

École polytechnique de Louvain

Modélisation et simulation numérique de la dispersion de polluants dans un domaine composé d'une couche poreuse

Auteurs: **Sara VERHEYLEWEGHEN, Juliette VINEL**

Promoteur: **Miltiadis PAPALEXANDRIS**

Lecteurs: **Vincent LEGAT, Sandra SOARES FRAZAO**

Année académique 2019–2020

Master [120] : ingénieur civil mécanicien

Remerciements

Notre mémoire est basé sur la compréhension de nombreux concepts physiques qui ont été possible grâce à un accompagnement et une disponibilité tout au long de l'année. Notre promoteur, Professeur Miltiadis Papalexandris, a toujours été prêt à donner de son temps pour répondre à une question ou planifier une réunion. Ceci nous a permis de trouver rapidement des réponses à nos interrogations et d'aller de l'avant. Nous avons aussi beaucoup apprécié ses idées de solutions qui nous ont permis d'atteindre l'objectif souhaité.

La prise en main des outils indispensables au bon déroulement du projet a été possible grâce au soutien de notre assistante, Victoria Hamtiaux. Son aide a été précieuse pour la compréhension du code réalisé par Docteur P. D. Antioniadis dans le cadre de sa thèse, l'utilisation des clusters CECI ainsi que pour la réalisation du code de post-processing des résultats. Nous la remercions aussi pour sa présence et ses avis constructifs lors des réunions avec notre promoteur.

Nous remercions également Professeur Eric Deleersnijder pour son partage d'expertise et de ressources qui se sont montrées très utiles lors de notre implémentation numérique.

Enfin, nous sommes reconnaissantes à nos lecteurs Professeur Sandra Soares Frazao et Professeur Vincent Legat d'avoir accepté de faire partie de notre jury.

Résumé

La modélisation et la simulation de la dispersion d'un scalaire passif au sein d'un domaine dont la partie inférieure est formée d'une couche poreuse constituent l'objet de ce travail de fin d'études. L'approche consiste en un modèle macroscopique qui s'intéresse à l'interaction entre la partie du domaine composée uniquement de fluide et la couche poreuse. La continuité à l'interface est assurée grâce à l'approche du domaine simple. De nombreux phénomènes naturels de dispersion peuvent être assimilés à ce modèle tels que la distribution des nutriments dans les récifs coralliens, la dispersion des pollens de graminées, la dispersion du dioxyde de carbone en présence d'une forêt, etc.

La première partie de ce travail repose sur le travail réalisé par *Dr P. D. Antoniadis* dans lequel il a modélisé et simulé un écoulement laminaire à l'interface entre un milieu poreux et un fluide pur. La modélisation et l'implémentation numérique de l'équation de dispersion d'un scalaire passif ont été ajoutées au modèle initial. Ensuite, un cas type de dispersion a été étudié : la dispersion du méthane au sein d'un compost. L'impact de deux paramètres sur l'intensité de l'interaction entre le compost et l'atmosphère a été analysé. Les deux paramètres concernés sont la porosité et la vitesse du vent.

La deuxième partie de ce travail porte sur la modélisation et l'implémentation numérique d'un écoulement turbulent à l'interface entre un milieu poreux et un fluide pur. Le modèle de fermeture implémenté pour simuler l'écoulement moyen turbulent est un modèle d'ordre deux de type viscosité effective : le modèle $k - \epsilon$. Un modèle mathématique et numérique de dispersion d'un scalaire passif au sein d'un écoulement turbulent ont également été développés. Ensuite, le modèle a été appliqué à un cas type d'écoulement turbulent : la dispersion du dioxyde de carbone et des particules fines au sein d'un milieu urbain. Une analyse paramétrique de la porosité et du nombre de Schmidt turbulent a été réalisée.

Les résultats obtenus permettent d'observer quelques phénomènes intéressants sur la dispersion des polluants tant dans un écoulement laminaire que turbulent. Cependant, les observations et analyses sont limitées par plusieurs facteurs qui sont discutés dans ce travail.

Table des matières

Remerciements	i
Résumé	ii
Nomenclature	v
1 Mise en contexte	1
1.1 Ecoulement en présence d'une interface milieu poreux - fluide pur	1
1.2 Dispersion au sein d'un milieu poreux	2
1.3 Exemples environnementaux	3
1.3.1 Aquifères	3
1.3.2 Végétation immergée des rivières	4
1.3.3 Couvert de cultures	5
1.3.4 Couvert forestier	5
1.3.5 Récifs coralliens	6
1.4 Contenu, organisation et objectifs du mémoire	6
2 Dispersion de scalaires passifs dans un écoulement de cisaillement laminaire à l'interface milieu poreux - fluide pur	8
2.1 Modèle mathématique de l'écoulement	8
2.1.1 Hypothèses du modèle	8
2.1.2 Développement du modèle	9
2.1.3 Approximation à faible nombre de Mach	11
2.2 Modèle mathématique de dispersion	13
2.2.1 Développement du modèle	13
2.2.2 Dispersion de particules solides	14
2.2.3 Adimensionnalisation de l'équation de dispersion et approximation à faible nombre de Mach	15
2.3 Méthodes numériques	16
2.3.1 Discrétisation temporelle	16
2.3.2 Discrétisation spatiale	21
2.3.3 Résolution d'un système linéaire à matrice tridiagonale	24
3 Cas d'étude laminaire : Dispersion de méthane au sein d'un compost	27
3.1 Paramètres de la simulation	28
3.1.1 Paramètres de référence	28
3.1.2 Paramètres géométriques	28

3.1.3	Paramètres dynamiques	30
3.1.4	Paramètres de dispersion	30
3.2	Pré-simulation	31
3.3	Conditions initiales	32
3.4	Conditions limites	32
3.4.1	Bas du domaine	32
3.4.2	Haut du domaine	32
3.4.3	Amont du domaine	33
3.4.4	Aval du domaine : Condition convective	33
3.5	Résultats	36
3.5.1	Écoulement	36
3.5.2	Dispersion	42
3.6	Analyse paramétrique	46
3.6.1	Cas traités	46
3.6.2	Overshoot	47
3.6.3	Dispersion du polluant	50
3.7	Conclusions	51
4	Dispersion de scalaires passifs dans un écoulement de cisaillement turbulent à l'interface milieu poreux - fluide pur	52
4.1	Modèle mathématique de l'écoulement turbulent	52
4.1.1	Décomposition de Reynolds	52
4.1.2	Equations moyennées de Navier-Stokes-Reynolds pour un milieu poreux	53
4.1.3	Problème de fermeture	54
4.1.4	Traitement de la paroi	60
4.2	Modèle mathématique de dispersion turbulente	61
4.2.1	Développement du modèle de dispersion	61
4.2.2	Adimensionnalisation de l'équation de dispersion	62
4.3	Implémentation numérique	63
4.3.1	Procédure de résolution	63
4.3.2	Discretisation de l'équation moyennée de quantité de mouvement .	64
4.3.3	Discretisation de l'équation de bilan de l'énergie cinétique turbulente	65
4.3.4	Discretisation de l'équation de bilan du taux de dissipation	67
4.3.5	Discretisation de l'équation de dispersion turbulente	68
5	Cas d'étude turbulent : dispersion de polluants dans un milieu urbain	69
5.1	Paramètres de la simulation	70
5.1.1	Paramètres d'adimensionnalisation	70
5.1.2	Paramètres géométriques	71
5.1.3	Paramètres dynamiques	71
5.1.4	Paramètres de dispersion	72
5.2	Conditions limites et initiales	75
5.3	Résultats	77
5.3.1	Ecoulement turbulent	78
5.3.2	Dispersion des polluants	81
5.4	Analyse paramétrique	85

5.4.1	Cas traités	85
5.4.2	Influence de la porosité	86
5.4.3	Influence du nombre de Schmidt turbulent	88
5.5	Conclusions	89
5.6	Pistes d'amélioration	90
5.6.1	Méthodes numériques	90
5.6.2	Conditions atmosphériques	91
5.6.3	Modélisation des sources de polluants	92
5.6.4	Polluants secondaires	92
Conclusion générale		94
A Développement de l'expression de la vitesse moyenne intervenant dans l'expression de la condition limite convective		96
B Développement des équations turbulentes non dimensionnelles		98
Bibliographie		108

Nomenclature

d_d	partie déviatoire du tenseur des taux de déformations
d	tenseur des taux de déformations
f	taux de transfert de quantité de mouvement
g	vecteur gravité
q	flux de chaleur
u	vecteur vitesse de la forme (u, v)
x	vecteur de position de la forme (x, y)
$\bar{k}$	énergie cinétique turbulente
$\tilde{u}$	vecteur vitesse intermédiaire de la forme $(\tilde{u}, \tilde{v})$
d	diamètre
d_a	diamètre aérodynamique
d_p	diamètre d'une particule du milieu poreux
d_s	diamètre de Stokes
e	énergie interne
e_t	énergie totale : interne et cinétique
h	hauteur du milieu poreux
l	longueur
m	résolution du maillage dans la direction verticale
n	résolution du maillage dans la direction horizontale
p	pression thermodynamique
p'	pression piezométrique
p^1	pression dynamique
p^v	pression de viscosité de volume
r_i	distance prise à partir du centre jusqu'à l'interface d'une maille dans la direction x

r_j	distance prise à partir du centre jusqu'à l'interface d'une maille dans la direction y
t	temps
u_τ	vitesse de frottement
v_g	vitesse verticale de dispersion due à la gravité
x	direction horizontale
y	direction verticale
$\mathbf{I}$	matrice unité
$\mathcal{D}$	coefficient de diffusion
$\mathcal{E}$	taux de transfert d'énergie
$\mathcal{M}$	taux de transfert de masse
$\mathcal{R}$	terme source de polluants
$\mathcal{T}$	tortuosité
C_C	facteur de correction de Cunningham
C_D	coefficient de traînée
H	hauteur du domaine
J	flux de diffusion
L	longueur du domaine
M	masse molaire
P	valeur de pression en un point du maillage
R	constante des gaz parfaits
S	degré de saturation
T	température
U	valeur de vitesse en un point du maillage
U_c	vitesse convective
V	volume arbitraire
Y	fraction massique
β	coefficient de traînée
$\overline{\tau}^t$	partie déviatoire du tenseur de Reynolds
σ^r	contraintes réversibles
σ^v	contraintes irréversibles

σ	tenseur des contraintes
τ	tenseur des contraintes de cisaillement
δ	symbole de Kronecker
γ	rapport des capacités calorifiques
μ	viscosité dynamique
μ_t	viscosité dynamique effective de turbulence
ν	viscosité cinématique
ν_t	viscosité cinématique effective de turbulence
$\overline{\sigma}^t$	tenseur de Reynolds turbulent
$\bar{\epsilon}$	taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente
ϕ	porosité
ψ	variable quelconque
ρ	masse volumique
σ_ϵ	constante dans le bilan de dissipation d'énergie cinétique turbulente
σ_k	constante dans le bilan d'énergie cinétique turbulente
θ	perturbation de l'approximation à faible nombre de Mach
ζ	viscosité de volume

Indices

1	direction horizontale (x)
2	direction verticale (y)
f	relatif au fluide
i	valeur centrale (horizontalement) dans une maille ou notation indicielle
j	valeur centrale (verticalement) dans une maille ou notation indicielle
p	relatif au polluant
r	référence
s	relatif à la matrice solide
t	turbulent

Exposants

$*$	résultat de l'étape prédicteur
n	résultat au pas de temps précédent

$n + 1$ résultat au pas de temps en cours de calcul

Nombres adimensionnels

$Re = \frac{ul}{\nu}$ Nombre de Reynolds

$Re_t = \frac{\bar{k}^2}{\nu \bar{\epsilon}}$ Nombre de Reynolds turbulent

$Ri = \frac{|g|l}{u^2}$ Nombre de Richardson

$Sc = \frac{\nu}{D}$ Nombre de Schmidt

$Sc_t = \frac{\nu_t}{D_t}$ Nombre de Schmidt turbulent

$y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu}$ distance à la paroi adimensionnée en unités de parois

Chapitre 1

Mise en contexte

Ce travail porte sur l'étude de la dispersion de scalaires passifs au sein d'un domaine dans lequel un milieu poreux et un milieu composé seulement de fluide se superposent. Le cas étudié est précis mais il permet de représenter beaucoup de phénomènes naturels de dispersion. Dans ce travail, les milieux poreux considérés sont des milieux dans lesquels le fluide a la possibilité de passer à travers la matrice solide ; les pores sont inter-connectés. La dynamique du fluide est toutefois modifiée par la présence de la matrice solide. Le problème fait alors intervenir une interface qui nécessite une attention particulière pour parvenir à une modélisation correcte de l'écoulement, qu'il soit turbulent ou laminaire. Une vue d'ensemble des modèles existants traitant l'interface est donnée à la section 1.1. La dispersion est également impactée par la présence du milieu poreux. Un modèle spécifique est nécessaire pour ce phénomène. Les différentes possibilités sont présentées dans la section 1.2. Ensuite, quelques exemples d'applications sont donnés à la section 1.3 de cette mise en contexte. Finalement, le contenu et les objectifs de ce travail sont présentés.

1.1 Ecoulement en présence d'une interface milieu poreux - fluide pur

L'écoulement d'un fluide pur en présence d'un milieu poreux où les deux milieux se superposent est l'objet de l'étude. Les équations qui gouvernent le milieu poreux et le fluide pur sont différentes. La principale difficulté réside donc dans le raccordement des équations qui régissent les deux domaines, c'est-à-dire dans la modélisation de la condition d'interface milieu poreux - fluide pur.

Une première approche consiste à utiliser deux ensembles d'équations de conservation : un ensemble pour le milieu poreux et un ensemble pour le fluide pur. Des conditions à l'interface entre le milieu poreux et le milieu fluide doivent être imposées. Cette approche est appelée *double approach domain*. *Beavers and Joseph (1967)* sont les premiers à avoir proposé d'imposer une condition limite *slip* pour la vitesse à l'interface entre les deux domaines. D'autres types de conditions à l'interface ont également été proposées. Par exemple, *Ochoa-Tapia and Whitaker (1995)* imposent une autre forme de condition de continuité de la vitesse à l'interface mais qui résulte en une discontinuité des contraintes de cisaillement à l'interface. [15]

La seconde approche consiste à utiliser un ensemble d'équations de conservation qui sont aussi bien valables pour le milieu poreux que pour le fluide pur. Celle-ci est appelée *single approach domain*. Les conditions de continuité à l'interface milieu poreux - fluide pur pour la pression, la vitesse, la température et la contrainte de cisaillement sont satisfaites automatiquement [42]. Cette méthode présente des avantages quant à son implémentation numérique : un seul ensemble d'équations doit être résolu pour l'entièreté du domaine et aucune condition à l'interface ne doit être imposée.

Une grande quantité de travaux ont mis en évidence et étudié le développement des différents types d'instabilités lors de l'écoulement entre le fluide pur et le milieu poreux, e.g. *Poggy et al. (2004)* [50], *Ghisalberti et Nepf (2006)* [26], *Banerjee et al. (2017)* [5], etc. Toutes ces études s'accordent sur le fait que lorsque le profil de la vitesse moyenne en présence d'un milieu poreux présente un point d'inflexion important et instable dans la partie supérieure de la canopée, une couche de cisaillement se forme à cet endroit. L'origine de ce point d'inflexion est la force de traînée induite par les différents éléments qui composent la canopée et qui ralentissent la vitesse du fluide au sein du milieu poreux dans la direction de l'écoulement [53]. Le cisaillement important du fluide pur observé dans la partie supérieure du milieu poreux favorise le développement d'instabilités appelées instabilités de Kelvin-Helmoltz [25]. Cette couche de cisaillement libre est donc produite par la différence de vitesse du fluide dans le milieu poreux et le fluide libre. La couche de cisaillement qui se développe n'est pas une couche limite classique mais une couche qui se rapproche plus d'une couche de mélange. Cependant contrairement aux couches de cisaillement libres, les vorticités présentent dans une couche de cisaillement au dessus d'une canopée ne grandissent pas de façon continue lorsqu'elle se propagent le long de l'écoulement. En effet, elles atteignent et maintiennent une taille qui est déterminée par l'équilibre entre la production de contraintes de cisaillement et la dissipation induite par la force de traînée [45]. Par conséquent, la hauteur de pénétration du vortex dans le milieu poreux se stabilise également. Ces structures tourbillonnaires contrôlent et dominent les échanges de masse, de quantité de mouvement et le transport de quantités scalaires comme par exemple la chaleur, la vapeur d'eau et le CO_2 entre l'intérieur et l'extérieur du milieu poreux.

1.2 Dispersion au sein d'un milieu poreux

La dispersion a lieu par l'intermédiaire de deux phénomènes différents : la dispersion mécanique et physiochimique. La dispersion mécanique est liée à la vitesse de l'écoulement dans laquelle elle a lieu. Ce phénomène de dispersion est la convection. Dans un milieu poreux, l'attention est plutôt portée sur la vitesse moyenne du flux. La dispersion peut avoir lieu dans la direction longitudinale à l'écoulement ou les directions transversales. La dispersion physiochimique est la diffusion moléculaire. Elle résulte du gradient de potentiel chimique qui est lié à la concentration. Ce phénomène peut donc aussi avoir lieu lorsque le fluide est au repos, contrairement à la dispersion mécanique [23].

L'intérêt est porté dans ce travail sur la dispersion de scalaires passifs. En d'autres mots, la substance étudiée est présente en quantité très faible. Dès lors, elle n'influence pas la

dynamique de l'écoulement, par l'effet de la gravité par exemple. Cette hypothèse permet de découpler la conservation de quantité de mouvement de la conservation et du transfert de masse [36].

La dispersion de scalaires passifs est influencée par la structure géométrique du milieu poreux et la phase fluide dans laquelle elle se produit. Ce type de dispersion est modélisé dans la littérature par la loi de Fick couplée à la conservation de la masse du soluté. La phase fluide est caractérisée par une certaine densité et vitesse. Cependant, elle influence aussi le coefficient de diffusion. Au sein d'un milieu poreux, le terme "coefficient de dispersion" est plutôt utilisé. Ce dernier nécessite d'être modélisé. Pour ce faire, la définition de paramètres géométriques et dynamiques pour la zone poreuse sont nécessaires. Il y a deux approches principales qui permettent de modéliser la dispersion au sein d'un milieu poreux.

La première est l'approche déterministe. Elle consiste à modéliser le milieu poreux comme un milieu homogène. A l'échelle des inclusions solides, le milieu peut être perçu comme périodique, c'est-à-dire que les inclusions, de même taille, se trouvent à distances égales les unes des autres. Les milieux poreux sont dès lors couramment caractérisés par des paramètres physiques moyennés sur le volume. Le premier paramètre est la porosité. Il s'agit de la fraction de fluide dans la phase poreuse. Le second paramètre caractérise les pores et les grains : leur forme et taille. Le terme *volume averaging methods* est utilisée pour cette approche qui se place plutôt sur une échelle macroscopique. Ces méthodes permettent alors de calculer des concentrations moyennes au sein du milieu poreux. Les modèles mathématiques de *Bear et Bachmat (1990)* [6, 7] sont souvent utilisés, encore aujourd'hui.

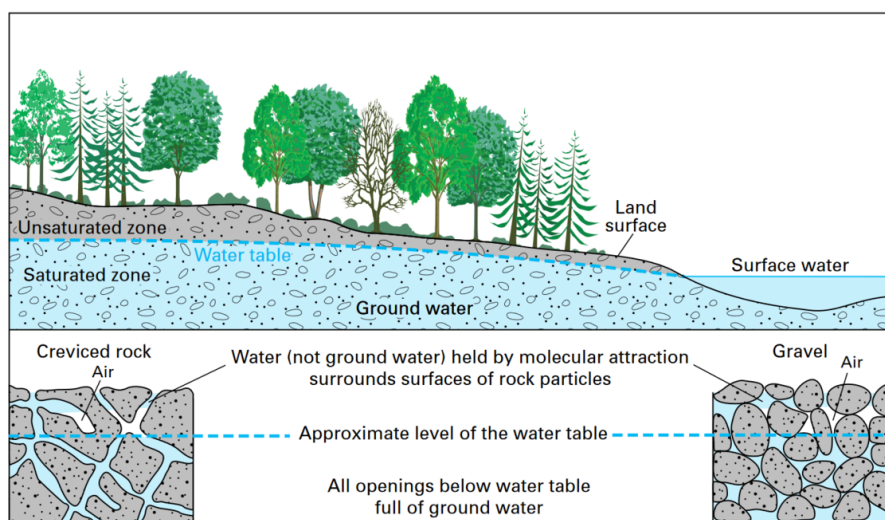
Lorsque le milieu ne peut pas être considéré comme homogène, certaines études introduisent des paramètres statistiques comme la distribution de taille des pores ; il s'agit de l'approche stochastique. Avec cette approche, l'incertitude sur la distribution spatiale des inclusions est prise en compte grâce à l'insertion de fonctions de distribution de probabilité [16]. Cette approche probabiliste s'intéresse plutôt au mouvement des particules à l'échelle des pores, l'échelle microscopique. Il est par exemple impossible de connaître la trajectoire exacte d'une particule au sein du milieu poreux. Cependant, les statistiques permettent de prédire un comportement global pour un ensemble de particules circulant dans la matrice solide [32]. Un concept qui est souvent utilisé pour décrire ce comportement est celui appelé *random walk*. *Berkowitz et al. (2002)* [8], *Bijeljic et Blunt (2006)* [9] et *Luhar et Britter (1989)* [41] sont des modèles souvent cités, basés sur ce concept stochastique.

1.3 Exemples environnementaux

1.3.1 Aquifères

Nos sols sont composés en profondeur de roches poreuses ou graviers. Les interstices de ces roches sont comblées par de l'air et de l'eau. Lorsqu'elles se trouvent à une profondeur suffisante, les pores sont remplis exclusivement d'eau, on dit que les roches sont saturées. Ces zones de roches saturées sont appelées aquifères. La grande quantité d'eau présente dans l'aquifère est une nappe phréatique. Cette eau est une des ressources principales de l'eau potable que nous buvons. Sa composition est particulière : seulement des éléments

chimiques essentiels et certains minéraux. La figure 1.1 donne une indication sur les différentes localisations possibles de roches saturées.



How ground water occurs in rocks.

FIGURE 1.1 – Représentation schématique de la localisation et composition des aquifères. [62]

L'aquifère est parfois en contact direct avec un point d'eau. La situation peut être représentée par un écoulement dans deux milieux superposés ou adjacents, la roche étant un milieu poreux. Plusieurs phénomènes de dispersion sont intéressants à étudier dans ce type d'écoulement afin de préserver une composition saine de l'eau gardée dans la roche. Premièrement, les canaux, rivières et lacs sont souvent pollués par l'activité humaine. Les déchets proviennent principalement de procédés industriels, mais peuvent aussi être dus à des fuites de réservoirs de pétrole ou autres [23]. En quantité faibles, ces contaminants ne sont pas dangereux pour la santé mais ils peuvent le devenir une fois présents en quantité trop élevée. L'étude de la dispersion permettrait d'estimer la quantité et la localisation des contaminants qui s'introduisent dans les interstices de la roche.

Les aquifères, remplies d'eau douce, peuvent aussi se trouver sur la côte et donc être en contact avec de l'eau de mer salée. La dispersion du sel à l'interface entre les deux milieux n'est pas négligeable et dépend aussi du taux de pompage de l'eau présente dans la nappe [17]. Le phénomène doit être surveillé afin d'ajuster le taux de pompage pour que l'eau reste potable dans la zone de pompage.

1.3.2 Végétation immergée des rivières

La végétation immergée des rivières joue un rôle important dans la régulation de la qualité de l'eau et dans la stabilité des berges. La vitesse de l'écoulement au sein de la couche de végétation est diminuée car celle-ci induit une force de résistance. Cette diminution de vitesse permet d'héberger le biote aquatique et de retenir des nutriments, des métaux lourds, des microbes, des sédiments dans la couche de végétation ainsi que la production d'oxygène dans ces régions stagnantes [58]. L'étude de l'écoulement dans ce milieu est crucial pour développer une bonne gestion des inondations et une bonne restauration des cours d'eau

permettant de réduire l'érosion des berges et d'héberger des poissons et invertébrés [59]. L'étude de la dispersion permet d'évaluer la quantité de solutés présents tels que HCO_3^{--} , Cl^- , Na^+ , ... Ainsi, il est possible d'étudier par exemple la meilleure façon de favoriser la disponibilité de ces solutés, nutriments pour les organismes localisés dans la canopée végétale afin de mieux préserver les services écosystémiques offerts.

1.3.3 Couvert de cultures

Une autre application intéressante concerne le monde agricole. Les céréales constituent une base essentielle de l'alimentation humaine et animale grâce à leur apport en nutriments majeurs comme les glucides et les protéines. La bonne gestion de la production des cultures passe par l'utilisation de pesticides pour protéger les cultures des bio-agresseurs nuisibles tels que les mauvaises herbes, les insectes et les moisissures. Néanmoins, leur utilisation présente aussi des inconvénients. Leur emploi à grande échelle a conduit à des concentrations croissantes dans l'environnement et dans notre alimentation qui s'avèrent être dangereuses pour de nombreux êtres vivants, dont l'homme. Un des principaux défis est de trouver une pulvérisation optimale de pesticides qui correspond au besoin des cultures afin de diminuer l'utilisation de produits chimiques, réduire le coût qui leur est consacré et diminuer la pollution environnementale [11]. L'étude de la dispersion des pesticides s'avère être une application intéressante.

Certaines céréales comme le maïs et le seigle sont à l'origine de troubles allergiques. Les pollens de ces graminées sont transmis par le vent et se répandent le plus souvent au printemps et en été. Les pollens sont des particules qui varient entre 15 et 150 microns [35]. L'étude de la dispersion de ce type de particules s'avère également être une application profitable dans le domaine de la santé sachant par exemple que le rhume des foins affecte un belge sur six. La pollinisation des céréales se faisant par le vent, l'étude de reproduction de ces graminées peut aussi constituer une mise en pratique d'un cas de dispersion au sein d'un milieu poreux.

1.3.4 Couvert forestier

La majorité du carbone contenu dans la biosphère terrestre est stockée dans les forêts. Elles retiennent le carbone dans la biomasse vivante et morte, dans les matières organiques en décomposition et dans les sols. Les processus de photosynthèse, de respiration, de transpiration, de décomposition et de combustion entretiennent la circulation naturelle du carbone entre la forêt et l'atmosphère. Par conséquent, les forêts jouent un rôle fondamental dans le cycle du carbone. Les actions humaines principalement, telles que la déforestation, mais aussi dans une moindre mesure certains phénomènes naturels comme les incendies, peuvent diminuer le stockage de carbone en forêt. Actuellement, les forêts se comportent globalement comme des puits de carbone : elles absorbent plus de carbone qu'elles n'en émettent [57]. Comprendre l'interaction entre l'atmosphère et la forêt présente donc un intérêt certain. Par exemple sur le plan climatique, une estimation de l'impact des modifications physiologiques des couverts végétaux sur certains paramètres climatiques comme la concentration en CO_2 dans l'atmosphère et la température de l'air constitue une application intéressante.

1.3.5 Récifs coralliens

Les récifs coralliens abritent 25% de la vie marine de notre planète. La variété de la faune et de la flore qui forment les récifs coralliens équivaut largement à celle des forêts tropicales. Cette biodiversité est essentielle car elle est à la fois source de revenus et de nourriture. Les récifs coralliens constituent aussi une protection naturelle et fondamentale contre les phénomènes violents tels que les cyclones, les typhons ou les ouragans. Ils ont un rôle important dans la dissipation de l'énergie marémotrice. Malheureusement, un quart des récifs coralliens mondiaux a déjà subi des dégâts irréversibles et deux tiers d'entre eux sont gravement menacés à cause de l'activité humaine [44]. La compréhension de la dynamique de l'écoulement entre les coraux et leur environnement est fondamentale. En effet, le profil de vitesse influence en partie la distribution des nutriments présents dans les récifs ainsi que des phénomènes physiologiques tels que la photosynthèse et la respiration près de la surface des coraux. Le transfert de nutriments de l'océan vers les récifs coralliens et le rejet de sous-produits des récifs dans l'océan dépendent de l'écoulement au sein et autour des coraux. Le transport de toute particule dans le milieu marin est dominé par les effets d'advection et de dispersion. L'écoulement influence aussi la température du micro-environnement à la surface des coraux qui est une variable extrêmement importante contribuant notamment au phénomène de blanchissement. [28]

1.4 Contenu, organisation et objectifs du mémoire

L'objectif principal de ce mémoire est de fournir une modélisation permettant la simulation de la dispersion de polluants dans un milieu urbain. Ce dernier peut être représenté par un milieu poreux. Étant donné l'échelle du problème, un écoulement turbulent est à considérer. Le modèle développé est basé sur l'approche du domaine simple et s'intéresse à la dispersion à l'échelle macroscopique. Le modèle a été réalisé pour un problème en deux dimensions. Pour atteindre cet objectif, plusieurs étapes ont été réalisées : compréhension, développement et implémentation numérique de modèles mathématiques afin de simuler la dynamique du fluide et du polluant dans un cas laminaire puis turbulent.

La structure de ce mémoire suit les étapes réalisées pour arriver au résultat final. Un modèle mathématique et numérique était déjà proposé par *P. Antoniadis* dans sa thèse "Modeling and Numerical simulation of transient flows in superposed porous and pure-fluid layers", 2015 [4]. La première étape, présentée au chapitre 2, a donc été de comprendre ce modèle et d'y ajouter le phénomène de dispersion développé à l'aide des mêmes approches. Le chapitre 3 est dédié à l'application de ce modèle à un cas concret. La simulation réalisée représente la dispersion du méthane produit au sein d'un compost lors de processus anaérobie. Cette application suscite beaucoup d'intérêt dans le monde agricole et pour la production de biofuels. Volontairement, le cas laminaire choisi est similaire à celui de l'écoulement dans une ville en ce qui concerne les conditions limites du problème et le fluide étudié. Les choix des différents paramètres de la simulation et de la modélisation sont expliqués. Le chapitre se clôture par une analyse d'un cas type et la variation de deux paramètres sur celui-ci : la porosité du compost et la vitesse du vent.

Ces deux premières étapes traitant un écoulement laminaire ont permis d'aborder le cas turbulent avec plus d'aisance. Les équations moyennées et le modèle de fermeture sont développés dans le chapitre 4 pour l'écoulement et la dispersion. Le choix des méthodes numériques y est aussi exposé.

Enfin, le dernier chapitre est dédié à l'étude du milieu urbain. L'activité humaine est l'objet de l'émission d'une grande quantité de composés nocifs pour l'environnement et pour la santé. Dans les villes, l'activité est intense et la population est dense. Il est important de garder un oeil sur les concentrations de ces polluants afin de garder un air sain et respirable. L'étude de la dispersion dans un milieu urbain pourrait avoir une application préventive. La simulation permet d'obtenir une idée de l'impact d'un changement propre au milieu poreux ou un changement des conditions auxquelles il est soumis. Une grande majorité des études qui traitent ce sujet, s'intéressent à la dispersion de polluants au sein de la ville en elle-même, à l'échelle d'une rue par exemple. Ici, l'intérêt est plutôt porté sur les échanges entre la ville et l'atmosphère pour des écoulements non stationnaires. Une analyse paramétrique est proposée dans ce chapitre.

Ce travail se termine par la proposition de pistes d'améliorations pour le modèle développé afin de tendre vers une simulation de dispersion de polluants plus réaliste.

Chapitre 2

Dispersion de scalaires passifs dans un écoulement de cisaillement laminaire à l'interface milieu poreux - fluide pur

Dr P.D. Antoniadis (2015) a étudié un écoulement laminaire à l'interface entre un milieu poreux et un fluide pur dans sa thèse "Modeling and Numerical simulation of transient flows in superposed porous and pure-fluid layers" [4]. Son travail présente un modèle mathématique et numérique pour un écoulement laminaire dans un domaine qui présente une interface milieu poreux - fluide pur. Cette étude a été utilisée comme base pour réaliser notre travail. Dans la première partie de ce chapitre, le modèle développé dans la thèse ainsi que le développement d'un modèle pour représenter le phénomène de dispersion laminaire dans un milieu biphasique sont présentés. Ensuite, l'implémentation numérique des différentes équations est détaillée.

2.1 Modèle mathématique de l'écoulement

2.1.1 Hypothèses du modèle

Le modèle mathématique utilisé par *Papalexandris et Antoniadis (2015)* [48] pour modéliser l'écoulement d'un fluide dans un domaine où le milieu poreux et le fluide pur se superposent est basé sur le *single-approach domain*. Pour rappel, cette approche consiste à obtenir un ensemble d'équations de conservation qui sont aussi bien valides pour le milieu poreux que pour le milieu contenant uniquement le fluide. Pour ce faire, une nouvelle variable est introduite dans les bilans de masse, quantité de mouvement et énergie : la porosité. Il s'agit du rapport entre le volume occupé par le fluide dans le volume de contrôle considéré et ce volume de contrôle. Cette variable est généralement une fonction de l'espace et du temps :

$$\phi = \phi(\mathbf{x}, t)$$

Ainsi, il n'est plus nécessaire d'avoir des conditions à l'interface entre les deux milieux.

Les équations dérivées pour le fluide simple et la matrice solide du milieu poreux sont basées sur une série d'hypothèses [48] :

1. Chaque phase (solide/fluide) est considérée comme un système thermodynamique continu.
2. Les deux phases sont immiscibles.
3. Les deux phases peuvent être en contact et elles ne sont pas à l'équilibre thermodynamique.
4. Les échanges de masse, quantité de mouvement et d'énergie entre le fluide pur et le milieu poreux s'effectuent uniquement entre ces deux milieux.
5. La matrice du milieu poreux est un corps solide avec une vitesse nulle et avec une masse volumique constante. Le fluide est simple et isotrope.
6. Les phénomènes irréversibles liés à chaque phase sont indépendants des variables de l'autre phase.

Dans le cadre de ce mémoire, certaines hypothèses supplémentaires ont été posées :

1. Aucun échange de masse entre la phase solide et fluide est considéré.
2. Le domaine étudié est supposé isotherme et la masse volumique du fluide est supposée constante.
3. Le milieu poreux considéré est orthotrope ou isotrope en fonction du cas d'étude.

2.1.2 Développement du modèle

Fluide pur et matrice solide Ainsi en prenant en compte les différentes hypothèses émises dans *Papalexandris et Antoniadis (2015)* [48], les équations de conservation de masse, quantité de mouvement et d'énergie sont respectivement pour le fluide pur :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho) + \nabla \cdot (\phi\rho\mathbf{u}) = \mathcal{M}, \quad (2.1a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho\mathbf{u}) + \nabla \cdot (\phi\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) + \nabla(\phi p) = \nabla \cdot (\phi\boldsymbol{\sigma}^v) + \phi\rho\mathbf{g} + \mathbf{f}, \quad (2.1b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho e_t) + \nabla \cdot (\phi\mathbf{u}(\rho e_t + p)) = \nabla \cdot (\phi\boldsymbol{\sigma}^v\mathbf{u}) - \nabla \cdot (\phi\mathbf{q}) + \phi\rho\mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + \mathcal{E}. \quad (2.1c)$$

Le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ a été décomposé en deux parties :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^r + \boldsymbol{\sigma}^v \quad (2.2)$$

où $\boldsymbol{\sigma}^r$ représente les contraintes réversibles et $\boldsymbol{\sigma}^v$ les contraintes irréversibles. Pour un fluide simple, le terme des contraintes réversibles est dû à la pression :

$$\boldsymbol{\sigma}^r = -p\mathbf{I}. \quad (2.3)$$

Le tenseur des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\sigma}^v$ peut lui-même être décomposé en une partie sphérique et une partie déviatoire :

$$\boldsymbol{\sigma}^v = -p^v \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} \quad (2.4)$$

où :

— la partie sphérique est liée à la pression de viscosité de volume

$$p^v = -\frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}^v) \quad (2.5)$$

— la partie déviatoire est le tenseur des contraintes de cisaillement

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\sigma}^v - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}^v) \mathbf{I}. \quad (2.6)$$

Pour un fluide newtonien, ce tenseur est également lié à la partie déviatoire du tenseur des taux de déformations $\mathbf{d}_d$ de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \mathbf{d}_d = 2\mu \left(\mathbf{d} - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right), \quad \mathbf{d} = \frac{1}{2} ((\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T) \quad (2.7)$$

Les équations de conservation de masse, quantité de mouvement et d'énergie pour la matrice solide du milieu poreux sont respectivement :

$$\frac{\partial}{\partial t} ((1 - \phi) \rho_s) = -\mathcal{M}, \quad (2.8a)$$

$$\nabla((1 - \phi) p_s) + \nabla \cdot ((1 - \phi) \boldsymbol{\tau}_s) = -\mathbf{f} + (1 - \phi) \rho_s \mathbf{g}, \quad (2.8b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} ((1 - \phi) \rho_s e_s) = -\nabla \cdot ((1 - \phi) \mathbf{q}_s) - \mathcal{E}. \quad (2.8c)$$

Sachant que la masse volumique de la matrice solide est considérée comme constante, les équations (2.8) deviennent :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{\rho_s} \mathcal{M}, \quad (2.9a)$$

$$\nabla((1 - \phi) p_s) + \nabla \cdot ((1 - \phi) \boldsymbol{\tau}_s) = -\mathbf{f} + (1 - \phi) \rho_s \mathbf{g}, \quad (2.9b)$$

$$(1 - \phi) \rho_s \frac{\partial e_s}{\partial t} = -\nabla \cdot ((1 - \phi) \mathbf{q}_s) - \mathcal{E} + \mathcal{M} e_s. \quad (2.9c)$$

Les hypothèses supplémentaires émises dans la section 2.1.1 permettent de simplifier les équations précédentes. Les équations de conservation de l'énergie ne sont plus considérées étant donné que le domaine est adiabatique. De plus, aucun échange de masse entre la phase solide et fluide, $\mathcal{M} = 0$, implique via l'équation (2.9a) que ϕ ne varie plus temporellement :

$$\phi = \phi(\mathbf{x}).$$

Les équations (2.1) du fluide se simplifient pour former un nouveau système :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho) + \nabla \cdot (\phi\rho\mathbf{u}) = 0, \quad (2.10a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho\mathbf{u}) + \nabla \cdot (\phi\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) + \nabla(\phi p) = \nabla \cdot (\phi\boldsymbol{\sigma}^v) + \phi\rho\mathbf{g} + \mathbf{f}. \quad (2.10b)$$

Les équations bilan de la phase solide, (2.9), se simplifient aussi pour former un nouveau système :

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = 0, \quad (2.11a)$$

$$\nabla((1-\phi)p_s) + \nabla \cdot ((1-\phi)\boldsymbol{\tau}_s) = -\mathbf{f} + (1-\phi)\rho_s\mathbf{g}. \quad (2.11b)$$

Lois de comportement linéaires Des équations linéaires constitutives ont été établies par *Papalexandris et Antoniadis (2015)* [48] pour les contraintes visqueuses et le terme d'échange de quantité de mouvement au moyen de forces à l'interface entre le milieu poreux et le fluide pur :

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\mathbf{d}_d, \quad p^v = -\zeta\nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (2.12)$$

$$\mathbf{f} = p\nabla\phi - \beta\mathbf{u} \quad (2.13)$$

En introduisant les équations (2.4) et (2.13) dans l'équation (2.10b) et en considérant que la viscosité de volume ζ est nulle, les équations de conservation du fluide s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho) + \nabla \cdot (\phi\rho\mathbf{u}) = 0, \quad (2.14a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho\mathbf{u}) + \nabla \cdot (\phi\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) + \phi\nabla p = \nabla \cdot (\phi\boldsymbol{\tau}) + \phi\rho\mathbf{g} - \beta\mathbf{u}. \quad (2.14b)$$

2.1.3 Approximation à faible nombre de Mach

Les équations (2.1) et (2.8) établies précédemment sont aussi bien valables pour des écoulements compressibles que pour des écoulements incompressibles. Dans le type d'écoulement qui nous intéresse, la vitesse du fluide est faible comparée à la vitesse du son : ce qui implique une faible valeur du nombre de Mach. Par conséquent, les effets de compressibilité peuvent être négligés, impliquant par ailleurs que la masse volumique du fluide varie peu.

L'approximation à faible nombre de Mach a été faite sur les équations de base (2.1) et (2.8). La viscosité de volume ζ a été supposée nulle par l'hypothèse de Stokes. En effet, pour l'air cette viscosité est faible. L'approximation à faible nombre de Mach consiste à introduire une perturbation dans le système, ce qui permet de simplifier les équations.

Ici, seuls les concepts de base du développement sont présentés. La dérivation de ces équations est développée de façon plus complète par *Varsakelis et Papalexandris (2011)* [67]. La première étape consiste à adimensionnaliser les équations. Pour ce faire, des variables de références doivent être choisies : une vitesse u_r , une longueur L_r ainsi qu'une viscosité de

cisaillement μ_r . Il en est de même pour la densité, pression et température. Ces dernières doivent respecter la loi des gaz parfaits :

$$p_r = R\rho_r T_r . \quad (2.15)$$

Ensuite, chaque variable adimensionnelle est développée en série de puissance de θ , la perturbation. Par exemple pour la vitesse, la série se présente comme suit :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^0 + \theta \mathbf{u}^1 + \mathcal{O}(\theta^2) \quad \text{avec} \quad \theta = \gamma_r M_r^2 \quad (2.16)$$

où M_r est le nombre de Mach pour la vitesse de référence. La perturbation θ devient pour un gaz parfait :

$$\theta = \frac{\rho_r u_r^2}{p_r} . \quad (2.17)$$

Ces séries sont par après introduites dans les équations adimensionnalisées. Cette étape permet de séparer chaque équation en une équation d'ordre $\mathcal{O}(1/\theta)$, une équation d'ordre $\mathcal{O}(1)$ et une équation d'ordre $\mathcal{O}(\theta)$. Les ordres supérieurs ne sont pas pris en compte. Ainsi, l'ensemble des équations du modèle considéré s'écrit :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{\rho_s} \mathcal{M} , \quad (2.18a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho) + \nabla \cdot (\phi \rho \mathbf{u}) = \mathcal{M} , \quad (2.18b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\phi \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\phi \nabla p^1 + \frac{1}{Re} \nabla \cdot (2\phi \mu \mathbf{d}_a) - \phi \rho Ri \mathbf{y} - \beta \mathbf{u} . \quad (2.18c)$$

Où p^1 est la pression dynamique, le nombre de Richardson vaut $Ri = (|\mathbf{g}| l_r)/u_r^2$ et $\mathbf{y}$ est un vecteur unité opposé à la direction de la force gravitationnelle. Toutes les variables sans exposant réfèrent à l'ordre 0 du développement en série (par exemple $\mathbf{u}^0$ de l'équation (2.16)). Il est également important de mentionner que toutes les variables dans les équations (2.18) sont adimensionnelles.

Le système n'est plus composé que de 3 équations au lieu de 4. L'équation de conservation de la quantité de mouvement de la matrice solide (2.11b) à l'ordre $\mathcal{O}(1)$ qui est considéré pour établir l'approximation à faible nombre de Mach n'intervient plus du fait qu'elle prend la forme $0 = 0$.

En plus de considérer un écoulement à faible nombre de Mach , ie. $M \ll 1$, il n'y a aucun échange de masse entre la phase solide et fluide. Les équations (2.18) deviennent alors :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 , \quad (2.19a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho) + \nabla \cdot (\phi \rho \mathbf{u}) = 0 , \quad (2.19b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\phi \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\phi \nabla p^1 + \frac{1}{Re} \nabla \cdot (2\phi \mu \mathbf{d}_a) - \beta \mathbf{u} - \phi \rho Ri \mathbf{y} . \quad (2.19c)$$

En combinant les équations (2.19a) et (2.19b) avec l'hypothèse de masse volumique constante, le système précédent devient :

$$\nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = 0, \quad (2.20a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\phi \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\phi \nabla p^1 + \frac{1}{Re} \nabla \cdot (2\phi \mu \mathbf{d}_d) - \beta \mathbf{u} - \phi \rho Ri \mathbf{y}. \quad (2.20b)$$

Les équations (2.20) sont les équations utilisées pour le modèle laminaire dans ce travail.

2.2 Modèle mathématique de dispersion

Dans cette section, un modèle de dispersion est développé en utilisant l'approche du domaine simple.

2.2.1 Développement du modèle

Pour rappel, le modèle est développé en considérant que la porosité ϕ est une fonction de l'espace $\phi(\mathbf{x})$ et que la densité du mélange ρ est constante. La loi de conservation globale de la masse de polluant est :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{V_f} \rho_p dV_f \right) = \int_{V_f} \mathcal{R} dV_f \quad (2.21)$$

Cette équation traduit le fait que la variation de masse de polluant dans le volume de fluide est due à la masse de polluant qui entrent et qui sortent de ce volume ou à l'apport de polluant par une source. En utilisant la relation $dV_f = \phi dV$, l'équation (2.21) devient :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_V \rho_p \phi dV \right) = \int_V \phi \mathcal{R} dV. \quad (2.22)$$

Le théorème de transport de Reynolds est ensuite appliqué au terme de gauche.

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho_p \phi) dV + \int_A \rho_p \phi u_{p,i} n_i dA = \int_V \phi \mathcal{R} dV \quad (2.23)$$

En utilisant le théorème de la divergence, l'équation devient :

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho_p \phi) dV + \int_V \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_p \phi u_{p,i}) dV = \int_V \phi \mathcal{R} dV. \quad (2.24)$$

La forme locale de l'équation de dispersion s'écrit comme :

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} (\rho_p) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_p \phi u_{p,i}) = \phi \mathcal{R}. \quad (2.25)$$

L'équation (2.25) peut aussi s'écrire sous la forme suivante.

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} (\rho_p) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_p \phi ((u_{p,i} - u_i) + u_i)) = \phi \mathcal{R} \quad (2.26)$$

Le flux de diffusion $\mathbf{J}_p$ est défini par la loi de Fick :

$$J_{p,i} = \rho_p(u_i - u_{p,i}) = \rho \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial Y_p}{\partial x_j} \quad (2.27)$$

où $\mathcal{D}$ est la matrice diagonale des coefficients de diffusion. Il s'agit d'une matrice car la diffusion peut être différente dans la direction horizontale ou verticale au sein du milieu poreux. L'équation devient :

$$\phi \frac{\partial}{\partial t}(\rho_p) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_p \phi u_i - \phi \rho \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial Y_p}{\partial x_j}) = \phi \mathcal{R} \quad (2.28)$$

Sachant aussi que $\rho_p = \rho Y_p$, l'équation précédente devient :

$$\rho \phi \frac{\partial}{\partial t}(Y_p) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \phi u_i Y_p) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\phi \rho \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial Y_p}{\partial x_j}) + \phi \mathcal{R} \quad (2.29)$$

L'équation (2.20a) de conservation de la masse du fluide permet de simplifier l'équation précédente et d'obtenir l'équation générale de dispersion laminaire.

$$\rho \phi \left(\frac{\partial Y_p}{\partial t} + u_i \frac{\partial Y_p}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \phi \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial Y_p}{\partial x_j} \right) + \phi \mathcal{R} \quad (2.30)$$

2.2.2 Dispersion de particules solides

Lorsque les scalaires passifs étudiés sont des particules solides, il est important de prendre la gravité en considération car les particules sont plus lourdes que l'air. Cependant, il est toujours considéré que leur dispersion n'influence pas la dynamique de l'écoulement. Le terme convectif de l'équation de dispersion est alors modifié en conséquence. Dans la direction verticale, la vitesse de convection devient la différence entre la vitesse verticale et la vitesse de dépôt [34]. L'équation de dispersion de particules solides est :

$$\rho \phi \left(\frac{\partial Y_p}{\partial t} + (u_i - u_{g,i}) \frac{\partial Y_p}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \phi \mathcal{D}_{ij} \frac{\partial Y_p}{\partial x_j} \right) + \phi \mathcal{R} \quad (2.31)$$

où $u_{g,i}$ est la vitesse de dépôt. Elle est nulle dans la direction horizontale ($u_{g,1} = u_g = 0$) et vaut v_g dans la direction verticale. La vitesse v_g est la suivante [42] :

$$v_g = \frac{1}{18} \frac{\rho d_a^2 C_c g}{\mu} . \quad (2.32)$$

Les définitions des variables de cette équation sont les suivantes :

- d_a est le diamètre aérodynamique de la particule. Pour des particules sphériques, le diamètre aérodynamique peut être défini comme :

$$d_a = d_s \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho}} \quad (2.33)$$

où ρ_p est la densité de la particule et d_s le diamètre de Stokes aussi appelé diamètre volumique équivalent.

- C_c est la constante "Cunningham slip correction factor". Il peut être égal à 1 pour des particules de grande taille comme les PM₁₀ et les poussières [31].

2.2.3 Adimensionnalisation de l'équation de dispersion et approximation à faible nombre de Mach

Un ensemble de variables de référence est utilisé pour adimensionnaliser l'équation (2.30). L'adimensionnalisation des différentes variables est reprise dans le tableau 2.1.

Variable	Adimensionnalisation
ρ	$\hat{\rho} = \frac{\rho}{\rho_r}$
u	$\hat{u} = \frac{u}{u_r}$
v	$\hat{v} = \frac{v}{u_r}$
t	$\hat{t} = \frac{tu_r}{L_r}$
x	$\hat{x} = \frac{x}{L_r}$
y	$\hat{y} = \frac{y}{L_r}$
$\mathcal{D}$	$\hat{\mathcal{D}}_{ij} = \frac{\mathcal{D}_{ij}}{\mathcal{D}_r}$
$\mathcal{R}$	$\hat{\mathcal{R}} = \frac{\mathcal{R}L_r}{\rho_r u_r}$

TABLE 2.1 – Adimensionnalisation des variables intervenant dans les équations de conservation dans le cas laminaire.

Ainsi l'équation (2.30) devient :

$$\rho_r \hat{\rho} \phi \left(\frac{u_r}{L_r} \frac{\partial \hat{Y}_p}{\partial \hat{t}} + u_r \hat{u}_i \frac{1}{L_r} \frac{\partial \hat{Y}_p}{\partial \hat{x}_i} \right) = \frac{1}{L_r} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} \left(\rho_r \hat{\rho} \phi \mathcal{D}_r \hat{\mathcal{D}}_{ij} \frac{1}{L_r} \frac{\partial \hat{Y}_p}{\partial \hat{x}_j} \right) + \frac{u_r \rho_r}{L_r} \phi \hat{\mathcal{R}} \quad (2.34)$$

En divisant l'équation (2.34) par $\frac{\rho_r u_r}{L_r}$, on obtient :

$$\hat{\rho} \phi \left(\frac{\partial \hat{Y}_p}{\partial \hat{t}} + \hat{u}_i \frac{\partial \hat{Y}_p}{\partial \hat{x}_i} \right) = \frac{\mathcal{D}_r}{L_r u_r} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} \left(\hat{\rho} \phi \hat{\mathcal{D}}_{ij} \frac{\partial \hat{Y}_p}{\partial \hat{x}_j} \right) + \phi \hat{\mathcal{R}} \quad (2.35)$$

Le terme $\frac{\mathcal{D}_r}{L_r u_r}$ est en fait équivalent à $\frac{1}{Re Sc}$. L'équation (2.35) devient :

$$\hat{\rho} \phi \left(\frac{\partial \hat{Y}_p}{\partial \hat{t}} + \hat{u}_i \frac{\partial \hat{Y}_p}{\partial \hat{x}_i} \right) = \frac{1}{Re Sc} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_i} \left(\hat{\rho} \phi \hat{\mathcal{D}}_{ij} \frac{\partial \hat{Y}_p}{\partial \hat{x}_j} \right) + \phi \hat{\mathcal{R}} \quad (2.36)$$

La perturbation θ n'apparaît pas dans l'équation (2.36). Par conséquent, les variables de cette équation réfèrent toutes à l'ordre zéro du développement en séries de θ de l'approximation à faible nombre de Mach.

Remarque : Afin de simplifier la notation de l'équation (2.36), l'accent circonflexe ne sera plus explicitement mis mais les variables restent bien entendu adimensionnelles pour les sections suivantes.

2.3 Méthodes numériques

Au vu des hypothèses considérées : masse volumique et température constantes ; la résolution de l'équation de la conservation de la quantité de mouvement est la seule équation du système (2.20) qui doit être résolue numériquement. Elle est reprise ci-dessous.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\phi \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\phi \nabla p^1 + \frac{1}{Re} \nabla \cdot (2\phi \mu \mathbf{d}_a) - \beta \mathbf{u}$$

Pour plus de compréhension dans les explications qui suivront, sont regroupés ci-dessous les noms données aux différents termes de l'équation bilan de quantité de mouvement (2.20b).

$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho \mathbf{u})$	Dérivée temporelle
$\nabla \cdot (\phi \rho \mathbf{u} \mathbf{u})$	Terme convectif
$\phi \nabla p^1$	Terme de pression
$\frac{1}{Re} \nabla \cdot (2\phi \mu \mathbf{d}_a)$	Terme diffusif
$\beta \mathbf{u}$	Terme de traînée

TABLE 2.2 – Termes de l'équation de conservation de la quantité de mouvement du fluide (2.20b).

En ce qui concerne le problème de dispersion, l'équation (2.36), reprise ci-dessous, doit également être résolue numériquement. Grâce à l'hypothèse de densité constante, les deux problèmes sont découplés.

$$\rho \phi \left(\frac{\partial Y_p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Y_p \right) = \frac{1}{Re Sc} \nabla \cdot (\rho \phi \mathcal{D} \cdot \nabla Y_p) + \phi \mathcal{R}$$

Cette section présente l'algorithme utilisé dans le travail réalisé par *Dr P.D. Antoniadis* pour le problème dynamique. Le modèle est basé sur les méthodes d'Adams-Bashforth-Moulton qui sont des méthodes prédicteur-correcteur. Par choix, l'équation de dispersion est résolue en suivant les mêmes méthodes. Ces méthodes et le cycle de calcul sont détaillés dans la section 2.3.1. Le domaine est discrétisé dans les deux dimensions. Les valeurs sont calculées à des intervalles constants $2r_i$ et $2r_j$. Pour ce faire, les deux équations à résoudre doivent être discrétisées spatialement. La méthode est expliquée dans la section 2.3.2.

2.3.1 Discrétisation temporelle

Méthodes prédicteur-correcteur

Le cycle de calcul est réalisé à chaque pas de temps. Les méthodes d'Adams-Bashforth-Moulton sont la combinaison des méthodes explicites d'Adams-Bashforth et des méthodes

implicites Adams-Moulton. Elles permettent de résoudre des équations différentielles du type :

$$\frac{\partial u(t)}{\partial t} = f(t, u(t)) . \quad (2.37)$$

Cette méthode de calcul consiste en un cycle en 2 étapes : estimer les valeurs à l'étape prédictrice par une méthode explicite et ensuite actualiser ces valeurs dans l'étape correctrice en utilisant les valeurs de la première étape dans une méthode implicite. Pour un ordre inférieur ou égal à 2, les méthodes explicites d'Adams-Bashforth sont inconditionnellement stables. Le choix de méthodes prédicteur-correcteur permet d'augmenter la stabilité et la précision lors de la résolution numérique [4, 38].

Étape prédicteur

Lors de la première phase, une première valeur est calculée grâce aux valeurs des pas de temps précédents à l'aide d'une méthode explicite.

La méthode explicite d'ordre deux choisie est :

$$\frac{U^{(*)} - U^{(n)}}{\Delta t} = -\frac{1}{2}f(t^{(n-1)}, U^{(n-1)}) + \frac{3}{2}f(t^{(n)}, U^{(n)}) . \quad (2.38)$$

L'indice n fait référence au pas de temps des dernières valeurs calculées. L'inconnu étant la valeur prédite de la fonction $u(t)$ au temps $t^{(n+1)}$, notée $U^{(*)}$.

Certains termes sont traités de façon implicite pour permettre une plus grande stabilité tout en gardant une taille de pas de temps acceptable. Néanmoins, traiter des termes avec dérivées implicitement dans les deux dimensions du domaine complexifie fortement la résolution du système. Le choix a été de traiter de façon implicite uniquement les gradients dans la direction y pour le terme diffusif ; la direction alignée à la gravité ainsi que la direction de préférence pour la flottabilité. En ne traitant qu'un seul terme de manière implicite, il est possible de résoudre plusieurs systèmes linéaires pour lesquels la matrice creuse est tridiagonale. La méthode implicite choisie est celle de deuxième ordre (méthode des trapèzes) :

$$\frac{U^{(*)} - U^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2}f(t^{(n)}, U^{(n)}) + \frac{1}{2}f(t^{(n+1)}, U^{(*)}) . \quad (2.39)$$

Le terme de traînée dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement est aussi discrétisée via cette méthode implicite.

Étape correctrice

Cette étape consiste à corriger les valeurs calculées lors de la première étape (*) tout en utilisant ces dernières. L'ordre de calcul des valeurs est identique dans les deux étapes. La seule différence concerne les termes traités explicitement. Ils sont traités de façon implicite cette fois. La discrétisation choisie est la méthode des trapèzes, aussi appelée Adams-Moulton d'ordre 2. Il s'agit donc de la même méthode implicite que pour le terme diffusif vertical. Toutefois, les termes $(n + 1)$ du membre de droite sont remplacés par les

valeurs calculées lors de la première étape du cycle (notées *). Sous forme d'équation, cela donne :

$$\frac{U^{(n+1)} - U^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2}f(t^{(n)}, U^{(n)}) + \frac{1}{2}f(t^{(n+1)}, U^{(*)}). \quad (2.40)$$

Le terme diffusif dans la direction verticale et le terme de traînée sont traités de la même manière que précédemment, c'est-à-dire :

$$\frac{U^{(n+1)} - U^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2}f(t^{(n)}, U^{(n)}) + \frac{1}{2}f(t^{(n+1)}, U^{(n+1)}). \quad (2.41)$$

Méthode de calcul

La résolution de l'équation de quantité de mouvement est réalisée en la combinant avec la définition de la pression piézométrique p' , explicitée dans l'équation (2.42).

$$p' = p_1 + \rho Ri y \quad (2.42)$$

La combinaison des équations (2.20b) et (2.42) donne :

$$\frac{\partial(\rho\phi\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}\mathbf{u}) + \phi\nabla p' = \frac{1}{Re}\nabla \cdot (2\phi\mu\mathbf{d}_d) - \beta\mathbf{u} + \phi Ri y \nabla \rho. \quad (2.43)$$

En tenant compte que la masse volumique est constante, l'équation précédente devient :

$$\frac{\partial(\rho\phi\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}\mathbf{u}) + \phi\nabla p' = \frac{1}{Re}\nabla \cdot (2\phi\mu\mathbf{d}_d) - \beta\mathbf{u}. \quad (2.44)$$

Les deux inconnues sont donc la pression piézométrique et le vecteur vitesse. Afin de faciliter la résolution du problème, les calculs de ces deux variables sont découplés par la méthode de projection. La première étape consiste à calculer une vitesse intermédiaire $\tilde{\mathbf{u}}$ grâce à l'équation (2.44) mais en négligeant le terme de pression. L'équation à résoudre est donc la suivante :

$$\frac{\partial(\rho\phi\tilde{\mathbf{u}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}) = \frac{1}{Re}\nabla \cdot (2\phi\mu\mathbf{d}_d) - \beta\tilde{\mathbf{u}}. \quad (2.45)$$

Ensuite, la pression est calculée en utilisant les valeurs de la vitesse intermédiaire. Finalement, les valeurs de pression et de vitesse intermédiaires permettent de calculer la vitesse $\mathbf{u}$.

La figure 2.1 propose une représentation schématique de la structure utilisée pour résoudre le système d'équations. Elle permet de visualiser l'ordre de calcul des différentes variables. La résolution de l'équation de dispersion de la fraction massique, Y , est réalisée en dernier lieu car cette variable n'intervient pas dans le calcul de la vitesse. Cependant, $\mathbf{u}$ intervient dans l'équation bilan de la concentration du scalaire passif, d'où sa position dans les étapes de résolution.

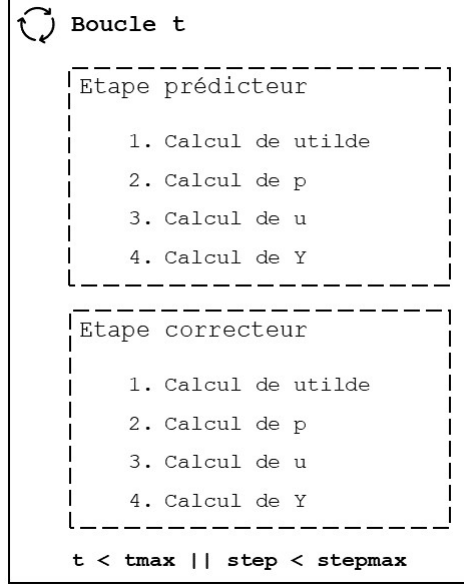


FIGURE 2.1 – Représentation schématique des étapes de résolution des équations de conservation pour le calcul de la concentration d'un scalaire passif dans un écoulement laminaire.

Prédicteur L'équation 2.45 est discrétisée temporellement avec la méthode explicitée ci-dessus : le terme de diffusion dans la direction verticale et le terme de traînée sont traités implicitement.

L'équation discrétisée pour le pas prédicteur prend la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 \frac{\rho\phi\tilde{\mathbf{u}} - \rho\phi\mathbf{u}^{(n)}}{\Delta t} &= \frac{3}{2}Res_{\mathbf{u}}^{(n)} - \frac{1}{2}Res_{\mathbf{u}}^{(n-1)} \\
 &+ \frac{1}{2}\mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi\mu \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial y} \right) + \frac{1}{2}\mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi\mu \frac{\partial \mathbf{u}^{(n)}}{\partial y} \right) \\
 &- \beta^{(n)} \left(\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{u}} + \frac{1}{2}\mathbf{u}^{(n)} \right).
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

Dans cette équation, le terme $\mathbf{c}$ est introduit pour simplifier l'écriture de l'équation et vaut $diag(1, \frac{4}{3})$. Le terme $Res_{\mathbf{u}}$ regroupe tous les termes traités explicitement. Ce terme est détaillé dans les équations (2.47). Ces équations sont développées grâce à la définition de la partie déviatoire du tenseur des taux de déformations $\mathbf{d}_a$ (équation (2.7)).

$$Res_u = -\nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}u) + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu\phi \left(2\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\nabla \cdot \mathbf{u} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu\phi \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \tag{2.47a}$$

$$Res_v = -\nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}v) + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu\phi \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu\phi \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right] \tag{2.47b}$$

La vitesse $\tilde{\mathbf{u}}$ est trouvée en utilisant un solveur **tridag** qui résout des matrices tri-diagonales. La raison de ce choix est détaillée dans la section 2.3.3. Une fois la vitesse $\tilde{\mathbf{u}}$

déterminée, il est possible de revenir à l'équation de quantité de mouvement (2.44) en la discrétisant comme précédemment et en utilisant les valeurs prédites (*) pour la pression.

$$\frac{\rho\phi\mathbf{u}^{(*)}}{\Delta t} = \frac{\rho\phi\tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} - \phi\nabla p'^{(*)}. \quad (2.48)$$

Cette dernière équation contient deux inconnues $\mathbf{u}^{(*)}$ et $p'^{(*)}$. Prendre la divergence de l'équation (2.48) permet d'obtenir une nouvelle équation dans laquelle la seule inconnue est $p'^{(*)}$:

$$\frac{1}{\Delta t}\nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}^{(*)}) = \frac{1}{\Delta t}\nabla \cdot (\rho\phi\tilde{\mathbf{u}}) - \nabla \cdot (\phi\nabla p'^{(*)}). \quad (2.49)$$

Grâce à l'équation (2.20a) de conservation de la masse, l'équation (2.49) devient :

$$\nabla \cdot (\phi\nabla p'^{(*)}) = \frac{1}{\Delta t}\nabla \cdot (\rho\phi\tilde{\mathbf{u}}). \quad (2.50)$$

Nous obtenons ainsi une équation elliptique pour calculer la variable p' . Pour des raisons de stabilité, *Dr P.D. Antoniadis* a décidé de résoudre ce système linéaire avec la méthode stabilisée par gradient biconjugué (BiCGSTAB). Une fois la pression p' calculée, la vitesse $\mathbf{u}^{(*)}$ est calculée via l'équation (2.48).

L'étape suivante consiste à résoudre l'équation de la dispersion. La discrétisation temporelle pour l'étape prédicteur est :

$$\rho\phi\left(\frac{Y_p^{(*)} - Y_p^{(n)}}{\Delta t}\right) = \frac{3}{2}Res_{Y_p}^{(n)} - \frac{1}{2}Res_{Y_p}^{(n-1)} + \frac{1}{Re Sc} \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho\phi\mathcal{D}_{yy} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial Y_p^{(*)}}{\partial y} + \frac{1}{2} \frac{\partial Y_p^{(n)}}{\partial y} \right) \right) \quad (2.51)$$

Le terme Res_{Y_p} regroupe à nouveau les termes traités explicitement :

$$Res_{Y_p} = -\rho\phi\mathbf{u} \cdot \nabla Y_p + \frac{1}{Re Sc} \frac{\partial}{\partial x} (\rho\phi\mathcal{D}_{xx} \frac{\partial Y_p}{\partial x}) + \phi\mathcal{R} \quad (2.52)$$

La discrétisation spatiale choisie suit le même principe que celle de la vitesse intermédiaire $\tilde{\mathbf{u}}$. Par conséquent, il faut aussi résoudre un système linéaire à matrice tridiagonale pour déterminer la fraction massique Y_p .

Correcteur Les étapes du pas prédicteur ont été détaillées précédemment et sont similaires pour la deuxième étape du cycle. En effectuant la discrétisation temporelle avec la méthode pour l'étape correctrice, l'équation (2.45) qui permet de trouver les valeurs de $\tilde{\mathbf{u}}$ devient :

$$\begin{aligned} \frac{\rho\phi\tilde{\mathbf{u}} - \rho\phi\mathbf{u}^{(n)}}{\Delta t} &= \frac{1}{2}Res_{\mathbf{u}}^{(*)} + \frac{1}{2}Res_{\mathbf{u}}^{(n)} \\ &+ \frac{1}{2}\mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi\mu \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial y} \right) + \frac{1}{2}\mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi\mu \frac{\partial \mathbf{u}^{(n)}}{\partial y} \right) \\ &- \beta^{(*)} \left(\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{u}} + \frac{1}{2}\mathbf{u}^{(n)} \right). \end{aligned} \quad (2.53)$$

A nouveau, le solveur **tridag** est utilisé pour trouver $\tilde{\mathbf{u}}$. Afin d'obtenir $\mathbf{u}^{(n+1)}$, il faut d'abord résoudre l'équation (2.54) et finalement l'équation (2.55) :

$$\nabla \cdot (\phi \nabla p'^{(n+1)}) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot (\rho \phi \tilde{\mathbf{u}}). \quad (2.54)$$

$$\frac{\rho \phi \mathbf{u}^{(n+1)}}{\Delta t} = \frac{\rho \phi \tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} - \phi \nabla p'^{(n+1)}. \quad (2.55)$$

La discrétisation temporelle de l'équation de dispersion pour l'étape correcteur est la suivante :

$$\begin{aligned} \rho \phi \left(\frac{Y_p^{(n+1)} - Y_p^{(n)}}{\Delta t} \right) &= \frac{1}{2} Res_{Y_p}^{(*)} + \frac{1}{2} Res_{Y_p}^{(n)} \\ &+ \frac{1}{Re Sc} \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \phi \mathcal{D}_{yy} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial Y_p^{(n+1)}}{\partial y} + \frac{1}{2} \frac{\partial Y_p^{(n)}}{\partial y} \right) \right) \end{aligned} \quad (2.56)$$

2.3.2 Discrétisation spatiale

Le domaine est discrétisé de manière rectiligne. Dès lors, la taille de chaque cellule du maillage est identique.

Avant d'explicitier le développement de la discrétisation spatiale, il est utile de définir quelques variables :

- La taille du maillage $[L \ H]$ correspond à la longueur et la hauteur du domaine considéré.
- La résolution du maillage $[n \ m]$ détermine le nombre de points sur lesquels les valeurs des variables sont calculées.
- L'intervalle constant correspondant à la taille des mailles $(2r_i, 2r_j)$ est défini par les équations suivantes :

$$2r_i = \frac{L}{n}, \quad 2r_j = \frac{H}{m}. \quad (2.57)$$

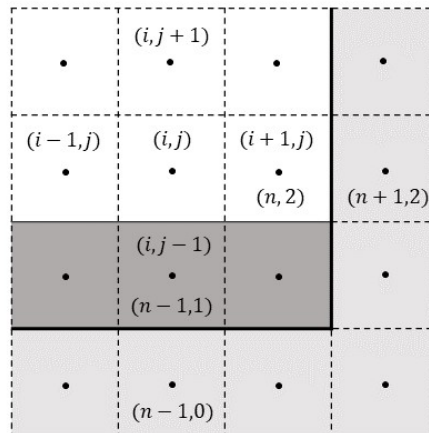


FIGURE 2.2 – Représentation schématique du coin inférieur droit d'un maillage quelconque utilisé dans le cadre de ce travail.

Dans cette section, la méthode de discrétisation spatiale utilisée pour le cas laminaire est développée. Sur la figure 2.2, sont représentées plusieurs cellules d'un maillage quelconque. Les cellules en gris foncé sont les mailles du milieu poreux ($\phi < 1$). Les cellules en gris clair sont les cellules fantômes. Leur fonction est précisée plus loin dans cette section. Il est important de mentionner que les valeurs calculées sont celles au centre de chaque cellule, c'est-à-dire à une distance r_i des interfaces verticales et une distance r_j des interfaces horizontales.

Valeurs aux interfaces

Les cellules sont séparées entre elles par des interfaces. Il est parfois utile de connaître les valeurs en un point se trouvant sur une interface afin de pouvoir, par exemple, réaliser des différences finies. Étant donné que le maillage considéré dans ce travail est composé de mailles de taille identique, les points centraux des mailles de part et d'autre de l'interface se trouvent à même distance de cette dernière. La valeur à l'interface est donc la moyenne entre les valeurs des cellules autour de cette interface.

$$\overline{f}_{i\pm\frac{1}{2},j}^x = \frac{f_{i\pm 1,j} + f_{i,j}}{2} \quad (2.58a)$$

$$\overline{f}_{i,j\pm\frac{1}{2}}^y = \frac{f_{i,j\pm 1} + f_{i,j}}{2} \quad (2.58b)$$

Pour une interface à droite d'une cellule (i, j) , la définition doit être prise avec le signe positif. Le signe négatif est utilisé pour l'interface à gauche.

Cellules fantômes

Sur le schéma de la figure 2.2, les cellules en gris clair représentent les cellules fantômes. Ces cellules permettent le calcul des valeurs sur les extrémités du domaine. Le bord du domaine coïncide avec les interfaces entre les cellules fantômes et les cellules aux extrémités ($i = 1$ ou n , $j = 1$ ou m). Ces interfaces sont mises en évidence par une épaisseur de trait plus grande sur la figure 2.2. L'introduction des cellules fantômes a donc deux rôles : permettre d'appliquer les conditions limites et permettre le calcul de différences finies aux extrémités du domaine.

Différences finies

La discrétisation d'une dérivée de premier ordre repose sur la différence entre les valeurs aux interfaces de la cellule. Une différence finie dans la direction horizontale (x) au centre de la maille s'écrit :

$$\left. \frac{\delta f}{\delta x} \right|_{i,j} = \frac{\overline{f}_{i+\frac{1}{2},j}^x - \overline{f}_{i-\frac{1}{2},j}^x}{2r_i} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{4r_i} \quad (2.59)$$

Via l'équation (2.58a), il est possible de se rendre compte qu'il s'agit d'une différence centrée entre les valeurs centrales des cellules adjacentes.

La valeur d'une différence finie sur une interface est aussi définie par la différence centrée des valeurs des deux cellules adjacentes à l'interface. Elle s'écrit :

$$\left. \frac{\delta f}{\delta x} \right|_{i \pm \frac{1}{2}, j} = \pm \frac{f_{i \pm 1, j} - f_{i, j}}{2 r_i}. \quad (2.60)$$

Dérivées partielles de premier ordre

Les dérivées partielles sont définies par des différences finies. Une dérivée partielle au centre d'une cellule équivaut à une différence finie évaluée au même point (équation (2.59)). La discrétisation d'une dérivée première sur un point se trouvant sur une interface s'écrit différemment en fonction de l'interface d'intérêt. Pour rappel, l'indice i fait référence à la direction horizontale (x) et l'indice j à la direction verticale (y). Voici leur définition :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i \pm \frac{1}{2}, j} = \left. \frac{\delta f}{\delta x} \right|_{i \pm \frac{1}{2}, j}, \quad (2.61a)$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i, j \pm \frac{1}{2}} = \overline{\left. \frac{\delta f}{\delta x} \right|_{i, j \pm \frac{1}{2}}}^y. \quad (2.61b)$$

Ces définitions facilitent la compréhension de la discrétisation de termes plus complexes. Dans la suite de cette section, la discrétisation de certains termes (voir tableau 2.2) de l'équation (2.20b) de conservation de quantité de mouvement est détaillée.

Terme convectif Le terme convectif intervient dans le calcul de la vitesse à partir des valeurs de la vitesse intermédiaire et de la pression.

$$\nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{u} \mathbf{u}) = \frac{f_u|_{i+\frac{1}{2}} \overline{\mathbf{u}}_{i+\frac{1}{2}}^x - f_u|_{i-\frac{1}{2}} \overline{\mathbf{u}}_{i-\frac{1}{2}}^x}{2 r_i} + \frac{f_v|_{j+\frac{1}{2}} \overline{\mathbf{u}}_{j+\frac{1}{2}}^y - f_v|_{j-\frac{1}{2}} \overline{\mathbf{u}}_{j-\frac{1}{2}}^y}{2 r_j} \quad (2.62)$$

Les fonctions f sont des fonctions auxiliaires définies dans les équations (2.63) par analogie à l'équation (2.49) qui permet de calculer la vitesse. Elles permettent de mieux approximer le terme convectif. En effet, les valeurs calculées de $\tilde{\mathbf{u}}$ et p' sont plus récentes que les dernières valeurs calculées pour $\mathbf{u}$.

$$f_u|_{i+\frac{1}{2}, j} = \rho \phi u|_{i+\frac{1}{2}, j} = \overline{(\rho \phi \tilde{u})}_{i+\frac{1}{2}, j}^x - \overline{\phi}_{i+\frac{1}{2}, j}^x \left. \frac{\delta p'}{\delta x} \right|_{i+\frac{1}{2}, j} \Delta t, \quad (2.63a)$$

$$f_v|_{i, j+\frac{1}{2}} = \rho \phi v|_{i, j+\frac{1}{2}} = \overline{(\rho \phi \tilde{v})}_{i, j+\frac{1}{2}}^y - \overline{\phi}_{i, j+\frac{1}{2}}^y \left. \frac{\delta p'}{\delta y} \right|_{i, j+\frac{1}{2}} \Delta t. \quad (2.63b)$$

Terme diffusif Une partie du terme diffusif est développée dans l'équation (2.47a). La particularité de ce terme est qu'il possède des dérivées partielles de second ordre dont la discrétisation spatiale varie selon la combinaison des deux directions de dérivation. Les deux termes étudiés sont les termes traités explicitement.

En se référant aux équations (2.61), les deux termes s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \phi \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i,j} = \frac{\overline{(\mu \phi)_{i+\frac{1}{2},j}}^x \frac{\delta u}{\delta x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} - \overline{(\mu \phi)_{i-\frac{1}{2},j}}^x \frac{\delta u}{\delta x} \Big|_{i-\frac{1}{2},j}}{2 r_i} \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \phi \frac{\partial v}{\partial x} \right)_{i,j} = \frac{\overline{(\mu \phi)_{i,j+\frac{1}{2}}}^y \frac{\delta v}{\delta x} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} - \overline{(\mu \phi)_{i,j-\frac{1}{2}}}^y \frac{\delta v}{\delta x} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}}}{2 r_j} \quad (2.65)$$

2.3.3 Résolution d'un système linéaire à matrice tridiagonale

La résolution de l'équation de la quantité de mouvement et la dispersion impliquent la résolution de plusieurs systèmes linéaires tridiagonaux. Une discrétisation détaillée permet de comprendre pourquoi les systèmes sont à matrice tridiagonale.

Équation de quantité de mouvement

La discrétisation de l'équation qui permet de déterminer la vitesse intermédiaire est détaillée seulement pour l'étape prédicteur dans cette section. Le principe reste cependant exactement le même pour l'étape correcteur. Le système à résoudre est du type $\mathbf{A} \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{B}$. La matrice $\mathbf{A}$ reprend les coefficients liés à la vitesse $\tilde{\mathbf{u}}$ qui est l'inconnue. L'ensemble des termes traités explicitement se trouvent dans le membre de droite $\mathbf{B}$ et sont regroupés sous l'expression $Res_{\mathbf{u}}$. L'ensemble des termes Res et les termes traités implicitement qui dépendent de $\mathbf{u}^{(n)}$ forment la matrice $\mathbf{B}$. Pour rappel, l'équation est la suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\rho \phi \tilde{\mathbf{u}} - \rho \phi \mathbf{u}^{(n)}}{\Delta t} &= \frac{3}{2} Res_{\mathbf{u}}^{(n)} - \frac{1}{2} Res_{\mathbf{u}}^{(n-1)} \\ &+ \frac{1}{2} \mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi \mu \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial y} \right) + \frac{1}{2} \mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi \mu \frac{\partial \mathbf{u}^{(n)}}{\partial y} \right) \\ &- \beta^{(n)} \left(\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} \mathbf{u}^{(n)} \right). \end{aligned}$$

Les termes qui se retrouvent dans la matrice de coefficients $\mathbf{A}$ sont

$$\frac{\rho \phi \tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t}, \quad \frac{1}{2} \mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi \mu \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial y} \right) \quad \text{et} \quad \beta^{(n)} \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{u}}$$

En ne s'intéressant qu'à la résolution de la vitesse prédictrice horizontale $\tilde{u}$, la discrétisation spatiale de ces termes est la suivante de par les choix de discrétisation spatiale présentés dans la section 2.3.2 :

$$\frac{\rho_{i,j} \phi_{i,j} \tilde{u}_{i,j}}{\Delta t} = B_{i,j} + \frac{1}{2} \mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\left(\overline{(\rho \phi)_{i,j+\frac{1}{2}}}^y \frac{\delta \tilde{u}}{\delta y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} - \overline{(\rho \phi)_{i,j-\frac{1}{2}}}^y \frac{\delta \tilde{u}}{\delta y} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}} \right)}{2 r_j} - \frac{1}{2} \beta_{11} \tilde{u}_{i,j} \quad (2.66)$$

Afin que l'équation ne dépende plus que des valeurs des vitesses au centre des mailles, les termes sont développés grâce à l'équation (2.60).

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{i,j} \phi_{i,j} \tilde{u}_{i,j}}{\Delta t} = & \frac{1}{2} \mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{1}{4r_j^2} \left(\overline{(\rho\phi)_{i,j+\frac{1}{2}}}^y (\tilde{u}_{i,j+1} - \tilde{u}_{i,j}) - \overline{(\rho\phi)_{i,j-\frac{1}{2}}}^y (\tilde{u}_{i,j} - \tilde{u}_{i,j-1}) \right) \\ & - \frac{1}{2} \beta_{11} \tilde{u}_{i,j} + B_{i,j} \end{aligned} \quad (2.67)$$

L'équation prend alors une forme simple et peut se réécrire sous la forme suivante.

$$c_{i,j} \tilde{u}_{i,j} + a_{i,j} \tilde{u}_{i,j+1} + b_{i,j} \tilde{u}_{i,j-1} = B_{i,j} \quad (2.68)$$

Les coefficients de l'équation (2.68) sont définis dans les équations (2.69). Il s'agit de tous les termes qui multiplient les valeurs de vitesse dans l'équation discrétisée (2.67).

$$a_{i,j} = -\frac{1}{2} \mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{1}{4r_j^2} \overline{(\rho\phi)_{i,j+\frac{1}{2}}}^y \quad (2.69a)$$

$$b_{i,j} = -\frac{1}{2} \mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{1}{4r_j^2} \overline{(\rho\phi)_{i,j-\frac{1}{2}}}^y \quad (2.69b)$$

$$c_{i,j} = \frac{\rho_{i,j} \phi_{i,j}}{\Delta t} + \frac{1}{2} \mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{1}{4r_j^2} \overline{(\rho\phi)_{i,j+\frac{1}{2}}}^y + \frac{1}{2} \mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{1}{4r_j^2} \overline{(\rho\phi)_{i,j-\frac{1}{2}}}^y + \frac{1}{2} \beta_{11} \quad (2.69c)$$

L'équation (2.68) est à résoudre pour chaque maille, c'est-à-dire pour chaque couple (i, j) . On remarque qu'elle fait intervenir les valeurs de vitesse pour des indices j qui varient mais un indice i fixé. Ceci permet d'éviter de résoudre un seul système pour trouver les valeurs en chaque point du maillage. En effet, la résolution peut être divisée en la résolution de plus petits systèmes de type : $\mathbf{A}_i \mathbf{x}_i = \mathbf{B}_i$.

Pour un indice i fixé, m équations discrétisées sont obtenues, c'est-à-dire une pour chaque indice j . Ainsi, m triplets de coefficients sont à placer dans la matrice $\mathbf{A}_i$ du système qui a pour inconnue $\mathbf{x}_i$; un vecteur qui comprend toutes les vitesses $\tilde{u}_{i,j}$ pour ce même i fixé. Étant donné qu'il y a 3 inconnues par équation discrétisée, seuls 3 coefficients de la matrice sont non nuls par ligne. Une matrice tridiagonale est alors obtenue et se présente comme suit :

$$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} c_{i,1} & a_{i,1} & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ b_{i,2} & c_{i,2} & a_{i,2} & 0 & \vdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & b_{i,m-1} & c_{i,m-1} & a_{i,m-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & b_{i,m} & c_{i,m} \end{pmatrix} \quad (2.70)$$

Le système linéaire à résoudre pour un indice fixé i est développé dans l'équation (2.71). Un tel système est à résoudre n fois afin de calculer la vitesse en chaque point du maillage.

$$\begin{pmatrix} c_{i,1} & a_{i,1} & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ b_{i,2} & c_{i,2} & a_{i,2} & 0 & \vdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & b_{i,m-1} & c_{i,m-1} & a_{i,m-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & b_{i,m} & c_{i,m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}_{i,1} \\ \tilde{u}_{i,2} \\ \vdots \\ \tilde{u}_{i,m-1} \\ \tilde{u}_{i,m} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{i,1} \\ B_{i,2} \\ \vdots \\ B_{i,m-1} \\ B_{i,m} \end{pmatrix} \quad (2.71)$$

Équation de dispersion

La résolution de l'équation bilan de la fraction massique de polluant, Y_p nécessite aussi de résoudre n systèmes linéaires à matrice tridiagonale du type $\mathbf{A}_i \mathbf{Y}_{pi} = \mathbf{B}_i$.

Pour l'étape prédicteur, les matrices $\mathbf{A}_i$ sont formées des coefficients $a_{i,j}, b_{i,j}, c_{i,j}$ qui sont associés cette fois à $Y_{p_{i,j+1}}^{(*)}, Y_{p_{i,j-1}}^{(*)}$ et $Y_{p_{i,j}}^{(*)}$, respectivement.

Pour l'équation de dispersion, ces coefficients valent :

$$a_{i,j} = -\frac{1}{Re Sc} \frac{1}{8r_j^2} \overline{(\rho\phi\mathcal{D}_{yy})}_{i,j+\frac{1}{2}}^y \quad (2.72a)$$

$$b_{i,j} = -\frac{1}{Re Sc} \frac{1}{8r_j^2} \overline{(\rho\phi\mathcal{D}_{yy})}_{i,j-\frac{1}{2}}^y \quad (2.72b)$$

$$c_{i,j} = \frac{\rho_{i,j} \phi_{i,j}}{\Delta t} + \frac{1}{Re Sc} \frac{1}{8r_j^2} \left(\overline{(\rho\phi\mathcal{D}_{yy})}_{i,j-\frac{1}{2}}^y + \overline{(\rho\phi\mathcal{D}_{yy})}_{i,j+\frac{1}{2}}^y \right) \quad (2.72c)$$

Pour l'étape prédicteur, la matrice $\mathbf{B}$ contient les termes suivants :

$$\mathbf{B} = \frac{3}{2} Res_{Y_p}^{(n)} - \frac{1}{2} Res_{Y_p}^{(n-1)} + \frac{1}{Re Sc} \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho\phi\mathcal{D}_{yy} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial Y_p^{(n)}}{\partial y} \right) \right) + \rho\phi \frac{Y_p^{(n)}}{\Delta t} \quad (2.73)$$

Résolution

Les algorithmes pour résoudre des systèmes à matrice tridiagonale sont nombreux dans la littérature. L'algorithme choisi dans le cadre de ce travail provient du livre *Numerical Recipes, the Art of Scientific Computing* [51].

Chapitre 3

Cas d'étude laminaire : Dispersion de méthane au sein d'un compost

Tout écoulement atmosphérique est soumis à des fluctuations rapides, ils sont donc considérés comme turbulents. Etudier un écoulement laminaire dans un milieu urbain perd donc son sens. Cependant, la dispersion laminaire de polluants reste un phénomène intéressant à étudier pour d'autres cas. Afin d'étudier la dispersion d'un polluant à plus petite échelle ; la dispersion de méthane produit au sein d'un compost est le cas choisi. La structure du compost peut être assimilée à un milieu poreux. Dans cette étude, nous nous intéressons aux émissions de méthane considéré comme un gaz à effet de serre important mais aussi utile pour créer du biogaz.

Le compostage consiste à convertir des matières organiques via un processus aérobie. Le produit de cette conversion est ce qui est appelé communément le compost. Les matières organiques proviennent des déchets verts et déchets alimentaires, souvent ménagers. Elles sont dégradées sous l'action de microorganismes comme les champignons et les bactéries, ce qui permet la composition d'un composé stable semblable à du terreau : le compost. L'utilisation du compost dans les sols permet d'augmenter leur qualité. En effet, il a des effets positifs sur la structure et la composition des sols : amélioration de la rétention d'eau, diminution de l'acidification du sol, ... [43] Cependant, lorsque le compostage n'est pas parfaitement efficace, certaines parties manquent d'accès à l'air. Dans ce cas, ce sont des processus anaérobies qui ont lieu, comme la méthanisation. Dans l'industrie, ces processus sont parfois combinés pour permettre deux valorisations différentes des composés organiques : enrichissement des sols et production de biogaz par captation du méthane. Ce méthane n'est pas toujours capté et est alors relâché dans l'atmosphère. Il est pourtant considéré comme un gaz à effet de serre très puissant. Lorsqu'il est émis dans l'atmosphère, il peut provoquer le réchauffement de cette dernière par l'absorption de la chaleur du soleil. Le méthane reste présent durant une période courte dans l'atmosphère mais il est plus néfaste que le dioxyde de carbone, autre gaz à effet de serre bien connu [19]. Il est donc important de limiter ces émissions de gaz dans l'atmosphère. Cette étude permettra alors de prédire le comportement de dispersion du gaz en fonction de la vitesse du vent et de la porosité du compost.

3.1 Paramètres de la simulation

La dispersion de méthane produit au sein d'un compost à ciel ouvert est le cas type étudié. Cette section présente l'ensemble des paramètres nécessaires à la simulation de cette application.

3.1.1 Paramètres de référence

Les paramètres de références permettent de définir les deux nombres adimensionnels : Re et Sc . Le nombre de Reynolds pour le cas type vaut 385. Le nombre de Schimdt vaut quant à lui 0.795 pour le cas type. Ces paramètres sont regroupés dans le tableau 3.1.

Variable de référence	Notation	Choix	Valeur du cas type
Longueur	L_r	Hauteur du milieu poreux	$0.3 [m]$
Vitesse	u_r	Vitesse en amont au niveau du milieu poreux	$0.02 [m/s]$
Viscosité dynamique	ν_r	Viscosité dynamique de l'air	$1.56 \cdot 10^{-5} [m^2/s]$
Densité	ρ_r	Densité de l'air	$1.2 [kg/m^3]$
Coefficient de diffusion	$\mathcal{D}_r$	Coefficient de diffusion du CH_4	$1.96 \cdot 10^{-5} [m^2/s]$

TABLE 3.1 – Variables de référence pour le cas type laminaire

3.1.2 Paramètres géométriques

Le compost est modélisé comme étant un milieu poreux composé d'un ensemble de sphères de mêmes dimensions caractéristiques, comme représenté sur la figure 3.1. Le cas analysé se base sur l'étude d'un compostage à ciel ouvert réalisée par *Jackel et al. (2004)* [30]. Il est constitué de 70% de déchets organiques communaux et de 30% de déchets verts (branches d'arbres, herbes, ...).

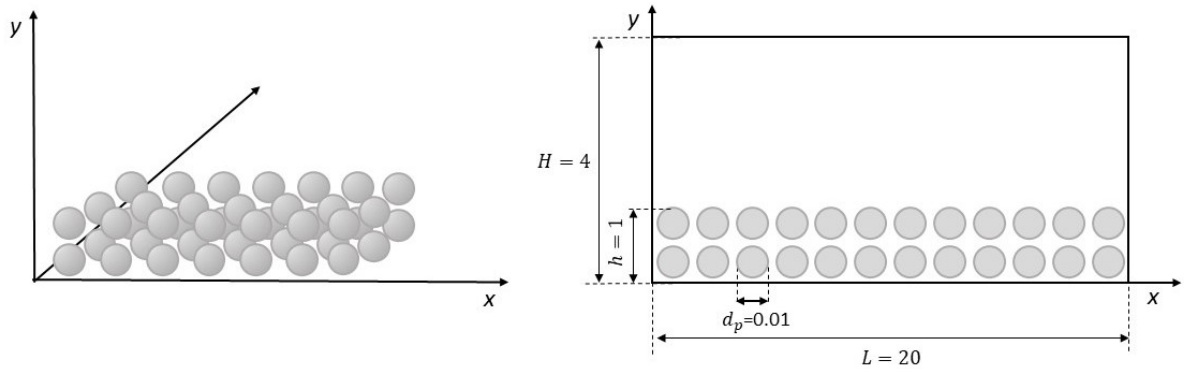


FIGURE 3.1 – Schéma représentant le choix de modélisation du compost et les dimensions caractéristiques adimensionnelles du domaine.

Domaine Les longueurs adimensionnelles du domaine utilisées pour toutes les simulations laminaires restent les mêmes et il en est de même pour le diamètre adimensionnel d_p qui caractérise les sphères. La figure 3.1 permet de visualiser les caractéristiques du domaine.

Porosité La porosité d'un compost dépend de sa composition et plus précisément de sa teneur en eau et en matières organiques. Selon *Kather (2015)* [33], la porosité est calculée par la formule suivante :

$$\tilde{\phi} = 1 - \rho_{wb} \left(\frac{MC}{\rho_w} + \frac{DM OM}{\rho_{OM}} + \frac{DM (1 - OM)}{\rho_{ash}} \right) \quad (3.1)$$

Les paramètres de cette équation sont les suivants :

Notation	Valeur	Définition
MC	0.45	Teneur en humidité
DM	0.55	Matière sèche
OM	0.7	Matière organique
ρ_w	1000	Masse volumique de l'eau
ρ_{OM}	1600	Masse volumique de matière organique
ρ_{ash}	2500	Masse volumique des cendres
ρ_{wb}	500	Masse volumique humide

TABLE 3.2 – Définition et valeurs des paramètres permettant le calcul de la porosité du compost.

Les densités sont exprimées en $[kg/m^3]$ et les autres variables sont des proportions exprimées en décimales. Les densités des matières organiques et cendres sont approximées. La masse volumique d'un compost humide à ciel ouvert a été estimée en se basant sur le travail de *Tchobanoglous et Kreith (2002)* [24] : $\rho_{wb} = 500 [kg/m^3]$. Cette densité prend en compte l'eau contenue dans le compost.

Dans le travail de *Schaub-Szabo et Leonard (2013)* [60], une proportion d'eau de 0.45 est mesurée pour un compost d'une densité humide proche de $500 [kg/m^3]$ et de composition similaire à celle étudiée ici. Comme déjà précisé, la proportion de matières organiques est de 70%. Avec ces paramètres, la porosité obtenue est de 0.62. Cependant, dans la porosité définie ici, le volume de fluide prend en compte l'air et l'eau présents dans les pores. La porosité qui nous intéresse ne prend en compte qu'un seul fluide : l'air. Ainsi, pour calculer la porosité selon cette définition, il faut enlever du volume de fluide considéré la fraction d'eau dans les pores.

$$\phi = \tilde{\phi}(1 - S) \quad \text{avec} \quad S = \frac{V_{eau}}{V_{compost}} \quad (3.2)$$

La fraction d'eau dans les pores est approximée par le degré de saturation du compost S qui peut être obtenu grâce à la fraction MC qui est le rapport de masse d'eau et compost. La porosité calculée est alors $\phi = 0.48$.

3.1.3 Paramètres dynamiques

Paramètre de traînée Le milieu poreux est supposé être composé de sphères, structure proche de la structure réelle du compost. Le milieu poreux est considéré isotrope dans ce cas. Le paramètre de traînée est dès lors nul pour les termes hors diagonaux et les termes diagonaux sont égaux. Leur valeur adimensionnelle est :

$$\beta_{11} = \beta_{22} = \frac{3}{4} C_D \rho (1 - \phi) \frac{\sqrt{(u^2 + v^2)}}{d_p} \quad [/] \quad (3.3)$$

où d_p est le diamètre des sphères considérées qui a été adimensionnalisé avec la longueur de référence. Pour déterminer le paramètre β , il faut déterminer la force de traînée par unité de volume et l'égaliser à l'expression $\beta \mathbf{u}$. La force de traînée est approximée en utilisant la loi de Stokes pour une sphère. Cette force est multipliée par le nombre de sphères par unité de volume pour obtenir la force de traînée par unité de volume. [3]

3.1.4 Paramètres de dispersion

Coefficient de diffusion Le polluant considéré est le méthane, CH_4 . Étant donné qu'il s'agit d'un gaz, son coefficient de diffusion $\mathcal{D}$ est élevé dans l'air. La valeur choisie est la même que celle choisie par *Jackel et al. (2004)* [30].

$$\mathcal{D} = 1.96 \cdot 10^{-5} \text{ [m}^2/\text{s]}$$

Le phénomène de dispersion est moins efficace dans un milieu poreux étant donné que le fluide a une liberté de mouvement moins grande par la présence de la matrice solide et d'eau dans les pores. Le coefficient de diffusion effectif dans le milieu poreux prend la formule d'une corrélation qui dépend du coefficient de diffusion du polluant dans l'air :

$$\mathcal{D}_{\text{poreux}} = \mathcal{D} a \phi^b. \quad (3.4)$$

avec $a = 0.9$ et $b = 2.3$. Ces coefficients empiriques sont utilisés couramment pour des études d'oxydation de méthane dans les sols [30]. Étant donné que le compost est un milieu isotrope, la matrice $\mathcal{D}$ devient un scalaire $\mathcal{D}$.

Taux de production de méthane Pour une température de 25°C , un compost mature a un taux de production de méthane assez constant d'une valeur de $\sim 75 \text{ [}\mu\text{mol/g}_{dw}/\text{h]}$, où l'unité g_{dw} désigne la masse de compost sec [30]. Le terme source $\mathcal{R}$ dans l'équation de dispersion (2.30) est exprimé en masse de polluant émise dans une unité de volume du composé poreux par seconde.

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= 75 \cdot 10^{-6} \frac{M_{\text{CH}_4} \rho_{dw}}{3600} = 75 \cdot 10^{-6} \frac{M_{\text{CH}_4} \rho_{wb}(1 - MC)}{3600} \\ \mathcal{R} &= 9.17 \cdot 10^{-5} \text{ [kg}_{\text{CH}_4}/\text{m}_{\text{compost}}^3/\text{s}] \end{aligned}$$

Les paramètres déterminés précédemment doivent être adimensionnalisés en fonction des paramètres de références, voir tableau 2.1.

3.2 Pré-simulation

Afin de générer un profil de vitesse réaliste en amont du domaine, le profil est généré au moyen d'une présimulation. Celle-ci a été réalisée en imposant des conditions limites périodiques en amont et en aval du domaine pour chaque variable. Les conditions en haut et en bas du domaine sont regroupées dans le tableau 3.3. Ces conditions limites sont expliquées dans la section 3.4.

Variable	Bas	Haut
Vitesse horizontale	Dirichlet zéro	Neumann zéro
Vitesse verticale	Dirichlet zéro	Dirichlet zéro
Pression piézométrique	Neumann zéro	Neumann zéro

TABLE 3.3 – Conditions limites imposées pour la présimulation permettant d'obtenir le profil de vitesse $u_{in}(y)$.

L'ensemble des variables ; pression piézométrique, vitesse horizontale et vitesse verticale, sont initialement nulles. Une force externe dans la direction horizontale x est imposée pour générer un écoulement forcé. Lorsque la vitesse dans le milieu poreux ne varie plus, la pré-simulation prend fin. La force a été choisie afin qu'elle contre la force de traînée lorsque la vitesse dans le milieu poreux vaut 1. Un exemple du type de profil généré est visible à la figure 3.2

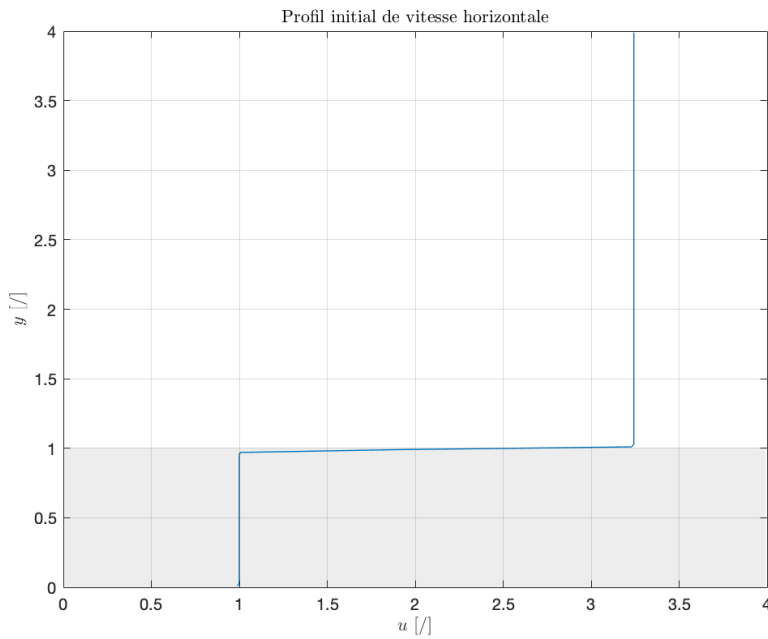


FIGURE 3.2 – Profil de vitesse $u_{in}(y)$ généré pour le cas de base : $\phi = 0.48$, $Re = 385$, $d_p = 0.01$.

3.3 Conditions initiales

Température et masse volumique La température et la densité de l'air sont constantes au cours de la simulation. Leurs valeurs initiales sont imposées aux valeurs de référence.

Vitesse horizontale Le profil de vitesse généré lors de la pré-simulation est imposé sur tout le domaine : $u(x, y, 0) = u_{in}(y)$.

Vitesse verticale La vitesse verticale v est nulle sur tout le domaine initialement : $v(x, y, 0) = 0$.

Fraction massique Il n'y a aucun polluant dans le domaine au début de la simulation : $Y_p(x, y, 0) = 0$.

Pression piézométrique La pression piézométrique est nulle sur tout le domaine initialement : $p'(x, y, 0) = 0$.

3.4 Conditions limites

Grâce à l'approche du domaine simple, aucune condition ne doit être imposée à l'interface entre le milieu du fluide pur et le milieu poreux.

3.4.1 Bas du domaine

Le bas du domaine correspond au sol. Une condition *no slip* pour la vitesse est imposée. Les vitesses verticale et horizontale sont nulles à l'interface, c'est-à-dire

$$u(x, 0, t) = 0 \text{ et } v(x, 0, t) = 0.$$

Les variations de la pression et de la fraction massique dans la direction y sont nulles, ce qui équivaut à une condition Neumann zéro :

$$\left. \frac{\partial p'(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0 \text{ et } \left. \frac{\partial Y_p(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0.$$

3.4.2 Haut du domaine

Une condition *free slip* est imposée pour la vitesse.

$$\left. \frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=H} = 0, v(x, H, t) = 0.$$

La fraction massique et pour la pression piézométrique répondent à une condition Neumann zéro :

$$\left. \frac{\partial Y_p(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=H} = 0, \left. \frac{\partial p'(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=H} = 0.$$

3.4.3 Amont du domaine

Afin d'obtenir un flux forcé d'amont en aval, un profil de vitesse horizontale $u(y)$ est imposé en amont. Il s'agit du même profil que celui imposé initialement :

$$u(0, y, t) = u_{in}(y).$$

La vitesse verticale et la fraction massique de polluant sont nulles à l'entrée du domaine.

$$v(0, y, t) = 0 \text{ et } Y_p(0, y, t) = 0$$

La variation de la pression dans la direction de l'écoulement est nulle en amont :

$$\left. \frac{\partial p'(x, y, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0.$$

3.4.4 Aval du domaine : Condition convective

Afin de limiter le temps de simulation, la longueur du domaine est limitée. Dans le cas d'un domaine assez long, une condition Neumann zéro pour l'ensemble des variables aurait été adéquate. Afin de diminuer le temps de calcul, un domaine plus court est préférable. Dans ce cas, une condition convective en aval est nécessaire pour les vitesses, la fraction massique de polluant et la pression de façon à ce que le résultat soit plus proche de la réalité. La condition convective correspond à la condition suivante :

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial t} + U_c \frac{\partial \vartheta}{\partial x} = 0 \quad (3.5)$$

où ϑ est la variable concernée par la condition convective et U_c est la vitesse convective. La vitesse convective a été choisie comme étant [4] :

$$U_c = \frac{\int \mathcal{M} dV - \int \frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} dV + \int_{\text{amont}} (\rho\phi u) dS}{\int_{\text{aval}} (\phi\rho) dS}. \quad (3.6)$$

Le développement qui a permis de définir la condition convective de cette façon est explicité dans l'annexe A. L'équation (3.6) utilisée par *Dr P. D. Antoniadis* reste valable dans notre cas au vu des conditions limites en haut et en bas choisies pour la vitesse verticale. De plus, l'équation (3.6) se simplifie dans le cadre de ce travail car aucun échange de masse est considéré, $\mathcal{M} = 0$. Aussi, la porosité est une fonction $\phi(\mathbf{x})$ et la masse volumique est constante :

$$U_c = \frac{\int_{\text{amont}} (\rho\phi u) dS}{\int_{\text{aval}} (\phi\rho) dS}. \quad (3.7)$$

Implémentation de la condition convective pour la pression

La condition limite convective a été implémentée dans le code réalisé par *Dr P. D. Antoniadis* seulement pour les vitesses et la température. La première idée pour notre cas d'étude a été d'imposer une condition limite de type Neumann zéro en aval pour la pression. Ce choix

pose problème et génère de la vorticit  le long des fronti res verticales amont et aval, voir figure 3.3. Il a donc fallu impl menter une condition convective pour la pression pi zom trique.

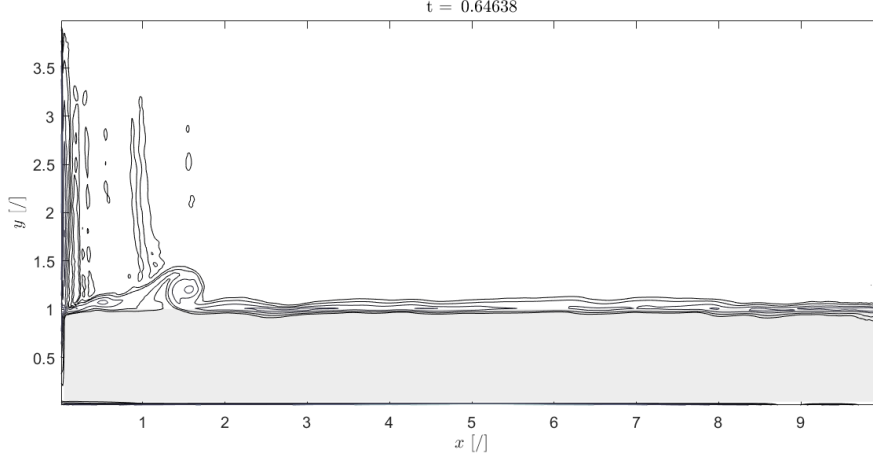


FIGURE 3.3 – Illustration du probl me survenu avec l'imposition d'une condition Neumann en aval pour la pression.

Le champ de pression $\mathbf{P}'$ est d termin  au moyen de l' quation (2.54) et en utilisant le solveur BiCGSTAB qui r sout un syst me lin aire du type $\mathbf{A} \mathbf{P}' = \mathbf{B}$ par it rations jusqu'  ce que le crit re de pr cision soit atteint. Afin d'appliquer une condition convective en aval, il faut modifier les matrices $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$. Pour rappel, l' quation   r soudre est la suivante :

$$\nabla \cdot (\phi \nabla p') = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot (\rho \phi \tilde{\mathbf{u}}).$$

La discr tisation du terme de gauche de l' quation pr c dente est d taill e. La discr tisation du terme de droite n'est pas n cessaire  tant donn  que la condition limite est appliqu e sur la pression et que ce terme est ind pendant de cette variable. Ce terme est associ    la valeur $B_{i,j}$.

$$\nabla \cdot (\phi \nabla p') = \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi \frac{\partial p'}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi \frac{\partial p'}{\partial y} \right) = B_{i,j}. \quad (3.8)$$

Les deux d riv es sont r alis es selon la m me variable. Ce terme est donc discr tis  spatialement de la m me fa on que le terme diffusif   l' quation (2.64).

$$\frac{\overline{\phi_{i+\frac{1}{2},j}}^x \frac{\delta p'}{\delta x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j} - \overline{\phi_{i-\frac{1}{2},j}}^x \frac{\delta p'}{\delta x} \Big|_{i-\frac{1}{2},j}}{2r_i} + \frac{\overline{\phi_{i,j+\frac{1}{2}}}^y \frac{\delta p'}{\delta y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}} - \overline{\phi_{i,j-\frac{1}{2}}}^y \frac{\delta p'}{\delta y} \Big|_{i,j-\frac{1}{2}}}{2r_j} = B_{i,j} \quad (3.9)$$

L' quation pr c dente est d velopp e davantage en utilisant l' quation (2.60) et devient :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4r_i^2} \left[\overline{\phi_{i+\frac{1}{2},j}}^x (P'_{i+1,j} - P'_{i,j}) - \overline{\phi_{i-\frac{1}{2},j}}^x (P'_{i,j} - P'_{i-1,j}) \right] + \\ & \frac{1}{4r_j^2} \left[\overline{\phi_{i,j+\frac{1}{2}}}^y (P'_{i,j+1} - P'_{i,j}) - \overline{\phi_{i,j-\frac{1}{2}}}^y (P'_{i,j} - P'_{i,j-1}) \right] = B_{i,j}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Les coefficients *west*, *east*, *north* et *south* dont la position est définie par rapport à une cellule centrale sont les suivants :

$$w = \overline{\phi_{i-\frac{1}{2},j}}^x \frac{1}{4r_i^2} \quad (3.11a)$$

$$e = \overline{\phi_{i+\frac{1}{2},j}}^x \frac{1}{4r_i^2} \quad (3.11b)$$

$$n = \overline{\phi_{i,j+\frac{1}{2}}}^x \frac{1}{4r_j^2} \quad (3.11c)$$

$$s = \overline{\phi_{i,j-\frac{1}{2}}}^x \frac{1}{4r_j^2}. \quad (3.11d)$$

En introduisant ces coefficients dans l'équation (3.10), celle-ci devient :

$$wP'_{i-1,j} + sP'_{i,j-1} + nP'_{i,j+1} + eP'_{i+1,j} + (-w - e - n - s)P'_{i,j} = B_{i,j}. \quad (3.12)$$

Il faut donc à présent introduire la condition convective sur l'interface en aval dans l'équation (3.12). Une condition convective pour la pression piézométrique en aval est :

$$\left(\frac{\partial p'}{\partial t} + U_c \frac{\partial p'}{\partial x} \right) \Big|_{n+\frac{1}{2}} = 0. \quad (3.13)$$

Pour rappel, les cellules en $i = n + 1$ sont des cellules fantômes. La discrétisation de la condition convective est implicite :

$$\frac{1}{2} \frac{(P'_{n+1,j})^{(n+1)} - P'_{n+1,j}^{(n)}}{\Delta t} + \frac{1}{2} \frac{(P'_{n,j})^{(n+1)} - P'_{n,j}^{(n)}}{\Delta t} + U_c \frac{(P'_{n+1,j})^{(n+1)} - P'_{n,j}^{(n+1)}}{2r_i} = 0 \quad (3.14)$$

Cette équation peut se réécrire comme :

$$P'_{i+1,j}^{(n+1)} = \frac{P'_{i,j}^{(n+1)} \left(\frac{U_c}{2r_i} - \frac{1}{2\Delta t} \right) + \frac{1}{2\Delta t} (P'_{i+1,j}^{(n)} + P'_{i,j}^{(n)})}{\left(\frac{1}{2\Delta t} + \frac{U_c}{2r_i} \right)} \quad (3.15)$$

Afin de simplifier cette expression , les coefficients c_1 et c_2 sont introduits et définis comme :

$$c_1 = \frac{\left(\frac{U_c}{2r_i} - \frac{1}{2\Delta t} \right)}{\left(\frac{1}{2\Delta t} + \frac{U_c}{2r_i} \right)} \quad (3.16a)$$

$$c_2 = \frac{1}{2\Delta t} \frac{(P'_{i+1,j})^n + P'_{i,j}^n}{\left(\frac{1}{2\Delta t} + \frac{U_c}{2r_i} \right)}. \quad (3.16b)$$

En introduisant les coefficients c_1 et c_2 dans l'équation (3.15), celle-ci devient :

$$P'_{i+1,j}^{(n+1)} = c_1 P'_{i,j}^{(n+1)} + c_2 \quad (3.17)$$

Afin d'imposer une condition convective, il faut insérer l'équation (3.17) dans l'équation (3.12) :

$$wP'_{i-1,j} + sP'_{i,j-1} + nP'_{i,j+1} + e(c_1P'_{i,j} + c_2) + (-w - e - n - s)P'_{i,j} = B_{i,j}, \quad (3.18)$$

$$wP'_{i-1,j} + sP'_{i,j-1} + nP'_{i,j+1} + (-w - e - n - s + e c_1)P'_{i,j} = B_{i,j} - e c_2. \quad (3.19)$$

Imposer une condition convective en aval revient donc à ajouter la valeur $e c_1$ au terme qui multiplie la valeur de la cellule centrale et à retirer $e c_2$ au terme de droite. L'ajout de ces termes se fait seulement pour les cellules à l'extrémité en aval du domaine ($i = n$).

Ainsi, le problème rencontré à la figure 3.3 n'est plus présent grâce à l'implémentation de cette nouvelle condition.

3.5 Résultats

Dans cette section, l'allure générale des résultats obtenus est présentée. Toutes les simulations lancées présentent des caractéristiques communes concernant l'évolution de l'écoulement et la répartition du polluant. Ces caractéristiques sont décrites sur base des résultats du cas type présenté dans la section 3.1.

L_r	u_r	ϕ	Re	Sc
0.3 [m]	0.02 [m/s]	0.48	385	0.795

TABLE 3.4 – Rappel des valeurs des paramètres principaux choisis pour le cas type/de base laminaire.

3.5.1 Écoulement

Allure des champs de vitesse

La distribution de la vitesse horizontale dans le domaine est visible à la figure 3.4. Il s'agit de la distribution lorsque l'écoulement devient stationnaire. La vitesse dans le milieu poreux ($y < 1$) tombe à zéro, tandis que la vitesse dans le fluide pur reste proche de la vitesse imposée en amont.

L'allure du profil de vitesse et son évolution le long du domaine peut être observée sur la figure 3.5. Le maximum de vitesse ne se trouve étonnamment pas en haut du domaine mais proche de l'interface milieu poreux - fluide pur. Le nom donné à ce dépassement de vitesse par rapport à la vitesse en haut du domaine est appelé *overshoot* dans cette analyse.

Cet overshoot est la réponse à la conservation de la masse ; la masse qui entre dans le domaine doit en sortir. Le phénomène peut être d'abord compris de manière intuitive. Par la condition limite imposée sur la vitesse en amont, il est imposé qu'une certaine masse de fluide entre dans le milieu poreux et dans la partie fluide pur du domaine. Le fluide qui entre dans le milieu poreux est directement freiné par la force de traînée causée par la présence de la matrice solide. C'est pourquoi, la masse entrante va se diriger vers le haut et

sortir du milieu poreux car elle ne peut pas continuer à avancer horizontalement. Ceci peut être confirmé par la distribution de vitesse verticale représentée sur la figure 3.6. La vitesse verticale v est positive en amont du domaine.

Le fluide sortant du milieu poreux est ensuite redirigé vers l'aval étant donné la dominance de la vitesse horizontale u dans le champ de vitesse du fluide pur. Cette addition de masse provenant du milieu poreux reste proche de l'interface et forme l'overshoot. Cet overshoot a tendance à s'affaiblir le long du domaine comme il peut être observé sur la figure 3.5. A partir d'une certaine distance de l'entrée du domaine, abscisse proche de $x = 4$, la quantité fluide qui passe du milieu poreux au milieu fluide pur devient presque négligeable car la vitesse verticale dans le milieu poreux tombe proche de zéro. Cependant, la masse de fluide au sein de la partie fluide pur se répartit autrement ; elle s'étale verticalement. En $x = 6$ et $x = 12$, on voit que le profil de vitesse est moins bombé qu'en $x = 3$ et que la hauteur de l'overshoot diminue. En effet, on peut observer une vitesse verticale négative dans le fluide pur dans l'intervalle $x = [4, 6]$. Après $x = 12$, la vitesse v est positive au dessus du milieu poreux. Par conséquent, la masse monte. Dès lors, dans les deux cas (vitesse verticale négative ou positive), l'intensité de l'overshoot diminue mais ce dernier s'élargit vers le bas dans le premier cas et vers le haut dans le second.

Le phénomène peut aussi être justifié mathématiquement. Pour rappel, dans le cas considéré ici, avec une densité constante, la conservation de masse est la suivante :

$$\nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = 0 .$$

En amont du milieu poreux, le fluide est freiné par la force de traînée, le terme $\frac{\partial u}{\partial x}$ est donc négatif. La variation de vitesse horizontale est compensée par une variation de vitesse verticale ; $\frac{\partial v}{\partial y}$ est positif ; le fluide monte. Ainsi, l'équation est respectée (la porosité est constante dans le milieu poreux). La vitesse verticale est maximale au niveau de l'interface. Dans le milieu fluide pur, elle diminue avec la hauteur au début du domaine ; la vitesse $\frac{\partial v}{\partial y}$ est négative. La propulsion verticale du fluide s'atténue. Il faut donc que la vitesse horizontale augmente dans cette zone pour que l'équation soit respectée. Le fluide se redirige donc vers l'aval et provoque la création de l'overshoot.

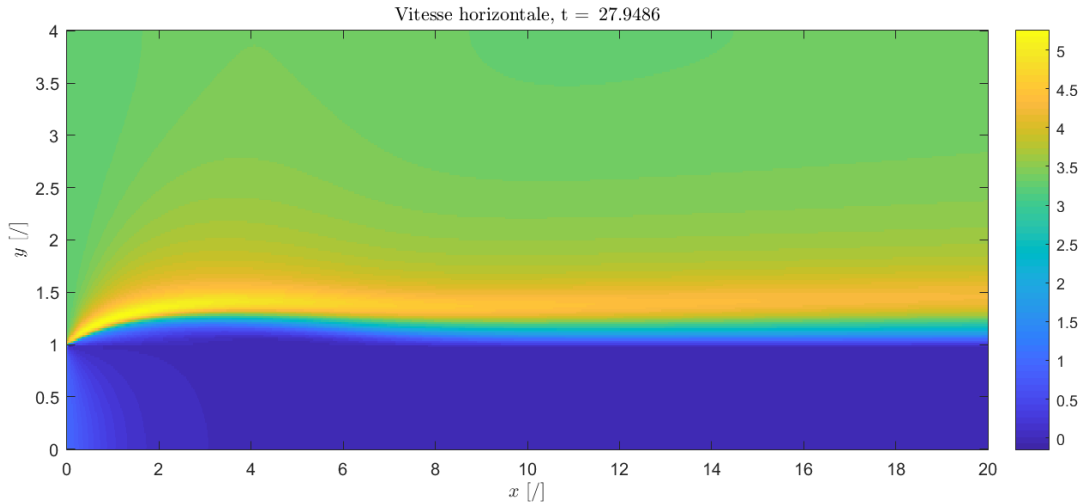


FIGURE 3.4 – Champ de vitesse horizontale stabilisé obtenu pour le cas de base laminaire.

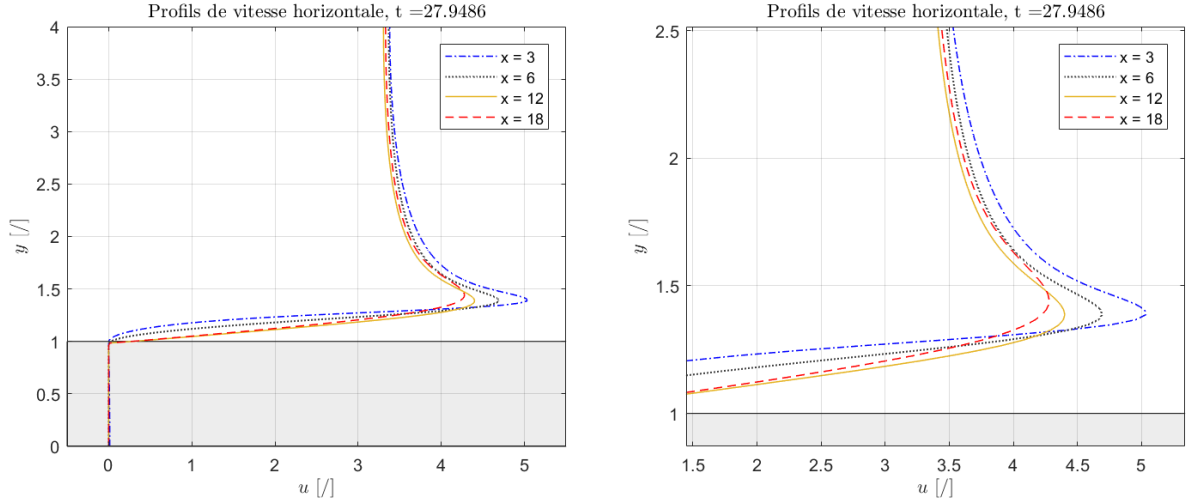


FIGURE 3.5 – Profil de vitesse pour différentes abscisses du domaine : vue d'ensemble à gauche, zoom sur l'overshoot à droite. Profils obtenus pour le cas de base laminaire.

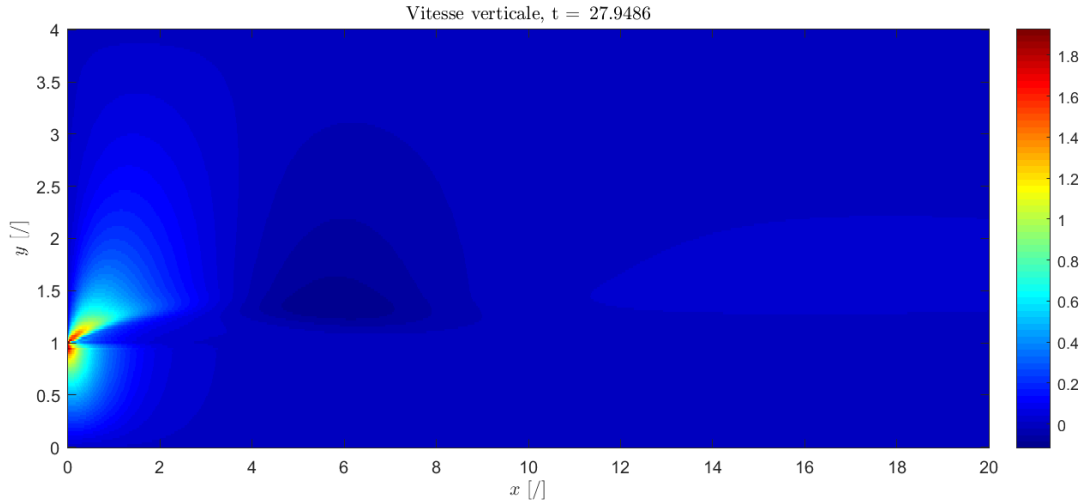


FIGURE 3.6 – Champ de vitesse verticale stabilisé obtenu pour le cas de base laminaire.

Vorticité

La vorticité est définie comme $\omega = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}$ pour un écoulement bidimensionnel. Elle permet de visualiser facilement la présence de vortex dans un écoulement. La vorticité de l'écoulement pour différents temps adimensionnels est visible à la figure 3.7. On remarque directement l'absence de structures tourbillonnaires dans l'écoulement. Cependant, l'interface milieu poreux - fluide étant la cause d'une couche de mélange, de telles structures devraient voir le jour. Cette absence de tourbillons est due au profil de vitesse imposé comme condition initiale sur l'ensemble du domaine et comme condition limite en amont. Pour rappel, ce profil a été obtenu au moyen d'une pré-simulation au cours de laquelle l'écoulement a été forcé. L'expression de cette force adimensionnelle pour un milieu poreux composé de sphères est :

$$F = \frac{3}{4} \frac{C_d}{d_p} (1 - \phi) \quad [/] \quad (3.20)$$

où C_d est le coefficient de traînée et d_p est le diamètre adimensionnel des particules. La pré-simulation prend fin lorsque la vitesse dans le milieu poreux est constante, $u = 1$. Cette condition peut être remplie lorsque la force imposée et la force de traînée s'opposent. Le choix de l'expression de la force imposée n'est donc pas anodin, il s'agit de la force de traînée $F = \beta_{11}u$ pour une vitesse horizontale valant l'unité et une vitesse verticale nulle.

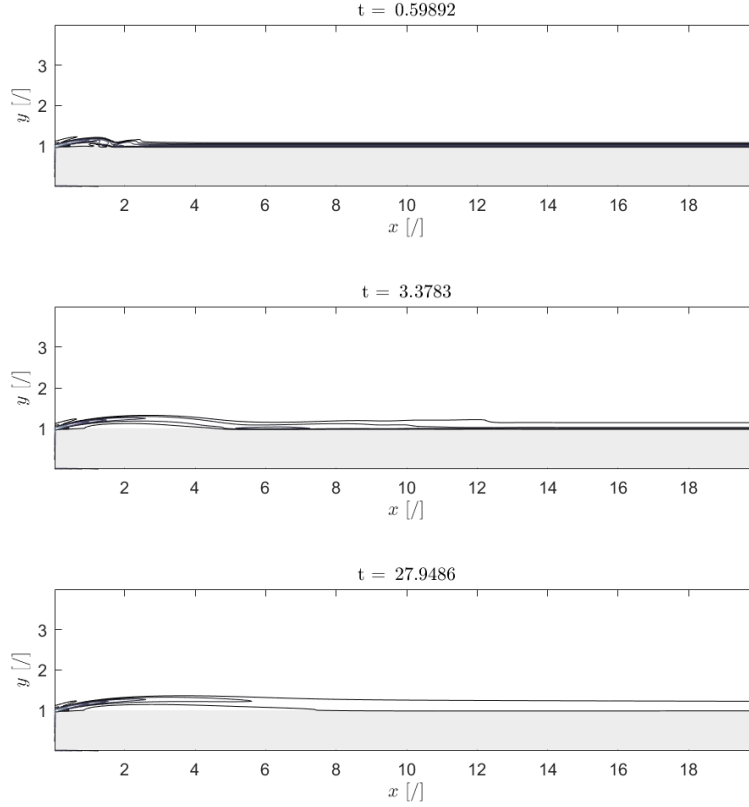


FIGURE 3.7 – Vorticité du cas de base laminaire à différents temps non dimensionnels.

Le coefficient de traînée C_d est une fonction du nombre de Reynolds Re et du diamètre des particules d_p . Dans le cas du compost, les paramètres utilisés pour le cas de base sont $\phi = 0.48$, $Re = 385$ et $d_p = 0.01$. La force résultante en utilisant ces paramètres vaut 780. Cette valeur importante implique que la vitesse constante dans le poreux est plus rapidement atteinte que lorsque la force est plus faible. Elle s'achève donc après moins de pas de temps. Par conséquent, le profil de vitesse a peu de temps pour se développer. La figure 3.8 représente différents profils de vitesse obtenus au cours des simulations pour lesquelles les paramètres ϕ , Re et d_p choisis sont différents entraînant donc une valeur de force différente aussi. La divergence principale entre les profils de vitesse pour différentes valeurs de force se situe au dessus de l'interface $y = [1, 1.03]$. Le profil créé pour le cas du compost ne présente pas de point d'inflexion. Or la présence d'un point d'inflexion est obligatoire pour voir apparaître les instabilités de Kelvin-Helmoltz.

Lorsque la valeur de la force est plus faible, les structures tourbillonnaires apparaissent au cours de l'écoulement comme cela est montré à la figure 3.9. Sur cette figure, la formation d'un vortex peut être visualisée pour un cas où la force de pré-simulation vaut $F = 35$. On remarque que dès les premiers instants une instabilité apparaît.

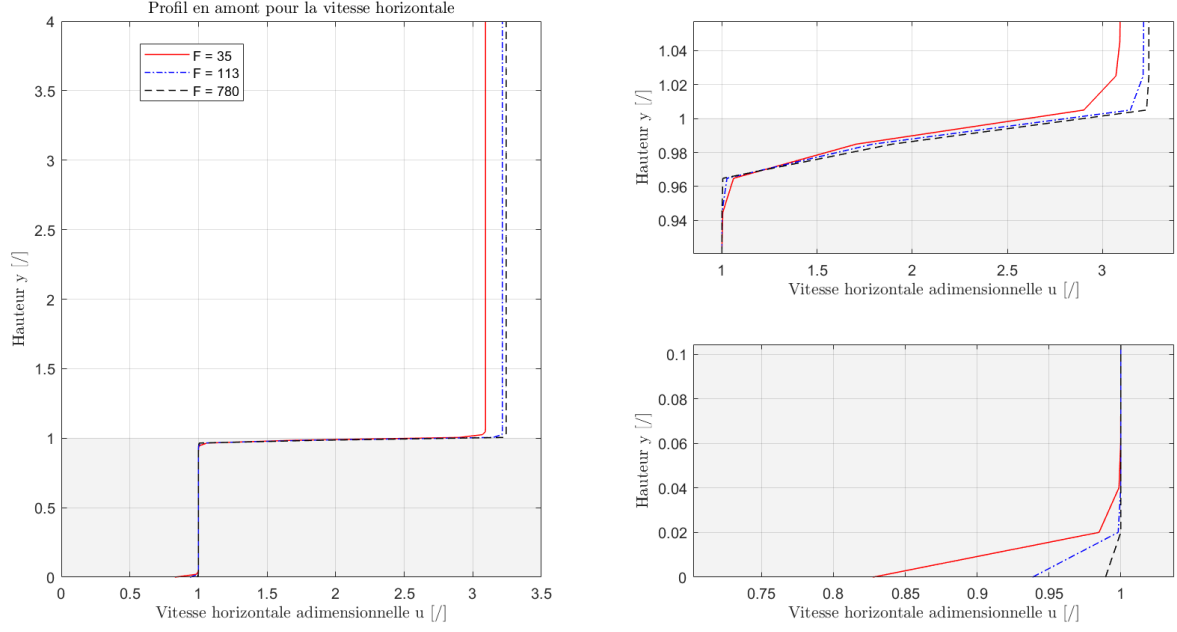


FIGURE 3.8 – Profils de vitesse pour différentes forces imposées lors de la pré-simulation. La figure en haut à droite est un zoom sur l’interface. Celle en bas à gauche est un zoom sur la zone proche paroi.

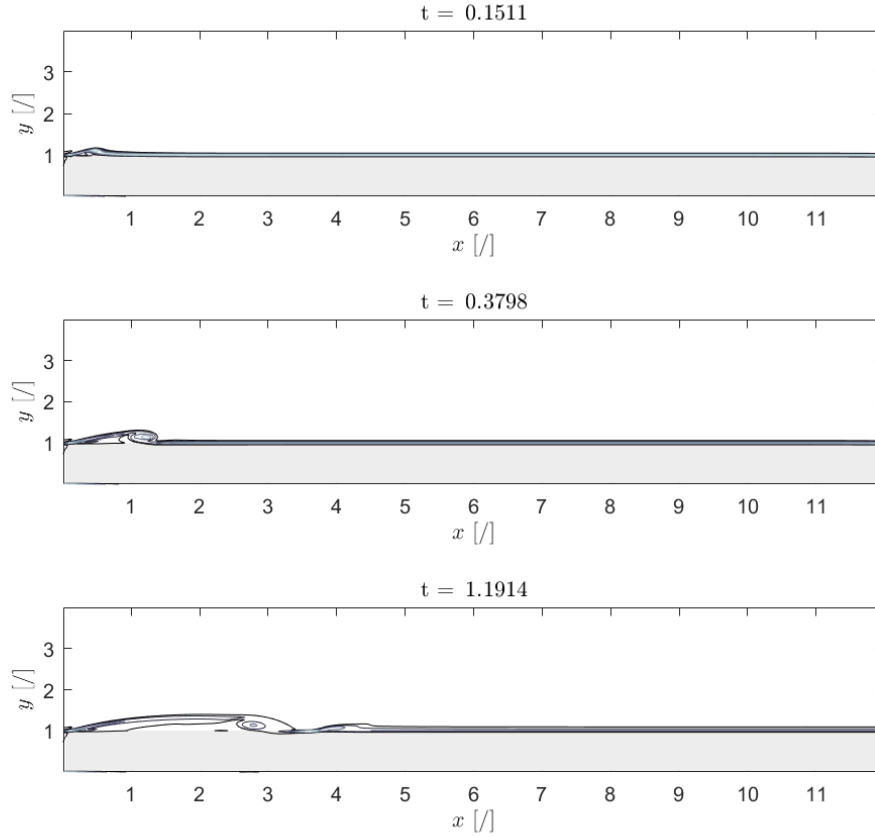


FIGURE 3.9 – Vorticité dans le cas où le profil en amont a été réalisé par un pré-simulation où la force imposée valait 35.

A la figure 3.8, il est intéressant de remarquer que la force impacte également le développement du profil de vitesse au niveau de la zone proche paroi. Pour le cas du compost, $F = 780$, on observe que la valeur de vitesse à la paroi reste proche de la vitesse au sein du milieu poreux.

Stabilisation du champ de vitesse

Après un certain temps de simulation, le champ de vitesse horizontal ne varie que très peu. A chaque pas de temps, la variation de la vitesse horizontale a été déterminée par rapport à la vitesse calculée au pas de temps précédent sur l'ensemble du domaine. La variation maximale est conservée pour chaque pas de temps. Cette variation maximale de vitesse est normalisée par rapport à la vitesse maximale présente dans le domaine à l'instant t . Elle s'exprime en pourcentage. La figure 3.10 présente l'évolution de cette variation temporelle maximale en fonction du temps adimensionnel pour le cas type.

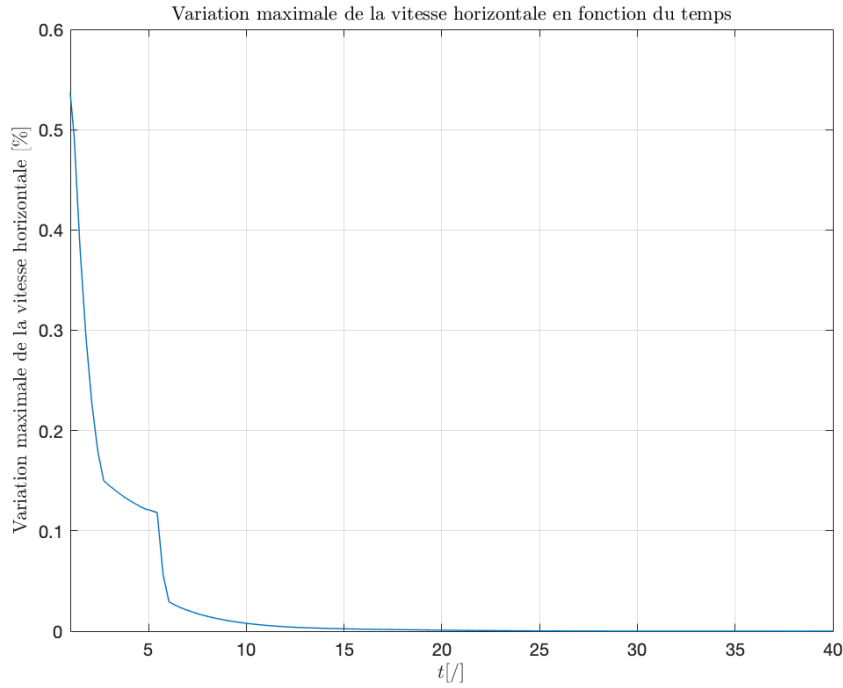


FIGURE 3.10 – Variation relative maximale de la vitesse horizontale $(\frac{1}{u_{max}} \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{max})$ en fonction du temps.

La variation temporelle du champ de vitesse est causée par la force de traînée qui vient perturber l'écoulement au niveau du milieu poreux à l'entrée du domaine. Étant donné qu'aucun vortex n'apparaît au niveau de l'interface poreux - fluide pur, on déduit qu'il s'agit de la seule perturbation pour le domaine simulé. Après un certain temps, le champ de vitesse initialement perturbé par la condition d'entrée du profil de vitesse semble s'être adapté à cet apport de masse constant.

Cependant, rien ne laisse penser que le profil de vitesse reste stable pour un domaine de simulation plus long dans le direction longitudinale. La dimension spatiale horizontale

constitue une limitation importante de notre simulation bien qu'elle soit déjà cinq fois plus grande que la dimension verticale. Par conséquent, il est possible que le développement de l'écoulement en aval, après $x = 20$, mène à la formation de structures tourbillonnaires. Des conditions limites périodiques sont couramment utilisées pour éviter cette contrainte spatiale; elles permettent à l'écoulement de se développer temporellement au lieu de spatialement. L'étude de dispersion de polluants nous limite à réaliser un développement spatial étant donné que les sources de polluants sont supposées émettre en continu. Avec des conditions périodiques, la localisation des points source dans le domaine de calcul devrait changer. Dans le cas étudié, la simulation doit donc être fixée sur un domaine précis.

3.5.2 Dispersion

Les sources de méthane sont réparties de deux manières différentes sur un rectangle de 980 x 40 mailles à l'intérieur du domaine poreux composé de 1000 x 50 mailles. Les 10 mailles sur les extrémités ont été considérées comme non émettrices de méthane, sauf dans le bas du domaine. A l'intérieur du rectangle contenant les sources, deux cas ont été considérés : chaque maille est une source de méthane ou une maille sur quatre l'est.

Sources assemblées

Le cas des sources assemblées se réfère au cas où chaque maille a été considérée comme une source de méthane. L'évolution de la dispersion du méthane à différents instants est visible sur la gauche de la figure 3.11. Il est possible de remarquer que le polluant, en amont du domaine, sort du milieu poreux et se dirige vers l'aval. Ceci crée une zone de concentration plus faible au dessus du bloc jaune formant une zone de forte concentration par la présence des sources. Ceci est dû au phénomène de conservation de masse comme expliqué plus haut. Il peut aussi être observé que la présence de polluants dans la direction verticale s'étend.

On remarque aussi que la frontière de gauche séparant la quantité maximale de méthane du reste du champ de concentration avance le long du domaine. La frontière se situe autour de $x = 1.8$ au temps t_1 et autour de $x = 2.3$ au temps t_2 . Cette séparation atteint une abscisse constante à partir d'un certain moment. Il s'agit de la position que l'on peut observer au temps t_3 . Ceci est dû à la stabilisation du profil de vitesse après un certain temps. Le profil de vitesse horizontal se stabilise pour $t = 15$ environ. Dans ce profil stable, la vitesse u dans le milieu poreux diminue avec la distance x pour finalement tendre vers zéro. La vitesse u atteint la valeur $u = 0$ à une abscisse entre $x = 3$ et $x = 4$, cette abscisse est appelée x_{00} . Il est donc normal qu'entre t_2 et t_3 , le déplacement de la frontière continue car celle-ci n'a pas atteint l'abscisse x_{00} . Le terme convectif de l'équation de dispersion continue donc d'avoir un effet de par le gradient de concentration jusqu'à ce que $u = 0$.

[illegible]

pas de méthane. C'est seulement lorsque le polluant atteint l'interface que la diffusion du milieu poreux vers l'atmosphère commence.

On remarque aussi en faisant attention aux échelles de polluants qu'au fur et à mesure que le temps de simulation augmente la concentration de polluants croît dans le domaine.

Sources espacées

Le cas des sources espacées se réfère au cas où une maille sur quatre a été considérée comme une source de méthane. L'évolution de la dispersion du méthane à différents instants est visible sur la droite de la figure 3.11.

Les observations mentionnées précédemment sont aussi valables pour ce cas. Cependant, on remarque une différence de comportement à l'intérieur du domaine poreux. Le polluant a tendance à s'accumuler dans le bas du domaine. Ceci est dû aux profils des vitesses horizontale et verticale en amont du domaine. Pour le cas des sources assemblées, il n'y a pas de gradient spatial de concentration : chaque maille émet la même quantité de polluant $\mathcal{R}$ dès le temps $t = 0$. Par conséquent, le terme convectif et diffusif de l'équation de dispersion sont nuls. Dans le cas traité ici, un gradient spatial de concentration de méthane est présent au sein du milieu poreux ce qui explique la différence de comportement entre les deux cas traités.

L'échelle des concentrations présente une valeur maximale plus grande dans le cas des sources espacées. En effet, dans ce cas, le terme source par maille est plus élevé car le volume qui émet du polluant est plus faible. Le but était que dans les deux cas, la même quantité de méthane soit produite par le compost dans un même laps de temps. Les gradients sont donc plus grands dans le cas espacé mais la totalité de polluant injecté à chaque instant dans le domaine ne varie pas d'un cas à l'autre.

Interaction compost - atmosphère

Les points source de méthane sont localisées au sein du compost. Dès lors, l'interaction entre le milieu poreux et le fluide pur peut être évaluée en regardant la proportion de méthane présent au sein de l'atmosphère. C'est ainsi que l'intensité de l'interaction est déterminée pour les deux cas traités : sources assemblées et espacées. La figure 3.12 présente l'évolution du rapport massique entre la quantité de polluants présents dans le fluide pur par rapport à la quantité totale de polluants présents au sein de l'entière du domaine au cours du temps.

Les deux courbes présentent la même allure : une pente forte pour des temps faibles qui diminue au cours du temps, ensuite la courbe se rapproche de l'horizontale. Cette observation est une autre conséquence du débit massique sortant du milieu poreux dans la partie amont du domaine. Plus haut, il a été mentionné que la surface regroupant des mailles de fortes concentrations ("bloc jaune") diminue en début de simulation et finit par occuper une surface constante au sein du domaine. Au cours du temps pendant lequel sa surface d'occupation varie, la quantité de méthane qui quitte le milieu poreux est plus importante que quand la répartition des concentrations est stable temporellement. En effet, les polluants émis par les points sources se trouvant dans la partie amont du domaine sont directement dirigés vers l'atmosphère et leur concentration est plus grande avant d'avoir atteint la stabilité du champ de concentration.

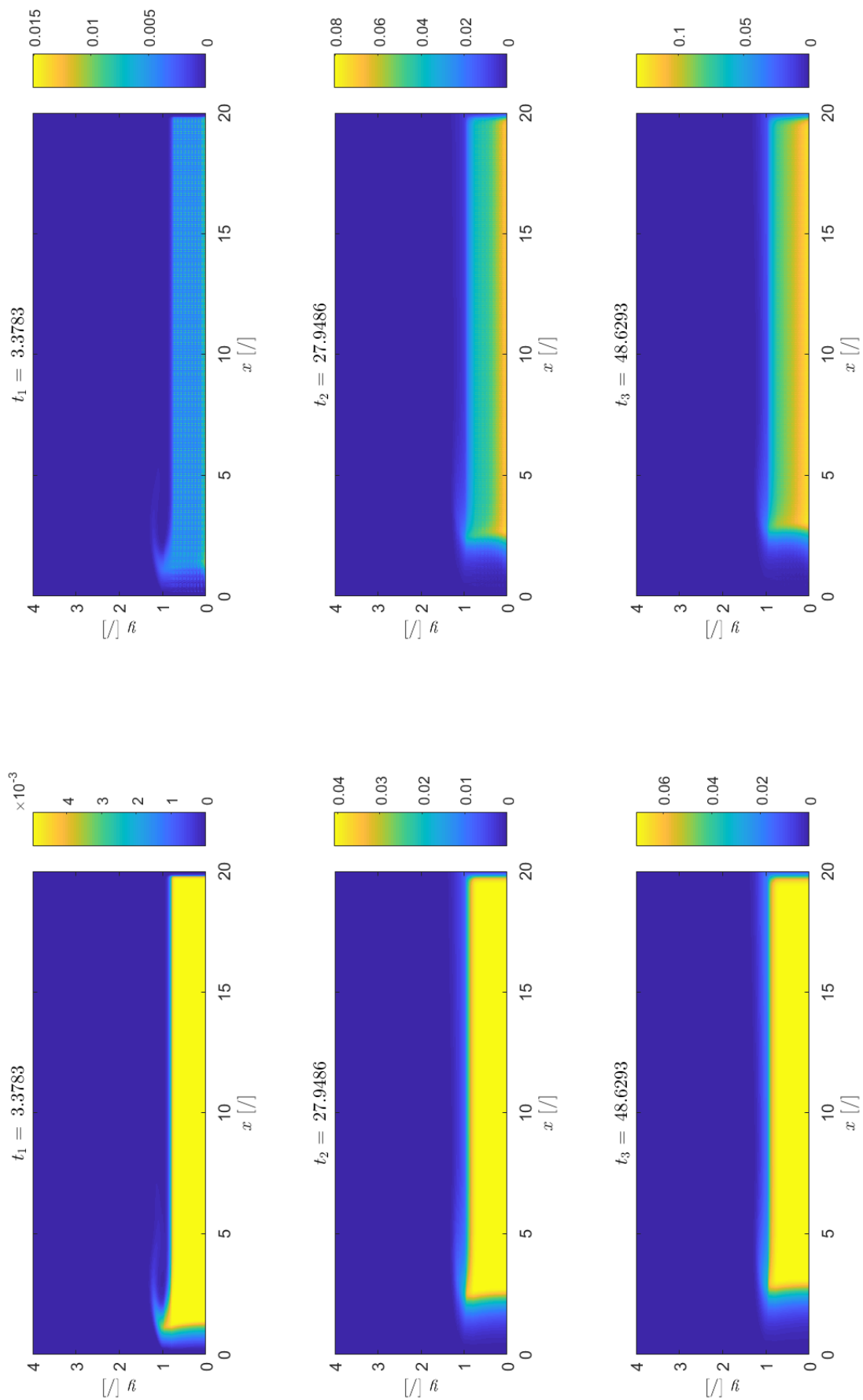


FIGURE 3.11 – Allure de la dispersion à trois temps adimensionnels différents. A gauche se trouve le cas où chaque maille est source de méthane, à droite se trouve le cas où les points source sont espacés.

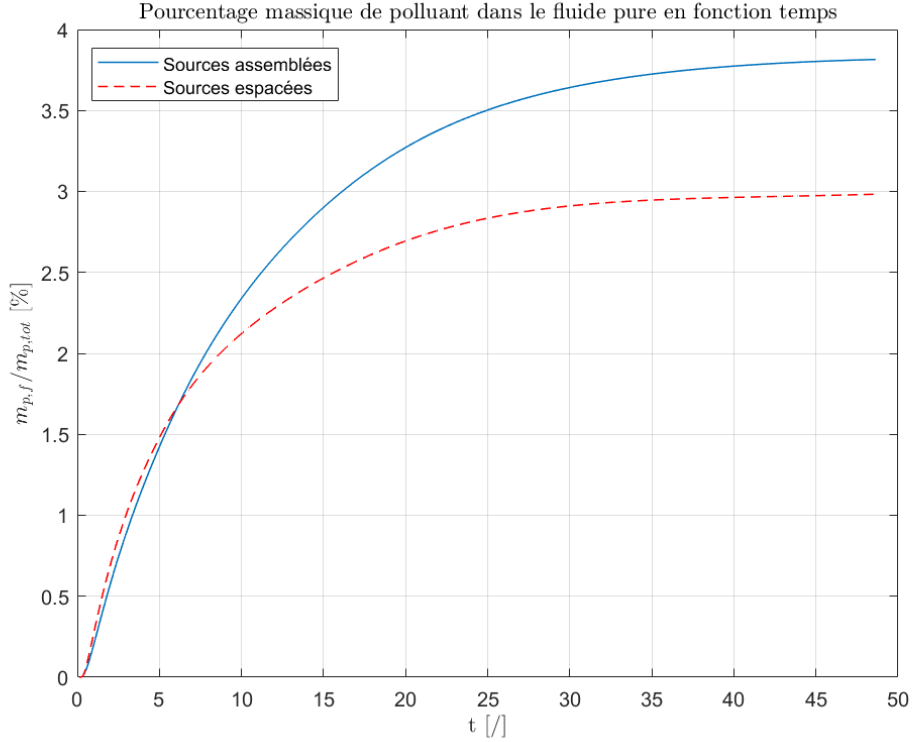


FIGURE 3.12 – Fraction massique de méthane se trouvant dans l’atmosphère en fonction du temps. Le cas représenté est le cas de base laminaire.

Une fois que la répartition stable des concentrations est atteinte, la courbe de fraction massique s’aplatit, voir figure 3.12. Cette pente presque horizontale pour des temps élevés signifie qu’une quantité de polluants presque constante est amenée dans le fluide d’un pas de temps à l’autre vu que les intensités des sources de polluants sont constantes au cours du temps. Dès lors, la quantité de méthane dans le milieu poreux augmente linéairement.

On peut remarquer que la fraction de polluants amenée dans le fluide pur est plus faible pour le cas des sources dispersées. Pourtant, la même quantité de méthane est produite au sein du compost à chaque instant dans les deux cas. Ceci pourrait être dû à la position de l’abscisse x_{00} au niveau de laquelle le profil de vitesse u tombe à zéro dans le compost. Certaines mailles du cas avec les sources espacées n’émettent pas de méthane. Si la limite x_{00} coïncide avec une abscisse au niveau de laquelle la quantité de polluants au sein de la surface ($y \cdot x_{00}$) n’est pas identique dans les deux cas, une quantité plus importante de polluants est dirigée vers le haut dans le cas des sources assemblées.

On remarque aussi que la pente initiale des sources espacées est plus grande. Cette observation pourrait se justifier par une convection du méthane plus importante au début de la simulation due à l’existence d’un gradient de concentration au sein du milieu poreux pour le cas des sources espacées.

3.6 Analyse paramétrique

Cette section est dédiée aux conséquences de la variation de paramètres sur les résultats obtenus. Les deux paramètres variés sont la porosité et le nombre de Reynolds. La première partie de cette section se penche sur des phénomènes liés aux champs de vitesses. Ensuite, la dispersion du méthane est analysée.

3.6.1 Cas traités

Les simulations comparées les unes aux autres dans cette analyse sont présentées dans le tableau 3.5. Il permet de mettre en évidence les paramètres qui changent d’une simulation à l’autre ; la vitesse de référence et la porosité. La variation du nombre de Reynolds est ici une simple variation de la vitesse de référence. Un seul paramètre varie à la fois.

		Variation de Re		Variation de ϕ	
Paramètres	Cas de base	Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4
u_r [m/s]	0.02	0.0104	0.026	0.02	
L_r [m]	0.3	0.3		0.3	
ν [m ² /s]	$1.56 \cdot 10^{-5}$	$1.56 \cdot 10^{-5}$		$1.56 \cdot 10^{-5}$	
$\mathcal{D}$ [m ² /s]	$1.96 \cdot 10^{-5}$	$1.96 \cdot 10^{-5}$		$1.96 \cdot 10^{-5}$	
$\mathcal{R}$ [kg/m ³ /s]	$9.17 \cdot 10^{-5}$	$9.17 \cdot 10^{-5}$		$9.17 \cdot 10^{-5}$	
ϕ	0.48	0.48		0.3	0.6
Re	385	200	500	385	
Sc	0.795	0.795		0.795	

TABLE 3.5 – Paramètres des différentes simulations traitées dans les analyses du cas laminaire.

Comme mentionné précédemment, la condition limite en amont pour la vitesse est définie par une pré-simulation. Pour rappel, le profil d’entrée $u(y)$ est déterminé lorsqu’une vitesse adimensionnelle $u = 1$ est atteinte dans le milieu poreux. La vitesse *free stream* dans le fluide pur varie en fonction de la force imposée lors de la pré-simulation. Cette force dépend entre autres de la porosité et du nombre de Reynolds. Pour chaque cas, la vitesse u non dimensionnelle en amont est identique dans le milieu poreux mais varie dans le fluide pur. Il est important de remarquer les conséquences que cela induit d’une simulation à l’autre afin de comparer les cas de la meilleure manière possible.

Dans cette analyse, deux paramètres variés sont : le Reynolds et la porosité. Dans le cas de la porosité, la vitesse de référence ne varie pas. En amont, la vitesse dimensionnelle dans le poreux est identique pour les trois cas tandis que la vitesse dans la partie fluide pur du domaine varie d’une porosité à l’autre. Il n’est pas possible d’analyser uniquement une

variation de porosité et de maintenir une condition limite d'entrée identique pour chaque porosité. Le profil de vitesse d'entrée obtenu lors de la pré-simulation est aussi dépendant de la variable porosité. Dans le cas d'une variation de Reynolds, celle-ci est causée uniquement par un changement de vitesse de référence. Ceci implique que les trois cas traités présentent des vitesses dimensionnelles différentes dans le milieu poreux et dans la partie fluide pur du domaine.

3.6.2 Overshoot

La présence d'un dépassement de vitesse par rapport à la vitesse dans le haut du domaine (vitesse *free stream*) a été remarquée dans le champ de vitesse, voir figure 3.5. Ce dépassement se localise près de l'interface. Dans cette section, l'intérêt est porté sur l'intensité de cet overshoot en fonction des deux paramètres variés. Sur les figures 3.13 et 3.14 sont représentées les intensités des dépassements le long du domaine pour différents choix de ces deux paramètres. L'intensité de l'overshoot est définie comme le rapport de la différence entre la vitesse maximale du profil non dimensionnel et la vitesse *free stream* pour chaque abscisse sur la vitesse au sein du poreux :

$$\Delta u = \frac{u_{max} - u_{freestream}}{u_{poreux}}. \quad (3.21)$$

Le premier paramètre étudié est la porosité. On remarque que l'intensité de l'overshoot augmente lorsque la porosité augmente. Lorsque la porosité est plus faible, le débit massique de fluide entrant dans le milieu poreux est plus faible. La vitesse horizontale en entrée dans le milieu poreux vaut $u = 1$ et elle atteint rapidement $u = 0$ après son entrée dans le domaine. Le flux se dirige vers l'interface et sort du milieu poreux par cette dernière. Le débit massique pour la porosité de $\phi = 0.6$ étant plus important, l'intensité de l'overshoot l'est aussi. En effet, le débit de masse entrant par unité de longueur, D , dans le milieu poreux peut s'écrire comme :

$$D = \int_0^h \rho \phi u_{in}(y) dy \quad (3.22)$$

où u_{in} vaut 1 par la vitesse imposée en amont. Ce débit entrant sort en grande partie au niveau de l'interface car après une certaine abscisse x la vitesse au sein du milieu poreux tend vers $u = 0$. Le débit sortant à droite dans le milieu poreux est donc très faible. Il ne peut pas non plus s'échapper à travers le sol car les vitesses sont nulles à cette extrémité du domaine. La seule possibilité est donc que le débit se dirige vers le haut et donc vers l'interface milieu poreux - fluide. La différence de hauteur des courbes représentant l'intensité de l'overshoot est justifiée par la différence du débit entrant dans le milieu poreux.

Le second paramètre étudié est un changement de la vitesse de référence. Cela équivaut à un changement de nombre de Reynolds pour lequel seulement l'inertie est changée étant donné que le fluide considéré reste identique. La figure 3.14 montre que l'intensité du dépassement augmente avec le Re . En amont du milieu poreux, la vitesse augmente avec le Re tout en gardant la même porosité. Dès lors, l'intensité de l'overshoot augmente avec le Re par une augmentation du flux en amont du milieu poreux.

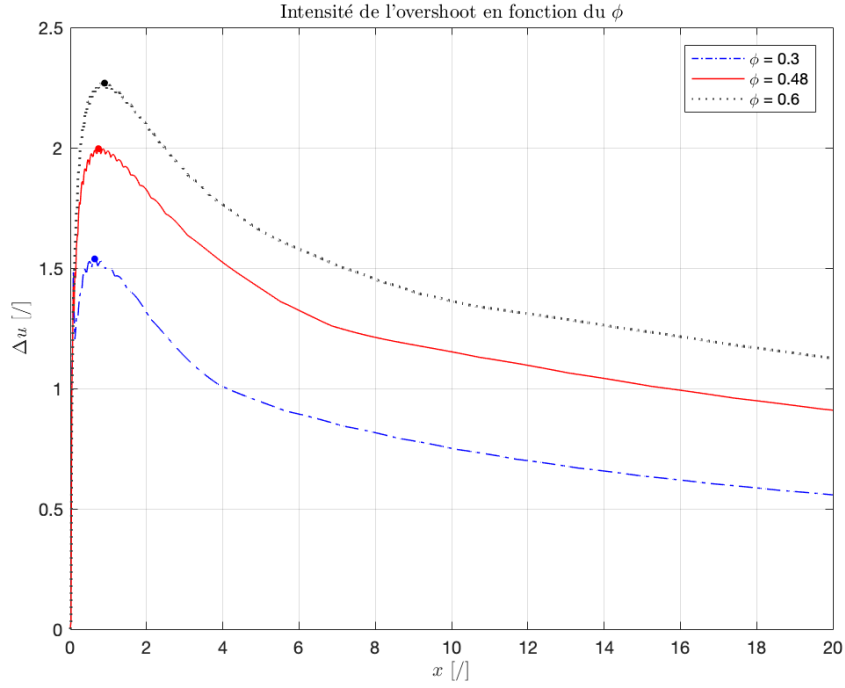


FIGURE 3.13 – Intensité de l’overshoot pour le champ de vitesse horizontale calculée à un temps non dimensionnel proche de $t = 38$ (temps où le champ de vitesse est stable dans tous les cas). Variation de la porosité pour un Re de 385. Les ordonnées sont déterminées par l’équation 3.21.

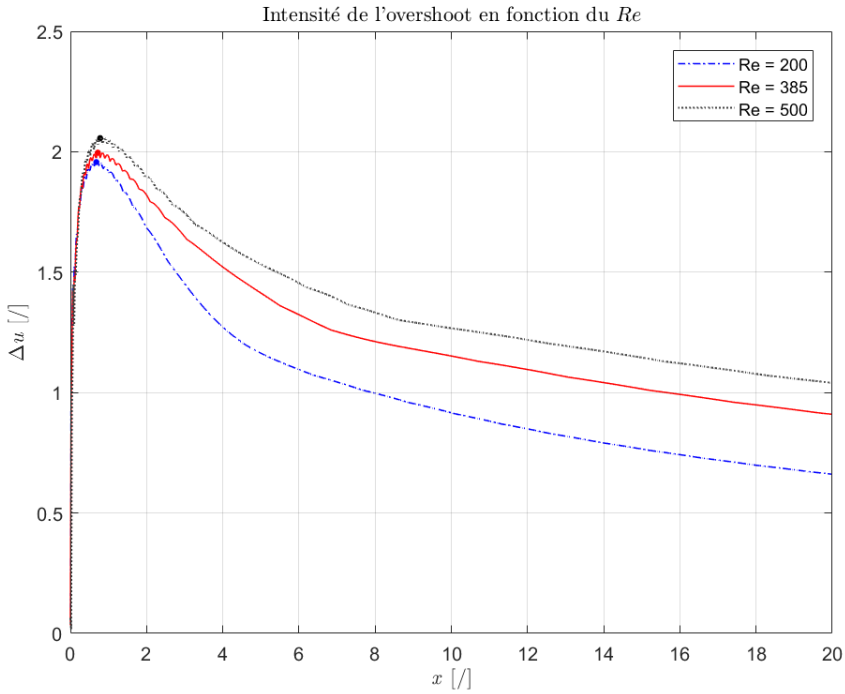


FIGURE 3.14 – Intensité de l’overshoot pour le champ de vitesse horizontale calculée à un temps non dimensionnel proche de $t = 38$ (temps où le champ de vitesse est stable dans tous les cas). Variation du nombre de Reynolds pour une porosité ϕ de 0.48. Les ordonnées sont déterminées par l’équation 3.21.

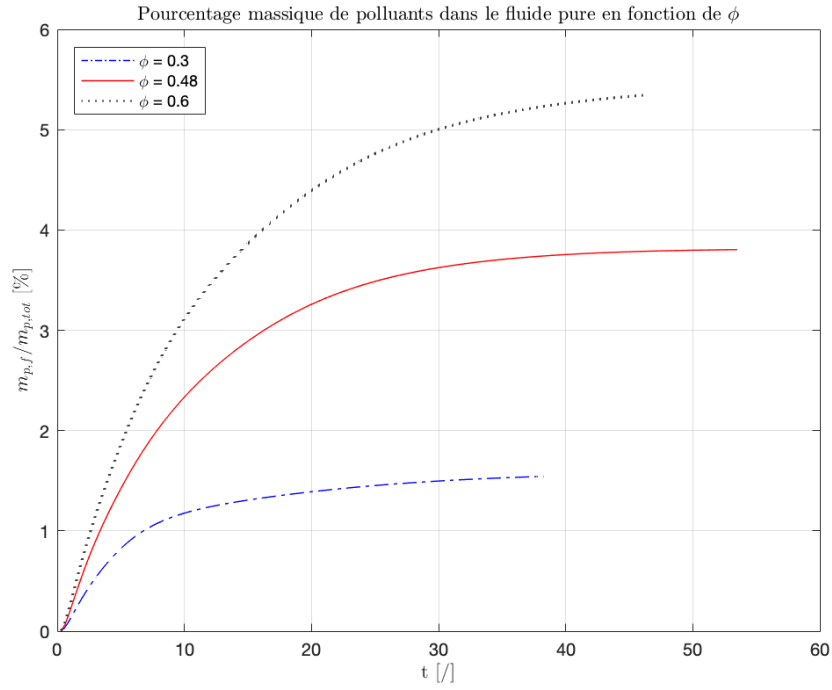


FIGURE 3.15 – Pourcentage de méthane dans l’atmosphère en fonction du temps pour le cas des points source assemblés. La figure présente la variation entre différentes porosité à un $Re = 385$.

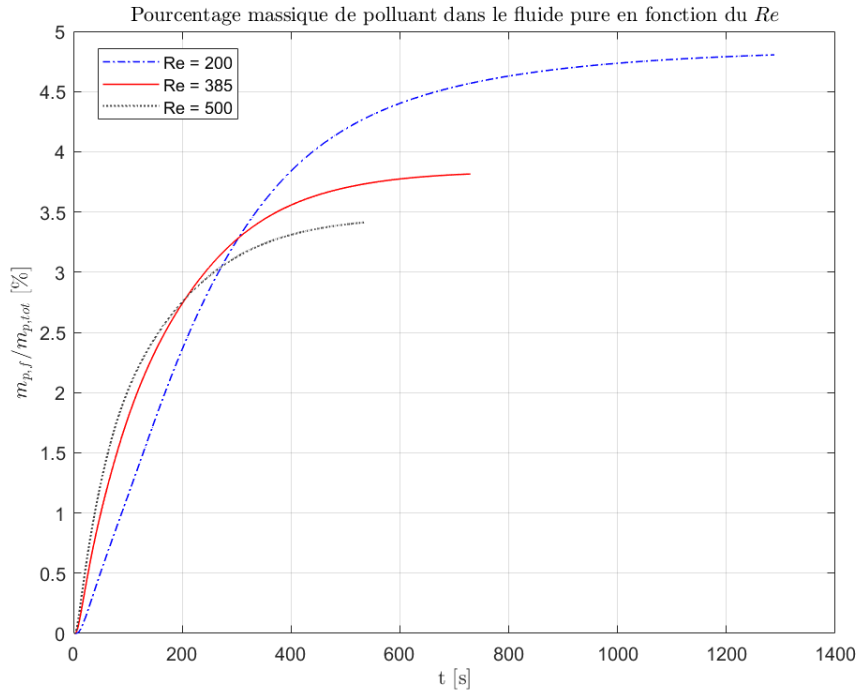


FIGURE 3.16 – Pourcentage de méthane dans l’atmosphère en fonction du temps pour le cas des points source assemblés. La figure présente la variation entre différents nombre de Reynolds à un $\phi = 0.48$.

Dans les deux schémas proposés aux figures 3.13 et 3.14, les maxima d'intensité sont localisés à une distance plus grande de l'entrée du domaine pour les cas où une intensité de dépassement plus grande est atteinte. La localisation du maximum serait alors aussi liée au débit. On peut également observer que les positions de ces maxima sont très proches les unes des autres. Il faudrait donc réaliser d'autres simulations pour confirmer cette tendance.

3.6.3 Dispersion du polluant

Les sources de polluants sont localisées au sein du milieu poreux. L'intensité de l'interaction est déterminée pour différentes porosités et différents nombres de Reynolds en se basant sur la proportion de méthane présent au sein de l'atmosphère. Les figures 3.15 et 3.16 présentent l'évolution du rapport massique entre la quantité de polluants présents dans le fluide pur par rapport à la quantité totale de polluants présent au sein du domaine au cours du temps. Le cas des points sources assemblés est analysé.

Le premier paramètre étudié est la porosité. Plus la porosité est grande, plus la proportion de polluants dans l'atmosphère est importante. Par exemple au temps $t = 20$, une porosité de $\phi = 0.3$ possède 1.4% du méthane au sein du fluide pur. La proportion de méthane présent au temps $t = 20$ est de 3.25% et de 4.3% au sein du fluide pur pour des porosités de $\phi = 0.48$ et de $\phi = 0.6$ respectivement. Cette observation s'explique par le fait que le coefficient de traînée dans le milieu poreux dépend de la porosité : β croît lorsque la porosité est plus faible. Par conséquent, le terme de traînée $\beta \mathbf{u}$ est plus important pour une porosité plus faible. Les vitesses chutent à une valeur nulle sur une distance plus faible. Une traînée plus importante entraîne une interaction entre le milieu poreux et l'atmosphère de plus faible intensité qui se traduit donc par une concentration du méthane moindre dans la région composée uniquement de fluide.

La figure 3.15 montre aussi que la variation de méthane au sein de l'atmosphère croît rapidement au début de la simulation et que cette variation temporelle est plus importante pour une porosité plus élevée. En effet, la pente au temps $t = 0$ augmente avec la porosité. Cette constatation est directement liée à la valeur de l'overshoot. Plus l'intensité de l'overshoot est élevée, plus la quantité de polluants présents dans l'atmosphère augmente brusquement d'un temps à l'autre en début de simulation. Le milieu poreux produit à chaque pas de temps une quantité de méthane identique pour chaque cas. Un overshoot plus grand est lié à un débit plus important se dirigeant du milieu poreux vers le fluide pur. L'intensité de cet overshoot augmente avec la porosité. Par conséquent, la variation temporelle de la répartition du méthane présent au sein de l'atmosphère augmente avec la porosité.

Le deuxième paramètre étudié est le nombre de Reynolds, pour lequel seulement la vitesse de référence varie. L'abscisse du graphe est cette fois-ci en temps dimensionnel étant donné que la vitesse de référence modifie cette variable. L'analyse se base sur la figure 3.16.

La pente initiale est plus forte pour un Re élevé. Comme mentionné dans l'analyse de l'overshoot, le débit massique est plus grand pour une vitesse de référence plus grande. La quantité de polluant qui quitte le milieu poreux est donc plus élevée.

Il peut aussi être observé que la fraction de polluant qui atteint l'atmosphère est plus élevée pour une vitesse de référence plus faible. L'explication est similaire à celle de la variation de porosité : une différence d'intensité de la traînée. Le terme de traînée est

proportionnel au carré de la vitesse et inversement proportionnel au Re . Dès lors, le terme de traînée augmente avec la vitesse de référence. Ceci implique que la fraction de polluants amenée dans l'atmosphère est plus faible car la vitesse est positive sur une portion plus petite du milieu poreux.

3.7 Conclusions

Le modèle de dispersion laminaire développé a été testé sur un cas d'étude portant sur la dispersion du méthane produit au sein d'un compost.

Il a été remarqué que le phénomène de dispersion au sein d'un écoulement laminaire semble être dominé par le phénomène convectif. Les observations sur la dispersion du méthane au sein du compost et son interaction avec l'atmosphère ont pu être interprétées grâce à une compréhension des caractéristiques de l'écoulement. Il a ensuite été observé que le nombre de Reynolds et la porosité influencent la dispersion du méthane au sein de l'atmosphère. Plus la porosité est élevée, plus le pourcentage massique de méthane présent dans l'atmosphère est haut. Il a également été montré que ce pourcentage massique diminue lorsque le nombre de Reynolds augmente. Nous avons pu aussi mettre en évidence que la répartition des points source influence aussi la dispersion du polluant.

Les résultats numériques de ce cas type permettent d'avoir une idée de l'influence qu'ont la porosité et la vitesse de référence sur la dispersion d'un scalaire passif localisé au sein du milieu poreux qui possède les caractéristiques d'un compost. Ces résultats permettent d'évaluer l'intensité de l'interaction entre le compost et l'atmosphère. Cependant, de par la faible porosité du compost et la petite taille des particules qui le compose, le cas étudié est très spécifique. Il s'agit d'un cas pour lequel la force de traînée est tellement grande qu'elle empêche le fluide de traverser le milieu poreux d'amont en aval. Les observations réalisées sont donc propres à ce type de milieu poreux. Nous avons remarqué que d'autres caractéristiques de simulation, changeant la force de traînée, permettraient l'apparition d'instabilités de Kelvin-Helmholtz. Il serait intéressant d'analyser la dispersion laminaire dans ce type de cas.

Enfin, le temps de calcul contraint la résolution du maillage. Pour rappel, le maillage utilisé est uniforme et constitué d'un ensemble de rectangles de même dimension sur l'entière du domaine. Il serait intéressant d'affiner les mailles présentes au niveau de la zone proche paroi et au niveau de l'interface. Le code actuel qui génère le maillage ne permet pas de l'affiner localement mais uniquement globalement ce qui engendre des temps de simulations très importants dès que l'on souhaite diminuer la taille des mailles. Les profils de pré-simulation créés pour les différents cas analysés pourraient donc être fortement impactés par un affinement du maillage à l'interface milieu poreux - fluide pur. Les résultats et observations obtenus pour les cas analysés pourraient être différents étant donné que les phénomènes présents dans cette zone dominent l'interaction entre le milieu poreux et le milieu formé uniquement de fluide. Il serait donc judicieux de lancer d'autres simulations avec un maillage non uniforme afin de confirmer les résultats obtenus.

Chapitre 4

Dispersion de scalaires passifs dans un écoulement de cisaillement turbulent à l'interface milieu poreux - fluide pur

4.1 Modèle mathématique de l'écoulement turbulent

4.1.1 Décomposition de Reynolds

La turbulence peut être caractérisée comme un phénomène aléatoire, ce qui justifie l'utilisation d'outils statistiques. L'approche statistique de Reynolds est considérée pour modéliser les effets moyens de la turbulence. Les équations de Navier-Stokes sont moyennées dans le temps afin de trouver la solution de l'écoulement turbulent moyen. Dans cette approche, toute grandeur physique instantanée ψ (vitesse, pression, ...) est décomposée en une partie moyenne $\bar{\psi}$ et une partie fluctuante ψ' :

$$\psi = \bar{\psi} + \psi' \quad (4.1)$$

Par exemple, une sonde fixe est placée dans un écoulement et mesure la composante instantanée de la vitesse. L'évolution de la composante instantanée de la vitesse au cours du temps est visible à la figure 4.1.

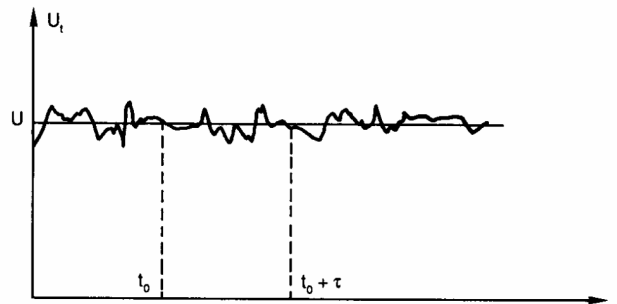


FIGURE 4.1 – Enregistrement d'une mesure de la vitesse en écoulement turbulent. [47]

La valeur instantanée de la vitesse présente de nombreuses oscillations mais celles-ci se produisent autour d'une valeur moyenne de la vitesse instantanée. La moyenne temporelle est définie comme :

$$\overline{\psi}(x, y, z, t_0) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0 + \tau} \psi(x, y, z, t) dt \quad (4.2)$$

Cette moyenne est aussi appelée moyenne de Reynolds. Cet opérateur de moyenne vérifie les propriétés suivantes :

$$\overline{\psi'} = 0 \quad (4.3a)$$

$$\overline{\overline{\psi}} = \overline{\psi} \quad (4.3b)$$

$$\overline{\overline{\psi} \overline{\chi}} = \overline{\psi} \overline{\chi} \quad (4.3c)$$

$$\overline{\psi' \overline{\chi}} = 0 \quad (4.3d)$$

$$\overline{\psi + \chi} = \overline{\psi} + \overline{\chi} \quad (4.3e)$$

$$\overline{\psi \chi} = \overline{\psi} \overline{\chi} + \overline{\psi' \chi'} \quad (4.3f)$$

$$\frac{\partial \overline{\psi}}{\partial x_i} = \overline{\frac{\partial \psi}{\partial x_i}} \quad (4.3g)$$

$$\frac{\partial \overline{\psi}}{\partial t} = \overline{\frac{\partial \psi}{\partial t}} \quad (4.3h)$$

4.1.2 Equations moyennées de Navier-Stokes-Reynolds pour un milieu poreux

Les équations de l'écoulement moyen turbulent sont obtenues en appliquant l'opérateur de moyenne temporelle aux équations dimensionnelles (2.14). La fluctuation de toute grandeur physique a été définie comme la différence entre sa valeur instantanée et sa valeur moyenne. Les équations (2.14) pour un écoulement où la masse volumique est constante et la porosité est une fonction $\phi(\mathbf{x})$ en notation indicelle sont les suivantes :

Conservation de la masse

$$\frac{\partial(\phi u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (4.4)$$

Conservation de la quantité de mouvement

$$\rho \left[\phi \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(\phi u_i u_j)}{\partial x_j} \right] = -\phi \frac{\partial p}{\partial x_i} + \phi \rho g_i + \frac{\partial(\phi \tau_{ij})}{\partial x_j} - \beta_{ij} u_j \quad (4.5)$$

L'opérateur de moyenne temporelle est appliqué aux équations (4.4) et (4.5). Moyenner les équations de Navier-Stokes a deux conséquences ; les détails "fins" de l'écoulement sont éliminés et des nouveaux termes apparaissent dans les équations. Ceux-ci doivent être modélisés. Les équations moyennées de Navier-Stokes-Reynolds pour un milieu poreux sont les suivantes :

Conservation de la masse

$$\frac{\partial(\phi \bar{u}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (4.6)$$

Conservation de la quantité de mouvement

$$\rho \left[\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\phi \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} \right] = -\phi \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \phi \rho g_i + \frac{\partial(\phi \bar{\tau}_{ij})}{\partial x_j} - \overline{\beta_{ij} u_j} \quad (4.7)$$

En utilisant la propriété décrite par l'équation (4.3f), l'équation (4.7) devient :

$$\rho \left[\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\phi \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} \right] = -\phi \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \phi \rho g_i + \frac{\partial(\phi \bar{\tau}_{ij})}{\partial x_j} - \rho \frac{\partial(\phi \overline{u'_i u'_j})}{\partial x_j} - \overline{\beta_{ij} u_j} - \overline{\beta'_{ij} u'_j} \quad (4.8)$$

Un terme additionnel apparaît dans l'équation de la conservation de la quantité de mouvement pour l'écoulement turbulent moyen. Cette contrainte additionnelle, $\bar{\sigma}_{ij}^t$, est couramment appelée le tenseur de Reynolds :

$$\bar{\sigma}_{ij}^t = -\rho \overline{u'_i u'_j} \quad (4.9)$$

En introduisant le tenseur de Reynolds dans l'équation (4.8), celle-ci se réduit à :

$$\rho \left[\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\phi \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} \right] = -\phi \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \phi \rho g_i + \frac{\partial(\phi(\bar{\tau}_{ij} + \bar{\sigma}_{ij}^t))}{\partial x_j} - \overline{\beta_{ij} u_j} - \overline{\beta'_{ij} u'_j} \quad (4.10)$$

Certaines relations liées au tenseur de Reynolds doivent être mises en évidence car elles sont utiles par la suite. La trace du tenseur de Reynolds est liée à l'énergie cinétique turbulente, $\bar{k}$:

$$\bar{k} = \frac{\overline{u'_k u'_k}}{2} = -\frac{\bar{\sigma}_{kk}^t}{2\rho} \quad (4.11)$$

Le tenseur de Reynolds peut lui aussi être décomposé en une partie sphérique et une partie déviatoire :

$$\bar{\sigma}_{ij}^t = \bar{\tau}_{ij}^t + \frac{1}{3} \bar{\sigma}_{kk}^t \delta_{ij} = \bar{\tau}_{ij}^t - \frac{2}{3} \rho \bar{k} \delta_{ij} . \quad (4.12)$$

La partie déviatoire du tenseur de Reynold est modélisée de la manière suivante :

$$\bar{\tau}_{ij}^t = 2\mu_t \bar{d}_{d,ij} \quad (4.13)$$

Par décomposition et moyenne du tenseur $d_{d,ij}$, nous obtenons la définition suivante :

$$\overline{d_{d,ij}} = \bar{d}_{ij} - \frac{1}{3} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (4.14)$$

4.1.3 Problème de fermeture

Des termes additionnels liés à la turbulence apparaissent dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Trouver un moyen de modéliser ces termes est ce qu'on appelle le problème de fermeture des équations en turbulence. Un modèle simple de fermeture qui consiste en une fermeture de type viscosité effective de turbulence est utilisé dans le cadre de ce travail. Des modèles de fermeture simplifiés sont couramment utilisés pour différentes

applications industrielles où les détails du champ turbulent ne sont pas essentiels [61]. Les différents modèles simplifiés sont généralement classés en fonction du nombre d'équations de transport que le modèle implique : zéro, une ou deux. Dans les modèles de fermeture à zéro équation de transport, on retrouve le modèle à longueur de mélange, développé par analogie à la théorie cinétique des gaz et qui se base donc sur une longueur caractéristique d'interaction des tourbillons. Dans les modèles de fermeture à une équation de transport, on retrouve le modèle de Spalart-Allmaras qui est l'un des plus connus. Finalement, dans les modèles à deux équations de transport, on retrouve le modèle $k - \epsilon$ et le modèle $k - \omega$ qui sont deux modèles fréquemment utilisés [69].

Le modèle à deux équations de transport $k - \epsilon$ standard a été choisi. Il s'agit d'un modèle bien établi et qui a largement été validé. L'utilisation de ce modèle est recommandé pour un écoulement comprenant une couche de cisaillement si cette dernière n'est pas soumise à de grands gradients de pression. Pour le cas étudié dans ce travail, le gradient de pression est raisonnable.

Modèle de fermeture de viscosité effective : $k - \epsilon$ standard

Ce modèle est un des moyens de compléter le système d'équations de conservation. Il s'agit d'un modèle couramment utilisé en mécanique des fluides numériques pour simuler les caractéristiques de l'écoulement moyen turbulent. Il se base sur deux équations qui représentent l'évolution de deux variables turbulentes : l'énergie cinétique turbulente $\bar{k}$ [m^2/s^2] et le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente : $\bar{\epsilon}$ [m^2/s^3]. L'énergie cinétique turbulente est une mesure de l'intensité de turbulence. Sa définition est la suivante :

$$\bar{k} = \frac{\overline{u'_i u'_i}}{2} \quad (4.15)$$

La dissipation de l'énergie turbulente caractérise la conversion de l'énergie cinétique turbulente en chaleur. Cette conversion est due au travail des plus petits tourbillons contre les contraintes visqueuses. Sa définition sera mise en évidence lors du développement des équations de modélisation de la turbulence.

Développement de l'équation de l'énergie cinétique turbulente L'équation liée à l'évolution de $\bar{k}$ est obtenue en soustrayant les équations moyennées aux équations de Navier-Stokes, c'est-à-dire en soustrayant l'équation (4.6) à l'équation (4.4) et en soustrayant l'équation (4.8) à l'équation (4.5). Ainsi, les équations suivantes sont obtenues :

$$\frac{\partial(\phi u'_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (4.16)$$

$$\rho \left[\phi \frac{\partial u'_i}{\partial t} + \frac{\partial(\phi(u_i u_j - \bar{u}_i \bar{u}_j - \overline{u'_i u'_j}))}{\partial x_j} \right] = -\phi \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \frac{\partial(\phi \tau'_{ij})}{\partial x_j} - \beta_{ij} u_j + \bar{\beta}_{ij} \bar{u}_j + \overline{\beta'_{ij} u'_j} \quad (4.17)$$

Remarque : p' fait référence ici à la partie fluctuante de la pression.

Les termes $u_i u_j$ et $\beta_{ij} u_j$ sont développés comme étant :

$$u_i u_j = (\bar{u}_i + u'_i)(\bar{u}_j + u'_j) = \bar{u}_i \bar{u}_j + \bar{u}_i u'_j + \bar{u}_j u'_i + u'_i u'_j \quad (4.18)$$

$$\beta_{ij} u_j = (\bar{\beta}_{ij} + \beta'_{ij})(\bar{u}_j + u'_j) = \bar{\beta}_{ij} \bar{u}_j + \bar{\beta}_{ij} u'_j + \bar{u}_j \beta'_{ij} + \beta'_{ij} u'_j \quad (4.19)$$

En introduisant ces expressions dans l'équation (4.17), celle-ci devient alors :

$$\rho \left[\phi \frac{\partial u'_i}{\partial t} + \frac{\partial(\phi(u'_i \bar{u}_j + \bar{u}_i u'_j + u'_i u'_j - \overline{u'_i u'_j}))}{\partial x_j} \right] = -\phi \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \frac{\partial(\phi \tau'_{ij})}{\partial x_j} - \beta'_{ij} u'_j - \beta'_{ij} \bar{u}_j - \bar{\beta}_{ij} u'_j + \overline{\beta'_{ij} u'_j} \quad (4.20)$$

L'équation précédente est multipliée par u'_i et l'équation (4.16) est utilisée.

$$\begin{aligned} \rho \left[\phi \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{u'_i u'_i}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\phi u'_i u'_i}{2} \bar{u}_j \right) + \phi u'_i u'_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\phi u'_i u'_i}{2} u'_j \right) - u'_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \overline{u'_i u'_j}) \right] \\ = -\phi u'_i \frac{\partial p'}{\partial x_i} + u'_i \frac{\partial(\phi \tau'_{ij})}{\partial x_j} - \beta'_{ij} u'_j u'_i - \beta'_{ij} \bar{u}_j u'_i - \bar{\beta}_{ij} u'_i u'_j + \overline{\beta'_{ij} u'_j} u'_i \end{aligned} \quad (4.21)$$

En utilisant l'égalité suivante :

$$\frac{\partial(\phi \tau'_{ij})}{\partial x_j} = \frac{\partial(2\phi \mu d'_{d,ij})}{\partial x_j},$$

l'équation précédente devient :

$$\begin{aligned} \rho \left[\phi \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{u'_i u'_i}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\phi u'_i u'_i}{2} \bar{u}_j \right) + \phi u'_i u'_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\phi u'_i u'_i}{2} u'_j \right) - u'_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \overline{u'_i u'_j}) \right] \\ = -\phi u'_i \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\phi \mu d'_{d,ij} u'_i) - 2\phi \mu d'_{d,ij} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \\ - \beta'_{ij} u'_j u'_i - \beta'_{ij} \bar{u}_j u'_i - \bar{\beta}_{ij} u'_i u'_j + \overline{\beta'_{ij} u'_j} u'_i \end{aligned} \quad (4.22)$$

L'opérateur de moyenne temporelle est appliqué sur l'équation (4.22), la définition de l'énergie cinétique turbulente (4.15) est utilisée ainsi que l'équation (4.16). Avec tout ceci, l'équation prend la forme suivante.

$$\begin{aligned} \rho \left[\phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \bar{k} \bar{u}_j) + \phi \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \frac{\overline{u'_i u'_i}}{2} u'_j) \right] \\ = -\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{u'_i \phi p'}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\phi \mu \overline{d'_{d,ij} u'_i}) - 2\phi \mu \overline{d'_{d,ij}} \frac{\partial \overline{u'_i}}{\partial x_j} \\ - \overline{\beta'_{ij} u'_i u'_j} - \overline{\beta'_{ij} u'_i \bar{u}_j} - \overline{\beta_{ij} \bar{u}'_i u'_j} \end{aligned} \quad (4.23)$$

Les termes $\overline{\beta'_{ij} u'_i u'_j}$ et $\overline{\beta'_{ij} u'_i \bar{u}_j}$ ne sont pas modélisés dans le cadre de ce mémoire afin de simplifier la modélisation. L'équation précédente peut se réécrire comme :

$$\begin{aligned} \rho \left[\phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \bar{k} \bar{u}_j) \right] = & -\rho \phi \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi \overline{u'_i p'}) \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(2\mu \phi \overline{d'_{d,ij} u'_i} - \overline{(\rho \phi \frac{u'_i u'_i}{2}) u'_j} \right) \\ & - 2\phi \mu \overline{d'_{d,ij} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} - \overline{\beta'_{ij} u'_i u'_j} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Dans l'équation (4.24), certains termes doivent être modélisés et le sont de la manière suivante :

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \bar{\sigma}_{ij}^t, \quad (4.25a)$$

$$2\mu \overline{d'_{d,ij} u'_i} - \overline{(p' + \rho \frac{u'_i u'_i}{2}) u'_j} = (\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j}, \quad (4.25b)$$

$$2\mu \overline{d'_{d,ij} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} = \rho \bar{\epsilon}. \quad (4.25c)$$

L'équation (4.25c) est la définition du terme $\bar{\epsilon}$, le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Il s'agit donc du terme de destruction de l'énergie cinétique turbulente par le cisaillement.

En introduisant les égalités précédemment mentionnées dans l'équation (4.24), en divisant l'équation par ρ et en se rappelant qu'il a été déduit que ϕ n'est pas une fonction dépendant du temps au vu des différentes hypothèses émises, l'équation (4.24) devient :

$$\left[\phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \bar{k} \bar{u}_j) \right] = \phi \frac{\bar{\sigma}_{ij}^t}{\rho} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \phi \bar{\epsilon} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right) + \overline{\beta'_{ij}} \frac{\bar{\sigma}_{ij}^t}{\rho^2} \quad (4.26)$$

La signification de chaque terme présent dans l'équation de bilan de l'énergie cinétique turbulente est explicitée dans le tableau 4.1.

Le terme de contraintes additionnelles liées à la turbulence $\bar{\sigma}_{ij}^t$ peut être développé similairement au terme des contraintes visqueuses σ_{ij}^v : une partie sphérique et une partie déviatoire. Cette décomposition est donnée aux équations (4.12) et (4.13).

$$\left[\phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \bar{k} \bar{u}_j) \right] = \left(\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\overline{\beta'_{ij}}}{\rho} \right) (2\nu_t \overline{d_{d,ij}} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij}) - \phi \bar{\epsilon} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right) \quad (4.27)$$

$\phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial t}$	Variation dans le temps de $\bar{k}$
$\frac{\partial}{\partial x_j}(\phi \bar{k} \bar{u}_j)$	Transport de $\bar{k}$ par convection
$\phi \frac{\bar{\sigma}_{ij}^t}{\rho} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$	Terme de production de $\bar{k}$
$-\phi \bar{\epsilon}$	Terme dissipatif de $\bar{k}$
$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right)$	Terme diffusif de $\bar{k}$
$\bar{\beta}_{ij} \frac{\bar{\sigma}_{ij}^t}{\rho^2}$	Terme supplémentaire de production de $\bar{k}$ par la force de traînée

TABLE 4.1 – Différents termes de l'équation de l'énergie cinétique turbulente (4.26).

L'équation de transport liée à la variable $\bar{\epsilon}$ est modélisée par analogie dimensionnelle de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente :

$$\begin{aligned}
\left[\phi \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\phi \bar{\epsilon} \bar{u}_j) \right] = & \left[\left(C_1 \phi \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + C_2 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\rho} \right) \left(2\nu_t \bar{d}_{d,ij} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \right] \\
& - C_3 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \phi \bar{\epsilon} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right)
\end{aligned} \tag{4.28}$$

où C_1 , C_2 , C_3 , σ_k et σ_ϵ sont des valeurs fixes. Les valeurs numériques standards de ces constantes sont données par *Jones et Launder (1975)* : $C_1 = 1.44$, $C_3 = 1.92$, $\sigma_k = 1$ et $\sigma_\epsilon = 1.3$. Le terme lié à la présence du milieu poreux est considéré comme étant un terme additionnel de production de $\bar{\epsilon}$ dans les études *Chan et al. (2007)* et *Lien et al. (2007)*. Par conséquent, le coefficient C_2 est identique au coefficient C_1 [14, 40]. La signification de chaque terme présent dans l'équation de bilan du taux de dissipation l'énergie cinétique turbulente est explicitée dans le tableau 4.2.

$\phi \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t}$	Variation dans le temps de $\bar{\epsilon}$
$\frac{\partial}{\partial x_j}(\phi \bar{\epsilon} \bar{u}_j)$	Transport de $\bar{\epsilon}$ par convection
$\left(C_1 \phi \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + C_2 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\rho} \right) \left(2\nu_t \bar{d}_{d,ij} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right)$	Terme de production de $\bar{\epsilon}$
$-C_3 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \phi \bar{\epsilon}$	Terme dissipatif de $\bar{\epsilon}$
$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right)$	Terme diffusif de $\bar{\epsilon}$

TABLE 4.2 – Différents termes de l'équation du taux de dissipation (4.28).

Le modèle $k - \epsilon$ standard suppose que la viscosité effective de turbulence est égale à :

$$\nu_t = C_\nu \left(\frac{\overline{k}^2}{\overline{\epsilon}} \right) \quad (4.29)$$

où C_ν est une constante déterminée expérimentalement : $C_\nu = 0.09$.

Adimensionnalisation et approximation à faible nombre de Mach

L'adimensionnalisation des équations moyennées de quantité de mouvement, de bilan d'énergie cinétique turbulente et de bilan du taux de dissipation suit le même principe d'adimensionnalisation que celui détaillé à la section 2.2.3 pour l'adimensionnalisation du modèle de dispersion laminaire. La non dimensionnalisation des variables supplémentaires et non introduites précédemment dans les équations adimensionnelles est regroupée dans le tableau 4.3. Les variables déjà utilisées auparavant sont adimensionnalisées de la même façon.

Variable	Adimensionnalisation
k	$\hat{k} = \frac{k}{u_r^2}$
ϵ	$\hat{\epsilon} = \frac{\epsilon L_r^2}{u_r^2 \nu_r}$
ν	$\hat{\nu} = \frac{\nu}{\nu_r}$
ν_t	$\hat{\nu}_t = \frac{\nu_t}{\nu_r}$
β	$\hat{\beta} = \frac{\beta L_r}{\rho_r u_r}$
p	$\hat{p} = \frac{p}{p_r}$

TABLE 4.3 – Adimensionnalisation des variables intervenant dans les équations de conservation d'un écoulement turbulent. Ce tableau complète le tableau 2.1.

Les étapes détaillées pour développer les formes adimensionnelles de l'équation moyennée de quantité de mouvement et des deux équations du modèle de fermeture sont reprises dans l'annexe B. Les variables intervenant dans les équations dans la suite de cette section sont sous leur forme non dimensionnelle.

Équation moyennée de quantité de mouvement Le terme fluctuant de traînée $\overline{\beta'_{ij} u'_j}$ n'est pas modélisé et dès lors négligé. En utilisant la définition du nombre de Reynolds Re , l'équation (4.10) prend la forme adimensionnelle suivante :

$$\rho \left[\phi \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\phi \overline{u}_i \overline{u}_j)}{\partial x_j} \right] = -\phi \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \frac{1}{Re} (\mu + \mu_t) \overline{d}_{d_{ij}} - \frac{2}{3} \rho \phi \overline{k} \delta_{ij} \right) - \overline{\beta}_{ij} \overline{u}_j \quad (4.30)$$

Équation de bilan de l'énergie cinétique turbulente L'équation (4.27) est adimensionnalisée en utilisant la définition du nombre de Reynolds.

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \bar{k} \bar{u}_j) = & \left(\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\rho} \right) \left(\frac{2}{Re} \nu_t \overline{d_{d,ij}} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \\ & - \frac{1}{Re} \phi \bar{\epsilon} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (4.31)$$

Équation de bilan du taux de dissipation L'équation (4.28) est reprise et adimensionnalisée à son tour.

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \bar{\epsilon} \bar{u}_j) = & \left(C_1 \phi \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + C_2 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\rho} \right) \left(\frac{2}{Re} \nu_t \overline{d_{d,ij}} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \\ & - \frac{1}{Re} C_3 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \phi \bar{\epsilon} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (4.32)$$

Finalement, l'équation (4.29) qui modélise la viscosité turbulente dans le modèle $k - \epsilon$ standard doit aussi prendre une forme non dimensionnelle :

$$\nu_t = C_\nu Re^2 \left(\frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \right) \quad (4.33)$$

4.1.4 Traitement de la paroi

La zone proche paroi est une zone dans laquelle la turbulence est plus faible, on parle souvent dans la littérature de zone bas Reynolds. Le modèle $k - \epsilon$ étant un modèle adapté à de grands nombres de Reynolds, il est donc nécessaire de corriger les résultats obtenus pour cette zone. Un moyen d'accomplir cela est de modifier le modèle utilisé par un modèle appelé *bas Reynolds*. Les deux modèles bas Reynolds les plus utilisés sont ceux de *Launder and Sharma* et *Chien*. Nous avons choisi le modèle de *Chien* pour éviter les opérateurs de type racine carrée, difficiles à manipuler numériquement. Le modèle consiste à ajouter un terme dans chacune des deux équations du modèle (D et E) ainsi que des fonctions d'amortissement pour certains termes de l'équation bilan du taux de dissipation et pour la définition de la viscosité turbulente. Le système d'équations obtenus avec les équations (4.31), (4.32) et (4.33) prend la forme suivante après introduction du modèle bas Reynolds.

Équation de bilan de l'énergie cinétique turbulente

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \bar{k} \bar{u}_j) = & \left(\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\rho} \right) \left(2 \frac{1}{Re} \nu_t \overline{d_{d,ij}} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \\ & - \frac{1}{Re} \phi \bar{\epsilon} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right) - D \end{aligned} \quad (4.34)$$

Équation de bilan du taux de dissipation

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \bar{\epsilon} \bar{u}_j) = & \left(C_1 f_1 \phi \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + C_2 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\rho} \right) \left(2 \frac{1}{Re} \nu_t \overline{d_{d,ij}} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \\ & - \frac{1}{Re} C_3 f_3 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \phi \bar{\epsilon} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right) - E \end{aligned} \quad (4.35)$$

Définition de la viscosité turbulente

$$\nu_t = C_\nu f_\mu Re^2 \left(\frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \right) \quad (4.36)$$

Les termes D et E sous forme adimensionnelle sont repris ci-dessous. Leur adimensionnalisation est détaillée dans l'annexe B.

$$D = \frac{2\phi \nu \bar{k}}{Re y^2} \quad (4.37)$$

$$E = \frac{2\phi \nu \bar{\epsilon}}{Re y^2} \exp(-0.5\sqrt{Re}y^+) \quad (4.38)$$

Les fonctions d'amortissement proposées par *Chien* sont détaillées dans les égalités (4.39). Le terme de production n'est pas amorti. Cependant, le terme de dissipation et la viscosité turbulente sont multipliés par des fonctions exponentielles.

$$f_1 = 1 \quad (4.39a)$$

$$f_3 = 1 - 0.22 \exp \left(- \left(\frac{Re_t}{6} \right)^2 \right) \quad (4.39b)$$

$$f_\mu = 1 - \exp(-0.0115y^+) \quad (4.39c)$$

Dans ces expressions apparaissent deux termes dont la forme adimensionnelle est reprise ci-dessous :

$$Re_t = Re \frac{\bar{k}^2}{\nu \bar{\epsilon}} \quad (4.40)$$

$$y^+ = \sqrt{Re} \frac{u_\tau y}{\nu} \quad \text{avec} \quad u_\tau = \sqrt{\nu \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right|_{y=0}}. \quad (4.41)$$

4.2 Modèle mathématique de dispersion turbulente

4.2.1 Développement du modèle de dispersion

L'équation de dispersion développée précédemment pour le cas laminaire doit être moyennée en appliquant l'opérateur de moyenne temporelle afin d'obtenir l'équation de dispersion de l'écoulement moyen turbulent. Le développement de cette nouvelle équation

est fait en partant de l'équation dimensionnelle (2.29) :

$$\rho\phi\frac{\partial}{\partial t}(Y_p) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\phi u_i Y_p) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\phi\rho\mathcal{D}_{ij}\frac{\partial Y_p}{\partial x_j}\right) + \phi\mathcal{R}$$

L'opérateur de moyenne temporelle est appliqué à l'équation précédente :

$$\rho\phi\frac{\partial}{\partial t}(\overline{Y_p}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\phi\overline{u_i Y_p}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\phi\rho\mathcal{D}_{ij}\frac{\partial \overline{Y_p}}{\partial x_j}\right) + \phi\mathcal{R} \quad (4.42)$$

En utilisant la propriété (4.3f) pour le deuxième membre du terme de droite, l'équation devient :

$$\rho\phi\frac{\partial}{\partial t}(\overline{Y_p}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\phi\overline{u_i Y_p}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\phi\rho\mathcal{D}_{ij}\frac{\partial \overline{Y_p}}{\partial x_j}\right) + \phi\mathcal{R} - \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\phi\overline{u'_i Y'_p}) \quad (4.43)$$

Le terme additionnel qui apparaît après avoir moyennée l'équation est modélisé comme étant équivalent à :

$$-\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\phi\overline{u'_i Y'_p}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\phi\rho\mathcal{D}_t\frac{\partial \overline{Y_p}}{\partial x_i}\right) \quad (4.44)$$

En introduisant cette modélisation dans l'équation (4.43), elle prend la forme suivante :

$$\rho\phi\frac{\partial}{\partial t}(\overline{Y_p}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\phi\overline{u_i Y_p}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\phi\rho\left(\mathcal{D}_{ij}\frac{\partial \overline{Y_p}}{\partial x_j} + \mathcal{D}_t\frac{\partial \overline{Y_p}}{\partial x_i}\right)\right) + \phi\mathcal{R} \quad (4.45)$$

4.2.2 Adimensionnalisation de l'équation de dispersion

L'adimensionnalisation de l'équation (4.45) est identique à ce qui a été détaillé dans la section 2.2.3 pour adimensionnaliser les différentes variables présentes dans l'équation laminaire de dispersion des polluants. Le nouveau coefficient turbulent de dispersion $\mathcal{D}_t$ est adimensionnalisé de façon similaire à $\mathcal{D}$:

$$\widehat{\mathcal{D}}_t = \frac{\mathcal{D}_t}{\mathcal{D}_r} \quad (4.46)$$

Ainsi, la forme non-dimensionnelle de l'équation (4.45) pour laquelle l'approximation à faible nombre de Mach est appliquée est la suivante :

$$\rho\phi\left(\frac{\partial \overline{Y_p}}{\partial t} + \overline{u_i}\frac{\partial \overline{Y_p}}{\partial x_i}\right) = \frac{1}{Re Sc}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho\phi\left(\mathcal{D}_{ij}\frac{\partial \overline{Y_p}}{\partial x_j} + \mathcal{D}_t\frac{\partial \overline{Y_p}}{\partial x_i}\right)\right) + \phi\mathcal{R} \quad (4.47)$$

Remarque : Les variables sont non dimensionnelles et font référence à l'ordre zéro du développement en séries de la perturbation θ appliquée dans le cadre de l'approximation à faible nombre de Mach. A nouveau, les variables sont non dimensionnelles dans la suite du travail.

4.3 Implémentation numérique

4.3.1 Procédure de résolution

La méthode prédicteur-correcteur est aussi utilisée dans le cas turbulent. Les valeurs des variables sont dès lors calculées au moins deux fois pour chaque pas de temps ; dans l'étape prédicteur et correcteur.

Afin de trouver le champ de vitesse moyen dans un écoulement turbulent, il faut résoudre 3 équations : l'équation moyennée de quantité de mouvement, l'équation de bilan de l'énergie cinétique turbulente et l'équation de bilan du taux de dissipation. La résolution du problème dynamique passe de la résolution de deux équations pour l'écoulement laminaire à la résolution d'un système de quatre équations pour l'écoulement turbulent. Toutes les variables d'intérêt dans ces quatre équations bilans ($\bar{u}$, $\bar{v}$, $\bar{k}$ et $\bar{\epsilon}$) dépendent les unes des autres. Pour rappel, l'introduction des variables $\bar{k}$ et $\bar{\epsilon}$ permet la modélisation la viscosité turbulente ν_t qui intervient dans les équations URANS. Cette dépendance réciproque des variables engendre la nécessité d'une résolution de la vitesse par itération. Une nouvelle boucle, nommée **boucle nu_t**, est introduite dans l'étape prédicteur et correcteur. Le schéma à la figure 4.2 représente l'ordre et l'agencement des calculs des différentes variables.

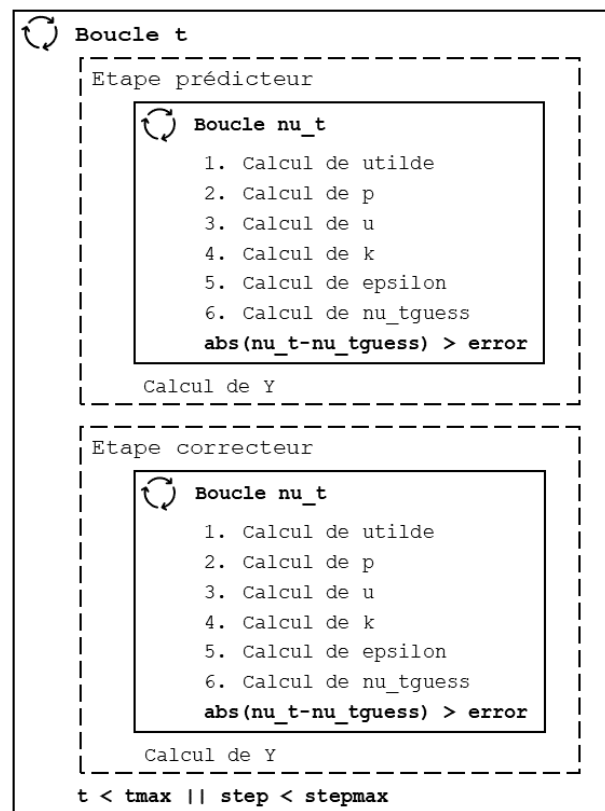


FIGURE 4.2 – Représentation schématique des étapes de résolution des équations de conservation pour le calcul de la concentration d'un scalaire passif dans un écoulement turbulent moyen.

A chaque itération au sein de la **boucle nu_t** sont calculées toutes les variables intervenant dans le calcul de la vitesse. En commençant par la résolution du bilan de quantité

de mouvement qui fait intervenir le calcul d'une vitesse intermédiaire $\tilde{\mathbf{u}}$ et de la pression comme dans le cas laminaire (voir section 2.3.1). Ensuite, les équations bilan couplées des variables turbulentes sont résolues. La dernière étape consiste à calculer la viscosité turbulente. Le nombre d'itérations n'est pas fixé, les passages dans la boucle s'arrêtent lorsque la convergence vers une solution est atteinte. La viscosité turbulente est la variable d'itération et permet de quantifier la convergence. En d'autres mots, lorsque la différence entre la viscosité calculée à l'itération précédente et la dernière valeur de viscosité calculée est plus élevée que l'erreur acceptée, une nouvelle itération a lieu.

Sur la figure 4.2, il peut être remarqué que le problème de dispersion est à nouveau découplé des équations dynamiques. La résolution du problème de dispersion a donc lieu après la résolution du système d'équations permettant d'obtenir des valeurs de vitesses adéquates.

La suite de cette section reprend la méthode de discrétisation du problème dynamique et de dispersion turbulente. Les équations à résoudre sont développées chacune à leur tour pour l'étape prédicteur et correcteur.

4.3.2 Discrétisation de l'équation moyennée de quantité de mouvement

La discrétisation spatiale de l'équation (4.30) est identique à celle présentée et détaillée dans la section 2.3.2. La discrétisation temporelle présente quelques changements.

Prédicteur La discrétisation temporelle de l'équation pour le pas prédicteur est la suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\rho\phi\tilde{\mathbf{u}} - \rho\phi\bar{\mathbf{u}}^{(n)}}{\Delta t} &= \frac{3}{2}Res_{\bar{\mathbf{u}}}^{(n)} - \frac{1}{2}Res_{\bar{\mathbf{u}}}^{(n-1)} \\ &+ \frac{1}{2}\mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi(\mu + \tilde{\mu}_t) \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial y} \right) + \frac{1}{2}\mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi(\mu + \mu_t^{(n)}) \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}^{(n)}}{\partial y} \right) \\ &- \bar{\beta}^{(n)} \left(\frac{1}{2}\bar{\mathbf{u}} + \frac{1}{2}\bar{\mathbf{u}}^{(n)} \right). \end{aligned} \quad (4.48)$$

Les termes contenus dans $Res_{\bar{\mathbf{u}}}$ et $Res_{\bar{\mathbf{v}}}$ sont les suivants :

$$\begin{aligned} Res_{\bar{\mathbf{u}}} &= -\nabla \cdot (\rho\phi\bar{\mathbf{u}}\bar{\mathbf{u}}) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{2}{3}\rho\phi k \right) \\ &+ \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left((\mu + \mu_t)\phi \left(2\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} - \frac{2}{3}\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((\mu + \mu_t)\phi \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.49a)$$

$$\begin{aligned} Res_{\bar{\mathbf{v}}} &= -\nabla \cdot (\rho\phi\bar{\mathbf{u}}\bar{\mathbf{v}}) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{2}{3}\rho\phi k \right) \\ &+ \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left((\mu + \mu_t)\phi \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left((\mu + \mu_t)\phi \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.49b)$$

Correcteur La discrétisation temporelle de l'équation pour le pas correcteur est la suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\rho\phi\bar{\mathbf{u}} - \rho\phi\bar{\mathbf{u}}^{(n)}}{\Delta t} &= \frac{1}{2}Res_{\bar{\mathbf{u}}}^{(*)} + \frac{1}{2}Res_{\bar{\mathbf{u}}}^{(n)} \\ &+ \frac{1}{2}\mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi(\mu + \tilde{\mu}_t) \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial y} \right) + \frac{1}{2}\mathbf{c} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\phi(\mu + \mu_t^{(n)}) \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}^{(n)}}{\partial y} \right) \\ &- \bar{\beta}^{(*)} \left(\frac{1}{2}\bar{\mathbf{u}} + \frac{1}{2}\bar{\mathbf{u}}^{(n)} \right). \end{aligned} \quad (4.50)$$

4.3.3 Discrétisation de l'équation de bilan de l'énergie cinétique turbulente

Prédicteur La discrétisation temporelle de l'équation (4.34) pour le pas prédicteur est la suivante :

$$\begin{aligned} \phi \left(\frac{\bar{k}^{(*)} - \bar{k}^{(n)}}{\Delta t} \right) &= \frac{3}{2}Res_{\bar{k}}^{(n)} - \frac{1}{2}Res_{\bar{k}}^{(n-1)} - \frac{2}{3\rho}(\bar{\beta}_{11}^{(n)} + \bar{\beta}_{22}^{(n)}) \left(\frac{1}{2}\bar{k}^{(*)} + \frac{1}{2}\bar{k}^{(n)} \right) \\ &- \frac{1}{Re} \phi \frac{\bar{\epsilon}^{(n)}}{\bar{k}^{(n)}} \left(\frac{1}{2}\bar{k}^{(*)} + \frac{1}{2}\bar{k}^{(n)} \right) + \frac{1}{2} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho\phi \left(\nu + \frac{\nu_t^{(*)}}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}^{(*)}}{\partial y} \right) \\ &+ \frac{1}{2} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho\phi \left(\nu + \frac{\nu_t^{(n)}}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}^{(n)}}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (4.51)$$

Le terme $Res_{\bar{k}}$ regroupe les termes suivants :

$$\begin{aligned} Res_{\bar{k}} &= -\phi\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{k} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x} \right) + \frac{2}{Re} \phi \nu_t (\nabla \bar{\mathbf{u}} : \bar{\mathbf{d}}_d) \\ &- \frac{2}{3} \bar{k} \phi (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}) + \frac{2}{Re} \frac{\nu_t}{\rho} (\bar{\mathbf{d}}_d : \bar{\beta}^T) - \frac{2\phi}{Re} \frac{\nu \bar{k}}{y^2} \end{aligned} \quad (4.52)$$

Le terme de dissipation a été discrétisé par une méthode pseudo-implicite proposée par *Patankar* [18]. Un exemple simple est repris ici pour expliciter en quoi ce schéma consiste.

$$\frac{d\psi}{dt} = -D(\psi) \quad (4.53)$$

où $D(\psi)$ est le terme de destruction qui est toujours positif.

La discrétisation de cette équation selon la méthode pseudo-implicite choisie est la suivante :

$$\frac{\psi^{(n+1)} - \psi^{(n)}}{\Delta t} = - \frac{D(\psi^{(n)}) \psi^{(n+1)}}{\psi^{(n)}} \quad (4.54a)$$

$$\psi^{(n+1)} = \frac{\psi^{(n)}}{1 + \Delta t \frac{D(\psi^{(n)})}{\psi^{(n)}}} \quad (4.54b)$$

Cette méthode garantit que $\psi^{(n+1)}$ soit toujours positif lorsque le $\psi^{(n)}$ l'est. En ayant choisi cette méthode de discrétisation pour le terme destructif, l'objectif était d'assurer la positivité de $\bar{k}$ et éviter que des valeurs négatives apparaissent lors des calculs.

Correcteur La discrétisation temporelle de l'équation (4.34) pour le pas correcteur est la suivante :

$$\begin{aligned} \phi \left(\frac{\bar{k}^{(n+1)} - \bar{k}^{(n)}}{\Delta t} \right) &= \frac{1}{2} Res_k^{(*)} + \frac{1}{2} Res_k^{(n)} - \frac{2}{3\rho} (\bar{\beta}_{11}^{(*)} + \bar{\beta}_{22}^{(*)}) \left(\frac{1}{2} \bar{k}^{(n+1)} + \frac{1}{2} \bar{k}^{(n)} \right) \\ &\quad - \frac{1}{Re} \phi \frac{\bar{\epsilon}^{(n)}}{\bar{k}^{(n)}} \left(\frac{1}{2} \bar{k}^{(n+1)} + \frac{1}{2} \bar{k}^{(n)} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \phi \left(\nu + \frac{\nu_t^{(n+1)}}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}^{(n+1)}}{\partial y} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \phi \left(\nu + \frac{\nu_t^{(n)}}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}^{(n)}}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (4.55)$$

Discrétisation spatiale La discrétisation spatiale reste la même que celle décrite à la section 2.3.2 pour tous les termes à l'exception du terme convectif.

Le terme convectif est traité avec un schéma explicite décentré amont d'ordre 1 ou autrement dit avec un *first order upwind scheme*. Dans la section 2.3.2, le terme convectif est discrétisé au moyen d'un schéma centré. L'utilisation de ce type de schéma pour l'équation de $\bar{k}$ est à l'origine de valeurs négatives pour $\bar{k}$ ce qui n'a aucun sens physique et il mène rapidement à la divergence de la solution. En effet, même en bloquant les valeurs possibles pour $\bar{k}$ à une valeur minimale de zéro, la solution continue à diverger. Ceci implique donc que l'instabilité n'est pas directement liée à la présence de négatifs mais qu'ils sont une des conséquences de la présence d'une instabilité numérique qui croit au cours de la simulation. La vitesse de convection dominant le coefficient de diffusion (grand nombre de Peclet c'est-à-dire $Pe \geq 2$) est la cause de cette instabilité [69]. Le terme convectif est développé dans l'équation suivante.

$$\text{Terme convectif} = \phi \bar{u} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x} + \phi \bar{v} \frac{\partial \bar{k}}{\partial y} \quad (4.56)$$

La convection dans la direction horizontale x ou dans la direction verticale y est discrétisée de la même manière. Par exemple, pour la convection dans la direction x :

$$\text{Si } \bar{u}_{i,j} < 0 : \quad \phi_{i,j} \bar{u}_{i,j} \frac{(\bar{k}_{i+1,j} - \bar{k}_{i,j})}{2r_i} \quad (4.57a)$$

$$\text{Si } \bar{u}_{i,j} \geq 0 : \quad \phi_{i,j} \bar{u}_{i,j} \frac{(\bar{k}_{i,j} - \bar{k}_{i-1,j})}{2r_i} \quad (4.57b)$$

L'utilisation d'un schéma décentré en amont a l'avantage, en plus d'être simple, de permettre une convergence de la solution. Néanmoins, ce schéma est à l'origine d'erreurs qui peuvent s'avérer être importantes lorsque l'écoulement n'est pas aligné avec les cellules qui constituent le maillage. En effet, ce type de schéma produit de la diffusion numérique. Un moyen de réduire cette diffusion est de réduire la taille du maillage [69]. Pour des calculs très précis d'écoulements, il ne s'agit pas du choix idéal. De nombreuses recherches se sont focalisées sur l'amélioration de ce schéma amont décentré. Cependant, dans le cadre de ce travail, celui-ci a été choisi tout en tenant en compte les inconvénients qu'il possède.

4.3.4 Discrétisation de l'équation de bilan du taux de dissipation

Prédicteur La discrétisation temporelle de l'équation (4.35) pour le pas prédicteur est la suivante :

$$\begin{aligned} \phi \left(\frac{\bar{\epsilon}^{(*)} - \bar{\epsilon}^{(n)}}{\Delta t} \right) &= \frac{3}{2} Res_{\bar{\epsilon}}^{(n)} - \frac{1}{2} Res_{\bar{\epsilon}}^{(n-1)} - \frac{2}{3\rho} C_2 (\bar{\beta}_{11}^{(n)} + \bar{\beta}_{22}^{(n)}) \left(\frac{1}{2} \bar{\epsilon}^{(*)} + \frac{1}{2} \bar{\epsilon}^{(n)} \right) \\ &\quad - \frac{1}{Re} \phi C_3 f_3^{(n)} \frac{\bar{\epsilon}^{(n)}}{\bar{k}^{(n)}} \left(\frac{1}{2} \bar{\epsilon}^{(*)} + \frac{1}{2} \bar{\epsilon}^{(n)} \right) + \frac{1}{2} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \phi \left(\nu + \frac{\nu_t^{(*)}}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}^{(*)}}{\partial y} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \phi \left(\nu + \frac{\nu_t^{(n)}}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}^{(n)}}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (4.58)$$

Le terme $Res_{\bar{\epsilon}}$ regroupe les termes suivants :

$$\begin{aligned} Res_{\bar{\epsilon}} &= -\phi \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\epsilon} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x} \right) + \frac{2}{Re} C_1 f_1 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \phi \nu_t (\nabla \bar{\mathbf{u}} : \bar{\mathbf{d}}_d) \\ &\quad - \frac{2}{3} C_1 f_1 \bar{\epsilon} \phi (\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}) - \frac{2\phi \nu \bar{\epsilon}}{Re y^2} \exp(-0.5\sqrt{Re} y^+) \\ &\quad + \frac{2}{Re} C_2 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \nu_t (\bar{\beta} : \bar{\mathbf{d}}_d^T) \end{aligned} \quad (4.59)$$

Correcteur La discrétisation temporelle de l'équation (4.35) pour le pas correcteur est la suivante :

$$\begin{aligned}
\phi\left(\frac{\bar{\epsilon}^{(n+1)} - \bar{\epsilon}^{(n)}}{\Delta t}\right) &= \frac{1}{2}Res_{\bar{\epsilon}}^{(*)} + \frac{1}{2}Res_{\bar{\epsilon}}^{(n)} - \frac{2}{3\rho}C_2(\bar{\beta}_{11}^{(*)} + \bar{\beta}_{22}^{(*)})\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}^{(n+1)} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^{(n)}\right) \\
&\quad - \frac{1}{Re}\phi C_3 f_3^{(n)} \frac{\bar{\epsilon}^{(n)}}{\bar{k}^{(n)}}\left(\frac{1}{2}\bar{\epsilon}^{(n+1)} + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}^{(n)}\right) \\
&\quad + \frac{1}{2}\frac{1}{Re}\frac{\partial}{\partial y}\left(\rho\phi\left(\nu + \frac{\nu_t^{(n+1)}}{\sigma_\epsilon}\right)\frac{\partial\bar{\epsilon}^{(n+1)}}{\partial y}\right) \\
&\quad + \frac{1}{2}\frac{1}{Re}\frac{\partial}{\partial y}\left(\rho\phi\left(\nu + \frac{\nu_t^{(n)}}{\sigma_\epsilon}\right)\frac{\partial\bar{\epsilon}^{(n)}}{\partial y}\right)
\end{aligned} \tag{4.60}$$

Discrétisation spatiale La discrétisation spatiale de l'équation de bilan du taux de dissipation est identique à celle de l'équation de bilan de l'énergie cinétique turbulente présentée dans la section 4.3.3.

4.3.5 Discrétisation de l'équation de dispersion turbulente

La discrétisation spatiale de l'équation (4.47) est identique à celle présentée dans la section 2.3.2. La discrétisation temporelle comporte quelques modifications par rapport au cas laminaire de par l'ajout d'un nouveau terme.

Prédicteur La discrétisation temporelle pour l'étape prédicteur est la suivante :

$$\begin{aligned}
\rho\phi\left(\frac{\bar{Y}_p^{(*)} - \bar{Y}_p^{(n)}}{\Delta t}\right) &= \frac{3}{2}Res_{\bar{Y}_p}^{(n)} - \frac{1}{2}Res_{\bar{Y}_p}^{(n-1)} \\
&\quad + \frac{1}{Re Sc}\frac{\partial}{\partial y}\left(\rho\phi(\mathcal{D}_{yy} + \mathcal{D}_t^{(*)})\left(\frac{1}{2}\frac{\partial\bar{Y}_p^{(*)}}{\partial y} + \frac{1}{2}\frac{\partial\bar{Y}_p^{(n)}}{\partial y}\right)\right)
\end{aligned} \tag{4.61}$$

Le terme $Res_{\bar{Y}_p}$ regroupe les termes traités suivants :

$$Res_{\bar{Y}_p} = -\rho\phi\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla\bar{Y}_p + \frac{1}{Re Sc}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho\phi(\mathcal{D}_{xx} + \mathcal{D}_t)\frac{\partial\bar{Y}_p}{\partial x}\right) + \phi\mathcal{R} \tag{4.62}$$

Correcteur La discrétisation temporelle pour l'étape correcteur est la suivante :

$$\begin{aligned}
\rho\phi\left(\frac{\bar{Y}_p^{(n+1)} - \bar{Y}_p^{(n)}}{\Delta t}\right) &= \frac{1}{2}Res_{\bar{Y}_p}^{(*)} + \frac{1}{2}Res_{\bar{Y}_p}^{(n)} \\
&\quad + \frac{1}{Re Sc}\frac{\partial}{\partial y}\left(\rho\phi(\mathcal{D}_{yy} + \mathcal{D}_t^{(n+1)})\left(\frac{1}{2}\frac{\partial\bar{Y}_p^{(n+1)}}{\partial y} + \frac{1}{2}\frac{\partial\bar{Y}_p^{(n)}}{\partial y}\right)\right)
\end{aligned} \tag{4.63}$$

Chapitre 5

Cas d'étude turbulent : dispersion de polluants dans un milieu urbain

La pollution de l'air est un sujet fortement étudié. Il est bien connu que la pollution a un impact sur l'environnement mais aussi sur la santé. Dans les villes, la population est plus dense et l'activité humaine est de très grande intensité. Dans les prochaines années, il est prévu que cette tendance à l'urbanisation continue et même qu'elle s'accélère. De nombreuses recherches sur la qualité de l'air dans les villes s'intéressent à l'étude de l'écoulement de l'air au-dessus et dans les villes ainsi qu'à la dispersion de gaz ou particules dans cet écoulement. Étudier la façon dont les polluants émis se répartissent dans l'air que nous respirons en ville et quel pourcentage s'échappe dans l'atmosphère s'avère donc être un sujet d'actualité. En effet, une meilleure compréhension de l'interaction ville-atmosphère permettrait de développer une meilleure gestion urbaine et qui plus est une gestion urbaine durable. En effet, rappelons-le, les villes produisent de manière concentrée de la pollution qui engendre des dégradations environnementales ainsi que des risques industriels et sanitaires [39]. Pour étudier cette interaction, la modélisation d'un écoulement turbulent au sein d'un milieu poreux est une option de simulation.

L'analyse se focalise sur deux types de polluants très présents en milieu urbain : le dioxyde de carbone (CO_2) et les particules fines (PM_{10}). Le dioxyde de carbone est principalement issu de la combustion de carburant fossile pour les transports, pour le chauffage des bâtiments et pour les activités industrielles. La présence de ce polluant en grande concentration a un impact environnemental important. Il contribue à l'accroissement de l'effet de serre et à une modification du climat. Les particules fines résultent aussi de la combustion fossile [21]. L'impact des particules fines sur la santé est conséquent. Les particules fines sont à l'origine d'irritation et d'altération de la fonction respiratoire chez les personnes sensibles. Elles s'associent facilement à des substances toxiques voire même cancérigènes telles que des métaux lourds et des hydrocarbures. Elles sont également officiellement reconnues comme un facteur contribuant à une augmentation de la mortalité pour causes respiratoires et cardio-vasculaires [1]. Deux des trois principales sources d'émission de ces deux polluants sont insérés dans les simulations réalisées : une industrie et des voitures. Il est évident que les émissions issues du transport ne comprennent pas uniquement les automobiles mais également les poids lourds et les transports en communs (train, bus, avion, ...), par exemple. Par simplification, seulement un certain nombre de voitures a été pris en compte.

Le milieu urbain est assimilé à un milieu poreux dont la porosité varie dans l'intervalle $\phi = [0.38, 0.82]$ [29]. Sa porosité est déterminée comme étant le rapport entre le volume étudié auquel on soustrait l'ensemble des éléments solides constituant un ville (bâtiments, arbres, voitures, monuments, ...) sur le volume total. La réalité d'une ville est telle qu'elle est constituée d'un ensemble d'éléments de géométries variables. Par l'approche macroscopique, la ville est considérée comme un milieu dont la porosité et la matrice solide sont homogènes en son sein.

Contrairement au compost, la ville ne peut pas être assimilée à un milieu isotrope. Par conséquent, les inclusions ne sont plus considérées comme sphériques comme cela a été fait dans le cas du compost mais elles sont remplacées par des inclusions cylindriques, géométrie proche de celle des bâtiments. La géométrie des inclusions solides du milieu poreux intervient dans le paramètre de traînée. La multitude de différentes géométries présentes a un impact direct et important sur la façon dont l'écoulement se comporte comme étudié par *Ricci et al.* [56]. En utilisant ce concept de milieu homogène pour l'ensemble de la ville, les détails de l'écoulement à l'échelle de la ville ne sont pas pris en compte. En effet, de nombreuses études s'intéressent par exemple à l'impact sur la dispersion des polluants qu'ont des grands bâtiments lorsqu'ils bordent de part et d'autre une rue étroite (*urban canyon street effect*). Les phénomènes à cette échelle ne sont pas modélisés ici.

L'impact des différents paramètres sur la dispersion des polluants tels que la porosité et le coefficient turbulent de dispersion sont analysés dans ce chapitre.

5.1 Paramètres de la simulation

5.1.1 Paramètres d'adimensionnalisation

Les paramètres de référence choisis pour l'adimensionnalisation sont similaires au cas laminaire. Les choix sont repris dans le tableau 5.1, accompagnés des valeurs pour le cas type.

Variable de référence	Notation	Choix	Valeur pour le cas type
Longueur	L_r	Hauteur du milieu poreux	60 [m]
Vitesse	u_r	Vitesse en amont au niveau du milieu poreux	1 [m/s]
Viscosité dynamique	ν_r	Viscosité dynamique de l'air	$1.56 \cdot 10^{-5}$ [m ² /s]
Densité	ρ_r	Densité de l'air	1.2 [kg/m ³]
Coefficient de diffusion	$\mathcal{D}_r$	Coefficient de diffusion du polluant étudié dans l'air	CO ₂ $1.47 \cdot 10^{-5}$ [m ² /s] PM ₁₀ $2.3 \cdot 10^{-12}$ [m ² /s]

TABLE 5.1 – Choix et valeurs des variables de référence nécessaires à l'adimensionnalisation des paramètres de la simulation turbulente.

Ces paramètres permettent de définir les deux nombres adimensionnels : Re et Sc . Le nombre de Reynolds pour le cas de référence vaut $3.846 \cdot 10^6$. Les nombres de Schimdt valent 1.06 et $6.78 \cdot 10^6$ pour le dioxyde de carbone et les particules fines respectivement.

5.1.2 Paramètres géométriques

Choix de modélisation du milieu urbain

Le milieu urbain est en réalité un milieu complexe à modéliser. Un schéma de la représentation choisie se trouve sur la figure 5.1. Il est simplifié dans ce travail par un milieu poreux homogène dans lequel les particules sont sous forme de cylindres verticaux dont la hauteur adimensionnelle est celle du milieu poreux, h . La taille des particules est spécifiée par le diamètre adimensionnel des cylindres, d_p . La géométrie des particules implique l'orthotropie du milieu. Dans le cas de cylindres, la force de traînée et la dispersion sont identiques dans les directions x et z mais différentes dans la direction verticale y .

Par choix, la ville occupe toute la longueur du domaine de calcul. Sa hauteur vaut un quart de la hauteur du domaine. Étant donné que la longueur de référence est la hauteur du milieu poreux, la hauteur adimensionnelle du milieu urbain est égale à l'unité. La longueur du domaine est prise à une valeur de 20 unités.

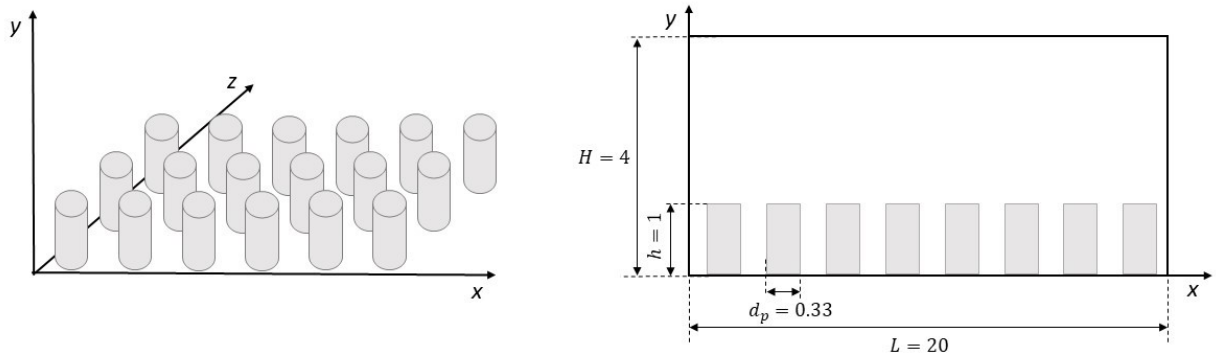


FIGURE 5.1 – Schéma de la représentation du milieu urbain et longueurs caractéristiques non dimensionnelles. Le schéma de droite est une représentation de la ville dans les deux dimensions de la simulation, c'est-à-dire une représentation du domaine de calcul.

Porosité

La porosité est le paramètre de densité de la ville. Selon *Hu et al (2012)* [29], la porosité d'un milieu urbain varie entre 0.38 et 0.82. La porosité choisie est de 0.6 pour le cas de référence. En d'autres mots, environ 40% de la superficie de la ville est occupée par des bâtiments.

5.1.3 Paramètres dynamiques

Paramètre de traînée

La force de traînée agissant sur le fluide au sein du milieu poreux est modélisée comme $\bar{\beta} \bar{\mathbf{u}}$. La variable $\bar{\beta}$ est une matrice 2×2 . Comme mentionné plus haut, le milieu est

orthotrope car il est composé de cylindres verticaux. Le paramètre de traînée est dès lors nul pour les termes hors diagonaux. Les termes diagonaux quant à eux sont non nuls dans le milieu poreux et différents dans les deux directions considérées. Pour déterminer les paramètres $\bar{\beta}_{11}$ et $\bar{\beta}_{22}$, il faut déterminer les expressions des forces de traînée par unité de volume dans leur direction respective étant donné que les forces de traînée par unité de volume sont directement liées au paramètre $\bar{\beta}$. Le paramètre adimensionnel prend la forme suivante présentée par *Papalexandris et Antoniadis (2016)* [3] :

$$\bar{\beta}_{11} = \frac{2}{\pi} C_D \rho \frac{1 - \phi}{d_p} |\bar{u}| \quad [/] \quad (5.1a)$$

$$\bar{\beta}_{22} = \frac{2.656}{\sqrt{Re}} \rho \frac{1 - \phi}{d_p} \sqrt{\frac{\mu \rho |\bar{v}|}{h}} \quad [/] \quad (5.1b)$$

où

- C_D est le coefficient de traînée
- d_p est le diamètre adimensionnel des cylindres considérés
- h est la hauteur adimensionnelle du domaine poreux (voir figure 5.1).

L'expression du paramètre $\bar{\beta}_{11}$ a été trouvée en déterminant la force de traînée par unité volume dans la direction horizontale. Celle-ci a été approximée via l'expression de la force de traînée par unité de longueur pour un écoulement 2D autour d'un cylindre multipliée par la hauteur h du cylindre et multipliée par le nombre de cylindres par unité de volume. Pour le coefficient $\bar{\beta}_{22}$, la force de traînée par unité volume dans la direction verticale est approximée comme étant la force de traînée générée par la friction d'un écoulement sur une plaque plane sur une distance h multipliée par le périmètre d'un cylindre et multipliée par le nombre de cylindres par unité de volume.

5.1.4 Paramètres de dispersion

Type de polluants

Les deux polluants traités sont le dioxyde de carbone, CO_2 et les particules fines dont le diamètre est inférieur à 10 microns, PM_{10} . Ces deux polluants peuvent être classifiés comme des polluants primaires et secondaires. Les polluants primaires sont directement émis par une source quelconque. Les polluants secondaires sont quant à eux les résultantes d'une réaction entre deux ou plusieurs composants dans l'atmosphère. Dans ce cas d'études, ne sont étudiés que les polluants primaires. Il est alors utile de définir quelles sources existantes dans un milieu urbain sont considérées.

Type de sources

Deux sources produisant du CO_2 et des PM_{10} dans une ville sont considérées : le transport routier et les industries.

L'industrie considérée est une raffinerie TOTAL belge située à Anvers. Cette dernière rejette aussi bien du CO_2 que des PM_{10} . Les données obtenues par l'*European Environment Agency* sont [20] :

$$\mathcal{R}_{\text{CO}_2} = 116.7 \text{ [kg/s]}$$

$$\mathcal{R}_{\text{PM}_{10}} = 6.21 \cdot 10^{-2} \text{ [kg/s]}$$

Les émissions industrielles sont représentées comme une source ponctuelle répartie sur quatre mailles de notre domaine.

Les voitures produisent également du CO_2 et des PM_{10} . La production de ces polluants par une voiture a été approximée :

$$\mathcal{R}_{\text{PM}_{10}} = 7.3 \cdot 10^{-7} \text{ [kg/s]}$$

$$\mathcal{R}_{\text{CO}_2} = 1.85 \cdot 10^{-3} \text{ [kg/s]}$$

Les émissions reprises ci-dessus sont des approximations des émissions lorsque le véhicule est en fonctionnement. Les émissions de particules sont obtenues grâce à *Ferm et Sjöberg (2015)* [22] qui proposent des facteurs d'émissions pour les particules fines sur base de mesures de trafic et d'émissions dans deux villes suédoises. Les facteurs d'émission sont donnés par véhicule. En ce qui concerne le dioxyde de carbone, le facteur d'émission choisi est basé sur des fiches techniques de véhicules récents et de taille moyenne [12, 13]. Il est supposé que les émissions ne proviennent que de ce type de véhicules (pas de poids lourds ou autres), avec une répartition égale entre des voitures diesel et essence. Il est aussi supposé que chaque citadin possédant une voiture roule en moyenne 1h par jour à une vitesse moyenne de 40 [km/h] dans la ville.

Les émissions du transport routier sont modélisées de façon très simplifiée : des sources ponctuelles placées à intervalles réguliers et immobiles. Chaque voiture est représentée par une source ponctuelle dans le domaine. Le fait de travailler en deux dimensions est limitant. Le réseau routier n'est pas modélisable dans le plan considéré. C'est pourquoi, les sources (voitures) sont réparties de façon homogène dans le bas du domaine.

Coefficients de diffusion

Le coefficient de diffusion du CO_2 dans l'air est [46] :

$$\mathcal{D}_{\text{CO}_2} = 1.47 \cdot 10^{-5} \text{ [m}^2/\text{s]}$$

Le coefficient de diffusion des PM_{10} dans l'air a été déterminé en utilisant l'équation de Stokes-Einstein [65] :

$$\mathcal{D}_{\text{PM}_{10}} = \frac{kT}{3\phi\mu d} \quad (5.2)$$

où k est la constante de Boltzmann, T est la température, μ la viscosité dynamique de l'air et d le diamètre de la particule en suspension dans l'air. Il est ainsi possible d'estimer que :

$$\mathcal{D}_{\text{PM}_{10}} = 2.3 \cdot 10^{-12} \text{ [m}^2/\text{s]}$$

Pour chaque polluant, les coefficients de diffusion dans l'air se trouvant dans un milieu poreux sont différents. En effet, la présence du milieu poreux impacte directement le

phénomène de diffusion. La relation entre le coefficient de diffusion dans le milieu poreux et le coefficient en absence de milieu poreux est [66] :

$$\frac{\mathcal{D}_{poreux}}{\mathcal{D}} = \frac{1}{\mathcal{T}} \quad (5.3)$$

où $\mathcal{T}$ est la tortuosité. Elle est définie comme le rapport entre le chemin tortueux réalisé par une particule (L_p) et la distance parcourue dans la direction étudiée (L_0).

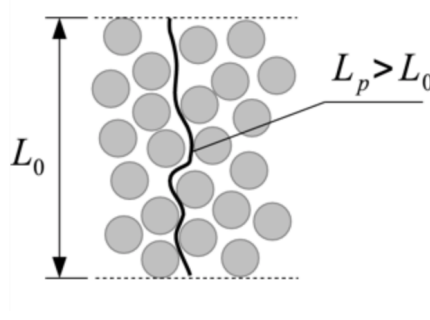


FIGURE 5.2 – Représentation 2D du chemin tortueux réalisé dans un milieu poreux dans le plan (x, z) . [63]

La diffusion dans le milieu poreux est perturbée par la présence de la matrice solide. La perturbation est différente dans les deux directions étudiées étant donné que le milieu poreux est orthotrope. Pour rappel, le coefficient de diffusion se présente comme une matrice diagonale. Par conséquent, le coefficient de diffusion dans le milieu poreux est de la forme :

$$\mathcal{D}_{poreux} = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_{11,poreux} & 0 \\ 0 & \mathcal{D}_{22,poreux} \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

La tortuosité dans la direction horizontale est déterminée en utilisant la relation empirique de *Bruggeman* valide pour les structures pour lesquelles la diffusion est limitée par des obstructions de géométrie sphérique [63, 66]. En effet, dans le plan (x, z) de la figure 5.1, les particules circulent dans un champ de cercles. La tortuosité dans la direction verticale vaut 1 étant donné que l'axe de révolution des cylindres sont alignés avec la direction verticale [54]. Les coefficients de diffusion dans le milieu poreux sont alors définis comme suit :

$$\mathcal{D}_{11,poreux} = \sqrt{\phi} \mathcal{D} \quad (5.5a)$$

$$\mathcal{D}_{22,poreux} = \mathcal{D} \quad (5.5b)$$

Coefficient de dispersion turbulent

La dispersion turbulente est modélisée avec un paramètre considéré comme étant le coefficient de diffusion turbulent. Ce coefficient est directement lié au nombre de Schmidt turbulent par la relation :

$$Sc_t = \frac{\nu_t}{D_t}. \quad (5.6)$$

Lien et al (2016) ont étudié la dispersion dans un milieu urbain modélisé par un milieu poreux homogène composé de particules cubiques. Ils ont défini le nombre de Schmidt

turbulent comme étant $Sc_t = 0.63$ [40]. La même valeur a été considérée pour le cas de référence.

5.2 Conditions limites et initiales

Les conditions limites sont similaires au cas laminaire, voir section 3.4. Cependant, deux nouvelles variables sont introduites pour le calcul de l'écoulement moyen turbulent : $\bar{k}$ et $\bar{\epsilon}$. Sur la paroi (bas du domaine), les deux variables sont imposées comme étant nulles (Dirichlet zéro). Les gradients normaux à la frontière du haut du domaine sont aussi imposés à une valeur nulle (condition Neumann zéro) [29, 47].

Pour les deux variables, un profil est imposé en amont et une condition convective en aval du domaine. Les conditions limites pour l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation turbulente sont donc similaires à celles de la vitesse horizontale. Les trois profils imposés en amont sont réalisés grâce à une pré-simulation. L'imposition d'un profil équivaut à une condition Dirichlet non nulle. Un rappel de toutes les conditions limites imposées se trouve sur la figure 5.3.

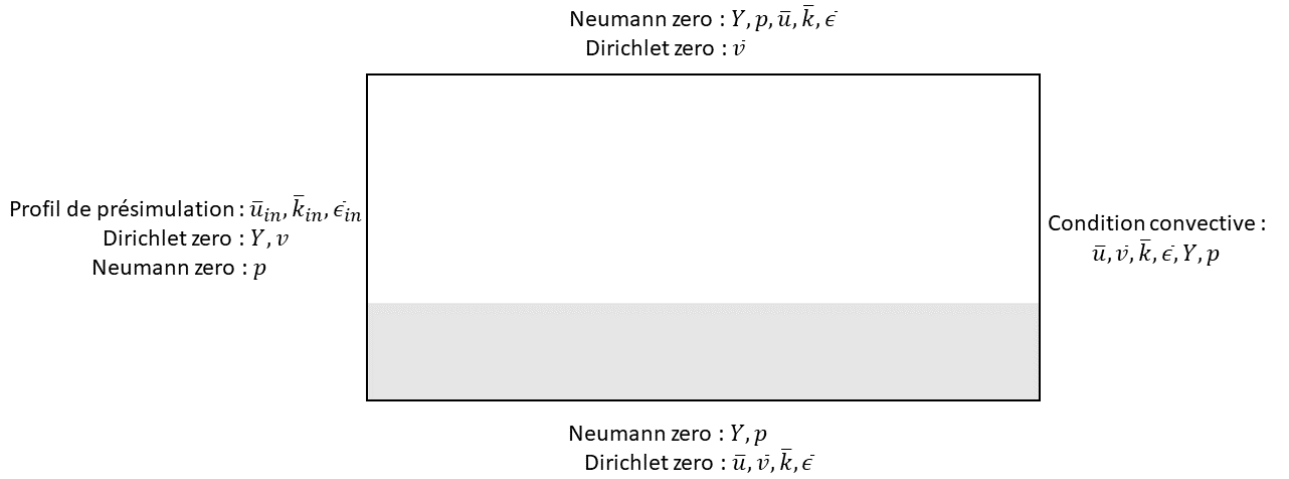


FIGURE 5.3 – Représentation schématique des conditions limites imposées pour la simulation de la dispersion de polluants dans un écoulement turbulent moyen.

Pré-simulation

La méthode choisie est similaire à celle utilisée pour le cas du compost, voir section 3.2. Toutefois, il faut définir ce qui a été imposé pour les deux variables turbulentes. Les conditions en haut et en bas du domaine sont les mêmes que celles définies ci-dessus, à la figure 5.3. Elles sont couplées à des conditions périodiques en amont et en aval du domaine. Initialement, des valeurs d'un ordre de grandeur adéquat sont imposées aux variables $\bar{k}$ et $\bar{\epsilon}$. Leurs équations bilans ne possèdent pas de termes sources, elles ne peuvent donc pas être initialisées à zéro comme pour la vitesse. Les profils de vitesse, d'énergie cinétique turbulente et du taux de dissipation sont visibles aux figures 5.4, 5.5 et 5.6 respectivement.

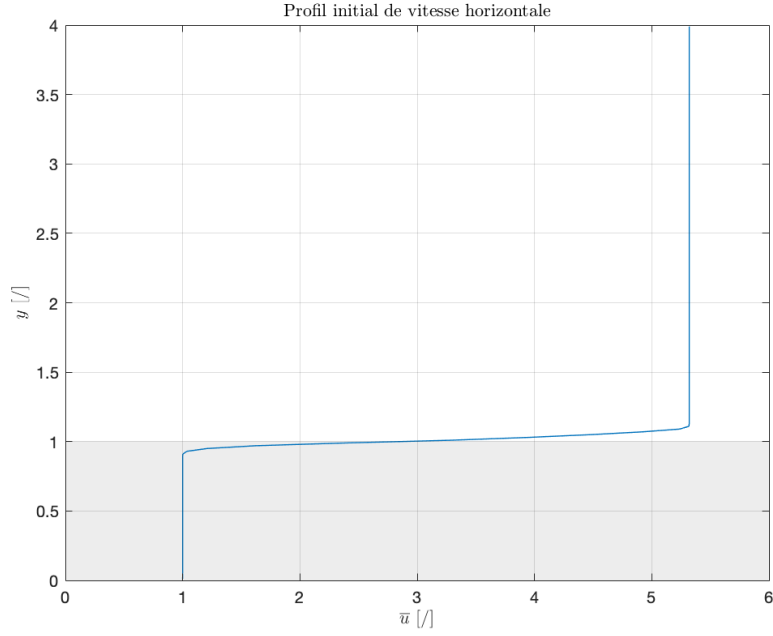


FIGURE 5.4 – Profil de vitesse $\bar{u}_{in}$ obtenu via la pré-simulation pour le cas de base : $\phi = 0.6$, $Re = 3.848 \cdot 10^6$, $d_p = 0.33$.

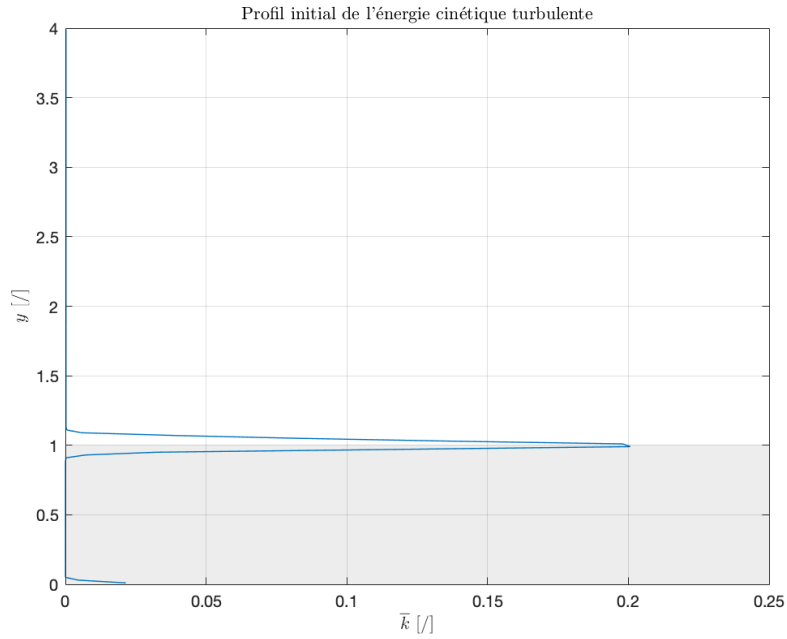


FIGURE 5.5 – Profil de $\bar{k}_{in}$ obtenu via la pré-simulation pour le cas de base : $\phi = 0.6$, $Re = 3.848 \cdot 10^6$, $d_p = 0.33$.

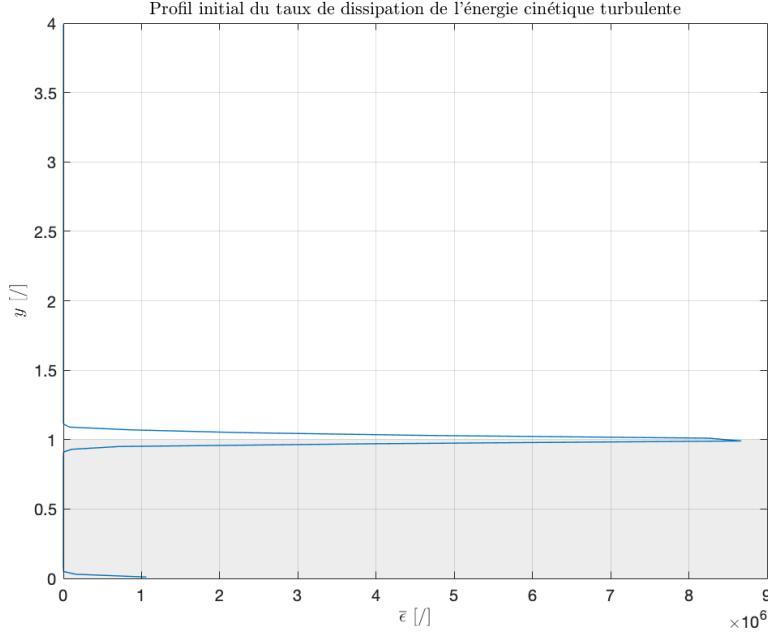


FIGURE 5.6 – Profil de $\bar{\epsilon}_{in}$ obtenu via la pré-simulation pour le cas de base : $\phi = 0.6$, $Re = 3.848 \cdot 10^6$, $d_p = 0.33$.

La pré-simulation prend fin lorsque la vitesse dans le milieu poreux ne varie plus. Le profil de vitesse moyennée, figure 5.4 est semblable à celui de la pré-simulation laminaire, figure 3.2. On peut remarquer que la transition entre la vitesse dans le milieu poreux et celle dans la partie fluide pur est plus douce que dans le cas laminaire. En effet, la force imposée était inférieure à 10.

Les profils de $\bar{k}$ et $\bar{\epsilon}$ associés à ce profil de vitesse présentent un maximum au niveau de l'interface, c'est-à-dire en $y = 1$. L'interface étant la région où la couche de mélange se développe, il semble correct qu'elle présente les valeurs maximales à cet endroit. En effet, *Amsari* [2] obtient des résultats similaires dans son étude numérique sur les couches de mélange (figures 7b, 7c, 7d et 8 de son étude). *Pui et Gartshore* [52] présentent une étude expérimentale d'une couche de mélange dans le plan dans laquelle ils observent également des maximums au niveau de l'interface (figures 3b, 3c et 3d de leur étude).

5.3 Résultats

Dans cette section, l'allure générale des résultats obtenus est présentée. Les simulations lancées présentent des caractéristiques communes concernant l'évolution de l'écoulement et la répartition des polluants. Ces caractéristiques sont décrites ici sur base des résultats du cas type présenté dans la section 5.1.2.

L_r	u_r	ϕ	Re	Sc_t
60 [m]	1 [m/s]	0.6	$3.846 \cdot 10^6$	0.63

TABLE 5.2 – Rappel des paramètres principaux choisis pour le cas type/de base turbulent.

5.3.1 Écoulement turbulent

Vorticité

Sur la figure 5.7, la vorticité au niveau de la couche de mélange peut être observée. Elle permet de caractériser les vortex dans l'écoulement. Après un certain temps, des instabilités se dessinent sous forme de *roll up*. Leur apparition est due au point d'inflexion présent dans le profil de vitesse initial au niveau de l'interface. Lorsque le contour de vorticité est fermé, le tourbillon est formé. Lorsque ce contour est ouvert, le tourbillon se forme ou se détruit. Ces vortex avancent le long du domaine et restent au niveau de l'interface. Au sein d'un vortex, la vitesse verticale est positive dans la partie gauche du vortex, et négative dans la partie droite. La vitesse horizontale quant à elle est négative dans la partie inférieure du vortex et positive dans la partie supérieure. Le fluide s'enroule autour d'un axe de révolution orthogonal au plan (x, y) qui peut être visualisé sur cette figure 5.7. Certaines structures de révolution sont plus petites que d'autres. Au cours du temps, les tourbillons formés apparaissent à une distance plus élevée de l'amont. Aussi, les structures tourbillonnaires formées se ressemblent de plus en plus au cours du temps.

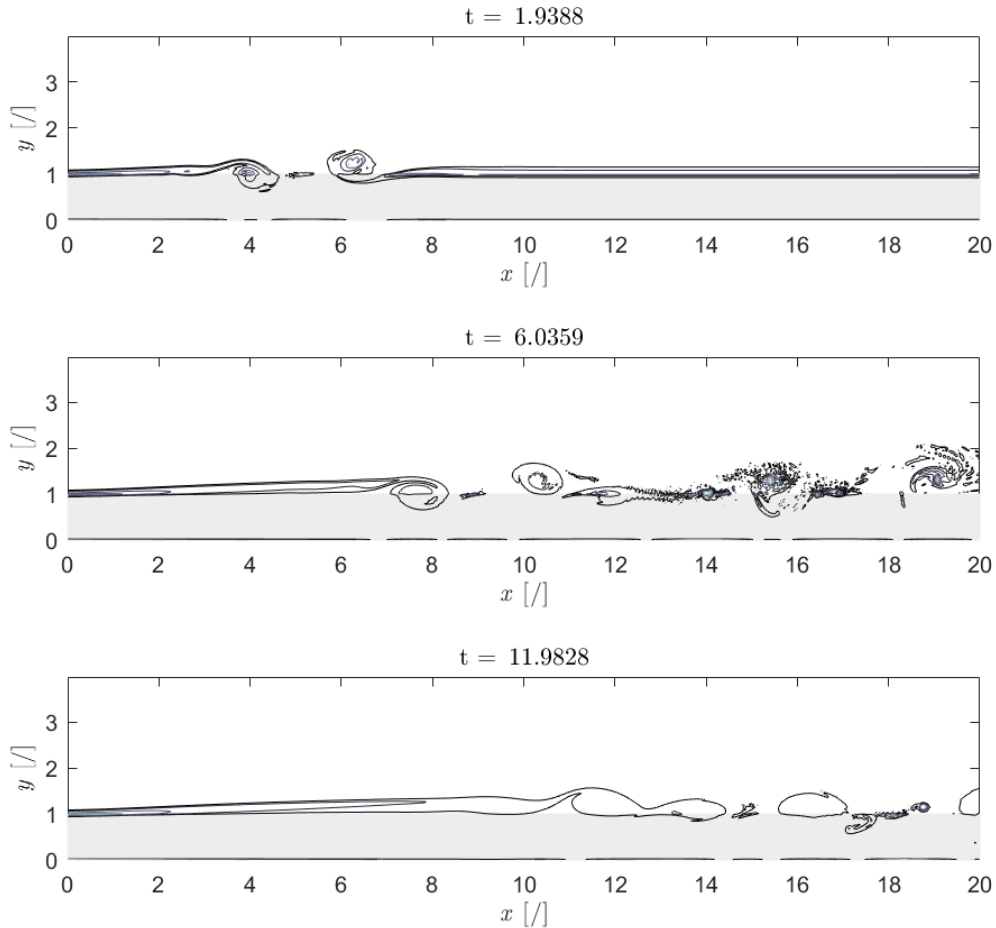


FIGURE 5.7 – Vorticité à différents temps adimensionnels pour le cas de base turbulent.

Il est intéressant de constater que la taille des vortex créés augmente. Ceci est dû au fait qu'ils s'assemblent deux par deux. Le phénomène peut être observé à la figure 5.8. Le vortex supérieur, créé après le vortex inférieur, avance plus vite et rattrape le second. Ils continuent ensemble leur mouvement rotatif, de même sens, et finissent par ne former qu'une unité de plus grande taille. Ce phénomène a été observé très fréquemment au sein des couches de mélange, notamment par *Leboeuf et Mehta (1996)* [37]. Leur expérience est similaire à ce qui a été simulé dans ce travail. Une couche de mélange turbulente est créée en imposant en amont un profil de vitesse présentant une différence de vitesse et une intensité de turbulence entre 0.05 et 0.15%. Le gradient transverse de pression est nul. Ils ont accéléré la formation de vortex par l'ajout d'une somme de signaux de forme sinusoïdale au sein de l'écoulement. Des assemblages de vortex deux à deux conduisant à une augmentation de l'épaisseur de la couche de mélange ont été observés. Au temps $t = 11.98$ (figure 5.7), on peut remarquer que le phénomène d'assemblage de deux vortex va à nouveau se produire entre les deux tourbillons localisés dans l'intervalle $x = [11, 15]$.

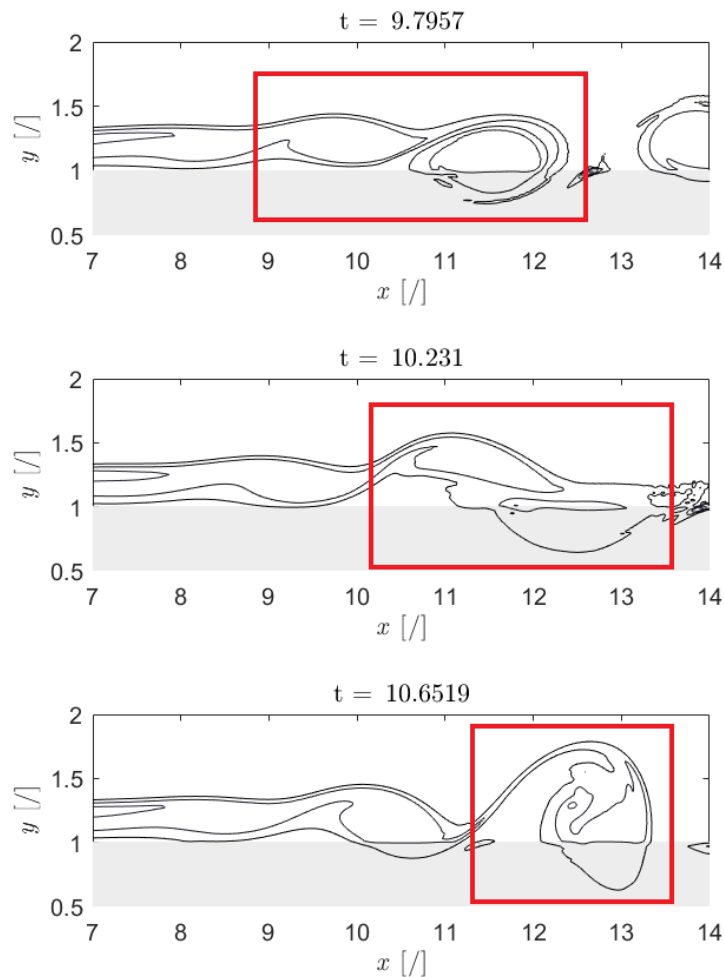


FIGURE 5.8 – Graphes permettant la visualisation de l'assemblage de deux vortex. Représentation de la vorticité de l'écoulement aux temps adimensionnels $t = 9.8$, $t = 10.23$, $t = 10.65$.

Viscosité cinématique turbulente

La viscosité cinématique turbulente dépend de l'espace et du temps $\nu_t(x, y, t)$, comme attendu en utilisant la modélisation proposée par le modèle $k - \epsilon$, voir figure 5.9. La viscosité cinématique turbulente n'est pas une propriété du fluide contrairement à la viscosité cinématique moléculaire. Elle dépend de l'état de turbulence et est donc une propriété de l'écoulement.

On remarque également que les valeurs de viscosité cinématique turbulente adimensionnelles sont largement supérieures à la valeur adimensionnelle de viscosité cinématique moléculaire, $\nu = 1$. Par conséquent, il serait légitime de la négliger par rapport à la viscosité turbulente. Les équations de conservation peuvent ainsi être simplifiées : équation moyennée de la quantité de mouvement, équation de bilan d'énergie cinétique turbulente, de bilan du taux de dissipation et équation de dispersion. Cependant, il faut prêter attention à la zone proche paroi dans laquelle la viscosité cinématique turbulente tend vers 0 : la viscosité moléculaire devient prépondérante par rapport à la viscosité turbulente.

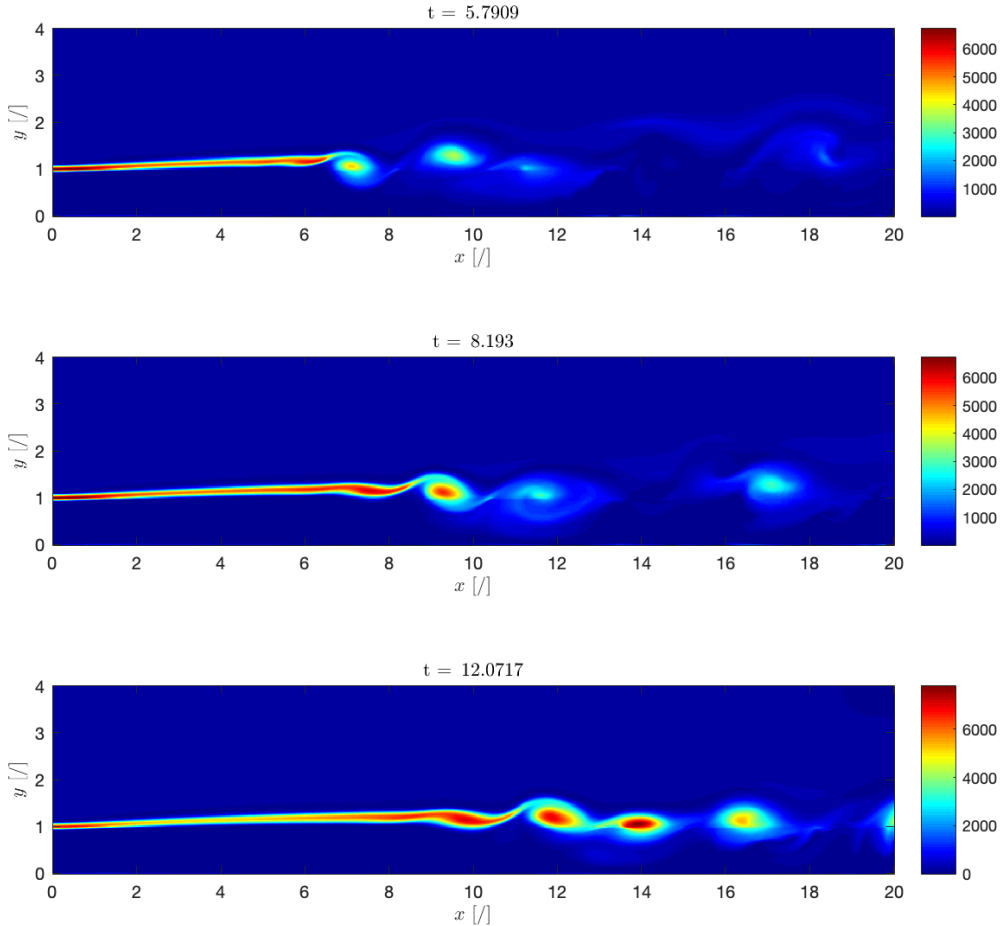


FIGURE 5.9 – Champ de la viscosité cinématique turbulente adimensionnelle, ν_t , à différents temps adimensionnels.

On observe aussi que les valeurs maximales sont situées au niveau de l'interface. L'interface est la zone où le cisaillement est le plus important ce qui justifie une turbulence plus importante qui se traduit via les paramètres de turbulence comme ν_t par une valeur plus élevée.

Aussi, au sein d'un vortex fraîchement créé, il peut être observé que l'intensité de turbulence décroît avec son diamètre.

5.3.2 Dispersion des polluants

L'allure de la dispersion du polluant au niveau de la ville et de l'atmosphère est représentée à la figure 5.10. La colonne de gauche nous montre la concentration de CO_2 aux mêmes temps que les vorticités montrées à la figure 5.7. La colonne de droite indique la concentration des particules PM_{10} .

On remarque tout d'abord que dans les deux cas, les polluants provenant de l'industrie en amont du domaine sont dirigés vers l'aval puis montent vers l'atmosphère. Comme dans le cas laminaire, la force de traînée a tendance à freiner l'écoulement. Seulement, dans ce cas-ci, la force est beaucoup plus faible. La vitesse verticale est donc plus faible que dans le cas laminaire mais permet tout de même aux polluants de sortir de la ville.

Les polluants provenant de l'industrie forment une sorte de jet. Ce jet, à la sortie de la ville, voit sa concentration diminuer fortement. Ceci peut être dû à une convection et/ou une diffusion plus grande du polluant. La convection est facilitée car la vitesse de l'air au sein de l'atmosphère est plus élevée. La diffusion est privilégiée en dehors du milieu poreux par l'absence de la matrice solide, comme mentionné à la section 5.1.4.

Au niveau de l'interface, après la sortie des polluants de la ville, on remarque que la répartition du polluant dans le domaine dessine la forme des vortex. Dans les deux cas, le polluant est transporté presque exclusivement par la convection dans ces structures. La diffusion est négligeable. En effet, les coefficients de diffusion des deux polluants ont une différence d'un ordre de grandeur de 10^{-7} . Cependant, au sein des structures dessinées, les gradients de polluants paraissent identiques ; la diffusion n'est donc pas visible. Ceci est davantage observable sur la figure 5.11.

Les vortex permettent un certain niveau d'interaction entre la ville et l'atmosphère. En effet, la vorticit   pr  sente dans l'  coulement permet un meilleur m  lange au sein m  me du poreux mais   galement au-dessus de l'interface o   la couche de m  lange se forme. Sur la figure 5.11, dans le cas du CO_2 , il peut   tre observ   que la dispersion des polluants provenant du transport routier est aussi influenc  e par la pr  sence de ces structures tourbillonnaires.

Les deux   chelles de polluants, visibles sur la figure 5.10, sont distinctes   tant donn   la diff  rence d'intensit   des termes sources pour chaque polluant. Pour rappel, ce terme source ne varie pas mais il est diff  rent pour les particules fines et pour le dioxyde de carbone. En d'autres mots, la m  me quantit   d'un certain polluant s'ajoute au sein du domaine pour un laps de temps donn  .

La diff  rence principale entre les deux dispersions de polluants semble se trouver au niveau du sol. Sur la figure 5.11 pr  sentant un zoom sur la dispersion au niveau des vortex, le CO_2 provenant des v  hicules dans le bas du domaine semble s'  tre dispers   davantage que pour les particules fines. Intuitivement, cela pourrait   tre expliqu   par le fait que les

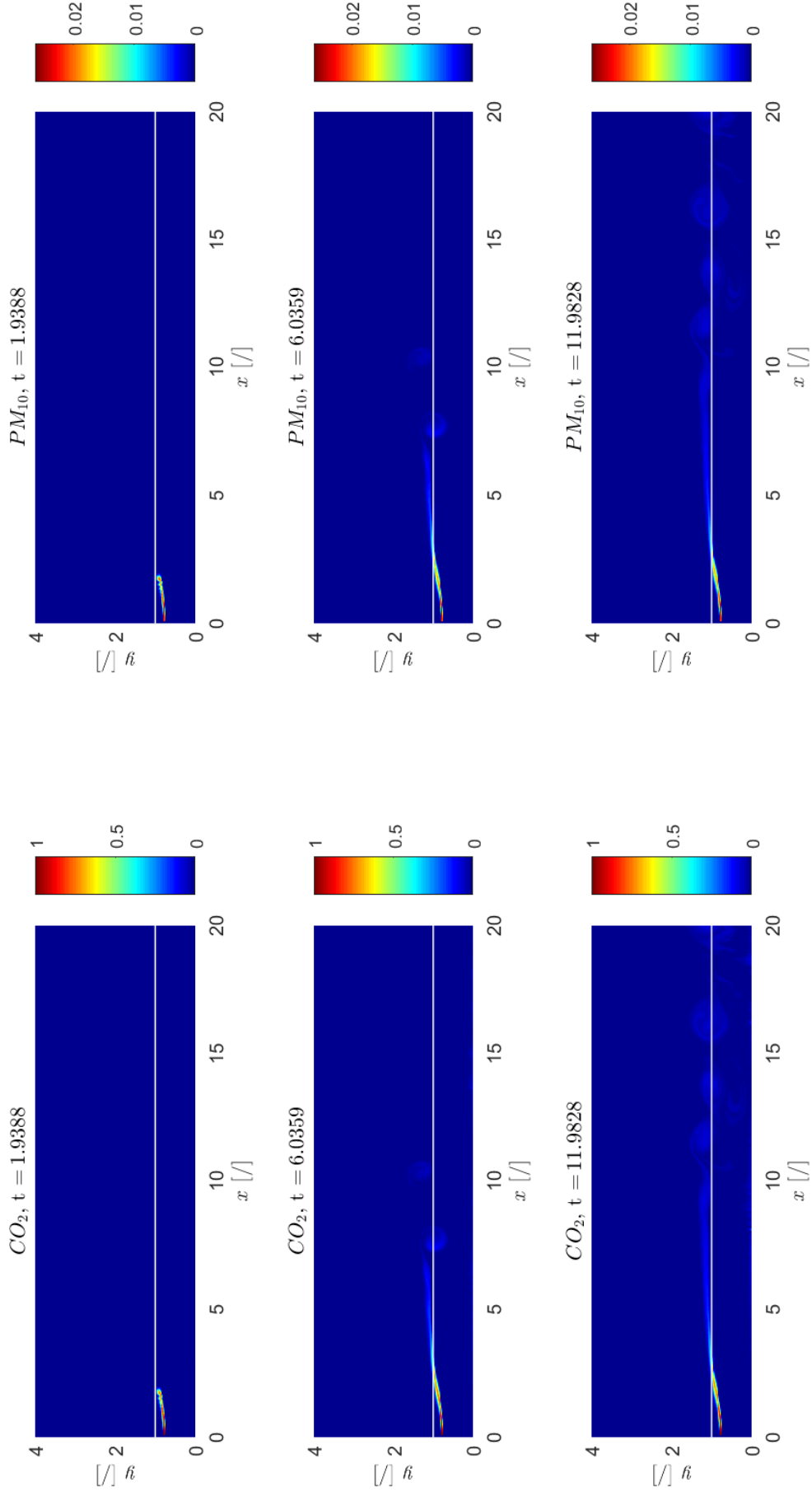


FIGURE 5.10 – Représentation de la dispersion des polluants pour différents temps non dimensionnels $t = 9.8$, $t = 10.23$, $t = 10.65$. Le CO_2 est à gauche et les PM_{10} sont à droite.

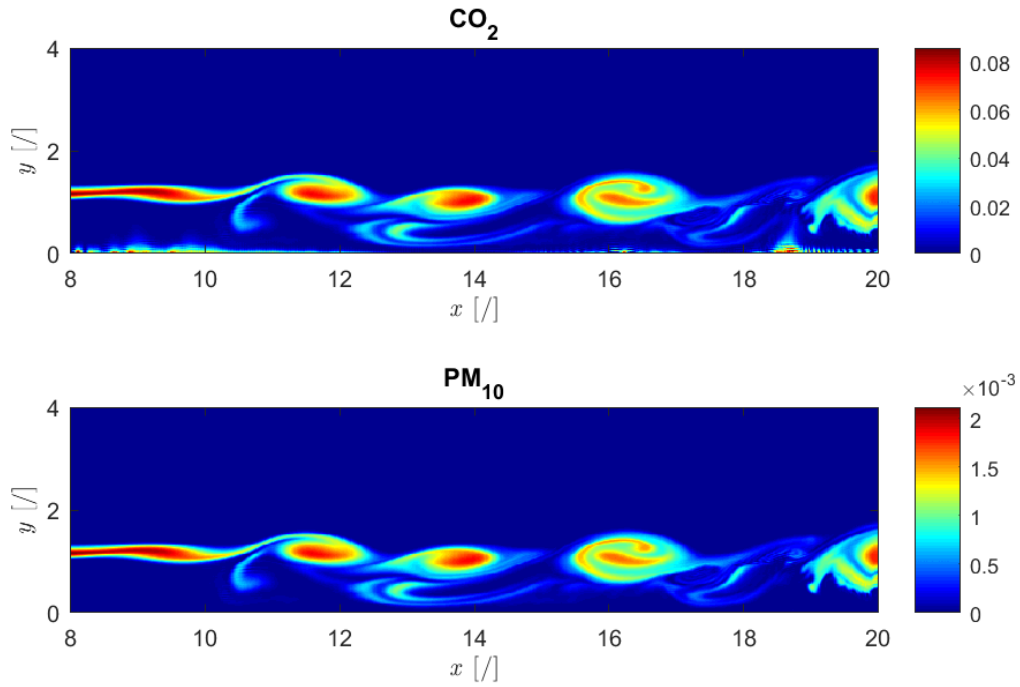


FIGURE 5.11 – Champ de la concentration des polluants au temps adimensionnel $t = 11.98$: zoom sur les vortex. Le rouge foncé indique que la concentration est égale ou supérieure à la valeur supérieure de l'intervalle de concentrations dessiné.

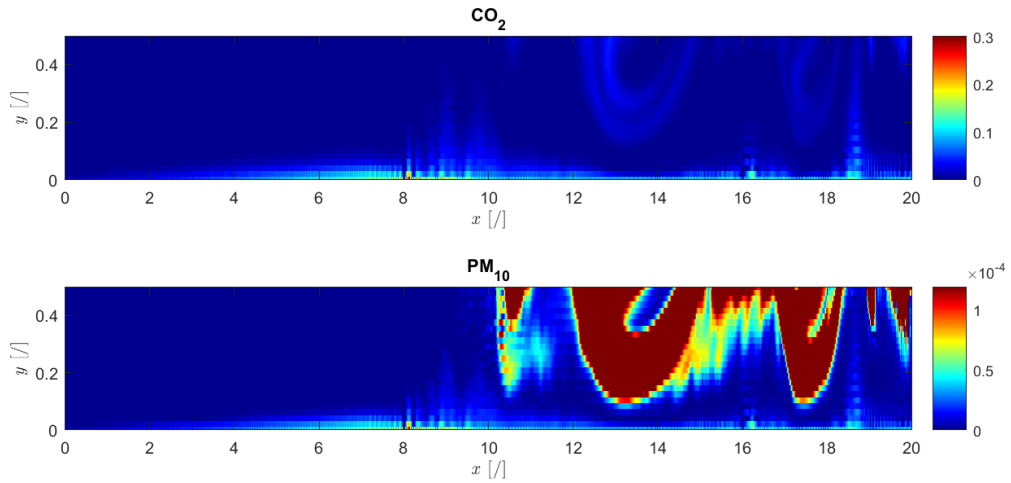


FIGURE 5.12 – Champ de la concentration des polluants au temps adimensionnel $t = 11.98$: zoom sur la bas du domaine. Le rouge foncé indique que la concentration est égale ou supérieure à la valeur supérieure de l'intervalle de concentrations dessiné.

particules sont soumises à la gravité, voir section 2.2.2. Leur vitesse verticale négative v_g compenserait la convection des particules vers le haut due à l'interaction du polluant avec les vortex. Cependant au niveau des abscisses où il y a présence de vortex, aucune différence de répartition verticale des polluants ne peut être observée. La différence observée sur cette figure réside dans le fait que le rapport des émissions de l'industrie et du transport routier est plus élevé pour les particules.

Afin de mieux visualiser la dispersion dans la zone proche du sol, un zoom sur le bas du domaine a été réalisé à la figure 5.12. L'échelle des concentrations est réalisée en imposant le maximum comme étant la concentration maximale que l'on trouve dans les premières mailles en contact avec le sol. Avec cette échelle, on remarque que la répartition des polluants provenant du transport routier est similaire. Ceci permet de conclure que v_g est négligeable par rapport à la vitesse de convection engendrée par les vortex dans le cas des particules solides.

Cependant, la dispersion des scalaires provenant des véhicules est intéressante. Tout d'abord, il peut être remarqué qu'en amont du domaine, les polluants sont poussés vers l'aval. Dans cette partie du domaine, la vitesse horizontale diminue à cause de la force de traînée mais elle reste positive. Avant l'interaction avec les vortex, le polluant a aussi une tendance à se propager verticalement. Il est cependant difficile de conclure si la diffusion ou la convection verticale domine ce mouvement. A partir des abscisses où les vortex sont présents, le mouvement du polluant est contrôlé par la présence des tourbillons et la répartition du scalaire devient alors plus chaotique.

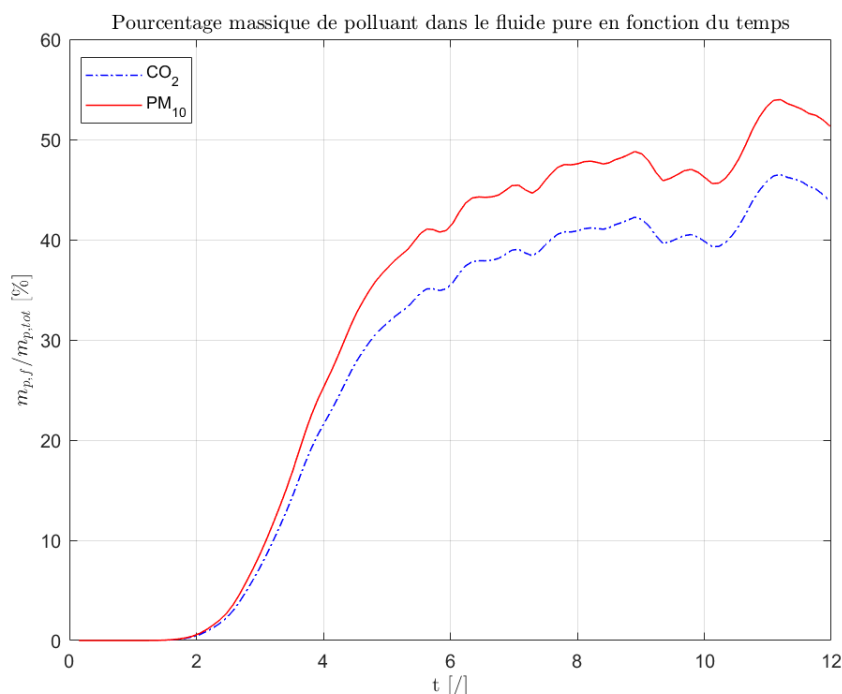


FIGURE 5.13 – Évolution du pourcentage massique de polluants dans le fluide pur en fonction du temps pour le cas de base turbulent.

La figure 5.13 présente l'évolution du pourcentage massique de CO_2 et de PM_{10} dans le fluide pur en fonction du temps. On remarque que l'allure de la courbe est identique pour les deux polluants. Un certain temps est nécessaire avant que le polluant provenant de la source industrielle rejoigne l'atmosphère. Ceci se traduit par un rapport massique nul avant d'atteindre $t = 2$. La quantité de polluants croît alors jusqu'à atteindre $t = 5.8$. A partir de ce temps adimensionnel, la courbe présente une série d'oscillations. Elle sont liées aux vortex localisés aux alentours de l'interface. Ceux-ci transportent les polluants.

Bien que l'allure soit identique, on observe que la hauteur des courbes ne l'est pas. La différence entre les deux cas simulés se trouve au niveau du coefficient de diffusion moléculaire $\mathcal{D}$ et du terme source $\mathcal{R}$. La diffusion moléculaire étant très faible, cette différence de hauteur est principalement due à un rapport entre le terme source industriel et le somme du terme source industriel et routier plus élevé lorsque les polluants concernés sont des particules fines. La plus grande partie du polluant qui se retrouve au sein de l'atmosphère provient de l'industrie. Les polluants émis par le trafic routier restent en grande partie au sein de la ville.

5.4 Analyse paramétrique

Cette section est dédiée aux conséquences de la variation de paramètres sur les résultats obtenus. Les deux paramètres variés sont la porosité et le nombre de Schmidt turbulent. Les analyses se penchent sur la dispersion du CO_2 . La dispersion des PM_{10} présente une allure similaire à celle du CO_2 , voir section précédente. Les conclusions pour les deux types de polluants sont donc identiques.

5.4.1 Cas traités

		Variation de ϕ		Variation de Sc_t	
Paramètres	Cas de base	Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4
$\mathcal{D}_{\text{CO}_2}$ [m^2/s]	$1.47 \cdot 10^{-5}$	$1.47 \cdot 10^{-5}$		$1.47 \cdot 10^{-5}$	
$\mathcal{R}_{\text{CO}_2, \text{voiture}}$ [kg/s]	$1.85 \cdot 10^{-3}$	$1.85 \cdot 10^{-3}$		$1.85 \cdot 10^{-3}$	
$\mathcal{R}_{\text{CO}_2, \text{industrie}}$ [kg/s]	116.7	116.7		116.7	
ϕ	0.6	0.5	0.8	0.6	
Re	$3.846 \cdot 10^6$	$3.846 \cdot 10^6$		$3.846 \cdot 10^6$	
Sc_{CO_2}	1.08	1.08		1.08	
Sc_t	0.63	0.63		0.5	0.9

TABLE 5.3 – Paramètres des différentes simulations traitées dans les analyses de cas turbulents.

Les simulations comparées les unes aux autres dans cette analyse sont présentées dans le tableau 5.3. Il permet de mettre en évidence les paramètres qui changent d’une simulation à l’autre ; la porosité et le nombre de Schmidt turbulent. Un seul paramètre varie à la fois.

Comme pour le cas laminaire, le profil d’entrée pour les variables $\bar{u}$, $\bar{k}$ et $\bar{\epsilon}$ varie en fonction de la porosité.

5.4.2 Influence de la porosité

Les sources de polluants sont localisées au sein du milieu poreux. L’interaction entre le milieu poreux et le milieu formé de fluide pur est caractérisée par la proportion de polluants présente au sein de l’atmosphère.

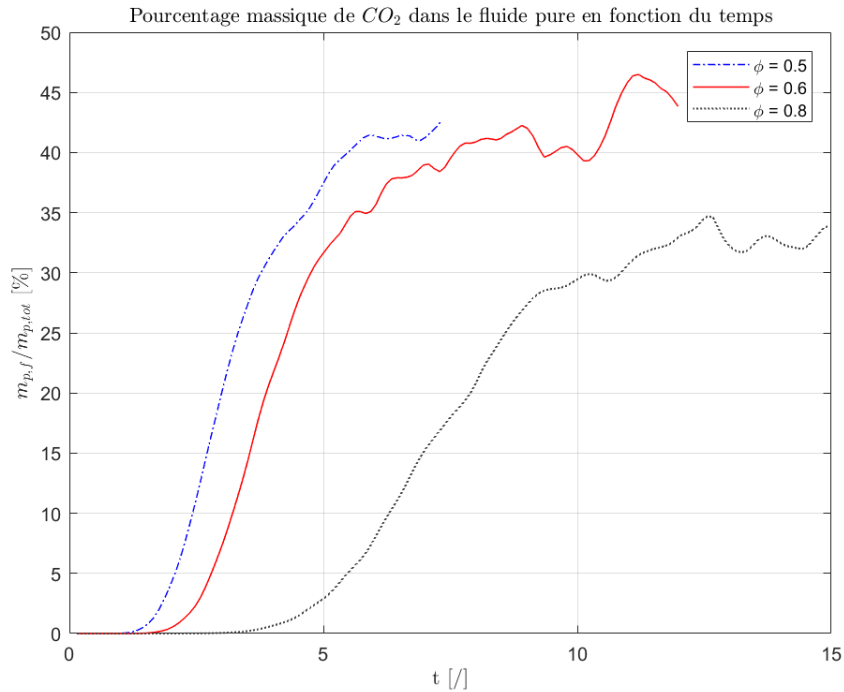


FIGURE 5.14 – Evolution du pourcentage massique de CO_2 dans le fluide pur en fonction du temps pour différentes porosités.

La figure 5.14 présente l’évolution du pourcentage massique de CO_2 en fonction du temps pour différentes porosités. On observe qu’il faut un certain laps de temps avant que le polluant localisé au sein du milieu poreux atteigne la région composée de fluide pur. Ce laps de temps est d’autant plus important que la porosité est élevée. Cette observation est directement liée à la valeur du terme de traînée, $\beta \bar{u}$. Ce terme est plus faible pour une porosité plus élevée. Par conséquent, la source industrielle localisée en amont du domaine rejoint l’atmosphère après avoir parcouru une distance x plus importante au sein du milieu poreux lorsque la porosité est plus élevée. Ceci peut être observé à la figure 5.15 ; le jet de polluants provenant de l’industrie reste dans le milieu poreux sur une distance plus longue pour une grande porosité.

On remarque aussi que pour le cas $\phi = 0.8$ sur la figure 5.14, la quantité de fluide qui atteint l'atmosphère est plus faible. Ceci pourrait être expliqué par un autre phénomène observé. On peut apercevoir sur la figure 5.15 que les structures tourbillonnaires apparaissent à une abscisse très proche de la sortie du polluant de la ville. Par ces vortex, le polluant est redirigé rapidement vers le bas, ce qui implique qu'une proportion moins grande de polluant reste dans l'atmosphère.

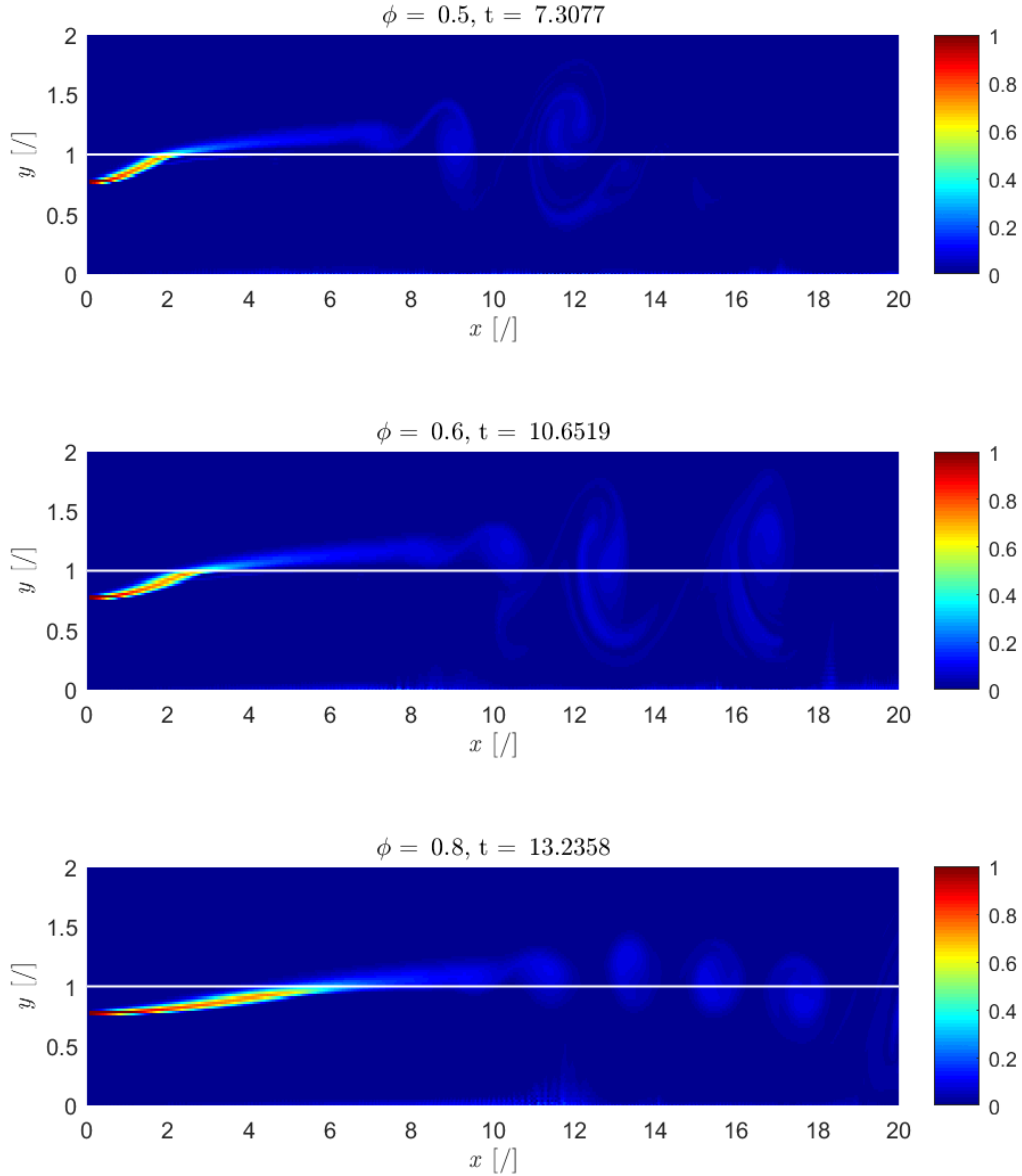


FIGURE 5.15 – Répartition du CO_2 dans le domaine pour différentes porosités. La ligne blanche désigne l'interface milieu poreux - fluide pur.

Il est important de mentionner que cette observation concernant la quantité de polluants dans l'atmosphère demande des temps de simulation plus longs pour pouvoir être confirmée. Il serait par exemple possible que les courbes se rejoignent ou se chevauchent après un certain temps étant donné que celles-ci fluctuent au cours du temps et que l'intensité maximale de ces fluctuations n'est pas connue.

Les fluctuations dans les courbes à la figure 5.14 nous montrent que la dispersion des polluants dépend fortement de la formation des vortex. Il s'agit pourtant d'un phénomène très aléatoire et il est donc difficile de tirer des conclusions générales de l'influence de la porosité sur celui-ci. En effet, le changement de porosité a beaucoup de conséquences sur les conditions de l'écoulement : force de traînée, débit, vitesse *free stream* dans la partie fluide pure du domaine. Ces trois quantités influencent l'écoulement et donc la géométrie et le mouvement des vortex qui permettent le transport de masse. C'est pourquoi il est difficile de savoir comment la porosité influence l'interaction entre l'atmosphère et la ville dans la zone du domaine présentant des structures tourbillonnaires.

5.4.3 Influence du nombre de Schmidt turbulent

La figure 5.16 montre l'influence d'une variation du nombre de Schmidt sur la proportion de polluants au sein du fluide pur. Une variation du nombre de Schmidt correspond ici à une variation du coefficient de diffusion turbulent, $\mathcal{D}_t$. L'écoulement est identique pour les différents nombres de Schmidt. Par conséquent, la viscosité cinématique turbulente est identique d'un cas à l'autre et la variation de Sc_t est associée à un changement de $\mathcal{D}_t$.

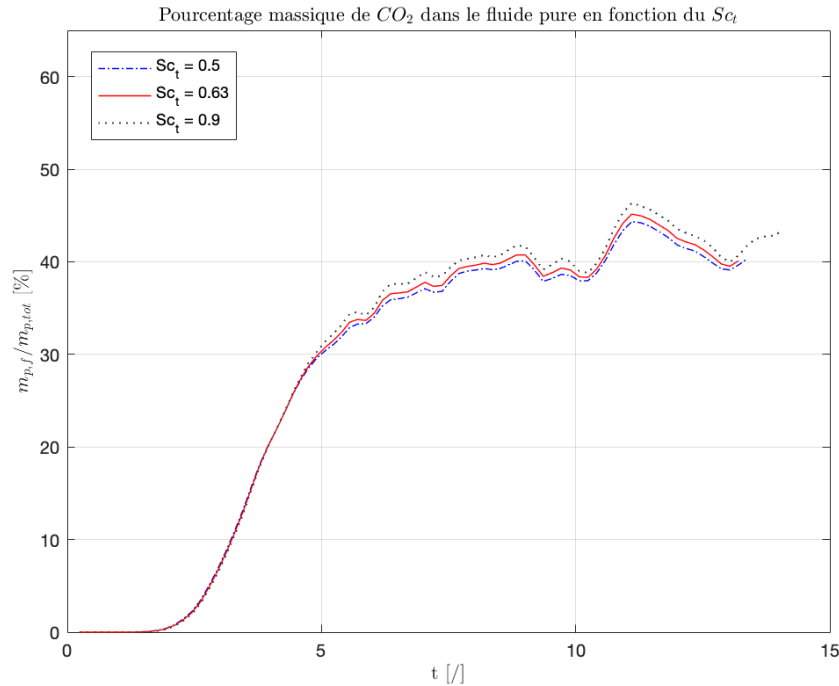


FIGURE 5.16 – Evolution du pourcentage massique de CO_2 dans le fluide pur en fonction du temps pour différents nombres de Schmidt.

On remarque que la variation du nombre de Schmidt a une faible influence sur la dispersion des polluants. En effet, les courbes pour les différents nombres de Schmidt ne s'écartent que très peu. Le plus grand Sc_t permet une légère augmentation de la proportion de polluants présente dans le fluide pur. Ceci se justifie par une diffusion turbulente plus élevée permettant une meilleure propagation. Le coefficient de diffusion turbulente a aussi un impact limité sur le phénomène de dispersion et donc sur l'interaction entre les deux milieux.

5.5 Conclusions

Lors de l'analyse des résultats, nous avons notifié que le temps de simulation est une contrainte à laquelle il a fallu faire face. Il limite les conclusions et observations que l'on peut réaliser. Ce temps de simulation a pu être réduit en diminuant la taille du domaine.

La longueur du domaine a donc été raccourcie. Une ville présente une dimension horizontale pouvant s'étendre sur des dizaines de kilomètres. Les observations sont donc localisées sur une petite proportion de la ville et leur validité pour l'entièreté de celle-ci ne peut pas être assurée. La hauteur du domaine considéré pose aussi question. Celle-ci est assez faible. Considérer que l'écoulement au-delà de cette hauteur n'est plus influencé par la couche de mélange constitue une approximation non négligeable.

Comme pour le cas laminaire, un maillage non uniforme pourrait influencer les calculs dans les zones sensibles telles que l'interface ou la zone proche paroi. Il permettrait d'obtenir des résultats plus précis.

Cependant, malgré ces approximations et contraintes, le modèle implémenté dans ce travail et les simulations réalisées permettent d'observer des phénomènes déjà mentionnés dans la littérature concernant l'écoulement de couche de mélange. La formation et l'assemblage de vortex en sont des exemples.

Le modèle permet de remarquer que le transport de polluants est principalement gouverné par les structures tourbillonnaires. La dispersion est donc dominée par la convection, ce qui engendre une faible différence de comportement entre les particules fines et le dioxyde de carbone.

Le but de l'analyse paramétrique a été de cerner l'influence de la porosité et du coefficient de diffusion turbulente sur l'interaction entre la ville et l'atmosphère. Il a été mis en évidence qu'une porosité plus élevée s'associe à une intensité de traînée plus faible. Le moment du premier passage du polluant vers l'atmosphère en est directement impacté. Il a lieu plus tard lorsque la porosité est faible. D'autres conclusions concernant l'influence de la porosité sont difficiles à établir de par ses influences multiples sur le comportement de l'écoulement. L'impact du coefficient de diffusion turbulent sur l'interaction entre la ville et l'atmosphère est plus facile à discerner. En effet, une variation du coefficient de diffusion turbulente n'a aucune influence sur l'écoulement. Il a été observé qu'un coefficient $\mathcal{D}_t$ plus élevé est associé à une fraction légèrement plus importante de polluant au sein de l'atmosphère.

5.6 Pistes d'amélioration

La section 5.1 a mis en évidence plusieurs hypothèses et approximations qui ont permis de simplifier le cas étudié. Aussi, les modèles mathématiques et numériques turbulents reposent sur des simplifications et hypothèses de paramètres qui influencent la dynamique de l'écoulement et la dispersion de scalaires. Cette section permet de compléter la conclusion précédemment tirée. Elle regroupe des idées d'améliorations qui pourraient être apportées à ce travail afin de progresser dans la modélisation de la dispersion de polluants dans les milieux urbains.

5.6.1 Méthodes numériques

Le terme convectif de l'équation de bilan de l'énergie cinétique turbulente et du taux de dissipation de l'énergie turbulente a été discrétisé en utilisant un schéma explicite décentré amont d'ordre un. Ce schéma est à l'origine d'une production plus grande de diffusion numérique. Un schéma centré quant à lui ne produit pas assez de diffusion numérique ce qui introduit une instabilité numérique. Dans la littérature, l'idée de créer un nouveau schéma qui combine le schéma centré et le schéma décentré amont est souvent mentionnée. Elle consiste à pondérer le poids donné à chaque schéma pour discrétiser le terme convectif de la manière suivante [55] :

$$\left. \frac{\partial f^{(n)}}{\partial x} \right|_i = \mathcal{X} \frac{f_i^{(n)} - f_{i-1}^{(n)}}{\Delta x} + (1 - \mathcal{X}) \frac{f_{i+1}^{(n)} - f_{i-1}^{(n)}}{2\Delta x}. \quad (5.7)$$

Lorsque $\mathcal{X} = 1$, le schéma mixte devient équivalent au schéma décentré amont. Lorsque $\mathcal{X} = 0$, le schéma mixte devient équivalent au schéma centré. En effectuant une analyse de l'erreur, il est possible de déterminer que la valeur optimale pour supprimer l'erreur liée au problème de régulation de la diffusion numérique est $\mathcal{X} = C$ où C est la condition CFL. Cependant, ce schéma mixte, également appelé schéma décentré amont d'ordre deux, est sujet à des erreurs dites dispersives qui peuvent aussi impacter de manière importante la solution. En présence de gradients importants, la solution peut présenter des oscillations non-physiques suffisantes pour introduire une instabilité numérique : la solution n'est plus bornée. Il en est de même pour les schémas d'ordre trois.

La figure 5.17 permet d'avoir une meilleure idée de la conséquence de la diffusion et dispersion numérique sur la solution. La diffusion a pour effet de lisser le profil calculé tandis que la dispersion induit des oscillations. Elles se distinguent par l'ordre le plus faible des dérivées présentes dans l'erreur de troncature : dérivée seconde pour la diffusion, dérivée troisième pour la dispersion. [27]

De nombreuses recherches se sont dès lors intéressées à des schémas d'ordre supérieur ayant comme objectif que la solution soit à la fois plus précise mais également bornée [64]. L'implémentation d'un schéma d'ordre supérieur peut constituer une amélioration.

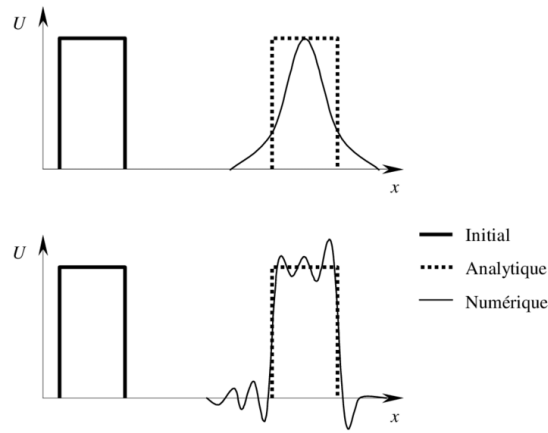


FIGURE 5.17 – Représentation schématique des erreurs numériques de diffusion (schéma supérieur) et dispersion (schéma inférieur) pour une équation unidimensionnelle. [27]

5.6.2 Conditions atmosphériques

Le modèle développé se base sur deux grandes hypothèses : le milieu est adiabatique et le fluide incompressible. En d'autres mots, la température et la densité du fluide sont considérées comme constantes. Dans ce travail, les équations moyennées de Navier-Stokes ont été développées en ne considérant des fluctuations que pour la pression et les vitesses. Ceci a permis de limiter le nombre de termes à modéliser. Pourtant, les flux environnementaux sont des écoulements à grandes échelles. Ils sont caractérisés par une densité de l'air et une température qui diminuent avec l'altitude. On parle dans la littérature d'écoulements stratifiés. Dans ce type d'écoulements, le mélange entre les couches d'air est restreint par la gravité [71]. Il existe des modèles turbulents pour écoulement stratifié, comme par exemple *Venayagamoorthy et al. (2003)* et *Bleeg et al. (2015)* [10, 68]. Ils utilisent un modèle de fermeture $k - \epsilon$ où la stratification est modélisée par l'ajout d'un terme de flottabilité dans les équations moyennées. *Venayagamoorthy et al. (2003)* proposent aussi un ajustement des constantes du modèle de fermeture. Elles deviennent alors dépendantes du nombre de Richardson et de Froude ; deux nombres adimensionnels qui font intervenir la gravité. La résolution du bilan moyenné de la conservation de l'énergie est alors aussi réalisée.

La dispersion des polluants influence et est aussi influencée par la variation de densité et température. Tout d'abord, les sources de polluants sont souvent plus chaudes que la température de l'air (tours de refroidissement, pots d'échappements, ...). Ceci devrait engendrer des variations de température par convection et diffusion dues à la dispersion du polluant dans le fluide. Ensuite, la concentration du polluant influence la densité de l'air qui le contient. La température influence également la viscosité du fluide. Elle influence donc directement la dynamique de l'écoulement et indirectement la dispersion des polluants.

Le *smog* est un exemple d'un phénomène d'accumulation de polluants dû aux gradients de température. Lorsque le vent est faible et en présence d'une inversion du gradient de température sur une couche atmosphérique, un nuage composé d'un mélange de polluants se crée : le *smog*. En effet, la faible intensité du vent limite la dispersion horizontale. L'inversion thermique, quant à elle, contrecarre la possible dispersion verticale.

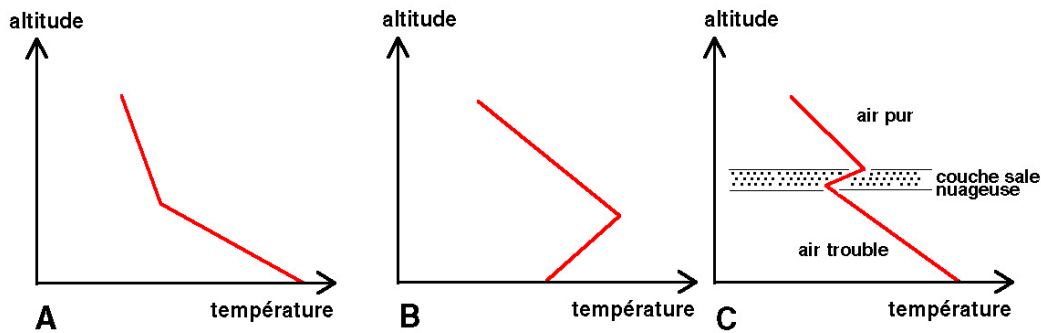


FIGURE 5.18 – Représentation du profil de température en fonction de l’altitude. (A) Situation habituelle, (B) Inversion simple de gradient engendrant un *smog* hivernal, (C) Double inversion de gradient engendrant un *smog* estival. [49]

5.6.3 Modélisation des sources de polluants

Les émissions du trafic routier sont modélisées par des sources ponctuelles réparties de façon homogène dans le bas du domaine. Comme expliqué plus haut, l’étude en deux dimensions, et dans le plan considéré, contraint la modélisation du trafic routier. D’autres limites à la modélisation choisie sont dues à la complexité qui domine le phénomène du trafic routier.

Il faut tout d’abord intervenir beaucoup de types de véhicules différents : poids lourds, bus, motocycles et voitures. Seulement des émissions propres aux voitures ont été considérées ici.

Une autre caractéristique du trafic routier est qu’il varie au cours du temps. Aucune variation temporelle d’émission n’est considérée dans ce cas. Cependant, il a été pris en compte, pour calculer le terme source $\mathcal{R}$, que les voitures ne roulaient pas toute une journée. Le terme source représente alors une moyenne des émissions d’une voiture sur un temps continu (journée, année). Une amélioration serait de considérer une journée-type durant laquelle il y a un pic de pollution émise lors des heures de pointe. Cela peut être réalisé par exemple en considérant un nombre de véhicules (sources ponctuelles) plus important durant ces heures.

Le terme source serait alors variable au cours du temps. Le calcul du terme source pour l’industrie est similaire. Les données sont des émissions en $[kg/an]$. Il aurait pu être possible de considérer que l’industrie n’émet que pendant les heures de travail et donc une fois de plus de considérer un terme source variable.

5.6.4 Polluants secondaires

Dans ce travail, les polluants étudiés sont le CO_2 et les PM_{10} . Comme mentionné précédemment, l’étude ne s’est penchée que sur les polluants primaires, c’est-à-dire de polluants émis directement par une source donnée. Les polluants secondaires ne sont pas émis directement par une source. Ils sont le produit d’une réaction chimique ou photochimique d’un ou plusieurs polluant(s) primaire(s). L’ozone est l’un d’eux. Le mécanisme qui engendre la formation/destruction de l’ozone est composé des étapes suivantes :

1. Le dioxyde d'azote est transformé en monoxyde d'azote et en oxygène sous l'effet des photons solaires. Par conséquent, cette réaction est favorisée lors des journées les plus chaudes d'été quand le soleil émet plus d'énergie.
2. L'oxygène réagit avec le dioxygène de l'air pour former de l'ozone.
3. Le monoxyde d'azote produit lors de la première étape réagit avec l'ozone pour former à nouveau du dioxyde d'azote.

Un processus d'équilibre dynamique s'installe donc entre le processus de formation d'ozone et le processus de destruction d'ozone :



Cet équilibre est perturbé lorsque des radicaux provenant des composés organiques volatils (COV) réagissent avec le monoxyde d'azote : le NO n'est plus disponible pour la destruction d'ozone. C'est alors que la quantité d'ozone dans l'atmosphère augmente. [70] Les principales sources d'émissions de NO_x et des COV sont la circulation automobile, les processus industriels, la production d'électricité, ... L'ozone troposphérique en grande concentration a un effet polluant de par son effet nocif pour la santé des êtres vivants. Il a également la capacité d'absorber le rayonnement infra-rouge et contribue à l'augmentation de l'effet de serre et donc au réchauffement de la planète. L'implémentation de cette réaction de formation de l'ozone, ou celles d'autres polluants secondaires, peut donc s'avérer être intéressante. Elle permettrait d'obtenir des informations plus précises sur les conséquences de changements sur l'environnement urbain car la formation de polluants secondaires est finalement une autre forme de source de polluants.

Conclusion générale

De nombreux écoulements atmosphériques peuvent être modélisés par un écoulement au sein d'un domaine dont la partie inférieure est une couche poreuse. Le but de ce travail était de modéliser et d'étudier la dispersion de polluants dans ce type d'écoulement. La modélisation s'est basée sur une approche du domaine simple ou *single domain approach* consistant à résoudre un seul ensemble d'équations de conservation pour l'entièreté du domaine.

La première étape a été d'adapter le travail réalisé par *Dr P.D. Antoniadis* afin d'atteindre l'objectif souhaité. Ce dernier a développé un modèle d'écoulement laminaire à l'interface milieu poreux - fluide pur. Une nouvelle condition limite et un modèle de dispersion laminaire ont été ajoutés. Le modèle mathématique a été développé en suivant l'approche du domaine simple.

Des premières observations sur le comportement du polluant et du fluide ont pu être faites grâce à une simulation numérique de la dispersion du méthane produit au sein d'un compost. Le compost peut en effet être assimilé à un milieu poreux de faible porosité et composé de particules de petite taille. Il a été remarqué que la dispersion au sein d'un écoulement atmosphérique est dominée par la convection. L'impact important de la force de traînée sur le mouvement du fluide a aussi été mis en évidence dans l'analyse paramétrique. L'analyse s'est principalement penchée sur l'interaction entre le compost et l'atmosphère.

L'étude d'un milieu poreux tel que le compost consiste en l'étude d'un cas particulier de par la traînée de grande intensité en son sein. Les observations et conclusions concernant les caractéristiques de l'écoulement et la dispersion du méthane ne sont donc pas des conclusions générales. Les paramètres de cet écoulement ont par exemple empêché la formation d'instabilités de Kelvin-Helmholtz pourtant attendues dans un écoulement présentant une interface de ce type. Cette absence d'instabilités a permis aussi de mettre en évidence les limites d'une simulation numérique par développement spatial et les limites de l'utilisation d'un maillage uniforme.

La deuxième partie a consisté à étendre le modèle à des écoulements turbulents afin d'analyser des cas d'études à plus grande échelle. La dispersion de polluants au sein d'un milieu urbain a été étudiée grâce à ce modèle turbulent. Pour ce faire, les équations de Navier-Stokes ont été moyennées et le modèle $k - \epsilon$ a été choisi pour modéliser les termes additionnels liés à la turbulence. Une attention particulière a été portée à la zone proche paroi au niveau de laquelle la turbulence est plus faible. L'équation de dispersion turbulente a été déterminée en moyennant le modèle laminaire établi dans la première partie. Les différentes équations ont finalement été implémentées numériquement. Quelques ajustements par rapport à l'implémentation du cas laminaire ont été réalisés afin d'atteindre

la convergence et une cohérence physique de la solution.

Le milieu urbain a été approximé par un milieu poreux homogène afin de pouvoir y appliquer le modèle développé et en tirer quelques conclusions sur son interaction avec l'atmosphère. Les résultats numériques obtenus ont permis d'observer le comportement du fluide et le transport de polluant au sein d'une couche à l'interface qui s'apparente à une couche de mélange turbulente. Dans ce cas, la formation d'instabilités de Kelvin-Helmholtz a été observée. Leur présence a une grande influence sur l'interaction entre la ville et l'atmosphère. La force de traînée a une fois de plus montré son effet sur la dispersion du polluant.

De nombreuses approximations ont malheureusement dû être réalisées concernant le modèle développé et la modélisation du milieu urbain. La ville a par exemple été assimilée à un milieu poreux constitué par des cylindres homogènes. Pour pallier à ces approximations, nous avons suggéré une série de pistes d'amélioration pour obtenir une simulation plus précise et réaliste. Ces pistes concernent l'implémentation numérique, les hypothèses émises et leurs conséquences sur l'aspect réaliste de la simulation.

Annexe A

Développement de l'expression de la vitesse moyenne intervenant dans l'expression de la condition limite convective

Cette annexe présente le développement détaillé de l'expression de la vitesse moyenne convective U_c qui est utilisée pour imposer une condition convective en aval du domaine.

L'équation (3.6) est établie en se basant sur l'équation (2.1a) de la conservation de masse du fluide pur :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho) + \nabla \cdot (\phi\rho\mathbf{u}) = \mathcal{M}.$$

L'équation (2.1a) est intégrée sur le domaine considéré :

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho)dV + \int_V \nabla \cdot (\phi\rho\mathbf{u})dV = \int_V \mathcal{M}dV \quad (\text{A.1})$$

En utilisant le théorème de la divergence, l'équation précédente devient :

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho)dV + \int_S \phi\rho(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})dS = \int_V \mathcal{M}dV \quad (\text{A.2})$$

Le domaine considéré étant un rectangle (2D), l'intégrale de surface peut s'écrire comme :

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho)dV - \int_{\text{amont}} (\phi\rho u)dS + \int_{\text{aval}} (\phi\rho u)dS \\ + \int_{\text{haut}} (\phi\rho v)dS - \int_{\text{bas}} (\phi\rho v)dS = \int_V \mathcal{M}dV \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Les vitesses verticales en haut et en bas étant nulles pour le cas considéré, l'équation (A.3) devient :

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\phi\rho)dV - \int_{\text{amont}} (\phi\rho u)dS + \int_{\text{aval}} (\phi\rho u)dS = \int_V \mathcal{M}dV \quad (\text{A.4})$$

Si la vitesse moyenne U_c est considérée pour la frontière en aval :

$$U_c \int_{\text{aval}} (\phi \rho) dS = \int_V \mathcal{M} dV - \int_V \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) dV + \int_{\text{amont}} (\phi \rho u) dS \quad (\text{A.5})$$

En isolant la vitesse U_c , on obtient qu'elle est égale à :

$$U_c = \frac{\int_V \mathcal{M} dV - \int_V \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho) dV + \int_{\text{amont}} (\phi \rho u) dS}{\int_{\text{aval}} (\phi \rho) dS} \quad (\text{A.6})$$

Annexe B

Développement des équations turbulentes non dimensionnelles

Cette annexe présente le développement détaillé de l'adimensionnalisation de l'équation moyennée de quantité de mouvement, de l'énergie cinétique turbulente et du taux de dissipation de l'énergie turbulente.

Équation moyennée de quantité de mouvement

Le terme fluctuant de traînée $\overline{\beta'_{ij} u'_j}$ n'est pas modélisé et il est dès lors négligé. L'équation (4.10) devient donc :

$$\rho \left[\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\phi \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} \right] = -\phi \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi (\mu + \mu_t) \bar{d}_{dij} - \frac{2}{3} \rho \phi \bar{k} \delta_{ij} \right) - \bar{\beta}_{ij} \bar{u}_j \quad (\text{B.1})$$

$$\begin{aligned} \frac{\rho_r u_r^2}{L_r} \hat{\rho} \left[\phi \frac{\partial \bar{\hat{u}}_i}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial (\phi \bar{\hat{u}}_i \bar{\hat{u}}_j)}{\partial \hat{x}_j} \right] &= \frac{1}{L_r} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \left(\phi \mu_r \frac{u_r}{L_r} (\hat{\mu} + \hat{\mu}_t) \bar{\hat{d}}_{dij} - \frac{2}{3} \rho_r u_r^2 \hat{\rho} \phi \bar{\hat{k}} \delta_{ij} \right) \\ &\quad - \frac{p_r}{L_r} \phi \frac{\partial \bar{\hat{p}}}{\partial \hat{x}_i} - \rho_r \frac{u_r^2}{L_r} \bar{\hat{\beta}}_{ij} \bar{\hat{u}}_j \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

L'équation précédente est ensuite divisée par $\frac{\rho_r u_r^2}{L_r}$.

$$\hat{\rho} \left[\phi \frac{\partial \bar{\hat{u}}_i}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial (\phi \bar{\hat{u}}_i \bar{\hat{u}}_j)}{\partial \hat{x}_j} \right] = -\frac{p_r}{\rho_r u_r^2} \phi \frac{\partial \bar{\hat{p}}}{\partial \hat{x}_i} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \left(\phi \frac{\mu_r}{\rho_r u_r L_r} (\hat{\mu} + \hat{\mu}_t) \bar{\hat{d}}_{dij} - \frac{2}{3} \hat{\rho} \phi \bar{\hat{k}} \delta_{ij} \right) - \bar{\hat{\beta}}_{ij} \bar{\hat{u}}_j \quad (\text{B.3})$$

Par la définition du nombre de Reynolds Re , l'équation adimensionnelle devient la suivante.

$$\hat{\rho} \left[\phi \frac{\partial \bar{\hat{u}}_i}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial (\phi \bar{\hat{u}}_i \bar{\hat{u}}_j)}{\partial \hat{x}_j} \right] = -\frac{1}{\theta} \phi \frac{\partial \bar{\hat{p}}}{\partial \hat{x}_i} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \left(\phi \frac{1}{Re} (\hat{\mu} + \hat{\mu}_t) \bar{\hat{d}}_{dij} - \frac{2}{3} \hat{\rho} \phi \bar{\hat{k}} \delta_{ij} \right) - \bar{\hat{\beta}}_{ij} \bar{\hat{u}}_j \quad (\text{B.4})$$

La perturbation θ définie à l'équation (2.17) est introduite dans l'équation. Afin d'appliquer l'approximation à faible nombre de Mach, le développement en séries (2.16) de θ est introduit dans l'équation (B.4).

A l'ordre $\mathcal{O}(1)$ de cette équation comprenant le développement en séries, on obtient :

$$\hat{\rho} \left[\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial(\phi \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial \hat{x}_j} \right] = -\phi \frac{\partial \bar{p}^1}{\partial \hat{x}_i} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \left(\phi \frac{1}{Re} (\hat{\mu} + \hat{\mu}_t) \bar{d}_{d,ij} - \frac{2}{3} \hat{\rho} \phi \bar{k} \delta_{ij} \right) - \bar{\beta}_{ij} \bar{u}_j \quad (\text{B.5})$$

Les variables sans exposant dans l'équation (B.5) font référence au terme d'ordre 0 du développement en séries de la perturbation θ de la variable (u_i^0 par exemple).

Équation de bilan de l'énergie cinétique turbulente

L'adimensionnalisation se fait à partir de l'équation (4.27) reprise ci-dessous.

$$\left[\phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\phi \bar{k} \bar{u}_j) \right] = \left(\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\rho} \right) (2\nu_t \bar{d}_{d,ij} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij}) - \phi \bar{\epsilon} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right) \quad (\text{B.6})$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{u_r^3}{L_r} \phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial \hat{t}} + \frac{u_r^3}{L_r} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} (\phi \bar{k} \bar{u}_j) \right] &= \left(\frac{u_r}{L_r} \phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \hat{x}_j} + \frac{\rho_r u_r}{L_r \rho_r} \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\hat{\rho}} \right) \left(2 \frac{u_r \mu_r}{\rho_r L_r} \hat{\nu}_t \bar{d}_{d,ij} - \frac{2}{3} u_r^2 \bar{k} \delta_{ij} \right) \\ &\quad - \frac{\nu u_r^2}{L_r^2} \phi \bar{\epsilon} + \frac{u_r^2 \mu_r}{L_r^2 \rho_r} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \left(\phi \left(\hat{\nu} + \frac{\hat{\nu}_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial \hat{x}_j} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

L'équation précédente est ensuite divisée par $\frac{u_r^3}{L_r}$.

$$\begin{aligned} \left[\phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} (\phi \bar{k} \bar{u}_j) \right] &= \left(\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \hat{x}_j} + \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\hat{\rho}} \right) \left(2 \frac{\mu_r}{\rho_r u_r L_r} \hat{\nu}_t \bar{d}_{d,ij} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \\ &\quad - \frac{\nu_r}{L_r u_r} \phi \bar{\epsilon} + \frac{\mu_r}{\rho_r u_r L_r} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \left(\phi \left(\hat{\nu} + \frac{\hat{\nu}_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial \hat{x}_j} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Par la définition du nombre de Reynolds Re , l'équation adimensionnelle devient la suivante.

$$\begin{aligned} \left[\phi \frac{\partial \bar{k}}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} (\phi \bar{k} \bar{u}_j) \right] &= \left(\phi \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \hat{x}_j} + \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\hat{\rho}} \right) \left(\frac{2}{Re} \hat{\nu}_t \bar{d}_{d,ij} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \\ &\quad - \frac{1}{Re} \phi \bar{\epsilon} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \left(\phi \left(\hat{\nu} + \frac{\hat{\nu}_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial \hat{x}_j} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

La perturbation θ n'apparaît pas dans l'équation du taux de dissipation. Par conséquent, l'ordre 1 de l'équation dans laquelle les développement en séries de θ des variables sont insérés est identique à celle développée ci-dessus. Une fois de plus, l'équation reprend donc les termes d'ordre zéro du développement en séries de la perturbation θ .

Équation de bilan du taux de dissipation

L'adimensionnalisation se fait à partir de l'équation (4.28) reprise ci-dessous.

$$\begin{aligned} \left[\phi \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \phi \bar{\epsilon} \bar{u}_j \right] = & \left[\left(C_1 \phi \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + C_2 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\bar{\beta}_{ij}}{\bar{\rho}} \right) \left(2\nu_t \overline{d_{d,ij}} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \right. \\ & \left. - C_3 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \phi \bar{\epsilon} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\phi \left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial x_j} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\nu_r u_r^3}{L_r^3} \phi \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial \hat{t}} + \frac{\nu_r u_r^3}{L_r^3} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \phi \bar{\epsilon} \widehat{\bar{u}_j} \right] = & \left[\left(C_1 \frac{\nu_r u_r}{L_r^3} \phi \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\partial \widehat{\bar{u}_i}}{\partial \hat{x}_j} + C_2 \frac{\nu_r u_r}{L_r^3} \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\widehat{\bar{\beta}_{ij}}}{\widehat{\bar{\rho}}} \right) \left(2 \frac{\nu_r u_r}{L_r} \widehat{\nu_t \overline{d_{d,ij}}} - \frac{2}{3} u_r^2 \bar{k} \delta_{ij} \right) \right. \\ & \left. - C_3 \frac{\nu_r^2 u_r^2}{L_r^4} \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \phi \bar{\epsilon} + \frac{\nu_r^2 u_r^2}{L_r^4} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \left(\phi \left(\widehat{\nu} + \frac{\widehat{\nu_t}}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial \hat{x}_j} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

L'équation précédente est divisée par $\frac{\nu_r u_r^3}{L_r^3}$:

$$\begin{aligned} \left[\phi \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \phi \bar{\epsilon} \widehat{\bar{u}_j} \right] = & \left[\left(C_1 \frac{1}{u_r^2} \phi \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\partial \widehat{\bar{u}_i}}{\partial \hat{x}_j} + C_2 \frac{1}{u_r^2} \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\widehat{\bar{\beta}_{ij}}}{\widehat{\bar{\rho}}} \right) \left(2 \frac{\nu_r u_r}{L_r} \widehat{\nu_t \overline{d_{d,ij}}} - \frac{2}{3} u_r^2 \bar{k} \delta_{ij} \right) \right. \\ & \left. - \frac{\nu_r}{L_r u_r} C_3 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \phi \bar{\epsilon} + \frac{\nu_r}{L_r u_r} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \left(\phi \left(\widehat{\nu} + \frac{\widehat{\nu_t}}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial \hat{x}_j} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

En utilisant à nouveau la définition du nombre de Reynolds, l'équation précédente devient :

$$\begin{aligned} \left[\phi \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \phi \bar{\epsilon} \widehat{\bar{u}_j} \right] = & \left[\left(C_1 \phi \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\partial \widehat{\bar{u}_i}}{\partial \hat{x}_j} + C_2 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \frac{\widehat{\bar{\beta}_{ij}}}{\widehat{\bar{\rho}}} \right) \left(2 \frac{1}{Re} \widehat{\nu_t \overline{d_{d,ij}}} - \frac{2}{3} \bar{k} \delta_{ij} \right) \right. \\ & \left. - \frac{1}{Re} C_3 \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \phi \bar{\epsilon} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial \hat{x}_j} \left(\phi \left(\widehat{\nu} + \frac{\widehat{\nu_t}}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial \hat{x}_j} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

La perturbation θ n'apparaît pas dans l'équation bilan du taux de dissipation. Par conséquent, l'ordre 1 de l'équation dans laquelle les développements en séries de θ des variables sont insérés est identique à celle développée ci-dessus. Les variables font référence à l'ordre zéro du développement en séries.

Finalement nous avons l'équation qui permet d'obtenir la viscosité turbulente B.14 :

$$\nu_t = C_\nu \left(\frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \right) \quad (\text{B.14})$$

$$\widehat{\nu_t} \nu_r = C_\nu \left(\frac{\bar{k}^2 u_r^4 L_r^2}{\bar{\epsilon} \nu_r u_r^2} \right) \quad (\text{B.15})$$

$$\hat{\nu}_t = C_\nu Re^2 \left(\frac{\bar{k}^2}{\bar{\epsilon}} \right) \quad (\text{B.16})$$

Traitement de la paroi

Le premier terme à adimensionnaliser est le terme ajouté dans le bilan d'énergie cinétique turbulente.

$$D = 2\phi \frac{\nu \bar{k}}{y^2} \quad (\text{B.17})$$

$$D = 2\phi \frac{\hat{\nu} \bar{k}}{\hat{y}^2} \frac{\nu_r u_r^2}{L_r^2} \quad (\text{B.18})$$

Comme pour passer de l'équation (B.7) à (B.8), il faut diviser l'expression par $\frac{u_r^2}{L_r^2}$. L'expression devient alors

$$D = 2\phi \frac{\hat{\nu} \bar{k}}{\hat{y}^2} \frac{\nu_r}{u_r L_r} = \frac{2\phi}{Re} \frac{\hat{\nu} \bar{k}}{\hat{y}^2} \quad (\text{B.19})$$

Le terme suivant est le terme ajouté dans le bilan de dissipation turbulente.

$$E = 2\phi \frac{\nu \bar{\epsilon}}{y^2} \exp(-0.5y^+) \quad (\text{B.20})$$

$$E = 2\phi \frac{\hat{\nu} \bar{\epsilon}}{\hat{y}^2} \frac{\nu_r^2 u_r^2}{L_r^4} \exp(-0.5\sqrt{Re} \hat{y}^+) \quad (\text{B.21})$$

La même étape que pour le terme D est effectuée. L'expression est cette fois-ci divisée par $\frac{\nu_r u_r^3}{L_r^3}$. L'adimensionnalisation de y^+ est détaillée plus bas.

$$E = 2\phi \frac{\hat{\nu} \bar{\epsilon}}{\hat{y}^2} \frac{\nu_r}{u_r L_r} \exp(-0.5\sqrt{Re} \hat{y}^+) = \frac{2\phi}{Re} \frac{\hat{\nu} \bar{\epsilon}}{\hat{y}^2} \exp(-0.5\sqrt{Re} \hat{y}^+) \quad (\text{B.22})$$

Les deux derniers termes à développer sont les termes qui interviennent dans les fonctions d'amortissement. Leurs expressions dimensionnelles sont les suivantes.

$$Re_t = \frac{\bar{k}^2}{\nu \bar{\epsilon}} \quad (\text{B.23})$$

$$y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu} \quad \text{avec} \quad u_\tau = \sqrt{\nu \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right|_{y=0}} \quad (\text{B.24})$$

Par des développements similaires aux précédents, les expressions deviennent :

$$\widehat{Re}_t Re = \frac{\bar{k}^2}{\hat{\nu} \bar{\epsilon}} \frac{u_r^4 L_r^2}{\nu_r^2 u_r^2} = \frac{\bar{k}^2}{\hat{\nu} \bar{\epsilon}} Re^2 \quad (\text{B.25})$$

$$\widehat{y}^+ = \frac{\widehat{u}_\tau \widehat{y}}{\widehat{\nu}} \sqrt{\frac{\nu_r u_r}{L_r} \frac{L_r}{\nu_r}} = \frac{\widehat{u}_\tau \widehat{y}}{\widehat{\nu}} \sqrt{Re} \quad (\text{B.26})$$

Par souci de meilleure lisibilité, la notation $\hat{\psi}$ n'est plus utilisée pour une variable adimensionnelle et est remplacée par la simple notation ψ à partir de l'équation (4.30) pour les équations dynamiques et l'équation (4.47) pour l'équation de dispersion.

Bibliographie

- [1] AIRPARIF. *Tableau récapitulatif (origine, impacts sur l'environnement et sur la santé) des principaux polluants et des autres sources de nuisances*. https://www.airparif.asso.fr/_pdf/tableau-polluants-origine-impacts.pdf. Consulté le 1/05/2020.
- [2] Amid ANSARI. "Self-similarity and mixing characteristics of turbulent mixing layers starting from laminar initial conditions". In : *Physics of Fluids* 9.6 (1997), p. 1714-1728. DOI : 10.1063/1.869288.
- [3] Panagiotis D. ANTONIADIS et Miltiadis V. PAPALEXANDRIS. "Numerical study of unsteady, thermally-stratified shear flows in superposed porous and pure-fluid domains". In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 96 (2016), p. 643-659. ISSN : 0017-9310. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.01.056>.
- [4] Panagiotis Dimitrios ANTONIADIS. "Modeling and numerical simulation of transient flows in superposed porous and pure-fluid layers". Thèse de doct. Louvain-la-Neuve, Belgium : Université Catholique de Louvain, sept. 2015.
- [5] Tirtha BANERJEE, Frederik DE ROO et Rodman LINN. "Revisiting Kelvin Helmholtz Instabilities and von Kármán Vortices in Canopy Turbulence". In : *Hydrology and Earth System Sciences Discussions* (oct. 2017). DOI : 10.5194/hess-2017-595.
- [6] Jacob BEAR et Yehuda BACHMAT. "Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media". In : jan. 1990.
- [7] Jacob BEAR et Yehuda BACHMAT. "Macroscopic Description of Transport Phenomena in Porous Media". In : jan. 1990, p. 43-262. ISBN : 978-0-7923-1106-5. DOI : 10.1007/978-94-009-1926-6_2.
- [8] Brian BERKOWITZ et al. "Physical pictures of transport in heterogeneous media : Advection-dispersion, random-walk, and fractional derivative formulations". In : *Water Resources Research* 38.10 (2002), p. 9-1-9-12. DOI : 10.1029/2001WR001030.
- [9] Branko BIJELJIC et Martin J. BLUNT. "Pore-scale modeling and continuous time random walk analysis of dispersion in porous media". In : *Water Resources Research* 42.1 (2006). DOI : 10.1029/2005WR004578.
- [10] James BLEEG et al. "Modeling stable thermal stratification and its impact on wind flow over topography". In : *Wind Energy* 18.2 (2015), p. 369-383. DOI : 10.1002/we.1692. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/we.1692>.

- [11] Joan CAMPOY, Jose GONZALEZ-MORA et Cristian DIMA. “Advanced Sensing for Tree Canopy Modeling and Precision Spraying”. In : *American Society of Agricultural and Biological Engineers Annual International Meeting 2010, ASABE 2010* Vol. 6 (jan. 2010). DOI : 10.13031/2013.29915.
- [12] La CENTRALE. *Fiche technique Volkswagen POLO - 2017 (Citadines) : V (2) 1.4 TDI 90 BLUEMOTION TECHNOLOGY ALLSTAR 5P*. [https://www.lacentrale.fr/fiche-technique-voiture-volkswagen-polo-v+\(2\)+1.4+tdi+90+bluemotion+technology+allstar+5p-2017.html](https://www.lacentrale.fr/fiche-technique-voiture-volkswagen-polo-v+(2)+1.4+tdi+90+bluemotion+technology+allstar+5p-2017.html). Consulté le 28/04/2020.
- [13] La CENTRALE. *Fiche technique Volkswagen POLO - 2017 (Citadines) V (2) 1.0 75 ALLSTAR 5P*. [https://www.lacentrale.fr/fiche-technique-voiture-volkswagen-polo-v+\(2\)+1.0+75+allstar+5p-2017.html](https://www.lacentrale.fr/fiche-technique-voiture-volkswagen-polo-v+(2)+1.0+75+allstar+5p-2017.html). Consulté le 28/04/2020.
- [14] Hsun-Chuan CHAN et al. “Macroscopic Modelling of Turbulent Flow Over a Porous Medium”. In : *International Journal of Heat and Fluid Flow* 28 (oct. 2007), p. 1157-1166. DOI : 10.1016/j.ijheatfluidflow.2006.10.005.
- [15] Huangxin CHEN et Xiao-Ping WANG. “A one-domain approach for modeling and simulation of free fluid over a porous medium”. In : *Journal of Computational Physics* 259 (2014), p. 650-671. ISSN : 0021-9991. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.12.008>. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999113008073>.
- [16] Frank A. COUTELIERIS et J.M.P.Q. DELGADO. *Transport Processes in Porous Media*. Advanced Structured Materials : Book 20. Springer Science & Business Media, 2012.
- [17] Hiroshi DEI. “Studies on Dispersion of Salts in Coastal Aquifers (1).” In : *Japanese Journal of Limnology (Rikusuigaku Zasshi)* 39.3 (1978), p. 112-117. DOI : 10.3739/rikusui.39.112.
- [18] Eric DELEERSNIJDER et al. “Some mathematical problems associated with the development and use of marine models”. In : *The Mathematics of Models for Climatology and Environment* (jan. 1997). DOI : 10.1007/978-3-642-60603-8_2.
- [19] Environmental Defense Fund EDF. *Methane : The other important greenhouse gas*. <https://www.edf.org/climate/methane-other-important-greenhouse-gas>. Consulté le 19/04/2020.
- [20] European Environment Agency EEA. *European Pollutant Release and Transfer Register : Excel file*. Consulté le 27/04/2020. URL : <https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/data/member-states-reporting-art-7-under-the-european-pollutant-release-and-transfer-register-e-prtr-regulation-23?fbclid=IwAR0BRXTyYplgv8hCGv4068yespZUVVuYz0rU1060U9k7s8GsXCmVnmY9GbU>.
- [21] Bruxelles ENVIRONNEMENT. *Principaux effets des polluants atmosphériques sur la santé et l'environnement*. https://environnement.brussels/sites/default/files/user_files/airnet_effets_polluants_fr.pdf. Consulté le 1/05/2020.
- [22] Martin FERM et Karin SJÖBERG. “Concentrations and emission factors for PM_{2.5} and PM₁₀ from road traffic in Sweden”. In : *Atmospheric Environment* 119 (2015), p. 211-219. ISSN : 1352-2310. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.08.037>.

- [23] J.J. FRIED et M.A. COMBARNOUS. “Dispersion in Porous Media”. In : sous la dir. de Ven Te CHOW. T. 7. *Advances in Hydrosience*. Elsevier, 1971, p. 169-282. DOI : <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-021807-3.50008-4>.
- [24] Tchobanoglous G. et Kreith F. *Handbook of Solid Waste Management*. Sous la dir. de McGraw Hill HANDBOOKS. 2^e éd. New York, 2002.
- [25] K. GAVRILOV et al. “Numerical simulation of coherent turbulent structures and of passive scalar dispersion in a canopy sub-layer”. In : *Computers & Fluids* 78 (2013). LES of turbulence aeroacoustics and combustion, p. 54-62. ISSN : 0045-7930. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.08.021>.
- [26] Marco GHISALBERTI et Heidi NEPF. “The Structure of the Shear Layer in Flows over Rigid and Flexible Canopies”. In : *Environmental Fluid Mechanics* 6 (juin 2006), p. 277-301. DOI : 10.1007/s10652-006-0002-4.
- [27] Vincent GUINOT et Bernard CAPPELAERE. “Méthodes Numériques Appliquées (Résolution numérique des équations différentielles de l’ingénieur)”. In : (mai 2020), p. 60-61.
- [28] Monir HOSSAIN et Anne STAPLES. “Effects of coral colony morphology on turbulent flow dynamics”. In : *bioRxiv* (2019). DOI : 10.1101/839902.
- [29] Zhangbao HU et al. “Numerical investigation on the urban heat island in an entire city with an urban porous media model”. In : *Atmospheric Environment* 47 (2012), p. 509-518. ISSN : 1352-2310. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2011.09.064>.
- [30] Udo JÄCKEL, Kathrin THUMMES et Peter KÄMPFER. “Thermophilic methane production and oxidation in compost”. In : *FEMS Microbiology Ecology* 52.2 (avr. 2005), p. 175-184. ISSN : 0168-6496. DOI : 10.1016/j.femsec.2004.11.003.
- [31] Chang Hoon JUNG et al. “Approximation of most penetrating particle size for fibrous filters considering Cunningham slip correction factor”. In : *Environmental Engineering Research* 25.3 (2020), p. 439-445. DOI : 10.4491/eer.2019.058.
- [32] Apostolos KANTZAS, Jonathan BRYAN et Saeed TAHERI. *Fundamentals of Fluid Flow in Porous Media. Chapter 5. Miscible Displacement : The Equation of Continuity in Porous Media : Equation of Dispersion in Porous Media*. Consulté le 28/05/2020. PERM Inc. TIPM Laboratory. URL : <https://perm-inc.com/resources/fundamentals-of-fluid-flow-in-porous-media/chapter-5-miscible-displacement/equation-continuity-porous-media/equation-dispersion-porous-media/>.
- [33] E. S. G. KATHER. “Some Physical and Chemical Properties of Compost”. In : (fév. 2015). Sous la dir. d’International Journal of WASTE RESOURCES.
- [34] Itzhak KATRA et al. “Modeling of particulate matter transport in atmospheric boundary layer following dust emission from source areas”. In : *Aeolian Research* 20 (2016), p. 147-156. ISSN : 1875-9637. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.aeolia.2015.12.004>.
- [35] Allergologisk Laboratorium KØBENHAVN. *Pollens de graminées*. <https://www.alk.fr/pollens-de-graminees>. Consulté le 11/05/2020.

- [36] B. J. LÁZARO et J. C. LASHERAS. “Particle dispersion in a turbulent, plane, free shear layer”. In : *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 1.6 (1989), p. 1035-1044. DOI : 10.1063/1.857394.
- [37] R. L. LEBOEUF et R. D. MEHTA. “Vortical structure morphology in the initial region of a forced mixing layer : Roll-up and pairing”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 315 (May 1996), 175-221. ISSN : 0022-1120. DOI : 10.1017/S002211209600239X.
- [38] V. LEGAT. *Mathématiques et méthodes numériques ...ou les aspects facétieux du calcul sur un ordinateur. Notes pour les cours EPL1104*. Université Catholique de Louvain. Version 8.1. 2020, p. 116-120.
- [39] F. LIEBERHERR-GARDIOL. “Durabilité urbaine et gouvernance, enjeux du xxie siècle.” In : 2007, p. 373-385. DOI : 10.3917/riss.193.0373.
- [40] F.S LIEN et al. “Progress and challenges in the development of physically based numerical models for prediction of flow and contaminant dispersion in the urban environment”. In : *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 20 (jan. 2007).
- [41] Ashok K. LUHAR et Rex E. BRITTER. “A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer”. In : *Atmospheric Environment (1967)* 23.9 (1989), p. 1911-1924. ISSN : 0004-6981. DOI : [https://doi.org/10.1016/0004-6981\(89\)90516-7](https://doi.org/10.1016/0004-6981(89)90516-7).
- [42] Ashok NAIMPALLY et Kirsten ROSSELOT. *Environmental Engineering : Review for the Professional Engineering Examination*. Août 2014, p. 88-89. DOI : 10.1007/978-0-387-49930-7.
- [43] BEP Bureau économique de la province de NAMUR. *Guide du compostage individuel*. Sept. 2016, p. 2-3.
- [44] World Wide Fund For NATURE. *Coraux : essentiels à la vie marine*. <https://www.wwf.fr/especes-prioritaires/coraux>. Consulté le 12/05/2020.
- [45] H. NEPF et al. “Retention time and dispersion associated with submerged aquatic canopies”. In : *Water Resources Research* 43.4 (2007). DOI : 10.1029/2006WR005362.
- [46] L. Huber P. DE PARCEVEAUX. *Bioclimatologie : concepts et applications*. Quae éditions, 2007, p. 89. ISBN : 978-2-7592-0047-4.
- [47] Jacques PADET. *Fluides en Ecoulement - Méthodes et Modèles*. 2^e éd. Jan. 2011. Chap. 3.
- [48] M.V. PAPALEXANDRIS et P.D. ANTONIADIS. “A thermo-mechanical model for flows in superposed porous and fluid layers with interphasial heat and mass exchange”. In : *International Journal of Heat and Mass Transfer* 88 (2015), p. 42-54. ISSN : 0017-9310. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.04.049>.
- [49] Université de PICARDIE JULES VERNE. *L’atmosphère*. <https://www.u-picardie.fr/beauchamp/mbg6/atmos.htm>. Consulté le 2/05/2020.
- [50] Davide POGGI et al. “The Effect of Vegetation Density on Canopy SubLayer Turbulence”. In : *Boundary-layer Meteorology - BOUND-LAY METEOROL* 111 (juin 2004), p. 565-587. DOI : 10.1023/B:BOUN.0000016576.05621.73.

- [51] W. H. PRESS et al. *Numerical recipes. The Art of Scientific Computing*. 3^e éd. 2007, p. 56-57.
- [52] N. K. PUI et I. S. GARTSHORE. "Measurements of the growth rate and structure in plane turbulent mixing layers". In : *Journal of Fluid Mechanics* 91.1 (1979), p. 111-130. DOI : 10.1017/S0022112079000069.
- [53] Charlotte PY, Emmanuel de LANGRE et Bruno MOULIA. "The mixing layer instability of wind over a flexible crop canopy". In : *Comptes Rendus Mécanique* 332.8 (2004), p. 613-618. ISSN : 1631-0721. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.crme.2004.03.005>.
- [54] M. QUINTARD. *Diffusion/Dispersion en milieu poreux*. http://mquintard.free.fr/cours/diffus.pdf?fbclid=IwAR0CD0TyIdf6QVxDMbTPWP9Q_Fir8bwJ2gTT4grI_14io6_mb1gzD8_JDVo. Consulté le 27/04/2020. Mar. 2003.
- [55] J.D. RAMSHAW. *Elements of computational fluid dynamics*. Imperial College Press, 2011, p. 77-82. ISBN : 978-1-84816-695-0.
- [56] A. RICCI et al. "Local-scale forcing effects on wind flows in an urban environment : Impact of geometrical simplifications". In : *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 170 (2017), p. 238-255. ISSN : 0167-6105. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jweia.2017.08.001>.
- [57] M. RUBIO. *Forêt et cycle du carbone*. https://www.appa.asso.fr/wp-content/uploads/2020/02/Rubio_2009.pdf. Consulté le 12/05/2020.
- [58] Simonetta RUBOL, Ilenia BATTIATO et Felipe de BARROS. "Vertical dispersion in vegetated shear flows". In : *Water Resources Research* (sept. 2016). DOI : 10.1002/2016WR018907.
- [59] Simonetta RUBOL, Bowen LING et Ilenia BATTIATO. "Universal scaling-law for flow resistance over canopies with complex morphology". In : *Scientific Reports* 8 (déc. 2018). DOI : 10.1038/s41598-018-22346-1.
- [60] S.M. SCHAUB-SZABO et J.J. LEONARD. "Characterizing the Bulk Density of Compost". In : *Compost Science & Utilization* 7.4 (1999), p. 15-24. DOI : 10.1080/1065657X.1999.10701980.
- [61] R. SCHIESTEL. "Modèle de turbulence générique à deux équations de transport". In : (jan. 2005).
- [62] USGS SCIENCE FOR A CHANGING WORLD. *Water Science School : Aquifers and Groundwater*. https://www.usgs.gov/special-topic/water-science-school/science/aquifers-and-groundwater?qt-science_center_objects=0#qt-science_center_objects. Consulté le 11/05/2020.
- [63] W. SOBIESKI et al. "The Path Tracking Method as an alternative for tortuosity determination in granular beds." In : *Granular Matter* 20 (2018), p. 72. DOI : <https://doi.org/10.1007/s10035-018-0842-x>.

- [64] Baojun SONG et Ryoichi AMANO. “A higher-order bounded discretization scheme”. In : *WIT Transactions on State of the Art in Science and Engineering* 14 (nov. 2010). Consulté le 3/05/2020. DOI : 10.2495/978-1-84564-144-3/01. URL : <https://www.witpress.com/Secure/elibrary/papers/9781845641443/9781845641443001FU1.pdf>.
- [65] Z. TAN. *Air pollution and greenhouse gases*. Springer, 2014, p. 91-103. ISBN : 978-981-287-212-8.
- [66] D.M. TARTAKOVSKY et M. DENTZ. “Diffusion in Porous Media : Phenomena and Mechanisms. Transport in Porous Media 130, 105–127”. In : (2019).
- [67] C. VARSAKELIS et M. V. PAPALEXANDRIS. “Low-Mach-number asymptotics for two-phase flows of granular materials”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 669 (2011), p. 472-497. DOI : 10.1017/S0022112010005173.
- [68] Subhas VENAYAGAMOORTHY et al. “Testing of RANS turbulence models for stratified flows based on DNS data”. In : (déc. 2003). URL : <https://web.stanford.edu/group/ctr/ResBriefs03/Venayagamoorthy.pdf>.
- [69] Henk Kaarle VERSTEEG et Weeratunge MALALASEKERA. *An introduction to computational fluid dynamics - the finite volume method*. Addison-Wesley-Longman, 1995, p. I-X, 1-257. ISBN : 978-0-582-21884-0.
- [70] J. De VILLERS, M. SQUILBIN et P. VANDERSTRAETEN. *Ozone troposphérique*. https://document.environnement.brussels/opac_css/elecfile/Air%2010. Consulté le 14/05/2020.
- [71] Joseph WERNE. *Stratified flows*. Sous la dir. de Center for Turbulence Research STANFORD UNIVERSITY. <https://web.stanford.edu/group/ctr/ctrsp02/stratified.pdf>. Consulté le 2/05/2020. 2002.

UNIVERSITÉ CATHOLIQUE DE LOUVAIN
École polytechnique de Louvain

Rue Archimède, 1 bte L6.11.01, 1348 Louvain-la-Neuve, Belgique | www.uclouvain.be/epl