rangle \end{cases}$$

**•Extension au cas inhomogène en supposant que la variable aléatoire, intervenant dans l'équation stochastique d'évolution de la vitesse, suit une loi gaussienne centrée de variance  $dt$ :**

De leur côté, VAN DOP et al. (1985) proposent un modèle où la forme de la partie aléatoire est supposée connue. Ils montrent, en étudiant  $\langle w \rangle$  et  $\langle w^2 \rangle$  proche de la source, que pour des temps petits, l'équation de LANGEVIN donnant l'évolution de la vitesse doit s'écrire:

$$dw = \left( -\frac{w}{\tau_L(z, t)} + a_1^{VD}(z, t) \right) dt + a_2^{VD}(z, t) d\zeta(t).$$

Ils calculent les coefficients indéterminés en comparant terme à terme les équations des moments obtenues à partir de l'équation de FOKKER-PLANCK à celles issues de l'analyse eulérienne.

Il se trouve que la méthode de THOMSON (1984) et celle de VAN DOP et al. (1985) conduisent à des résultats satisfaisants. Subsiste alors une zone d'ombre: ces deux approches sont-elles équivalentes et physiquement cohérentes malgré leur différence, l'une ne jouant que sur la partie aléatoire et l'autre que sur la partie déterministe? On trouve la réponse, ainsi que les bases théoriques rigoureuses du modèle stochastique à une particule et une échelle de temps appliqué à une turbulence inhomogène, dans l'article de THOMSON (1987).

## 3.2 Modèle de THOMSON (1987)

Aucune hypothèse n'est ici faite sur la nature de la turbulence. Par conséquent, aucune direction n'est privilégiée; la formulation sera tridimensionnelle.

Le nombre de REYNOLDS sera toutefois suffisamment grand pour pouvoir faire l'hypothèse que le processus aléatoire donnant la position  $(\vec{x}, \vec{u})$  de la particule dans l'espace des phases est markovien.

Si on suppose de plus que:

- $\vec{x}$  et  $\vec{u}$  sont des fonctions continues du temps avec

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u}$$

- le processus a la même structure locale qu'un processus à incréments indépendants (Annexe III pour la signification de l'expression "même structure locale qu'un processus à incréments indépendants");

ce processus peut alors être décrit par le système d'équations stochastiques:

$$\begin{cases} dx_i = u_i dt \\ du_i = a_i(\vec{x}, \vec{u}, t) dt + b_{ij}(\vec{x}, \vec{u}, t) d\zeta_j \end{cases} \quad (3.1)$$

où le vecteur  $\vec{a}$  et le tenseur  $\mathbf{b}$  sont fonctions de  $\vec{x}$ ,  $\vec{u}$  et  $t$ , et les incréments  $d\zeta_j$  suivent une loi gaussienne centrée de variance  $dt$  et vérifient

$$\langle d\zeta_i d\zeta_j \rangle = \delta_{ij}(t) dt \quad (3.2)$$

En particulier la formulation proposée dans THOMSON (1984) se trouve mise en défaut car la partie aléatoire alors utilisée ne vérifie pas cette condition.

La suite du raisonnement de THOMSON s'appuie sur le critère simple du mélange parfait, à savoir qu'un mélange initialement homogène doit le rester. Il est important de noter que ce critère ne fait aucune hypothèse sur la turbulence, en particulier concernant la stationnarité.

THOMSON montre qu'il y a équivalence entre la condition de mélange parfait et:

- le comportement de la distribution de vitesse des particules pour des temps petits est correct;
- le modèle est compatible avec les équations eulériennes;
- les densités de probabilité suivant les temps croissants et les temps décroissants sont cohérentes (on dit aussi compatibilité des formulations directe et inverse).

Grâce au caractère markovien de la variable donnée par (3.1), on en déduit l'équation de FOKKER-PLANCK associée:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_L(\vec{x}, \vec{u}; t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i g_L(\vec{x}, \vec{u}; t)) - \frac{\partial}{\partial u_i} (a_i(\vec{x}, \vec{u}, t) g_L(\vec{x}, \vec{u}; t)) \\ & + \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} (B_{ij}(\vec{x}, \vec{u}, t) g_L(\vec{x}, \vec{u}; t)) \end{aligned} \quad (3.3)$$

où  $g_L$ , telle que

$$\int_{\mathbf{R}^3} g_L(\vec{x}, \vec{u}; t) d\vec{u} = \langle c(\vec{x}, t) \rangle$$

avec  $\mathbf{R}$  l'ensemble des réels, est la fonction de densité de distribution des particules marquées dans l'espace des phases et  $\mathbf{B}$  est le tenseur  $\frac{1}{2} \mathbf{b}^t \mathbf{b}$ .

Bien que la détermination du tenseur  $\mathbf{B}$  ne donne pas explicitement  $\mathbf{b}$ , elle permet néanmoins d'obtenir la partie aléatoire  $b_{ij} d\zeta_j$  d'après (3.2) en remarquant que

$$B_{ij} dt = \frac{1}{2} b_{ik} b_{jk} \langle d\zeta_k d\zeta_k \rangle$$

On pourra également écrire (3.3) sous la forme:

$$a_i g_L = \frac{\partial (B_{ij} g_L)}{\partial u_j} + \Phi_i \quad (3.4)$$

avec  $\vec{\Phi}$ , qui tend vers  $\vec{0}$  lorsque  $|\vec{u}|$  tend vers l'infini, satisfaisant:

$$\frac{\partial \Phi_i}{\partial u_i} = -\frac{\partial g_L}{\partial t} - \frac{\partial (u_i g_L)}{\partial x_i} \quad (3.5)$$

Le critère de mélange parfait impose aux fonctions de densité de distribution  $g_L(\vec{x}, \vec{u}; t)$  des particules marquées dans l'espace des phases et  $g_E(\vec{x}, \vec{u}; t)$  des particules fluides constituant le domaine d'étude d'être proportionnelles; par conséquent  $g_E$ , doit également vérifier (3.4) et (3.5), qui deviennent alors:

$$\begin{cases} a_i g_E = \frac{\partial (B_{ij} g_E)}{\partial u_j} + \Phi_i \\ \frac{\partial \Phi_i}{\partial u_i} = -\frac{\partial g_E}{\partial t} - \frac{\partial (u_i g_E)}{\partial x_i} \end{cases}$$

On rappelle que  $g_E$  vérifie

$$\int_{\mathcal{E}} g_E(\vec{x}, \vec{u}; t) d\vec{u} = \langle \rho(\vec{x}, t) \rangle$$

Toute l'élégance de ce résultat réside dans le fait que le modèle se déduit directement de la connaissance de la fonction de densité de distribution  $g_E$  des particules fluides (on verra un peu plus loin que l'on peut effectivement approcher cette fonction de densité de distribution par la mesure expérimentale des moments eulériens de la vitesse, ce qui est beaucoup plus difficile à réaliser d'un point de vue lagrangien).

Pour parachever la détermination du modèle, il reste à préciser les valeurs de  $\vec{a}$  et  $\mathbf{B}$ .

### 3.2.1 Choix de $\vec{a}$ et $\mathbf{B}$

Si on se place dans le cas d'un écoulement monodimensionnel, le système complet selon l'axe ( $z/z'$ ) devient:

$$\begin{cases} dw = a dt + \sqrt{2B} d\zeta \\ dz = w dt \\ a g_E = \frac{\partial (B g_E)}{\partial w} + \Phi \\ \frac{\partial \Phi}{\partial w} = -\frac{\partial g_E}{\partial t} - \frac{\partial (w g_E)}{\partial z} \end{cases}$$

La solution  $\Phi$  de

$$\frac{\partial \Phi}{\partial w} = -\frac{\partial g_E}{\partial t} - \frac{\partial (w g_E)}{\partial z} \quad (3.6)$$

est unique (par hypothèse,  $\Phi$  tend vers 0 lorsque  $w$  tend vers l'infini).  $a$  peut alors être déduit de

$$a g_E = \frac{\partial (B g_E)}{\partial w} + \Phi \quad (3.7)$$

si  $B$  est connu.

Par contre, en dimension deux ou trois,  $\vec{\Phi}$  est unique, modulo l'addition d'un champ solénoïdal dans l'espace des vitesses qui tend rapidement vers  $\vec{0}$  lorsque  $|\vec{u}|$  tend vers l'infini. Il faut donc considérer d'autres aspects de la turbulence pour lever cette indétermination et évaluer  $\vec{a}$  et  $\mathbf{B}$ .

Pour déterminer  $\mathbf{B}$ , on considère la fonction de structure lagrangienne:

$$D_{ij} = \langle (u_i(t + \tau) - u_i(t))(u_j(t + \tau) - u_j(t)) \rangle$$

Pour  $\tau$  tel que  $\frac{1}{\tau}$  soit une fréquence située dans la zone inertielle, on sait que:

$$D_{ij} = \delta_{ij} C_0 \varepsilon \tau \quad (3.8)$$

où  $C_0$  est la constante de KOLMOGOROV et  $\varepsilon$  la moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente.

L'équation différentielle

$$du_i = a_i(\vec{x}, \vec{u}, t) dt + b_{ij}(\vec{x}, \vec{u}, t) d\zeta_j$$

issue de (3.1) conduit pour le modèle à:

$$D_{ij}^{\text{modèle}} = 2\langle B_{ij} \rangle \tau + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (3.9)$$

Or le modèle considéré (à une échelle de temps) ne peut décrire correctement le mouvement des particules que pour des temps supérieurs à l'échelle de temps de KOLMOGOROV (échelle dissipative). On doit donc s'attendre pour des temps petits à ce que le modèle conduise à une fonction de structure lagrangienne  $D_{ij}^{\text{modèle}}$  égale à la forme prise par la fonction de structure exacte dans la zone inertielle. Il doit donc y avoir égalité entre (3.8) et (3.9), ce qui conduit à:

$$2\langle B_{ij} \rangle = \delta_{ij} C_0 \varepsilon$$

Relier  $\vec{\Phi}$  et  $\mathbf{B}$  au champ cinématique n'est pas un problème trivial. THOMSON conclut qu'en l'absence de données ou d'une théorie permettant d'obtenir les fonctions  $\mathbf{B}$  et  $\vec{\Phi}$ , on prendra le modèle le plus simple possible. On choisit ainsi pour  $\mathbf{b}$ :

$$b_{ij} = \delta_{ij} \sqrt{C_0 \varepsilon}$$

SAWFORD & GUEST (1988) démontrent, dans le cas d'une turbulence inhomogène localement gaussienne, que la formulation de THOMSON ne conduit pas à une solution unique pour un écoulement de dimension supérieure à un.

Dans le cas monodimensionnel, on a vu précédemment que  $\Phi$  était unique et que  $a$  pouvait être obtenu dès lors que  $B$  était connu. En prenant

$$2B = C_0 \varepsilon \quad (3.10)$$

le système devient:

$$\left\{ \begin{array}{l} dw = a dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \\ dz = w dt \\ ag_E = \frac{\partial \left( \frac{C_0}{2} \varepsilon g_E \right)}{\partial w} + \Phi \\ \frac{\partial \Phi}{\partial w} = -\frac{\partial g_E}{\partial t} - \frac{\partial (w g_E)}{\partial z} \end{array} \right.$$

Il apparaît alors clairement que le calcul des fonctions  $\Phi$  et  $a$  nécessite la connaissance de la fonction de densité de distribution  $g_E$  des particules fluides dans l'espace des phases. Tout le problème va être alors de déterminer cette grandeur.

### 3.2.2 Modélisation de la fonction de densité de distribution $g_E$

On vient de voir que, moyennant la fermeture par la relation (3.10), l'obtention de  $\Phi$  par (3.6) et  $a$  par (3.7) réside dans la connaissance de la fonction de densité de distribution  $g_E$  dans l'espace des phases des particules fluides constituant l'écoulement. Différentes méthodes pour modéliser  $g_E$  existent dans la littérature.

#### •modèle de LUHAR & BRITTER (1989)

Il s'agit, dans le cas d'une couche limite instable, en menant un peu plus en avant l'idée de BAERNTSEN & BERKOWICZ (1984), de modéliser la fonction de densité de distribution des particules fluides par la combinaison linéaire de deux gaussiennes. La démarche d'obtention de ces deux gaussiennes est la suivante:

Soit une variable aléatoire  $w$  suivant à la cote  $z$  la loi gaussienne  $G(m(z), \sigma(z))$  de moyenne  $m(z)$  et d'écart type  $\sigma(z)$ . Sa d.d.p. est donc:

$$p(w; z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{w-m}{\sigma}\right)^2\right)$$

Considérons maintenant le champ de vitesse verticale eulérienne  $w$  et écrivons  $g_E(z, w; t)$  sous la forme

$$g_E(z, w; t) = \alpha(z)p_a(w; z, t) + \beta(z)p_b(w; z, t)$$

où  $G_a$  et  $G_b$  sont deux gaussiennes de moyennes  $m_a(z)$  et  $m_b(z)$  et d'écart types  $\sigma_a(z)$  et  $\sigma_b(z)$  respectivement;  $\alpha(z)$  et  $\beta(z)$  sont les probabilités d'avoir  $G_a$  et  $G_b$ . L'équation de normalisation de  $g_E$  et les équations sur les trois premiers moments

$$\langle \rho w^i \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} g_E(z, w; t) w^i dw \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.11)$$

fournissent quatre équations reliant les six inconnues  $\alpha(z)$ ,  $m_a$ ,  $\sigma_a$ ,  $\beta(z)$ ,  $m_b$  et  $\sigma_b$  entre elles. L'écoulement étant supposé à masse volumique  $\rho_0$  constante, l'équation de normalisation de  $g_E$  et les équations (3.11) deviennent:

$$\rho_0 \langle w^i \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} g_E(z, w; t) w^i dw \quad i = 0, 1, 2, 3$$

Il demeure deux degrés de liberté pour déterminer les six variables cherchées. LUHAR & BRITTER font alors la même hypothèse de fermeture que BAERNTSEN & BERKOWICZ (1984) en supposant que

$$\begin{cases} m_a = \sigma_a \\ m_b = -\sigma_b \end{cases}$$

(cette fermeture est justifiée dans le cas d'une couche convective en rappelant que la vitesse moyenne  $m_a$  (respectivement  $m_b$ ) des courants ascendants (respectivement descendants) est convertie en énergie cinétique représentée par  $\sigma_a^2$  ( $\sigma_b^2$ )).

On obtient, tout calcul fait<sup>1</sup>:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_b = \left( (\langle w^3 \rangle^2 + 8\langle w^2 \rangle^3)^{1/2} - \langle w^3 \rangle \right) / 4\langle w^2 \rangle \\ \sigma_a = \langle w^2 \rangle / 2\sigma_b \\ m_a = \sigma_a \\ m_b = -\sigma_b \\ \alpha = \sigma_b / (\sigma_a + \sigma_b) \\ \beta = \sigma_a / (\sigma_a + \sigma_b) \end{array} \right.$$

Les résultats obtenus avec ce modèle sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux de WILLIS & DEARDORFF (1976) et se distinguent très nettement de ceux de DE BAAS et al. (1986) qui sous-estiment d'environ 10% l'élévation maximale du centre de masse du panache, ainsi que l'écart type de la dispersion des particules se déplaçant dans une couche limite convective. (figures (3.5) et (3.6)).

Néanmoins, ce procédé présente deux défauts essentiels:

- (i) son utilisation n'est immédiate que dans le cas des couches limites instables;
- (ii) il privilégie une fonction de densité de distribution par rapport à toutes celles qui ont les mêmes premiers moments.

Deux approches plus systématiques sont alors proposées. Celle de KAPLAN & DINAR (1992) détermine  $a(z, w)$  par un développement en puissances de  $w$ . Mais DU & WILSON (1994a) montrent qu'elle ne satisfait pas en général le critère de mélange parfait, et en présentent une plus rigoureuse (DU & WILSON (1994b)).

**•modèle de DU & WILSON (1994b)**

On utilise un résultat mathématique démontré par JAYNES (1957) qui stipule que la fonction de densité de distribution des particules fluides d'un écoulement à masse volumique  $\rho_0$  constante doit se soumettre aux conditions suivantes:

- C1. vérifier toutes les informations disponibles sur les moments, soit, si nous connaissons les  $(N + 1)$  premiers moments  $(\mu_j(z, t))_{j=0, \dots, N}$  de la turbulence, vérifier:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w^j g_E(z, w; t) dw = \rho_0 \mu_j(z, t) \quad j = 1, \dots, N$$

- C2. maximiser

$$H(g_E) = - \int_{-\infty}^{+\infty} g_E(z, w; t) \ln(g_E(z, w; t)) dw$$

Le problème constitué par C1 et C2 peut être résolu en cherchant les multiplicateurs de Lagrange  $(\lambda_k^L)_{k=0, \dots, N}$  de

$$H^*(g_E) = H(g_E) + \sum_{i=0}^N \lambda_i^L \rho_0 \mu_i$$

---

1. Le signe négatif de  $m_b$  signifie que la gaussienne  $G_a$  sera relative aux courants descendants.

DU & WILSON montrent ainsi que les deux conditions indiquées ci-dessus mènent à l'expression:

$$\begin{aligned} g_E^{mmi}(w) &= \rho_0 \exp\left(1 - \sum_{k=0}^N \lambda_k^L w^k\right) \\ &= \rho_0 \exp\left(-\sum_{k=0}^N \lambda_k w^k\right) \end{aligned}$$

avec les  $\lambda_k$  donnés implicitement par:

$$\mu_j = \int_{-\infty}^{+\infty} w^j \exp\left(-\sum_{k=0}^N \lambda_k w^k\right) dw. \quad (3.12)$$

L'indice  $mmi$  de  $g_E^{mmi}$  vient de l'anglais "maximal missing information"<sup>2</sup>, qualificatif donné à la méthode de minimisation de JAYNES.

Il est à noter que  $N$  devra être pair et  $\lambda_N$  strictement positif pour que l'intégrale composant le second membre de (3.12) converge dans l'ensemble des nombres réels. Pour  $N$  supérieur à 2, on ne peut pas trouver de solution analytique donnant explicitement les  $\lambda_k$  en fonction des  $\mu_j$ . Ils pourront être évalués par une méthode classique de "descente" (Annexe IV).

### 3.3 Tests de validation du modèle de THOMSON (1987) moyennant le calcul de la fonction de densité de distribution "m.m.i.", et comparaison à des modèles antérieurs

Afin d'évaluer la performance du modèle de THOMSON (1987) avec calcul de la fonction de densité de distribution "m.m.i.", nous allons présenter des résultats obtenus dans le cas d'une couche limite neutre, et la comparaison à d'autres modèles en couche limite convective.

#### 3.3.1 Couche limite neutre

On se place dans les conditions expérimentales de SHLIEN & CORRSIN (1976). La source linéique de température parallèle à l'axe ( $y'y$ ) est placée à une cote égale à

$$z_s = 0.21\delta$$

où  $\delta$  est l'épaisseur de la couche limite.

---

2. parmi les fonctions vérifiant les contraintes C1,  $g_E^{mmi}$  est celle qui maximise l'entropie.

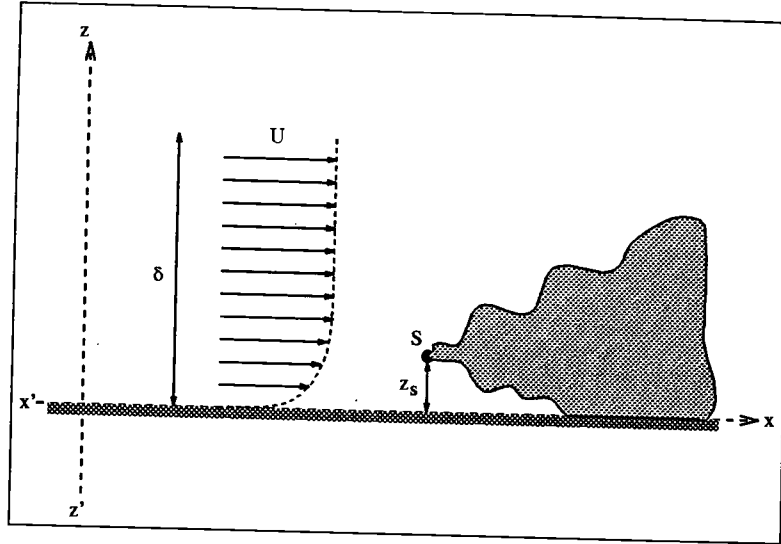


FIG. 3.1 - Schéma de l'expérience de SHLIEN & CORRISIN (1976)

Les grandeurs  $\sigma_w(z)$  et pour  $\tau_L(z)$  n'étant pas fournies par SHLIEN & CORRISIN, on a utilisé les formules analytiques données par DURBIN & HUNT (1980), à savoir:

$$\begin{cases} \sigma_w = u_* & z < 0.4\delta \\ \sigma_w = u_* \left(1.4 - \frac{z}{\delta}\right) & 0.4\delta < z < \delta \end{cases}$$

et

$$\begin{cases} \tau_L = 0.4 \frac{z}{u_*} & z < 0.23\delta \\ \tau_L = 0.92 \frac{\delta}{u_*} & z > 0.23\delta \end{cases}$$

où  $u_*$  est la vitesse de frottement.

Nous avons ici utilisé la formule classique reliant  $\varepsilon$  à  $\tau_L$  en turbulence homogène isotrope

$$\varepsilon = \frac{2}{C_0} \frac{\sigma_w^2}{\tau_L}$$

faute de données sur  $\varepsilon$ .

On a pris comme coefficient d'asymétrie une variation affine par segments approchant les mesures effectuées par ZEGADI (1992), soit pour le moment d'ordre 3:

$$\begin{cases} \langle w^3 \rangle = 0.2\sigma_w^3 & Z < 0.5 \\ \langle w^3 \rangle = (0.2 + 1.15(Z - 0.5))\sigma_w^3 & 0.5 < Z < 0.9 \\ \langle w^3 \rangle = 0.66\sigma_w^3 & Z > 0.9 \end{cases}$$

avec

$$Z = \frac{z}{\delta}$$

En ce qui concerne le coefficient d'aplatissement, on a fait l'hypothèse vérifiée expérimentalement

$$\langle w^4 \rangle = 3\sigma_w^4$$

Les coefficients  $a$  et  $b$  du modèle de THOMSON (1987) s'écrivent:

$$\begin{cases} a = \frac{1}{g_E} \frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{1}{2} b^2 g_E \right) + \frac{\Phi}{g_E} \\ b = \left( \frac{2\sigma_w^2}{\tau_L} \right)^{1/2} \\ \Phi = - \int_{-\infty}^w s \frac{\partial g_E}{\partial z} ds \end{cases}$$

Le calcul de  $\Phi$  a été mené en envisageant la formule équivalente

$$\Phi = - \frac{\partial}{\partial z} \left( \int_{-\infty}^w u g_E du \right)$$

car nous évitons ainsi un cumul d'erreurs. On a néanmoins constaté que l'évaluation numérique de ces deux formules donne des résultats très proches.

La concentration est proportionnelle au temps passé par l'ensemble des particules dans un volume élémentaire entourant le point où l'on effectue la mesure. Or, le temps passé par chaque particule dans un volume élémentaire est inversement proportionnel à sa vitesse au point considéré. On découpe alors l'épaisseur de la couche limite en 20 segments pour chacun desquels on calcule la grandeur

$$C'_i = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{1}{U_j}$$

où  $N_i$  est le nombre total de particules passant à travers le segment  $i$  et  $U_j$  la vitesse de la  $j^{\text{ième}}$  particule passant par ce segment.  $C'_i$  est clairement proportionnelle à la concentration moyenne (LEY (1982)).

Il nous a semblé intéressant de mesurer l'influence des coefficients d'asymétrie et d'aplatissement des fluctuations de vitesse suivant l'axe ( $z'z$ ) sur les niveaux de concentration. On a donc calculé  $g_E$  avec la moyenne et l'écart type des fluctuations de vitesse d'une part, puis en tenant également compte de ces coefficients.

Cinquante mille particules sont relâchées. Afin de comparer les résultats de la simulation à ceux de SHLIEN & CORRISIN (1976), on a relevé les niveaux de la concentration moyenne à  $x$  égal à  $\delta$ ,  $2\delta$

et  $6\delta$ , rapporté à sa valeur maximale dans chaque section considérée (figures (3.2), (3.3) et (3.4)).

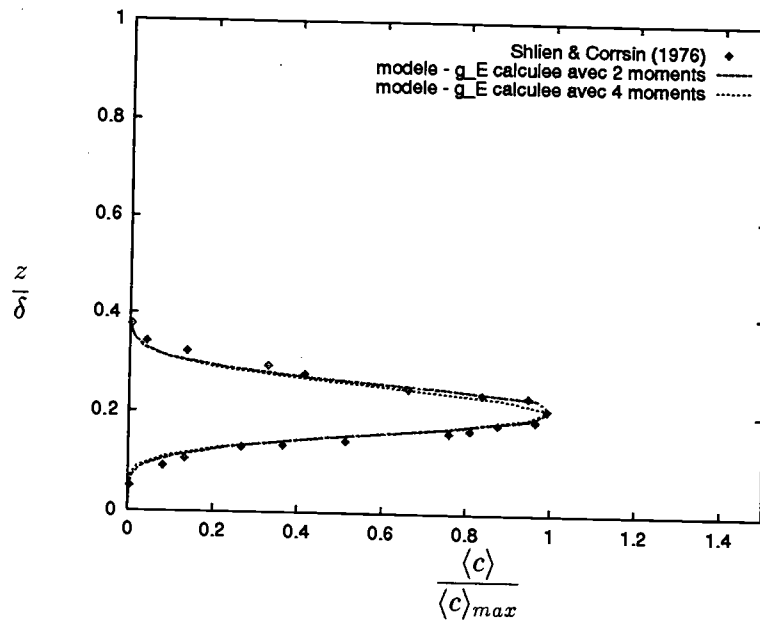


FIG. 3.2 - Profils de la concentration moyenne à  $x = \delta$  obtenue avec la fonction de densité de distribution "m.m.i." calculée avec 2 et 4 moments

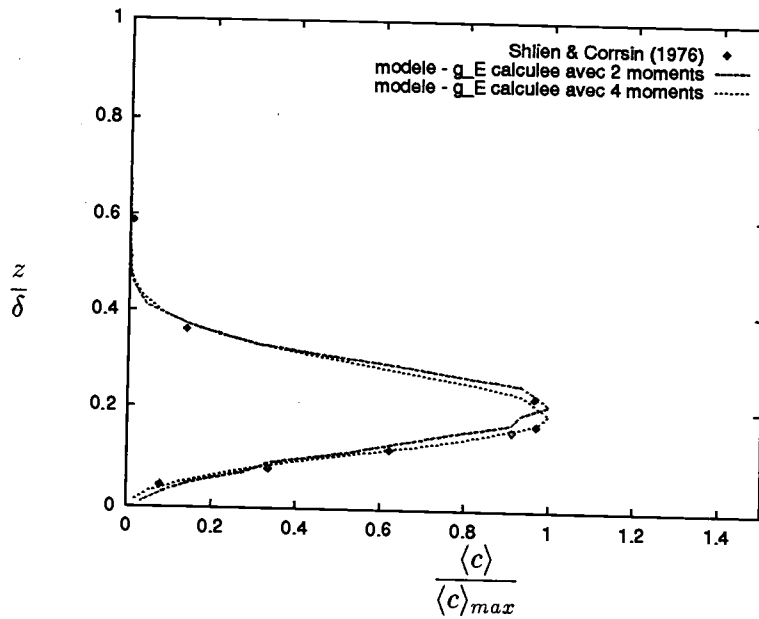


FIG. 3.3 - Profils de la concentration moyenne à  $x = 2\delta$  obtenue avec la fonction de densité de distribution "m.m.i." calculée avec 2 et 4 moments

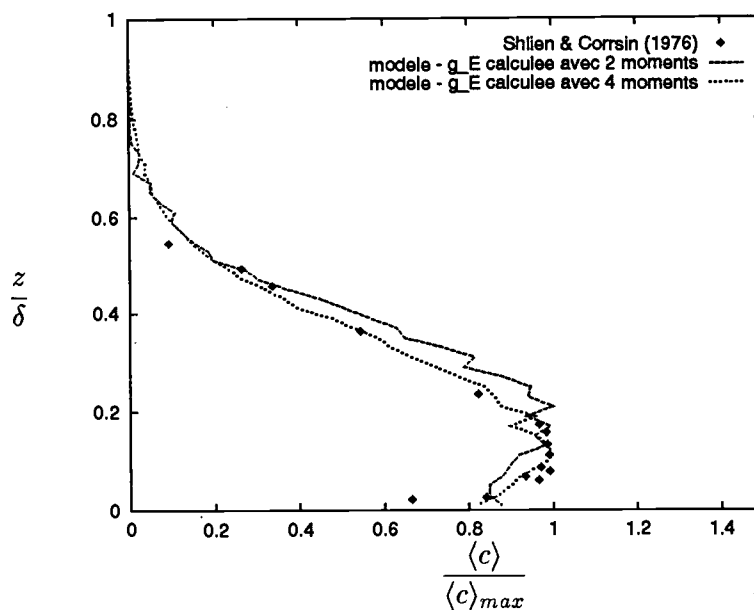


FIG. 3.4 - Profils de la concentration moyenne à  $x = 6\delta$  obtenue avec la fonction de densité de distribution "m.m.i." calculée avec 2 et 4 moments

On remarque en fait que l'influence des coefficients d'asymétrie et d'aplatissement de la turbulence est sensible principalement au voisinage du sol ce qui est logique, cette région étant celle où la turbulence est le plus inhomogène.

Nous allons maintenant effectuer des tests de comparaison entre différents modèles.

### 3.3.2 Couche limite convective

On compare ici la cote moyenne et l'écart type de la cote des particules issues d'une source ponctuelle placée dans une couche limite instable. Ces valeurs sont évaluées grâce au modèle de THOMSON (1987) avec calcul de la fonction de densité de distribution "m.m.i.". Elles sont comparées à celles de DE BAAS (1984) avec le modèle de THOMSON (1984), à celles de LUHAR & BRITTER (1989) avec le modèle de THOMSON (1987) et la construction de la d.d.p. avec deux gaussiennes, et aux mesures expérimentales de WILLIS & DEARDORFF (1976).

On se place dans les conditions expérimentales de WILLIS & DEARDORFF (1976). Les grandeurs caractéristiques du cas considéré sont les suivantes:

$$\begin{cases} \delta = 28.7 \cdot 10^{-2} m \\ z_s = 6.7 \cdot 10^{-2} \delta \\ w_* = 9.8 \cdot 10^{-3} m s^{-1} \end{cases}$$

où  $\delta$  est l'épaisseur de la zone de mélange convectif,  $z_s$  la cote de la source ponctuelle et  $w_*$  l'échelle

de vitesse convective<sup>3</sup>. On retient les formules analytiques de moments et d'échelle de temps intégrale lagrangienne de la vitesse proposées par SAWFORD & GUEST (1987):

$$\begin{cases} \sigma_w^2 &= 1.1Z^{2/3}(1-Z)^{2/3} \left(1 - \frac{4(Z-0.3)}{(2+|Z-0.3|)^2}\right) w_*^2 \\ \langle w^3 \rangle &= 0.8\sigma_w^3 \\ \tau_L &= 2.5 \frac{\sigma_w^2 \delta}{w_*^3} \end{cases}$$

avec

$$Z = \frac{z}{\delta}$$

auxquelles on rajoute la fermeture gaussienne sur le quatrième moment:

$$\langle w^4 \rangle = 3\sigma_w^4$$

Ici aussi, comme indiqué dans le paragraphe précédent, la moyenne d'ensemble  $\varepsilon$  du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente sera reliée directement à  $\tau_L$  par:

$$\varepsilon = \frac{2}{C_0} \frac{\sigma_w^2}{\tau_L}$$

Deux mille particules sont relâchées. Leurs vitesses sont initialisées par une variable aléatoire gaussienne de moyenne nulle et d'écart type  $\sigma_w$ . Le faible nombre de particules suivies ici est suffisant puisque l'on s'intéresse à deux grandeurs moyennes calculées sur l'ensemble des particules (contrairement à la concentration par exemple qui est calculée localement). Quatre heures et demie de calcul sont nécessaires sur SPARC 5, une fois la fonction de densité de distribution "m.m.i." déterminée.

Supposer l'hypothèse de TAYLOR

$$t = \frac{x}{U}$$

vérifiée permet de représenter la moyenne  $\langle Z \rangle$  et la variance  $\langle (Z - \langle Z \rangle)^2 \rangle^{1/2}$  de la cote divisée par  $\delta$  en fonction de la variable sans dimension  $X = \left(\frac{w_*}{U}\right) \left(\frac{x}{\delta}\right)$ .

Les résultats obtenus figures (3.5) et (3.6) avec le modèle utilisant la fonction de densité de distribution "m.m.i." sont très proches des résultats expérimentaux de WILLIS & DEARDORFF (1976). Ils sont meilleurs que ceux de DE BAAS et al. (1986), et néanmoins légèrement moins bons que ceux de LUHAR & BRITTER (1989). En particulier, la cote moyenne des particules atteint son maximum à une abscisse mise sous forme sans dimension  $X$  égale à 1.5 expérimentalement, à 1.7 pour LUHAR & BRITTER et à 2 pour le modèle de THOMSON avec la fonction de densité de distribution "m.m.i." (figure (3.5)). Ceci peut venir de la modélisation de  $g_E$  utilisée par LUHAR & BRITTER qui serait plus proche de la fonction de densité de distribution expérimentale que l'approximation "m.m.i.". Cela n'implique pas pour autant qu'il faille privilégier leur modèle à celui de DU et al. (1994); rappelons

3. A titre indicatif, on rappelle la formule donnée par WILLIS & DEARDORFF:

$$w_* = (g\alpha Q_0 \delta)^{1/3}$$

où  $\alpha$  est le coefficient d'expansion thermique et  $Q_0$  le flux cinématique de chaleur proche de la paroi chauffée.

en effet que le modèle utilisant la fonction de densité de distribution "m.m.i." présente un caractère universel, contrairement à celui de LUHAR & BRITTER.

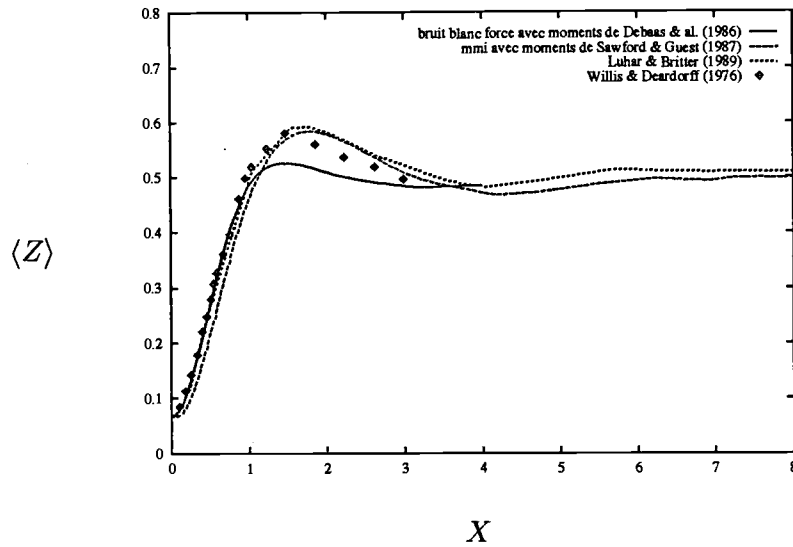


FIG. 3.5 - Evolution longitudinale de  $\langle Z \rangle$  obtenue avec différents modèles stochastiques développés pour une turbulence inhomogène

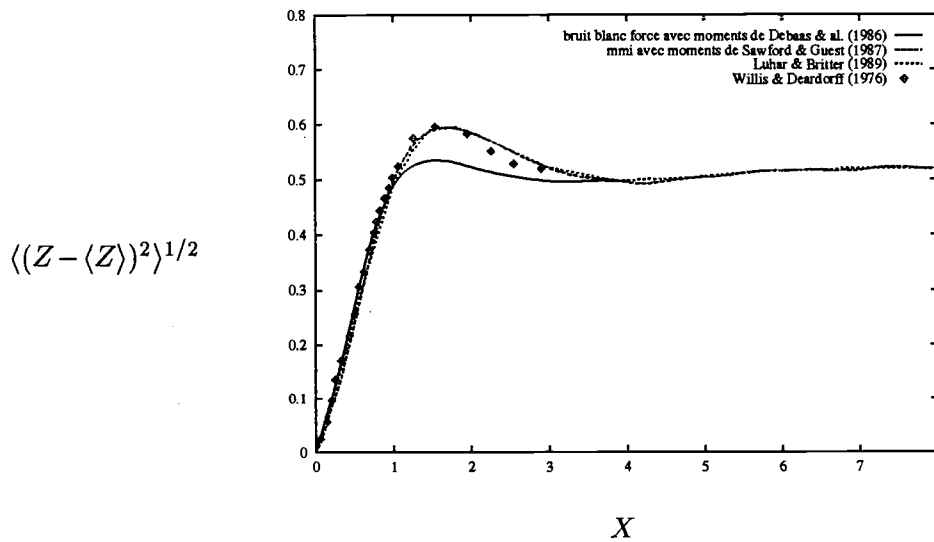


FIG. 3.6 - Evolution longitudinale de  $\langle (Z - \langle Z \rangle)^2 \rangle^{1/2}$  obtenue avec différents modèles stochastiques développés pour une turbulence inhomogène

Le modèle de THOMSON (1987) utilisant  $g_E$  évaluée par la méthode "m.m.i." donne donc d'excellents résultats. Néanmoins, il reste très préjudiciable au niveau temps de calcul. Compte tenu

du caractère localement gaussien du champ de vitesse turbulente en couche limite neutre observé expérimentalement, on retiendra cette hypothèse qui conduit à une formulation du modèle beaucoup plus simple. Sa nouvelle forme est présentée dans le paragraphe suivant, où l'on montre d'autre part que le calcul bidimensionnel qui vient d'être présenté, pour un rejet tridimensionnel dans une couche limite neutre, est licite.

### 3.4 Validation dans le cas de rejets ponctuels de l'utilisation de profils de concentration obtenus à partir du modèle bidimensionnel

Les rejets étudiés dans la littérature sont principalement des rejets ponctuels dans une couche limite neutre bidimensionnelle. Néanmoins, le panache est tridimensionnel, les fluctuations transversales de vitesse agissant sur la dispersion au même titre que les fluctuations verticales. Comme nous avons jusqu'à présent négligé la dispersion transversale, il faut justifier que les profils verticaux de la concentration moyenne mise sous forme sans dimension sont semblables, que l'on envisage la contribution transversale ou non.

Pour traiter cette partie, on envisage l'expérience menée par FACKRELL & ROBINS (1982). Il s'agit du rejet d'un gaz passif issue d'une source ponctuelle placée dans une couche limite neutre. L'épaisseur de la couche limite  $\delta$ , la vitesse extérieure  $U_e$ , la vitesse de frottement  $u_*$ , la cote de la source  $z_s$  et son diamètre  $d_s$  valent respectivement à l'abscisse de la source:

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta = 1.2 \text{ m} \\ U_e = 4 \text{ m s}^{-1} \\ u_* = 0.047 U_e \\ z_s = 0.19 \delta \\ d_s = 7.08 \cdot 10^{-3} \delta \end{array} \right.$$

Les profils verticaux de la vitesse moyenne, de la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique de turbulence et de la moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence sont reportés figure (3.7).

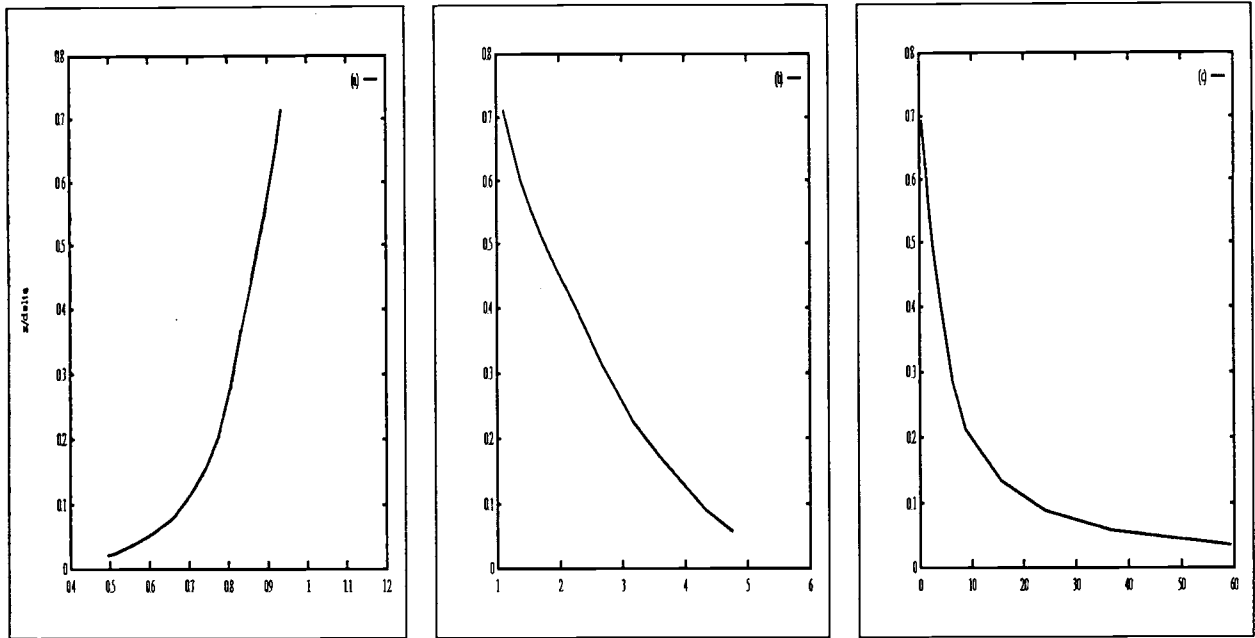


FIG. 3.7 - Profils de  $\frac{U}{U_e}$  (a), de  $\frac{k}{u_*^2}$  (b) et de  $\frac{\epsilon\delta}{u_*^3}$  (c) donnés par FACKRELL & ROBINS (1982)

Ces profils seront supposés constants sur tout le domaine d'étude. On remarque que ces grandeurs ne suffisent pas à déterminer complètement le problème numérique. En effet, le modèle de dispersion monodimensionnelle suivant la verticale fait intervenir l'écart type des fluctuations de vitesse  $\sigma_w$ , ainsi que l'échelle de temps intégrale de vitesse lagrangienne  $T_L$  (on a vu que les limites de validité du modèle stochastique à une échelle de temps imposait à l'incrément temporelle d'être prise égale à  $0.05T_L$ , ce qui implique la connaissance de  $T_L$ ).

Certaines hypothèses de fermeture sont alors nécessaires:

- on utilise les fermetures, classiques pour une couche limite atmosphérique neutre bidimensionnelle dans la direction  $(x'x)$ , reliant les écarts types des fluctuations de vitesse à la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique turbulente:

$$\begin{cases} \sigma_u^2 = \frac{32}{29}k \\ \sigma_v^2 = \frac{18}{29}k \\ \sigma_w^2 = \frac{8}{29}k \end{cases}$$

- on fait l'hypothèse, vérifiée expérimentalement, que la turbulence est localement gaussienne dans le cas d'une couche limite neutre.
- on prend comme échelle de temps intégrale lagrangienne:

$$T_L = \frac{2}{C_0} \frac{\sigma_w^2}{\epsilon}$$

L'hypothèse d'une turbulence localement gaussienne permet de simplifier considérablement le modèle de THOMSON (1987). En effet, dans le cas d'une dispersion monodimensionnelle, ce modèle

s'écrit:

$$\begin{cases} dw = a dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \\ dz = w dt \end{cases}$$

avec

$$\begin{cases} a = \frac{1}{g_E(z, w; t)} \frac{\partial}{\partial w} (C_0 \varepsilon g_E(z, w; t)) + \frac{\Phi}{g_E(z, w; t)} \\ \Phi = -\frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^w s g_E(z, s; t) ds \end{cases}$$

Or, dans le cas d'une turbulence localement gaussienne d'un écoulement à masse volumique  $\rho_0$  constante, on a:

$$g_E(z, w; t) = \frac{\rho_0}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{w}{\sigma_w}\right)^2\right)$$

Ceci permet d'écrire:

$$\begin{aligned} \Phi &= \rho_0 \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{\sigma_w}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{w}{\sigma_w}\right)^2\right) \right] \\ &= \sigma_w \left(1 + \frac{w^2}{\sigma_w^2}\right) \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} g_E(z, w; t) \end{aligned}$$

et

$$\frac{\partial}{\partial w} (C_0 \varepsilon g_E(z, w; t)) = -C_0 \varepsilon \frac{w}{\sigma_w^2} g_E(z, w; t)$$

ce qui conduit finalement à:

$$a = -C_0 \varepsilon \frac{w}{\sigma_w^2} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{w^2}{\sigma_w^2}\right) \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z}$$

Le système se réduit alors à:

$$\begin{cases} dz = w dt \\ dw = \left[ -C_0 \varepsilon \frac{w}{\sigma_w^2} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{w^2}{\sigma_w^2}\right) \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} \right] dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \end{cases}$$

Le problème des fermetures étant résolu, on est confronté à un autre problème proche de la paroi: les variations rapides des moyennes d'ensemble de l'énergie cinétique turbulente et de son taux de dissipation au voisinage du sol font que ces grandeurs ne peuvent y être mesurées. De même, si l'on envisage la résolution eulérienne de l'écoulement considéré par un code  $k - \varepsilon$  (Annexe I), la présence de forts gradients proche de la paroi font que la résolution n'est envisagée qu'au-delà d'une certaine distance  $D_p$ , appelée déplacement de paroi, de la frontière solide. A cette distance, on suppose que l'équilibre local est respecté, à savoir que le taux de production de l'énergie cinétique turbulente égale son taux de dissipation. Cette hypothèse, fondée sur des observations expérimentales, permet de relier  $k$  et  $\varepsilon$  à la vitesse de frottement  $u_*$ , que l'on déduit à son tour de la vitesse par la loi logarithmique. Pour se situer dans cette zone d'équilibre local, on devra vérifier

$$30 < \frac{D_p \cdot u_*}{\nu} < 150$$

où  $\nu$  sera la viscosité cinématique du fluide.

Dans de telles circonstances, deux options se présentent pour la simulation numérique du suivi lagrangien de particules:

- soit la source est prise à hauteur réelle (figure (3.8)): les particules subissent alors la turbulence qu'elles verraient en écoulement réel. Par contre, un problème se pose lorsqu'elles atteignent la hauteur du déplacement de paroi. On impose ici une condition de réflexion à cette altitude.

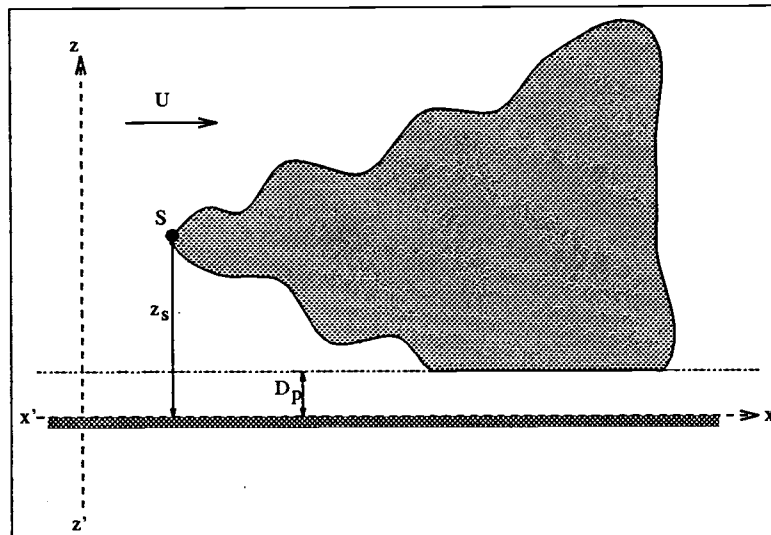


FIG. 3.8 - La source est à une distance  $z_s$  de la paroi réelle

- soit la source est prise à une hauteur surélevée de la valeur du déplacement de paroi (figure (3.9)): dans ce cas, la paroi fictive du domaine de calcul se situe à une distance de la source égale à celle séparant la source réelle de la paroi solide; par contre, les particules ne subissent plus la turbulence réelle mais celle observée à la valeur du déplacement de paroi plus haut.

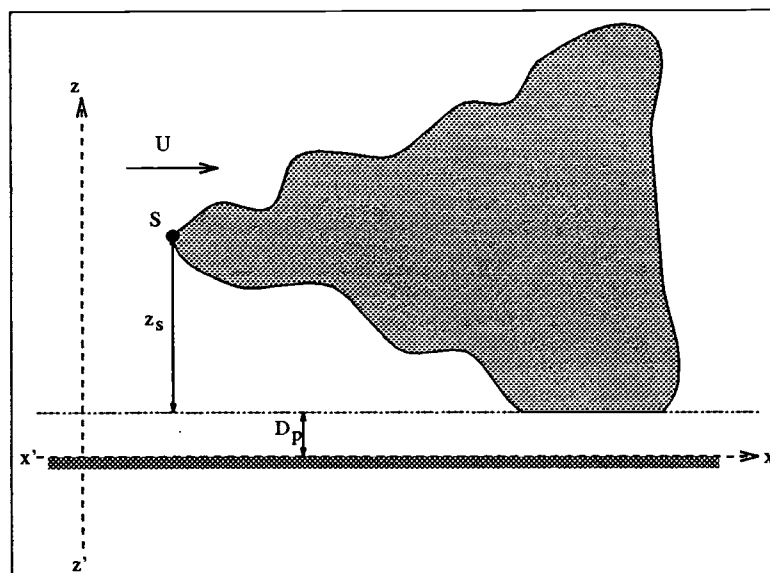


FIG. 3.9 - La source est à une distance  $z_s$  de la paroi fictive

Enfin, l'influence de la dispersion turbulente transversale sur les profils verticaux de la concentration moyenne sera quantifiée en simulant une dispersion purement verticale, puis une dispersion verticale et transversale. Dans le second cas, on supposera les deux processus indépendants<sup>4</sup> et on prendra la même échelle de temps intégrale de vitesse lagrangienne dans les deux directions. Le système d'équations continues sera donc:

$$\left\{ \begin{array}{l} dx = U(z)dt \\ dy = vdt \\ dv = \left[ -C_0\varepsilon \frac{v}{\sigma_v^2} + \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{v^2}{\sigma_v^2} \right) \frac{\partial \sigma_v^2}{\partial z} \right] dt + \sqrt{C_0\varepsilon} d\zeta \\ dz = wdt \\ dw = \left[ -C_0\varepsilon \frac{w}{\sigma_w^2} + \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{w^2}{\sigma_w^2} \right) \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} \right] dt + \sqrt{C_0\varepsilon} d\zeta \end{array} \right.$$

Les profils de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à l'abscisse considérée (1.15 m, 2.30 m, 3.45 m et 5.75 m (soit respectivement à  $0.96\delta$ ,  $1.92\delta$ ,  $2.88\delta$  et  $4.79\delta$ ) en aval de la source sont représentés figures (3.10)- (3.13). Ils sont établis avec et sans déplacement de paroi, pour les modèles à deux et trois dimensions.

On les détermine en relâchant 5000 particules dans le cas bidimensionnel et 40000 dans le cas tridimensionnel. Le déplacement de paroi est pris égal à  $0.05\delta$ .

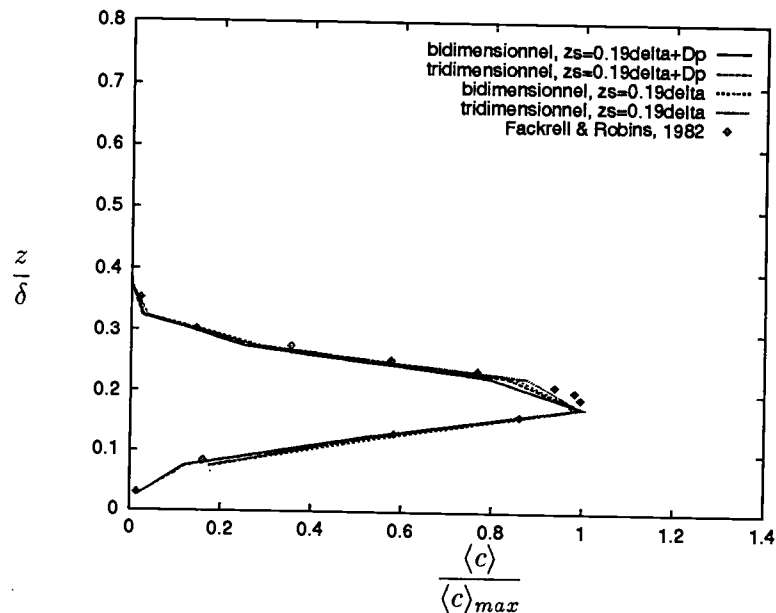


FIG. 3.10 - Profils de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à  $x = 1.15 m$

4. On sait que les fluctuations de vitesse eulérienne dans une turbulence homogène ne sont pas corrélées. On supposera que cela reste vrai pour les fluctuations de vitesse lagrangienne et que l'écoulement est ici "suffisamment homogène" pour pouvoir faire cette hypothèse.

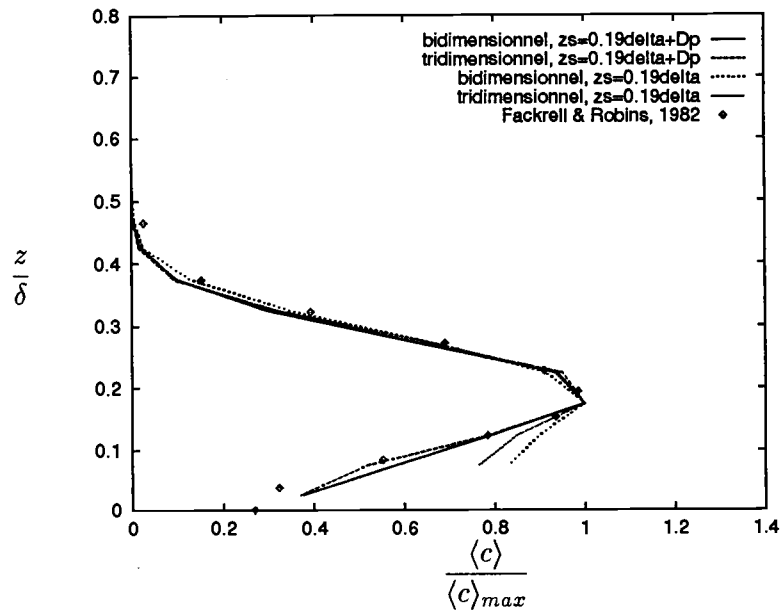


FIG. 3.11 - Profils de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à  $x = 2.30 \text{ m}$

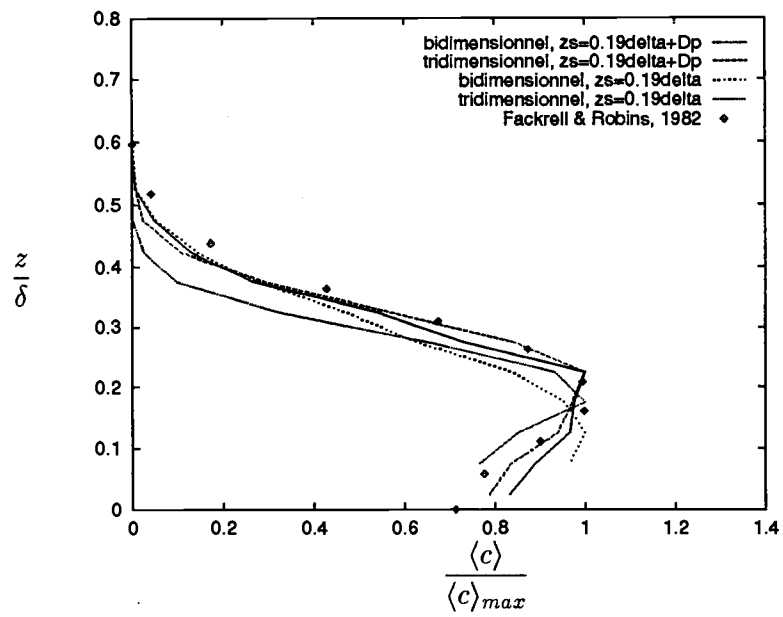


FIG. 3.12 - Profils de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à  $x = 3.45 \text{ m}$

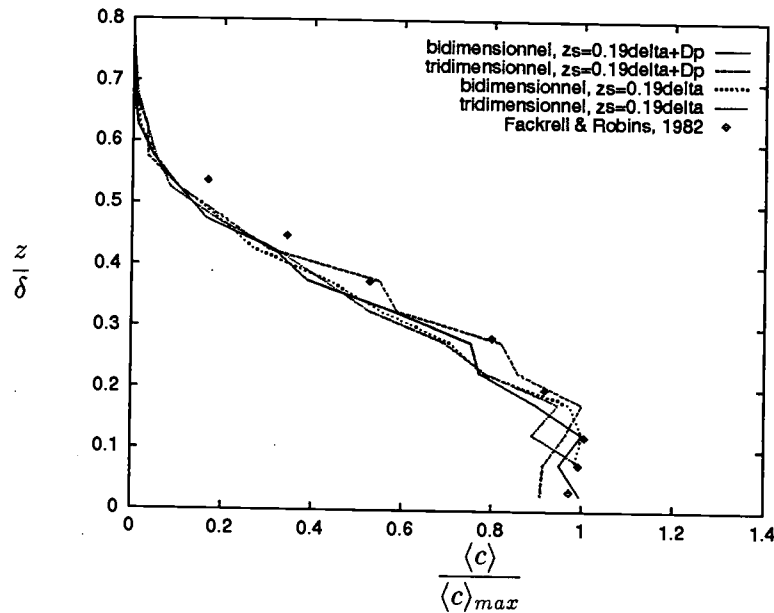


FIG. 3.13 - Profils de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à  $x = 5.75 \text{ m}$

Ces profils permettent de tirer les conclusions suivantes:

- Les résultats obtenus en plaçant la source à hauteur réelle sont médiocres comparés à ceux pour lesquels la source est surélevée de la valeur du déplacement de paroi. Lorsque la simulation numérique est effectuée avec la source à hauteur réelle, les particules heurteront la paroi fictive plus tôt qu'elles ne l'auraient fait avec la paroi réelle. Si les grandeurs cinématiques sont obtenues numériquement, une parade à ce problème de déplacement de paroi est d'utiliser un modèle de calcul eulérien, appelé "modèle bi-couche", qui envisage des prolongements analytiques des profils cinématiques proche de la paroi. Ici, comme nous utilisons les valeurs expérimentales, la source sera systématiquement surélevée d'une hauteur égale à la cote du premier point des profils expérimentaux. Ainsi, ce point sera séparé de la source fictive d'une distance égale à celle séparant le sol de la source réelle.
- Les profils verticaux de concentration, rapportés à la concentration maximale, donnés par les simulations tridimensionnelles (considérant la dispersion transversale) et bidimensionnelle sont très proches. Compte tenu du nombre de particules beaucoup plus important nécessaire au calcul tridimensionnel, nous nous limiterons dès lors à des simulations bidimensionnelles.

Les profils de concentration dans le cas d'une source au sol obtenus expérimentalement par FACKRELL & ROBINS et par simulation numérique bidimensionnelle sont reportés figure (3.14).

Ces résultats sont beaucoup moins satisfaisants; on ne retrouve pas la similitude observée par FACKRELL & ROBINS entre les différents profils. Ceci s'explique par l'erreur liée au déplacement de paroi qui se répercute ici sur toutes les particules, celles-ci étant initialement proche de la frontière solide. Par conséquent, excepté dans le paragraphe suivant traitant de la flottabilité, les simulations envisagées dorénavant le seront pour des sources élevées.

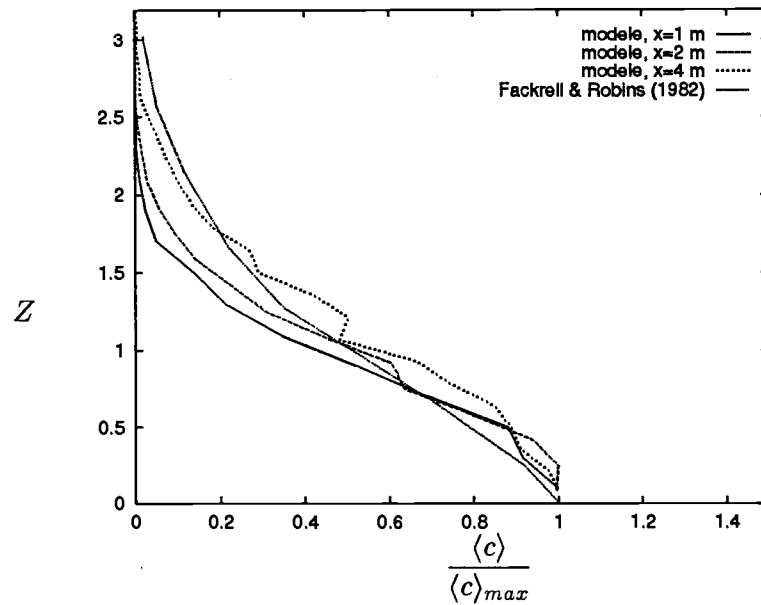


FIG. 3.14 - Profils dans différentes sections de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale dans la section considérée ( $Z = z/\delta_z$  avec  $\delta_z$  la cote du point où la concentration est la moitié de la concentration maximale)

Voyons, pour terminer ce chapitre voué au modèle stochastique lagrangien à une particule et une échelle de temps en turbulence inhomogène, comment y introduire la flottabilité. Cet aspect est en effet important dans les applications pratiques des modèles de suivis lagrangiens stochastiques de particules, les gaz envisagés lors de rejets en couche limite atmosphérique étant souvent de densités supérieures à celle de l'air.

### 3.5 Introduction de la flottabilité dans le modèle à une particule et une échelle de temps

Nous nous sommes intéressés jusqu'à présent à des rejets de gaz de densités égales à celle du fluide de l'écoulement porteur. Dans le cas du rejet d'un gaz de densité différente, il faut modéliser l'influence de la flottabilité sur la cinématique des particules suivies. On suppose toujours que la dispersion turbulente n'a lieu que dans la direction verticale. La démarche est alors semblable à celle suivie par THOMSON (1987):

- (i) on postule la forme d'un système d'équations stochastiques d'évolution de la variable aléatoire markovienne modélisant la position de la particule marquée dans l'espace des phases en présence de phénomènes gravitationnels;
- (ii) on détermine l'équation de FOKKER-PLANCK associée à cette variable markovienne;
- (iii) enfin, les coefficients cherchés seront déterminés, en procédant comme VAN DOP et al. (1985), par l'évaluation des moments  $\langle c(z, t) \rangle$  et  $\langle w(z, t)c(z, t) \rangle$  à partir de l'équation de FOKKER-PLANCK et à partir de l'équation eulérienne de conservation de la matière.

(i) On postule la forme du système d'équations stochastiques d'évolution de la position  $(z, w)$  de la particule marquée dans l'espace des phases:

$$\begin{cases} dz = wdt \\ dw = (a + G)dt + bd\zeta \end{cases} \quad (3.13)$$

Il n'est différent de celui du modèle de THOMSON (1987) que par l'ajout du terme déterministe  $Gdt$  dans l'équation d'évolution de la vitesse. Ce modèle revient donc à supposer que la flottabilité agit linéairement (par  $Gdt$ ) sur l'équation d'évolution de la vitesse et laisse les coefficients  $a$  et  $b$  du modèle initial inchangés.

(ii) En remplaçant  $a$  par  $(a + G)$  dans l'équation de FOKKER-PLANCK (2.20), on trouve l'équation de FOKKER-PLANCK associée à ce système:

$$\frac{\partial g_L}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}(wg_L) - \frac{\partial}{\partial w}((a + G)g_L) + \frac{\partial^2}{\partial w^2}\left(\frac{b^2}{2}g_L\right). \quad (3.14)$$

où  $g_L$  est la fonction de densité de distribution des particules marquées dans l'espace des phases.

(iii) En procédant comme nous l'avons fait dans le chapitre précédent pour relier les approches lagrangienne et eulérienne, l'intégration de (3.14) par rapport à  $w$  conduit à:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle c \rangle = -\frac{\partial}{\partial z}\langle wc \rangle - \left[ (a + G)g_L + \frac{\partial}{\partial w}\left(\frac{b^2}{2}g_L\right) \right]_{-\infty}^{+\infty} \quad (3.15)$$

On fait alors les mêmes hypothèses que THOMSON (1987) concernant  $g_L$ . Ainsi, on supposera que  $g_L$  tend vers 0 suffisamment rapidement lorsque  $|w|$  tend vers l'infini pour que l'intégrale en  $w$  de toute expression où intervient  $g_L$  ou une de ses dérivées, multipliée par  $a$ ,  $b$ ,  $G$ ,  $w$  ou leurs dérivées, converge. Le terme entre crochets dans (3.15) est donc nul. L'équation (3.15) devient alors:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle c \rangle = -\frac{\partial}{\partial z}\langle wc \rangle \quad (3.16)$$

De même, en multipliant l'équation (3.14) par  $w$ , on trouve en intégrant par rapport à  $w$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\langle wc \rangle &= -\frac{\partial}{\partial z}\langle w^2c \rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} (a + G)g_L dw \\ &\quad - \left[ (a + G)wg_L + w\frac{\partial}{\partial w}\left(\frac{b^2}{2}g_L\right) \right]_{-\infty}^{+\infty} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Le terme entre crochet est nul compte tenu de l'hypothèse faite précédemment concernant le comportement de  $g_L$  lorsque  $w$  tend vers l'infini. Si de plus on suppose que  $G$  est indépendant de  $w$ , (3.17) s'écrit

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle wc \rangle = -\frac{\partial}{\partial z}\langle w^2c \rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} ag_L dw + G\langle c \rangle \quad (3.18)$$

Les deux équations (3.16) et (3.18) donnent le système:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}\langle c \rangle = -\frac{\partial}{\partial z}\langle wc \rangle \\ \frac{\partial}{\partial t}\langle wc \rangle = -\frac{\partial}{\partial z}\langle w^2c \rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} ag_L dw + G\langle c \rangle \end{cases} \quad (3.19)$$

D'autre part, l'équation eulérienne de conservation de la matière s'écrit

$$\frac{dc}{dt} = \kappa \Delta c$$

et conduit, après avoir négligé la diffusivité moléculaire  $\kappa$  afin de se placer dans les hypothèses du modèle stochastique utilisé, au système:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \langle c \rangle &= -\frac{\partial}{\partial z} \langle wc \rangle \\ \frac{\partial}{\partial t} \langle wc \rangle &= -\frac{\partial}{\partial z} \langle w^2 c \rangle + \langle c \frac{dw}{dt} \rangle \end{cases} \quad (3.20)$$

Si on veut que la modélisation soit cohérente avec les équations eulériennes exactes, l'identification de (3.19) et (3.20) implique:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} ag_L dw + G \langle c \rangle = \langle c \frac{dw}{dt} \rangle \quad (3.21)$$

Faisons l'hypothèse que les variations de masse volumique sont petites devant la masse volumique  $\rho_0$  de l'écoulement porteur. Un raisonnement identique à l'analyse de BOUSSINESQ permet d'écrire l'équation de NAVIER-STOKES pour la vitesse verticale sous la forme:

$$\frac{dw}{dt} = \left( \frac{dw}{dt} \right)_{passif} - \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} g$$

où  $\rho$  est la masse volumique du fluide au point considéré. Le premier terme du membre de droite est la forme que prendrait l'accélération dans le cas du rejet d'un fluide de même densité que l'écoulement porteur.

L'équation (3.21) devient alors:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} ag_L dw + G \langle c \rangle = \langle c \left( \frac{dw}{dt} \right)_{passif} \rangle - \langle c \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} g \rangle$$

On a supposé que  $a$  gardait la forme qu'il prenait dans le cas d'un rejet passif, ce qui nous permet d'écrire:

$$\begin{cases} \int_{-\infty}^{+\infty} ag_L dw &= \langle c \left( \frac{dw}{dt} \right)_{passif} \rangle \\ G &= -\frac{1}{\langle c \rangle} \langle c \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} g \rangle \end{cases}$$

On obtient donc la formulation de  $G$  suivante:

$$G = \left( 1 - \frac{\langle c \rho \rangle}{\langle c \rangle \rho_0} \right) g \quad (3.22)$$

Nous allons alors exprimer  $\rho$  en fonction de  $c$ .

Soient alors  $c_F$ ,  $c_P$  et  $c$  les concentrations molaires volumiques respectivement globale, du fluide porteur et du fluide dense au point considéré, L'écoulement étant supposé incompressible et isotherme,  $c_F$  est constante.

On a d'autre part les deux égalités suivantes:

$$\begin{cases} c_F = c_P + c & \text{(a)} \\ \rho = c_P M_0 + c M_d & \text{(b)} \end{cases} \quad (3.23)$$

où  $M_0$  est la masse molaire du fluide porteur et  $M_d$  celle du fluide dense.

L'équation (3.23 (b)) peut s'écrire, moyennant (3.23 (a)):

$$\begin{aligned} \rho &= c_F M_0 + c(M_d - M_0) \\ &= \rho_0 + \frac{c}{c_F}(c_F M_d - c_F M_0) \\ &= \rho_0 + \frac{c}{c_F}(\rho_d - \rho_0) \end{aligned} \quad (3.24)$$

où  $\rho_0$  et  $\rho_d$  sont les masses volumiques respectives du fluide porteur pur et du fluide dense pur dans les conditions de température et de pression envisagées.

En reportant (3.24) dans (3.22), on trouve que l'expression de  $G$  en fonction de  $c$  uniquement est:

$$G = -\frac{\rho_d - \rho_0}{\rho_0} \frac{\langle c^2 \rangle}{c_F \langle c \rangle} g$$

ou encore, en décomposant  $c$  en parties moyenne et fluctuante:

$$G = -\frac{\rho_d - \rho_0}{\rho_0} \left( \frac{\langle c \rangle}{c_F} + \frac{\langle c'^2 \rangle}{c_F \langle c \rangle} \right) g$$

Si on fait l'hypothèse<sup>5</sup> que l'écart type des fluctuations de concentration est très inférieur à la moyenne, on écrira:

$$\langle c'^2 \rangle \simeq \langle c \rangle^2$$

ce qui entraîne la simplification:

$$G \simeq -\frac{\rho_d - \rho_0}{\rho_0} \frac{\langle c \rangle}{c_F} g$$

Le système d'équations stochastiques (3.13) régissant l'évolution de la position de la particule suivant la direction verticale s'écrit finalement:

$$\begin{cases} dz = w dt \\ dw = \left( a - \frac{\rho_d - \rho_0}{\rho_0} \frac{\langle c \rangle}{c_F} g \right) dt + b d\zeta \end{cases}$$

A notre connaissance, il existe peu de résultats expérimentaux concernant des rejets à faible flotabilité (où l'hypothèse de BOUSSINESQ est respectée). Le cas retenu est celui d'une source au sol dans une couche limite neutre simulée en soufflerie par BRITTER & SNYDER (1988). Néanmoins, cet article ne donne pas non plus toutes les grandeurs cinématiques nécessaires au suivi lagrangien; notamment, il ne fournit pas la moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. On

5. Le modèle présenté au chapitre 4 sera a priori capable de modéliser les fluctuations de concentration.

prendra pour cette grandeur le profil donné par FACKRELL & ROBINS (1982), bien que les conditions expérimentales de ces deux expériences ne soient pas strictement identiques.

L'épaisseur de la couche limite  $\delta$ , la vitesse extérieure  $U_e$ , la vitesse de frottement  $u_*$ , le diamètre de la source  $d_s$  et la densité du gaz rejeté valent respectivement à l'abscisse de la source:

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta = 7 \cdot 10^{-1} \text{ m} \\ U_e = 1 \text{ ms}^{-1} \\ u_* = 4.8 \cdot 10^{-2} U_e \\ z_s = 1.9 \cdot 10^{-1} \delta \\ d_s = 14.86 \cdot 10^{-2} \delta \\ \rho_d = 1.52 \rho_0 \end{array} \right.$$

Afin de pouvoir prendre en compte la vitesse d'éjection verticale qui est de  $6 \cdot 10^{-2} \text{ ms}^{-1}$  dans l'expérience, la couche limite avec rejet vertical a été simulée avec le code de calcul eulérien NATUR. Les champs cinématiques ainsi établis sont utilisés pour le suivi stochastique lagrangien.

Les observations expérimentales de BRITTER & SNYDER (1988) montrent que les rejets denses ont tendance à moins diffuser verticalement que les rejets passifs. Ainsi, on s'attend à ce que l'échelle de temps intégrale lagrangienne de vitesse et l'écart type de la vitesse verticale décroissent lorsque la masse volumique du gaz émis croît. En appelant  $T'_L$  et  $\sigma'_w$  leurs valeurs respectives dans le cas d'un rejet dense et  $T_L$  et  $\sigma_w$  leurs valeurs dans le cas passif, on propose alors de relier ces grandeurs en écrivant

$$\left\{ \begin{array}{l} T'_L = f(\rho) T_L \\ \sigma'_w = f(\rho) \sigma_w \end{array} \right.$$

où  $f$  est une fonction décroissante. On choisit de prendre

$$f(\rho) = \frac{\rho_0}{\langle \rho \rangle}$$

et on aura lors de la simulation numérique:

$$\left\{ \begin{array}{l} T'_L = \frac{\rho_0}{\langle \rho \rangle} T_L \\ \sigma'_w = \frac{\rho_0}{\langle \rho \rangle} \sigma_w \end{array} \right.$$

avec

$$\langle \rho \rangle = \rho_0 + \frac{\langle c \rangle}{c_F} (\rho_d - \rho_0) \quad (3.25)$$

Il reste donc à modéliser le terme  $\frac{\langle c \rangle}{c_F}$ .

Pour ce faire, le domaine d'étude est découpé en carrés identiques à l'intérieur desquels on compte le nombre de particules  $n_{ij}$  à chaque itération. Ce nombre est ensuite divisé par le nombre maximum  $N_{max}$  de particules dans chaque carré à l'instant initial, ce qui donne le coefficient

$$\alpha_{ij} = \frac{n_{ij}}{N_{max}}$$

Pour toute particule comprise dans la boîte ( $ij$ ), on évaluera la moyenne d'ensemble de la masse volumique par la formule

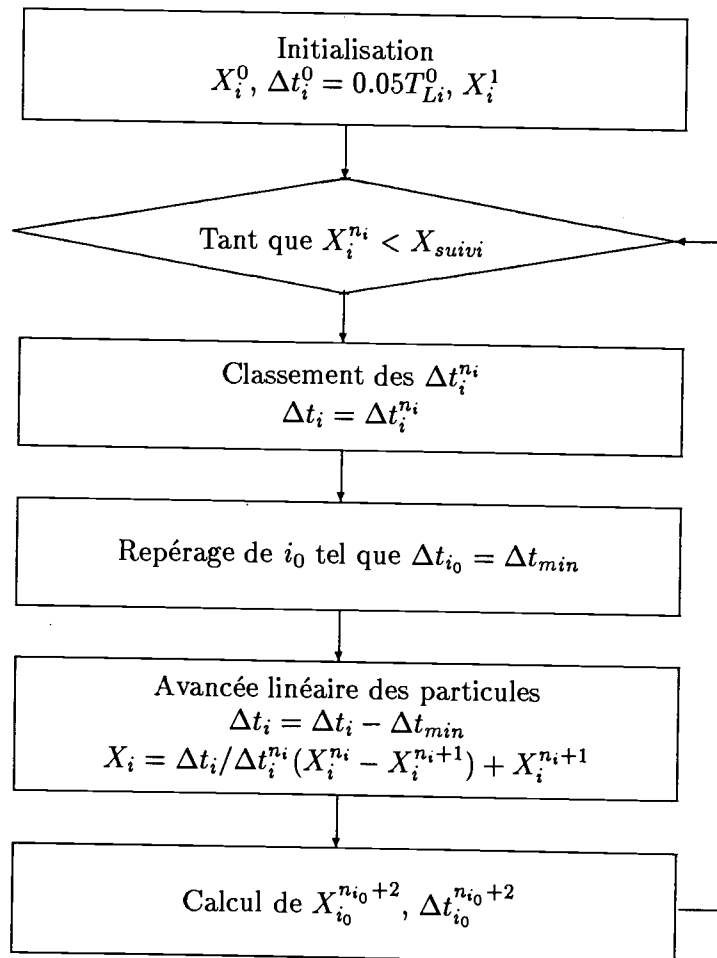
$$\langle \rho \rangle = \rho_0 + \alpha_{ij}(\rho_d - \rho_0) \quad (3.26)$$

En comparant (3.25) et (3.26), on s'aperçoit que la modélisation envisagée revient en fait à remplacer le rapport des moyennes d'ensemble des concentrations en molécules par celui des concentrations en particules.

Pour le gaz passif, chaque particule était suivie indépendamment. Ici, toutes doivent être suivies simultanément. Cela veut dire que le pas de temps sera maintenant fixé par la particule ayant la plus petite échelle de temps intégrale  $T_L$ , puisque la trajectoire de chaque particule est simulée avec une incrémentation temporelle égale à  $0.05T_L$ .

Des simulations effectuées pour un gaz passif montre que le suivi simultané est dans ce cas environ sept fois plus long que le suivi indépendant. Le temps de calcul est d'autant plus long que la densité du gaz rejeté croît. En effet, les particules ont alors tendance à se concentrer proche de la paroi où l'échelle de temps intégrale devient petite.

On utilise l'algorithme suivant:



Enfin, la condition de réflexion est légèrement différente de celle adoptée pour un gaz passif. Dans ce dernier cas, on supposait une réflexion par choc élastique: si le calcul à partir de la cote  $z_n$  rendait la

cote  $z_{n+1}$  négative, on posait alors:

$$\begin{cases} z_{n+1} = -z_{n+1} \\ w_{n+1} = -w_{n+1} \end{cases}$$

Dans le cas dense, on fait l'hypothèse après le choc que la particule repart effectivement avec une vitesse opposée à celle à laquelle elle frappe la paroi, mais que maintenant la gravité intervient (on néglige les forces visqueuses). La position  $z_{n+1}$  et la vitesse  $w_{n+1}$  deviennent alors:

$$\begin{cases} z_{n+1} = z_n - w_{n+1}\Delta t_r - \frac{\rho_d - \rho_0}{\rho_0} \frac{\langle c \rangle}{c_F} g \Delta t_r^2 \\ w_{n+1} = -w_{n+1} - \frac{\rho_d - \rho_0}{\rho_0} \frac{\langle c \rangle}{c_F} g \Delta t_r \end{cases}$$

où  $\Delta t_r$  est le temps écoulé après le choc. Il peut alors arriver que ce terme correctif, lié à la force gravitationnelle et tendant à faire descendre la particule, conduise à une cote de nouveau négative. On prendra dans ce cas  $z_{n+1} = 0$ .

Le rejet dense a été simulé en relâchant deux mille particules. Le temps de calcul sur SPARC 5 pour un suivi jusqu'à 500 mm en aval de la source est de quatre heures et quarante minutes. Les profils de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale dans la section considérée sont reportés sur les figures (3.15) et (3.16). Ils correspondent respectivement aux sections situées à 300 mm et 500 mm en aval de la source.

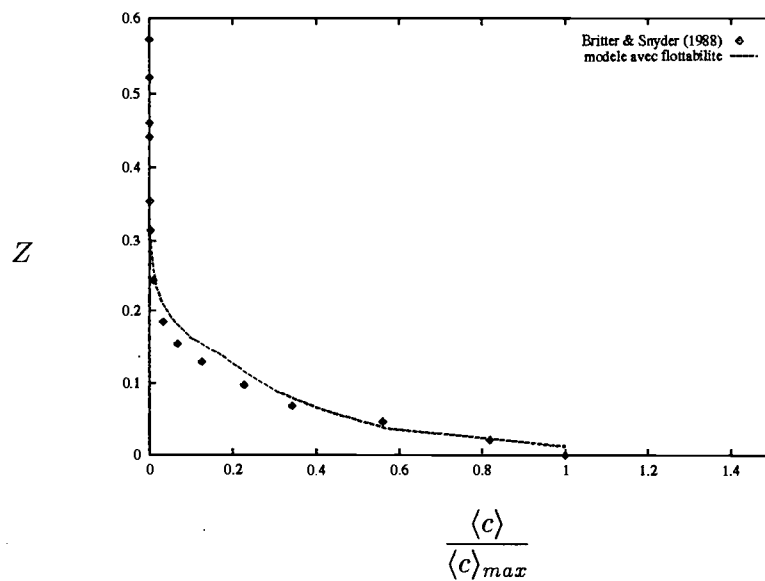


FIG. 3.15 - Profil de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à  $x = 300$  mm pour  $\rho_d = 1.52\rho_0$

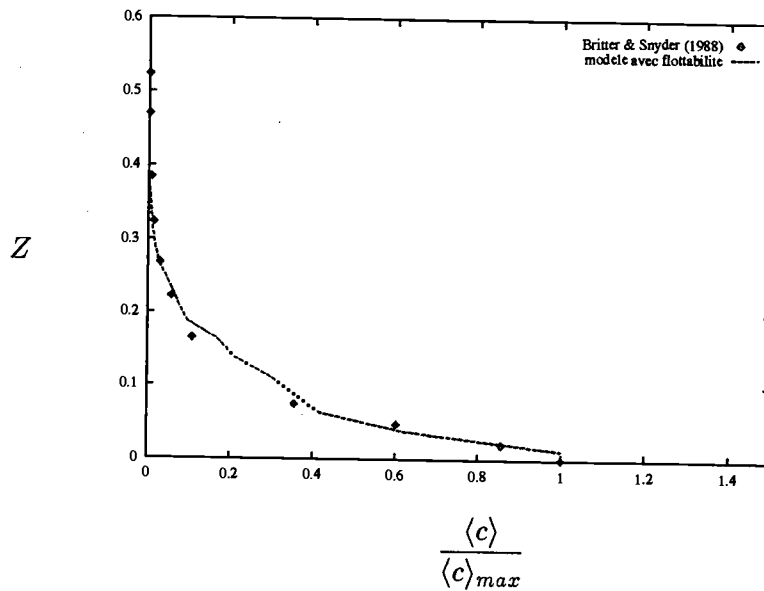


FIG. 3.16 - Profil de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à  $x = 500$  mm pour  $\rho_d = 1.52\rho_0$

Il semble donc que cette modélisation rende très bien compte des phénomènes gravitationnels. Néanmoins, elle repose sur l'hypothèse d'un rejet de densité peu différente de celle de l'écoulement porteur. Si on se place dans un cas où cette hypothèse n'est plus valable, par exemple celui de l'expérience menée par AYRAULT & SIMOENS (1993) où la densité du gaz relâché est

$$\rho_d = 2.1\rho_0$$

les profils de concentration obtenus sont nettement moins bons (FIG (3.17) et FIG (3.18)).

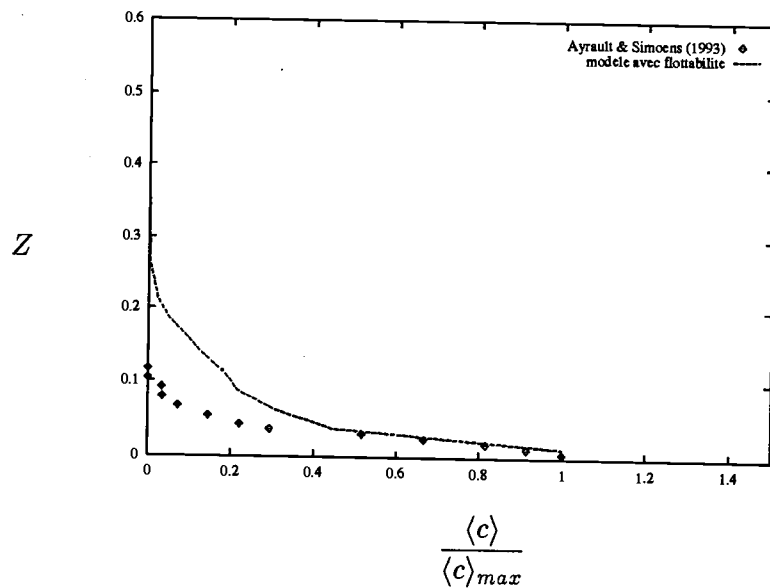


FIG. 3.17 - Profil de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à  $x = 300$  mm pour  $\rho_d = 2.1\rho_0$

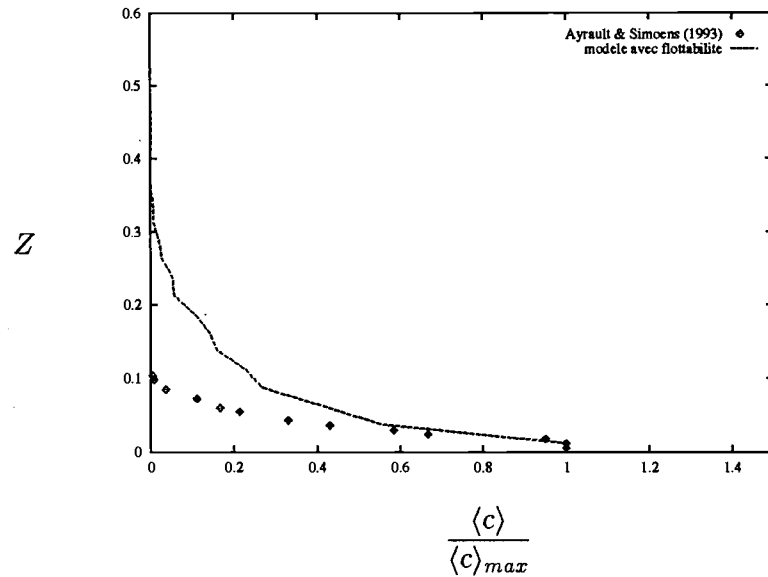


FIG. 3.18 - Profil de la concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à  $x = 500 \text{ mm}$  pour  $\rho_d = 2.1\rho_0$

Ces résultats médiocres s'expliquent par la différence de comportement d'un rejet passif par rapport à celui d'un gaz dense. En effet, dans ce dernier cas, les échanges de quantité de mouvement entre l'écoulement principal et le fluide dense seront importants. Ceci se manifeste expérimentalement par une tendance du rejet à agir sur l'écoulement principal comme un obstacle. Or, les grandeurs cinématiques obtenues ici avec le code de calcul eulérien NATUR l'ont été pour le rejet d'un gaz passif. L'élévation moyenne du panache sera par conséquent plus importante que pour un gaz dense.

La modélisation de la flottabilité donne donc des résultats satisfaisants, dès lors que la masse volumique du gaz rejeté est peu différente de celle du milieu ambiant.

D'autre part, cette étude a permis de programmer un suivi simultané qui, malgré son coût en temps de calcul, va s'imposer dans le chapitre suivant où l'on traite des écoulements réactifs (les réactions chimiques sont, au même titre que la flottabilité, un processus local dépendant de la proximité des particules).

Dans ce chapitre, nous avons présenté les différents modèles stochastiques à une particule et une échelle de temps existants. Nous avons rappelé pourquoi le modèle de THOMSON (1987) est le plus rigoureux compte tenu des hypothèses retenues. Les simulations numériques de dispersion en couche limite neutre et en couche limite convective que nous avons effectuées sont venues confirmer ce résultat.

En outre, nous avons montré que les simulations de dispersion suivant les directions verticale et transversale ou suivant la direction verticale uniquement conduisent à des profils de concentrations moyennes mises sous formes sans dimension semblables dans le plan principal contenant la source. Cette partie a donc permis de valider les résultats de simulations bidimensionnelles de certaines expériences tridimensionnelles.

Enfin, nous avons proposé un modèle stochastique prenant en compte les effets de flottabilité. Les résultats obtenus avec ce modèle sont très satisfaisants dès lors que l'hypothèse de BOUSSINESQ est vérifiée.

Nous allons dès lors tenter de construire un modèle stochastique lagrangien de suivi de particules pouvant traiter les rejets réactifs.

## Chapitre 4

# Modèle de dispersion turbulente avec réactions chimiques

### 4.1 Problème et ligne directrice de la résolution

Au cours des chapitres 2 et 3, nous nous sommes intéressés à la modélisation du déplacement de particules fluides dans un écoulement turbulent par un modèle stochastique du premier ordre sur la vitesse. Les phénomènes moléculaires étaient alors négligés.

Nous souhaitons maintenant modéliser le mélange de constituants réactifs. Les réactions chimiques étant des processus moléculaires, on s'aperçoit immédiatement que le modèle à une particule et une échelle de temps jusqu'alors utilisé leur est inadapté.

Il s'agit donc ici de proposer un nouveau modèle qui rétablit le rôle de la diffusion moléculaire et restitue éventuellement un effet des petites structures sur la dispersion turbulente. On verra notamment que ce modèle conduit à une densité de probabilité relative à la concentration relaxant vers une gaussienne en turbulence homogène isotrope stationnaire, et ceci conformément aux observations expérimentales.

Ainsi, la physique d'ensemble sera prise en charge par un ensemble de modèles élémentaires traduisant chacun des effets fondamentaux. On assemblera de fait:

- le modèle à une particule et une échelle de temps qui déterminera le parcours lagrangien;
- le modèle de diffusion qui régira l'échange de matière entre les particules;
- le processus réactionnel proprement dit.

Le modèle complet sera validé par trois cas tests de mélange réactifs en turbulence de grille.

### 4.2 Traitement des phénomènes convectif, diffusif et réactif

#### 4.2.1 Influence de la convection

Compte tenu des résultats satisfaisants obtenus dans le cas de la dispersion turbulente non réactive (chapitre précédent), la convection sera de nouveau modélisée par la résolution d'une équation stochastique du premier ordre sur la vitesse verticale suivant l'approche de THOMSON (1987) (modèle à une particule et une échelle de temps). Le système d'équations régissant le déplacement d'une particule dans un écoulement principal de vitesse moyenne  $U$  suivant l'axe  $(x'x)$  avec un modèle de dispersion

turbulente suivant la direction verticale sera donc:

$$\left\{ \begin{array}{l} dx = U dt \\ dz = w dt \\ dw = a dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \\ ag_E(z, w; t) = \frac{\partial \left( \frac{C_0}{2} g_E(z, w; t) \right)}{\partial w} + \Phi \\ \frac{\partial \Phi}{\partial w} = - \frac{\partial g_E(z, w; t)}{\partial t} - \frac{\partial (w g_E(z, w; t))}{\partial z} \end{array} \right.$$

#### 4.2.2 Influence de la diffusion

Différents modèles diffusifs ont été proposés, notamment pour résoudre l'équation d'évolution de la densité de probabilité  $p_c$  de la concentration (chapitre 1)

$$\frac{\partial p_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \vec{u} | \Gamma \rangle p_c) = - \frac{\partial}{\partial \Gamma} (\kappa \langle \Delta c | \Gamma \rangle p_c) - \frac{\partial}{\partial \Gamma} (\dot{C}(\Gamma) p_c)$$

où l'évaluation du terme diffusif est conditionnée par la concentration. On distingue en fait trois grandes familles de modélisation (POPE (1985)).

La première s'appuie sur une fermeture par un modèle déterministe du terme diffusif. Cette approche est proposée par DOPAZO (1975) et subit quelques modifications par POPE (1976), JANICKA et al. (1978) et DOPAZO (1979), ces modifications induisant en turbulence homogène isotrope une relaxation de la densité de probabilité de la concentration vers une distribution gaussienne, ceci quelle que soit la répartition initiale.

Les deux suivantes font appel à un modèle aléatoire de type MONTE-CARLO et nous intéressent tout particulièrement compte tenu de l'approche stochastique lagrangienne utilisée.

L'une envisage une équation de LANGEVIN pour modéliser l'évolution de la concentration. Cette équation, où la fluctuation aléatoire est un processus de WIENER, a dû être modifiée afin d'obtenir une concentration réaliste (positive et bornée). Ainsi, VALIÑO & DOPAZO (1990) et VALIÑO & DOPAZO (1991) proposent un modèle où la fluctuation aléatoire suit une loi binomiale dont les paramètres sont fonctions des valeurs minimale et maximale de la concentration; ils obtiennent ainsi une concentration réaliste dont la densité de probabilité en turbulence homogène isotrope stationnaire relaxe suivant une courbe proche de la gaussienne souhaitée.

L'autre s'appuie sur une interaction directe entre les particules suivies. Une telle approche fut initialement proposée par CURL (1963) pour modéliser les réacteurs où interagissent des gouttelettes de deux espèces chimiques à l'état liquide. Il ne s'agissait alors pas de diffusion, mais d'une succession de fusion-redispersion de couples de gouttelettes choisis aléatoirement. L'idée est reprise par Pope (1985) et appliquée à la diffusion de la manière suivante:

Soient  $N_p$  le nombre de particules suivies et  $T_{N_p}$  l'échelle de temps caractéristique du modèle de diffusion. Le domaine d'étude est découpé en boîtes à l'intérieur desquelles les particules sont sélectionnées aléatoirement par paires. Pour chaque paire  $(m, n)$  de particules de concentrations

respectives  $c_m(t)$  et  $c_n(t)$ , on aura:

- avec une probabilité  $\frac{\Delta t}{T_{N_p}}$ , les particules sont suffisamment proches et se mélangent:

$$c_m(t + \Delta t) = c_n(t + \Delta t) = \frac{c_m(t) + c_n(t)}{2}$$

- avec une probabilité  $1 - \frac{\Delta t}{T_{N_p}}$ , les particules sont trop éloignées et leurs concentrations restent inchangées:

$$\begin{cases} c_m(t + \Delta t) = c_m(t) \\ c_n(t + \Delta t) = c_n(t) \end{cases}$$

Il reste à déterminer  $T_{N_p}$ . Pour ce faire, on envisage l'équation d'évolution de la variance de la concentration en turbulence homogène. Elle s'écrit:

$$\frac{1}{2} \frac{d\langle c'^2 \rangle}{dt} = -\varepsilon_c$$

où

$$\varepsilon_c = \left( \frac{\kappa}{\rho} \right) \langle \vec{\nabla} c' \cdot \vec{\nabla} c' \rangle$$

est le taux de dissipation de la variance de la concentration.

Par analogie à l'échelle de temps de décroissance des fluctuations de vitesse

$$T = \frac{k}{\varepsilon} \quad (4.1)$$

on définit l'échelle de temps de décroissance des fluctuations de concentration

$$T_{dif} = \frac{1}{2} \frac{\langle c'^2 \rangle}{\varepsilon_c}$$

Si l'on suppose  $T$  et  $T_{dif}$  proportionnelles (SPALDING (1971)), soit

$$T_{dif} = \frac{T}{C_{dif}}$$

on obtient:

$$\frac{d\langle c'^2 \rangle}{dt} = -\frac{C_{dif}}{T} \langle c'^2 \rangle$$

POPE (1985) montre alors que ce modèle conduit à la même équation d'évolution de la variance pour

$$T_{N_p} = \frac{T_{dif}}{N_p}$$

POPE propose en outre comme valeur empirique

$$C_{dif} = 2$$

La densité de probabilité de la concentration obtenue avec ce modèle relaxe vers une courbe en forme de cloche, différente d'une gaussienne. En particulier, les moments d'ordres supérieurs à trois sont infinis. POPE (1982) propose alors un modèle stochastique amélioré conduisant à une densité de probabilité se rapprochant d'une gaussienne et donnant des moments finis. Il est semblable à celui de CURL, mais la probabilité de sélection des paires de particules dépend maintenant d'un "âge" et d'une "espérance" de vie des particules. Le modèle est relativement lourd et difficilement compréhensible d'un point de vue physique.

Le principal inconvénient de ces différents modèles est leur caractère discontinu en temps, notamment lorsque l'on souhaite traiter des réactions chimiques. HSU & CHEN (1991) proposent alors de remédier à ce problème de la manière suivante. Le domaine d'étude est toujours découpé en boîtes et les particules sélectionnées aléatoirement par paires, mais chaque paire participe maintenant à la diffusion suivant le système d'équations d'évolution:

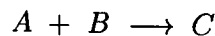
$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \frac{\xi}{T_{dif}} (c_n(t) - c_m(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \frac{\xi}{T_{dif}} (c_m(t) - c_n(t)) \end{cases}$$

où  $\xi$  est une variable aléatoire équiprobable sur  $[0, 1]$ .

Ce modèle conduit à une densité de probabilité relaxant vers une courbe proche d'une gaussienne et les moments d'ordres quatre et six, s'ils semblent ne pas converger, demeurent finis et proches de ceux d'une gaussienne. Compte tenu de l'avantage de ce modèle par rapport aux précédents, à savoir sa continuité en temps qui le rend très pratique dans le cas de réactions chimiques, une étude plus systématique de la densité de probabilité de la concentration va être présentée dans le paragraphe 4.3. Cela permettra de vérifier par des arguments théoriques si celle relative à ce modèle relaxe bien vers une gaussienne.

### 4.2.3 Influence de la réaction chimique

Les concentrations des différents constituants chimiques peuvent également évoluer suite à des réactions chimiques. Envisageons pour fixer les idées une réaction réversible du second ordre supposée isotherme:



Soient  $k_1$  la constante de réaction et  $k_2$  celle de la réaction inverse ( $k_1$  et  $k_2$  étant des fonctions de la température, l'hypothèse d'écoulement isotherme nous permet d'affirmer, en supposant en outre la répartition des réactifs localement homogène, qu'elles sont bien constantes). Les variations des espèces  $A$ ,  $B$  et  $C$  dues à la réaction chimique s'écrivent:

$$\begin{cases} \frac{dc_A}{dt} = -k_1 c_A c_B + k_2 c_C \\ \frac{dc_B}{dt} = -k_1 c_A c_B + k_2 c_C \\ \frac{dc_C}{dt} = k_1 c_A c_B - k_2 c_C \end{cases}$$

où  $c_A$ ,  $c_B$  et  $c_C$  sont les concentrations instantanées des constituants  $A$ ,  $B$  et  $C$  respectivement. Ces équations d'évolution seront résolues au niveau de chaque particule. Cette démarche sera identique quel que soit l'ordre de la réaction.

### 4.3 Etude de la densité de probabilité de la concentration relative au modèle de diffusion de Hsu & Chen (1991)

Nous présentons ici l'étude d'une famille de modèles de diffusion continus en temps à laquelle appartient le modèle de Hsu & Chen.

Cette partie va nous permettre de construire un modèle de diffusion très satisfaisant d'un point de vue physique, puisque la densité de probabilité de la concentration déduite de celui-ci relaxera vers une gaussienne en turbulence homogène isotrope stationnaire, conformément aux observations expérimentales.

#### 4.3.1 Etude théorique

On considère un ensemble de  $N_p$  particules dans une turbulence homogène isotrope stationnaire. A chaque instant, les particules sont sélectionnées aléatoirement par paires; on suppose alors que les concentrations  $c_m(t)$  et  $c_n(t)$  de chaque paire  $(m, n)$  évoluent simultanément suivant le système d'équations différentielles:

$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \psi(c_n(t) - c_m(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \psi(c_m(t) - c_n(t)) \end{cases} \quad (4.2)$$

où  $\psi$  est une variable quelconque (égale à  $\xi/T_{dif}$  avec  $\xi$  variable aléatoire équiprobable sur  $[0, 1]$  dans le modèle de Hsu & Chen). Soit  $p_c(c; t)$  la densité de probabilité (d.d.p.) de l'événement "la concentration vaut  $c$  à l'instant  $t$ ":

$$p_c(c; t) = Proba(c \leq \Gamma(t) < c + dc)$$

On souhaite déterminer les conditions que doit satisfaire la variable  $\psi$  pour que cette densité de probabilité tende asymptotiquement vers une gaussienne.

Nous allons dans un premier temps déterminer l'équation d'évolution de  $p_c$ , puis chercher s'il existe une solution de similitude  $g$  qui soit une gaussienne et qui vérifie cette équation d'évolution. Ceci va faire apparaître l'influence de la variable aléatoire  $\psi$  sur  $g$ , et donc sur l'écart à une gaussienne.

#### Détermination de l'équation d'évolution de la d.d.p. de la concentration pour les modèles continu et discret

Pendant un intervalle de temps infinitésimal  $\tau$ , en supposant le nombre de particules  $N_p$  infini, la densité de probabilité relative à la formulation discrète du modèle de diffusion (4.2) continu en temps évolue suivant<sup>1</sup> (POPE (1982)):

$$\begin{aligned} p_c(c; t + \tau) = & p_c(c; t) + \frac{1}{2} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) p_c(c_n; t) p_r(\psi; t) \{ \delta(c - c_m(t + \tau)) - \delta(c - c_m(t)) \\ & + \delta(c - c_n(t + \tau)) - \delta(c - c_n(t)) \} dc_n dc_m d\psi \end{aligned} \quad (4.3)$$

1.  $\delta$  est la fonction classiquement utilisée en théorie des distributions, et vérifiant notamment

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(n)}(x) f(x) dx = (-1)^n f^{(n)}(0)$$

où  $f^{(n)}$  est la dérivée  $n^{ième}$  de la fonction  $f$ . On utilisera d'autre part les notations classiques  $\delta'$  pour  $\delta^{(1)}$  et  $\delta''$  pour  $\delta^{(2)}$ .

où  $p_r$  est la d.d.p. relative à la variable  $\psi$ . L'expression (4.3) est l'équation intégrale exacte de la d.d.p. relative à la concentration dont l'évolution est régie par l'expression discrète du modèle continu (4.2). On va établir l'approximation différentielle de (4.3) en effectuant son développement limité en  $\tau$  à l'ordre deux.

Le développement de  $c_m(t + \tau)$  à l'ordre deux en  $\tau$  s'écrit:

$$\begin{aligned} c_m(t + \tau) &= c_m(t) + \tau \frac{dc_m}{dt}(t) + \frac{\tau^2}{2} \frac{d^2c_m}{dt^2}(t) + \mathcal{O}(\tau^3) \\ &= c_m + \tau \psi (c_n - c_m) + \frac{\tau^2}{2} \frac{d}{dt} (\psi (c_n - c_m)) + \mathcal{O}(\tau^3) \\ &= c_m + \tau \psi (c_n - c_m) + \frac{\tau^2}{2} \frac{d\psi}{dt} (c_n - c_m) + \frac{\tau^2}{2} \psi \left( \frac{dc_n}{dt} - \frac{dc_m}{dt} \right) + \mathcal{O}(\tau^3) \\ &= c_m + \tau \left[ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right] (c_n - c_m) + \mathcal{O}(\tau^3) \end{aligned}$$

Le même raisonnement appliqué à  $c_n(t + \tau)$  conduit à l'égalité

$$c_n(t + \tau) = c_n + \tau \left[ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right] (c_m - c_n) + \mathcal{O}(\tau^3)$$

Reporter ces expressions de  $c_m(t + \tau)$  et  $c_n(t + \tau)$  dans  $\delta(c - c_m(t + \tau))$  et  $\delta(c - c_n(t + \tau))$  respectivement permet d'écrire

$$\delta(c - c_m(t + \tau)) = \delta \left( (c - c_m) - \tau \left[ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right] (c_n - c_m) + \mathcal{O}(\tau^3) \right)$$

et

$$\delta(c - c_n(t + \tau)) = \delta \left( (c - c_n) + \tau \left[ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right] (c_n - c_m) + \mathcal{O}(\tau^3) \right)$$

En effectuant un développement limité de  $\delta(c - c_m(t + \tau))$  au voisinage de  $(c - c_m(t))$ , on obtient alors:

$$\begin{aligned} \delta(c - c_m(t + \tau)) &= \delta \left( (c - c_m) - \tau \left[ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right] (c_n - c_m) + \mathcal{O}(\tau^3) \right) \\ &= \delta(c - c_m) - \delta'(c - c_m) \tau \left[ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right] (c_n - c_m) \\ &\quad + \frac{1}{2} \delta''(c - c_m) (\tau \psi (c_n - c_m))^2 + \mathcal{O}(\tau^3) \end{aligned} \tag{4.4}$$

et de même:

$$\begin{aligned} \delta(c - c_n(t + \tau)) &= \delta \left( (c - c_n) + \tau \left[ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right] (c_n - c_m) + \mathcal{O}(\tau^3) \right) \\ &= \delta(c - c_n) + \delta'(c - c_n) \tau \left[ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right] (c_n - c_m) \\ &\quad + \frac{1}{2} \delta''(c - c_n) (\tau \psi (c_n - c_m))^2 + \mathcal{O}(\tau^3) \end{aligned} \tag{4.5}$$

D'autre part, le développement limité à l'ordre deux en  $\tau$  de  $p_c(c; t + \tau)$  s'écrit:

$$p_c(c; t + \tau) = p_c(c; t) + \tau \frac{\partial p_c}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 p_c}{\partial t^2} + \mathcal{O}(\tau^3) \quad (4.6)$$

En reportant (4.4), (4.5) et (4.6) dans (4.7), on obtient:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial p_c}{\partial t} \tau + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p_c}{\partial t^2} \tau^2 = \\ & -\frac{1}{2} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) p_c(c_n; t) p_r(\psi; t) \left[ \delta'(c - c_m) - \delta'(c - c_n) \right] \\ & \quad \left[ \left\{ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right\} \tau (c_n - c_m) \right] dc_n dc_m d\psi \\ & + \frac{1}{4} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) p_c(c_n; t) p_r(\psi; t) \left[ \delta''(c - c_m) + \delta''(c - c_n) \right] \\ & \quad \left[ \left( \psi \tau (c_n - c_m) \right)^2 \right] dc_n dc_m d\psi \\ & + \mathcal{O}(\tau^3) \end{aligned} \quad (4.7)$$

En supposant que la variable aléatoire  $\psi$  et la concentration sont statistiquement indépendantes, on peut écrire:

$$\begin{aligned} & \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) p_c(c_n; t) p_r(\psi; t) \delta'(c - c_m) \left[ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right] \tau (c_n - c_m) dc_n dc_m d\psi \\ & = \left[ \langle \psi \rangle + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\langle \psi \rangle}{dt} - \langle \psi^2 \rangle \right) \right] \tau \int \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) p_c(c_n; t) \delta'(c - c_m) (c_n - c_m) dc_n dc_m \\ & = \left[ \langle \psi \rangle + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\langle \psi \rangle}{dt} - \langle \psi^2 \rangle \right) \right] \tau \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) \delta'(c - c_m) (\langle c \rangle - c_m) dc_m \\ & = \left[ \langle \psi \rangle + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\langle \psi \rangle}{dt} - \langle \psi^2 \rangle \right) \right] \tau \frac{\partial}{\partial c} ((\langle c \rangle - c) p_c(c; t)) \end{aligned} \quad (4.8)$$

et

$$\begin{aligned} & \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) p_c(c_n; t) p_r(\psi; t) \delta'(c - c_n) \left[ \psi + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\psi}{dt} - \psi^2 \right) \right] \tau (c_n - c_m) dc_n dc_m d\psi \\ & = \left[ \langle \psi \rangle + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\langle \psi \rangle}{dt} - \langle \psi^2 \rangle \right) \right] \tau \frac{\partial}{\partial c} ((c - \langle c \rangle) p_c(c; t)) \end{aligned} \quad (4.9)$$

De même, on a:

$$\begin{aligned}
& \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) p_c(c_n; t) p_r(\psi; t) \delta''(c - c_m) (\psi \tau (c_n - c_m))^2 dc_n dc_m d\psi \\
&= \langle \psi^2 \rangle \tau^2 \int \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) p_c(c_n; t) \delta''(c - c_m) (c_n - c_m)^2 dc_n dc_m \\
&= \langle \psi^2 \rangle \tau^2 \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) \delta''(c - c_m) [\langle c^2 \rangle - 2\langle c \rangle c_m + c_m^2] dc_m \\
&= \langle \psi^2 \rangle \tau^2 \frac{\partial^2}{\partial c^2} \left( [\langle c^2 \rangle - 2\langle c \rangle c + c^2] p_c(c; t) \right) \\
&= \langle \psi^2 \rangle \tau^2 \frac{\partial^2}{\partial c^2} \left( [(c - \langle c \rangle)^2 + \sigma_c^2] p_c(c; t) \right) \tag{4.10}
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
& \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} p_c(c_m; t) p_c(c_n; t) p_r(\psi; t) \delta''(c - c_n) (\psi \tau (c_n - c_m))^2 dc_n dc_m d\psi \\
&= \langle \psi^2 \rangle \tau^2 \frac{\partial^2}{\partial c^2} \left( [(c - \langle c \rangle)^2 + \sigma_c^2] p_c(c; t) \right) \tag{4.11}
\end{aligned}$$

Les expressions (4.8), (4.9), (4.10) et (4.11) reportées dans (4.7) conduisent à:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial p_c}{\partial t} \tau + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p_c}{\partial t^2} \tau^2 &= \left[ \langle \psi \rangle + \tau \left( \frac{1}{2} \frac{d\langle \psi \rangle}{dt} - \langle \psi^2 \rangle \right) \right] \tau \frac{\partial}{\partial c} \left( (c - \langle c \rangle) p_c \right) \\
&\quad + \frac{1}{2} \langle \psi^2 \rangle \tau^2 \frac{\partial^2}{\partial c^2} \left( [(c - \langle c \rangle)^2 + \sigma_c^2] p_c \right) + \mathcal{O}(\tau^3) \tag{4.12}
\end{aligned}$$

En identifiant les termes d'ordre un en  $\tau$ , on peut écrire:

$$\frac{\partial p_c}{\partial t} = \langle \psi \rangle \frac{\partial}{\partial c} \left( (c - \langle c \rangle) p_c \right) \tag{4.13}$$

C'est l'équation d'évolution exacte de la d.d.p. de la concentration donnée par le modèle continu (4.2), c'est-à-dire pour  $\tau$  égal à 0. On dérive alors cette équation par rapport au temps, et on trouve:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 p_c}{\partial t^2} &= \frac{d\langle \psi \rangle}{dt} \frac{\partial}{\partial c} \left( (c - \langle c \rangle) p_c \right) + \langle \psi \rangle \frac{\partial}{\partial c} \left( (c - \langle c \rangle) \frac{\partial p_c}{\partial t} \right) \\
&= \frac{d\langle \psi \rangle}{dt} \frac{\partial}{\partial c} \left( (c - \langle c \rangle) p_c \right) + \langle \psi \rangle \frac{\partial}{\partial c} \left( (c - \langle c \rangle) \langle \psi \rangle \frac{\partial}{\partial c} \left( (c - \langle c \rangle) p_c \right) \right) \\
&= \frac{d\langle \psi \rangle}{dt} \frac{\partial}{\partial c} \left( (c - \langle c \rangle) p_c \right) + \langle \psi \rangle^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial c^2} \left( (c - \langle c \rangle)^2 p_c \right) - \frac{\partial}{\partial c} \left( (c - \langle c \rangle) p_c \right) \right) \tag{4.14}
\end{aligned}$$

En reportant (4.14) dans (4.12), on obtient l'expression au premier ordre en temps de la dérivée première par rapport au temps de  $p_c$ :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial p_c}{\partial t} &= \left[ \langle \psi \rangle \left( 1 + \frac{\tau \langle \psi \rangle}{2} \right) - \tau \langle \psi^2 \rangle \right] \frac{\partial}{\partial c} \left( (c - \langle c \rangle) p_c \right) \\
&\quad + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2}{\partial c^2} \left( (\sigma_\psi^2 (c - \langle c \rangle)^2 + \langle \psi^2 \rangle \sigma_c^2) p_c \right) + \mathcal{O}(\tau^2) \tag{4.15}
\end{aligned}$$

où  $\sigma_\psi$  est l'écart type de la variable  $\psi$ . Cette équation est la formulation différentielle précise au second ordre de l'équation (4.3).

**Remarques fondamentales:**

- Il est intéressant de noter que, d'après (4.13), le modèle continu (4.2) conduit à une fermeture égale à celle du modèle L.M.S.E. (Linear Mean Square Estimation) (DOPAZO & O'BRIEN (1974)).
- L'incapacité de ce type de fermeture à modifier la forme de la d.d.p. (VALIÑO & DOPAZO (1990)) disparaîtra dès que le modèle (4.2) sera discrétisé. En effet, dès que le pas en temps  $\tau$  de la discrétisation est différent de 0, l'équation d'évolution de la d.d.p. ne sera plus (4.13), mais deviendra (4.15). En d'autres termes, la formulation purement convective du membre de droite de (4.13) dans l'espace des concentrations va être remplacé par un terme convectif plus un terme diffusif (le membre de droite de (4.15)). Le caractère parabolique de l'équation d'évolution de la d.d.p. de la concentration donnée par le modèle discret laisse prévoir une solution de similitude lorsque  $t$  tend vers l'infini.
- La solution de similitude asymptotique de l'équation (4.15) (sans les termes en  $\mathcal{O}(\tau^2)$ ) ne dépendra pas de  $\tau$  pour  $\tau$  différent de 0 (et ne correspondra pas à la solution asymptotique de l'équation hyperbolique (4.13)). Néanmoins, le temps caractéristique de convergence sera une fonction de  $\tau$  et de la variable  $\psi$ .

On déduit de (4.15) les équations d'évolution de  $\langle c \rangle$  et  $\sigma_c$ . Ainsi, multiplier (4.15) par  $c$ , puis par  $c^2$ , conduit à, moyennant quelques transformations immédiates sur les dérivées:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle cp_c \rangle}{\partial t} &= \left[ \langle \psi \rangle \left( 1 + \frac{\tau \langle \psi \rangle}{2} \right) - \tau \langle \psi^2 \rangle \right] \left[ \frac{\partial}{\partial c} (c(c - \langle c \rangle) p_c) - (c - \langle c \rangle) p_c \right] \\ &+ \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial c} \left[ c \frac{\partial}{\partial c} \left( \left[ \sigma_\psi^2 (c - \langle c \rangle)^2 + \langle \psi^2 \rangle \sigma_c^2 \right] p_c \right) - \left( \sigma_\psi^2 (c - \langle c \rangle)^2 + \langle \psi^2 \rangle \sigma_c^2 \right) p_c \right] \\ &+ \mathcal{O}(\tau^2) \end{aligned} \quad (4.16)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle c^2 p_c \rangle}{\partial t} &= \langle \psi \rangle \left( 1 + \frac{\tau \langle \psi \rangle}{2} \right) \left[ \frac{\partial}{\partial c} (c^2 (c - \langle c \rangle) p_c) - 2c(c - \langle c \rangle) p_c \right] \\ &+ \frac{\tau}{2} \frac{\partial}{\partial c} \left[ c^2 \frac{\partial}{\partial c} \left( \left[ \sigma_\psi^2 (c - \langle c \rangle)^2 + \langle \psi^2 \rangle \sigma_c^2 \right] p_c \right) - 2c \left( \sigma_\psi^2 (c - \langle c \rangle)^2 + \langle \psi^2 \rangle \sigma_c^2 \right) p_c \right] \\ &+ \tau \left( \sigma_\psi^2 (c - \langle c \rangle)^2 + \langle \psi^2 \rangle \sigma_c^2 \right) p_c + \mathcal{O}(\tau^2) \end{aligned} \quad (4.17)$$

L'intégration de (4.16) sur  $] - \infty, +\infty[$  conduit directement à:

$$\frac{d\langle c \rangle}{dt} = 0 + \mathcal{O}(\tau^2)$$

ce qui, moyennant l'intégration de (4.17) sur  $] - \infty, +\infty[$ , donne:

$$\frac{d\sigma_c^2}{dt} = -2 \left[ \langle \psi \rangle - \tau (\sigma_\psi^2 + \langle \psi^2 \rangle) \right] \sigma_c^2 + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (4.18)$$

### Obtention d'une solution de similitude

Cette démarche est semblable à celle proposée par SABELNIKOV (1995) dans le cas d'une turbulence de grille en présence d'un gradient moyen de concentration.

Afin de faire apparaître une solution de similitude de la d.d.p., écrivons  $p_c$  sous la forme

$$p_c(c; t) = \frac{1}{\sigma_c} g(s) \quad (4.19)$$

où

$$s = \frac{c - \langle c \rangle}{\sigma_c}$$

avec  $\langle c \rangle$  et  $\sigma_c$  respectivement la moyenne d'ensemble et l'écart type de la concentration.

Moyennant la transformation (4.19), l'équation différentielle (4.15) devient, en notant  $f'$  la dérivée de toute fonction  $f$  de  $s$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left( \frac{g}{\sigma_c} \right)}{\partial t} &= \left[ \langle \psi \rangle \left( 1 + \frac{\tau \langle \psi \rangle}{2} \right) - \tau \langle \psi^2 \rangle \right] \frac{1}{\sigma_c} (sg)' \\ &+ \frac{\tau}{2} \left( \sigma_\psi^2 \frac{1}{\sigma_c} (s^2 g)'' + \langle \psi^2 \rangle \frac{1}{\sigma_c} g'' \right) + \mathcal{O}(\tau^2) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Or

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left( \frac{g}{\sigma_c} \right)}{\partial t} &= -\frac{1}{\sigma_c^2} \frac{d\sigma_c}{dt} g + \frac{1}{\sigma_c} \frac{d\sigma_c}{dt} \frac{ds}{d\sigma_c} g' \\ &= -\frac{1}{\sigma_c^2} \frac{d\sigma_c}{dt} (sg)' \end{aligned}$$

Ceci permet d'écrire (4.20), après avoir regroupé les termes dans le premier membre, sous la forme:

$$\left\{ \frac{1}{2} \frac{d\sigma_c^2}{dt} + \left[ \langle \psi \rangle \left( 1 + \frac{\langle \psi \rangle \tau}{2} \right) - \tau \langle \psi^2 \rangle \right] \sigma_c^2 \right\} (sg)' + \frac{\tau}{2} \sigma_c^2 \left( \sigma_\psi^2 s^2 g + \langle \psi^2 \rangle g \right)'' = \mathcal{O}(\tau^2)$$

En utilisant (4.18), l'équation vérifiée par la solution de similitude devient:

$$\left( \alpha_\psi s^2 g + (1 - \alpha_\psi) g \right)'' + (sg)' = 0 + \mathcal{O}(\tau) \quad (4.21)$$

où

$$\begin{aligned} \alpha_\psi &= \frac{\sigma_\psi^2}{\sigma_\psi^2 + \langle \psi^2 \rangle} \\ &= \frac{\sigma_\psi^2}{2\sigma_\psi^2 + \langle \psi \rangle^2} \\ &= \frac{1}{2 + \frac{\langle \psi \rangle^2}{\sigma_\psi^2}} \end{aligned}$$

$\alpha_\psi$  appartient clairement à l'intervalle  $\left[ 0, \frac{1}{2} \right]$ .

Lorsque  $\tau$  tend vers 0 l'équation (4.21) devient

$$(\alpha_\psi s^2 g + (1 - \alpha_\psi)g)'' + (sg)' = 0 \quad (4.22)$$

Etudions les solutions de cette équation:

• **Premier cas:**  $\alpha_\psi = 0$ , soit  $\sigma_\psi = 0$

L'équation d'évolution de  $g$  devient:

$$g'' + (sg)' = 0$$

dont la primitive est:

$$g' + sg = C$$

avec  $C$  constante. Si  $C$  n'était pas nulle, l'intégration sur  $] -\infty, +\infty[$  de cette équation conduirait à:

$$g \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \langle s \rangle = C \int_{-\infty}^{+\infty} ds$$

Le terme de droite serait infini et celui de gauche fini, ce qui est impossible. Ceci impose:

$$C = 0$$

et finalement

$$g' + sg = 0$$

Par conséquent, la fonction  $g$  est une gaussienne:

$$g(s) = g_0 e^{-\frac{s^2}{2}}$$

L'intégrale de  $p_c$  sur  $] -\infty, +\infty[$  devant être égale à 1, on trouve en utilisant (4.19):

$$g(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{s^2}{2}}$$

On obtient donc le résultat suivant:

si la variable  $\psi$  est telle que  $\sigma_\psi = 0$ , soit en d'autres termes si  $\psi$  est constante sauf sur un ensemble de mesure nulle, le modèle continu s'écrit

$$\begin{cases} \frac{dc_m}{dt} = \psi(c_n - c_m) \\ \frac{dc_n}{dt} = \psi(c_m - c_n) \end{cases}$$

et la d.d.p. de la concentration donnée par la formulation discrète de ce modèle admet une gaussienne comme solution de similitude.

- **Second cas:**  $\alpha_\psi \neq 0$ , soit  $\sigma_\psi \neq 0$

L'équation d'évolution de  $g$  s'écrit

$$(\alpha_\psi s^2 g + (1 - \alpha_\psi)g)'' + (sg)' = 0$$

et admet pour primitive

$$(\alpha_\psi s^2 g + (1 - \alpha_\psi)g)' + sg = C$$

où  $C$  est une constante; on montre comme dans le premier cas que cette constante est nulle, ce qui donne l'équation différentielle suivante:

$$(\alpha_\psi s^2 g + (1 - \alpha_\psi)g)' + sg = 0$$

soit:

$$\left(s^2 + \frac{1 - \alpha_\psi}{\alpha_\psi}\right) g' + \frac{2\alpha_\psi + 1}{\alpha_\psi} sg = 0$$

Cette équation peut encore s'écrire:

$$\frac{g'}{g} = -\frac{2\alpha_\psi + 1}{\alpha_\psi} \frac{s}{\left(s^2 + \frac{1 - \alpha_\psi}{\alpha_\psi}\right)}$$

L'intégration de cette dernière conduit à l'égalité:

$$\ln\left(\frac{g}{g_0}\right) = -\frac{2\alpha_\psi + 1}{2\alpha_\psi} \ln\left(s^2 + \frac{1 - \alpha_\psi}{\alpha_\psi}\right)$$

ce qui donne finalement la solution:

$$\begin{aligned} g &= g_0 \left(s^2 + \frac{1 - \alpha_\psi}{\alpha_\psi}\right)^{-\left(1 + \frac{1}{2\alpha_\psi}\right)} \\ &= g_0 \left(s^2 + \frac{\langle\psi^2\rangle}{\sigma_\psi^2}\right)^{-\left(1 + \frac{\sigma_\psi^2 + \langle\psi^2\rangle}{2\sigma_\psi^2}\right)} \end{aligned}$$

Le moment relatif d'ordre  $k$  étant défini par:

$$\begin{aligned} M_k &= \int_{-\infty}^{+\infty} (c - \langle c \rangle)^k p_c(c; t) dc \\ &= \sigma_c^k \int_{-\infty}^{+\infty} s^k g(s) ds \\ &= \sigma_c^k g_0 \int_{-\infty}^{+\infty} s^k \left(s^2 + \frac{1 - \alpha_\psi}{\alpha_\psi}\right)^{-\left(1 + \frac{1}{2\alpha_\psi}\right)} ds \end{aligned}$$

il sera fini pour

$$k - 2 - \frac{1}{\alpha_\psi} < -1$$

soit:

$$k < \frac{1 + \alpha_\psi}{\alpha_\psi}$$

En particulier, pour le modèle de HSU & CHEN on a<sup>2</sup>:

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \psi^{HC} \rangle = \frac{1}{2T_{dif}} \\ \langle \psi^{HC^2} \rangle = \frac{1}{3T_{dif}^2} \\ \sigma_{\psi^{HC}}^2 = \frac{1}{12T_{dif}^2} \end{array} \right.$$

ce qui donne:

$$\alpha_\psi^{HC} = \frac{1}{5}$$

donc:

$$g^{HC} = g_0^{HC} (s^2 + 4)^{-7/2}$$

La normalisation conduit finalement à:

$$g^{HC} = 60(s^2 + 4)^{-7/2}$$

Le moment d'ordre  $k$  sera fini pour:

$$k^{HC} < 6$$

On trouve:

$$\left\{ \begin{array}{l} M_{2k+1}^{HC} = 0 \\ M_2^{HC} = \sigma_c^2 \\ M_4^{HC} = 6\sigma_c^4 \\ M_{2k}^{HC} = \infty \quad k \geq 3 \end{array} \right.$$

Les coefficients d'asymétrie et d'aplatissement sont donc:

$$\left\{ \begin{array}{l} S^{HC} = 0 \\ K^{HC} = 6 \end{array} \right.$$

---

2. L'indice  $HC$  signifie "relatif au modèle de HSU & CHEN.

**En conclusion:** soit le modèle de diffusion

$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \psi(c_n(t) - c_m(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \psi(c_m(t) - c_n(t)) \end{cases}$$

où  $c_m(t)$  et  $c_n(t)$  sont les concentrations instantanées des particules  $m$  et  $n$  tirées au hasard, réalisé sur un nombre infini de particules. On vient de montrer que la forme discrète de ce modèle conduira à une densité de probabilité de la concentration relaxant vers une gaussienne en turbulence homogène isotrope stationnaire si et seulement si  $\psi$  est constante sauf sur un ensemble de mesure nulle. En particulier, le modèle de HSU & CHEN (1991) pour lequel  $\psi$  est la variable aléatoire équiprobable sur l'intervalle  $[0 : 1]$  ne vérifiera pas cette propriété; la concentration dont l'évolution est régie par ce modèle a des coefficients d'asymétrie et d'aplatissement qui valent respectivement 0 et 6; ses moments d'ordres impairs sont tous nuls et ses moments d'ordres pairs et supérieurs à quatre sont infinis.

### 4.3.2 Validation numérique

Afin de visualiser ces résultats théoriques, on simule numériquement le mélange de particules en turbulence homogène isotrope stationnaire en partant de la densité de probabilité de concentration

$$p_c(c; 0) = \frac{1}{2} (\delta(c + 1) + \delta(c - 1))$$

La concentration initiale en un point vaut ainsi  $(-1)$  ou  $1$  avec la même probabilité.

Pour mettre en évidence les différentes grandeurs physiques intervenant dans le modèle, écrivons le système régissant l'évolution des concentrations  $c_m(t)$  et  $c_n(t)$  de chaque paire  $(m, n)$  de particules

$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \psi(c_n(t) - c_m(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \psi(c_m(t) - c_n(t)) \end{cases}$$

sous la forme

$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \frac{\psi}{T_{dif}} (c_n(t) - c_m(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \frac{\psi}{T_{dif}} (c_m(t) - c_n(t)) \end{cases}$$

où  $T_{dif}$  est l'échelle de temps de décroissance des fluctuations de concentration. En supposant  $T_{dif}$  proportionnelle à l'échelle de temps de décroissance des fluctuations de vitesse (SPALDING (1971))

$$T_{dif} = \frac{T}{C_{dif}}$$

et en prenant  $C_{dif}$  égale à 2 comme le propose POPE (1985), le modèle s'écrit

$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \frac{2\psi}{T} (c_n(t) - c_m(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \frac{2\psi}{T} (c_m(t) - c_n(t)) \end{cases}$$

On teste alors le cas où  $\psi$  est une variable aléatoire équiprobable sur  $[0, 1]$  afin de parachever l'étude du modèle de HSU & CHEN (1991), et celui où  $\psi$  est une constante pour vérifier que dans ce cas la densité de probabilité évolue bien vers une gaussienne. On a choisi de prendre cette constante égale à  $\frac{1}{2}$  qui est la valeur moyenne de la variable aléatoire utilisée par HSU & CHEN.

On suit l'évolution du mélange de 20000 particules, 10000 ayant une concentration égale à  $(-1)$  initialement, les 10000 autres ayant une concentration égale à 1 (le terme concentration est à comprendre ici au sens de scalaire; le fait que ce scalaire puisse être négatif n'a rien de choquant, les valeurs  $(-1)$  et 1 ayant été choisies arbitrairement pour avoir une concentration moyenne nulle).

Afin d'éviter certaines instabilités numériques, on a forcé le problème à rester symétrique tout au long du calcul. Pour chaque paire de particules choisie aléatoirement, on a imposé à une paire ayant des concentrations symétriques de se mélanger suivant les mêmes lois d'évolution. Les concentrations ont été calculées analytiquement (Annexe V). Les densités de probabilité données par les deux modèles sont présentées figures (4.1)-(4.3) pour  $\frac{t}{T}$  égal à 0.2, 0.5 et 1. Le pas de temps a été fixé à  $0.05T$  (on tient compte ici de l'application finale à laquelle on destine ce modèle de diffusion, à savoir au couplage à un modèle de suivi lagrangien à une échelle de temps).

Ces courbes montrent que le temps de relaxation est plus petit pour le nouveau modèle (avec  $\psi$  constante) que pour celui de HSU & CHEN, soient en d'autres termes que la constante de proportionnalité entre l'échelle de temps caractéristique de la diffusion et l'échelle de temps caractéristique de la turbulence n'est pas la même pour les deux modèles. En fait, on a noté que le modèle discrétisé conduisait à une équation de FOKKER-PLANCK dont les coefficients dépendaient du pas en temps  $\tau$  et de  $\psi$ . On ne peut donc pas espérer trouver une constante universelle.

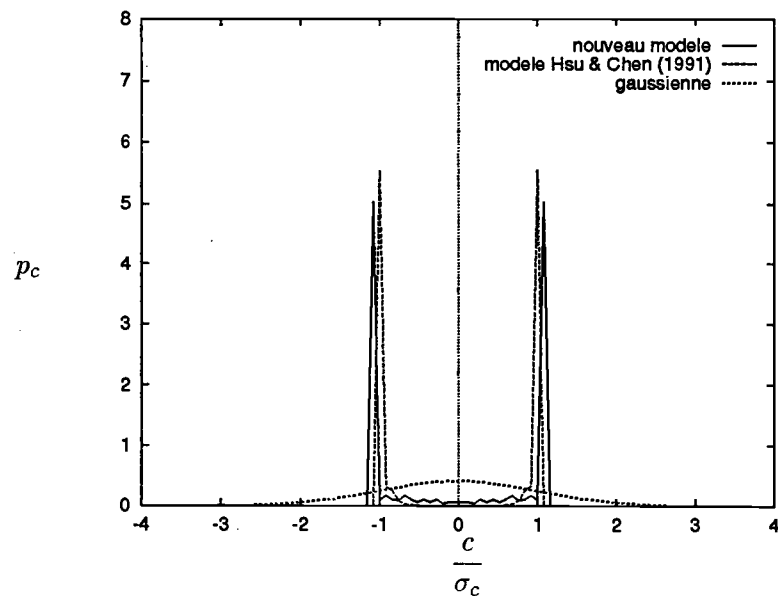


FIG. 4.1 - Densités de probabilité calculées à  $\frac{t}{T} = 0.2$

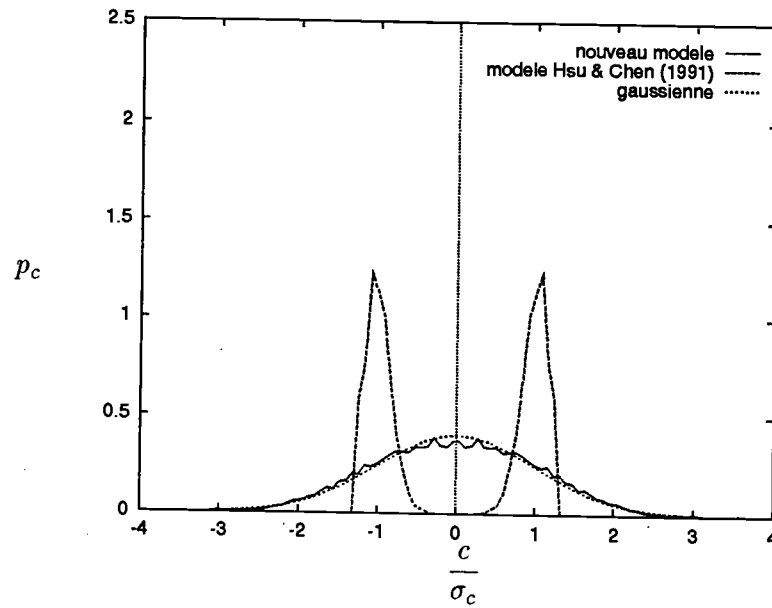


FIG. 4.2 - Densités de probabilité calculées à  $\frac{t}{T} = 0.5$

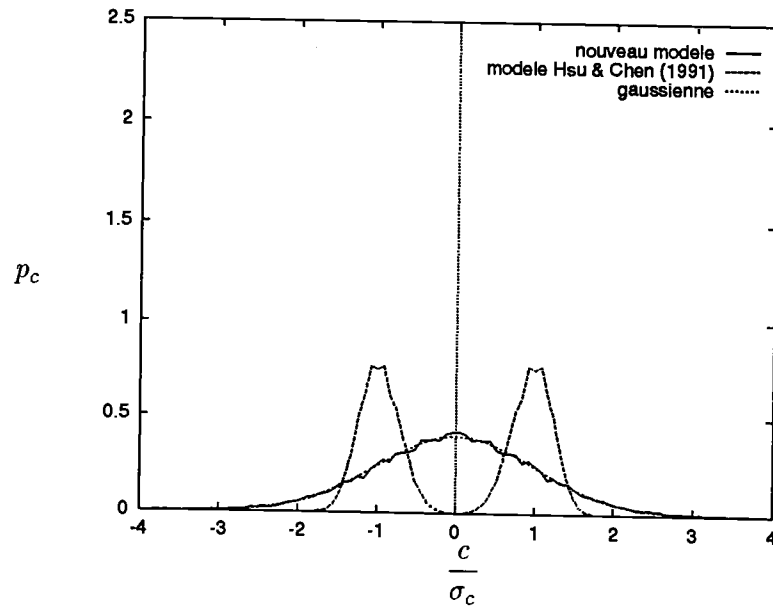


FIG. 4.3 - Densités de probabilité calculées à  $\frac{t}{T} = 1$ .

Si l'on observe la densité de probabilité obtenue par le modèle de HSU & CHEN à  $\frac{t}{T}$  égal à 20, elle ne semble pas très éloignée d'une gaussienne (figure (4.4)). Néanmoins, l'étude théorique menée ci-dessus assure que seul le modèle avec  $\psi$  constant donne une densité de probabilité relaxant vers une

gaussienne.

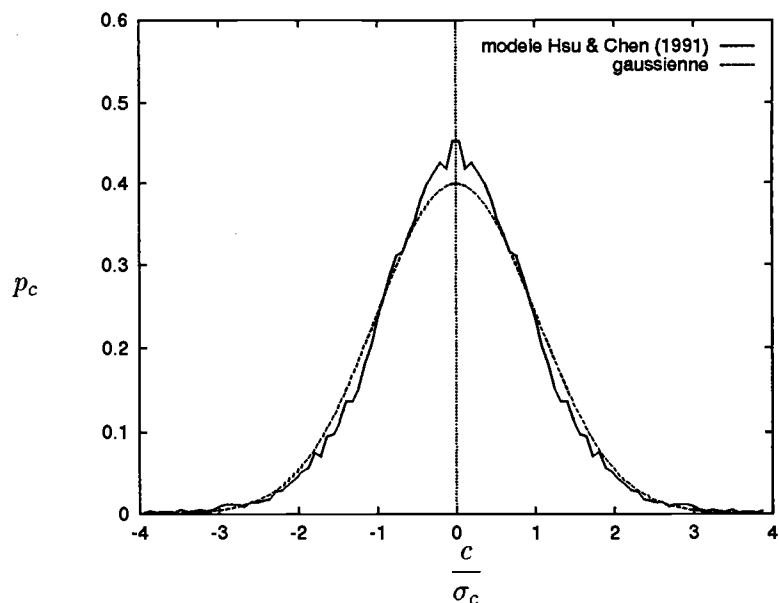


FIG. 4.4 - Densité de probabilité obtenue par le modèle de HSU & CHEN (1991) à  $\frac{t}{T} = 20$ .

Pour vérifier ceci, on a tracé l'évolution du coefficient d'aplatissement. On sait que si la densité de probabilité est gaussienne, ce coefficient doit être égal à 3. La théorie prédit une valeur de 6 dans le cas du modèle de HSU & CHEN. Les figures (4.5) et (4.6) confirment les résultats théoriques.

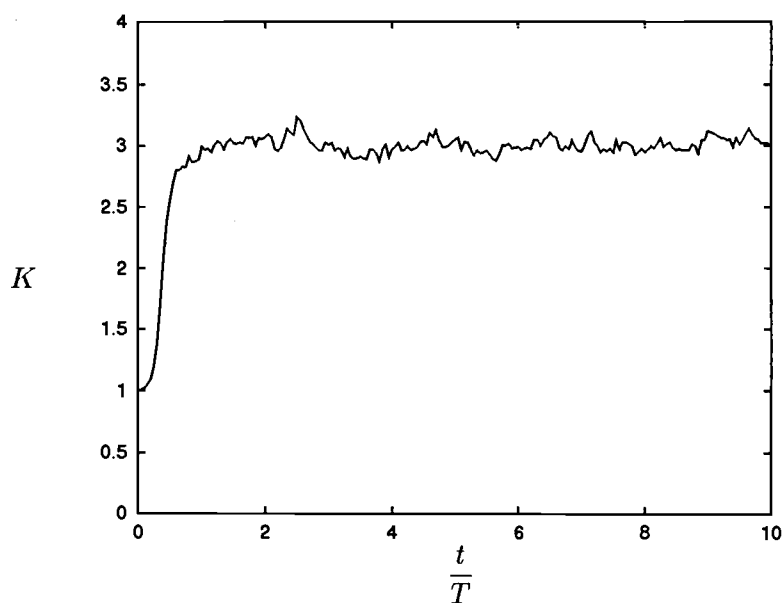


FIG. 4.5 - Evolution du coefficient d'aplatissement donné par le nouveau modèle

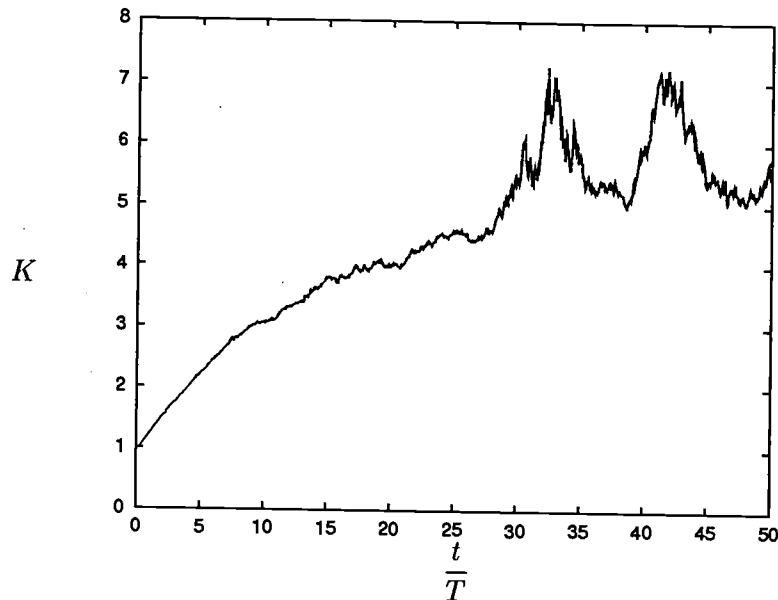


FIG. 4.6 - Evolution du coefficient d'aplatissement donné par le modèle de HSU & CHEN (1991)

On notera toutefois que les fluctuations autour de la valeur escomptée du coefficient d'aplatissement  $K$  sont beaucoup plus faibles avec le nouveau modèle qu'avec celui de HSU & CHEN. Ceci vient sans doute du caractère doublement aléatoire de ce dernier (tirage aléatoire de la paire de particules qui échangent de la matière, et variable aléatoire dans l'équation même d'évolution des concentrations).

Ces différents résultats nous conduisent tout naturellement à abandonner le modèle de HSU & CHEN pour la suite de l'étude et à lui préférer le nouveau modèle d'évolution des concentrations. On aura dès lors, pour chaque paire  $(m, n)$  de particules choisie aléatoirement:

$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \frac{C_{dif}}{2T} (c_n(t) - c_m(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \frac{C_{dif}}{2T} (c_m(t) - c_n(t)) \end{cases}$$

Par la suite, nous n'allons plus exprimer le modèle avec l'échelle temporelle de décroissance de la turbulence  $T$  donnée par (4.1), mais avec l'échelle de temps intégrale lagrangienne. En retenant la formule que nous avons utilisée dans les chapitres 2 et 3, on a:

$$T_L = \frac{2\sigma_w^2}{C_0\varepsilon}$$

En turbulence homogène isotrope, les fluctuations de vitesse sont statistiquement identiques dans toutes les directions. La moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique turbulente vaut donc:

$$k = \frac{3}{2}\sigma_w^2$$

et l'échelle de temps intégrale lagrangienne devient:

$$T_L = \frac{4k}{3C_0\varepsilon} = \frac{4}{3C_0}T$$

En posant

$$C'_{dif} = \frac{4C_{dif}}{3C_0}$$

le modèle s'écrira dès lors:

$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \frac{C'_{dif}}{2T_L} (c_n(t) - c_m(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \frac{C'_{dif}}{2T_L} (c_m(t) - c_n(t)) \end{cases}$$

Les simulations que nous avons effectuées à partir des cas tests qui vont suivre nous ont conduits à prendre

$$C'_{dif} = 1$$

ce qui correspond, pour  $C_0$  valant 3, à:

$$C_{dif} = \frac{9}{4} = 2.25$$

On peut remarquer que  $C_{dif}$  est très proche de la valeur 2 proposée par POPE (1985) pour son modèle. Néanmoins, ceci n'a aucune signification. On a en effet insisté sur le fait que l'échelle de temps caractéristique du modèle dépendait du pas en temps  $\tau$  et de la valeur  $\langle \psi \rangle$  qui a été prise ici égale à  $\frac{1}{2}$ .

#### 4.4 Application à la réaction entre $NO$ et $O_3$ sans mélange initial dans une turbulence de grille

Nous vérifions ici la validité de l'approche lagrangienne avec une réaction rapide du second ordre dans une turbulence homogène.

Le modèle complet se composera à chaque pas de temps:

- d'une étape convective au cours de laquelle la position de chaque particule  $m$  sera régie par:

$$\begin{cases} dx_m = U dt \\ dz_m = w_m dt \\ dw_m = -C_0 \varepsilon \frac{w_m}{\sigma_w^2} dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \end{cases}$$

- d'une étape diffusive et réactive où les particules sont sélectionnées aléatoirement par paires  $(m, n)$  dans chaque boîte de mélange; le  $i^{ième}$  constituant évolue pour chaque paire suivant:

$$\begin{cases} \frac{dc_m^i}{dt} = \frac{C'_{dif}}{2T_L} (c_n^i - c_m^i) + \dot{C}_m^i \\ \frac{dc_n^i}{dt} = \frac{C'_{dif}}{2T_L} (c_m^i - c_n^i) + \dot{C}_n^i \end{cases}$$

avec  $\dot{C}_m^i$  le terme d'évolution du constituant  $i$  de la particule  $m$  par réaction chimique.

Le modèle discret utilisé est présenté dans l'Annexe V.

La validation sera effectuée en comparant les simulations numériques aux résultats expérimentaux. Ces derniers devront toujours être utilisés avec beaucoup de prudence, les mesures concernant des constituants réactifs étant très délicates. Par exemple, BILGER et al. (1991) indiquent que, dans leur expérience, les échantillons de mesures parcourent un tube long de 5 m avant d'atteindre l'analyseur. Les résolutions spatiale et fréquentielle relatives sont respectivement 12 mm et 23 Hz. Si ces auteurs ont vérifié la validité de leurs mesures de concentrations, on peut toutefois noter que la résolution est beaucoup plus grossière que celle relative à des données pouvant être obtenues par des techniques non intrusives, telles que les mesures par photoluminescence. L'idéal serait d'avoir des corps réactifs étant photoluminescents suivant des fréquences différentes!

#### 4.4.1 Couche de mélange dans une turbulence de grille

On envisage ici l'expérience réalisée par BILGER et al. (1991) et reprise par LI et al. (1992). Il s'agit, dans une turbulence de grille, d'une couche de mélange réactive entre le monoxyde d'azote et l'ozone (figure 4.7).

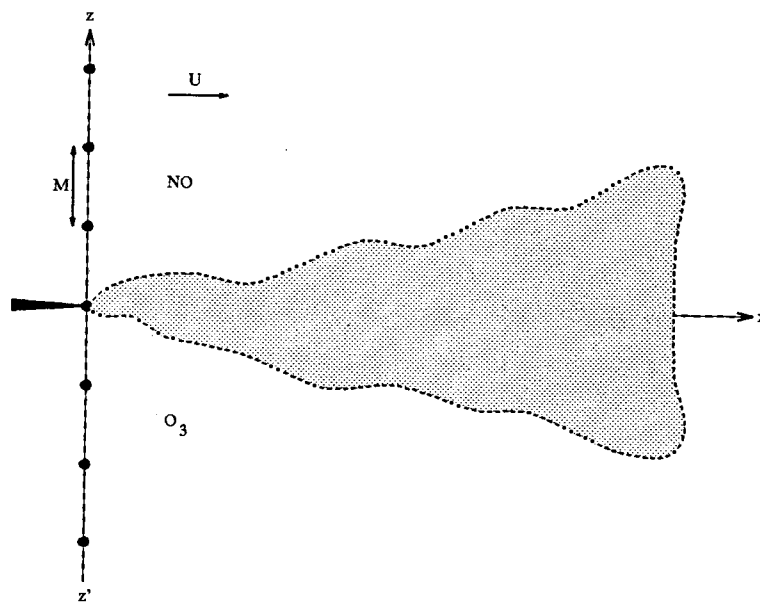
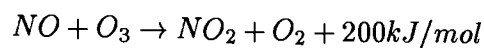


FIG. 4.7 - Schéma de l'expérience de BILGER et al. (1991)

Ces deux constituants subissent, en absence de lumière, la réaction irréversible suivante:



de constante de réaction

$$k_c = 3.7 \cdot 10^{-1} ppm^{-1} s^{-1}$$

Les grandeurs expérimentales de référence, à savoir la taille de la maille de la grille  $M$ , la vitesse moyenne  $U$  de l'écoulement et le nombre de REYNOLDS construit sur  $M$  valent respectivement:

$$\begin{cases} M &= 3.2 \cdot 10^{-1} \text{ m} \\ U &= 0.5 \text{ m s}^{-1} \\ Re &= 10700 \end{cases}$$

Le nombre de DAMKÖHLER  $N_D$ , rapport de l'échelle de temps cinématique sur l'échelle de temps chimique, est défini par ces auteurs comme étant

$$N_D = \frac{k_c M (c_{NO}^0 + c_{O_3}^0)}{U}$$

où  $c_{NO}^0$  et  $c_{O_3}^0$  sont les concentrations initiales en  $NO$  et  $O_3$ . Le nombre de DAMKÖHLER de cette expérience est égal à 1.6. Cette valeur, proche de l'unité, confirme que la réaction envisagée est bien une réaction rapide. Afin d'obtenir cette valeur du nombre de DAMKÖHLER, nous avons pris comme concentrations initiales

$$c_{NO}^0 = c_{O_3}^0 = 3.38 \text{ ppm}$$

L'évolution de la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique turbulente à partir des valeurs relevées par LI et al. (1992) en fonction de l'abscisse divisée par  $M$

$$X = \frac{x}{M}$$

est obtenue en appliquant la méthode des moindres carrés à

$$\log k = f(\log X)$$

pour  $X \in [3, 21]$ . On trouve:

$$k(X) = 8.82 \cdot 10^{-2} X^{-1.103} U^2$$

En outre, le coefficient d'anisotropie  $r$  est à peu près constant, égal à 2.03 sur le domaine d'étude. En supposant l'anisotropie égale dans les directions transversale et verticale, la variance de la vitesse verticale s'écrit:

$$\begin{aligned} \sigma_w^2(X) &= \frac{2k(X)}{2+r^2} \\ &= 2.68 \cdot 10^{-2} X^{-1.103} U^2 \end{aligned}$$

La moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence s'écrit en turbulence homogène (COMTE-BELLOT (1982)):

$$\varepsilon = -\frac{Dk}{Dt} = -\frac{U}{M} \frac{dk}{dX}$$

où  $\frac{D}{Dt}$  représente la dérivée particulaire en suivant le mouvement moyen, soit:

$$\varepsilon(X) = 9.73 \cdot 10^{-2} X^{-2.103} \frac{U^3}{M}$$

Enfin, l'échelle de temps intégrale lagrangienne sera:

$$T_L(X) = \frac{2}{C_0} \frac{\sigma_w^2(X)}{\varepsilon(X)}$$

Pour  $X < 3$ , on supposera la variance de la vitesse verticale et la moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence constantes, égales à leurs valeurs à  $X = 3$ .

Dans le cas de l'interaction entre deux constituants non prémélangés et ayant des coefficients de diffusivité identiques, une grandeur intéressante est la fraction de mélange (BILGER et al. (1991)). Elle

se comporte comme un scalaire passif et permet de mesurer indépendamment les effets du mélange global (convection + diffusion) et ceux de la chimie. Elle est définie par:

$$F = \frac{c_{NO} - c_{O_3} + c_{O_3}^0}{c_{NO}^0 + c_{O_3}^0}$$

Cette grandeur prend la valeur 1 dans la région où le monoxyde d'azote est pur et 0 dans celle où il est absent.

Pour montrer que la fraction de mélange se comporte comme un scalaire passif, on écrit les équations eulériennes d'évolution des concentrations en monoxyde d'azote et en ozone:

$$\begin{cases} \frac{dc_{NO}}{dt} = \nabla(\kappa_1 \nabla c_{NO}) - k_c c_{NO} c_{O_3} \\ \frac{dc_{O_3}}{dt} = \nabla(\kappa_2 \nabla c_{O_3}) - k_c c_{NO} c_{O_3} \end{cases}$$

où  $\kappa_1$  et  $\kappa_2$  sont respectivement les coefficients de diffusivité du monoxyde d'azote et de l'ozone dans l'air. En effectuant la différence et en supposant égales les diffusivités de l'ozone et du monoxyde d'azote dans l'air, soit

$$\kappa_1 = \kappa_2 = \kappa$$

on trouve

$$\frac{d(c_{NO} - c_{O_3})}{dt} = \nabla(\kappa \nabla (c_{NO} - c_{O_3}))$$

ce qui conduit en divisant chaque membre par  $(c_{NO}^0 + c_{O_3}^0)$  à:

$$\frac{dF}{dt} = \nabla(\kappa \nabla F)$$

qui est bien l'équation eulérienne d'évolution d'un scalaire passif.

On s'intéresse dans un premier temps aux mesures concernant la fraction de mélange obtenues par LI et al. (1992).

La largeur du panache  $e$  est définie par BILGER et al. (1991) comme la distance séparant verticalement les points où la valeur moyenne de la fraction de mélange passe de 0.1 à 0.9.

Le modèle donne une valeur moyenne de la fraction de mélange en fonction de la coordonnée transversale divisée par  $e$ , ceci à  $X = 12$  et  $X = 21$ , très proche des mesures de LI et al. (1992). Le

profil de  $\langle F \rangle$ , en fonction de l'abscisse mise sous forme sans dimension  $X$ , évolue peu (figure (4.8)).

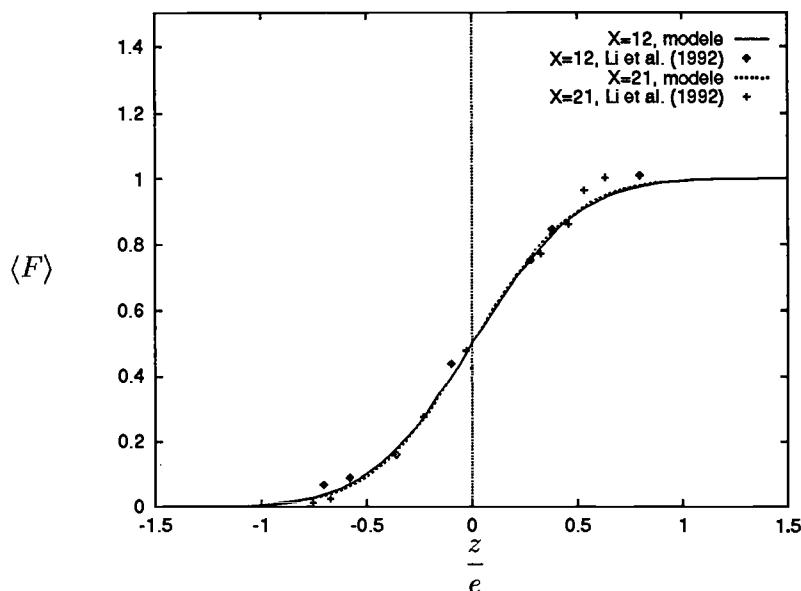


FIG. 4.8 - Profils de la valeur moyenne de la fraction de mélange à différentes sections

L'écart type  $\sigma_F$  de la fraction de mélange donné par le modèle est légèrement supérieur aux résultats expérimentaux (figure (4.9)). Néanmoins, on remarque que les résultats de LI et al. (1992) ne sont pas symétriques. Cela peut venir du fait que la fraction de mélange n'est pas exactement un scalaire passif (il existe toujours un écart entre les valeurs des coefficients de diffusivité; ainsi, à  $25^\circ C$  et  $1 atm$ , les coefficients de diffusivité dans l'air pour le monoxyde d'azote et l'ozone sont respectivement égaux à  $18 \cdot 10^{-6} m^2 s^{-1}$  et  $22 \cdot 10^{-6} m^2 s^{-1}$ ).

En outre, la valeur maximale expérimentale de  $\sigma_F$  est très proche de celle proposée par LUMLEY (1986) qui précise que cette dernière, égale à 0.159, est trop faible.

Enfin, le modèle donne quasiment la même courbe que MA & WARHAFT (1986). Même si leur expérience a été réalisée à un nombre de REYNOLDS deux fois supérieur à celui de l'expérience considérée, LI et al. (1992) montrent, en comparant des résultats obtenus avec des nombres de REYNOLDS différents, que ce paramètre a peu, voire pas, d'influence sur ces profils. On note également que les profils de  $\sigma_F$  évoluent peu avec l'abscisse. Ces deux remarques semblent indiquer que les simulations numériques donnent des résultats identiques à ceux observés dans une turbulence établie. Ceci est cohérent avec le fait que les profils analytiques de la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique turbulente et de celle de son taux de dissipation utilisés pour les simulations numériques ne tiennent

pas compte des conditions initiales (on rappelle que ces profils ont été pris constants pour  $X < 3$ ).

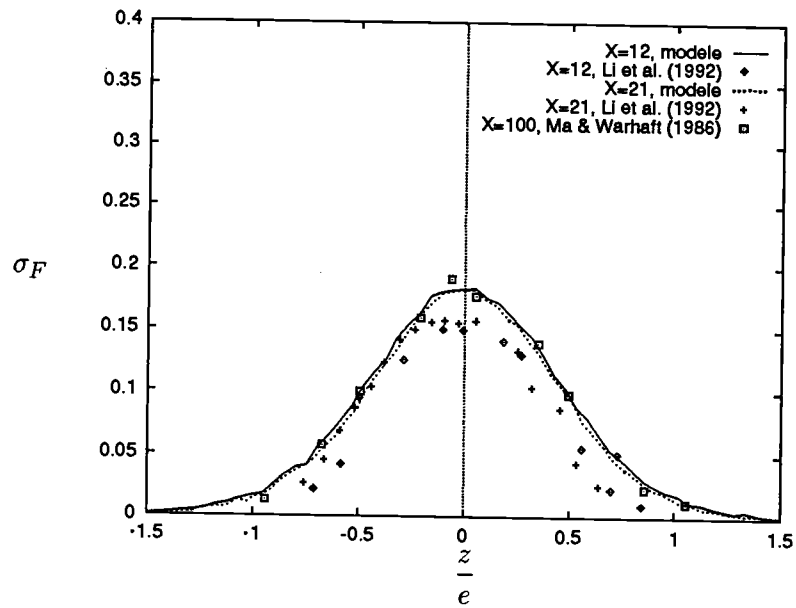


FIG. 4.9 - Profils de l'écart type de la fraction de mélange à différentes sections

Les valeurs prises par les coefficients d'asymétrie  $S$  et d'aplatissement  $K$  de la fraction de mélange, définis par

$$\left\{ \begin{array}{l} S = \frac{\langle (F - \langle F \rangle)^3 \rangle}{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle^{3/2}} \\ K = \frac{\langle (F - \langle F \rangle)^4 \rangle}{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle^2} \end{array} \right.$$

sont comparables aux résultats des simulations numériques (figures (4.10) et (4.11)). Le nombre limité de mesures expérimentales ne permet pas à ce niveau une analyse plus approfondie.

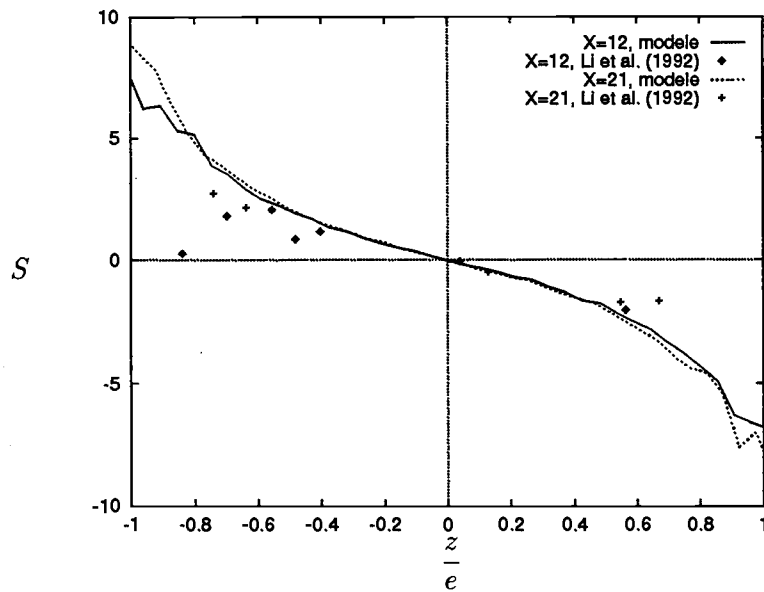


FIG. 4.10 - Profils du coefficient d'asymétrie de la fraction de mélange à différentes sections

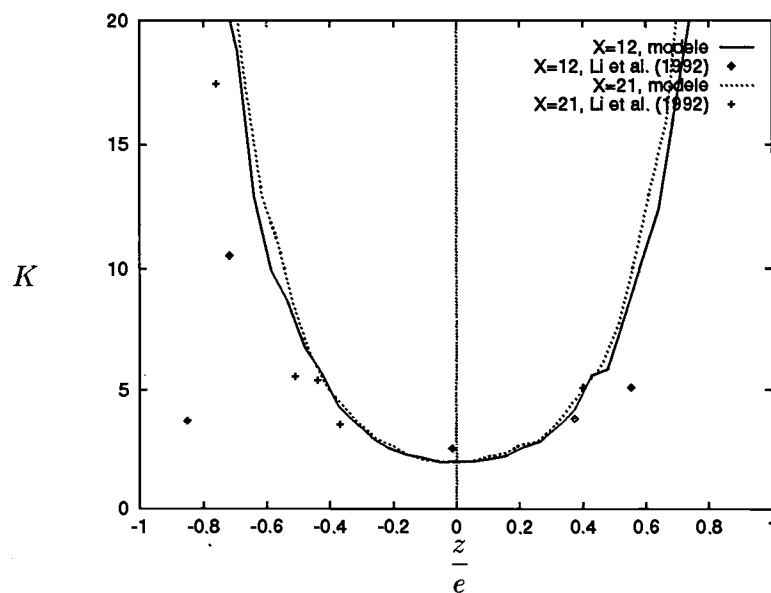


FIG. 4.11 - Profils du coefficient d'aplatissement de la fraction de mélange à différentes sections

Le résultat le plus médiocre est celui concernant l'évolution de la largeur du panache (figure (4.12)). Il a pourtant été montré avec la simulation de l'expérience de STAPOUNTZIS et al. (1986) que le modèle stochastique de dispersion à une particule et une échelle de temps donnait une évolution du panache très satisfaisante dans une turbulence de grille. La seule explication de l'écart entre la largeur

du panache donnée par le modèle et celle mesurée est l'impossibilité de prendre en compte la forte inhomogénéité juste derrière la grille de turbulence (on rappelle que les simulations ont été menées avec des grandeurs turbulentes fixées arbitrairement, pour  $X$  inférieur à 3, à leurs valeurs à  $X = 3$ ). En d'autres termes, il nous est impossible de simuler les conditions initiales.

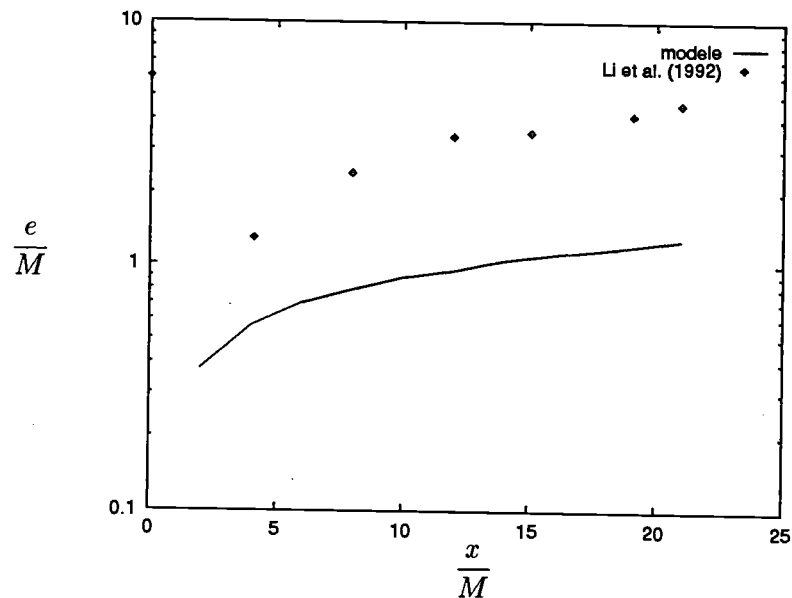


FIG. 4.12 - Evolution longitudinale de la largeur du panache

Toujours avec les mêmes conditions cinématiques, on considère maintenant les mesures de BILGER et al. (1991), ceci afin de voir l'effet du nombre de DAMKÖHLER sur les mesures où interviennent directement les constituants chimiques. Le nombre de DAMKÖHLER vaudra 0.3 et 1.8 (dans l'expérience, ces valeurs correspondent respectivement à des concentrations initiales  $c_{NO}^0 = 0.68 \text{ ppm}$  et  $c_{O_3}^0 = 0.70 \text{ ppm}$ , et  $c_{NO}^0 = 3.9 \text{ ppm}$  et  $c_{O_3}^0 = 3.85 \text{ ppm}$ ). On va comparer aux sections  $X = 16$  et 21 quelques grandeurs propres aux concentrations des réactifs.

Les figures (4.13) et (4.14) représentent à  $X = 21$  les profils de concentrations moyennes rapportées à leurs valeurs initiales pour des nombres de DAMKÖHLER de 0.3 et 1.8.

Le modèle semble ne pas disperser assez vite. En effet, les profils de concentrations moyennes (4.13) et (4.14) en fonction de la cote divisée par  $e$  obtenus numériquement et expérimentalement sont relativement proches. La largeur  $e$  du panache étant sous-évaluée par le modèle d'après la figure (4.12), les variations des concentrations au centre du panache en fonction de la cote seront donc plus brutales. Cette tendance est vérifiée sur les profils des écarts types des fluctuations de concentrations (figures (4.15) et (4.16)) pour lesquels les simulations surévaluent les valeurs sur l'axe ( $x'$ ).

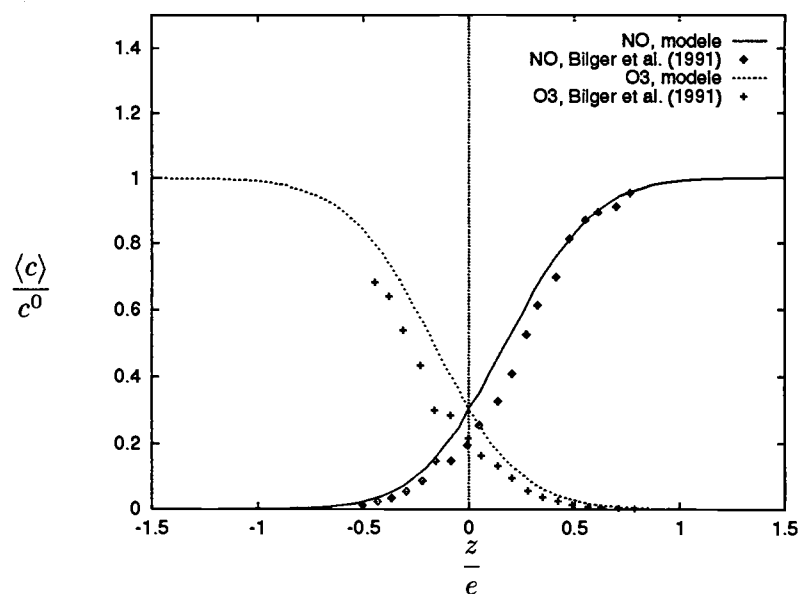


FIG. 4.13 - Profils des concentrations moyennes en monoxyde d'azote et en ozone rapportées aux valeurs respectives des concentrations initiales à  $X = 21$  pour  $N_D = 0.3$

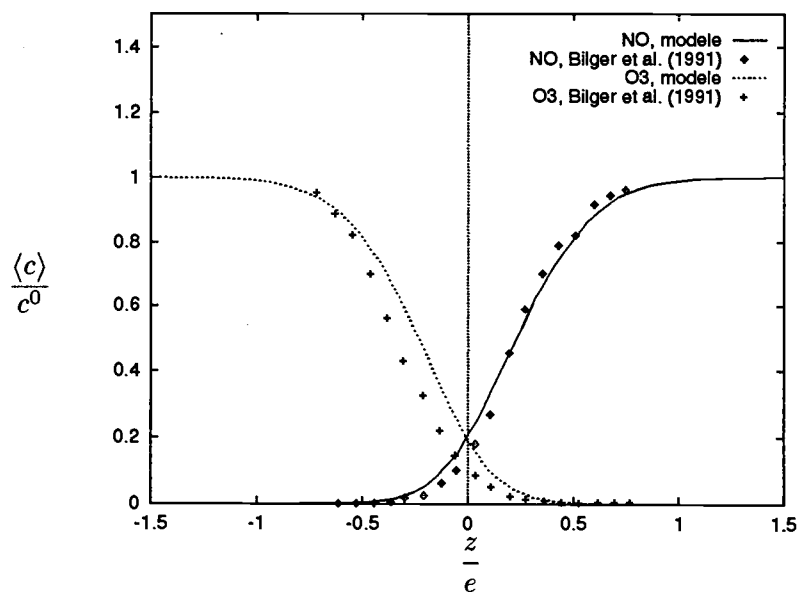


FIG. 4.14 - Profils des concentrations moyennes en monoxyde d'azote et en ozone rapportées aux valeurs respectives des concentrations initiales à  $X = 21$  pour  $N_D = 1.8$

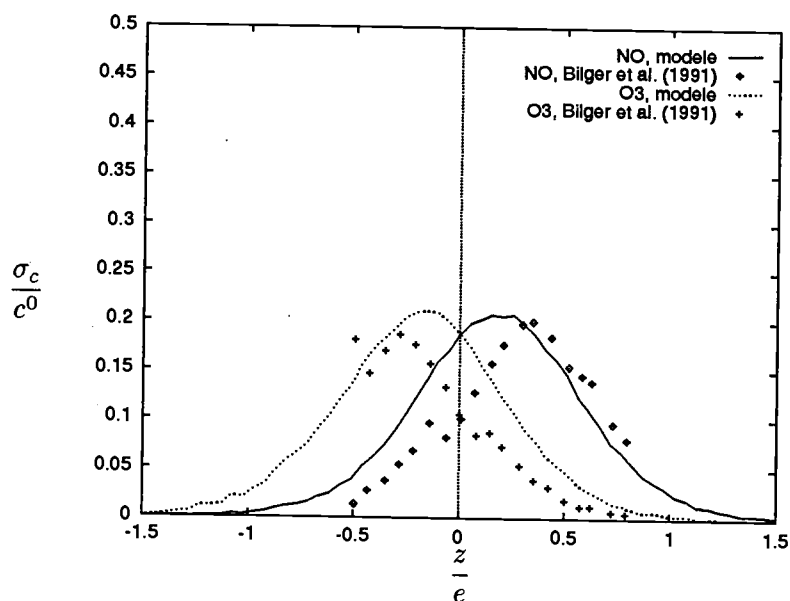


FIG. 4.15- Profils des écarts types de concentrations en monoxyde d'azote et en ozone rapportés aux valeurs respectives des concentrations initiales à  $X = 21$  pour  $N_D = 0.3$

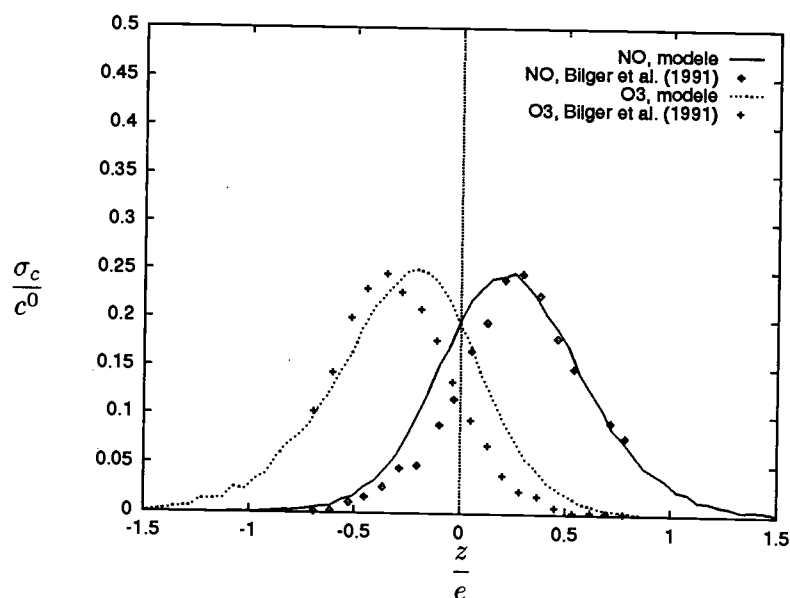


FIG. 4.16- Profils des écarts types de concentrations en monoxyde d'azote et en ozone rapportés aux valeurs respectives des concentrations initiales à  $X = 21$  pour  $N_D = 1.8$

Le modèle surestime la corrélation des fluctuations de concentrations pour la même raison (figures (4.17) et (4.18)).

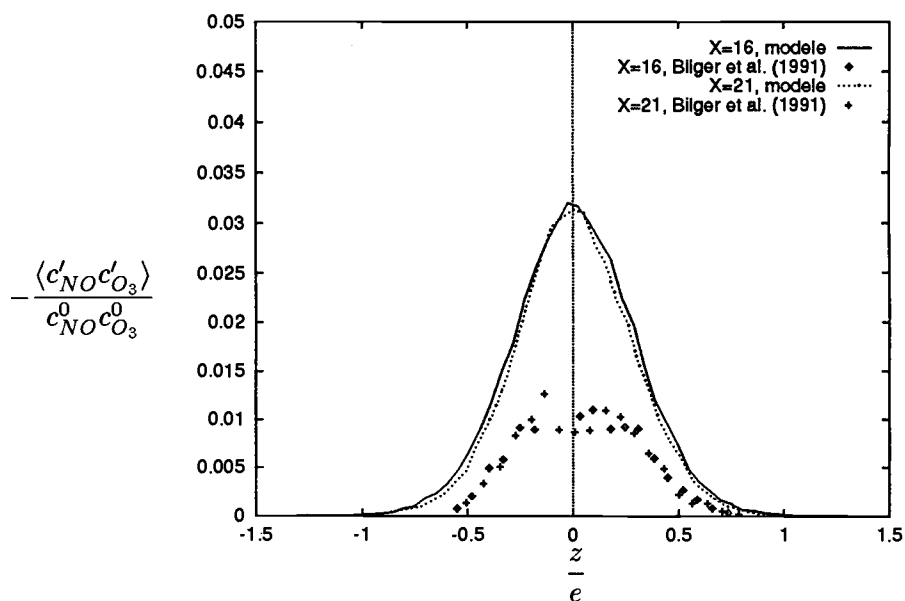


FIG. 4.17 - Profils à  $X = 16$  et  $X = 21$  pour  $N_D = 0.3$  des corrélations de fluctuations de concentrations rapportées au produit des concentrations initiales

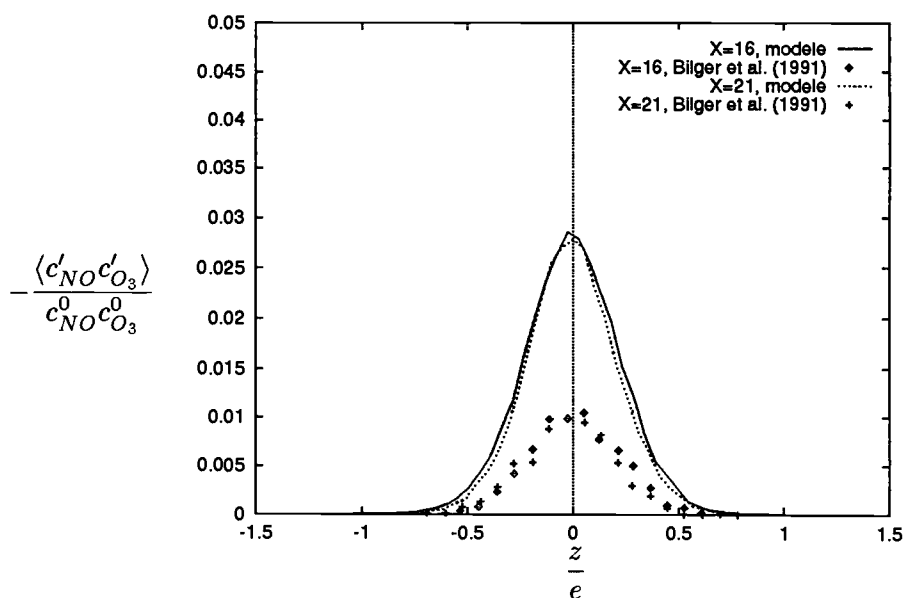


FIG. 4.18 - Profils à  $X = 16$  et  $X = 21$  pour  $N_D = 1.8$  des corrélations de fluctuations de concentrations rapportées au produit des concentrations initiales

Les figures (4.19) et (4.20) représentent les flux verticaux de la fraction de mélange et des concentrations en monoxyde d'azote et en ozone.

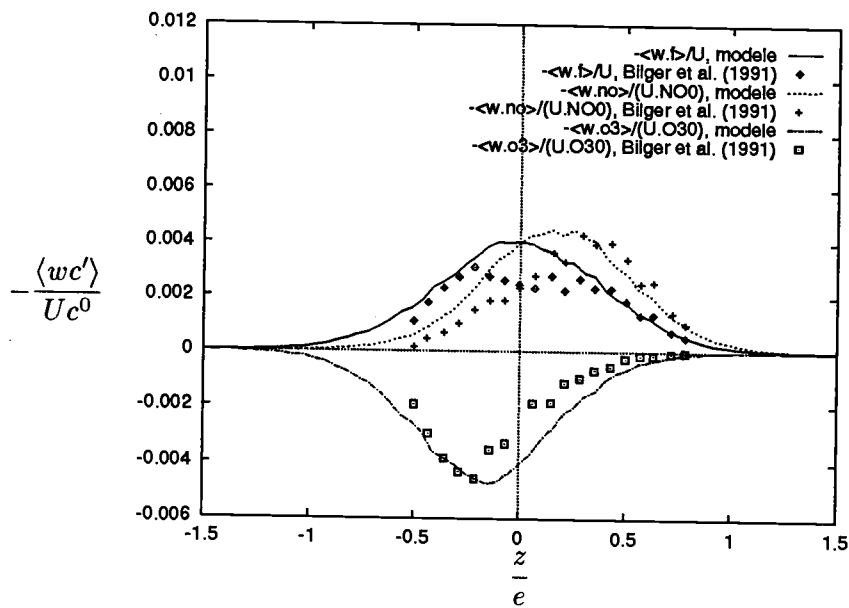


FIG. 4.19 - Profils à  $X = 21$  pour  $N_D = 0.3$  des flux de matières rapportés au produit de la vitesse moyenne de l'écoulement principal par la concentration initiale

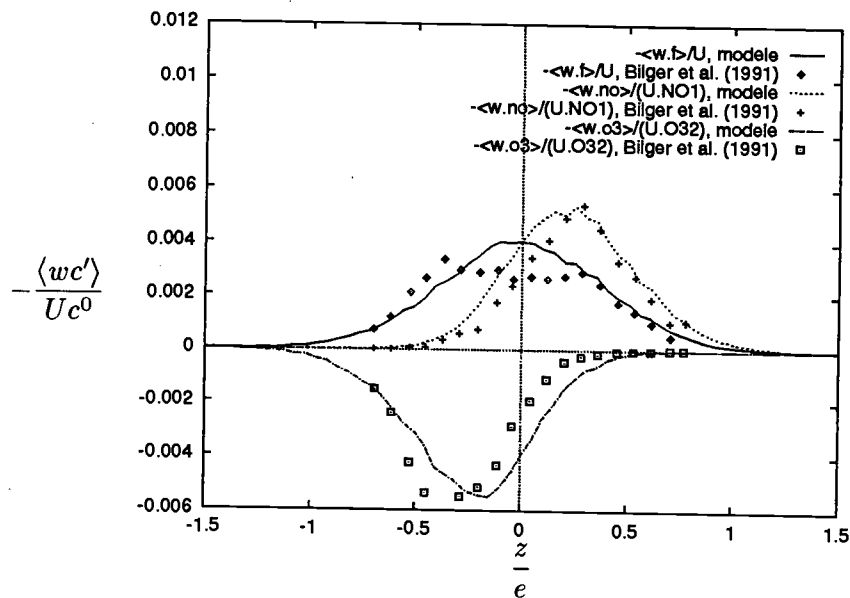


FIG. 4.20 - Profils à  $X = 21$  pour  $N_D = 1.8$  des flux de matières rapportés au produit de la vitesse moyenne de l'écoulement principal par la concentration initiale

On notera que les résultats expérimentaux concernant le flux de la fraction de mélange présentent un plateau autour de l'origine. Il est fort probable que cette tendance soit fautive. En effet, BILGER

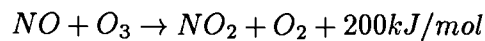
et al. (1991) ont mis en évidence cette caractéristique pour les différents moments de la fraction de mélange, mais LI et al. (1992) ont montré que ceci venait d'un problème expérimental. Ainsi, l'écart type et le coefficient d'aplatissement ne doivent respectivement laisser apparaître qu'un extremum, et le coefficient d'asymétrie est strictement monotone sur  $[0, 1]$ , ce qui est vérifié par le modèle.

Le modèle fournit donc d'excellentes estimations des mesures de BILGER et al. (1991) et de LI et al. (1992) concernant une couche de mélange réactive. En outre, les seuls résultats décevants ne semblent pas être dus au modèle lui-même, mais à des conditions initiales différentes de celles de l'expérience.

Le second cas test envisagé sera celui d'une source linéique placée dans une turbulence de grille.

#### 4.4.2 Source linéique dans une turbulence de grille

On s'intéresse ici à un panache réactif bidimensionnel en aval d'une source linéique placée dans une turbulence de grille. L'expérience que l'on reproduit par simulation numérique est celle de LI & BILGER (1996). La source linéique parallèle à l'axe ( $y/y$ ) rejette un mélange d'azote et de monoxyde d'azote ( $NO$ ) dans l'écoulement principal transportant de l'ozone ( $O_3$ ) (figure 4.21). En absence de lumière, il se produit la réaction irréversible suivante:



dont la constante de réaction est

$$k_c = 3.7 \cdot 10^{-1} \text{ ppm}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

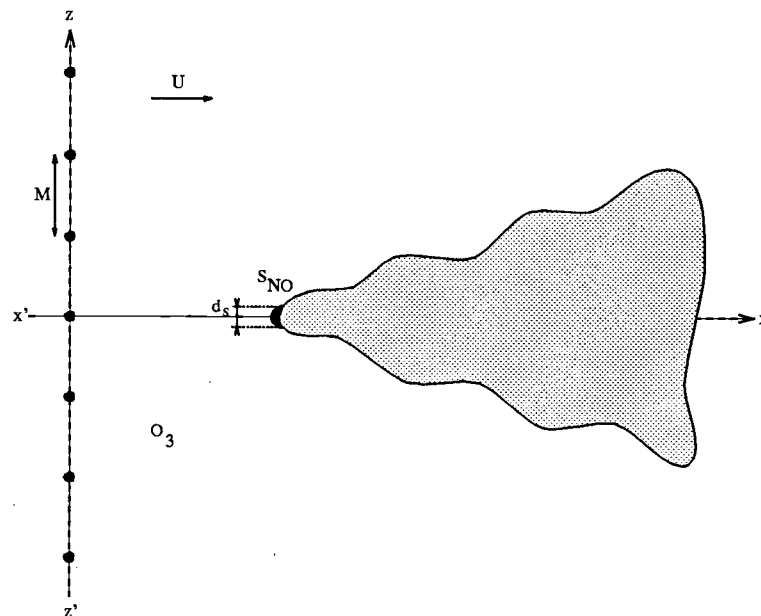


FIG. 4.21 - Schéma de l'expérience de LI & BILGER (1996)

Pour cette expérience, la taille  $M$  de la maille de grille, la vitesse moyenne  $U$  de l'écoulement et le nombre de REYNOLDS construit sur  $M$  sont les mêmes que dans l'expérience précédente:

$$\begin{cases} M = 3.2 \cdot 10^{-1} \text{ m} \\ U = 0.5 \text{ ms}^{-1} \\ Re = 10700 \end{cases}$$

Les profils des grandeurs cinématiques turbulentes sont ceux donnés par BROWN & BILGER (1996). Ils ont été établis dans la même soufflerie et avec les mêmes conditions expérimentales pour l'étude d'un panache réactif. Ainsi, les variances du champ de vitesse dans les directions longitudinale et verticale sont respectivement:

$$\begin{cases} \sigma_u^2(X) = 17.3 \cdot 10^{-2} X^{-1.37} U^2 \\ \sigma_w^2(X) = 4.1 \cdot 10^{-2} X^{-1.27} U^2 \end{cases}$$

où

$$X = \frac{x}{M}$$

Ceci conduit, en supposant la turbulence identique dans les directions verticale et transversale, à l'expression de la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique de turbulence suivante:

$$k(X) = \frac{1}{2} (17.3 \cdot 10^{-2} X^{-1.37} + 8.2 \cdot 10^{-2} X^{-1.27}) U^2$$

En prenant de nouveau comme expression de la moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence

$$\varepsilon = -\frac{Dk}{Dt} = -\frac{U}{M} \frac{dk}{dX}$$

il vient:

$$\varepsilon(X) = (11.9 \cdot 10^{-2} X^{-2.37} + 5.2 \cdot 10^{-2} X^{-2.27}) \frac{U^3}{M}$$

On suppose ici aussi que l'échelle intégrale de temps lagrangienne vaut:

$$T_L(X) = \frac{2}{C_0} \frac{\sigma_w^2(X)}{\varepsilon(X)}$$

La source de monoxyde d'azote est constituée d'un tube de diamètre

$$d_s = 3 \cdot 10^{-2} \text{ m}$$

placé orthogonalement au plan ( $xOz$ ) et laissant s'échapper du monoxyde d'azote.

Afin d'effectuer des mesures proche et loin de la source, cette dernière est placée à deux abscisses; la première,

$$X_1 = 1.33,$$

servira à étudier le champ lointain et la seconde,

$$X_2 = 7.7,$$

le champ proche.

Les mesures ont été effectuées à différentes sections, chacune correspondant à des conditions initiales différentes, ceci afin d'évaluer l'influence sur les différents profils étudiés de la fraction de mélange stœchiométrique, définie par

$$F_s = \frac{c_{O_3}^0}{c_{NO}^0 + c_{O_3}^0}$$

et correspondant à la valeur prise par la fraction de mélange lorsque les concentrations en monoxyde d'azote et en ozone sont égales.

Soient  $x_m$  l'abscisse des sections de mesure et  $X_m$  sa valeur divisée par  $M$ . Les conditions expérimentales pour le champ lointain sont

| symboles | $c_{NO}^0$ (ppm) | $c_{O_3}^0$ (ppm) | $F_s$ | $N_D$ | $X_m$ | $(X_m - X_1)/X_1$ |
|----------|------------------|-------------------|-------|-------|-------|-------------------|
| A        | 18.3             | 1.85              | 0.092 | 4.8   | 3.34  | 1.51              |
| B        | 18.3             | 1.85              | 0.092 | 4.8   | 5.33  | 3.01              |
| C        | 26.9             | 1.85              | 0.064 | 6.8   | 7.34  | 4.52              |
| D        | 21.7             | 1.85              | 0.079 | 5.6   | 9.34  | 6.02              |
| E        | 21.7             | 1.22              | 0.053 | 5.4   | 11.34 | 7.53              |
| F        | 21.7             | 1.02              | 0.045 | 5.4   | 13.35 | 9.04              |
| G        | 21.7             | 1.78              | 0.076 | 5.6   | 15.35 | 10.54             |

et pour le champ proche

| symboles | $c_{NO}^0$ (ppm) | $c_{O_3}^0$ (ppm) | $F_s$ | $N_D$ | $X_m$ | $(X_m - X_2)/X_2$ |
|----------|------------------|-------------------|-------|-------|-------|-------------------|
| M        | 19.5             | 2.5               | 0.114 | 5.2   | 8.09  | 0.05              |
| N        | 19.5             | 2.5               | 0.114 | 5.2   | 8.47  | 0.10              |
| O        | 19.5             | 2.4               | 0.110 | 5.2   | 9.24  | 0.20              |
| P        | 14.8             | 2.4               | 0.140 | 4.1   | 10.78 | 0.40              |
| Q        | 14.8             | 2.3               | 0.135 | 4.1   | 14.01 | 0.82              |

où les stations de mesures seront symbolisées par les lettres capitales A, B, C, D, E, F, G pour le champ lointain et par M, N, O, P, Q pour le champ proche. Dans la suite, les résultats numériques correspondants seront symbolisés par les lettres minuscules a, b, c, d, e, f, g pour le champ lointain et par m, n, o, p, q pour le champ proche.

L'épaisseur  $e$  du panache est définie ici comme l'écart type de la gaussienne la plus proche (au sens de la méthode des moindres carrés) du profil vertical de  $\langle F \rangle$ . Comme dans le cas de la couche de mélange, la simulation numérique conduit à un développement du panache inférieur à celui de l'expérience (figure (4.22)), mais on observe une évolution asymptotique correcte lorsque l'abscisse croît. Cela vient du fait qu'en prenant les profils cinématiques donnés ci-dessus, on ne modélise pas l'influence de la source sur l'écoulement (Il s'agit en effet d'un tube de 30 mm de diamètre; il crée

donc en aval un sillage et des perturbations sensibles sur la turbulence non modélisées ici).

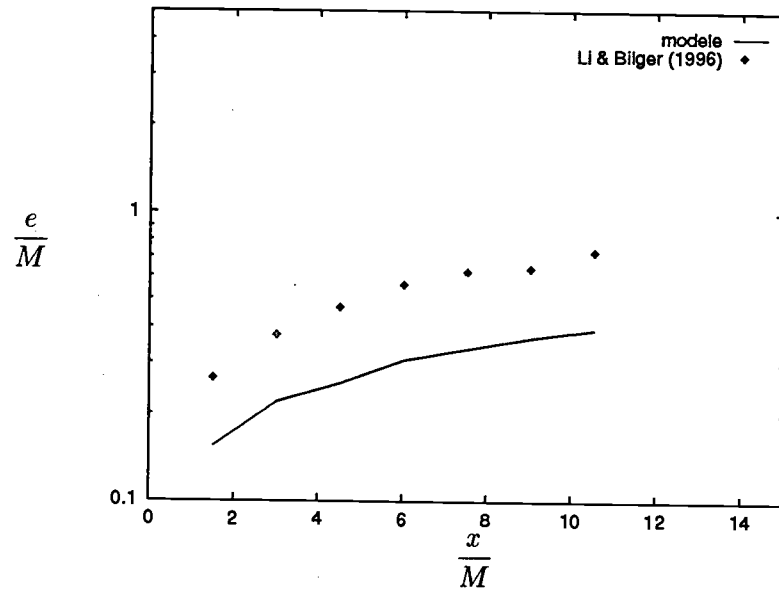


FIG. 4.22 - Evolution longitudinale de la largeur du panache

La comparaison des profils de l'écart type de la fraction de mélange  $\sigma_F$  rapporté à sa valeur sur l'axe  $(x'x)^3$  (figures (4.23) et (4.24)) montre que ceux relatifs au champ lointain laissent apparaître deux maxima. Ce comportement a été observé expérimentalement par WARHAFT (1984) et LI & BILGER (1996), et prédit par THOMSON (1990) avec un modèle à deux particules moyennant quelques approximations sur les densités de probabilité relatives aux déplacements des particules marquées. Il n'est pas observé dans le cas du champ proche.

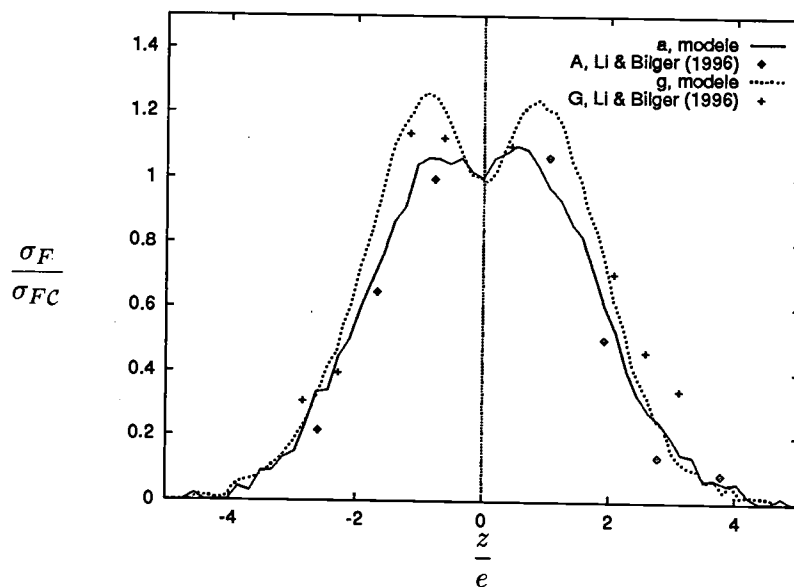


FIG. 4.23 - Profils de l'écart type de la fraction de mélange rapporté à sa valeur sur l'axe  $(x'x)$ ; cas du champ lointain aux stations A et G

3. Les grandeurs indicées par C sont évaluées sur l'axe  $(x'x)$

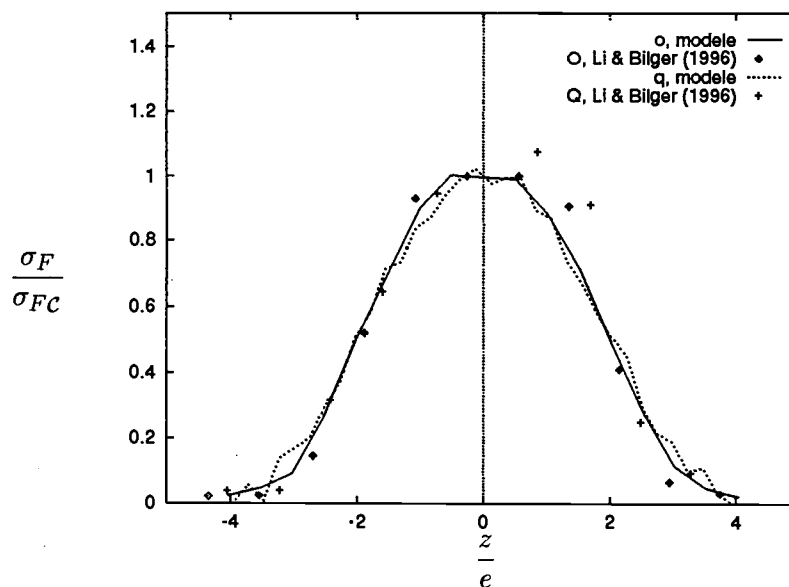


FIG. 4.24 - Profils de l'écart type de la fraction de mélange rapporté à sa valeur sur l'axe ( $x'x$ ); cas du champ proche aux stations O et Q

Sur la figure (4.25) est représentée l'évolution longitudinale au centre du panache de l'écart type de la fraction de mélange par la moyenne.  $x'$  est la distance de la source située en  $x_i$  à l'abscisse considérée:

$$x' = x - x_i, \quad i = 1, 2$$

La simulation numérique et l'expérience de LI & BILGER (1996) donnent des évaluations différentes pour le champ proche. Par contre, le modèle est en accord quasi parfait avec les résultats de LI & BILGER (1996) et l'approche théorique de THOMSON (1990) pour le champ lointain. THOMSON (1990) propose pour l'écart type de la fraction de mélange rapporté à la valeur moyenne de cette grandeur une valeur asymptotique de 0.16 au centre du panache. Les résultats expérimentaux continuent à décroître pour  $\frac{x'}{x_s}$  supérieur à 10 vers une valeur a priori inférieure à 0.3 et la simulation, arrêtée à  $\frac{x'}{x_s}$  égal à

40, donne une limite inférieure à 0.22.

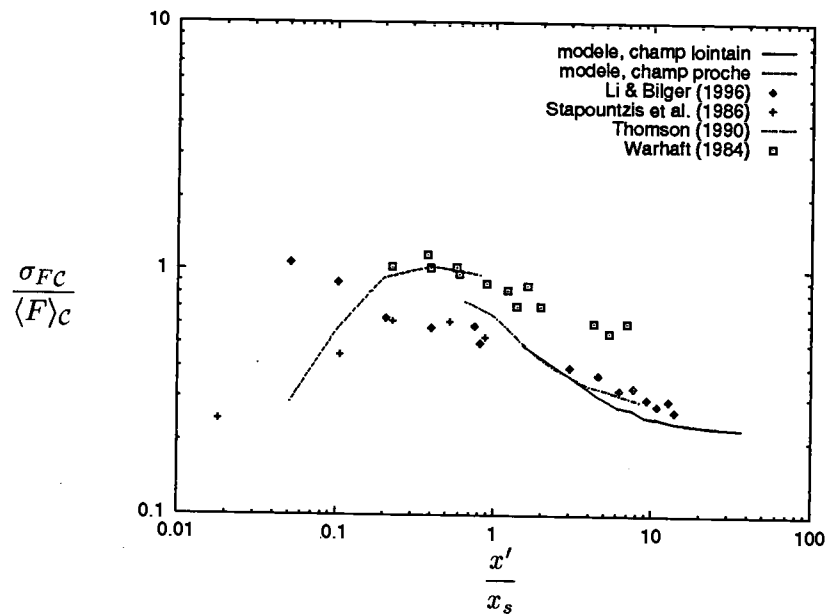


FIG. 4.25 - Evolution longitudinale sur l'axe ( $x'x$ ) de l'écart type de la fraction de mélange divisé par la moyenne de cette grandeur

Le moment absolu d'ordre deux de la fraction de mélange  $\langle F^2 \rangle$  suit approximativement une gaussienne (WARHAFT (1984) et STAPOUNTZIS et al. (1986)) d'écart type  $e_2$ . Le rapport de ce moment sur l'axe normalisé par la valeur moyenne sur l'axe au carré (figure (4.26)) semble tendre vers une constante proche de l'unité. De même, le rapport  $\frac{e_2}{e}$  (figure (4.27)) converge vers une valeur de 0.8 environ. Là encore, c'est pour le champ proche que les résultats numériques et expérimentaux sont le plus dissemblables. Par contre, on obtient des résultats très voisins pour le champ lointain.

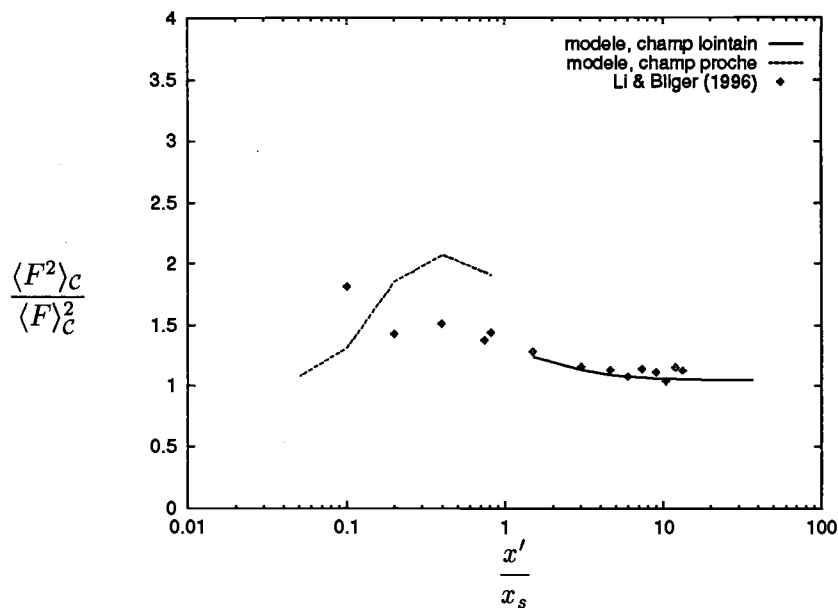


FIG. 4.26 - Evolution longitudinale sur l'axe ( $x'x$ ) du moment absolu d'ordre deux de la fraction de mélange rapporté au carré de la moyenne

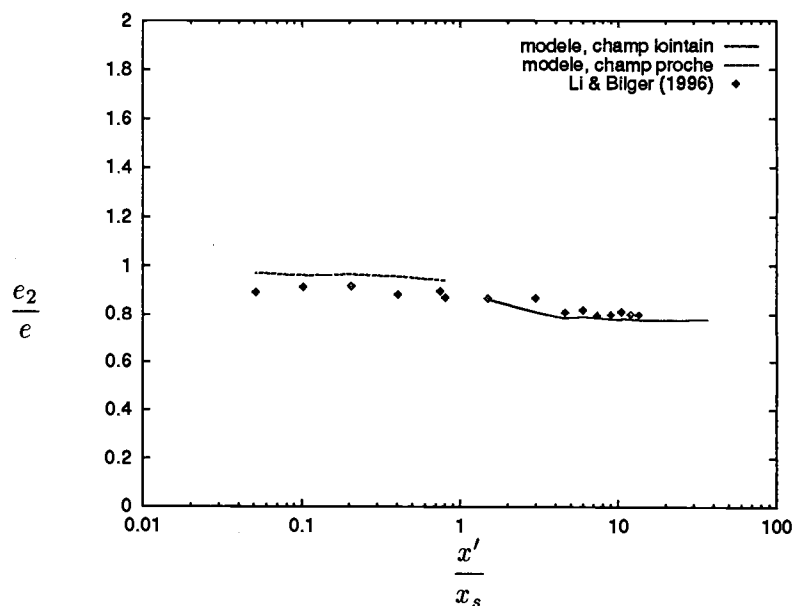


FIG. 4.27 - Evolution longitudinale de l'écart type  $e_2$  de la gaussienne approximant  $\frac{\langle F^2 \rangle}{\langle F \rangle_c}$  rapporté à la largeur  $e$  du panache

Le modèle donne également des profils de coefficients d'asymétrie et d'aplatissement de la fraction de mélange très proches des résultats expérimentaux (figures (4.28)-(4.31)). Par conséquent, on tire des conclusions semblables à celles données par LI & BILGER (1996):

- (i) le coefficient d'asymétrie est en général positif, ce qui signifie que la valeur la plus probable de la fraction de mélange est supérieure à sa moyenne;
- (ii) dans le champ lointain, les résultats numériques et expérimentaux donnent  $S$  et  $K$  proches respectivement de 0 et 3 au centre du panache. La densité de probabilité de la fraction de mélange devient donc symétrique et se rapproche d'une gaussienne.

On note aussi que le coefficient d'aplatissement est sous évalué par rapport aux mesures expérimentales, systématiquement supérieures à 3 (on rappelle que les valeurs de  $S$  et  $K$  pour une gaussienne sont respectivement égales à 0 et 3).

Il est important de remarquer à ce niveau que l'on obtient des résultats de simulation numérique très voisins, que l'on utilise le modèle de diffusion de HSU & CHEN ou celui proposé ici.

On note en particulier que  $K$  tend vers 3 alors que le modèle de diffusion de HSU & CHEN (1991) conduit à une valeur asymptotique de 6. Cela signifie donc que le modèle stochastique à une particule et une échelle de temps couplé à ce type de modèle diffusif amoindrit le caractère "non-gaussien" de ce dernier. Plus précisément, cela montre que le terme de production de fluctuations de concentration par les fluctuations de vitesse conduit rapidement la densité de probabilité de la concentration à relaxer vers une gaussienne en turbulence homogène. Les résultats concernant le champ lointain sont là aussi meilleurs que ceux concernant le champ proche.

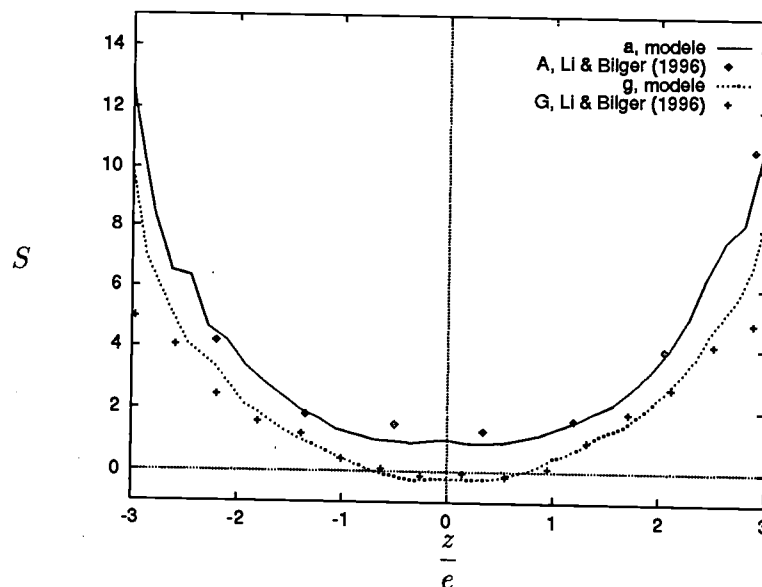


FIG. 4.28 - Profils du coefficient d'asymétrie de la fraction de mélange; cas du champ lointain aux stations A et G

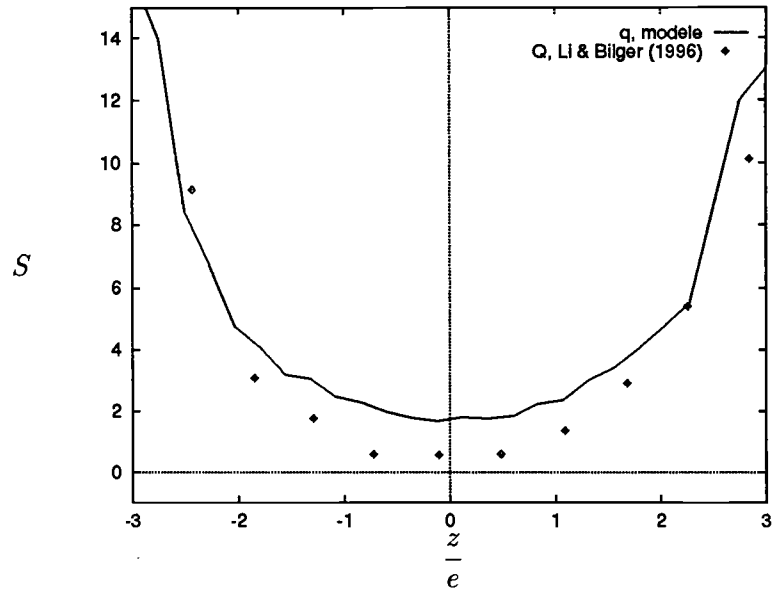


FIG. 4.29 - Profils du coefficient d'asymétrie de la fraction de mélange; cas du champ proche à la station Q

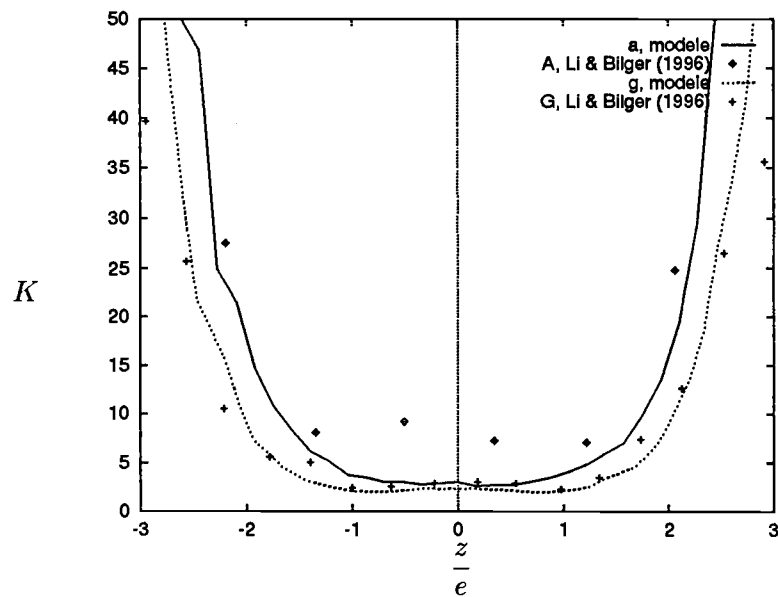


FIG. 4.30 - Profils du coefficient d'aplatissement de la fraction de mélange; cas du champ lointain aux stations A et G

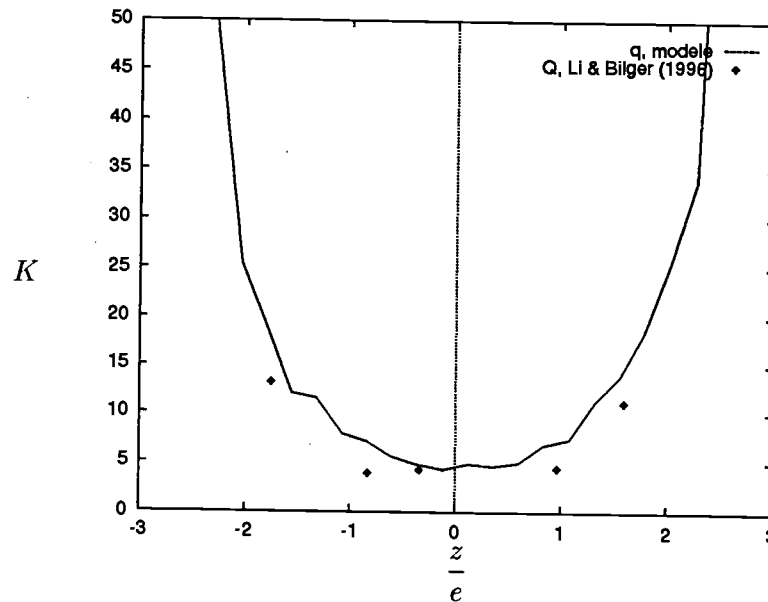


FIG. 4.31 - Profils du coefficient d'aplatissement de la fraction de mélange; cas du champ proche à la station Q

On voit très bien sur la figure (4.30) que, au centre du panache, le coefficient d'aplatissement donné par le modèle converge très vite vers 3 alors que les résultats de LI & BILGER (1996) donnent une valeur de 3 uniquement pour les mesures effectuées loin de la source. Pour les mesures les plus proches de la source, on observe une valeur de 7 environ. Ceci s'explique simplement par l'influence du tube source sur la turbulence qui n'est pas prise en compte par le modèle. On rappelle en effet que le modèle utilise des lois d'évolution pour la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique turbulente et pour celle de son taux de dissipation correspondant à une turbulence de grille établie. La densité de probabilité de la fraction de mélange converge donc plus rapidement vers une gaussienne avec le modèle qu'expérimentalement.

Un autre aspect intéressant concernant les coefficients d'asymétrie et d'aplatissement relatifs à un scalaire passif, pour de nombreux écoulements où ce dernier laisse apparaître un comportement asymptotique de similitude, est qu'ils sont souvent liés par une relation algébrique simple. Ainsi MOLE & CLARKE (1995) proposent une relation de la forme:

$$K = aS^2 + b$$

Ils montrent en particulier, moyennant les travaux de CHATWIN & SULLIVAN (1989) et de SAWFORD & SULLIVAN (1995), que

$$K \geq S^2 + 1$$

Les données de MOLE & JONES (1994) conduisent à

$$K = 1.31S^2 + 0.77$$

et celles de LI & BILGER (1996) à

$$K = 1.51S^2 + 2.8$$

Le modèle donne également une loi quadratique (figures (4.32) et (4.33)). Par contre, celle-ci diffère légèrement entre le champ proche et le champ lointain. On trouve pour le champ proche

$$K = 1.05S^2 + 2$$

et pour le champ lointain

$$K = 1.2S^2 + 2$$

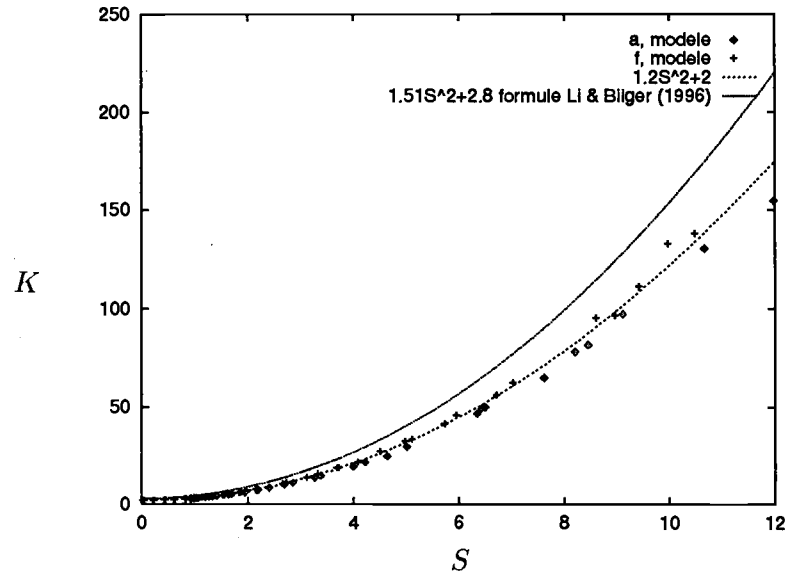


FIG. 4.32 - Coefficient d'aplatissement de la fraction de mélange en fonction du coefficient d'asymétrie; cas du champ lointain aux stations A et F

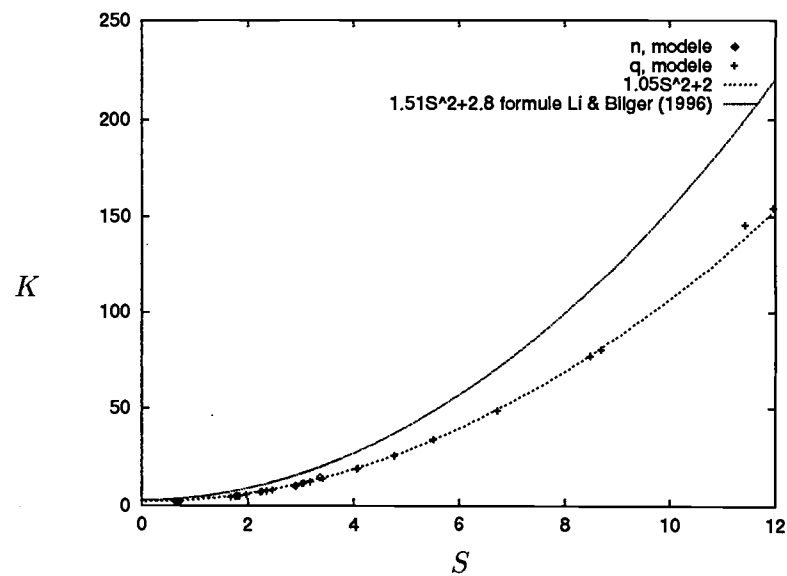


FIG. 4.33 - Coefficient d'aplatissement de la fraction de mélange en fonction du coefficient d'asymétrie; cas du champ proche aux stations N et Q

Si l'on s'intéresse aux profils de concentrations moyennes (figures (4.34) et (4.35)), on vérifie que  $\frac{\langle c_{NO} \rangle}{\langle c_{NO} \rangle c}$  se trouve sous la gaussienne caractéristique d'un scalaire passif, alors que  $\frac{(c_{O_3}^0 - \langle c_{O_3} \rangle)}{(c_{O_3}^0 - \langle c_{O_3} \rangle) c}$  se situe au dessus. Ceci est conforme aux observations expérimentales de LI & BILGER (1996).

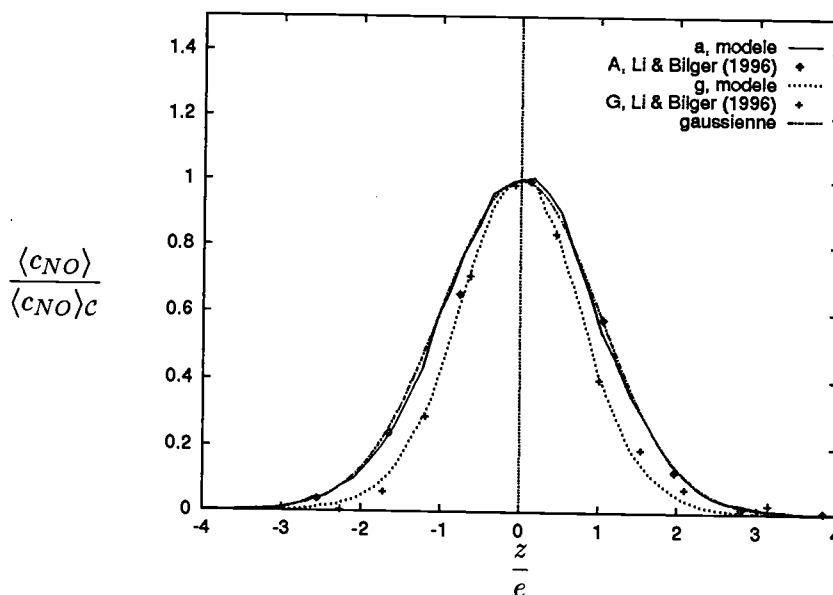


FIG. 4.34 - Profils de la concentration moyenne en monoxyde d'azote rapportée à sa valeur au centre du panache; cas du champ lointain aux stations A et G

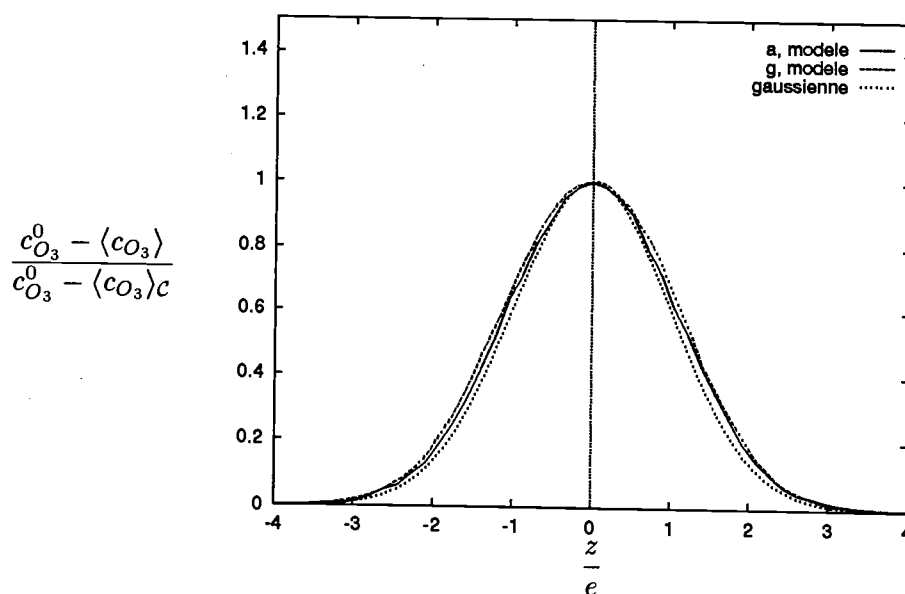


FIG. 4.35 - Profils normalisés de la concentration moyenne en ozone; cas du champ lointain aux stations A et G

Comme le soulignent LI & BILGER (1996), une des différences entre les panaches réactif et non-réactif est que le panache réactif verra le constituant relâché à la source ( $NO$ ) disparaître complètement

sur une certaine distance maximum  $L_r$  à partir de la source (croquis (4.36)).

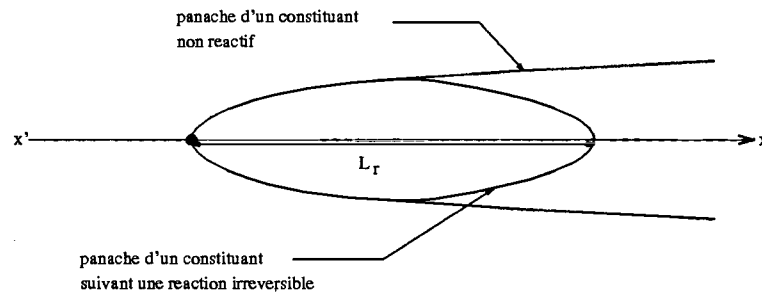


FIG. 4.36 - Croquis des panaches passif et réactif

D'après la définition de la fraction de mélange, cette longueur sera d'autant plus petite que la fraction de mélange stœchiométrique  $F_s$  sera grande. En effet, pour  $F_s$  grande, le réactif porté par le panache réagira complètement avec une quantité moindre de réactant venant de l'écoulement extérieur, ce qui rendra  $L_r$  d'autant plus petite. Or, en comparant les profils de  $\frac{\langle c_{NO} \rangle}{\langle c_{NO} \rangle_c}$  (figure (4.37)) pour  $F_s = 0.079$  (symbole D) et pour  $F_s = 0.045$  (symbole F), soit une différence de 75% au niveau de la fraction de mélange stœchiométrique, à  $X = 6$  et  $X = 9$  respectivement, LI & BILGER (1996) notent une différence de largeur du panache (relativement à celui du scalaire passif) de 5% uniquement. Quant aux profils donnés par le modèle, ils sont quasiment identiques (figure (4.37)). On en conclut que les résultats sont obtenus dans la région où

$$\frac{x'}{L_r} \ll 1$$

Dans cette zone, l'effet de la réaction chimique sur l'extension verticale du panache est minime, et

celle-ci est principalement due à la dispersion turbulente.

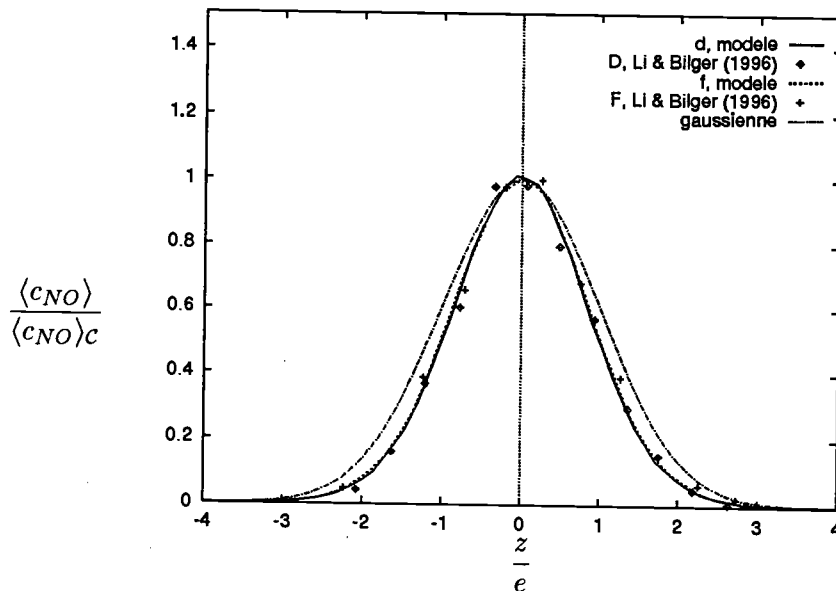


FIG. 4.37 - Profils de la concentration moyenne de monoxyde d'azote normalisée par sa valeur au centre du panache pour différentes fractions de mélange stœchiométriques; cas du champ lointain aux stations D et F

L'évolution longitudinale sur l'axe ( $x'x$ ) de la concentration moyenne en monoxyde d'azote donnée par le modèle suit celle des résultats expérimentaux (figure (4.38)). Elle se trouve néanmoins translatée vers des valeurs supérieures. Ceci vient confirmer que la réaction chimique est correctement prise en compte, mais que l'influence des conditions cinématiques initiales sur la dispersion, en l'occurrence l'effet de la source sur les lois de décroissance utilisées pour la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique turbulente et celle de son taux de dissipation, est ignorée. En ce qui concerne la fraction de mélange stœchiométrique, on voit que le point D, pour lequel  $F_s = 0.079$ , se trouve d'ores et déjà en dessous du point F, pour lequel  $F_s = 0.045$  alors qu'il est beaucoup plus proche de la source. On note ainsi l'effet marqué de la réaction chimique sur la décroissance de la concentration en monoxyde d'azote, et que cet effet dépend fortement du nombre de DAMKÖHLER et de la fraction de mélange stœchiométrique. Ceci contraste avec les largeurs des panaches quasi identiques mentionnées ci-dessus.

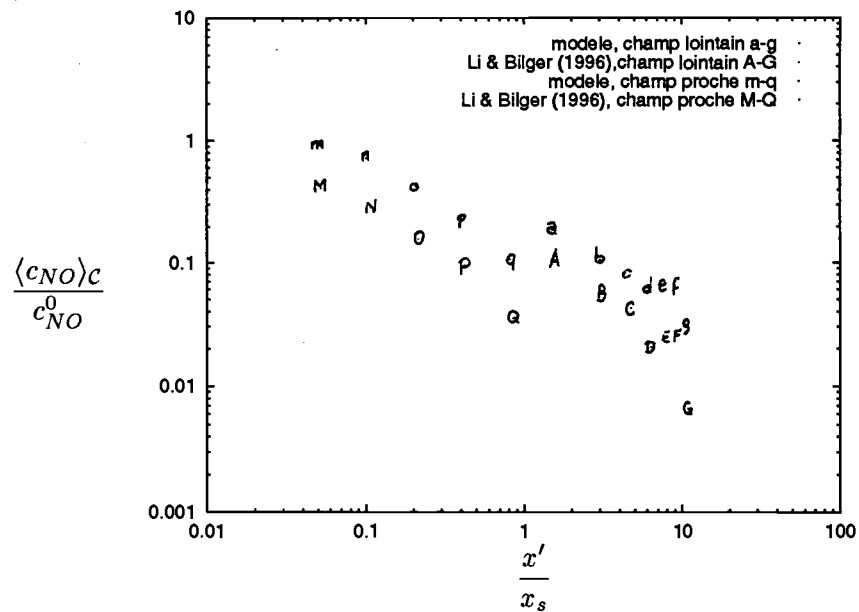


FIG. 4.38 - Evolution longitudinale sur l'axe ( $x'x$ ) de la concentration moyenne en monoxyde d'azote normalisée par sa valeur initiale

Les profils de l'écart type de la concentration en monoxyde d'azote ne présentent quasiment qu'un maximum alors que ceux relatifs à l'ozone en laissent apparaître deux, ce qui est en accord avec les mesures expérimentales (figure (4.39)). Par contre, dans le cas de l'ozone (figure (4.40)), on observe une surévaluation sensible de ces pics.

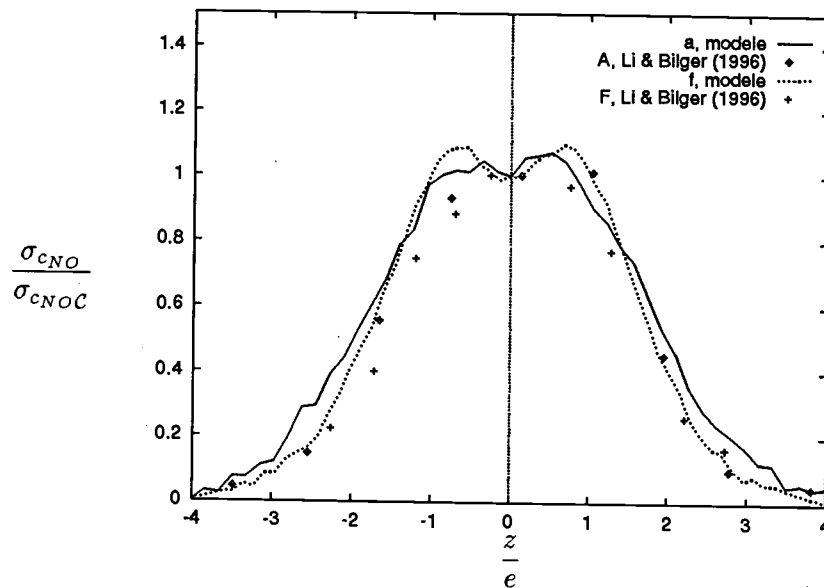


FIG. 4.39 - Profils de l'écart type de la concentration en monoxyde d'azote rapporté à sa valeur au centre du panache; cas du champ lointain aux stations A et F

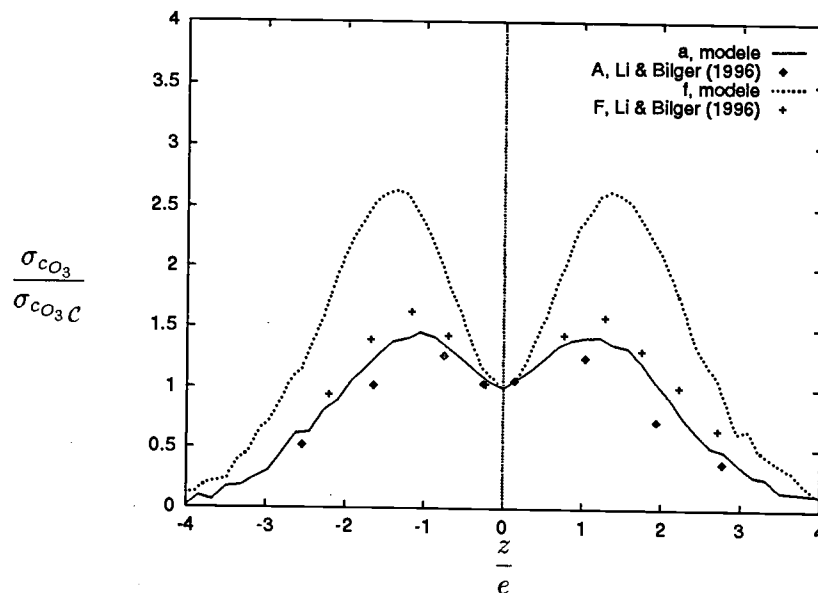


FIG. 4.40 - Profils de l'écart type de la concentration en ozone rapporté à sa valeur au centre du panache; cas du champ lointain aux stations A et F

Comme pour la concentration moyenne en monoxyde d'azote, l'écart type de la concentration de ce composé suit une loi de décroissance semblable à celle des mesures expérimentales (figure (4.41)),

mais est surévalué pour la même raison, à savoir des conditions cinématiques initiales erronées.

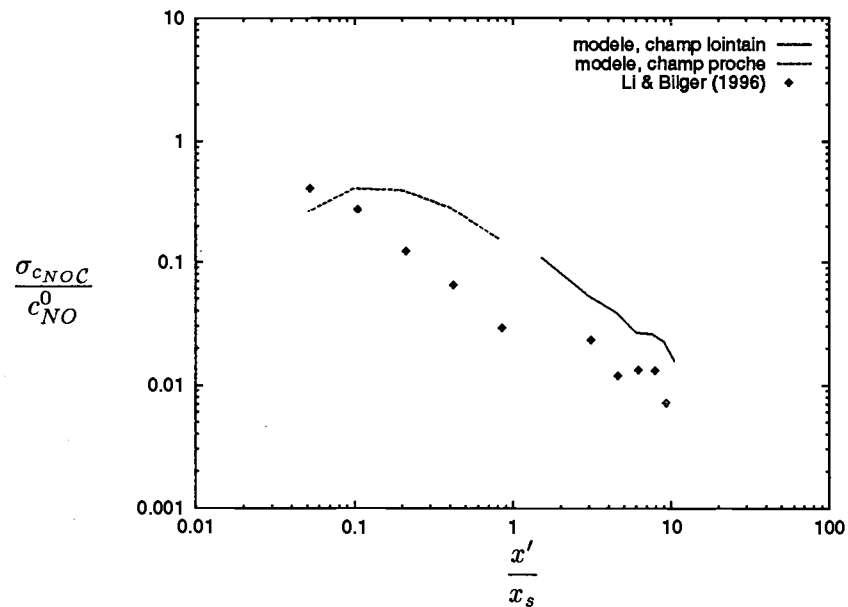


FIG. 4.41 - Evolution longitudinale sur l'axe ( $x'x$ ) de l'écart type de la concentration en monoxyde d'azote rapporté à la concentration initiale

Cependant, l'évolution de l'écart type de la concentration en ozone donnée par le modèle est très proche des résultats expérimentaux (figure (4.42)). Ceci s'explique facilement en reprenant le raisonnement utilisé par LI & BILGER (1996) pour commenter ces courbes. En effet, dans toute la zone où a lieu la réaction,  $c_{O_3}$  variera de 0 à  $c_{O_3}^0$ . On verra donc peu l'influence de la dispersion sur cette grandeur. Par contre, la concentration en monoxyde d'azote variera de 0 à une valeur maximale qui elle dépendra directement de la dispersion, ce qui explique l'influence notable des conditions cinématiques initiales sur les courbes concernant le monoxyde d'azote.

Les corrélations de concentrations rapportées aux écarts types donnés par le modèle sont semblables à celles mesurées (figures (4.43) et (4.44)), et à peu près constantes sur l'intervalle  $[-2, 2]$ .

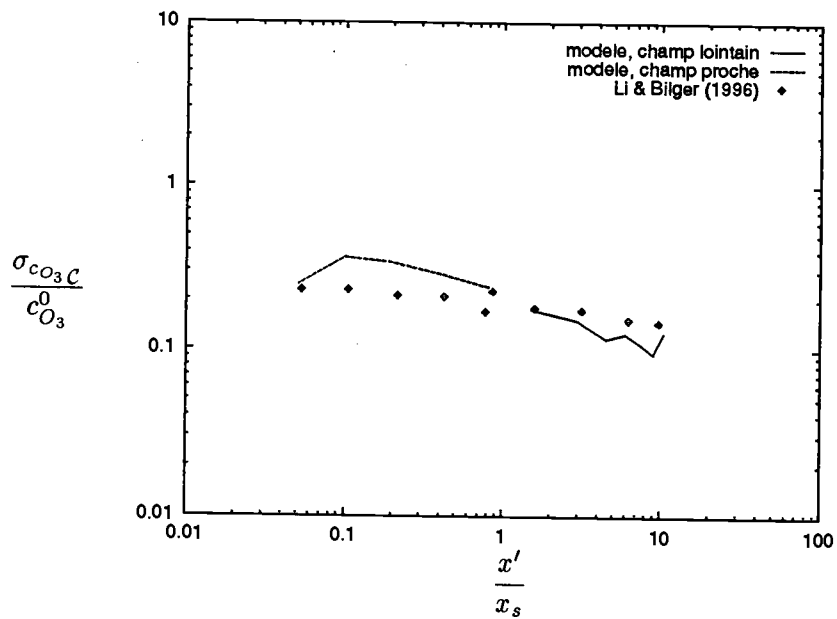


FIG. 4.42 - Evolution longitudinale sur l'axe ( $x'x$ ) de l'écart type de la concentration en ozone rapporté à la concentration initiale

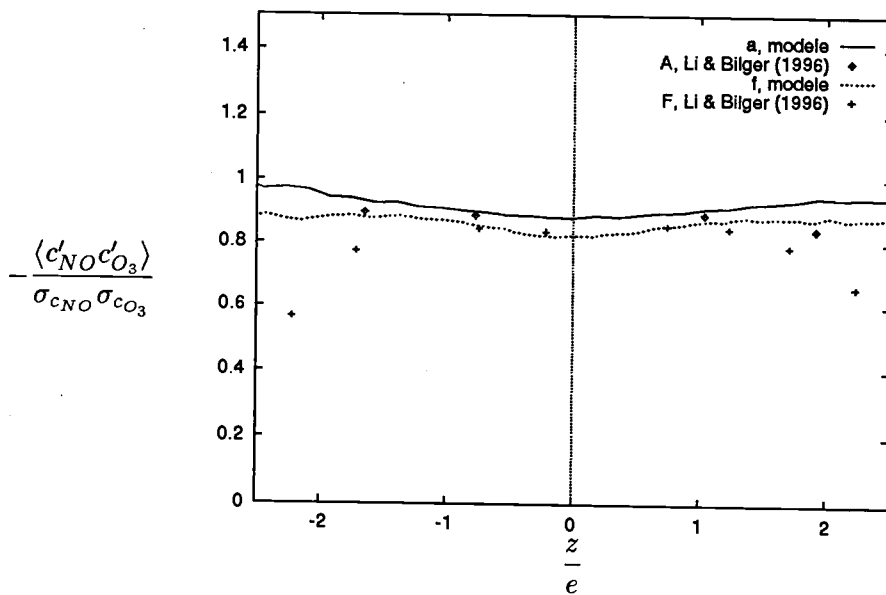


FIG. 4.43 - Profils des corrélations de fluctuations de concentrations rapportées au produit des écarts types; cas du champ lointain aux stations A et F

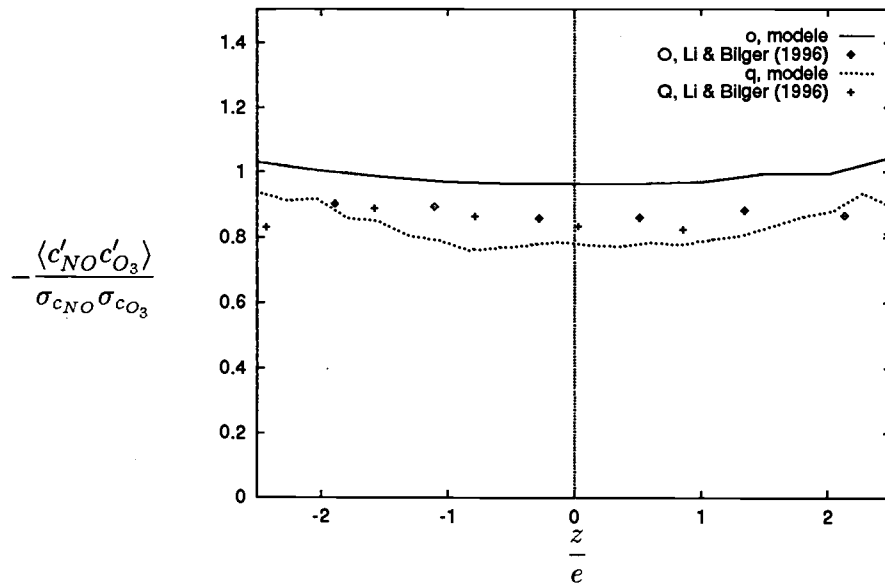


FIG. 4.44 - Profils des corrélations de fluctuations de concentrations rapportées au produit des écarts types; cas du champ proche aux stations O et Q

Enfin, le modèle donne des flux turbulents de la fraction de mélange assez proches des résultats expérimentaux (figures (4.45) et (4.46)). Toutefois, les conditions cinématiques initiales étant erronées, on peut estimer que de meilleurs résultats sont envisageables.

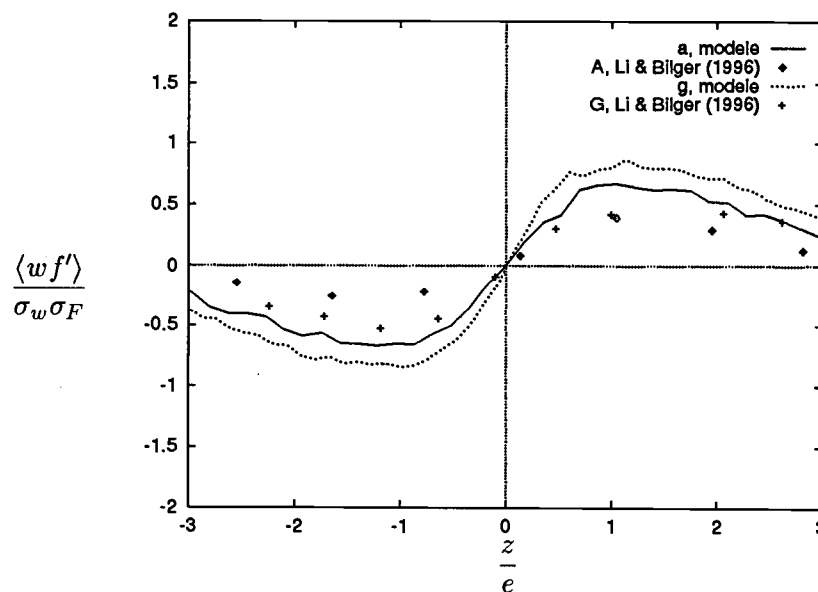


FIG. 4.45 - Profils de la corrélation vitesse-fraction de mélange rapportée au produit des écarts types; cas du champ lointain aux stations A et G

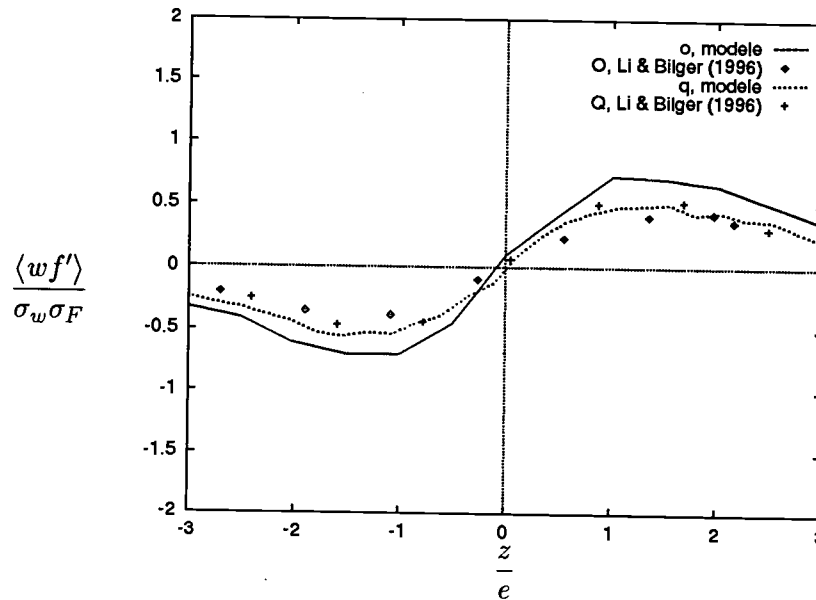


FIG. 4.46 - Profils de la corrélation vitesse-fraction de mélange rapportée au produit des écarts types; cas du champ proche aux stations O et Q

Afin de clore cette série de validations, nous allons envisager le cas d'une source ponctuelle de monoxyde d'azote dans une turbulence de grille transportant de l'ozone. Nous passons donc ici d'une simulation bidimensionnelle à une approche tridimensionnelle.

#### 4.4.3 Source ponctuelle dans une turbulence de grille

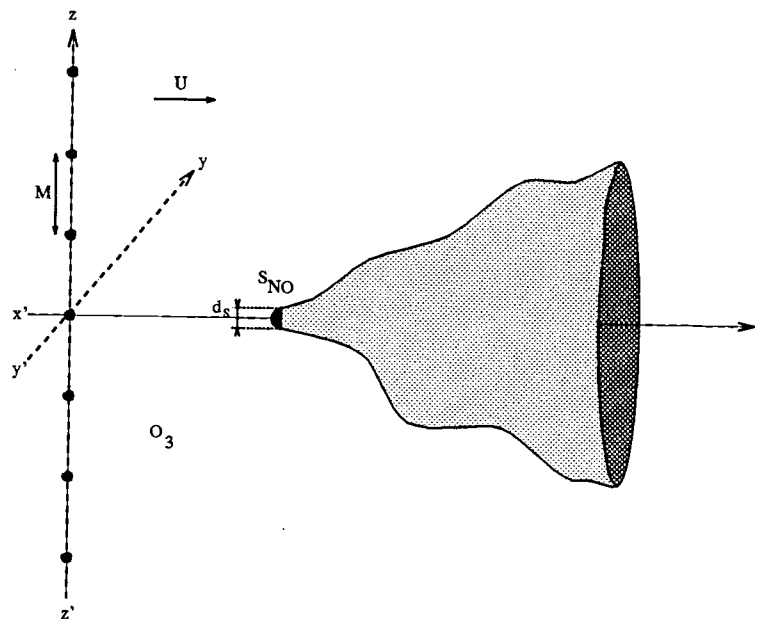
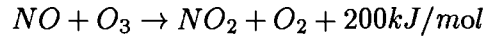


FIG. 4.47 - Schéma de l'expérience de BROWN & BILGER (1996)

Nous présentons ici les résultats relatifs à la simulation numérique de l'expérience menée par BROWN & BILGER (1996). Il s'agit d'une source ponctuelle de monoxyde d'azote dans une turbulence de grille dopée en ozone. Ce problème est différent du précédent puisqu'il ne peut plus être traité suivant une approche bidimensionnelle et nécessite une résolution tridimensionnelle.

Comme pour l'expérience de LI & BILGER (1996), BROWN & BILGER ont étudié la réaction entre le monoxyde d'azote et l'ozone en absence de lumière. La source ponctuelle rejette du monoxyde d'azote qui réagit avec l'ozone transporté par l'écoulement principal suivant la réaction



avec une constante de réaction  $k_0$  égale à  $3.7 \cdot 10^{-1} ppm^{-1}s^{-1}$ .

Elle est placée à une distance égale à  $3M$  de la grille de turbulence avec  $M$  la taille de la maille. Les données expérimentales et les profils de la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique turbulente et de celle de son taux de dissipation ont été rappelés dans le paragraphe précédent. Seules diffèrent les concentrations initiales des deux constituants. Dans le cas de la source ponctuelle, BROWN & BILGER (1996) considèrent des concentrations initiales en monoxyde d'azote et en ozone à peu près constantes, respectivement égales à  $515ppm$  et  $1ppm$ .

Le problème est semblable à celui traité précédemment, à ceci près que le développement du panache ne peut plus être considéré comme bidimensionnel. On peut néanmoins considérer la turbulence isotrope dans tout plan orthogonal à l'axe ( $x'x$ ), direction principale de l'écoulement. Ceci nous permet d'envisager des déplacements suivant les directions ( $y'y$ ) et ( $z'z$ ) décorrélés. Ainsi, le modèle utilisé ici ne diffère de celui utilisé dans le cas du panache bidimensionnel (présenté dans l'Annexe V) que par l'ajout d'un système de deux équations supplémentaires donnant la position de la particule suivant la direction transversale, à savoir:

$$\begin{cases} dy = v dt \\ dv = -C_0 \varepsilon \frac{v}{\sigma_v^2} dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \end{cases}$$

où  $y$  et  $v$  représentent respectivement la position et la vitesse de la particule suivant la direction transversale et  $\sigma_v$  l'écart type des fluctuations de vitesse dans cette direction.

On va donc être conduit à résoudre à chaque pas de temps:

- le modèle stochastique lagrangien à une particule et une échelle de temps donnant l'évolution de la position de chaque particule dans la turbulence de grille:

$$\begin{cases} dx = U dt \\ dz = w dt \\ dw = -C_0 \varepsilon \frac{w}{\sigma_w^2} dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \\ dy = v dt \\ dv = -C_0 \varepsilon \frac{v}{\sigma_v^2} dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \end{cases}$$

- le nouveau modèle de diffusion couplé au terme dû à la chimie donnant l'évolution des concentrations en monoxyde d'azote et en ozone  $c_{NO_m}$ ,  $c_{O_3_m}$ ,  $c_{NO_n}$  et  $c_{O_3_n}$  de deux particules  $m$  et  $n$  tirées aléatoirement dans une boîte:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc_{NO_m}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{NO_n} - c_{NO_m}) - k_0 c_{NO_m} c_{O_3_m} \\ \frac{dc_{O_3_m}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{O_3_n} - c_{O_3_m}) - k_0 c_{NO_m} c_{O_3_m} \\ \frac{dc_{NO_n}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{NO_m} - c_{NO_n}) - k_0 c_{NO_n} c_{O_3_n} \\ \frac{dc_{O_3_n}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{O_3_m} - c_{O_3_n}) - k_0 c_{NO_n} c_{O_3_n} \end{array} \right.$$

La simulation est alors rapidement limitée par la mémoire de l'ordinateur utilisé (SPARC 5). Le nombre de particules croissant très vite avec le temps, le plus grand nombre envisageable, soit  $1.7 \cdot 10^6$  particules, pour atteindre la première section de mesure située à  $X = 7$  s'est avéré insuffisant pour obtenir des résultats suffisamment précis. On ne peut alors que s'intéresser au caractère qualitatif des résultats numériques. Les figures (4.48), (4.50) et (4.52) représentent les profils des valeurs moyennes à la première station de mesure de la fraction de mélange, de la concentration en monoxyde d'azote et de celle en ozone respectivement, et les figures (4.49), (4.51) et (4.53) les profils des écarts types de ces mêmes grandeurs. L'abscisse est ici la distance  $r$  séparant le point considéré de l'axe ( $x'$ ):

$$r^2 = y^2 + z^2$$

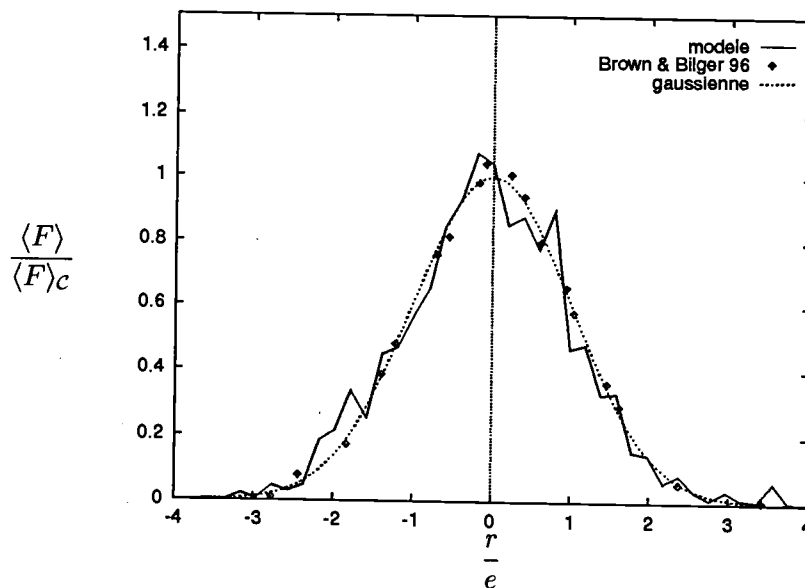


FIG. 4.48 - Profils de la moyenne de la fraction de mélange à  $X = 7$  rapportée à sa valeur au centre du panache

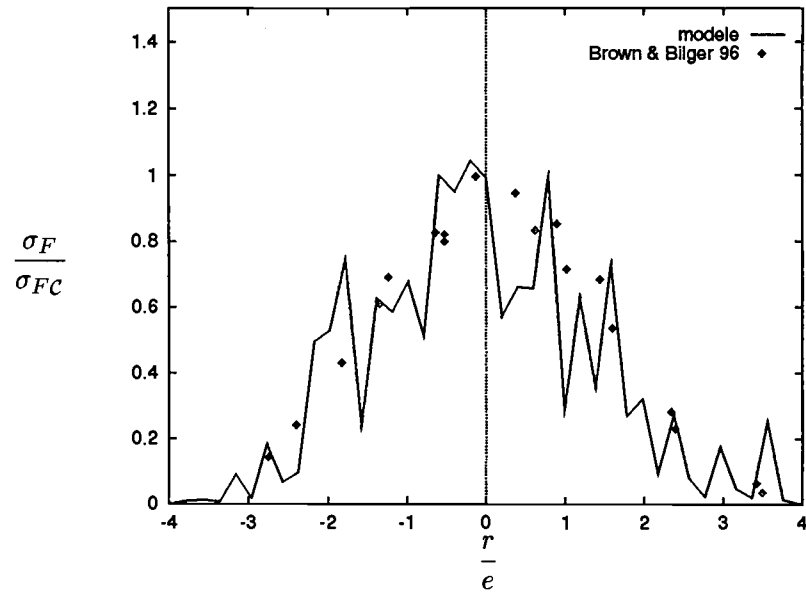


FIG. 4.49 - Profils de l'écart type de la fraction de mélange à  $X = 7$  rapporté à sa valeur au centre du panache

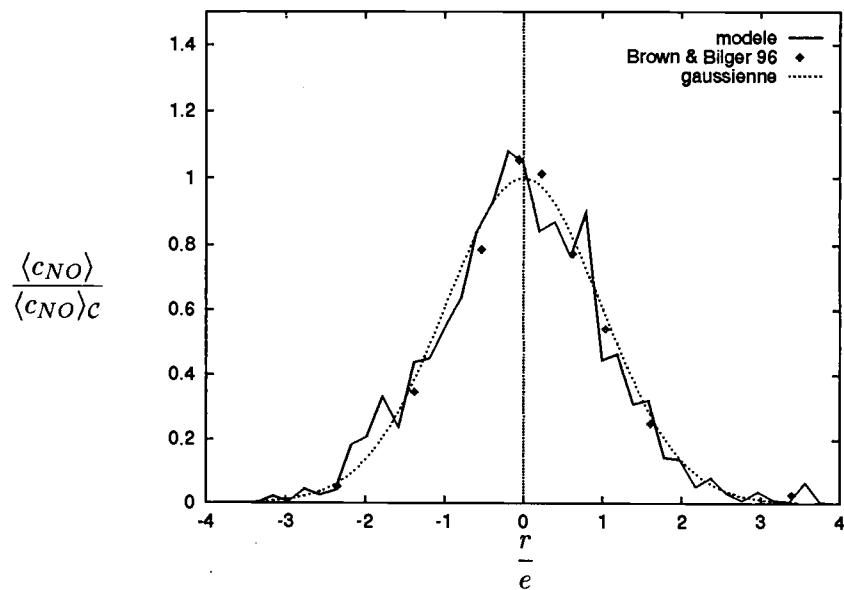


FIG. 4.50 - Profils de la concentration moyenne en monoxyde d'azote à  $X = 7$  rapportée à sa valeur au centre du panache

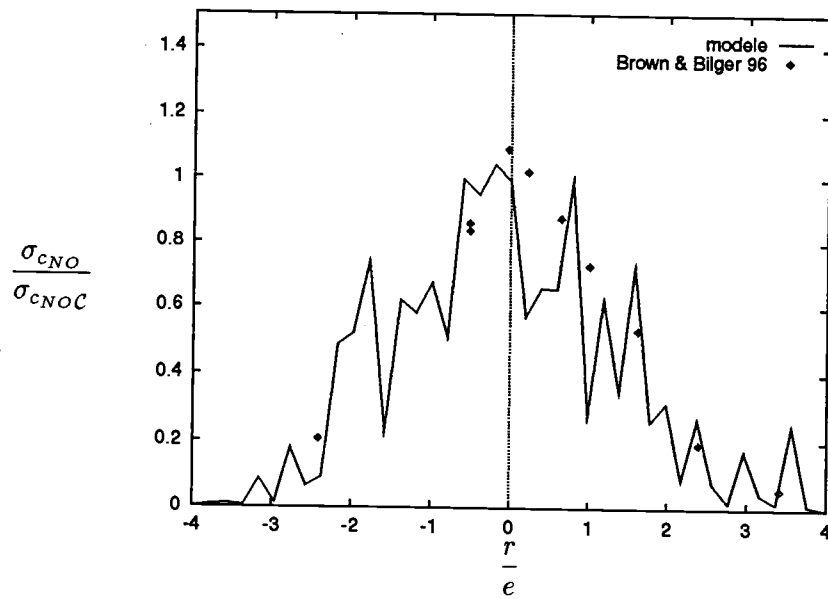


FIG. 4.51 - Profils de l'écart type de la concentration en monoxyde d'azote à  $X = 7$  rapporté à sa valeur au centre du panache

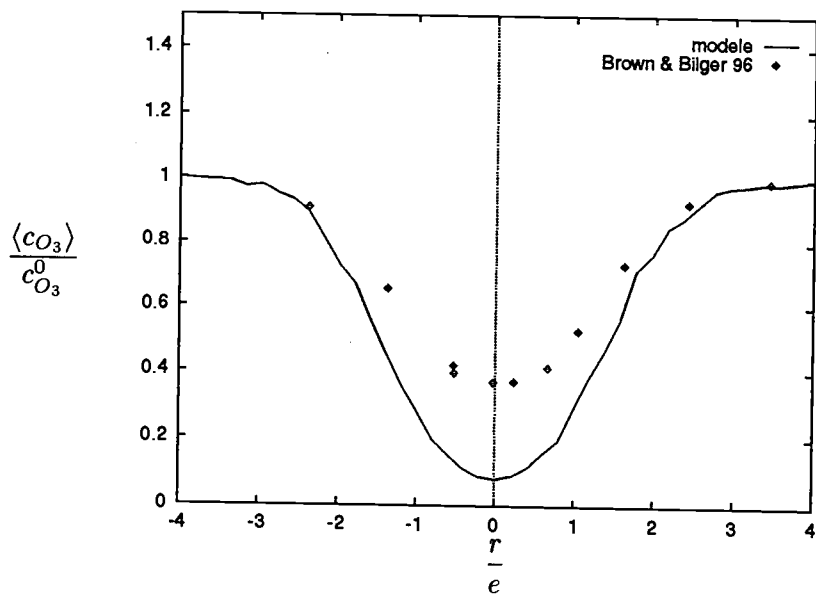


FIG. 4.52 - Profils de la concentration moyenne en ozone à  $X = 7$  rapportée à sa valeur initiale

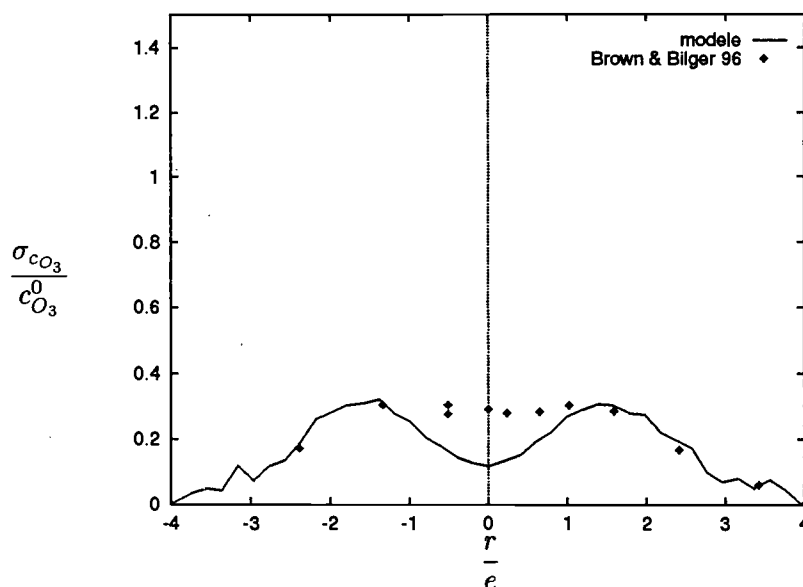


FIG. 4.53 - Profils de l'écart type de la concentration en ozone à  $X = 7$  rapporté à la valeur de la concentration initiale

Ces figures montrent le bon comportement qualitatif du modèle et laissent espérer que l'accord quantitatif sera obtenu dès que la simulation sera effectuée sur un des ordinateurs plus puissants dont dispose maintenant le laboratoire. Concernant l'analyse quantitative, on remarquera néanmoins sur les figures (4.52) et (4.53) que le modèle conduit sur l'axe à une disparition de l'ozone par réaction avec le monoxyde d'azote plus conséquente que ce qui est observé par Brown & Bilger. Comme dans la simulation de la source linéique, ceci s'explique par une dispersion trop faible du modèle au début du calcul. Le monoxyde d'azote reste donc plus longtemps proche de l'axe et réagit par conséquent en plus grande quantité avec l'ozone dans cette région. On rappelle que cette faible dispersion n'est pas liée au modèle à proprement parlé mais par le fait que l'effet de la source sur l'écoulement aval n'est pas modélisé.

Le modèle utilisé est donc capable de donner des résultats très satisfaisants, que ce soit pour des constituants réactifs ou non. Les résultats obtenus pour le champ proche sont moins bons que pour le champ lointain. Ceci est uniquement dû aux conditions cinématiques initiales qui ne sont pas connues exactement.

Les simulations numériques d'une couche de mélange, d'une source linéique et d'une source ponctuelle réactives dans une turbulence de grille nous ont permis de valider le modèle complet. Il est apparu qu'il dépend sensiblement de l'évolution de la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique turbulente et de celle de son taux de dissipation. Néanmoins, dès que ces deux grandeurs sont connues, la qualité des résultats obtenus est très satisfaisante pour le cas d'une chimie lente ou rapide. Enfin, le modèle est capable de donner de bonnes évaluations de grandeurs très importantes dans le cas d'écoulements réactifs telles que les écarts types, les coefficients d'asymétrie et les coefficients d'aplatissement des concentrations, et les flux des différents constituants.



# Conclusion

Les problèmes de pollution atmosphérique devenant préoccupants, de nombreux travaux ont été réalisés afin de simuler des écoulements où ont lieu des réactions chimiques. Nous avons ici concentré notre étude sur la recherche d'un modèle lagrangien de dispersion avec prise en compte des réactions chimiques.

Le travail qui vient d'être présenté offre une réponse très satisfaisante, bien que partielle, au problème posé.

- Il permet tout d'abord de faire le point sur les modèles stochastiques de suivi lagrangien de particules. Il apparaît que l'approche de THOMSON (1987) visant à obtenir un modèle à une particule et une échelle de temps est la plus rigoureuse. Des simulations de dispersion d'un scalaire non réactif ont été réalisées en turbulence homogène et surtout en turbulence inhomogène, avec ou sans flottabilité, ce qui assure une validation numérique de cette approche dans des cas peu étudiés jusqu'alors.
- Ensuite, afin d'envisager un modèle stochastique de suivi lagrangien de particules avec réactions chimiques, on a couplé le modèle stochastique lagrangien à une particule et une échelle de temps à un modèle de diffusion qui a pour but de prendre en compte l'effet de la diffusivité moléculaire et aussi celui des plus petites échelles de la turbulence sur la dispersion. Le modèle a l'avantage d'être continu en temps et d'assurer une relaxation de la densité de probabilité de la concentration vers une gaussienne en turbulence homogène isotrope stationnaire (conformément aux observations expérimentales), critère non rigoureusement respecté à notre connaissance par d'autres modèles. La continuité en temps permet une extension immédiate aux écoulements réactifs. Les réactions chimiques ne nécessitent pour leur part aucune modélisation.

On note que le modèle de diffusion est tout à fait adapté aux calculs de densité de probabilité par la méthode de MONTE-CARLO.

- Les simulations numériques d'une couche de mélange entre le monoxyde d'azote et l'ozone, d'une source linéique et d'une source ponctuelle de monoxyde d'azote dans une turbulence de grille dopée en ozone donnent des résultats satisfaisants. Ceux relatifs à la fraction de mélange, scalaire passif, sont toutefois meilleurs que ceux concernant les constituants réactifs. On peut noter que les expériences nécessaires à la validation de ce type de modèle sont très délicates (BILGER et al. (1991)) et que les mesures doivent parfois être considérées avec prudence.

Il sera dès lors intéressant de simuler de nouveau une source ponctuelle réactive, telle que l'expérience de BROWN & BILGER (1996), sur un ordinateur plus puissant que SPARC 5 afin d'affiner les résultats obtenus.

Remarquons que les réactions chimiques envisagées ici sont rapides (nombre de DAMKÖHLER de l'ordre de l'unité). Pour des réactions très rapides, c'est-à-dire celles dont les échelles de temps de

réaction sont très inférieures à l'échelle temporelle intégrale de la turbulence, il sera nécessaire d'utiliser le modèle stochastique de suivi lagrangien de particules à deux échelles de temps. Ce type de réactions se rencontre principalement dans l'eau, par exemple pour la réaction entre un acide et une base (BENNANI et al. (1985)). Il faudra de plus s'attendre à une influence du nombre de SCHMIDT sur le modèle. Le temps nécessaire au calcul numérique sera bien évidemment supérieur à celui du modèle à une échelle de temps.

La simplicité structurelle du modèle permettra l'extension immédiate à une chaîne de réactions.

Le rejet ponctuel, que nous avons simulé pour valider notre modèle dans le cas d'une dispersion tridimensionnelle, était placé dans une turbulence de grille. La turbulence était alors supposée isotrope dans tout plan orthogonal à l'axe longitudinal, ce qui nous a permis d'envisager des équations stochastiques d'évolution des vitesses verticale et transversale non corrélées. Si l'on souhaite maintenant simuler un rejet dans une turbulence inhomogène, il faudra envisager des équations stochastiques corrélées, ce qui semble être un problème ouvert (SAWFORD & GUEST (1988)).

Enfin, on peut souligner le potentiel intrinsèque du modèle que nous venons de présenter. En effet, si nous nous sommes limités à l'étude de l'évolution de concentrations dans des écoulements isothermes et à masse volumique constante, il est clair que la généralisation à l'étude d'un scalaire quelconque peut être envisagé sur les mêmes bases.

# Annexes



## Annexe I

# Modèles de fermeture des équations de la mécanique des fluides

On présente ici le traitement statistique des équations de la mécanique des fluides. Les fermetures envisagées vont faire apparaître deux nouvelles grandeurs, l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation. Les équations d'évolution de ces deux quantités sont rappelées, ainsi que les différentes façons de traiter l'écoulement proche d'une paroi.

### I.1 Traitement statistique des équations

Toute grandeur physique  $\Phi(\vec{x}, t)$  permettant de décrire un écoulement turbulent peut se décomposer en une partie moyenne (moyenne d'ensemble) et une partie fluctuante:

$$\Phi(\vec{x}, t) = \langle \Phi \rangle(\vec{x}, t) + \varphi'(\vec{x}, t)$$

Cette décomposition, dite de REYNOLDS, est surtout utilisée pour les écoulements faiblement compressibles ou faiblement dilatables. Pour les écoulements compressibles, on lui préférera, notamment pour des raisons de simplification des équations, la décomposition de FAVRE donnée par

$$\Phi(\vec{x}, t) = \tilde{\Phi}(\vec{x}, t) + \varphi''(\vec{x}, t)$$

avec

$$\langle \rho \rangle(\vec{x}, t) \tilde{\Phi}(\vec{x}, t) = \langle \rho(\vec{x}, t) \Phi(\vec{x}, t) \rangle$$

Pour fixer les idées, considérons un mélange binaire isotherme de deux fluides chimiquement passifs. Il est déterminé en tout point  $M(\vec{x})$  du domaine d'étude par:

- sa densité  $\rho(\vec{x}, t)$ ;
- sa vitesse  $\vec{u}(\vec{x}, t)$ ;
- sa pression  $p(\vec{x}, t)$ ;
- les fractions massiques  $\chi_1(\vec{x}, t)$  et  $\chi_2(\vec{x}, t)$  des deux constituants.

Les équations de continuité, de conservation de la matière et de NAVIER-STOKES s'écrivent sous forme sans dimension <sup>1</sup>

---

1. On gardera par abus d'écriture les mêmes notations pour les grandeurs sans dimension que pour les grandeurs dimensionnées.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \tilde{\mathbf{u}}) = 0 \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial \tilde{\chi}_1}{\partial t} + \langle \rho \rangle \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{\chi}_1 = \nabla \cdot \left( \frac{1}{Re Sc} \nabla \langle \chi_1 \rangle \right) - \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \chi_1'' \tilde{\mathbf{u}}'') \\ \tilde{\chi}_1 + \tilde{\chi}_2 = 1 \\ \frac{\partial (\langle \rho \rangle \tilde{\mathbf{u}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \tilde{\mathbf{u}} * \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla \langle p \rangle + \langle \rho \rangle \tilde{\mathbf{g}} - \frac{2}{3Re} \nabla (\nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{u}} \rangle) \\ \quad + \frac{1}{Re} \nabla \cdot (\hat{\nabla} \cdot \langle \tilde{\mathbf{u}} \rangle + \hat{\nabla}^t \cdot \langle \tilde{\mathbf{u}} \rangle) - \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \tilde{\mathbf{u}}'' * \tilde{\mathbf{u}}'') \end{array} \right.$$

Auxquelles vient s'ajouter, dans le cas des gaz parfaits, l'équation d'état:

$$\langle \rho \rangle = 1 + \gamma M_0^2 \langle p \rangle$$

où

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

$$\hat{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

et  $Re$ ,  $Sc$  et  $M_0$  sont les nombres sans dimension de REYNOLDS, SCHMIDT et MACH:

$Re = \frac{U_0 L_0}{\nu}$  mesure le rapport entre les forces d'inertie et de viscosité;

$Sc = \frac{\nu}{D}$  mesure le rapport entre les diffusivités cinématique et moléculaire du constituant 1 dans le constituant 2;

$M_0 = \frac{U_0}{c_0}$  mesure le rapport entre la vitesse de référence et la célérité du son.

Dans le système d'équations d'évolution, il apparaît donc deux corrélations, dues à la non-linéarité des équations, qu'il va falloir modéliser pour résoudre le système aux valeurs moyennes:

- $\tilde{\mathbf{u}}'' * \tilde{\mathbf{u}}''$  est appelée tenseur de REYNOLDS et traduit l'action du flux turbulent de quantité de mouvement;

- $\chi_1'' \tilde{\mathbf{u}}''$  traduit l'action du flux turbulent de fraction massique.

Ces termes vont être modélisés grâce à une hypothèse de viscosité de turbulence.

## I.2 Hypothèses de fermeture

L'hypothèse de Boussinesq revient à considérer les termes du tenseur de REYNOLDS comme des termes de contraintes et à les relier par conséquent au gradient de vitesse moyenne suivant une "viscosité de turbulence", fonction de l'écoulement en présence et non de la nature du fluide. En compressible, cette hypothèse s'écrit (JONES & MC GUIRK (1979)):

$$\langle \rho \rangle \tilde{u}'' * \tilde{u}'' = \frac{2}{3} (\langle \rho \rangle k + \mu_t \nabla \cdot \tilde{u}) \mathbf{I} - \mu_t (\hat{\nabla} \tilde{u} + \hat{\nabla}^t \tilde{u})$$

où  $k$  est l'énergie cinétique turbulente, définie par:

$$k = \tilde{u}'' * \tilde{u}''$$

On choisit ici pour la viscosité de turbulence une relation la reliant directement à l'énergie cinétique de turbulence et son taux de dissipation  $\varepsilon$  suivant:

$$\mu_t = C_\mu \langle \rho \rangle \frac{k^2}{\varepsilon}$$

avec

$$\varepsilon = \left\langle \frac{\nu}{2} \left( \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right)^2 \right\rangle$$

et  $C_\mu$  une constante. Cette relation introduit deux inconnues ( $k$  et  $\varepsilon$ ) qui nécessitent deux nouvelles équations d'évolution. En généralisant l'approche faite pour modéliser le tenseur de REYNOLDS, la corrélation  $\chi_1'' \tilde{u}''$  peut être exprimée en fonction du gradient de fraction massique:

$$\chi_1'' \tilde{u}'' = - \frac{\mu_t}{S_{c_t}} \nabla \chi_1$$

où  $S_{c_t}$  est le nombre de SCHMIDT turbulent, habituellement pris constant.

## I.3 Modélisation des équations sur $k$ et $\varepsilon$

Les équations exactes d'évolution de  $k$  et  $\varepsilon$  (TENNEKES & LUMLEY (1972)) contiennent de nombreux termes inconnus qui seront exprimés en fonction des variables principales du problème. En faiblement compressible ou faiblement dilatable, de nombreux travaux ont donné naissance à des équations modélisées sur  $k$  et  $\varepsilon$  s'écrivant, dans les régions où la turbulence est quasi homogène, sous la forme:

$$\begin{cases} \langle \rho \rangle \frac{\partial k}{\partial t} + \langle \rho \rangle \tilde{u} \cdot \nabla k &= \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + P - \langle \rho \rangle \varepsilon \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \langle \rho \rangle \tilde{u} \cdot \nabla \varepsilon &= \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P - C_{\varepsilon 2} \langle \rho \rangle \frac{\varepsilon^2}{k} \end{cases}$$

avec

$$P = - \langle \rho \rangle \tilde{u}'' * \tilde{u}'' \cdot \hat{\nabla} \tilde{u}$$

et où  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\varepsilon$ ,  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$  sont des constantes.

En supposant  $M_0 \ll 1$ , le système fermé d'équations rendues sans dimension s'écrit finalement:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{Q} = 0 \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial \tilde{\chi}_1}{\partial t} + \vec{Q} \cdot \nabla \tilde{\chi}_1 = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{Re Sc} + \frac{1}{R_t Sc_t} \right) \nabla \langle \chi_1 \rangle \right] \\ \tilde{\chi}_1 + \tilde{\chi}_2 = 1 \\ \frac{\partial \vec{Q}}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{\vec{Q}}{\rho} * \vec{Q} \right) = -\nabla p^* + \frac{1}{Fr} \Delta \rho \frac{\vec{g}}{\|\vec{g}\|} \\ \quad + \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t} \right) (\hat{\nabla} \langle \vec{u} \rangle + \hat{\nabla}^t \langle \vec{u} \rangle) \right] \\ \langle \rho \rangle = 1 \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial k}{\partial t} + \vec{Q} \cdot \nabla k = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t \sigma_k} \right) \nabla k \right] + P - \langle \rho \rangle \varepsilon \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \vec{Q} \cdot \nabla \varepsilon = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t \sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] \\ \quad + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P - C_{\varepsilon 2} \langle \rho \rangle \frac{\varepsilon^2}{k} \end{array} \right. \quad (I.1)$$

avec:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{Q} = \langle \rho \rangle \vec{u} \\ \frac{1}{R_t} = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \\ \Delta \langle \rho \rangle = \langle \rho \rangle - \rho_0 \\ \langle p \rangle^* = \langle p \rangle - \frac{1}{Fr} \rho_0 z + \frac{2}{3} \left[ \left( \frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t} \right) \nabla \cdot \frac{\vec{Q}}{\langle \rho \rangle} + \langle \rho \rangle k \right] \\ P = \left[ \frac{1}{R_t} (\hat{\nabla} \frac{\vec{Q}}{\langle \rho \rangle} + \hat{\nabla}^t \frac{\vec{Q}}{\langle \rho \rangle}) - \frac{2}{3} (\langle \rho \rangle k \frac{1}{R_t} \nabla \cdot \frac{\vec{Q}}{\langle \rho \rangle}) \mathbf{I} \right] \cdot \hat{\nabla} \frac{\vec{Q}}{\langle \rho \rangle} \end{array} \right.$$

Les constantes ont été calibrées en comparant des tests numériques et des mesures expérimentales dans le cas incompressible.

Pour le cas compressible ou dilatable, on prendra les mêmes valeurs, à savoir  $C_\mu = 0.09$ ,  $C_{\varepsilon 1} = 1.44$ ,  $C_{\varepsilon 2} = 1.92$ ,  $\sigma_k = 1$  et  $\sigma_\varepsilon = 1.3$ . On prendra d'autre part  $Sc_t = 1$ .

Se pose alors un problème purement numérique. En effet, plus les variations des grandeurs sont fortes, plus le maillage dans la région concernée devra être raffiné afin que la résolution numérique puisse traiter ces forts gradients sans diverger. De telles régions se rencontrent notamment proche des parois solides où la condition d'adhérence de la vitesse à la paroi provoque de brusques variations des grandeurs cinématiques. Dans ces zones, la turbulence devient fortement inhomogène, et les équations données ci-dessus ne peuvent plus modéliser correctement l'écoulement. Suivant l'intérêt de ces régions, on envisagera soit un modèle avec lois dites "de proches parois", soit un modèle dit "bas REYNOLDS", soit un modèle "bi-couche". Le premier envisage la résolution du système d'équations (I.1) jusqu'à une

distance à la paroi au-delà de laquelle les variations des grandeurs calculées sont modérées. Il implique donc une perte d'information proche de la paroi mais permet d'éviter un nombre de points de résolution trop important et par là même un coût en temps de calcul trop élevé. Le second résout des équations plus détaillées. La perte d'information disparaît mais le coût temporel croît très sensiblement. Le dernier est un compromis entre les deux, utilisant des lois de comportement algébriques proche de la paroi. On présente ici les deux premiers.

## I.4 Modèle avec lois "de proches parois"

On utilise dans ce modèle des lois analytiques d'équilibre permettant le calcul des conditions aux limites à imposer à une certaine distance  $D_p$  de la paroi. Au voisinage de la paroi, pour une couche limite incompressible, l'équation de NAVIER-STOKES s'intègre suivant la direction tangentielle (CEBECI & SMITH (1974)):

$$\left( \frac{1}{Re} \frac{\partial \langle \vec{u} \rangle \cdot \vec{t}}{\partial n} - \langle u'v' \rangle \right) \Big|_{D_p} = \frac{1}{Re} \frac{\partial \langle \vec{u} \rangle \cdot \vec{t}}{\partial n} \Big|_0 = \frac{\tau_p}{\langle \rho \rangle} = u_f^2$$

où  $\tau_p$  et  $u_f$  définissent respectivement une contrainte pariétale et une vitesse de frottement. En modélisant  $\langle u'v' \rangle$  à l'aide d'une longueur de mélange, soit en prenant

$$\mu_t = \langle \rho \rangle l^2 \|\hat{\nabla} \langle \vec{u} \rangle\|,$$

on obtient dans la zone pleinement turbulente la loi logarithmique suivante:

$$\frac{\langle \vec{u} \rangle \cdot \vec{t} \Big|_{D_p}}{u_f} = \frac{1}{\kappa} \log(Re D_p u_f) + C$$

où  $\kappa$  est la constante de KARMAN. Pour la sous-couche visqueuse, où la contrainte turbulente est négligeable, on trouve la loi linéaire suivante:

$$\frac{\langle \vec{u} \rangle \cdot \vec{t} \Big|_{D_p}}{u_f} = Re D_p u_f$$

Les valeurs de  $\kappa$  et  $C$ , calibrées expérimentalement, sont classiquement les suivantes:  $\kappa = 0.419$ ,  $C = 5.445$ . Le raccordement de ces deux lois est obtenu pour  $Re D_p u_f = 11.6$ . Proche de la paroi, on fait l'hypothèse que les équations d'évolution de  $k$  et  $\varepsilon$  se réduisent à un équilibre entre les termes de production et de dissipation, ce qui conduit aux conditions aux limites pour  $k$  et  $\varepsilon$  suivantes:

$$\begin{cases} k \Big|_{D_p} = \frac{u_f^2}{\sqrt{C_\mu}} \\ \varepsilon \Big|_{D_p} = \frac{u_f^3}{\kappa D_p} \end{cases}$$

Pour les écoulements compressibles, on gardera les mêmes relations. Bien qu'elles ne soient pas justifiées de manière rigoureuse, les résultats expérimentaux obtenus par CHUNG & NG (1982) les confirment à condition d'introduire les variations de  $\nu$  avec la température. On retiendra finalement les relations

suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\bar{u} \cdot \bar{t}}{u_f} \Big|_{D_p} = Re D_p u_f \quad \text{si } Re D_p u_f < 11.6 \\ \frac{\bar{u} \cdot \bar{t}}{u_f} \Big|_{D_p} = \frac{1}{\kappa} \log(Re D_p u_f) + C \quad \text{si } Re D_p u_f < 11.6 \\ \bar{u} \cdot \bar{t} \Big|_{D_p} = 0 \\ k \Big|_{D_p} = \frac{u_f^2}{\sqrt{C_\mu}} \\ \varepsilon \Big|_{D_p} = \frac{u_f^3}{\kappa D_p} \end{array} \right.$$

avec

$$u_f^2 = \left( \frac{1}{Re} \frac{\partial \bar{u} \cdot \bar{t}}{\partial n} - u'' v'' \right) \Big|_{D_p} = \left( \frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t} \right) \frac{\partial \bar{u} \cdot \bar{t}}{\partial n} \Big|_{D_p}$$

## I.5 Modèle "bas REYNOLDS"

Dans ce modèle, on envisage une formulation des équations régissant les variations des grandeurs moyennes légèrement différentes de (I.1), en ce sens que les effets de proches parois sont ici modélisés d'après l'étude du comportement asymptotique des différents termes de corrélations. De nombreuses modélisations ont été proposées. On pourra notamment consulter l'article de PATEL et al. (1985), qui comparent les principales. Par exemple, le système (I.1) devient suivant la modélisation de MICHELASSI & SHI (1991)

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \bar{Q} = 0 \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial \tilde{\chi}_1}{\partial t} + \bar{Q} \cdot \nabla \tilde{\chi}_1 = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{Re Sc} + \frac{1}{R_t' Sc_t} \nabla \langle \chi_1 \rangle \right) \right] \\ \tilde{\chi}_1 + \tilde{\chi}_2 = 1 \\ \frac{\partial \bar{Q}}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{\bar{Q}}{\rho} * \bar{Q} \right) = -\nabla \langle p \rangle^* + \frac{1}{Fr} \Delta \rho \frac{\bar{g}}{\|\bar{g}\|} \\ \quad + \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t'} \right) (\hat{\nabla} \langle \bar{u} \rangle + \hat{\nabla}^t \langle \bar{u} \rangle) \right] \\ \langle \rho \rangle = 1 \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial k}{\partial t} + \bar{Q} \cdot \nabla k = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t' \sigma_k} \right) \nabla k \right] + P' - \langle \rho \rangle \varepsilon + \pi \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{Q} \cdot \nabla \varepsilon = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{Re} + \frac{1}{R_t' \sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] \\ \quad + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P' - C_{\varepsilon 2} \langle \rho \rangle \frac{\varepsilon^2}{k} f_2 f_\varepsilon + E \end{array} \right.$$

avec:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{R'_t} = \frac{1}{R_t} f_\mu \\ f_\mu = 1 - \exp(-0.0004 \exp(1.2 R_L^{1/4})) / \exp(-0.0004) \\ R_L = \frac{L}{L_\nu} \\ L = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \\ L_\nu = \frac{\nu}{\|\langle \vec{u} \rangle\|} \\ \pi = \left[ \frac{0.004}{f_\mu^2} \frac{1}{R_t \sigma_k} k_{,j} \right]_{,j} \\ P' = \left[ \frac{1}{R'_t} (\hat{\nabla} \frac{\bar{Q}}{\langle \rho \rangle} + \hat{\nabla}^t \frac{\bar{Q}}{\langle \rho \rangle}) - \frac{2}{3} (\langle \rho \rangle k \frac{1}{R'_t} \nabla \cdot \frac{\bar{Q}}{\langle \rho \rangle}) \mathbf{I} \right] \cdot \hat{\nabla} \frac{\bar{Q}}{\langle \rho \rangle} \\ R_T = Re \frac{k^2}{\varepsilon} \\ f_2 = 1 - 2.22 \exp(-\frac{R_T^2}{36}) \\ f_\varepsilon = 1 - \exp(-\sqrt{R_T}) \\ E = \frac{\langle \rho \rangle}{Re R'_t} \langle u \rangle_{i,jk} \langle u \rangle_{i,jk} \end{array} \right.$$

Les valeurs des différentes grandeurs à la paroi seront:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{u}_{paroi} = 0 \\ \frac{\partial \tilde{\chi}_1}{\partial n} = 0 \\ k_{paroi} = 0 \\ \varepsilon_{paroi} = \left( \frac{\partial k}{\partial n} \right)^2 / (2k Re) \end{array} \right.$$



## Annexe II

## Constantes de réactions

Les valeurs données ci-dessous sont issues de SEINFELD (1986).

| Réaction   | Constante de réaction                                |
|--|--|
| $NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O$                         | $k_1$ dépend de l'intensité lumineuse                |
| $O + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$                        | $2.17 \cdot 10^8 (T/300)^{-2.3} m^3 mol^{-2} s^{-1}$ |
| $O_3 + NO \rightarrow NO_2 + O_2$                        | $1.32 \cdot 10^6 \exp(-1430/T) m^3 mol^{-1} s^{-1}$  |
| $O_3 + h\nu \rightarrow O(^1D) + O_2$                    | $0.0028 k_1$   |
| $O(^1D) + M \rightarrow O + M$                           | $1.75 \cdot 10^7 m^3 mol^{-1} s^{-1}$                |
| $O(^1D) + H_2O \rightarrow 2OH^\bullet$                  | $1.32 \cdot 10^8 m^3 mol^{-1} s^{-1}$                |
| $CO + OH^\bullet \rightarrow CO_2 + HO_2^\bullet$        | $1.32 \cdot 10^5 m^3 mol^{-1} s^{-1}$                |
| $HO_2^\bullet + NO \rightarrow NO_2 + OH^\bullet$        | $2.23 \cdot 10^6 \exp(240/T) m^3 mol^{-1} s^{-1}$    |
| $OH^\bullet + NO_2 \rightarrow HNO_3$                    | $6.62 \cdot 10^6 m^3 mol^{-1} s^{-1}$                |
| $HCHO + h\nu \rightarrow 2HO_2^\bullet + CO$             | dépend de l'intensité lumineuse                      |
| $HCHO + h\nu \rightarrow H_2 + CO$                       | dépend de l'intensité lumineuse                      |
| $HCHO + OH^\bullet \rightarrow HO_2^\bullet + CO + H_2O$ | $6.62 \cdot 10^6 m^3 mol^{-1} s^{-1}$                |



## Annexe III

# Signification de l'expression "même structure locale qu'un processus à incréments indépendants"

Soit le couple de variables vectorielles à composantes réelles  $(\vec{x}, \vec{u})$  suivant un processus markovien tel que:

- $\vec{x}$  et  $\vec{u}$  sont des fonctions continues du temps vérifiant

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u};$$

- le processus a la même structure locale qu'un processus à incréments indépendants.

On a vu dans le chapitre 3 que l'évolution de  $(\vec{x}, \vec{u})$  peut être décrite par le système d'équations stochastiques:

$$\begin{cases} d\vec{x} &= \vec{u}dt \\ du_i &= a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)dt + b_{ij}(\vec{x}, \vec{u}, t)d\zeta_j \end{cases}$$

où le vecteur  $\vec{a}$  et le tenseur  $b$  sont fonctions de  $\vec{x}$ ,  $\vec{u}$  et  $t$ , et les incréments  $d\zeta_j$  suivent une loi gaussienne centrée de variance  $dt$  et vérifient

$$\langle d\zeta_i d\zeta_j \rangle = \delta_{ij}(t)dt.$$

Afin de rendre tout à fait claire cette formulation, nous rappelons la signification donnée par THOMSON (1987) de "même structure locale qu'un processus à incréments indépendants".

Soit alors  $\mathbf{X}(t)$  un processus de MARKOV continu dans  $\mathbf{R}^6$  où  $\mathbf{R}$  est l'ensemble des réels ( $\mathbf{X}(t) = (\vec{x}(t), \vec{u}(t))$ );

soit  $\Pi(\mathbf{X}; t | \mathbf{Y}; s)$  la densité de probabilité (d.d.p.) de transition liée à l'événement "le vecteur considéré est en  $\mathbf{X}$  à l'instant  $t$  sachant qu'il se trouvait en  $\mathbf{Y}$  à l'instant  $\tau$ ";

soit

$$q(\mathbf{X}; t | \mathbf{Y}; \tau) = \Pi(\mathbf{X} + \mathbf{Y}; t + \tau | \mathbf{Y}; \tau)$$

la d.d.p. de l'incrément sur l'intervalle  $[\tau, \tau + t]$ ;

soit

$$\hat{q}(\theta; t | \mathbf{Y}; \tau) = \int \exp(i\mathbf{X} \cdot \theta) q(\mathbf{X}; t | \mathbf{Y}; \tau) d\mathbf{X}$$

la fonction caractéristique de  $q$ . Si  $\mathbf{X}$  était un processus stochastique continu à incréments stationnaires indépendants, on aurait  $\hat{q}$  indépendante de  $\mathbf{Y}$  et  $\tau$ , et

$$\hat{q}(\theta; t_1 + t_2) = \hat{q}(\theta; t_1)\hat{q}(\theta; t_2)$$

Ainsi,  $\hat{q}$  s'écrirait:

$$\hat{q} = \exp(j(\theta)t)$$

avec  $j$  une fonction continue telle que

$$j(\theta) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\hat{q} - 1}{t}$$

cette limite étant uniforme sur chaque sphère  $|\theta| \leq M$ .

On dit alors que "même structure locale qu'un processus à incréments indépendants" signifie que la limite

$$j(\theta, \mathbf{Y}, \tau) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\hat{q} - 1}{t}$$

existe et est uniforme sur chaque sphère  $|\theta| \leq M$ , est continue, et dépend de façon régulière de  $\mathbf{Y}$  et  $\tau$ .

## Annexe IV

# Exemple de processus itératif pour la détermination de la fonction de densité de distribution "mmi"

On a vu dans le chapitre 3 que, moyennant la connaissance des  $N$  premiers moments  $\mu_j(z)$  du champ vertical de vitesse turbulente, la fonction qui approche le mieux la fonction de densité de distribution  $g_E$  des particules fluides dans l'espace des phases s'écrit (DU & WILSON (1994b)), si la masse volumique est constante et égale à  $\rho_0$ :

$$g_E^{mmi}(z, w) = \rho_0 \exp\left(-\sum_{k=0}^N \lambda_k(z) w^k\right)$$

avec les fonctions  $\lambda_k(z)$  données implicitement par:

$$\mu_j(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} w^j \exp\left(-\sum_{k=0}^N \lambda_k(z) w^k\right) dw.$$

Le problème de recherche de racines:

"Trouver les  $\lambda_k$  vérifiant

$$\mu_j = \int_{-\infty}^{+\infty} w^j \exp\left(-\sum_{k=0}^N \lambda_k w^k\right) dw \quad j = 0, \dots, N"$$

va être remplacé par une recherche d'extremum:

"Trouver les  $\lambda_k$  annulant

$$l(\lambda_0, \dots, \lambda_N) = \sum_{j=0}^N \left( \mu_j - \int_{-\infty}^{+\infty} w^j \exp\left(-\sum_{k=0}^N \lambda_k w^k\right) dw \right)^2."$$

Posons alors

$$\Lambda = (\lambda_0, \dots, \lambda_N).$$

On initialise le processus de recherche du minimum en prenant

$$\Lambda = \Lambda^0$$

quelconque (mais vérifiant  $\lambda_N^0$  supérieur strictement à 0), et on se dirige suivant la ligne de plus grande pente de  $l(\Lambda^0)$ , soit dans le sens opposé au vecteur  $\vec{grads}|_{\Lambda^0}$ :

$$\Lambda = \Lambda^0 - v \vec{grads}|_{\Lambda^0} \quad v > 0$$

Suivant cette direction,  $l$  devient une fonction de  $v$  uniquement. On réitère ce schéma jusqu'à ce que  $l$  soit inférieure à une erreur  $\varepsilon_l$  fixée. L'erreur  $\varepsilon_l$  que l'on calcule portera donc sur  $l$  et non sur  $\Lambda$ . Nous allons donc dans un premier temps estimer l'influence de  $\Lambda^0$  et de  $\varepsilon_l$  sur l'erreur commise sur la détermination de  $\Lambda$ .

Pour envisager les différents tests de validation du calcul de  $\Lambda$ , on se place dans les conditions expérimentales de DEARDORFF & WILLIS (1985), utilisées par LUHAR & BRITTER (1989), afin de pouvoir comparer nos résultats à des résultats numériques et expérimentaux. Il s'agit d'une couche limite convective. On calcule  $\Lambda$  et on en déduit la fonction de densité de distribution "mmi" à

$$Z_1 = 0.5$$

et

$$Z_2 = 0.75$$

où

$$Z_i = z_i/\delta,$$

$\delta$  étant l'épaisseur de la couche limite. On choisit, pour les quatre premiers moments, les mêmes profils que ceux utilisés par LUHAR & BRITTER (1989). Comme nous retenons les quatre premiers moments auxquels on joint la condition de normalisation sur la fonction de densité de distribution,  $\Lambda$  sera donc un vecteur à 5 composantes. On utilise en outre les données de DEARDORFF & WILLIS (1985) suivantes:

| $Z$  | $w_*(ms^{-1})$      | $\delta(m)$          |
|------|---------------------|----------------------|
| 0.48 | $8.3 \cdot 10^{-3}$ | $16.9 \cdot 10^{-2}$ |
| 0.79 | $8.3 \cdot 10^{-3}$ | $17 \cdot 10^{-2}$   |

où  $w_*$  est l'échelle de vitesse convective donnée par:

$$w_* = (g\alpha Q_0 \delta)^{1/3}.$$

On reconnaîtra dans cette expression l'accélération gravitationnelle  $g$ , le coefficient d'expansion thermique  $\alpha$  et le flux cinématique de chaleur à la surface  $Q_0$  (WILLIS & DEARDORFF (1974).

$\Lambda$  a été calculé à partir de deux valeurs initiales

$$\Lambda_1^0 = (0, 0, 1, 0, 1)$$

et

$$\Lambda_2^0 = (1, 1, 1, 1, 1),$$

avec deux erreurs sur  $l$ ,

$$\varepsilon_l^1 = 1.10^{-4}$$

et

$$\varepsilon_l^2 = 5.10^{-6}.$$

Nous appellerons  $\Lambda_{ij}$  la valeur finale de  $\Lambda_i$  obtenue avec  $\varepsilon_l^j$ . A  $Z$  fixé, l'écart entre  $\Lambda_1$  et  $\Lambda_2$  diminue avec  $\varepsilon_l$ . On trouve par exemple à la cote mise sous forme sans dimension  $Z_1$  que

$$\begin{cases} \sup\{|\lambda_{11,k} - \lambda_{21,k}|\}_{k=0,4} = 3.610^{-5} \\ \sup\{|\lambda_{12,k} - \lambda_{22,k}|\}_{k=0,4} = 2.10^{-5}. \end{cases}$$

Néanmoins, cette différence est très faible. Ceci prouve que, dans ce cas précis, les  $\Lambda$  suivent le même chemin de convergence. Par contre, nous obtenons des écarts sensibles entre  $\Lambda_{i1}$  et  $\Lambda_{i2}$ , indépendamment des valeurs initiales. On trouve ainsi que

$$\sup\{|\lambda_{i1,k} - \lambda_{i2,k}|\}_{k=0,4} = 0.30$$

à  $Z_1$  et 0.81 à  $Z_2$ . L'influence de ces écarts sur les fonctions de densité de distribution calculées en  $Z_1$  et  $Z_2$  est mise en évidence par les figures FIG (IV.1) et (IV.2).

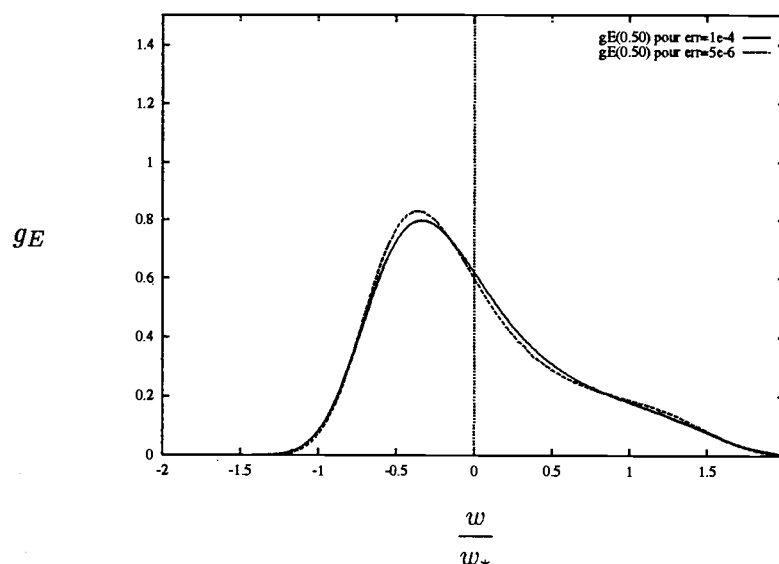


FIG. IV.1 - Influence à  $Z = 0.50$  de l'erreur  $\epsilon_1$  sur la fonction de densité de distribution

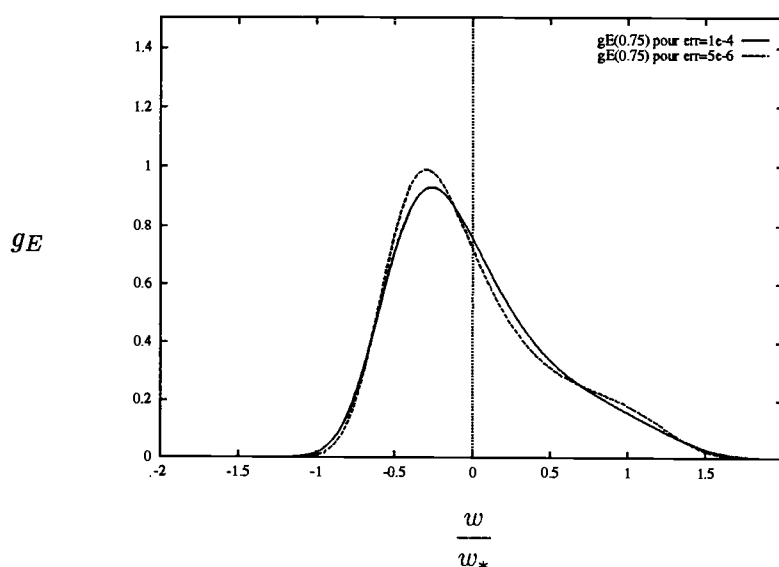


FIG. IV.2 - Influence à  $Z = 0.75$  de l'erreur  $\epsilon_1$  sur la fonction de densité de distribution

Il apparaît que  $\varepsilon_l$  devra être de l'ordre de la précision machine pour obtenir une bonne approximation des différents moments. On remarque en particulier que le calcul de  $\Lambda$  est souvent accéléré et plus précis lorsque l'on envisage, comme cela vient d'être fait, la résolution avec des grandeurs mises sous formes sans dimension, car l'erreur calculée est alors une erreur relative. Quoi qu'il en soit, le coût temporel de ces calculs reste important. Ainsi, dans le cas test de WILLIS & DEARDORFF (1976) envisagé dans le chapitre 3, une heure est nécessaire pour l'obtention sur SPARC 5 des valeurs de  $\Lambda$  à 11 cotes équiréparties sur l'épaisseur de la couche limite.

Les fonctions de densité de distribution obtenues avec  $\varepsilon_l^2$  à  $Z_1$  et  $Z_2$  ont été comparées à celles de LUHAR & BRITTER (1989) et de DEARDORFF & WILLIS (1985) (FIG (IV.3) et (IV.4)).

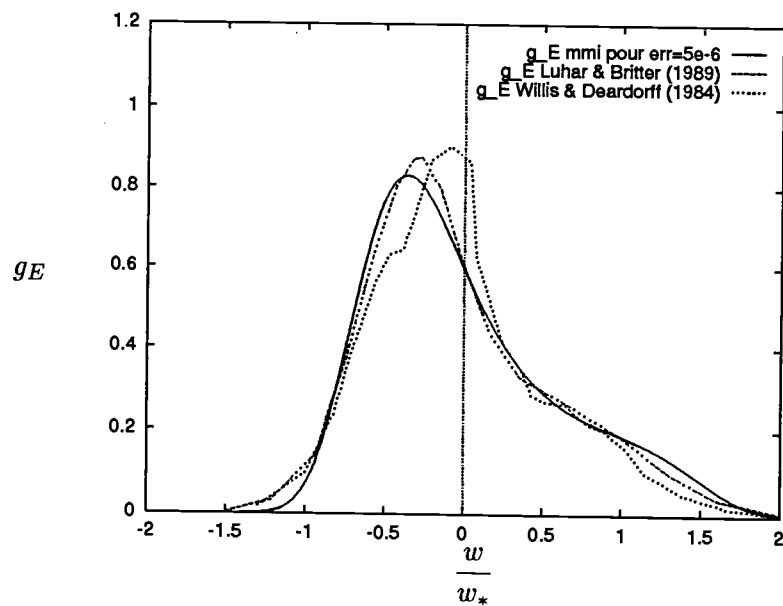


FIG. IV.3 - Comparaison de fonctions de densité de distribution à la cote mise sous forme sans dimension  $Z = 0.50$

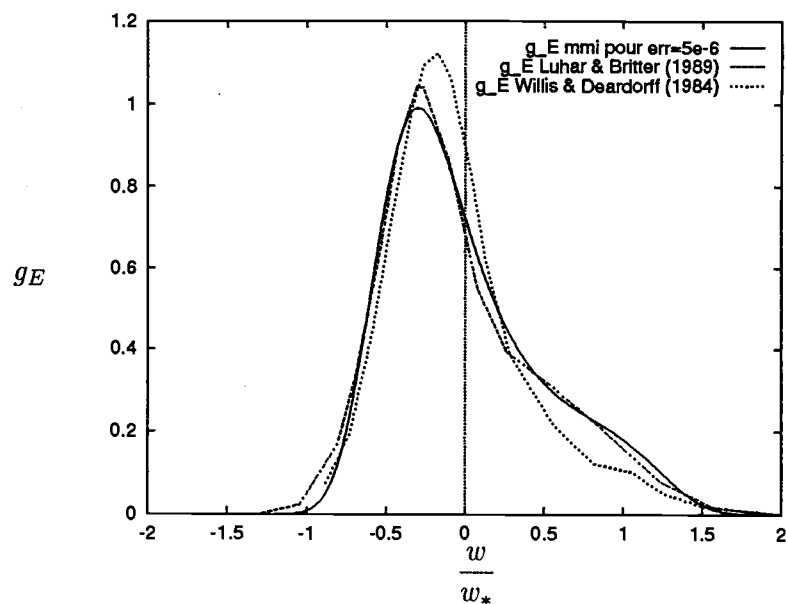


FIG. IV.4 - Comparaison de fonctions de densité de distribution à la cote mise sous forme sans dimension  $Z = 0.75$

Nous nous approchons plus des résultats numériques de LUHAR & BRITTER (1989) que des résultats expérimentaux. Cela s'explique aisément par le fait que les expressions que nous avons prises pour les moments sont celles considérées par ces auteurs et ne sont qu'une approximation plus ou moins juste des moments physiques.

Ce modèle itératif de calcul de la fonction de densité de distribution "mmi" est très satisfaisant en ce qui concerne les résultats, mais demeure un procédé très cher au niveau temps de calcul. Néanmoins, on pourra à présent utiliser les bibliothèques Fortran installées sur les nouveaux ordinateurs (bibliothèque NAG par exemple) pour optimiser ce processus.



## Annexe V

# Méthodes numériques utilisées

On présente ici les processus numériques importants pour réaliser les calculs présentés dans cette thèse.

### V.1 Construction d'une variable aléatoire de densité de probabilité gaussienne

Les calculs ont été effectués sur SPARC 5. Cet ordinateur met à la disposition des utilisateurs un processus aléatoire ( $rand(0)$ ) censé donner une variable aléatoire suivant une loi uniforme sur l'intervalle  $[0, 1]$ . La figure (V.1) présente la densité de probabilité (d.d.p.) que l'on trouve pour cette variable en effectuant  $10^6$  tirages et en prenant des intervalles de comptage d'amplitude 0.01.

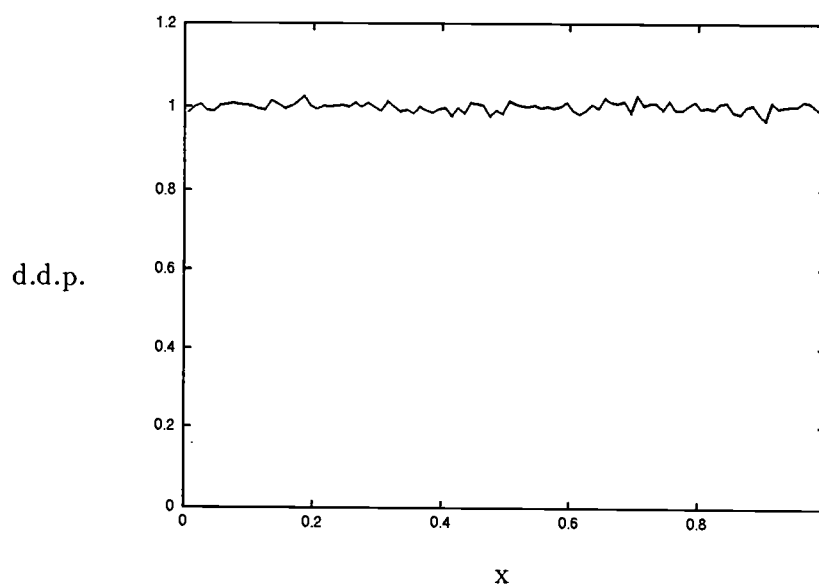


FIG. V.1 - *d.d.p. obtenue avec  $10^6$  tirages de la variable aléatoire  $x = rand(0)$*

La d.d.p. est très proche de celle de la loi uniforme. Nous utiliserons dès lors le processus aléatoire  $rand(0)$  lorsque nous aurons besoin d'une variable aléatoire suivant une loi uniforme.

On va alors construire une variable aléatoire suivant la loi normale, c'est à dire ayant une d.d.p. gaussienne de moyenne nulle et d'écart type unitaire, en appliquant le théorème central limite.

**Théorème central limite:** Soient  $N$  variables aléatoires indépendantes  $X_1, X_2, \dots, X_N$  distribuées identiquement, chacune de moyenne  $m$  et d'écart type  $\sigma$  avec

$$-\infty < m < \infty$$

et

$$0 < \sigma < \infty ;$$

alors la distribution de la variable

$$\frac{(\langle X \rangle - m)}{\sigma/\sqrt{N}}$$

où

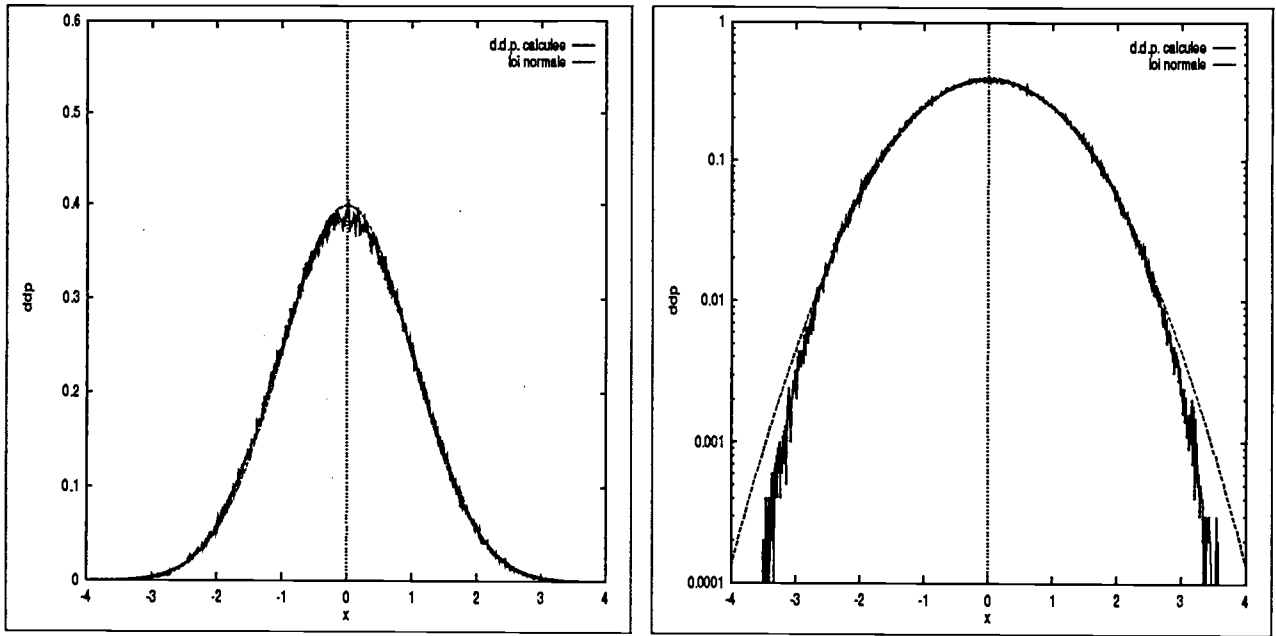
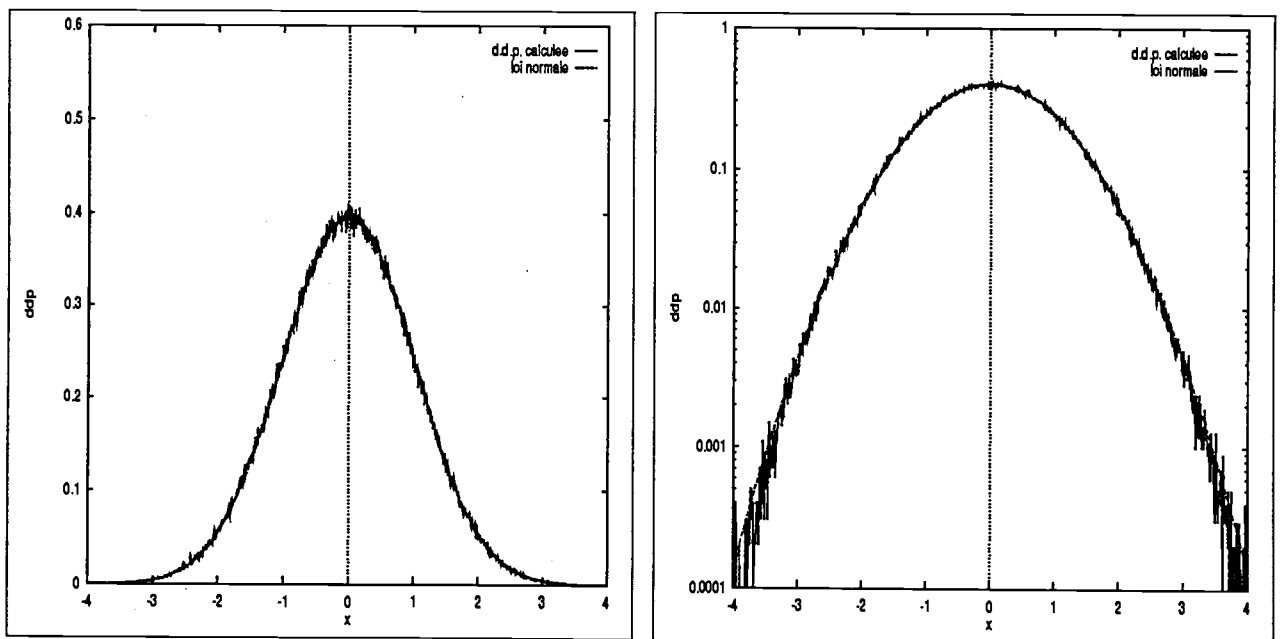
$$\langle X \rangle = \left( \sum_{i=1}^N X^i \right) / N$$

tend vers la loi normale lorsque  $N$  tend vers l'infini.

Ce théorème est vrai pour  $N$  tendant vers l'infini, ce qui n'est pas réalisable numériquement. Il va falloir trouver un compromis entre précision et temps de calcul. On a appliqué le théorème à la variable aléatoire  $X = rand(0)$  de moyenne et d'écart type

$$\begin{cases} m = 0.5 \\ \sigma = \frac{\sqrt{3}}{6} \end{cases}$$

pour  $N$  égal à 5, 20 et 50. La d.d.p. a été construite à partir de  $10^6$  réalisations de la variable aléatoire, avec des intervalles de comptage d'amplitude 0.01. (figures (V.2)-(V.4)).

FIG. V.2 - *d.d.p. obtenue en appliquant le théorème central limite avec  $N = 5$* FIG. V.3 - *d.d.p. obtenue en appliquant le théorème central limite avec  $N = 20$*

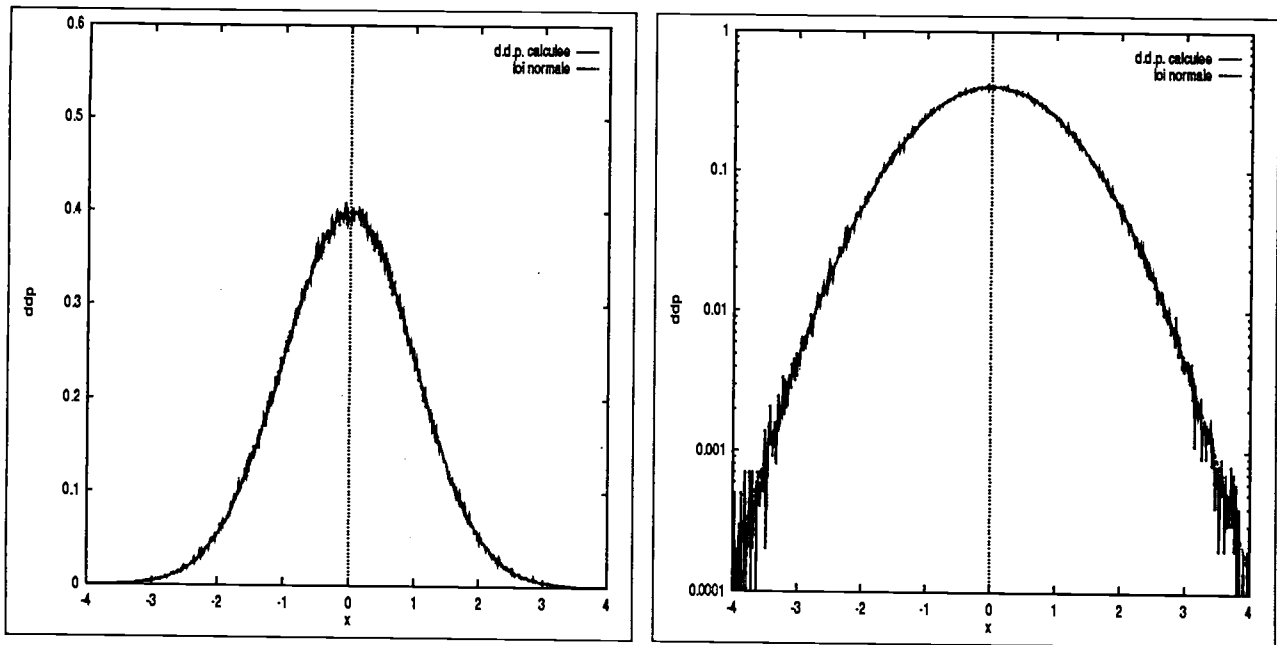


FIG. V.4 - *d.d.p. obtenue en appliquant le théorème central limite avec  $N = 50$*

Compte tenu de ces résultats, on considéra que  $N = 20$  suffit à créer la variable aléatoire souhaitée avec une précision satisfaisante.

## V.2 Construction des "boîtes de mélange"

Afin de fixer les idées, plaçons-nous dans le cas d'une dispersion turbulente uniquement suivant la verticale, et supposons la vitesse longitudinale  $U$  constante et la vitesse transversale nulle. Les boîtes de mélange dégénèrent en segments verticaux.

A la  $i^{\text{ème}}$  itération<sup>1</sup>, les particules modélisées se situent sur une droite verticale située à l'abscisse  $x^i$  égale à  $U\Delta t^i$ , où  $\Delta t^i$  est le pas de temps. Elles sont soumises à une dispersion turbulente verticale. POPE (1985) propose de prendre une taille de segment "petite" devant l'échelle de longueur de l'écoulement.

Nous avons choisi de prendre une taille  $d^i$  de segment égale à  $1.65\sigma_w^i\Delta t^i$ ,  $\sigma_w^i$  étant l'écart type de la vitesse verticale turbulente, car en turbulence homogène 90 % des particules ont un déplacement inférieur à cette valeur pendant  $\Delta t^i$ . Néanmoins, les calculs effectués avec des segments de taille  $\sigma_w^i\Delta t^i$  ont donné les mêmes résultats. La taille pertinente des segments est donc de l'ordre de  $\sigma_w^i\Delta t^i$ .

On considère alors  $L^i$  l'étendue du domaine d'étude et  $d_{max}^i$  la distance maximale séparant de l'axe une particule contenant un réactif issu de la source, ainsi que  $n^i$  le nombre de particules rajoutées aléatoirement entre les cotes  $-\frac{L^i}{2}$  et  $-\frac{L^{i-1}}{2}$ , et entre les cotes  $\frac{L^{i-1}}{2}$  et  $\frac{L^i}{2}$ .

Le nombre de segments  $N^i$  sera choisi tel qu'une particule contenant un réactif issu de la source est séparée d'une distance au moins égale à trois segments de la limite verticale du domaine.

1. Les grandeurs indicées par  $i$  seront relatives à la  $i^{\text{ème}}$  itération.

Les inconnues  $N^i$ ,  $L^i$  et  $n^i$  seront données par:

$$\begin{cases} N^i = \max \left[ \left( 4E \left( \frac{L^{i-1}}{4d^i} \right) + 4 \right), \left( 4E \left( \frac{d_{max}^i}{2d^i} \right) + 8 \right) \right] \\ L^i = N^i d^i \\ n^i = E \left( (L^i - L^{i-1}) n_p \right) \end{cases}$$

où  $n_p$  est le nombre moyen de particules par unité de longueur (fixé initialement) et  $E$  représente la fonction partie entière.

On imposera une condition de réflexion aux cotes  $-\frac{L^i}{2}$  et  $\frac{L^i}{2}$  (ce qui signifie tout simplement que si une particule de l'écoulement porteur sort du domaine d'étude, elle est remplacée par une autre ayant la même composition).

### V.3 Algorithme utilisé pour le suivi avec réactions chimiques

#### Initialisation

- découpage du domaine d'étude en segments
- positionnement des  $n^i$  particules:  $(x^0, z_j^0, w_j^0, c_{jA}^0, c_{jB}^0)_{j=1, \dots, n^i}$

#### Boucle en temps

- détermination de l'incrément de temps:

$$\Delta t^i = 0.05 T_L^i = 0.05 \frac{2\sigma_w^i{}^2}{C_0 \varepsilon^i}$$

- détermination de l'abscisse commune:

$$dx = U dt$$

- détermination de la cote et de la vitesse verticale de chaque particule par le modèle stochastique à une particule et une échelle de temps:

$$\begin{cases} dz = w dt \\ dw = -C_0 \varepsilon \frac{w}{\sigma_w^2} dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \end{cases}$$

et repérage du segment contenant la particule

- sur chaque segment, application du modèle de diffusion, continu en temps, à l'ensemble des paires de particules choisies aléatoirement, auquel on couple, pour chaque particule, le terme de réaction chimique. Ainsi, pour chaque paire  $(m, n)$  de particules, on devra résoudre:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc_{mA}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{nA} - c_{mA}) - k_c c_{mA} c_{mB} \\ \frac{dc_{mB}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{nB} - c_{mB}) - k_c c_{mA} c_{mB} \\ \frac{dc_{nA}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{mA} - c_{nA}) - k_c c_{nA} c_{nB} \\ \frac{dc_{nB}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{mB} - c_{nB}) - k_c c_{nA} c_{nB} \end{array} \right.$$

- calcul de  $\langle c_a \rangle$ ,  $\langle c_b \rangle$ ,  $\langle c_a'^2 \rangle$ ,  $\langle w_a' \rangle$ , ..., en moyennant sur chaque segment

## V.4 Schémas numériques utilisés

- **Modèle stochastique du suivi lagrangien**

On a résolu le système d'équations (ici pour une turbulence homogène)

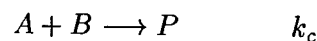
$$\left\{ \begin{array}{l} dx = U dt \\ dz = w dt \\ dw = -C_0 \varepsilon \frac{w}{\sigma_w^2} dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} d\zeta \end{array} \right.$$

par un schéma d'Euler. La condition imposée sur le pas en temps du modèle, à savoir que  $\Delta t^i$  est égal à  $0.05 T_L^i$ , assure une précision suffisante. Le système d'équations s'écrit alors sous forme discrète:

$$\left\{ \begin{array}{l} x^{i+1} = x^i + U \Delta t^i \\ w^{i+1} = w^i - C_0 \varepsilon^i \frac{w^i}{\sigma_w^2} \Delta t^i + \sqrt{C_0 \varepsilon^i} \chi^{i+1} \\ z^{i+1} = z^i + \frac{w^i + w^{i+1}}{2} \Delta t^i \end{array} \right.$$

- **Mélange et réactions chimiques**

Soit la réaction chimique irréversible isotherme du second ordre de constante de réaction  $k_c$ :



L'évolution des concentrations en espèce  $A$  et  $B$  de chaque paire (1,2) de particules choisies

aléatoirement à chaque incrémentation temporelle est donnée pour le modèle par:

$$\begin{cases} \frac{dc_{1A}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{2A} - c_{1A}) - k_c c_{1A} c_{1B} \\ \frac{dc_{1B}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{2B} - c_{1B}) - k_c c_{1A} c_{1B} \\ \frac{dc_{2A}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{1A} - c_{2A}) - k_c c_{2A} c_{2B} \\ \frac{dc_{2B}}{dt} = \frac{1}{2T_L}(c_{1B} - c_{2B}) - k_c c_{2A} c_{2B} \end{cases}$$

ce qui peut s'écrire:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_{1A} \\ c_{1B} \\ c_{2A} \\ c_{2B} \end{pmatrix} = \frac{1}{2T_L} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1A} \\ c_{1B} \\ c_{2A} \\ c_{2B} \end{pmatrix} - k_c \begin{pmatrix} c_{1A} c_{1B} \\ c_{1A} c_{1B} \\ c_{2A} c_{2B} \\ c_{2A} c_{2B} \end{pmatrix}$$

En posant

$$V = \begin{pmatrix} c_{1A} \\ c_{1B} \\ c_{2A} \\ c_{2B} \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

et

$$\mathcal{NL}(V) = \begin{pmatrix} c_{1A} c_{1B} \\ c_{1A} c_{1B} \\ c_{2A} c_{2B} \\ c_{2A} c_{2B} \end{pmatrix}$$

l'équation se met vectoriellement sous la forme:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{1}{2T_L} AV - k_c \mathcal{NL}(V) = F(V)$$

On applique alors le schéma d'ordre 2 en temps de RUNGE-KUTTA:

$$V^{i+1} = V^i + \frac{1}{2} \Delta t^i (M_1 + M_2)$$

avec

$$\begin{cases} M_1 = F(V^i) \\ M_2 = F(V^i + \Delta t^i M_1) \end{cases}$$

• **Remarque importante**

Dans le cas du mélange non réactif, le terme non linéaire disparaît et l'évolution de  $V$  est donnée par:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{1}{2T_L} AV$$

Cette équation a pour solution algébrique:

$$V = \exp\left(\frac{1}{2T_L} tA\right) V_0 \quad (\text{V.1})$$

Le développement limité de l'exponentielle d'une matrice carrée  $X$  s'écrit:

$$\exp(X) = I + X + \frac{1}{2!} X^2 + \dots + \frac{1}{n!} X^n + \dots$$

or

$$A^n = (-1)^{n-1} nA$$

ce qui entraîne, en remplaçant  $X$  par  $\left(\frac{1}{2T_L} tA\right)$ :

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{1}{2T_L} tA\right) &= I + \left(\frac{1}{2T_L}\right) tA - 2\frac{1}{2!} \left(\frac{1}{2T_L}\right)^2 t^2 A + \dots + (-1)^{n-1} n \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2T_L}\right)^n t^n A + \dots \\ &= I - t \left[ -\left(\frac{1}{2T_L}\right) + \frac{1}{2!} 2 \left(\frac{1}{2T_L}\right)^2 t + \dots + (-1)^n \frac{1}{n!} n \left(\frac{1}{2T_L}\right)^n t^{n-1} + \dots \right] A \\ &= I - t \left[ 1 - \left(\frac{t}{2T_L}\right) + \frac{1}{2!} \left(\frac{t}{2T_L}\right)^2 + \dots + \frac{1}{n!} \left(\frac{-t}{2T_L}\right)^n + \dots \right]' A \\ &= I - t \left[ \exp\left(-\frac{t}{2T_L}\right) \right]' A \\ &= I + \frac{t}{2T_L} \exp\left(-\frac{t}{2T_L}\right) A \end{aligned}$$

En reportant cette expression dans (V.1), on obtient finalement:

$$V = \left[ I + \frac{t}{2T_L} \exp\left(-\frac{t}{2T_L}\right) A \right] V_0$$

Dans le cas considéré, on aura à chaque pas de temps la solution analytique:

$$V^{i+1} = \left[ I + \frac{\Delta t^i}{2T_L} \exp\left(-\frac{\Delta t^i}{2T_L}\right) A \right] V^i$$

Ainsi dans le chapitre 4, pour l'étude du mélange seul on utilise cette solution analytique, et dans le cas du mélange avec réactions chimiques le schéma de RUNGE-KUTTA d'ordre deux.

# Bibliographie

- AUMONT, B. 1994 Modélisation de la chimie de la basse troposphère continentale: Développements et tests d'un modèle chimique condensé. *Thèse de doctorat Paris VII*
- AYRAULT, M. & SIMOENS, S. 1993 Effects of obstacles on the dispersion of dense gas plumes. *STEP-FLADIS report*
- BAERENTSEN, J. H. & BERKOWICZ, R. 1984 Monte Carlo simulation of plume dispersion in the convective boundary layer. *Atmospheric Environment* **18**, 4, 701-712.
- BENNANI, A., GENGE, J. N. & MATHIEU, J. 1985 The influence of a grid-generated turbulence on the development of chemical reactions. *A. I. Ch. E.* **31**, 7, 1157-1166.
- BILGER, R. W., SAETRAN, L. R. & KRISHNAMOORTHY, L. V. 1991 Reaction in a scalar mixing layer. *J. Fluid Mech.* **233**, 211-242.
- BORGAS, M. S. & SAWFORD, B. L. 1994 Stochastic equations with multifractal random increments for modeling turbulent dispersion. *Phys. Fluids A* **6**, 2, 618-633.
- BRITTER, R. E. & SNYDER, W. H. 1988 Fluid modeling of dense gas dispersion over a ramp. *J. Haz. Mat.* **18**, 37-67.
- BROWN, R. J. & BILGER, R. W. 1996 An experimental study of a reactive plume in grid turbulence. *J. Fluid Mech.* **312**, 373-407.
- CAILLAU, P. 1994 Modélisation et simulation de la combustion turbulente par une approche probabiliste eulérienne lagrangienne. *Thèse de doctorat.*
- CEBECI, T. & SMITH, A. M. O. 1974 Analysis of turbulent boundary layers. *Academic press.*
- CHANDRASEKHAR, S. 1943 Stochastic Problems in Physics and Astronomy. *Reviews of Modern Physics* **15**, 1-89.
- CHATWIN, P. C. & SULLIVAN, P. J. 1990 A simple and unifying physical interpretation of scalar fluctuation measurements from many turbulent shear flows. *J. Fluid Mech.* **212**, 533-556.
- CHOLLET, J. P., & LESIEUR, M. 1981 Parameterization of small scales of three-dimensional isotropic turbulence utilizing spectral closures. *J. Atmos. Sci.* **38**, 2747-2757.
- CHUNG, R. K. & NG, T. T. 1982 Some aspects of strongly heated turbulent boundary layer flow. *Phys. Fluids* **25**, 8, 1333-1341.
- COMTE-BELLOT, G. 1982 Cours de Turbulence de 3<sup>ème</sup> Année. *Ecole Centrale de Lyon.*

- CORRSIN, S. 1963 Estimates of the relations between eulerian and lagrangian scales in large Reynolds number. *J. Atmos. Sci.* **20**, 2, 115-119
- CURL, R. L. 1963 Dispersed Phase Mixing: I. Theory and effects in Simple Reactors. *A.I.Ch.E. Journal* **9**, 2, 175-181.
- DEARDORFF, J. W. & WILLIS G. E. 1985 Further results from a laboratory model of the convective planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.* **32**, 205-236.
- DE BAAS, A. F., VAN DOP H. & NIEUWSTADT F. T. M. 1986 An application of the Langevin equation for inhomogeneous conditions to dispersion in a convective boundary layer. *Quart. J. R. Met. Soc.* **112**, 165-180.
- DONALDSON, C. DU P. & HILST, G. R. 1972 Effect of inhomogeneous mixing on atmospheric photochemical reactions. *Environmental Science and Technology*, 812-816.
- DONALDSON, C. DU P. & VARMA, A. K. 1976 Remarks on the construction of a second order closure description of turbulent reacting flows. *Comb. Sci. Technol.* **13**, 55-78.
- DOPAZO, C. 1975 Probability density function approach for a turbulent axisymmetric heated jet. Centerline evolution. *Phys. Fluids* **18**, 4, 397-404.
- DOPAZO, C. 1979 Relaxation of initial probability density functions in the turbulent convection of scalar fields. *Phys. Fluids* **22**, 20-30.
- DOPAZO, C. & O'BRIEN, E. E. 1974 An approach to the autoignition of a turbulent mixture *Acta Astronautica* **1**, 1239-1266.
- DU, S., SAWFORD, B. L., WILSON, J. D. & WILSON, D. J. 1995 Estimation of the Kolmogorov constant ( $C_0$ ) for the Lagrangian structure function, using a second-order model of grid turbulence. *Phys. Fluids A* **7**, 12, 3083-3090.
- DU, S., WILSON, J. D. & YEE, E. 1994a On the moments approximation method for constructing a lagrangian stochastic model. *Boundary-Layer Meteorol.* **40**, 273-292.
- DU, S. & WILSON, J. D. & YEE, E. 1994b Probability density functions for velocity in the convective boundary layer, and implied trajectory models. *Atmospheric Environment* **28**, 6, 1211-1217.
- DURBIN, P. A. 1980a A random flight model of inhomogeneous turbulent dispersion. *Phys. Fluids* **23**, 11, 2151-2153.
- DURBIN, P. A. 1980b A stochastic model of two-particle dispersion and concentration fluctuations in homogeneous turbulence. *J. Fluid Mech.* **100**, 2, 279-302.
- DURBIN, P. A. & HUNT, J. C. R. 1980 Dispersion from elevated sources in turbulent boundary layers. *Journal de mécanique* **19**, 4, 679-695.
- DURBIN, P. A. 1983 Stochastic Differential Equations and Turbulent Dispersion. *NASA Reference Publication* **1103**, 1-69.
- EGGEL, J. G. M., UNGER, F., WEISS, M. H., WESTERWEEL, J., ADRIAN, R. J., FRIEDRICH, R. & NIEUWSTADT, F. T. M. 1994 Fully developed turbulent pipe flow: a comparison between direct numerical simulation and experiment. *J. Fluid Mech.* **268**, 175-209.

- ESWARAN, V. & POPE, S. B. Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar. *Phys. Fluids* **31**, 3, 506-520.
- FACKRELL, J. E. & ROBINS, A. G. 1982 Concentration fluctuations and fluxes in plumes from point sources in a turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.* **117**, 1-26.
- GENCE, J. N. 1990 Cours de D.E.A.
- GENCE, J. N. 1994 Sur la description des mélanges turbulents par densités de probabilité. (Communication privée)
- GEORGOPOULOS, P. G. & SEINFELD, J. H. 1986 Mathematical modeling of turbulent reacting plumes - I. General theory and model formulation. *Atmospheric Environment* **20**, 9, 1791-1807
- HALL, C. D. 1975 The simulation of particle motion in the atmosphere by a numerical random-walk model. *Quart. J. R. Met. Soc.* **101**, 235-244.
- HSU, A. T. & CHEN, J.-Y. 1991 A continuous mixing model for p.d.f. simulations and its applications to combusting shear flows. *Eighth Symposium on turbulent shear flows*, 22.4.1-22.4.5.
- JANICKA, J., KOLBE, W., KOLLMANN, W. 1978 Closure of the transport equation for the probability density function of scalar fields. *J. Non-equilib. Thermodyn.* **4**, 47-66
- JAYESH, & WARHAFT, Z. 1992 Probability distribution, conditional dissipation, and transport of passive temperature fluctuations in grid-generated turbulence. *Phys. Fluids A* **4**, 2292.
- JAYNES, E. T. 1957 Information theory and statistical mechanics. *Phys. Rev.* **106**, 4, 620-630.
- JONES, W. P. & MC GUIRK, J. J. 1979 Mathematical modeling of gas-turbine combustion chambers. *AGARD CP 275*
- KAPLAN, H. & DINAR, N. 1992 A stochastic model for the dispersion of a non-passive scalar in a turbulent field. *Atmospheric Environment* **26A**, 13, 2413-2423.
- KOMORI, S, HUNT, J. C. R., KANSAKI, T. & MURAKAMI, Y. 1991 The effects of turbulent mixing on the correlation between two species and on concentration fluctuations in non-premixed reacting flows. *J. Fluid Mech.* **228**, 629-659.
- LAMB, R. G. & SHU, W. R. 1978 A model of second-order chemical reactions in turbulent fluid - Part I. Formulation and validation. *Atmospheric Environment* **12**, 1685-1694.
- LEGG, B. J. & RAUPACH, M. R. 1982 Markov-chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flows: the mean drift velocity induced by a gradient in eulerian velocity variance. *Boundary-Layer Meteorol.* **24**, 3-13.
- LEONARD, A. 1974 On the energy cascade in large eddy simulation of turbulent fluid flows. *Adv. Geophys.* **18A**
- LEY, A. J. 1982 A random walk simulation of two-dimensional turbulent diffusion in the neutral surface layer. *Atmospheric Environment* **16**, 12, 2799-2808.
- LEY, A. J. & THOMSON, D. J. 1983 A random walk model of dispersion in the diabatic surface layer. *Quart. J. R. Met. Soc.* **109**, 847-880.

- LI, J. D. & BILGER, R. W. 1995 Experimental study of reactive plumes behind line sources in homogeneous turbulence. *10<sup>th</sup> turbulent Shear Flow*, 16.1-16.6
- LI, J. D. & BILGER, R. W. 1996 The diffusion of conserved and reactive scalars behind line sources in homogeneous turbulence. *J. Fluid Mech.* soumis
- LI, J. D., BROWN, R. J. & BILGER, R. W. 1992 Experimental study of a scalar mixing layer using reactive and passive scalars. *11<sup>th</sup> Australasian Fluid Mechanics Conference*, 159-162
- LUHAR, A. K. & BRITTER, R. E. 1989 A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Atmospheric Environment* **23**, 9, 1911-1924.
- LUMLEY, J. L. 1962 The mathematical nature of the problem of relating Lagrangian and Eulerian statistical functions in turbulence. *The Mechanics of Turbulence Gordon and Breach*, 17-26.
- LUMLEY, J. L. 1986 Evolution of a non-self-preserving thermal mixing layer. *Phys. Fluids* **29**, 12, 3976-3981.
- LUSIS, M. A. 1976 Mathematical modelling of chemical reactions in a plume. *Proc. 7<sup>th</sup> Internat. NATO/CCMS Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Application, Airlie, Virginia, 7 - 10 Sept.*, 831-855.
- MA, B.-K. & WARHAFT, Z. 1986 Some aspects of the thermal mixing layer in grid turbulence. *Phys. Fluids* **29**, 10, 3114-3120.
- MELO, O. T., LUSIS M. A. & STEVENS, R. D. S. 1978 Mathematical modelling of dispersion and chemical reactions in a plume - Oxydation of  $NO$  to  $NO_2$  in the plume of a power plant. *Atmospheric Environment* **12**, 1231-1234.
- MICHELASSI, V. & SHIH, T. H. 1991 Low Reynolds number two equation modeling of turbulent flow. *NASA Technical Memorandum* 104368 ICOMP-91-06.
- MOLE, N. & CLARKE, E. D. 1995 Relationships between higher moments of concentration and of dose in turbulent dispersion. *Boundary-Layer Meteorol.* **73**, 35-52.
- MOLE, N. & JONES, C. D. 1994 Concentration fluctuation data from dispersion experiments carried out in stable and unstable conditions. *Boundary-Layer Meteorol.* **67**, 41-74.
- MONIN, A. S. & YAGLOM, A. M. 1975 Statistical Fluid Mechanics. *MIT Press Vol I et II.*
- ORSZAG, S. A. & PATTERSON, G. S. 1972 Numerical Simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence. *Phys. rev. letters* **28**, 2, 76-79.
- PATEL, V. C., RODI, W. & SCHEUERER, G. 1985 Turbulence models for near wall and low Reynolds number flows: a review. *AIAA J.* **23**, 9, 1308-1319.
- PETERS, L. K., & RICHARDS, L. W. 1977 Extension of atmospheric dispersion models to incorporate fast reversible reactions. *Atmospheric Environment* **11**, 101-108.
- POPE, S. B. 1976 The probability approach to the modeling of turbulent reacting flows. *Combust. Flame* **27**, 299.
- POPE, S. B. 1982 An Improved Turbulent Mixing Model. *Combustion Science and Technology* **28**, 131-135.

- POPE, S. B. 1985 P.D.F. methods for turbulent reactive flows. *Prog. Energy Combust. Sci.* **11**, 119-192.
- PRIESTLEY, M. B. 1981 Spectral Analysis and Time Series. *Academic, London*.
- REID, J. D. 1979 Markov chain simulations of vertical dispersion in the neutral surface layer for surface and elevated releases. *Boundary-Layer Meteorol.* **16**, 3-22.
- RAI, M.M. & MOIN, P. 1991 Direct simulations of turbulent flow using finite-difference schemes. *J. Comput. Phys.* **96**, 15-53.
- RAYNAL, F. 1991 Rapport de D.E.A.
- SABELNIKOV, V. A. 1995 Solution analytique de l'équation de la densité de probabilité de concentration (PDF) dans une turbulence décroissante de grille en présence d'un gradient moyen de concentration. *C. R. Acad. Sci.* **321**, IIb, 451-454.
- SAFFMAN, P. G. 1960 On the effect of the molecular diffusivity in turbulent diffusion. *J. Fluid Mech.* **8**, 273-283.
- SAWFORD, B. L. 1991 Reynolds number effects in Lagrangian stochastic models of turbulent dispersion. *Phys. Fluids A* **3**, 6, 1577-1586.
- SAWFORD, B. L. & GUEST, F. M. 1987 Lagrangian stochastic analysis of flux-gradient relationships in the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.* **44**, 8, 1152-1165.
- SAWFORD, B. L. & GUEST, F. M. 1988 Uniqueness and universality of lagrangian stochastic models of turbulent dispersion. *8<sup>th</sup> Turbulence and Diffusion Symposium - American Meteorological Society*, 96-99.
- SAWFORD, B. L. & HUNT, J. C. R. 1986 Effects of turbulence, molecular diffusion and source size on scalar fluctuations in homogeneous turbulence. *J. Fluid Mech.* **165**, 373-400.
- SAWFORD, B. L. & SULLIVAN, P. J. 1995 A simple representation of a developing contaminant concentration field. *J. Fluid Mech.* **289**, 141-157.
- SEINFELD, J. H. 1986 Atmospheric chemistry and Physics of air pollution. *John Wiley and Sons*.
- SHLIEN, D. J. & CORRSIN, S. 1976 Dispersion measurements in a turbulent boundary layer. *Int. J. Heat Mass Transfer* **19**, 285-295.
- SPALDING, D. B. 1971 Concentration fluctuations in a round turbulent free jet. *Chem. Engng Sci.* **26**, 95-107.
- STAPOUNTZIS, H., SAWFORD, B. L., HUNT, J. C. R. & BRITTER, R. E. 1986 Structure of the temperature field downwind of a line source in grid turbulence. *J. Fluid Mech.* **165**, 401-424.
- TAYLOR, G. I. 1921 Diffusion by continuous movements. *Scientific Papers. Cambridge University Press* vol.II, 172-184.
- TENNEKES, H. & LUMLEY, J. L. 1972 A First Course in Turbulence. *MIT Press, Cambridge, MA*, 2<sup>nd</sup> edition.
- THOMSON, D. J. 1984 Random walk modelling of diffusion in inhomogeneous turbulence. *Quart. J. R. Met. Soc.* **110**, 1107-1120.

- THOMSON, D. J. 1987 Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *J. Fluid Mech.* **180**, 529-556.
- THOMSON, D. J. 1990 A stochastic model for the motion of particle pairs in isotropic high-Reynolds-number turbulence, and its application to the problem of concentration variance. *J. Fluid Mech.* **210**, 113-153.
- VALIÑO, L. & DOPAZO, C. 1990 A binomial sampling model for scalar turbulent mixing. *Phys. Fluids A* **2**, 7, 1204-1212.
- VALIÑO, L. & DOPAZO, C. 1991 A binomial Langevin model for turbulent mixing. *Phys. Fluids A* **3**, 12, 3034-3037.
- VAN DOP, H. 1992 Buoyant plume rise in a lagrangian framework. *Atmospheric Environment* **26A**, 7, 1335-1346.
- VAN DOP, H., NIEUWSTADT, F. T. M. & HUNT, J. C. R. 1985 Random walk models for particle displacements in inhomogeneous unsteady turbulent flows. *Phys. Fluids* **28**, 6, 1639-1653.
- WARHAFT, Z. 1984 The interference of thermal fields from line sources in grid turbulence. *J. Fluid Mech.* **144**, 363-387.
- WILLIS, G. E. & DEARDORFF, J. W. 1974 A laboratory Model of the Unstable Planetary Boundary Layer. *J. Atmos. Sci.* **31**, 1297-1307.
- WILLIS, G. E. & DEARDORFF, J. W. 1976 A laboratory model of diffusion into the convective planetary boundary layer. *Quart. J. R. Met. Soc.* **102**, 427-445.
- WILSON, J. D., THURTELL, G. W. & KIDD, G. E. 1981 Numerical Simulation of Particle Trajectories in Inhomogeneous Turbulence, II: Systems with Variable Turbulent Velocity Scale. *Boundary-Layer Meteorol.* **21**, 423-441.
- YEUNG, P. K. & POPE, S. B. 1989 Lagrangian statistics from direct numerical simulation of isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.* **207**, 531.
- ZEGADI, R. 1992 Etude en soufflerie de la couche de surface atmosphérique. *Thèse de doctorat Ecole Centrale de Lyon*

## ABSTRACT

The aim of this work is to build a stochastic Lagrangian model of particles tracking which takes into account chemical reactions between the different species encountered in the flow.

The first chapter briefly deals with different kinematic existing models. The complexity of atmospheric chemical reactions is then highlighted through the example of nitrogen oxides ones. Lagrangian approach is chosen to consider reacting flows, as it seems more appropriate than Eulerian approach to local phenomena such as diffusion and chemical reactions.

The modeling of the convection in isotropic turbulence by stochastic Lagrangian models based on a Langevin equation is presented in the second chapter. In order to establish the link between Lagrangian and Eulerian formulations, the Fokker-Planck equation deduced from the one particle one time scale stochastic model is determined. This model is applied to the case of a temperature source line seeding a grid generated turbulence. The validation is performed by comparisons of the numerical results to experimental data.

The third chapter begins with a summary of the different extensions of the one particle one time scale stochastic model to inhomogeneous turbulent flows. The model of Thomson (1987) will be retained as it appears to be the more rigorous relatively to the hypothesis. Many types of rejections in inhomogeneous turbulence are simulated, which will allow to check the influence of different parameters on numerical results. To end with this chapter, a model including buoyancy effects is presented and tested in the case of a ground level source in a neutral boundary layer.

The last chapter is devoted to reacting flows. The one particle Lagrangian approach has needed the use of a mixing model within the tracked particles. Starting from a more general formulation than the diffusion model of Hsu & Chen (1991), the condition it has to satisfy for the concentration probability density function to relax towards a Gaussian shape in isotropic turbulence is established. The new one particle one time scale stochastic model including mixing process is successfully applied to different cases of reacting species mixing experiments in grid generated turbulence which are:

- a turbulent mixing layer between ozone and nitrogen monoxide;
- a line source of nitrogen monoxide in a main flow of ozone;
- a point source of nitrogen monoxide in a main flow of ozone.



dernière page de la thèse

## AUTORISATION DE SOUTENANCE

Vu les dispositions de l'arrêté du 5 Juillet 1984, modifié par l'arrêté du 21 Mars 1988 et l'arrêté du 23 Novembre 1988,

Vu la demande du Directeur de Thèse

Mr D. JEANDEL      Professeur - L.M.F.A. - ECOLE CENTRALE DE LYON,

et les rapports de

Mr J.P. CHOLLET    Professeur - Université J. Fourier - GRENOBLE I - BP 53X -  
38041 GRENOBLE Cedex,

Mr V. SABELNIKOV Professeur - Deputy Director Propulsion Division -  
ZHUKOVSKY, MOSCOW REG. - 140160 RUSSIA,

Monsieur **MICHELOT** Christophe

est autorisé à soutenir une thèse pour l'obtention

du titre de **DOCTEUR**

**Spécialité : MECANIQUE**

Fait à Ecully, le 10 décembre 1996

P/Le Directeur de l'Administration et de la Recherche  
Le Directeur de l'Administration et de la Recherche

F. LEBLANC

