RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEURE
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ DE BATNA

FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

Mémoire
Présenté pour l'obtention du diplôme de magistère

Spécialité : PHYSIQUE

Option : PHYSIQUE ENERGETIQUE

MODELISATION ET SIMULATION DE LA REACTIVITE D'UN POLLUANT EN ATMOSPHERE PAR LA METHODE DES DIFFERENCES FINIES APPLICATION AUX OXYDES D'AZOTE

Présenté par:

Meguellati Farouk

Devant le jury:

N. Moumi	M.C	Président	Univ. Biskra
H. Ben Moussa	M.C	Rapporteur	Univ. Batna
N. Bourmada	M.C	Examinateur	Univ. Batna
Z. Aouachria	C.C	Examinateur	Univ. Batna
A. Soudani	M.C	Examinateur	Univ. Batna

ANNEE UNIVERSITAIRE 2005 / 2006

Remerciement

Mes remerciements s'adresse également aux enseignants :
Dr H. Ben Moussa, Dr R. Hamzi et Dr N. Bourmada pour m'avoir proposer ce travail ainsi que ses fructueux conseils et orientations et qui ont permis la réalisation de ce travail.

Je remercie infiniment mon ami Djamel, Dr Hamzi et Dr K. Oulmi à leur aide, sans oublier les deux petites dames de notre groupe Samia et Yasmine.

Mes toutes sincères remerciement à ma famille : ma mère, mes frères et sœurs à leur soutient le long de toutes les années passées et je dédie ce travail à la mémoire de mon très cher père, mes frères et sœur, mes grands père et mère.

Je remercie les membres de jury pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu porter à ce modeste travail , messieurs les docteurs : N. Moumi, Z. Aouachria, A. Soudani, N. Bourmada et H. Benmoussa.

A tout ce qui de près ou de loin m'on aider à la réalisation de ce modeste travail par l'aide, la sympathie et le soutient moral.

Lettres

cp_α : *Chaleur spécifique d'une espèce*
D_m : *Coefficient de diffusion du mélange*
D_a : *Nombre de Damkohler*
E : *Energie totale*
g_i : *Accélération de la gravité*
Gr_m : *Nombre de Grashof massique*
Gr_T : *Nombre de Grashof thermique*
h_a : *Enthalpie de formation des espèces*
h_α^0 : *Enthalpie standard*
$h^{'}$: *Enthalpie fluctuante*
H : *Hauteur du domaine*
j_q : *Flux de chaleur*
k : *Constante de vitesse d'une espèce*
k_b : *Energie cinétique turbulente*
L : *Longueur du domaine*
M_a : *Masse molaire d'une espèce*
M_t : *Nombre de Mach*
P : Pression
Pr_t : *Nombre de* Prandtl *turbulent*
R : *Constante des gaz parfait*
Re : *Nombre de* Reynolds
Sc_α : *Nombre de Schmidt d'une espèce*
T_{ref} : *Température de référence*
$u_j^{'}$: *Vitesse fluctuante*
u_∞ : *Vitesse de référence*
w_α : *Taux de réaction d'une espèce*
Y_m : *Fraction massique du mélange*
Y_α : *Fraction massique d'une espèce*

Grec

ε : *Taux de dissipation de l'énergie cinétique*
ρ : *Masse volumique*
μ : *Viscosité dynamique*
μ_t : *Viscosité turbulente*
τ_{ij} : *Tenseur moyenne des contraintes de déformation*
C_μ : *Constante de l'approche de viscosité turbulente*
σ_k : *Nombre de* Prandtl *turbulent pour* k
σ_ε : *Nombre de* Prandtl *turbulent pour* ε
β_m : *Coefficient d'*expansion *(de dilatation) massique*
β_T : *Coefficient d'*expansion *(de dilatation) thermique*
λ : *Conductivité thermique*

Sommaire

Introduction Générale ……2

Chapitre I Généralités Sur La Pollution Atmosphérique

I.1- Introduction ……...…6
I.2- L'atmosphère terrestre ……..…6
I.2.1- Structure de l'atmosphère……...6
I.2.2- Nature et dynamique de la basse atmosphère……..…8
I.2.3- Composition chimique……....9
I.3- La pollution atmosphérique…….10
I.3.1- Les échelles spatiales de pollution ……..…..10
I.3.2- Les principaux polluants……...12
I.4.1-Émission des polluants……...15
I.4- Dispersion des polluants en atmosphère……..15
I.4.2-Transport des polluants……..15
I.5- Les différentes approches pour modéliser la pollution atmosphérique……....16
I.5.1- L'approche Eulérienne…….....16
I.5.2- L'approche Lagrangienne…….16
I.5.3- Le couplage : modèles sous mailles…….....17
I.5.4 - Les modèles épisodiques……..17
I.6- Les modèles numériques existants de Chimie- Transport……17

Chapitre II Dynamique De La Couche Limite Atmosphérique

II.1- Introduction ……20
II.2- Description de la turbulence dans la CLA……...20
II.2.1- Turbulence dans la CLA……..….20
II.3- Les principales modélisations de la turbulence……..….22
II.3.1- La simulation numérique directe (DNS) ……..……..…22
II.3.2- La simulation des grandes échelles (LES) ……....22
II.3.3- La simulation des équations de Navier Stokes moyennées (RANS) ……..…23
II.4- Outils pour la modélisation……..…..23
II.4.1- Moyenne d'ensemble……..……..…24
II.5- Equations moyennées……24
II.5.1- Rappel des équations instantanées…….25
II.5.2- Les équations du mouvement moyen……..…25
II.5.3- Les équations du mouvement fluctuant……..…26
III.5.4- Le problème de la fermeture……28

Chapitre III Chimie De La Couche Limite Atmosphérique :
Transport De Masse Et Cinétique Chimique

III.1- Introduction……37
III.2- Description des équations générales pour la chimie……...37
III.2.1- Les équations de transport……...37
III.3- Cinétique chimique…….....39
III.3.1- Vitesse de réaction……...…...39
III.3.2- Equation de vitesse de Guldberg et Waage……..… 41
III.3.3- Recherche de l'ordre global d'une réaction…….. 42
III.3.4- Paramètres influençant la vitesse de réaction……..…46
III.3.5- Influence de la température sur la vitesse de réaction ……....46
II.3.6- Energie d'activation…….....46
III.3.7- Mécanisme réactionnel ……....48
III.3.8- Théorie de collision……..…49
III.3.9- Loi de vitesse d'une réaction complexe……..…49
III.4-Photochimie……...….51

Chapitre IV modèle numérique

IV.1- Introduction……55
IV.2- Méthodes des différences finies ……56
IV.3- Discrétisation de l'équation générale de transport……...……..…57
IV.4- Méthode des volumes finis……...58
IV.5- Méthode des éléments finis ……...62
IV.6- Discrétisation numérique……...62
IV.7- Algorithme de résolution des équations discrétisées……66

Chapitre V résultats et discussion

V.1- Formulation du problème……...70
V.2- Modèle mathématique……...70
V.3- Conditions aux limites……73
V.4- Discussions des résultats de simulation……. 73
V.4.1- Profils des lignes de courants……..……...74
V.4.2- Profils de vitesses moyennés……75
V.4.3- L'énergie cinétique turbulente……76
V.4.4- Profils de contrainte de Reynolds……78
V.4.5- Température……80
V.4.6- Evolution de la concentration en fonction du temps des différents constituants de la réaction des NOx……81
conclusion ……...89
Annexe

Introduction générale

Introduction Générale :

La modélisation numérique est un outil de compréhension, d'analyse et dans certains cas de prévision. Les modèles numériques, dites « d'atmosphère et d'océan », ont d'abord été crées pour simuler les régimes de vent et de courant à l'échelle du globe. Pour cela, ils utilisent les équations de la mécanique des fluides et calculent ainsi avec une résolution de quelques centaines de kilomètres, l'évolution de paramètres tels que le vent, la température, l'humidité, l'eau nuageuse ou les précipitations Il existe un grand nombre de modèles numériques de transports et transformations d'éléments dans l'atmosphère. Ces modèles se distinguent suivant les échelles spatiales et temporelles prises en compte mais aussi suivant les équations de transport utilisées.

Dans le domaine de la qualité de l'air, il devient possible de modéliser l'évolution physico-chimique des polluants, leur émission, leur transport, leur diffusion, leur dépôt et transformation chimique. Divers modèles sont aujourd'hui couramment utilisés par les spécialistes de la qualité de l'air. Ils permettent d'accéder à une estimation des concentrations des polluants atmosphérique dans l'espace et dans le temps.

Il est possible de les classifier suivant l'échelle spatiale utilisée pour modéliser l'environnement :

- A l'échelle locale, les modèles tiennent en compte la topographie locale et des obstacles. Ils permettent de suivre, à fine résolution spatiale, l'évolution d'une situation de pollution. La zone d'étude est limite à celle d'un tronçon de rue ou d'un quartier.
- A l'échelle urbaine, les modèles se distinguent suivant la résolution spatiale de travail, les paramètres d'entrées utilisés, l'initialisation du modèle, les conditions aux frontières, les techniques numériques utilisées. La qualité des résultats de chacun des modèles dépend de la qualité des paramètres d'entrées.
- A l'échelle régionale, les domaines d'étude s'étendent sur une centaine de kilomètres horizontalement et sur des périodes d'une durée de quelques jours. La résolution du maillage est de l'ordre du kilomètre.

Un modèle de pollution atmosphérique est constitué d'outils développés séparément :

- Un modèle pour simuler des écoulements de l'air dans la couche limite atmosphérique en trois dimensions. Il prend en compte le relief, les caractéristiques du sol, le forçage

par des conditions météorologiques au bord du domaine et des termes sources de polluants pour leur dispersion passive ;

- Un module chimique gérant l'évolution d'un nombre limité représentatif de polluants primaires. Les réactions chimiques dans la couche limite atmosphérique font intervenir un grand nombre d'espèces chimiques et des réductions de schémas cinétiques sont nécessaires pour limiter le temps de calcul.

Alors le phénomène de la pollution atmosphérique traduit la présence dans l'air de polluants, dont les principaux sont les oxydes d'azote, les oxydes de soufre, l'ozone de basse altitudes, les particules en suspension, et tant d'autre. Ces différents polluants engendrent des conséquences néfastes sur les équilibres globaux, parmi ceux-ci on distingue, l'effet de serre additionnel, l'appauvrissement de la couche d'ozone stratosphérique, et les pluies acides, et qui ont fait l'objet des nombreuses études des recherches au niveau international.

Cependant le problème présenté par le mécanisme de réactivité des principaux polluants, et des photoxydant dans l'atmosphère, et conduisant ainsi au développement des différents problèmes liée au phénomène de la pollution atmosphérique reste jusqu'à aujourd'hui peut connu.
Dans ce contexte la problématique posée par notre travail se résume aux questions suivantes :

- Quels sont les phénomènes entrant en jeu dans la dispersion des d'oxydes d'azote ?
- Quelle est la réactivité d'un polluant dans l'atmosphère ?
- Quelle est l'évolution des oxydes d'azote dans l'air ?
- Comment réduire la pollution produite par les oxydes d'azote ?

Notre travail s'inscrit dans cette perspective, et s'inscrit dans le cadre de la chimie de l'environnement, et par le biais du quel nous essayerons d'apporter une modeste contribution quant a la compréhension de la réactivité des oxydes d'azote et leur transport dans l'atmosphère. Au cœur de la chimie de l'environnement, on trouve donc les propriétés des composés, leur répartition dans l'environnement et les connaissances qu'on peut en déduire sur les processus complexes se situant entre origines et effets. En ce qui concerne le transport des polluants, on s'intéresse à leur distribution spatiale et temporelle.

Nous allons alors étudier le processus de destruction des oxydes d'azote, ce chois peut être justifié par les considération suivantes :

- les oxydes d'azote possèdent une très grande réactivité dans l'atmosphère, et participent donc activement au phénomène des pluies acides et au phénomène du smog.
- Il sont nocifs, et représentent un sérieux problème pour la santé humaine.
- Sur un autre plan l'industrie algérienne est directement concernée par le rejet de ces polluants dans l'atmosphère.

A titre d'exemple l'industrie chimique (tel que ASMIDAL-ANNABA) rejette dans l'atmosphère les oxydes d'azote, les oxydes de soufres et autres.

Notre travail comporte les chapitres suivants :

- Le premier chapitre est consacré à une étude bibliographique sur les propriétés physico-chimiques, réactivités, sources et effets des oxydes d'azote.

Au moyen de cette théorie on peut déterminer la variation temporelle des concentrations des réactifs et celle des produits.

- Le deuxième chapitre montre comment est traité la dynamique des polluants présentés dans l'atmosphère, et donc la formulation d'un modèle mathématique.
- Le troisième chapitre présente des notions générales sur la théorie de la cinétique chimique, qui permettra d'établir les mécanismes réactionnels de ces polluants dans l'atmosphère afin d'étudier le temps de leurs séjours dans l'atmosphère.

- Le quatrième chapitre présente les différentes méthodes utilisées pour la discrétisation des équations régissant le phénomène de la dispersion des polluants (transport + réactivité)
- Et enfin le cinquième chapitre qui donne les résultats de simulation obtenus dans ce travail.

Chapitre I :
Généralités Sur
La Pollution Atmosphérique

I.1- Introduction :

Les besoins ressentis dans le domaine de la qualité de l'air (estimer la pollution hors des zones couvertes par la mesure, définir des mesures de réduction des émissions de polluants en cas de dépassement des seuils d'alerte et prévoir la pollution), et la complexité des phénomènes de pollution (en particulier due à la non linéarité du système chimique), ont incité les scientifiques à développer des modèles déterministes de simulation de la qualité de l'air. En outre, la prévision de la pollution est d'un intérêt scientifique majeur dans la mesure où une bonne prévision est le résultat d'une bonne compréhension des processus chimiques et physiques mis en jeu.

I.2- *L'atmosphère terrestre :*

I.2.1- Structure de l'atmosphère :

L'atmosphère terrestre se découpe habituellement en couches délimitées par des niveaux caractéristiques à des altitudes déterminées par la variation du gradient de température. En partant du sol vers les pressions faibles *(Fig. I.1*), on distingue notamment la troposphère, la stratosphère, la mésosphère, suivie de la thermosphère (figure 1.1). On divise les basses couches atmosphériques (altitude inférieure à 10 Km) en deux parties distinctes :

- ***La couche libre :*** la partie supérieure de la troposphère. Le vent y est déterminé par de grands mouvements d'ensemble à l'échelle de la planète et est appelé vent géostrophique. Il résulte de l'équilibre entre les forces de gradient de pression et la force de Coriolis due à la rotation de la Terre ;

- ***La couche limite atmosphérique (CLA)*** : la partie proche de la surface terrestre. Le sol y perturbe l'écoulement de l'air et donne naissance à une forte agitation appelée turbulence. La variation diurne du rayonnement solaire y est directement perceptible d'un point de vue thermique.

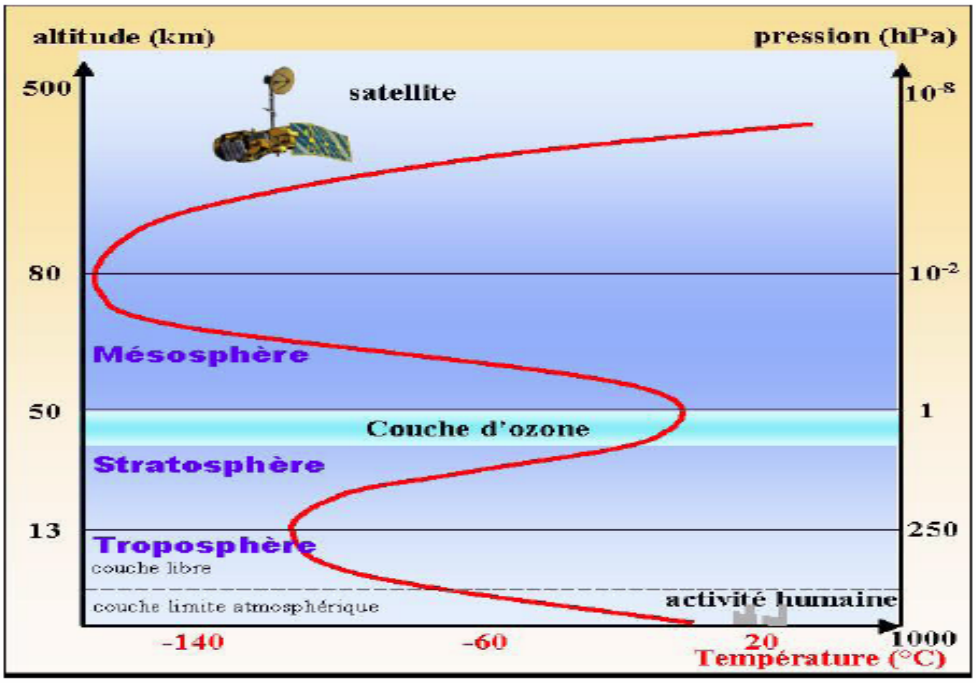


Figure I-1 : Les différentes couches atmosphériques.

La hauteur de la CLA varie dans le temps et dans l'espace. Elle est comprise en moyenne entre 100 et 3000 mètres. La partie supérieure de la CLA est appelée la couche d'Ekman. Les masses d'air y subissent à la fois le frottement de l'air sur la surface terrestre, la stratification thermique de l'air et la force de Coriolis. La rotation de la direction du vent avec l'altitude peut atteindre 30 à 40°. Ensuite la couche de surface, de dix à quelques dizaines de mètres, représente environ 10 % de la CLA. La turbulence y est homogène, et la force de Coriolis négligeable devant les forces de frottement dues au sol. Enfin, la direction du vent (composante horizontale de la vitesse) ne varie pas avec la hauteur alors que son intensité est proportionnelle au logarithme de l'altitude. La partie inférieure de la couche de surface, directement en contact avec la surface terrestre, est la sous-couche rugueuse. Elle se trouve au voisinage immédiat du sol. C'est une zone de mélange des sillages des obstacles rencontrés par le vent. Les champs de vitesses y sont fortement hétérogènes et instationnaires et les forces de frottement y sont prépondérantes. Son épaisseur varie en fonction de la nature du terrain, de quelques millimètres en mer à quelques dizaines de mètres en zone urbaine. C'est au travers de cette couche que se font les échanges de masse, d'énergie, et d'humidité entre le sol et la couche limite atmosphérique. Elle est caractérisée par la longueur de rugosité aérodynamique.

I.2.2- Nature et dynamique de la basse atmosphère :

En revenant sur la structure de la basse atmosphère, plus particulièrement sur la troposphère, la basse stratosphère et la limite entre ces deux couches : « tropopause » on constate que ce découpage n'est pas quelque chose de figé en fonction de la latitude. La troposphère est caractérisée par son gradient vertical de température négatif et la présence d'eau en quantité importante, sous ses trois formes (vapeur, liquide et solide). On y observe des mouvements verticaux intenses : l'air plus chaud et plus léger s'élève alors que l'air supérieur, plus froid, descend. Entre l'équateur et les pôles, l'épaisseur de la troposphère varie de 16 Km à 8 Km (12 Km dans les régions tempérées). Quant à la stratosphère située au-dessus de la troposphère, elle possède un gradient de température positif. La présence de l'eau s'y fait beaucoup plus rare d'où (sauf exception) une absence de nuages au-dessus de l'altitude de la tropopause. La stabilité verticale y est donc très grande car l'air froid, avec une densité plus grande, est situé au-dessous de l'air chaud avec une densité moindre. C'est un domaine stratifié d'où son nom, qui ne favorise pas les échanges verticaux.

En revanche, les mouvements horizontaux y sont importants, ce qui permet le transport de constituants sur de longues distances.

La tropopause, limite entre ces deux couches de l'atmosphère, fluctue et est parfois difficile à définir. Selon les conventions de la météorologie, la tropopause est définie comme étant la limite supérieure d'une couche dont le gradient de température est supérieur ou égal à -0,2 K/100 m. Cette couche doit être d'une épaisseur supérieure ou égale à 2 Km.

En plus de ce découpage vertical on peut aussi définir un découpage horizontal suivant la latitude qui est principalement dû à la dynamique des masses d'air. En effet il existe des mouvements d'air liés à la différence de température entre les différents niveaux de la troposphère, à quoi il faut aussi ajouter les mouvements d'air induits par la rotation de la Terre sur elle-même. On voit ainsi apparaître des cellules d'air dans lesquelles on observe des mouvements cohérents, ces cellules étant séparées par des frontières plus ou moins étanches qu'on appelle barrières dynamiques *(Fig. I-2)*. On distingue trois grands types de cellules qu'on retrouve dans chaque hémisphère terrestre : en partant de l'équateur vers les pôles, on a la cellule de Hadley, celle de Ferrel, et la cellule du pôle. A cela s'ajoutent les vents zonaux (Est- Ouest) *(Fig. I-3)* qui font de la troposphère un milieu où la circulation et le brassage de l'air sont importants. On remarque en particulier une circulation d'ouest aux latitudes moyennes et d'est aux basses et hautes latitudes. Mais le passage d'une masse d'air d'un

hémisphère à l'autre reste difficile. C'est ainsi que des quantités considérables de fines poussières émises lors de l'explosion du mont Saint Helens (volcan situé au nord-ouest des Etats-Unis) ont fait plusieurs fois le tour du monde, sans quitter l'hémisphère nord.

Les mouvements atmosphériques à la limite de la tropopause conduisent à des échanges entre la troposphère et la stratosphère, permettant ainsi à certains constituants atmosphériques de passer dans la stratosphère et d'y avoir une réactivité et une durée de vie très différentes par rapport à ce qui se passe dans la troposphère. Ces processus peuvent être représentés en termes de flux à travers la tropopause.

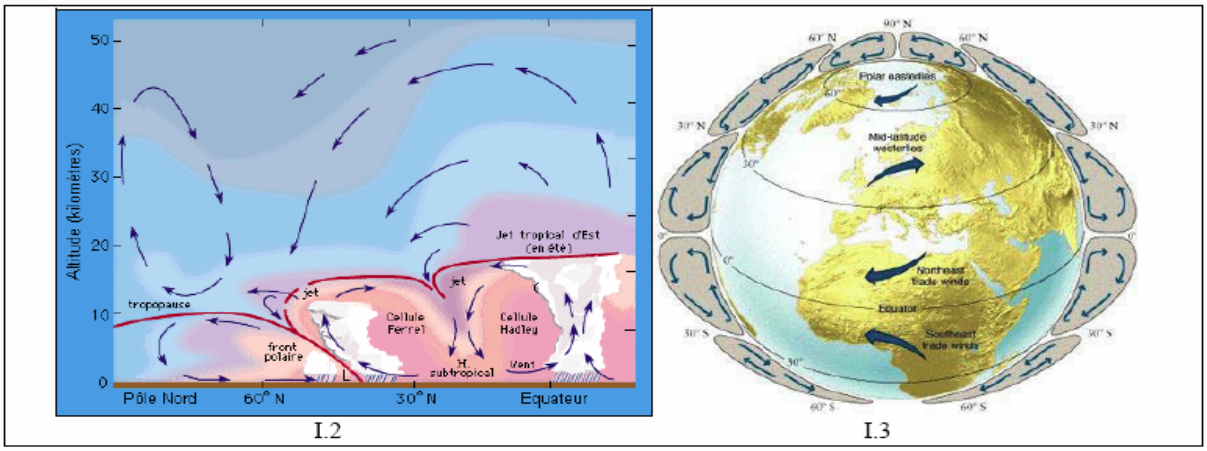


Figure I-2 et I-3 : Représentation des mouvements d'air verticaux en fonction de la latitude pour la basse atmosphère.

I.2.3- Composition chimique :

L'air propre et sec est constitué de 78 % d'azote, 21 % d'oxygène, 1 % d'argon, et de 0,33 % de dioxyde de carbone. S'ajoutent à cela la vapeur d'eau et les aérosols. Les aérosols sont des particules liquides ou solides de taille 0,001 à 10 microns environ d'origine et de nature variées. Les principales familles d'aérosols sont : les aérosols stratosphériques d'acide sulfurique liés en majeure partie aux éruptions volcaniques ; les aérosols troposphériques marins produits par les océans ; les aérosols désertiques constitués par des poussières minérales ; les aérosols anthropiques liés à la pollution urbaine ou aux feux de végétation et les aérosols résultants de transformations chimiques. Retenons que l'atmosphère se décompose en trois groupes : les molécules d'air sec et les gaz permanents, le contenu en eau et les aérosols.

I.3- La pollution atmosphérique :

Il y a pollution de l'air lorsque la présence d'une substance étrangère ou une variation importante dans la proportion de ses constituants est susceptible de provoquer un effet nuisible compte tenu des connaissances scientifiques du moment, ou de créer une gêne.

Un polluant atmosphérique n'est pas toujours une espèce étrangère à l'atmosphère. En effet, les composés chimiques introduits dans l'air par les diverses activités humaines (transport, combustions diverses, agriculture…) sont souvent de même nature que les espèces émises par des processus naturels. Ils deviennent polluants si la modification de leur concentration montre un impact négatif sur les êtres vivants et/ou sur l'environnement.

Les espèces émises dans l'atmosphère vont parfois réagir entre elles et donner naissance à de nouveaux constituants. Si la réaction nécessite un apport d'énergie lumineuse, la pollution résultante est appelée pollution photochimique. Les polluants émis directement dans l'atmosphère sont dits primaires tandis que ceux produits par des réactions chimiques sont dits secondaires.

I.3.1- Les échelles spatiales de pollution :

Les échelles de temps et d'espace qui caractérisent le phénomène de dispersion des polluants sont multiples. Le temps de vie d'un polluant dépend essentiellement de la rapidité de la chimie. Or, les vitesses de réaction sont très variables d'une réaction à une autre. Nous consacrons cette partie aux échelles spatiales qui peuvent être regroupées en trois catégories : les échelles locales, régionales ou globales.

I.3.1.1- la pollution à l'échelle locale : la pollution de proximité :

Cette pollution est celle qui existe à proximité des sources (industries, chauffage, trafic). C'est par exemple la pollution urbaine. Elle affecte la santé des populations par son action directe et à court terme, mais exerce également une toxicité à plus long terme pour certaines pathologies. Outre les problèmes de santé, la pollution de proximité peut procurer une gêne olfactive importante et participer à la dégradation du patrimoine bâti par corrosion et salissure. C'est cette pollution locale qui, la première, a fait l'objet d'un suivi aux abords des grands sites industriels.

I.3.1.2- La pollution à l'échelle régionale :

Elle caractérise des pollutions que l'on observe dans des zones situées à quelques dizaines, voire à plusieurs centaines de kilomètres des sources de pollution. Trois phénomènes sont regroupés sous ce terme, la pollution photochimique (abordé précédemment), les rejets accidentels (par exemple : Tchernobyl) et les pluies acides. Les oxydes d'azote et le souffre par combinaison avec la pluie créent des acides nitrique et sulfurique qui attaquent la végétation.

I.3.1.3- La pollution planétaire :

Il s'agit de la diminution de la couche d'ozone stratosphérique et de l'effet de serre. Les rejets dus aux activités humaines tendent à diminuer l'épaisseur la couche d'ozone stratosphérique, qui est nécessaires, à l'inverse de l'ozone de basse altitude (fig. I-4). En effet, la couche d'ozone filtre une grande part du rayonnement solaire ultraviolet, ce dernier peut engendrer une augmentation du risque de développer des pathologies telles que des cancers de la peau.

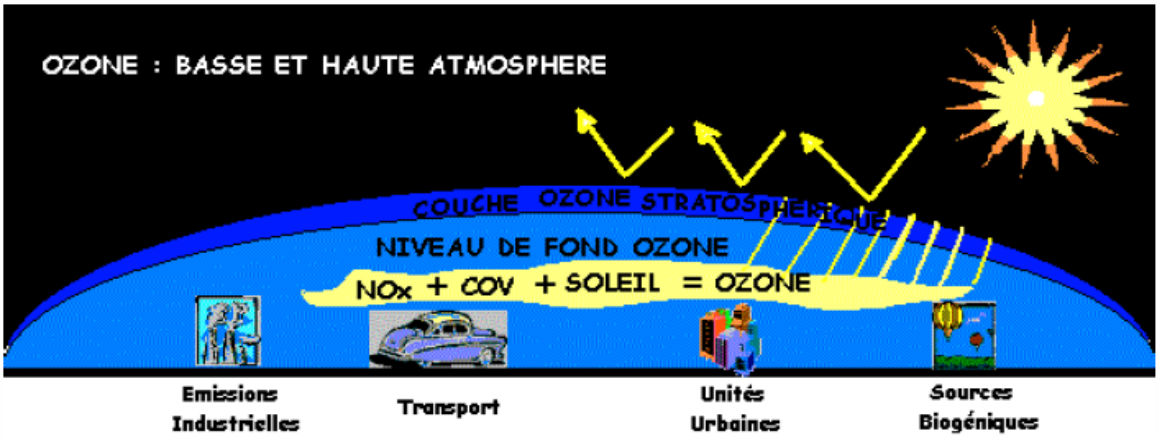


Figure I-4 : ozone stratosphérique et l'ozone à basse altitude

Tout comme l'ozone, l'effet de serre est indispensable à l'équilibre biologique terrestre. Il consiste en un réchauffement de l'atmosphère par des molécules qui ont la propriété de piéger les radiations à grande longueur d'onde émies par la surface du globe. Sans ce phénomène, la température de l'air serait inférieure de 30°C à sa valeur moyenne actuelle qui est de 15°C. Or, aujourd'hui, l'effet de serre augmente à cause des émissions anthropiques des certains gaz dits « à effet de serre », comme N2o, CO2, CH4, ou CO, ce qui conduit à un déséquilibre climatique.

La classification des échelles est récapitulée dans le tableau1.

Macro échelle α	Sup.10000 Km
Macro échelle β	2000 Km<L<10000 Km
Méso échelle α	200 Km<L<2000 Km
Méso échelle β	20 Km<L<200 Km
Méso échelle γ	2 Km<L<20 Km
Macro échelle α	0.2 Km<L<2 Km
Macro échelle β	0.02 Km<L<0.2 Km
Macro échelle γ	2 m<L<20 m
Macro échelle δ	2 mm<L<2 m

Tableau I-1 : Echelles d'étude de la pollution

I.3.2- Les principaux polluants :

Un polluant est un corps d'origine anthropique ou non, à l'état solide, liquide ou gazeux, contenu dans l'atmosphère et qui ne fait pas partie de la composition normale de l'air ou qui y est présent en quantité normale. Suivant un critère de toxicité, de spécificité de sources et de la pollution générée, les principaux polluants mesurés par les organismes de surveillance de la qualité de l'air sont les oxydes d'azote (NOx), le dioxyde de soufre (SO2), le monoxyde de carbone (CO), les particules en suspension (PS), le plomb (pb), les composés organiques volatils (COV) et l'ozone (O3). Une description complète des effets de ces polluants à court, moyen et long terme figure sur le rapport du haut comité de Santé Publique, et est reproduite ci-dessous :

polluants	Origines	Pollutions générées	Effets sur la santé
Dioxyde de soufre	Il provient essentiellement de la combustion de combustibles fossiles contenant du soufre : fioul, charbon. Compte tenu du développement du nucléaire, de l'utilisation de combustibles moins chargés en soufre et des systèmes de dépollution des cheminées d'évacuation des fumées, des économies d'énergie, les concentrations ambiantes ont diminue de plus de 50 % depuis 15 ans.	En présence d'humidité, il forme de l'acide de sulfurique qui contribue au phénomène de pluies acides et à la dégradation de la pierre et des matériaux de certaines constructions.	C'est un gaz irritant. Le mélange acido - particulaire peut, selon les concentrations des différents polluants, déclencher des effets bronchospastiques chez l'asthmatique, augmenter les symptômes respiratoires aigus chez l'adulte (toux, gêne respiratoire), altérer la fonction respiratoire chez l'enfant (baisse de la capacité respiratoire, excès de toux ou de crise d'asthme).
Poussières ou particules en suspension (PS)	Elles constituent un complexe de substances organiques ou minérales. Elles peuvent être d'origine naturelle (volcan) ou anthropique (combustion industrielle ou de chauffage, incinération, véhicules). On distingue les particules « fines » provenant des fumées des moteurs « diesel » ou de vapeurs industrielles recondensées et les « grosses » particules provenant des chaussées ou d'effluents industriels (combustion et procédés).	Le particules les plus fines peuvent transporter des composées toxiques dans les voies respiratoires inférieures (sulfates, métaux lourds, hydrocarbures.) Elles potentialisent ainsi les effets des polluants acides, dioxyde de soufre et acide sulfurique notamment.	Les plus grosses sont retenues par les voies aériennes supérieures. Les plus fines, à des concentrations relativement basses, peuvent, surtout chez l'enfant, irriter les voies respiratoires ou altérer la fonction respiratoire. Certaines particules ont des propriétés mutagènes et cancérogènes : c'est le cas de certains hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP). Des recherches sont actuellement développées pour évaluer l'impact des composés émis par les véhicules « diesel ».
Oxydes d'azote (NOx)	Ils proviennent surtout des véhicules (environ 75%) et des installations de combustion (centrales énergétiques,…). Le monoxyde d'azote (No) et le dioxyde d'azote (NO2) font l'objet d'une surveillance attentive dans les centres urbains. le pot catalytique permet une diminution des émissions de chaque véhicule. Néanmoins, les concentrations dans l'air ne diminuent guère compte tenu de l'âge et de l'augmentation forte du parc et du trafic automobile	Les NOx interviennent dans le processus de formation d'ozone dans la basse atmosphère. Ils contribuent également au phénomène des pluies acides.	Le NO2 pénètre dans les pluies fines ramifications des voies respiratoires. Il peut, dès 200 $\mu g/m^3$ (microgrammes par m^3 d'air), entraîner une altération de la fonction respiratoire et une hyperréactivité bronchique chez l'asthmatique et chez les enfants, augmenter la sensibilité des bronches aux
Composés Organiques Volatils (COV)	**I**ls sont multiples. Il s'agit d'hydrocarbures (émis par évaporation des bacs de stockage pétroliers, remplissage des réservoirs	**I**ls interviennent dans le processus de formation d'ozone dans la basse atmosphère.	**L**es effets sont très divers selon les polluants: ils vont de la simple gêne olfactive à une

	automobiles), de composés organiques (provenant des procédés industriels ou de la combustion incomplète des combustibles), de solvants (émis lors de l'application des peintures, des encres, le nettoyage des surfaces métalliques et des vêtements), de composés organiques émis par l'agriculture et par le milieu naturel.		irritation (aldéhydes), à une diminution de la capacité respiratoire jusqu'à des risques d'effets mutagènes et cancérigènes (benzène).
Monoxyde de carbone (CO)	**I**l provient de la combustion incomplète des combustibles et carburants. Des taux importants de CO peuvent être rencontrés quand le moteur tourne dans un espace clos (garage) ou quand il y a une concentration de véhicules qui roulent au ralenti dans des espaces couverts (tunnel, parking), ainsi qu'en cas de mauvais fonctionnement d'un appareil de chauffage.	**I**l contribue à la formation de l'ozone.	**I**l se fixe à la place de l'oxygène sur l'hémoglobine du sang conduisant à un manque d'oxygénation du système nerveux, du coeur, des vaisseaux sanguins. A des taux importants, et à doses répétées, il peut être à l'origine d'intoxication chronique avec céphalées, vertiges, asthénie, vomissements. En cas d'exposition très élevée et prolongée, il peut être mortel ou laisser des séquelles neuropsychiques irréversibles.
Métaux lourds plomb (Pb), cadmium (Cd), vanadium (V)	**L**e plomb a été employé dans l'essence du fait de ses propriétés antidétonantes. Les essences sans plomb ou à teneurs réduites en plomb ont permis d'abaisser depuis quelques années les teneurs dans l'air très en deçà des seuils de nuisances. Le cadmium a des origines très diverses essentiellement, industrielles. Le vanadium est un indicateur de combustible industriel et domestique.		**C**es métaux ont la propriété de s'accumuler dans l'organisme, engendrant ainsi un risque de toxicité à long terme impliquant d'éventuelles propriétés cancérogènes. Le plomb est un toxique neurologique, rénal et du sang. Le cadmium a un effet sur l'appareil rénal, c'est aussi un irritant respiratoire. Le vanadium est essentiellement un toxique respiratoire qui peut conduire, selon les concentrations, à une simple irritation ou à des lésions pulmonaires plus graves.

Tableau I-2 : Les principaux polluants atmosphériques.

I.4- Dispersion des polluants en atmosphère :

Le transport des polluants de l'air est décrit par trois éléments fondamentaux : une source, d'où provient le polluant, l'atmosphère, dans laquelle le composé, émis sous forme de gaz, d'aérosols ou de particules solides, atteint un récepteur.

On dénomme les processus qui ont ainsi lieu : émission, transmission et dépôt.

I.4.1-Émission des polluants :

On classe généralement les émissions de polluants en différentes catégories selon le type de la source. Cette dernière peut être ponctuelle, surfacique, mobile ou naturelle :

- ***Sources ponctuelles :*** Ce sont des sources identifiables qui émettent une quantité de polluants dans l'atmosphère supérieure à une valeur limite définie par les autorités locales ou les agences pour l'environnement. Ce sont typiquement les grandes usines possédant une ou plusieurs cheminées d'évacuation. La quantité de polluants émise peut être globalisée sur une année ou bien plus détaillée en fonction de l'activité de l'usine.
- ***Sources surfaciques :*** Ce sont des sources plus petites que les précédentes en terme d'émission individuelle mais dont le nombre est plus abondant sur une zone donnée. On y retrouve typiquement le chauffage domestique, les stations services ou bien l'utilisation des pesticides.
- **Sources mobiles** *: Ce sont toutes les sources non stationnaires telles que* les automobiles, camions, bus, motos, avions ou trains.
- ***Sources naturelles :*** Elles sont le produit de processus naturels de transformation des sols ou de la végétation. Elles proviennent aussi de la faune (ruminants, termites).

I.4.2-Transport des polluants :

Une fois émis dans l'atmosphère, un polluant dit primaire- est soumis à deux types de contraintes : il est transporté par le vent d'un point à un autre de la ville et réagit chimiquement pour donner naissance à de nouveaux composés appelés polluants secondaires. En un point donné, la concentration mesurée ou calculée sera en permanence fonction de ces phénomènes. Selon l'espèces chimique considérée ou les conditions météorologiques, une des contraintes pourra être prédominante sur l'autre. Ce sera le cas si les vents sont faibles où la chimie sera le facteur dominant, ou au contraire pour des espèces chimiques dont le temps de

réactions est tellement rapide que le transport sera faible. Nous sommes donc en présence d'un phénomène ou ces deux composantes, faisant appel à des disciplines scientifiques différentes, doivent être abordées, sans négliger l'une par rapport à l'autre. Notre modèle sera lié à ces deux phénomènes.

I.5- Les différentes approches pour modéliser la pollution atmosphérique :

Modéliser la pollution atmosphérique se fait de différentes manières. Toutes reposent sur une formulation mathématique des phénomènes mis en jeu, une simplification et une résolution numérique. On peut distinguer les différentes approches suivantes :

I.5.1- L'approche Eulérienne :

Le point de vue Eulérien consiste à étudier les équations dans un référentiel fixe par rapport à la terre. Cette approche nécessite un maillage dans laquelle nous suivrons l'évolution des polluants. Cette grille a l'avantage de permettre de calculer, sur tout le domaine désiré, les différentes grandeurs physiques nécessaires à l'étude de la pollution atmosphérique. Mais, elle limite par ailleurs la précision de calcul. En effet, les modèles de grille ne sont pas capables de résoudre la variation des paramètres à une échelle inférieure à la taille des mailles. Les phénomènes de petites tailles ne sont donc pas pris en compte dans la résolution des équations, ils sont paramétrés de façon statistique. De plus, les émissions sont uniformes et moyennées dans le volume d'une cellule, ce qui ne permet pas de prendre en compte la taille réelle des sources polluantes. Réduire la taille de la grille sur tout le domaine augmenterait considérablement le temps de calcul, et une précision importante n'est pas nécessaire partout. C'est pourquoi une des méthodes employées est le raffinement local pour affiner le calcul aux endroits caractérisés par les plus petites échelles. La plupart des codes de calcul utilisés dans le domaine de la pollution atmosphérique sont de type Eulérien.

I.5.2- L'approche Lagrangienne :

L'approche Lagrangienne consiste à fixer un repère sur une particule virtuelle représentative du déplacement général des polluant, et à suivre son évolution. Une boite Lagrangienne peut comporter un ou plusieurs niveaux de hauteur (permettant la prise en compte de la diffusion des polluants), elle est ensuite transportée par les vents, passant au-dessus des différentes sources polluantes ou alors les émissions sont injectées dans la boite. Seule la chimie est résolue de façon précise dans ce cas, c'est pourquoi cette approche comporte des modules chimiques très importants. Elle nécessite une météorologie assez

simple et constante sur toute la boite. Elle est plus souvent utilisée pour la résolution des modèles de panaches qui font l'objet d'implantation dans ces codes Eulériens pour augmenter localement la précision des calculs.

I.5.3- Le couplage : modèles sous mailles :

Le couplage des deux méthodes précédentes permet de gagner en précision sans avoir à raffiner le domaine. Cela consiste à résoudre de façon Eulérienne, avec un maillage à grandes mailles le domaine souhaité, et d'appliquer à chaque source d'émission un modèle de panache Lagrangien qui communique ses données aux mailles Eulériennes dans lesquelles il se situe. La maille Eulérienne fournit, quant à elle, les taux de concentration ambiants au modèle Lagrangien. Ce couplage permet une discrétisation spatiale uniquement aux endroits nécessaires (au sein du panache) et une modélisation du panache dès son émission, ce qui permet dans le cas de cheminée de prendre en compte sa hauteur, son diamètre, la vitesse d'éjection de façon précise.

I.5.4 - Les modèles épisodiques :

Pour évaluer l'impact de la pollution due à une exposition quotidienne aux polluants sur de longues périodes, il est nécessaire de procéder à des simulations longues (de plusieurs mois, voir plusieurs années). Le temps de calcul que cela nécessite pousse vers la parallélisation des codes de calcul ou vers la simulation de scénarii de quelques jours représentatifs de la totalité de la période d'étude. Cette approche fait appel à la fois à des méthodes statistiques et à une résolution Eulérienne classique des équations.

I.6- Les modèles numériques existants de Chimie- Transport :

Le premier modèle de simulation de la pollution photochimique urbaine a été réalisé par Reynolds et al (1973). Ce modèle était dédié à l'étude de la pollution à Los Angeles. De tels modèles, il en existe aujourd'hui une large variété de par le monde. Ceux-ci couvrent différentes échelles spatiales :

- L'échelle régionale : SMOG (LosAnge les)(Lu et Turco, 1997); CALGRID(Milan)[Silibello et al.,1998] ; Méso –NH -c (Toulouse)[Tulet et al.,2000] ; CHIMERE (PAris) [Vautard et al.,2000].
- L'échelle continentale :
    - USA : [Peters et al., 1995

- EUROPE : EURAD [jakobs et al., 1995]; [EMEP, 1998]; [Olendrzynski 1999]; LOTOS [Builjes, 1992]; CHIMERE [schimidt et al., 2001]

- L'échelle globale : MOZART [Hauglustaine et al., 1998]; TM_3 [Lelieveld et Dentener, 2000];

Chapitre II :
Dynamique De La Couche Limite Atmosphérique

II.1- Introduction :

L'étude des écoulements atmosphériques est un domaine passionnant de la mécanique des fluides de part les enjeux rencontrés (climatologie, prévisions météorologiques, protection de l'environnement...) mais aussi de part la nature même des écoulements faisant l'objet de nombreuses recherches fondamentales ou appliquées. Que les échelles de travail soient continentales, régionales ou plus locales comme pour notre étude, la turbulence est toujours présente. Elle a été définit comme un système dynamique imprévisible, désordonné, possédant de fortes propriétés de mélange, un caractère dissipatif et faisant intervenir une très large gamme d'échelles spatiales.

II.2- Description de la turbulence dans la CLA :

La description de la turbulence dans la CLA permet de retrouver les critères de stabilité. On rappelle d'abord brièvement quelques propriétés d'un écoulement turbulent avant de détailler la turbulence dynamique et thermique de la CLA.

II.2.1- Turbulence dans la CLA

Une caractérisation de la turbulence pour un écoulement est l'existence de mouvements (visualisés par des _tourbillons) balayant un large spectre d'échelles spatiales et temporelles.

Ceci conduit à augmenter les propriétés de brassage de l'écoulement en transférant de l'énergie cinétique des grandes échelles vers les petites échelles, où cette énergie est dissipée en chaleur (via la diffusion moléculaire).

Les effets de couche limite induisent la forte turbulence de la CLA. On distingue en réalité deux effets distincts :

- La couche limite dynamique liée aux effets de frottement sur le sol induite par la condition d'adhérence pour le vent ($V = Vsol$ au sol) ;
- La couche limite thermique liée aux cycles de température du sol.

II.2.1.1- Couche Limite dynamique

Ce phénomène est associé à un effet de ralentissement du champ horizontal de vitesse au voisinage du sol (du fait de la propagation de la condition d'adhérence $V = 0$, ou $V = Vmer$ au dessus de la mer) : il est donc essentiellement lié à la stratification verticale du champ de vitesse horizontal.

Au dessus de cette couche limite dynamique, le champ horizontal de vent est à peu près constant et déterminé par les gradients horizontaux de pression (vent géostrophique).
Le bon indicateur de turbulence est alors le nombre de Reynolds qui apparaît comme le rapport des forces d'inertie (convection et pression), déstabilisatrices, sur les forces d'origine visqueuse (diffusion), stabilisatrices, dans l'équation d'évolution $\partial u/\partial t + u.\nabla u = \nu \Delta u + ...$ (u vitesse du vent, ν viscosité cinématique) :

$$R_e = \frac{(u.\nabla)u}{\nu \Delta u} = \frac{UL}{\nu} \qquad (II-1)$$

Avec les ordres de grandeur dans la CLA, $U = 10 m.s^{-1}$, $L = 1000 m$, $\nu = 10^{-5} m^2.s^{-1}$, on obtient une valeur de Reynolds $R_e = 10^9$, qui indique un milieu fortement turbulent.

II.2.1.2- Couche Limite thermique

L'expérience classique illustrant ce phénomène est celle de Bénard, consistant à chauffer progressivement deux plaques horizontales séparées d'une longueur L aux températures T (plaque inférieure) et $T + \Delta T$ (plaque supérieure).
Si $\Delta T > 0$, le profil de densité de l'air entre les deux plaques est stable (l'air chaud, plus léger, est au dessus). Ce profil est instable dans le cas contraire et on a génération de mouvements convectifs du haut vers le bas.
Un bon indicateur de turbulence est alors le nombre de Rayleigh :

$$Ra = \frac{g}{T} \frac{L^3}{\nu} \frac{\Delta T}{\nu_\theta} \qquad (II-2)$$

Où ν_θ est la diffusion thermique. L'écoulement est turbulent pour des valeurs de Ra fortement négatives (par exemple inférieures à -50000).

	Turbulence dynamique	Turbulence thermique
Atmosphère libre	occasionnelle	occasionnelle
CLA	toujours	Dépend du gradient de température

Tableau II-1 : Turbulence dans l'atmosphère.

II.3- Les principales modélisations de la turbulence :

Il existe trois principales méthodes de modélisation d'un écoulement turbulent : la simulation numérique directe, dans laquelle on cherche à représenter la totalité des phénomènes physiques, la simulation des grandes échelles, dans laquelle on représente seulement les plus gros tourbillons en fonction du temps, et la simulation moyennée dans laquelle on représente seulement l'écoulement moyen.

II.3.1- La simulation numérique directe (DNS) :

Lorsque le nombre de Reynolds est élevé, l'écart entre les plus grandes échelles dans l'écoulement et les plus petites devient tellement élevées qu'il est impossible de prendre en compte toutes les échelles dans un calcul.

On montre que le nombre de mailles nécessaires pour résoudre toutes les échelles est proportionnel à $Re^{\frac{9}{4}}$. Ainsi pour un nombre de Reynolds de 10000, il faut envisager un nombre de mailles de 10^9 mailles... C'est ce que l'on appelle la simulation numérique directe (DNS ou Direct Numerical Simulation) : aucune modélisation de la turbulence n'est effectuée, on résout toutes les quantités physiques.

En l'état actuel des choses, les plus gros calculs sont justement de l'ordre de 1024^3 mailles, et tournent sur des machines de plusieurs centaines de processeurs en parallèle. Ce type de calcul est extrêmement difficile à mettre en oeuvre et génère un nombre de données tellement important qu'elles sont très difficiles à utiliser, même dans un cadre de recherche scientifique. Ce type de simulation est donc réservé à des écoulements académiques à des nombres de Reynolds inférieurs à 1000, pour servir d'expérience numérique, souvent utilisées pour la validation des modèles de turbulence que nous allons voir par la suite.

II.3.2- La simulation des grandes échelles (LES) :

Afin d'augmenter le nombre de Reynolds des simulations numériques, la simulation des grandes échelles (LES pour Large eddy Simulation) ne résout que les échelles de l'écoulement supérieures à une taille de coupure donnée.

On suppose qu'en dessous de cette taille, la turbulence est isotrope et que les tourbillons peuvent être modélisés par une viscosité turbulente supplémentaire.

Cette approche est apparue dans les années 1970 et permet à l'heure actuelle d'effectuer des calculs relativement réalistes à des nombres de Reynolds entre 1000 et 50000 environ.

En pratique on considère que toutes les échelles qui ont une taille inférieure à la taille locale de la maille sont modélisées. Ainsi on appelle le modèle de turbulence le modèle "de sous-maille". Le nombre de modèles de sous-maille développés depuis les années 70 est très

important. Chaque modèle a été développé et validé pour telle ou telle classe d'écoulement, avec chacun des caractéristiques différentes en terme de coût de calcul, de robustesse (non explosion des calculs), de précision (par rapport à des essais), de représentation physique des phénomènes, d'universalité (précision sur plusieurs types d'écoulement).

II.3.3- La simulation des équations de Navier Stokes moyennées (RANS) :

Cette approche consiste à ne simuler que l'écoulement moyen en temps.

Toutes les fluctuations sont filtrées et on modélise ces fluctuations par l'action d'une viscosité turbulente.

Les deux types de moyenne possible sont les suivantes :

- ***Moyenne d'ensemble :*** on effectue N fois la même expérience (c'est-à-dire le même écoulement dans la même soufflerie) et on moyenne les données obtenues
- ***Moyenne temporelle :*** on effectue une expérience pendant un temps très long et on moyenne les données obtenues.

Si le temps de moyenne est suffisamment long, en principe les moyennes temporelles sont indépendantes du temps. En revanche si le temps de moyenne est court (pas de temps petit devant le phénomène principal), les moyennes temporelles restent dépendantes du temps. Les moyennes d'ensemble peuvent également être dépendantes du temps, par exemple pour un écoulement à une fréquence principale périodique.

Lorsque les moyennes temporelles et d'ensemble ne coïncident pas, on dit que le système n'est pas ergodique : lorsque le système évolue lentement par exemple, ou lorsque la moyenne temporelle sera différente en fonction de conditions initiales différentes.

Lorsque les moyennes d'ensemble et les moyennes temporelles sont indépendantes du temps et égales, on dit que le processus est "statistiquement stationnaire".

Dans le paragraphe suivant, on décrit la démarche d'obtention des équations moyennées et les modèles de turbulence associée.

II.4- Outils pour la modélisation :

Dans le cadre de ce travail, on s'intéresse principalement aux modèles dits statistiques pour la simulation de la turbulence. Il apparaît donc nécessaire de définir les outils mathématiques qui vont permettrent à partir des équations instantanées du mouvement d'obtenir des équations moyennées (en un sens que nous allons définir).

II.4.1- Moyenne d'ensemble :

On va réaliser N expériences indépendantes portant sur le même écoulement. A chaque expérience, on va enregistrer la valeur de la quantité qui nous intéresse à la même position et au même temps soit $f^{(i)}(\vec{x},t)$. La moyenne d'ensemble de la quantité f en $(\vec{x},t)$ sera donnée par :

$$\overline{f(\vec{x},t)} = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f^{(i)}(\vec{x},t) \qquad (II-3)$$

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

$$\begin{cases} \overline{f+g} = \overline{f} + \overline{g} \\ \overline{\alpha f} = \alpha \overline{f} \quad \text{avec} \quad \alpha = const \\ \overline{\overline{f}} = \overline{f} \\ \overline{\overline{f}\,g} = \overline{f}\,\overline{g} \\ \dfrac{\overline{\partial f}}{\partial x_i} = \dfrac{\partial \overline{f}}{\partial x_i} \\ \dfrac{\overline{\partial f}}{\partial t} = \dfrac{\partial \overline{f}}{\partial t} \end{cases} \qquad (II-4)$$

A partir de cet opérateur de moyenne, on définit la décomposition de Reynolds d'une quantité quelconque de l'écoulement $f(\vec{x},t)$ en deux parties distinctes :

$$f = \overline{f} + f' \qquad (II-5)$$

$\overline{f}$: Moyenne d'ensemble

f' : Partie fluctuante

De part la définition de l'opérateur de moyenne on a $\overline{f'} = 0$.

II.5- Equations moyennées :

La simulation directe des équations instantanées de Navier-Stokes reste pour l'instant (et sûrement pour longtemps encore) limitée à des écoulements à faible nombre de Reynolds et pour des configurations géométriques simples voire simpliste par rapport aux préoccupations industrielles. C'est essentiellement un outil de recherche qui permet de réaliser des expériences numériques sur des configurations académiques. Lorsqu'on s'intéresse à des écoulements réalistes, une alternative consiste à ne s'intéresser qu'aux quantités moyennes et donc à obtenir le système d'équations vérifiées par ces quantités. Pour ce faire, on applique l'opérateur de moyenne d'ensemble sur les équations instantanées en pratiquant la

décomposition de Reynolds sur les inconnues du problème. Les nouvelles équations obtenues sont dites équations moyennées. Dans la littérature anglo-saxonne on utilise l'acronyme RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes)

II.5.1- Rappel des équations instantanées :

On s'intéresse essentiellement aux écoulements incompressibles. Les équations vérifiées sont donc l'équation de continuité

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \qquad (II-6)$$

Et les trois équations de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_j} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \qquad (II-7)$$

Ici les u_i sont les composantes de la vitesse, p la pression, ρ la densité constante et ν la viscosité cinématique.

II.5.2- Les équations du mouvement moyen :

On notera :

$$u_i(\vec{x},t) = U_i(\vec{x},t) + u_i'(\vec{x},t) \qquad (II-8)$$

$$p(\vec{x},t) = P(\vec{x},t) + p'(\vec{x},t) \qquad (II-9)$$

En introduisant la décomposition de Reynolds dans l'équation de continuité et en prenant la moyenne d'ensemble on obtient pour le champ moyen :

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \qquad (II-10)$$

Par soustraction de cette équation à l'équation de continuité du mouvement instantané, on obtient pour les fluctuations de vitesse :

$$\frac{\partial u_i'}{\partial x_i} = 0 \qquad (II-11)$$

On remarque donc que les quantités moyennes et fluctuantes vérifient toutes les deux l'équation de continuité.

Les trois composantes de la vitesse moyenne sont données par :

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \overline{u_j' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j} \qquad (II-12)$$

La condition d'incompressibilité sur les fluctuations implique que :

$$\overline{u_j' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} = \overline{\frac{\partial u_i' u_i'}{\partial x_j}} \qquad (II-13)$$

On définit alors le tenseur de Reynolds par :

$$R_{ij} = -\rho \overline{u_i' u_j'} \qquad (II-14)$$

Finalement les équations moyennées s'écrivent :

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\tau_{ij}} + R_{ij}\right) \qquad (II-15)$$

Avec $\overline{\tau_{ij}} = \mu\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)$. On voit donc que sous cette forme les équations du champ moyen de vitesse sont différentes des équations instantanées puisque apparaît dans ces équations un nouveau terme lié à l'effet du champ fluctuant. On peut assimiler l'effet du mouvement fluctuant à une loi de comportement non newtonienne :

Le tenseur de Reynolds est un tenseur symétrique :

$$R_{ij} = -\rho \begin{bmatrix} \overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{u'v'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'} \\ \overline{u'w'} & \overline{v'w'} & \overline{w'w'} \end{bmatrix} \qquad (II-16)$$

Ce tenseur introduit donc 6 inconnues supplémentaires. On a donc un problème de fermeture. Le rôle des modèles de turbulence sera donc de fournir des lois phénoménologiques (algébriques ou différentielles) pour fermer le problème.

II.5.3- Les équations du mouvement fluctuant :

II.5.3.1- Equations de tensions de Reynolds :

En soustrayant aux équations de quantité de mouvement instantanées les équations de quantité de mouvement moyen on obtiendra les équations de transports pour les fluctuations. En multipliant scalairement chaque équation de transport des fluctuations par les fluctuations et en prenant la moyenne que l'on a définie précédemment, on obtient les équations de transport des contraintes ou tensions de Reynolds.

$$\frac{\partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial t} + U_j \frac{\partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_j} = P_{ij} + \tau_{ij} + \Pi_{ij} + D_{ij} - \varepsilon_{ij} \qquad (II-17)$$

Le membre de droite se décompose en plusieurs termes :

- $P_{ij} = -\left(\overline{u_i' u_k'} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} + \overline{u_j' u_k'} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right)$ Production
- $\tau_{ij} = -\frac{\partial \overline{u_i' u_j' u_k'}}{\partial x_k}$ Transport turbulent
- $\Pi_{ij} = -\frac{1}{\rho}\left(\overline{u_i'} \frac{\partial p'}{\partial x_j} + \overline{u_j'} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)$ Corrélation pression-vitesse
- $D_{ij} = \nu \frac{\partial^2 \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_k \partial x_k}$ Diffusion visqueuse
- $\varepsilon_{ij} = 2\nu \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k} \frac{\partial u_j'}{\partial x_k}}$ tenseur de dissipation turbulente

On a donc ici introduit six équations supplémentaires, cependant de nouveaux termes apparaissent dans ces équations et le système n'est toujours pas fermé.

II.5.3.2- Equation de l'énergie cinétique turbulente :

En contractant les indices dans le système précédent, on obtient une équation de transport pour l'énergie cinétique turbulent $k = \frac{1}{2}\overline{u_i' u_i'}$:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \overbrace{-\overline{u_i' u_k'} \frac{\partial U_i}{\partial x_k}}^{P_k} - \overbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial \overline{u_i' u_i' u_k'}}{\partial x_k}}^{\tau_k} - \overbrace{\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{u_k' p'}}{\partial x_k}}^{\Pi_k}$$
$$+ \underbrace{\nu \frac{\partial^2 k}{\partial x_k \partial x_k}}_{D_k} - \underbrace{\nu \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k} \frac{\partial u_i'}{\partial x_k}}}_{\varepsilon_k} \qquad (II-18)$$

- P_k appelé production turbulente. Il caractérise les échanges d'énergie par interaction avec le mouvement moyen. Ce terme est positif comme on le verra par la suite. Il représente de l'énergie cédée par le mouvement moyen au mouvement turbulent
- τ_k Transport turbulent ou diffusion turbulente par les fluctuations de vitesse
- Π_k transfert d'énergie par l'interaction pression vitesse fluctuantes
- D_k Diffusion visqueuse de l'énergie cinétique turbulente par la viscosité

- ε_k dissipation de l'énergie turbulente sous forme de chaleur. Ce terme constitue un puits dans l'équation de *k* et conduit donc toujours à une décroissance de la turbulence.

II.5.4- Le problème de la fermeture :

Comme on vient de le voir, la décomposition de Reynolds a permis d'écrire un certain nombre d'équations pour les inconnues du problème. Cependant, on introduit à chaque étape des inconnues supplémentaires. Il s'agit alors de fermer le problème en introduisant des modèles pour les inconnues supplémentaires.

II.5.4.1- Classification des modèles de turbulence :

On distingue généralement deux grandes classes de modèles :

- Les modèles à viscosité turbulente (modèles du premier ordre) basés sur l'hypothèse de Boussinesq (que l'on détaillera plus tard) qui consiste à modéliser directement les tensions de Reynolds à l'aide d'une viscosité turbulente.
- Les modèles du second ordre : Les tensions de Reynolds sont calculées directement, la modélisation portant sur les moments d'ordre supérieur .

Pour les modèles du premier ordre, on introduit la classification suivante selon le nombre d'équations d'évolutions supplémentaires du modèle :

- modèle à 0 équations (longueur de mélange).
- modèle à 1 équation (k , énergie cinétique turbulente.
- modèle à 2 équations $\left(k-\varepsilon, k-w, k-l, ..\right)$.

Il est bien évident que la qualité des résultats de simulation d'écoulement turbulent est très liée au modèle utilisé. Le choix du modèle sera subordonné au type d'information que l'on veut obtenir à partir de la simulation. D'un point de vue industriel, les modèles du premier ordre à deux équations permettent généralement d'obtenir des résultats satisfaisant moyennant certaines adaptations du modèle suivant le cas considéré. Cependant, comme on le verra par la suite, des comportements pathologiques peuvent apparaître dans certains types d'écoulement. L'utilisation de modèles plus sophistiqués comme les modèles au second ordre peut s'avérer nécessaire. On a résumé sur le tableau suivant, le type d'information que l'on peut obtenir suivant le modèle employé.

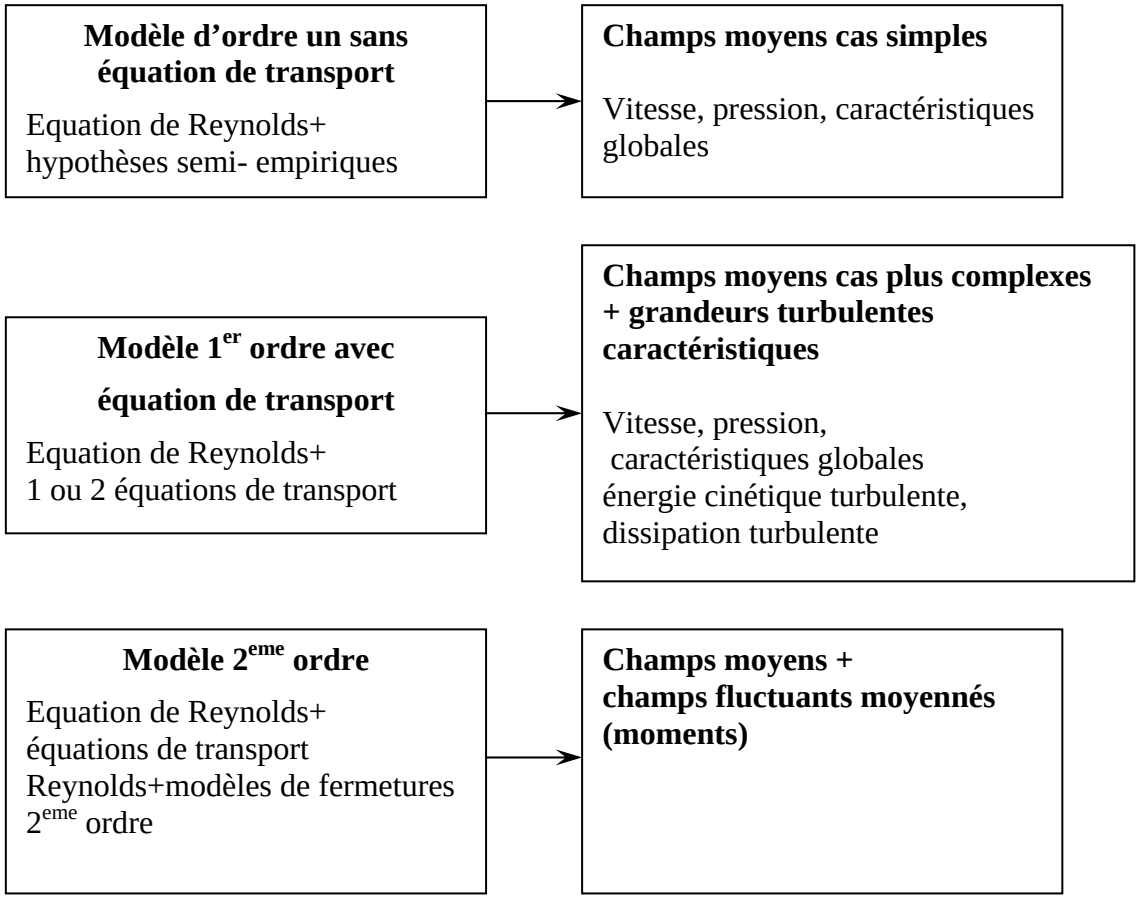


Tableau II-2 : les modèles couramment utilisés dans la modélisation de la turbulence.

II.5.4.2- L'hypothèse de Boussinesq : concept de viscosité turbulente

Par similitude avec la loi de comportement d'un fluide visqueux reliant le tenseur des contraintes visqueuses au champ de vitesse, Boussinesq (1897) a proposé de relier le tenseur de Reynolds au champ moyen de vitesse par :

$$R_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \qquad (II-19)$$

Où $\mu_t(x,t)$ représente une viscosité turbulente. L'objet de la modélisation de la turbulence dans ce cadre est d'avoir une relation entre ^{l}t et les autres inconnues du problème afin de fermer le système d'équations à résoudre. Exprimée telle quelle, cette relation fournit une énergie cinétique turbulente nulle. En effet, si on prend la trace de ce tenseur et compte tenu de l'incompressibilité du champ moyen on obtient $k = 0$. Pour remédier à ce problème on utilise plutôt la relation suivante :

$$R_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \qquad (II-20)$$

On remarquera que cette relation implique la colinéarité des directions principales du tenseur des vitesses de déformation moyennes et du tenseur d'anisotropie turbulente $\left(R_{ij} + \frac{2}{3}\rho k \delta_{ij} \right)$, car ici μ_t est un scalaire ce qui n'est pas vérifié en général. Bien que ce concept présente de graves lacunes, il reste largement utilisé.

II.5.4.3- Le modèle $k-\varepsilon$

Bien que tout à fait simples, les modèles algébriques de type longueur de mélange soufrent d'un empirisme certain. On a vu que l'on pouvait dériver de manière exacte une équation de transport pour l'énergie cinétique turbulente *k*. On peut espérer en résolvant une équation de transport pour une quantité qui reste à définir obtenir de manière plus formelle une échelle de longueur caractéristique de la turbulence. On accède ainsi à la classe des modèles du premier ordre de turbulence à deux équations de transport. On va chercher à écrire une équation de transport pour ² la dissipation de l'énergie cinétique turbulente.

On peut relier par analyse dimensionnelle k, ε et l échelle de longueur de la turbulence par :

$$l \approx \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon} \qquad (II-21)$$

En procédant par analyse dimensionnelle, Prandtl et Kolomgorov ont dérivé la relation suivante pour la viscosité turbulente :

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \qquad (II-22)$$

où C_μ est une constante adimensionnelle à déterminer.

II.5.4.3.1- Equation de k :

On a dérivé précédemment à partir des équations de transport pour les contraintes de Reynolds, l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente qui s'écrit :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \overbrace{-\overline{u_i' u_k'} \frac{\partial U_i}{\partial x_k}}^{P_k} - \overbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial \overline{u_i' u_i' u_k'}}{\partial x_k}}^{\tau_k} - \overbrace{\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{u_k' p'}}{\partial x_k}}^{\Pi_k}$$
$$+ \underbrace{\nu \frac{\partial^2 k}{\partial x_k \partial x_k}}_{D_k} - \underbrace{\nu \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k} \frac{\partial u_i'}{\partial x_k}}}_{\varepsilon_k} \qquad (II-23)$$

En utilisant l'hypothèse de Boussinesq, le terme de production s'écrira :

$$-\rho\overline{u_i' u_k'}\frac{\partial U_i}{\partial x_k} = \left[\mu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k}+\frac{\partial U_k}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}\rho k\delta_{ik}\right]\frac{\partial U_i}{\partial x_k} \qquad (II-24)$$

Pour le terme de diffusion turbulente et de couplage avec la pression fluctuante de *k*, par analogie avec la diffusion visqueuse, il peut d'écrire sous la forme :

$$-\rho\left(\overline{ku_k'}+\overline{p'u_k'}\right)=\frac{\mu_t}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_k} \qquad (II-25)$$

où σ_k est l'équivalent d'un nombre de Prandtl turbulent. Enfin le terme de dissipation s'écrira :

$$2\mu\overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k}\frac{\partial u_i'}{\partial x_k}}=\rho\varepsilon \qquad (II-26)$$

Avec les hypothèses précédentes l'équation de *k* se met sous la forme :

$$\frac{\partial k}{\partial t}+U_k\frac{\partial k}{\partial x_k}=\frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\nu+\frac{\nu}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_k}\right]+\nu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k}+\frac{\partial U_k}{\partial x_i}\right)\frac{\partial U_i}{\partial x_k}-\varepsilon \qquad (II-27)$$

Finalement en remplaçant ν_t par sa valeur en fonction de *k* et de ε on obtient :

$$\frac{\partial k}{\partial t}+U_k\frac{\partial k}{\partial x_k}=\frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\nu+\frac{C_\mu k^2}{\sigma_k\varepsilon}\right)\frac{\partial k}{\partial x_k}\right]+\frac{C_\mu k^2}{\varepsilon}\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k}+\frac{\partial U_k}{\partial x_i}\right)\frac{\partial U_i}{\partial x_k}-\varepsilon \qquad (II-28)$$

II.5.4.3.2- Equation de la dissipation ε :

L'équation pour s'obtient en prenant le rotationnel des équations des fluctuations de vitesse et ensuite en faisane la moyenne d'ensemble. La dérivation de cette équation est relativement aisée mais les calculs restent fastidieux. On donne donc directement le résultat :

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t}+U_k\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_k}=-\nu\frac{\partial U_i}{\partial x_k}\left(\overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_l}\frac{\partial u_k'}{\partial x_l}}+\overline{\frac{\partial u_l'}{\partial x_i}\frac{\partial u_l'}{\partial x_i}}\right)-\nu\overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k}\frac{\partial u_i'}{\partial x_k}\frac{\partial u_k'}{\partial x_l}}$$
$$-\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{u_k'\varepsilon}+\frac{\nu}{\rho}\overline{\frac{\partial p}{\partial x_k}\frac{\partial u_k'}{\partial x_k}}\right)-\left(\nu\frac{\partial^2 u_i'}{\partial x_l\partial x_l}\right)^2 \qquad (II-29)$$

En utilisant les mêmes idées que pour l'équation de *k* on obtient finalement l'équation suivante pour ε :

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t}+U_k\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_k}=\frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\nu+\frac{C_\mu k^2}{\sigma_\varepsilon\varepsilon}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_k}\right]+C_{\varepsilon1}C_\mu k\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_k}+\frac{\partial U_k}{\partial x_i}\right)\frac{\partial U_i}{\partial x_k}-C_{\varepsilon2}\frac{\varepsilon^2}{k} \qquad (II-30)$$

Il reste donc maintenant pour fermer complètement le système à déterminer les constantes $C_\mu, C_{\varepsilon1}, C_{\varepsilon2}, \sigma_k, \sigma_\varepsilon$.

Remarque : dans la littérature, on néglige souvent dans ces deux équations les contributions dans les termes de diffusion de k et ε dues à la viscosité moléculaire. Ceci est justifié lorsque l'on suppose qu'on se trouve à grand nombre de Reynolds de la turbulence.

II.5.4.3.3- Détermination des constantes du modèle :

En fait ces constantes sont déterminées à partir de résultats expérimentaux obtenus dans des cas très simple d'écoulement turbulent.

Décroissance d'une turbulence homogène :

Expérimentalement, cette configuration peut être reproduite en plaçant une grille, dont on connaît la taille des barreaux et l'espacement entre eux, dans un canal que l'on alimente en continu. On va donc générer une turbulence calibrée par les barreaux qui va produire un spectre à la Kolmogorov. Au fur et à mesure que l'on se déplace vers l'aval et en restant proche de l'axe du canal, cette turbulence que l'on peut considérer comme homogène va décroître. Cette expérience fournit une représentation spatiale dans le sens de l'écoulement des évolutions temporelles de toute propriété statistique du modèle théorique. Concrètement, cela revient à supposer que le champ turbulent est figé au sens où il se transporte à la vitesse d'ensemble du champ moyen (qui est ici constante) et donc devient directement observable dans un repère qui se déplace à cette vitesse moyenne. En appliquant ces hypothèses d'homogénéité au système d'équation de k et ε on a :

$$\frac{\partial k}{\partial t} = -\varepsilon \qquad (II-31)$$

Et

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -C_{\varepsilon 2}\frac{\varepsilon^2}{k} \qquad (II-32)$$

Les résultats expérimentaux montrent que l'évolution de *k* avec le temps est de la forme :

$$k(t) = t^{-n} \qquad (II-33)$$

En prenant cette forme de *k* on obtient donc pour la constante $C_{\varepsilon 2}$:

$$n = \frac{1}{C_{\varepsilon 2}-1} \qquad (II-34)$$

Les résultats d'expérience donnent pour *n* :

$1 < n < 1.25$

ce qui fournit pour $C_{\varepsilon 2}$:

$1.8 < C_{\varepsilon 2} < 2$

On utilise généralement :

$C_{\varepsilon 2} = 1.92$

Cisaillement homogène :

On utilise le même type d'expérience que précédemment, en remplaçant les barreaux par des plaques planes régulièrement espacées à l'entrée du canal et de plus en plus longues. De cette façon, on va créer un profil moyen de vitesse longitudinale linéaire avec la hauteur du canal. Si on appelle $S = dU / dy$ le taux de cisaillement moyen, et en appliquant la même méthodologie que dans le cas précédent, on obtient le système suivant pour k et ε :

$$\frac{\partial k}{\partial t} = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} S^2 - \varepsilon \qquad (II-35)$$

Et

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = C_{\varepsilon 1} C_\mu k S^2 - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \qquad (II-36)$$

En posant $\Theta = k / \varepsilon$ pour le temps caractéristique de la turbulence, on obtient l'équation suivante : $\frac{\partial \Theta}{\partial t} = -C_\mu S^2 \Theta^2 \left(C_{\varepsilon 1} - 1\right) + \left(C_{\varepsilon 2} - 1\right) \qquad (II-37)$

La solution de cette équation est une tangente hyperbolique du temps, de sorte que pour les temps grands, l'état initial est oublié et Θ prend une valeur constante. On peut aussi trouver cette valeur limite en écrivant que Θ est indépendant du temps dans l'équation précédente.

Le groupement $C_\mu S^2 \Theta^2$ n'est rien d'autre que le rapport production sur dissipation qui prend donc la valeur limite suivante :

$$\left(\frac{P}{\varepsilon}\right)_\infty = \left(C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}\right)_\infty = \frac{\left(C_{\varepsilon_2} - 1\right)}{\left(C_{\varepsilon_1} - 1\right)}$$

Le choix $C_{\varepsilon_1} = 1.44$ et $C_{\varepsilon 2} = 1.92$ donne un rapport de 2.09 proche du rapport expérimental de 1.8. Durbin a proposé le choix de $C_{\varepsilon 2} = 1.83$ qui donne alors pour la même valeur de C_{ε_1} un rapport de 1.88 plus proche du rapport expérimental.

Couche limite turbulente :

On considère ici une couche limite turbulente bidimensionnelle. La forme du cisaillement turbulent permet d'écrire :

$$C_\mu = \frac{\varepsilon}{k^2} \frac{-\overline{u' v'}}{\partial U / \partial y} \qquad (II-38)$$

On se place dans la zone d'équilibre où production égale dissipation, on obtient alors :

$$-\overline{u'v'}\frac{\partial U}{\partial y}=\varepsilon \qquad (II-39)$$

En substituant dans la relation précédente le gradient de vitesse moyenne, on obtient l'expression suivante pour C_μ :

$$C_\mu=\frac{\overline{u'v'}^2}{k^2} \qquad (II-40)$$

Les mesures expérimentales ont montré que la valeur de ce rapport était quasiment constante et de l'ordre de 0.3, on en déduit donc que $C_\mu=0.09$.

Si l'on se place dans la zone logarithmique de la couche limite turbulente, le modèle doit pouvoir représenter la physique de cette zone. Or on sait (voir chapitre 3) que dans cette zone le gradient de vitesse moyenne et la contrainte de Reynolds s'expriment par :

$$\frac{\partial U}{\partial y}=\frac{u^*}{\kappa y}\ ,\ \overline{u'v'}\approx -u^{*2} \qquad (II-41)$$

Dans cette zone, la production est approximativement égale à la dissipation, on a donc :

$$-\overline{u'v'}\frac{\partial U}{\partial y}\approx\frac{u^{*3}}{\kappa y}\approx\varepsilon \qquad (II-42)$$

Comme le modèle doit restituer la viscosité turbulente du modèle de Prandlt, on doit avoir :

$$k=\frac{u^{*2}}{\sqrt{C_\mu}} \qquad (II-43)$$

En reprenant l'équations de ε avec toutes ces hypothèses, on obtient :

$$0=\frac{\varepsilon^2}{k}\left(C_{\varepsilon1}-C_{\varepsilon2}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\kappa y u^*}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial\varepsilon}{\partial y}\right) \qquad (II-44)$$

En remplaçant ε par sa valeur on obtient la relation suivante pour σ_ε :

$$\sigma_\varepsilon=\frac{\kappa^2}{\left(C_{\varepsilon2}-C_{\varepsilon1}\right)\sqrt{C_\mu}} \qquad (II-45)$$

Ce qui donne $\sigma_\varepsilon=1.3$ pour une constante de Von Karmann de 0.43. Enfin le coefficient est pris égal à $\sigma_k=1$.

On a résumé dans le tableau suivant les différentes constantes du modèle $k-\varepsilon$:

C_μ	σ_k	σ_k	$C_{\varepsilon1}$	$C_{\varepsilon2}$
0.09	1.	1.22	1.44	1.92

Tableau II-3 : coefficients du modèle $k-\varepsilon$ standard

Chapitre III :

Chimie De La Couche Limite Atmosphérique : Transport de Masse Et Cinétique Chimique

III.1- Introduction :

Les besoins ressentis dans le domaine de la qualité de l'air (estimer la pollution hors des zones couvertes par la mesure, définir des mesures de réduction des émissions de polluants en cas de dépassement des seuils d'alerte et prévoir la pollution), et la complexité des phénomènes de pollution (en particulier due à la non linéarité du système chimique), ont incité les scientifiques à développer des modèles déterministes de simulation de la qualité de l'air. Pour modéliser de façon satisfaisante le problème de transport des polluants chimique dans l'atmosphère, beaucoup de phénomènes sont à prendre en compte : le déplacement dû au vent (transport), les émissions, les dépôts d'espèces, la diffusion, la chimie intervenant entre les espèces émises et celles présentes dans l'atmosphère, le relief, la météo, le développement de la couche limite atmosphérique… les émissions sont des données d'entrées à interpoler en chaque point du domaine. La météorologie et Le relief ne sont pas pris en compte

La complexité de notre problème posé (pollution atmosphérique) détermine celle du modèle, qui va de la simple représentation schématique de la pollution jusqu'à ses formules mathématiques spécifiques. Nous avons, en amont du développement du modèle proprement parlé, présenter les principaux phénomènes de la pollution atmosphérique : transport et réactivité des polluants qui sont décrits par des équations différentielles.

III.2- Description des équations générales pour la chimie :

III.2.1- Les équations de transport :

La modélisation de la dispersion dans l'atmosphère d'une espèce chimique *i (1<i<ne)* se fait grâce à une équation de conservation de la concentration C

(Fraction massique Y dans le cas ou la masse volumique est variable)

$$\underbrace{\frac{\partial Y_i}{\partial t}}_{\substack{\text{variation}\\ \text{locale}}} + \underbrace{u.\nabla Y_i}_{\text{advection}} = \underbrace{\nabla.\left(D\nabla Y_i\right)}_{\substack{\text{diffusion}\\ \text{moléculaire}}} + \underbrace{E_i}_{\text{émission}} + \underbrace{R_i}_{\substack{\text{production}\\ \text{par réaction}\\ \text{chimique}}} - \underbrace{D_i}_{\text{dépôt}} \qquad \text{(III-1)}$$

D est le coefficient de diffusion moléculaire. Dans une première approximation, il peut être considéré comme isotrope et identique quelle que soit l'espèce chimique. Il est exprimé en fonction du nombre de Schmidt :

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

Le terme d'émission E_i est donné par le modèle d'émission.

Le terme de production/destruction par réactions chimiques et photochimiques R_i couple les *ne* équations de transport entre elles. Des considérations de cinétique chimique développées dans les sections suivantes sont nécessaires afin de l'exprimer plus en détail.

D_i est le terme de dépôt des polluants. Il peut être humide ou sec. Le premier représente l'absorption par les gouttes d'eau et le seconde le transfert vertical vers le sol, l'eau ou la végétation sur lesquels les polluants se déposent et disparaissent.

$\Rightarrow$ ***Formulation statistique :*** Comme nous sommes en présence de problèmes turbulents, nous appliquons le même traitement que pour les autres équations du problème, à savoir une décomposition de la concentration en la somme d'une moyenne et d'une fluctuation. En moyennant l'équation (III-1), on obtient l'équation en fraction massique suivante :

$$\frac{\partial \overline{Y_i}}{\partial t} + \overline{u}.\nabla \overline{Y_i} = \nabla.\left(D\nabla \overline{Y_i}\right) + E_i + \overline{R_i} + R_i^{'} - D_i \qquad \text{(III-2)}$$

$\Rightarrow$ ***Fermeture des équations :*** Le problème de fermeture apparaît à nouveau, dû au caractère non linéaire des termes d'advection et de production R_i.

$R_i^{'}$ est l'effet des fluctuations des concentrations sur le terme de production. C'est un terme composé de corrélations d'ordre deux, en général négligées dans les simulations. On peut noter tout de même que cette hypothèse n'est valable que lorsque le temps caractéristique d'une réaction chimique est proche de celui de la turbulence mais peut être source d'erreurs dans le cas contraire (pour les espèces à courte durée de vie et faible concentration telle que le radical OH).

En faisant l'hypothèse que le flux de diffusion turbulente est dominé par le gradient de concentration moyenne, nous pouvons modéliser le terme de corrélation double de façon classique par :

$$-\overline{u^{'}Y_i^{'}} = K\nabla \overline{Y_i} \qquad \text{(III-3)}$$

Où ***K*** est la matrice diagonale des coefficients de diffusion turbulente (diffusion anisotrope mais identique d'un polluant à l'autre). Les composantes de ***K*** sont fonction de la stabilité de l'atmosphère.

Cette modélisation est valide tant que les processus réactionnels sont lents par rapport au transport turbulent et que les longueurs et temps caractéristiques du champ moyen de

concentration sont grands par rapports aux échelles turbulentes correspondantes. Dans une première approximation nous pouvons écrire l'équation de diffusion pour une espèce Y_i par :

$$\frac{\partial \overline{Y_i}}{\partial t} + \overline{\mathrm{u}}.\nabla \overline{Y_i} = \nabla.\left(\left(D\mathrm{I} + \mathrm{K}\right)\nabla \overline{Y_i}\right) - \nabla.\overline{\mathrm{u}'Y_i'} + E_i + \overline{R_i} - D_i \qquad \text{(III-4)}$$

$\Rightarrow$ ***Terme de dépôt :*** Le flux vertical d'un polluant à la surface est le produit de la Concentration par un paramètre empirique appelé vitesse de dépôt. Elle dépend de l'espèce considérée, des conditions météorologiques et de la nature de la surface. On distingue trois stades: un stade aérodynamique contrôlé par la diffusion turbulente qui amène le polluant de la couche de surface turbulente directement à proximité de la surface ; un second stade contrôlé par la diffusion laminaire du polluant dans la sous-couche limite laminaire de la surface ; et un troisième stade qui est la composante de transfert ou d'absorption par la surface.
Nous ne modélisons pas ici ce terme de d'équation de transport.

III.3- Cinétique chimique :

La cinétique vise à établir les lois de vitesse des réactions chimiques, à partir de ces lois on pourra prévoir de quelle manière évoluent les concentrations des espèces chimiques intervenant dans la réaction par rapport au temps.

En plus de la détermination de la loi de vitesse, la cinétique permet d'établir l'enchaînement chronologique des réactions élémentaires conduisant à la réaction finale.

III.3.1- Vitesse de réaction

La première idée que l'on pourrait se faire d'une vitesse de réaction serait de l'exprimer en nombre de moles (formées ou disparues) par unité de temps. Cependant la plupart des réactions chimiques sont effectuées à volume constant, soit parce que l'opération est effectuée dans un réacteur de volume constant comme étant égale au nombre de mole formées par unité de temps et par unité de volume, si la transformation était du type le plus simple :

$$A \longrightarrow B$$

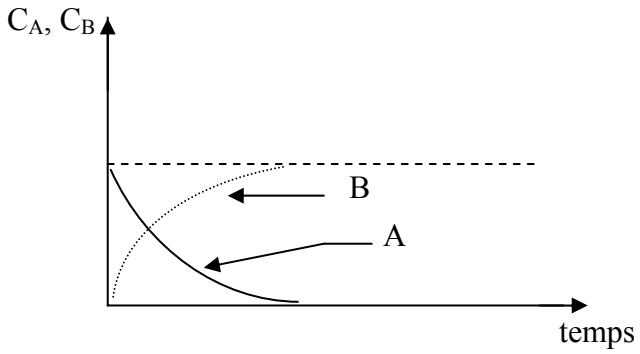


Figure III-1 : l'évolution temporelle des espèces A (réactif) et B (produit).

$$v = \frac{1}{V}\frac{dn}{dt} = \frac{dc}{dt} \qquad \text{(III-5)}$$

v : vitesse de réaction s'exprime par conséquent en mol.L^{-1} s^{-1}

V : volume de réacteur

dn : représente la variation du nombre de moles pendant le temps dt

dc : représente la variation du concentration pendant le temps dt

Les vitesses de disparition de A et d'apparition de B seraient avec une telle définition, identique en valeur absolue mais de signe opposé.

Or, on ne tient pas à ce que la vitesse soit positive ou négative selon que le produit considéré est formé ou consommé au cours de la réaction et, plus généralement, on souhaite qu'une réaction chimique donnée soit caractérisée par une seule vitesse, indépendante de la nature du produit utilisé pour la définir. En écrivant la réaction à étudier sous la forme générale :

$$aA + bB \longrightarrow cC + dD$$

A et B sont les molécules de réactifs ; C et D sont les molécules de produits ; a , b, c, et d : les coefficients stœchiométriques, c'est-à-dire des nombres entiers les plus petits possibles tels que les nombres d'atomes de même nature sont égaux dans les réactifs et les produits. Cette réaction est totale et univoque ; elle ne présente pas de particularités.

On est ainsi amené à introduire la vitesse absolue de réaction définie par :

$$v = \frac{-1}{a}\frac{dc_A}{dt} = \frac{-1}{b}\frac{dc_B}{dt} = \frac{+1}{c}\frac{dc_C}{dt} = \frac{+1}{d}\frac{dc_D}{dt} \qquad \text{(III-6)}$$

Il est bien évident que les quantités de matière produite ou consommée restent dans le rapport de ces coefficients et qu'il faut donc les faire intervenir dans la définition de la vitesse afin que celle-ci ne dépende pas du produit considéré. On pourra alors définir l'avancement de la réaction ξ comme étant la variation des quantités par rapport à la stoechiométrie :

$$d\xi = \frac{-dn_A}{a} = \frac{-dn_B}{b} = \frac{+dn_C}{c} = \frac{+dn_D}{d} \qquad \text{(III-7)}$$

Dans le cas particulier où le mélange réactionnel est gazeux ou constitué d'une seul phase liquide parfaitement agité (réaction homogène) et ou le réacteur et fermé, on peut définir la vitesse de réaction par la relation:

$$v = \frac{1}{V}\frac{d\xi}{dt} \qquad \text{(III-8)}$$

III.3.2- Equation de vitesse de Guldberg et Waage :

Le problème fondamental de la cinétique chimique est de trouver une relation entre la vitesse de la réaction définie précédemment et les paramètres caractéristiques. Des tentatives laborieuses élaborées à partir des propriétés des réactifs n'ont donné que des résultats très limités

Ce n'est qu'en 1867 que les Norvégiens Cato Guldberg (1836-1902) et Pierre Waage (1833-1900) imaginèrent une relation entre vitesse et concentrations des réactifs dont l'expression est à température constante :

$$v = K\,[A]^{\alpha}\,[B]^{\beta} \qquad \text{(III-9)}$$

Cette expression empirique est à la base de tout développement cinétique dont les objectifs sont alors, pour chaque réaction simple à une température donnée, de déterminer les inconnues K, α et β.

Le coefficient de proportionnalité K est appelé constante de vitesse de la réaction à la température donnée.

α et β sont les ordres partiels de réaction par apport respectivement aux réactifs A et B.

La somme (α + β**)** est l'ordre global de la réaction considérée.

Le problème est mathématiquement insoluble ; personne ne peut prétendre résoudre une équation différentielle à trois inconnues (vitesse, ordre et concentration).

Le seule moyen de surmonter cette difficulté est de choisir des conditions expérimentales permettant de réduire le nombre des inconnues et d'interpréter rigoureusement les résultats expérimentaux, afin d'en extraire des relations généralisable. L'expérience devient absolument indispensable pour développer l'étude cinétique.

III.3.3- Recherche de l'ordre global d'une réaction :

L'ordre global d'une réaction se confond avec l'ordre partiel lorsque la réaction est la transformation d'un seul réactif. Quand la réaction implique plusieurs réactifs, la mise en œuvre des réactifs en proportions stoechiométrique permet de faire apparaître l'ordre global de la réaction dans l'équation de vitesse suivante :

$$aA + bB \longrightarrow cC + dD$$

La vitesse s'écrit : $v = K [A]^{\alpha} [B]^{\beta}$

Tel que α et β des constantes, K est une constante

L'équation générale se réduit à deux inconnues K et $(\alpha+\beta) = m$.

L'équation différentielle reste néanmoins insoluble puisqu-elle met en jeu deux inconnues m et K.

Il devient alors indispensable pour continuer, d'obtenir des résultats expérimentaux, afin de pouvoir préciser la relation existant entre la vitesse et la concentration ou la concentration et le temps, et en déduire la valeur de m.

a- Relation vitesse – concentration :

Une mesure de la vitesse de la réaction en fonction de la concentration au cours du temps permet de trouver facilement la valeur de m ; en effet, il suffit de représenter lg v_A en fonction de lg [A] pour obtenir m qui est la pente de la droite obtenue :

$V_A = K [A]^m$ et $\log v_A = m \log [A] + \log K$

La vitesse d'une réaction est un paramètre expérimental qu'il est rare de pouvoir mesurer directement en fonction de la concentration.

Il est possible de déterminer cette vitesse à partir des tangentes à la courbe [A] = f (t) à différentes valeurs de [A].

b- Relation concentration – temps

La relation **concentration – temps** est la plus fréquente ; elle s'applique à toute valeur expérimentale proportionnelle à la concentration.

Les résultats « concentration en fonction du temps » sont représentés sur un graphe et permettent de construire la courbe de la variation de concentration [A] en fonction du temps.

Il s'agit alors d'interpréter rigoureusement cette courbe, ce qui est relativement facile dans les cas où m prend une valeur entière.

m = 0

La relation [A] = f (t) est linéaire puisque :

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = K \Rightarrow -d[A] = K.dt \qquad \text{(III-10)}$$

L'intégration de cette équation différentielle depuis $[A_0]$ jusque [A] avec t = 0 et t = t respectivement, donne :

$$K\,t = [A_0] - [A] \quad \text{ou} \quad [A] = [A_0] - K\,t \qquad \text{(III-11)}$$

m = 1

La relation [A] = f (t) est logarithmique.

Pour identifier l'allure exponentielle décroissante de la courbe [A] = f (t), il suffit de rechercher si elle présente une propriété spécifique de ces courbes. Cette technique est appelée méthode des temps partiels de réaction ; soit [A] la valeur de la concentration au temps t ; pour la concentration [A] / 2, on lit sur la courbe, la valeur du temps t', puis pour [A] / 4, la valeur t''.

Si la courbe est logarithmique, t' – t = t'' – t'.

Pour plus de sûreté, on représente la transformée linéaire de la relation

[A] = f (t) qui s'établit facilement.

$$-\frac{d[A]}{dt} = K[A] \quad \Rightarrow \quad -\frac{d[A]}{[A]} = Kdt \qquad \text{(III-12)}$$

En intégrant entre t = 0 et t =t d'une part, $[A_0]$ et [A] d'autre part, on obtient :

$$Ln\frac{[A_0]}{[A]} = Kt \qquad \text{ou} \qquad [A] = [A_0]\exp(-K\,t) \qquad \text{(III-13)}$$

Soit : $\ln [A] = \ln [A_0] - K\,t$ La linéarité entre ln [A] et t confirme définitivement la valeur de l'ordre global m =1.

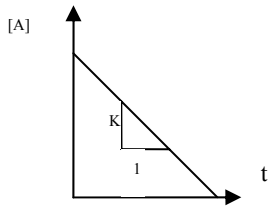
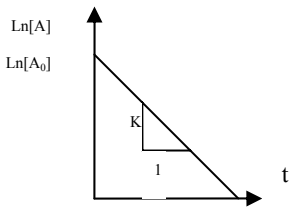
m	Equation différentielle Loi cinétique après intégration	Temps de demi- vie $t_{1/2}$	Représentation graphique
0	$-\frac{d[A]}{dt} = K$ $[A] = [A_0] - Kt$	$\frac{[A_0]}{2K}$	
1	$-\frac{d[A]}{dt} = K[A]$ $[A] = [A_0]\,e^{-kt}$	$\frac{\ln 2}{K} = \frac{0{,}693}{K}$	

Tableau III-1 : lois de vitesse simple

c- Détermination de la constante de vitesse

- Relation vitesse – concentration. Si la vitesse est connue avec précision en fonction du temps, le graphe lg (v) = f (lg [A]) admet pour ordonnée à l'origine lg K ; on obtient ainsi K. Toutefois, cette méthode séduisante et simple est d'utilisation rare pour des raisons expérimentales de possibilité de mesure de v en fonction de t**.**

- Relation **concentration – temps**. Après avoir déterminé la valeur de m, le calcule de la constante K est toujours réalisé à partir de la transformée linéaire de la courbe [A] = f (t). Il revient à la détermination de la pente d'une droite, ce qui est élémentaire (voir tableau ci-dessous).

m	ordonnée	abscisse	Transformée linéaire	K
0	[A]	t	$[A] = [A_0]- K t$	$Mol.l^{-1} .t^{-1}$
1	Ln [A]	t	$Ln[A]= Ln[A_0] -Kt$	t^{-1}

Tableau III-2 : Détermination de la pente

- Dimensions de K. Les dimensions de cette constante dépendent de l'ordre m ; elle sont toujours en $(temps)^{-1}$.

L'unité de temps reste à la discrétion de l'expérimentateur. La concentration peut être remplacée par une unité de pression, provenant de l'expression d'une pression partielle, proportionnelle à la concentration du composé correspondant en phase gazeuse.

La constante vraie de la réaction K que si la réaction ne présente qu'un seul réactif :

$$v_A = K[A]^{\alpha} \qquad \text{(III-14)}$$

Ou si la stoechiométrie est égale à 1, soit : a = b.

La recherche de l'ordre global m n'est donc qu'une première étape dans la majorité des cas ; il reste à rechercher les valeurs de α, β.

De plus, la méthode d'interprétation de la courbe concentration – temps ne permet que de calculer m dans des cas simples.

III.3.4- Paramètres influençant la vitesse de réaction :

La vitesse d'une réaction dépend généralement de :

-Température : une élévation de température accélère les réactions.

-Concentration : une réaction est généralement d'autant plus rapide que la concentration des réactifs est élevée.

-Contact entre les réactifs : les réactifs doivent pouvoir se rencontrer, si la réaction fait intervenir plusieurs phases, la vitesse de réaction dépendra de leurs possibilités de contact.

-Catalyse : la présence de certains corps accélère la réaction.

-Lumière : certaines réactions ne se produisent avec une vitesse appréciable qu'en présence de lumière qui joue le rôle d'une énergie excitatrice.

Les facteurs qui influencent la vitesse d'une réaction chimique sont principalement la **concentration** des réactifs et parfois celle de certains produit (réaction complexe) et la **température.**

III.3.5- Influence de la température sur la vitesse de réaction :

Les vitesses des réactions chimiques sont toujours affectées par une variation de température et elles croissent généralement lorsque la température T croit[1].
Cet accroissement de vitesse est essentiellement du à l'accroissement de mobilité de diverses espèces qui rend les collisions plus fréquentes et leur confère une plus grande énergie.

III.3.6- Energie d'activation :

La cinétique chimique montre que trois conditions doivent être remplies au niveau moléculaire pour qu'une réaction puisse se produire : les molécules doivent entrer en collision ; elles doivent être positionnées de telle sorte que les groupes réactifs puissent former un état de transition, ou complexe activé, de structure intermédiaire entre les réactifs et les produits ; enfin, la collision doit être suffisamment énergétique pour que cet état de transition puisse être atteint et conduire aux produits.
Lorsqu'une liaison chimique entre deux molécules se rompt — ce qui intervient nécessairement dans toute réaction chimique —, puis qu'une autre se crée, cela correspond à un choc efficace entre les entités. Au cours du choc, l'énergie cinétique des particules se transforme en énergie chimique, ce qui permet la formation d'une espèce réactive, le complexe activé. On peut représenter le diagramme énergétique d'une réaction simple — c'est-à-dire ne comportant qu'une seule étape — comme suit :

[1] on peut trouver un contre exemple à cette règle dans le cas de la catalyse enzymatique : la vitesse croit bien avec la température mais, lorsque celle-ci devient trop élevée, l'enzyme se dénature, la catalyse cesse la vitesse décroît.

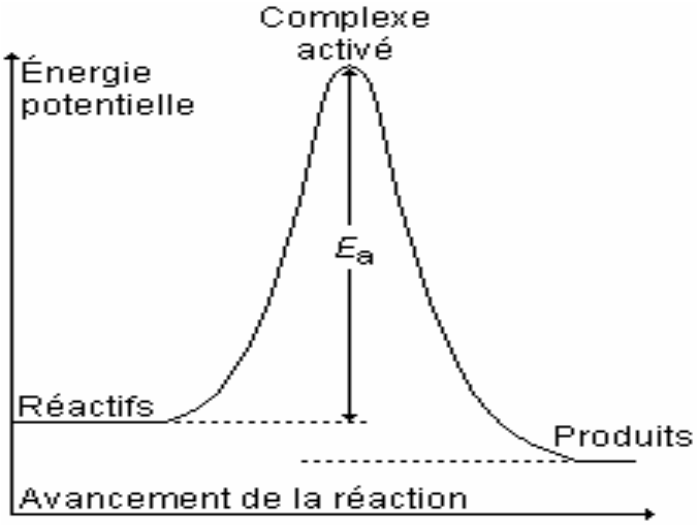


Figure III-2 : Energie d'activation d'une réaction à une seule étape.

Pour que la réaction puisse avoir lieu, les réactifs nécessitent un apport d'énergie minimale, appelé énergie d'activation, notée E_a. Il s'agit de l'énergie nécessaire pour former le complexe activé. Une fois constitué, ce dernier se décompose pour engendrer les produits de la réaction (ou les réactifs dans certains cas).

Pour une réaction en plusieurs étapes, c'est l'étape la plus lente qui détermine la vitesse de réaction et l'on observe la formation d'intermédiaires réactionnels. Considérons une réaction en deux étapes, la première étant la plus lente. Elle a le diagramme énergétique suivant :

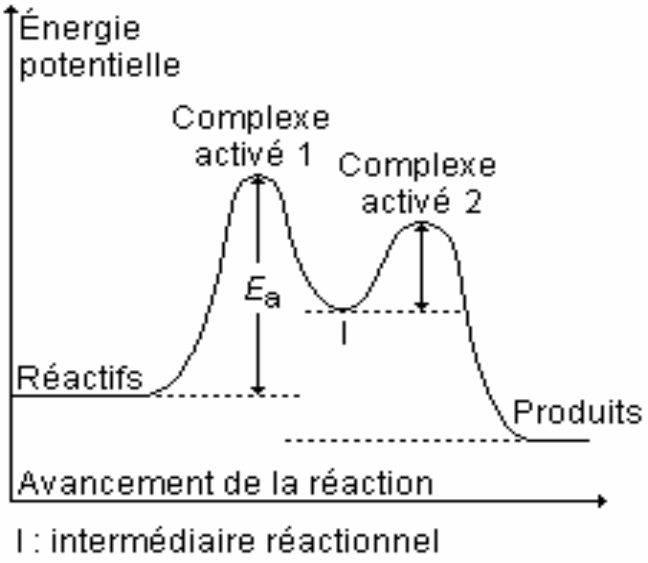


Figure III-3 : Energie d'activation d'une réaction à deux étapes.

Loi D'Arrhenius

Pour la plupart des réactions, on peut appliquer la loi d'Arrhenius, relation entre la température absolue, la constante de vitesse et l'énergie d'activation : dln (k) / dT = Ea / RT2, R étant la constante des gaz parfaits (R = 8,31 $J.K^{-1}.mol^{-1}$). On utilise généralement cette loi sous la forme intégrée : $k = k_0.\exp(- Ea / RT)$, k_0 étant une constante. On remarque ici que la constante de vitesse k ne dépend que de la température et qu'une augmentation de température provoque une élévation de la constante de vitesse, et donc une accélération du processus réactionnel.

III.3.7- Mécanisme réactionnel :

Toutes les réactions peuvent se dérouler en une ou plusieurs étapes : une réaction simple ne présente qu'une seule étape ; une réaction complexe se produit en plusieurs étapes. Ces dernières donnent naissance à des intermédiaires réactionnels, composés très réactifs qui n'apparaissent pas dans le bilan réactionnel ; on les appelle également centres actifs. Le mécanisme réactionnel est la succession des processus élémentaires, ou actes élémentaires, qui conduisent à la formation des intermédiaires réactionnels, puis des produits. La molécularité d'un acte élémentaire est le nombre d'entités réactives (molécules, ions…) qui interviennent dans le processus.

D'une façon générale le mécanisme réactionnel comprend trois étapes essentielles :

a- l'étape d'initiation (amorçage) : correspond à la formation dans le milieu réactionnel d'une entité active.

b- L'étape de propagation : (ramification) correspond à la formation des centres actifs à partir des chocs efficaces.

c- L'étape de rupture : correspond à la désactivation d'un des centres actifs qui intervient dans la réaction déterminante du mécanisme réactionnel.

III.3.8- Théorie de collision :

Cette théorie à permis d'expliciter la nature des conditions favorables à la réalisation des réactions chimiques en donnant un sens physique à la constante de vitesse et au terme A et E_a, introduit par Arrhenius. Cette théorie a été établie pour les réactions se produisant en phase gazeuse : en effet, dans l'état gazeux, les molécules sont toujours en mouvement et entrent en contact entre elles au moment de leur collisions dont la fréquence peut être évaluée à l'aide de la théorie cinétique des gaz.

III.3.9- Loi de vitesse d'une réaction complexe :

III.3.9 .1- Cas de deux étapes monomoleculaires :

Soit un réactif A qui se transforme en un produit C grâce à la succession de deux étapes monomoléculaires :

$$A \xrightarrow{K_1} B$$

$$B \xrightarrow{K_2} C$$

Les équations de vitesse s'écrivent :

$$v_1 = K_1 [A]^{\alpha} = -\frac{d[A]}{dt} \qquad \text{(III-15)}$$

$$v_2 = K_2 [B]^{\beta} - K_1 [A]^{\alpha} = -\frac{d[B]}{dt} \qquad \text{(III-16)}$$

Avec:

v_1 : vitesse de réaction 1 et α ordre partiel par rapport à A

v_2 : vitesse de réaction 2 et β ordre partiel par rapport à B (réactif).

La résolution du système d'équation différentielle du premier ordre

$$-\frac{d[A]}{dt} = K_1 [A]^{\alpha} \qquad \text{(III-17)}$$

$$-\frac{d[B]}{dt} = K_2 [B]^{\beta} - K_1 [A]^{\alpha} \qquad \text{(III-18)}$$

Nous permis d'avoir l'évolution de la concentration de A en fonction du temps et également l'évolution de B en fonction du temps puisque la vitesse

$$v_2 = \frac{d[C]}{dt} \qquad \text{(III-19)}$$

Dans le cas où les ordres partiels α et β sont égaux à 1, on montre facilement que deux cas sont possibles :

- $K_1 > K_2$: la concentration de B augmente au début de la réaction, lorsque sa formation est plus rapide que sa consommation, elle diminue ensuite lorsque le rapport de ces deux vitesses s'inverse, en raison de épuisement progressif de A.
- $K_1 < K_2$: la concentration de B reste faible et peut être considérée comme approximativement constante. Tout se passe comme si A se transformait directement en C. Le réactif A est consommé uniquement dans la première étape qui est

monomoléculaires, sa concentration diminue donc exponentiellement avec le temps, à partir de sa concentration initiale $[A_0]$.

Par ailleurs, la concentration de C ne peut que croître à partir de zéro et tendre finalement vers la concentration initiale de A lorsque A aura été totalement transformé en C.

La concentration de B commence par augmenter au début de la réaction tant que $v_1 > v_2$. Mais comme la concentration de A diminue, et celle de B augmente en fonction du temps, v_1 décroît, et v_2 croit. Il peut exister donc un moment où $v_1 = v_2$ après lequel la situation s'inverse ($v_2 > v_1$). Après être passé par un maximum, la concentration de B diminue et tend vers zéro.

III.3.9 .2- Cas de plusieurs étapes :

Soit deux réactifs A et B qui se transforment en produits grâce à une succession de plusieurs étapes :

$$A + B \rightarrow C + D \quad (K_1)$$
$$C + E \rightarrow F + B \quad (K_2)$$
$$C + B \rightarrow F + D \quad (K_3)$$

Tel que A est le réactif stable, et B un réactif dans un état excité.

Les équations de vitesse s'écrivent sous forme d'un système d'équations différentielles du premier ordre :

$$\frac{d[A]}{dt} = - K_1 [A]^{\alpha} [B]^{\beta} \qquad \text{(III-20)}$$

$$\frac{d[B]}{dt} = - K_1 [A]^{\alpha} [B]^{\beta} + K_2 [C]^{\gamma}[E]^{\theta} - K_3[C]^{\gamma}[B]^{\beta} \qquad \text{(III-21)}$$

$$\frac{d[C]}{dt} = + K_1 [A]^{\alpha} [B]^{\beta} - K_3 [C]^{\gamma} [B]^{\beta} - K_2 [C]^{\gamma} [E]^{\theta} \qquad \text{(III-22)}$$

$$\frac{d[D]}{dt} = + K_1 [A]^{\alpha} [B]^{\beta} + K_3 [C]^{\gamma} [B]^{\beta} \qquad \text{(III-23)}$$

$$\frac{d[E]}{dt} = - K_2 [C]^{\gamma} [E]^{\theta} \qquad \text{(III-24)}$$

Dans le cas où les ordres partiels $\alpha, \beta, \gamma, \theta$ sont égaux à 1 ; on pose :

$$[A] = Y_1 \quad \text{tel que} \quad \frac{d[A]}{dt} = Y_1' \qquad \text{(III-25)}$$

$$[B] = Y_2 \quad \text{tel que} \quad \frac{d[B]}{dt} = Y_2' \qquad \text{(III-26)}$$

$$[C] = Y_3 \quad \text{tel que} \quad \frac{d[C]}{dt} = Y_3' \qquad \text{(III-27)}$$

$$[D] = Y_4 \quad \text{tel que} \quad \frac{d[D]}{dt} = Y_4' \qquad \text{(III-28)}$$

$$[E] = Y_5 \quad \text{tel que} \quad \frac{d[E]}{dt} = Y_5' \qquad \text{(III-29)}$$

$$[F] = Y_6 \quad \text{tel que} \quad \frac{d[F]}{dt} = Y_6' \qquad \text{(III-30)}$$

Alors le système d'équations différentielles devient :

$$Y_1' = - K_1 Y_1 Y_2 \qquad \text{(III-31)}$$

$$Y_2' = - K_1 Y_1 Y_2 + K_2 Y_3 Y_5 - K_3 Y_3 Y_2 \qquad \text{(III-32)}$$

$$Y_3' = + K_1 Y_1 Y_2 - K_2 Y_3 Y_5 - K_3 Y_3 Y_2 \qquad \text{(III-33)}$$

$$Y_4' = + K_1 Y_1 Y_2 + K_3 Y_3 Y_2 \qquad \text{(III-34)}$$

$$Y_5' = - K_2 Y_3 Y_5 \qquad \text{(III-35)}$$

$$Y_6' = + K_2 Y_3 Y_5 + K_3 Y_3 Y_2 \qquad \text{(III-36)}$$

Dans le cas où on a un mécanisme réactionnel formé par plusieurs étapes, deux problèmes essentiels se posent ; le premier c'est de déterminer le réactif important dans le mécanisme et le second c'est de déterminer l'étape déterminante du mécanisme réactionnel.

La détermination du réactif important dans le mécanisme et relativement facile, parce que d'une façon générale le mécanisme réactionnel est établi pour expliquer l'évolution d'un réactif bien déterminé.

Quant à l'étape déterminante c'est-à-dire l'étape qui ralenti la succession des étapes permettant la formation du produit final : En quelque sorte, c'est l'étape qui impose sa vitesse à la vitesse globale du mécanisme, ce qui est important c'est la détermination des constantes de vitesse K de chaque étape, car à partir des valeurs des constantes de vitesse on aura une idée sur la vitesse de chaque étape du mécanisme réactionnel.

La réaction complexe, qui admet ce mécanisme et qui s'effectue lors d'un enchaînement plus ou mois compliqué d'étapes élémentaires, possède une vitesse globale.

La constante de vitesse de la réaction complexe est une fonction de toutes les constantes de vitesse des réactions élémentaires qui constitué le mécanisme. Il s'agit donc d'une constante de vitesse apparente pour la réaction complexe.

III.4-Photochimie.

A la différence de ce qui se passe pour les réactions dites « par collision » ou « thermique », dans les réactions photochimiques, l'énergie nécessaire à la réaction chimique est acquise par absorption d'un photon. Elles sont donc gouvernées par le rayonnement solaire, surtout dans l'ultraviolet. Une molécule peut se dissocier par absorption d'un photon (photodissociation) et produire des atomes ou des radicaux (très réactifs), qui serviront ensuite lors de réactions secondaires. Dans une réaction photochimique, il y a un stade proprement photochimique, qui est le plus souvent le stade initial, et qui conduit à un état excité de l'espèce photolysée :

$A^* + h\nu \rightarrow A^*$

Où $h\nu$ représente un photon.

Ce stade est suivi d'un ou plusieurs stades 'noirs' dans lesquels la lumière n'intervient plus :

$A^* + B \rightarrow X + Y$

Considérons la réaction d'un point de vue global $\left(A + h\nu \rightarrow X + Y\right)$ le taux de dissociation (production des espèces X et Y et destruction de A) R_A vaut :

$$R_A = -J_a c_A \qquad \text{(III-37)}$$

Où J_A, appelé coefficient de photodissociation, est l'équivalent des constantes de vitesse k pour les réactions par collision. La formule 4.14 explicitant le terme de production/destruction reste valable dans le cas des réactions photochimiques, k étant remplacé par J_a. Il est fonction de la position du soleil dans le ciel et s'exprime par la relation suivante :

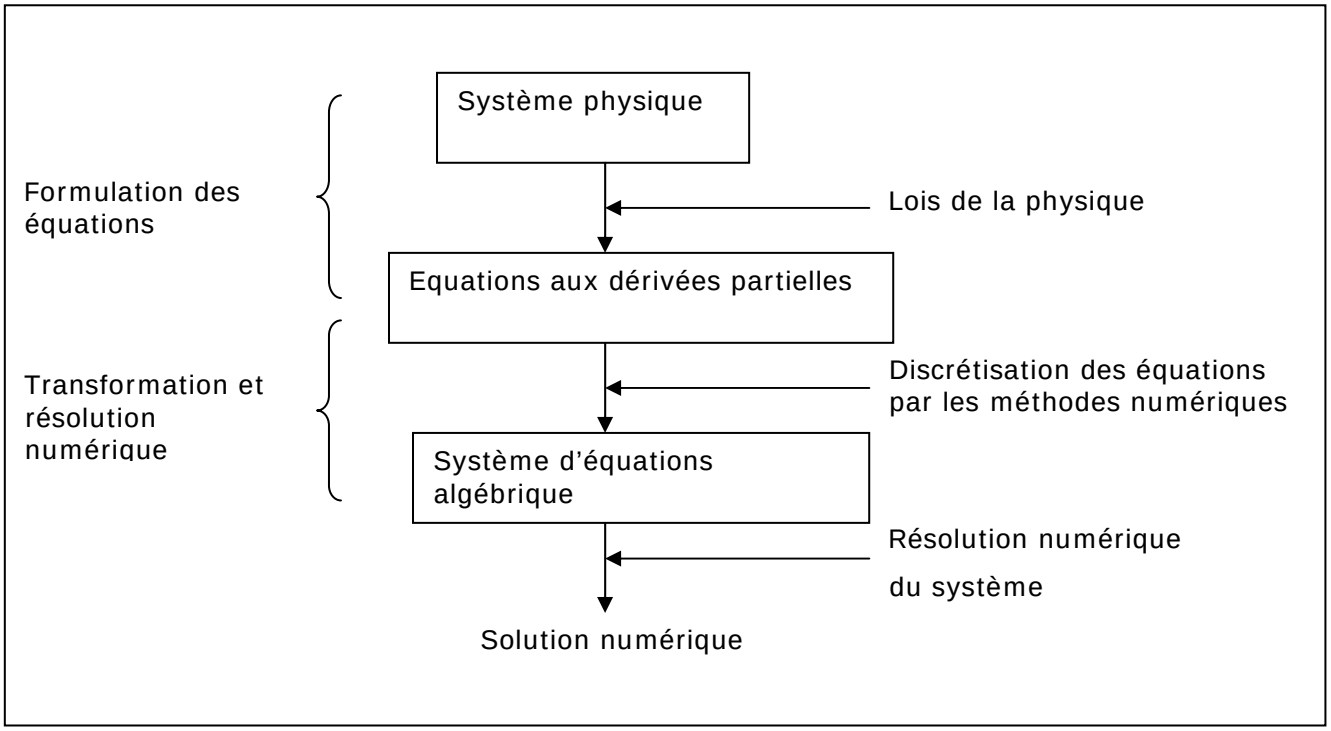
$$J_a = ae^{-b/\cos Z} \qquad \text{(III-38)}$$

Où a et b sont des constantes déterminées expérimentalement et Z l'angle solaire zénithal

Chapitre IV:
Modèle Numérique

IV.1- Introduction

Le comportement d'un système physique est généralement représenté par un système d'équation aux dérivées partielles, associée à des conditions aux limites sur le domaine considéré. Comme, il n'y a pas toujours possible de trouver les solutions analytique dans la plupart de ces problèmes physique. Le système est remplacé par un système discret équivalent décrit par des équations algébrique quand peut résoudre par les méthodes numériques on suit les marches décrites dans l'organigramme suivant :



Il n'existe pas de solution analytique simple du système d'équations différentielles qui décrit les mouvements de l'atmosphère. Cette résolution doit se faire de façon numérique et avec d'importantes simplifications, pour résoudre ces équations aux dérivées partielles, il faut choisir une technique de discrétisation. Il y en a trois types possibles :

-méthode des différences finies.

-méthode des volumes finis.

-méthode des éléments finis.

Ce choix n'est pas anodin, car les techniques de discrétisation sont couplées aux types de maillages utilisés. Un maillage structuré (figure IV-1 (a)), où les points sont repérés par des indices (i,j,k) et possèdent le même nombre de voisins, est généralement utilisé avec des méthodes de différences finies ou de volumes finis. Alors qu'un maillage non structuré (figure

IV-1 (b)), où les points sont numérotés et peuvent ne pas avoir le même nombre de voisins, sert plus pour la méthode des éléments finis.

(a) **(b)**

Figure IV-1 : structure du maillage

IV.2- Méthodes des différences finies :

L'idée de cette méthode est d'obtenir des valeurs approchées de la solution continue en un certain nombre de points. La technique de discrétisation consiste à établir des relations permettant d'évaluer approximativement les dérivées de la solution aux nœuds du maillage.

Ensuite l'équation différentielle, où les dérivées ont été remplacées par leur expression approchée, doit être satisfaite à chaque nœud du domaine. Par exemple, sur une grille à deux dimensions où chaque nœud est repéré par les indices (i,j) en (x,y), le développement de la solution en série de Taylor autour du point (x_0,y_0) est donné par :

$$u(x_0+\Delta x, y_0) = u_{i+1,j} = u_{i,j} + \Delta x\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} + \frac{\Delta x}{2!}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} + \ldots \qquad \text{(IV-1)}$$

Dans ce cas, le développement a été limité au second ordre, mais on peut le poursuivre jusqu'à un ordre quelconque. On obtient ainsi l'expression de la dérivée première :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + \Theta(\Delta x) \qquad \text{(IV-2)}$$

La notation $\Theta(\Delta x)$ signifie que l'erreur de troncature ε est telle que pour $\Delta x \to 0$, $\varepsilon \le K|\Delta x|$, où K est une constante positive. Dans l'étude des différences finies, l'erreur de troncature est toujours de la forme $\Theta(\Delta x^q)$, q est appelé l'ordre de précision de la formule.

La formule établie pour la dérivée première n'est pas unique. En développant en série de Taylor pour le point $(x_0-\Delta x, y_0)$ (le nœud (i-1,j)) on obtient une formule pour la dérivée première de différence arrière :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} + \ldots = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + \Theta(\Delta x) \qquad \text{(IV-3)}$$

En combinant les formules de différence arrière et avant (en (i+1, j)), on obtient une formule de différence centrée :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + \Theta(\Delta x^2) \qquad \text{(IV-4)}$$

L'ordre de précision n'est pas limité. Il suffit de recombiner les valeurs de u pour un nombre de points plus important. Par exemple, à l'ordre 4 :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{-u_{i+2,j} + 8u_{i+1,j} - 8u_{i-1,j} + u_{i-2,j}}{12\Delta x} + \Theta(\Delta x^4) \qquad \text{(IV-5)}$$

Cependant, l'augmentation de la précision du schéma entraîne une augmentation du nombre de points à considérer, et par conséquent l'augmentation du nombre d'opérations à résoudre, et donc l'augmentation du temps de calcul. Il en ressort que plus l'ordre de précision sera élevé plus la restitution des résultats sera lente.

Reste à noter que les schémas d'ordre pair ont tendance à favoriser les oscillations et les schémas d'ordre impair ont tendance à introduire la dissipation.

IV.3- Discrétisation de l'équation générale de transport :

L'équation générale de transport s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + S_\phi \qquad \text{(IV-6)}$$

Elle gouverne le paramètre transporté à savoir, température, concentration, quantité de mouvement, masse…

Discrétisation du terme local (terme d'accumulation) :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = \frac{(\rho\phi)_{ij}^{t+\Delta t} - (\rho\phi)_{ij}^{t}}{\Delta t} \qquad \text{(IV-7)}$$

Discrétisation du terme convectif :

$$\frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} = \frac{(\rho u\phi)_{i+1j} - (\rho u\phi)_{i-1}}{2\Delta x} \qquad \text{(IV-8)}$$

$$\frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} = \frac{(\rho v\phi)_{ij+1} - (\rho v\phi)_{ij-1}}{2\Delta y} \qquad \text{(IV-9)}$$

Discrétisation du terme de diffusion :

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) = \frac{\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i+1j} - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i-1j}}{2\Delta x} = \frac{\left(\Gamma_{\phi_{i+1j}} \frac{\phi_{i+1j} - \phi_{i-1j}}{2\Delta x}\right) - \left(\Gamma_{\phi_{i-1j}} \frac{\phi_{i+1j} - \phi_{i-1j}}{2\Delta x}\right)}{2\Delta x} \qquad \text{(IV-10)}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)=\frac{\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_{ij+1}-\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_{ij-1}}{2\Delta y}=\frac{\left(\Gamma_{\phi_{ij+1}} \frac{\phi_{ij+1}-\phi_{ij-1}}{2\Delta y}\right)-\left(\Gamma_{\phi_{ij-1}} \frac{\phi_{ij+1}-\phi_{ij-1}}{2\Delta y}\right)}{2\Delta y} \qquad \text{(IV-11)}$$

Pour la discrétisation temporelle, il existe plusieurs schémas tels que :

Schéma explicite

$$\frac{(\rho\phi)_{ij}^{t+\Delta t}-(\rho\phi)_{ij}^{t}}{\Delta t}=f(\phi_{ij},\phi_{ij+1},\phi_{ij-1},\phi_{i+1j},\phi_{i-1j},\rho_{ij},\Gamma_{ij},u_{ij},v_{ij})^t \qquad \text{(IV-12)}$$

C'est-à-dire :

$$\frac{(\rho\phi)_{ij}^{t+\Delta t}-(\rho\phi)_{ij}^{t}}{\Delta t}=\left[-\left(\frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x}+\frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)+S_\phi\right]^t \qquad \text{(IV-13)}$$

Schéma implicite

$$\frac{(\rho\phi)_{ij}^{t+\Delta t}-(\rho\phi)_{ij}^{t}}{\Delta t}=f(\phi_{ij},\phi_{ij+1},\phi_{ij-1},\phi_{i+1j},\phi_{i-1j},\rho_{ij},\Gamma_{ij},u_{ij},v_{ij})^{t+\Delta t} \qquad \text{(IV-14)}$$

$$\frac{(\rho\phi)_{ij}^{t+\Delta t}-(\rho\phi)_{ij}^{t}}{\Delta t}=\left[-\left(\frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x}+\frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)+S_\phi\right]^{t+\Delta t} \qquad \text{(IV-15)}$$

La méthode des différences finies qu'en a utilisée est d'ordre un, donc elle correspond à un schéma pour la méthode des volumes finis (schéma aux différences centrées) qu'en va voir dans la section suivante et qui est valable ou bien stable dans un intervalle bien défini d'un nombre adimensionnel, donc c'est un schéma conditionnel, qui nous conduisant à chercher d'autres schémas inconditionnels.

IV.4- Méthode des volumes finis :

La technique des volumes finis consiste à discrétiser la forme intégrale des équations de conservations plutôt que leurs formes différentielles.

Les lois de conservation intégrées sur un volume élémentaire (une maille) V de frontière S peuvent se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x}+\frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right)+S_\phi \qquad \text{(IV-16)}$$

Où ϕ est le scalaire transporté, ρ est la masse volumique, u et v sont les composante de la vitesse suivant les directions x et y, Γ_ϕ est le coefficient de diffusion dépend du scalaire transporté et S_ϕ est le terme source qui dépend aussi du scalaire transporté.

La différence essentielle entre la méthode des différences finies et la méthode des volumes finis est que dans la première, on manipule des valeurs correspondant aux points de calcul tandis que dans la deuxième, on manipule des valeurs moyennes prises sur un volume de contrôle entourant les points de calcul (figure).

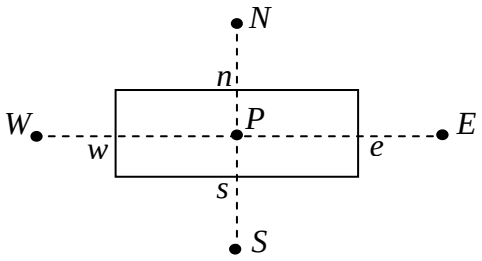


Figure IV-2 : volume de contrôle entourant le point centrale P.

En intégrant l'équation de transport sur le volume de contrôle, on a :

$$\overbrace{\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}dt.dy.dx}^{I}+\overbrace{\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi)\,dt.dy.dx}^{II}+\overbrace{\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}\frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi)dt.dy.dx}^{III}=$$

$$\underbrace{\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)dt.dy.dx}_{IV}+\underbrace{\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}\frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)dt.dy.dx}_{V}+\underbrace{\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}Sdt.dy.dx}_{VI} \qquad \text{(IV-17)}$$

Avant de calculer l'intégrale des différents termes présents dans l'équation précédente, on laisse l'intégration des deux termes II et III plus tard pour plus de détail.

Le terme instationnaire (ou locale) I :

$$\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}dt.dy.dx=\left[(\rho\phi)_P^1-(\rho\phi)_P^0\right]\Delta x.\Delta y \qquad \text{(IV-18)}$$

Le terme de diffusion IV :

$$\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)dt.dy.dx=\int_t^{t+\Delta t}\Delta y.\left[\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_e-\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_w\right].dt$$

$$=\int_t^{t+\Delta t}\Delta y.\left[\left(\frac{\Gamma_e(\phi_E-\phi_P)}{(\delta x)_e}\right)-\left(\frac{\Gamma_w(\phi_P-\phi_W)}{(\delta x)_w}\right)\right].dt \qquad \text{(IV-19)}$$

Plusieurs hypothèses sont possible pour définir comment varie ϕ_P, ϕ_E et ϕ_W en fonction du temps dans l'intervalle $[t,\ t+\Delta t]$. Ils sont généralise comme suit :

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi_P .dt = \left[f\phi_P^1 + (1-f)\phi_P^0 \right].\Delta t \qquad \text{(IV-20)}$$

Où f est un facteur de pondération compris entre 0 et 1 ($f=0$ pour le schéma explicite, $f=1$, pour le schéma implicite et $f=0.5$, pour le schéma de Crank - Nicholson). On remplace cette définition dans l'équation précédente, on trouve :

$$\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) dt.dy.dx = f.\left[\left(\frac{\Gamma_e\left(\phi_E^1-\phi_P^1\right)}{(\delta x)_e}\right)-\left(\frac{\Gamma_w\left(\phi_P^1-\phi_W^1\right)}{(\delta x)_w}\right)\right].\Delta y + (1-f)\left[\left(\frac{\Gamma_e\left(\phi_E^0-\phi_P^0\right)}{(\delta x)_e}\right)-\left(\frac{\Gamma_w\left(\phi_P^0-\phi_W^0\right)}{(\delta x)_w}\right)\right].\Delta y \qquad \text{(IV-21)}$$

On procède de la même manière pour le terme V :

$$\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) dt.dy.dx$$

On trouve :

$$\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) dt.dy.dx = f.\left[\left(\frac{\Gamma_n\left(\phi_N^1-\phi_P^1\right)}{(\delta y)_n}\right)-\left(\frac{\Gamma_s\left(\phi_P^1-\phi_S^1\right)}{(\delta y)_s}\right)\right].\Delta x + (1-f)\left[\left(\frac{\Gamma_n\left(\phi_N^0-\phi_P^0\right)}{(\delta y)_n}\right)-\left(\frac{\Gamma_s\left(\phi_P^0-\phi_S^0\right)}{(\delta y)_s}\right)\right].\Delta x \qquad \text{(IV-22)}$$

Le terme source VI :

Le terme S_ϕ dépend de la quantité transportée à savoir vitesse, température, concentration, énergie cinétique turbulente, dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Donc ce terme va discrétiser plus tard.

Concernant les deux termes II et III, on procède de la manière suivante :

$$\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi)\, dt.dy.dx = \int_t^{t+\Delta t} \Delta y.\left[(\rho u\phi)_e - (\rho u\phi)_w\right].dt = \int_t^{t+\Delta t} \Delta y.\left[(\rho u)_e \phi_e - (\rho u)_w \phi_w\right].dt \qquad \text{(IV-23)}$$

Au premier lieu, les valeurs de ϕ_e et ϕ_w sont exprimées en fonction de ϕ_P, ϕ_E et ϕ_W comme suit :

$$\phi_e = \frac{1}{2}\left(\phi_E + \phi_P\right)$$

$$\phi_w = \frac{1}{2}\left(\phi_P + \phi_W\right)$$

Même chose pour ϕ_s et ϕ_n, c'est-à-dire :

$$\phi_n = \frac{1}{2}\left(\phi_N + \phi_P\right)$$

$$\phi_s = \frac{1}{2}\left(\phi_P + \phi_S\right)$$

Donc le terme II devient :

$$\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho u\phi\right)dt.dy.dx = \int_t^{t+\Delta t}\Delta y.\left[\frac{1}{2}\left(\rho u\right)_e\left(\phi_E+\phi_P\right)-\frac{1}{2}\left(\rho u\right)_w\left(\phi_P+\phi_W\right)\right].dt$$

$$= \frac{1}{2}.f.\left[\left(\rho u\right)_e\left(\phi_E^1+\phi_P^1\right)-\left(\rho u\right)_w\left(\phi_P^1+\phi_W^1\right)\right].\Delta y$$

$$+\frac{1}{2}\left(1-f\right)\left[\left(\rho u\right)_e\left(\phi_E^0+\phi_P^0\right)-\left(\rho u\right)_w\left(\phi_P^0+\phi_W^0\right)\right].\Delta y \qquad \text{(IV-24)}$$

De même pour le terme III :

$$\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}\frac{\partial}{\partial y}\left(\rho v\phi\right)dt.dy.dx = \int_t^{t+\Delta t}\Delta x.\left[\frac{1}{2}\left(\rho v\right)_n\left(\phi_N+\phi_P\right)-\frac{1}{2}\left(\rho v\right)_s\left(\phi_P+\phi_S\right)\right].dt$$

$$= \frac{1}{2}.f.\left[\left(\rho v\right)_n\left(\phi_N^1+\phi_P^1\right)-\left(\rho v\right)_s\left(\phi_P^1+\phi_S^1\right)\right].\Delta x \qquad \text{(IV-25)}$$

$$+\frac{1}{2}\left(1-f\right)\left[\left(\rho v\right)_n\left(\phi_N^0+\phi_P^0\right)-\left(\rho u\right)_s\left(\phi_P^0+\phi_S^0\right)\right].\Delta x$$

L'intégration des différents termes nous donne :

$$\left[\left(\rho\phi\right)_P^1-\left(\rho\phi\right)_P^0\right]\Delta x.\Delta y = f.\left[\left(\frac{\Gamma_e\left(\phi_E^1-\phi_P^1\right)}{\left(\delta x\right)_e}\right)-\left(\frac{\Gamma_w\left(\phi_P^1-\phi_W^1\right)}{\left(\delta x\right)_w}\right)\right].\Delta y$$

$$+\left(1-f\right)\left[\left(\frac{\Gamma_e\left(\phi_E^0-\phi_P^0\right)}{\left(\delta x\right)_e}\right)-\left(\frac{\Gamma_w\left(\phi_P^0-\phi_W^0\right)}{\left(\delta x\right)_w}\right)\right].\Delta y + f.\left[\left(\frac{\Gamma_n\left(\phi_N^1-\phi_P^1\right)}{\left(\delta y\right)_n}\right)-\left(\frac{\Gamma_s\left(\phi_P^1-\phi_S^1\right)}{\left(\delta y\right)_s}\right)\right].\Delta x$$

$$+\left(1-f\right)\left[\left(\frac{\Gamma_n\left(\phi_N^0-\phi_P^0\right)}{\left(\delta y\right)_n}\right)-\left(\frac{\Gamma_s\left(\phi_P^0-\phi_S^0\right)}{\left(\delta y\right)_s}\right)\right].\Delta x+\frac{1}{2}.f.\left[\left(\rho u\right)_e\left(\phi_E^1+\phi_P^1\right)-\left(\rho u\right)_w\left(\phi_P^1+\phi_W^1\right)\right].\Delta y$$

$$+\frac{1}{2}\left(1-f\right)\left[\left(\rho u\right)_e\left(\phi_E^0+\phi_P^0\right)-\left(\rho u\right)_w\left(\phi_P^0+\phi_W^0\right)\right].\Delta y+\frac{1}{2}.f.\left[\left(\rho v\right)_n\left(\phi_N^1+\phi_P^1\right)-\left(\rho v\right)_s\left(\phi_P^1+\phi_S^1\right)\right].\Delta x$$

$$+\frac{1}{2}\left(1-f\right)\left[\left(\rho v\right)_n\left(\phi_N^0+\phi_P^0\right)-\left(\rho u\right)_s\left(\phi_P^0+\phi_S^0\right)\right].\Delta x+\int_w^e\int_s^n\int_t^{t+\Delta t}S_\phi dt.dy.dx \qquad \text{(IV-26)}$$

On pose $F = \rho u$, $D = \frac{\Gamma}{\delta x}$ et $P = \frac{F}{D}$, et on considère le schéma implicite pour la discrétisation temporelle.

Ainsi la forme réduite :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \qquad \text{(IV-27)}$$

Où :

$$a_E = D_e A\left(|P_e|\right) + \left[-F_e, 0\right] \qquad \text{(IV-28)}$$

$$a_W = D_w A\left(|P_w|\right) + \left[F_w, 0\right] \qquad \text{(IV-29)}$$

$$a_N = D_n A\left(|P_n|\right) + \left[-F_n, 0\right] \qquad \text{(IV-30)}$$

$$a_S = D_s A\left(|P_s|\right) + \left[F_s, 0\right] \qquad \text{(IV-31)}$$

Où le symbole $[a,b]$ désigne le maximum entre a et b.

$$a_P^0 = \frac{\rho_P^0 \Delta x \Delta y}{\Delta t} \qquad \text{(IV-32)}$$

$$b = \int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} S_\phi \, dt.dy.dx + a_P^0 \phi_P^0 \qquad \text{(IV-33)}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 \qquad \text{(IV-34)}$$

$$F_e = (\rho u)_e, \; D_e = \frac{\Gamma_e \, \Delta y}{(\delta x)_e} \text{ et } P_e = \frac{F_e}{D_e} \; ; \qquad \text{(IV-35)}$$

$$F_w = (\rho u)_w, D_w = \frac{\Gamma_w \, \Delta y}{(\delta x)_w} \text{ et } P_w = \frac{F_w}{D_w} \; ; \qquad \text{(IV-36)}$$

$$F_n = (\rho u)_n, D_n = \frac{\Gamma_n \, \Delta x}{(\delta y)_n} \text{ et } P_n = \frac{F_n}{D_n} \; ; \qquad \text{(IV-37)}$$

$$F_s = (\rho u)_s, D_s = \frac{\Gamma_s \, \Delta x}{(\delta y)_s} \text{ et } P_s = \frac{F_s}{D_s} \; ; \qquad \text{(IV-38)}$$

La fonction $A\left(|P|\right)$ s'écrit pour différent schéma comme suit :

schéma aux Différences centrées	$A\left(\lvert P\rvert\right) = 1 - 0.5\lvert P\rvert$	(IV-39)
schéma Upwind	$A\left(\lvert P\rvert\right) = 1$	(IV-40)
schéma Hybride	$A\left(\lvert P\rvert\right) = \left[0, 1 - 0.5\lvert P\rvert\right]$	(IV-41)
schéma au Loi de puissance	$A\left(\lvert P\rvert\right) = \left[0, \left(1 - 0.1\lvert P\rvert\right)^5\right]$	(IV-42)
schéma Exponentielle	$A\left(\lvert P\rvert\right) = \lvert P\rvert / \left[\exp\left(\lvert P\rvert\right) - 1\right]$	(IV-43)

IV.5- Méthode des éléments finis :

La méthode des éléments finis est une méthode générale d'approximation numérique qui consiste à subdiviser le domaine de calcul en sous- domaine de forme simple (triangle, tétraèdres) appelés éléments, puis de construire une approximation sur chacun de ces éléments. L'approximation globale est alors la somme de ces approximations élémentaires.

IV.6- Discrétisation numérique :

On a à discrétiser les équations gouvernants le phénomène de transport des polluants par la méthode des volumes finis décrite précédemment.

Avant de discrétiser les équations régissant notre problème, on définie d'abord la notion du maillage sur lequel est basé la méthode des volumes finis. C'est que les variables scalaires comme pression, concentration, température, énergie cinétique,… sont emmagasinés dans les nœuds aux centres, tandis que les flux sont emmagasinés aux faces comme le montre la figure suivante :

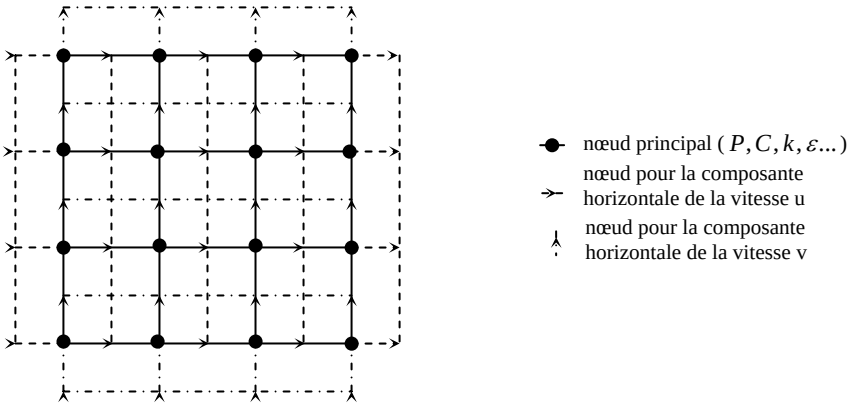


Figure IV-3 : maillage décalé en vitesse- pression

En se basant sur la marche décrite précédemment concernant la discrétisation des équations de transports, en transformant les équations régissant la dispersion des polluants d'un système différentiel difficile à résoudre à un système algébrique facile à traiter sur ordinateur, on trouve :

Équation de continuité :

L'équation de continuité définie la conservation de la masse dans chaque volume de contrôle, donc c'est un scalaire et est emmagasinée dans le nœud central comme l'indique le schéma suivant:

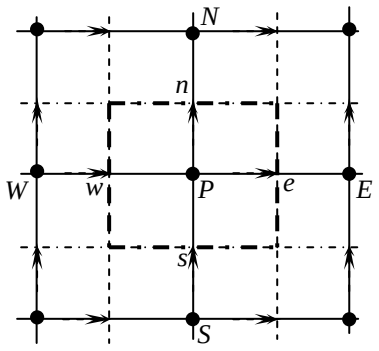


Figure IV-4 : volume de contrôle pour la

Donc l'intégration de l'équation de continuité sur le volume de contrôle conduit à :

$$(\rho u)_e - (\rho u)_w + (\rho v)_n - (\rho v)_s = 0 \qquad (IV-44)$$

Équations de quantité de mouvement:

Les équations de quantité de mouvement définie la conservation de quantité de mouvement à travers les faces du volume de contrôle comme l'indique le schéma suivant:

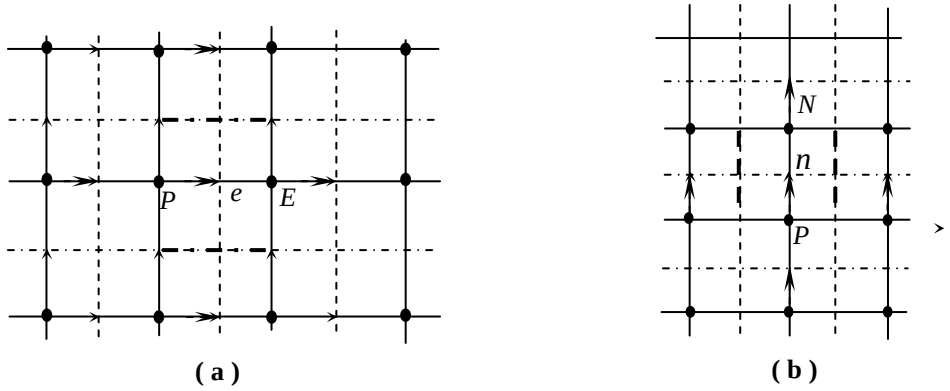


Figure IV-5: volume de contrôle : (a) pour la composante u, (b) pour la composante v

Alors en intégrant l'équation de quantité de mouvement suivant les deux axes sur leur volume de contrôle correspond, on arrive à :

$$a_e u_e = \sum a_{nb} v_{nb} + b_u + (P_P - P_E)\Delta y \qquad (IV-45)$$

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + b_v + (P_P - P_N)\Delta x \qquad (IV-46)$$

Équations de transport des espèces:

Les équations de transport des espèces définies la conservation des espèces transportées à travers le volume de contrôle comme l'indique le schéma suivant:

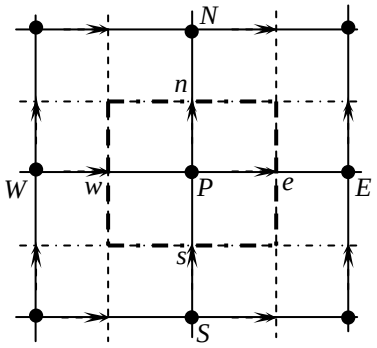


Figure IV-6: volume de contrôle de l'espèce Y_α

Ce qui conduit après intégration des équations de transports à la forme algébrique suivant :

$$a_P Y_P = a_E Y_E + a_W Y_W + a_N Y_N + a_S Y_S + b_Y \qquad \text{(IV-47)}$$

$$a_E = D_e A\left(|P_e|\right) + \left[-F_e, 0\right]$$

$$a_W = D_w A\left(|P_w|\right) + \left[F_w, 0\right]$$

$$a_N = D_n A\left(|P_n|\right) + \left[-F_n, 0\right]$$

$$a_S = D_s A\left(|P_s|\right) + \left[F_s, 0\right]$$

$$a_P^0 = \frac{\rho_P^0 \Delta x \Delta y}{\Delta t}$$

$$b_Y = S_C \Delta x \Delta y + a_P^0 \phi_P^0$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - S_P \Delta x \Delta y$$

$$F = (\rho u),\ D = \frac{\Gamma\, \Delta y}{(\delta x)} \text{ et } P = \frac{F}{D}\ ;$$

Où la fonction $A\left(|P|\right)$ correspond au schéma choisi. Dans notre cas on a choisi le schéma à la loi de puissance développé par Patankar et est le schéma le plus convenable :

$$A\left(|P|\right) = \left[0, \left(1 - 0.1|P|\right)^5\right]$$

Discrétisation des termes sources pour différentes équations de transport :

Même chose pour la méthode des volumes finis que pour la méthode des différences finies.

Le terme source de l'équation de la quantité de mouvement :

Suivant x :

$$S_u = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial x}\right) \qquad \text{(IV-48)}$$

$$S_u = \frac{\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1j} - \left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i-1j}}{2\Delta x} + \frac{\left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right)_{ij+1} - \left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right)_{ij-1}}{2\Delta y}$$

$$S_u = \frac{\left(\mu_{i+1j}\frac{u_{i+1j}-u_{ij}}{\Delta x}\right) - \left(\mu_{i-1j}\frac{u_{ij}-u_{i-1j}}{\Delta x}\right)}{2\Delta x} + \frac{\left(\mu_{ij+1}\frac{v_{i+1j+1}-v_{i-1j+1}}{2\Delta x}\right) - \left(\mu_{ij-1}\frac{v_{i+1j-1}-v_{i-1j-1}}{2\Delta x}\right)}{2\Delta y}$$

$$S_u = \frac{1}{2\Delta x^2}\left[\left(\mu_{i+1j}\left(u_{i+1j}-u_{ij}\right)\right) - \left(\mu_{i-1j}\left(u_{ij}-u_{i-1j}\right)\right)\right] +$$
$$\frac{1}{4\Delta y.\Delta x}\left[\left(\mu_{ij+1}\left(v_{i+1j+1}-v_{i-1j+1}\right)\right) - \left(\mu_{ij-1}\left(v_{i+1j-1}-v_{i-1j-1}\right)\right)\right] \qquad \text{(IV-49)}$$

Suivant y :

$$S_v = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right) \qquad \text{(IV-50)}$$

$$S_v = \frac{\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+1j} - \left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i-1j}}{2\Delta x} + \frac{\left(\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right)_{ij+1} - \left(\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right)_{ij-1}}{2\Delta y}$$

$$S_v = \frac{\left(\mu_{i+1j}\frac{u_{i+1j+1}-u_{i+1j-1}}{2\Delta y}\right) - \left(\mu_{i-1j}\frac{u_{i-1j+1}-u_{i-1j-1}}{2\Delta y}\right)}{2\Delta x} + \frac{\left(\mu_{ij+1}\frac{v_{ij+1}-v_{ij}}{\Delta y}\right) - \left(\mu_{ij-1}\frac{v_{ij}-v_{ij-1}}{\Delta y}\right)}{2\Delta y}$$

$$S_v = \frac{1}{4\Delta y.\Delta x}\left[\left(\mu_{i+1j}\left(u_{i+1j+1}-u_{i+1j-1}\right)\right) - \left(\mu_{i-1j}\left(u_{i-1j+1}-u_{i-1j-1}\right)\right)\right] +$$
$$\frac{1}{2\Delta y^2}\left[\left(\mu_{ij+1}\left(v_{ij+1}-v_{ij}\right)\right) - \left(\mu_{ij-1}\left(v_{ij}-v_{ij-1}\right)\right)\right] \qquad \text{(IV-51)}$$

Le terme source de l'équation de l'énergie cinétique turbulente est exprimé par

$$S_k = G_k + G_b - \rho\varepsilon \qquad \text{(IV-52)}$$

Le terme de production G_k :

$$G_k = \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\left[\mu_t\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\left(\rho k + \mu_t\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right)\delta_{ij}\right] \qquad \text{(IV-53)}$$

$$G_k = \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\left[\mu_t\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}\left(\rho k+\mu_t\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right)\delta_{ij}\right]$$

$$= \frac{\partial u}{\partial x_i}\mu_t\left(\frac{\partial u_i}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial x_i}\right)+\frac{\partial v}{\partial x_i}\mu_t\left(\frac{\partial u_i}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\left(\rho k+\mu_t\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right)$$

$$= \left[\mu_t\frac{\partial u}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\mu_t\frac{\partial u}{\partial y}\left(\frac{\partial v}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial y}\right)\right]+\left[\mu_t\frac{\partial v}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)+\mu_t\frac{\partial v}{\partial y}\left(\frac{\partial v}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial y}\right)\right]-$$

$$\frac{2}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}\right)\left[\rho k+\mu_t\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}\right)\right]$$

$$G_k = \mu_t\left[2\left(\frac{\partial u_{ij}}{\partial x}\right)^2+2\left(\frac{\partial v_{ij}}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial u_{ij}}{\partial y}+\frac{\partial v_{ij}}{\partial x}\right)^2\right]-\frac{2}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}\right)\left[\rho k+\mu_t\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}\right)\right]$$

$$G_k = \mu_t\left[2\left(\frac{u_{i+1j}-u_{i-1j}}{2\Delta x}\right)^2+2\left(\frac{v_{ij+1}-v_{ij-1}}{2\Delta y}\right)^2+\left(\frac{u_{ij+1}-u_{ij-1}}{2\Delta y}+\frac{v_{i+1j}-v_{i-1j}}{2\Delta x}\right)^2\right]-$$

$$\frac{2}{3}\left(\frac{u_{i+1j}-u_{i-1j}}{2\Delta x}+\frac{v_{ij+1}-v_{ij-1}}{2\Delta y}\right)\left[(\rho k)_{ij}+\mu_t\left(\frac{u_{i+1j}-u_{i-1j}}{2\Delta x}+\frac{v_{ij+1}-v_{ij-1}}{2\Delta y}\right)\right] \qquad \text{(IV-54)}$$

Le terme de flottabilité G_b :

$$G_b = -g_i\frac{\mu_t}{\rho Pr_t}\frac{\partial\rho}{\partial x_i} \qquad \text{(IV-55)}$$

Où : $\rho = \rho_0\left[1-\left(\beta_t\left(T-T_0\right)+\beta_m\left(Y_m-Y_0\right)\right)\right]$, ce qui nous donne :

$$G_b = g\frac{\rho_0\mu_t}{\rho Pr_t}\left(\beta_t\frac{\partial T}{\partial y}+\beta_m\frac{\partial Y_m}{\partial y}\right) \qquad \text{(IV-56)}$$

$$G_b = g\frac{\rho_0\mu_t}{\rho Pr_t}\left(\beta_t\frac{T_{ij+1}-T_{ij-1}}{2\Delta y}+\beta_m\frac{(Y_m)_{ij+1}-(Y_m)_{ij-1}}{2\Delta y}\right) \qquad \text{(IV-57)}$$

Pour la détermination du terme de dissipation $\rho\varepsilon$ on a résolu l'équation de transport de dissipation de l'énergie cinétique turbulente :

$$\frac{\partial\rho\varepsilon}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho\varepsilon U_j\right)=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right)+C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}(G_k+C_{3\varepsilon}G_b)-C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k}+S_\varepsilon \qquad \text{(IV-58)}$$

Le terme source de l'équation de l'énergie:

$$S_T = \mu_t\left[2\left(\frac{\partial u_{ij}}{\partial x}\right)^2+2\left(\frac{\partial v_{ij}}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial u_{ij}}{\partial y}+\frac{\partial v_{ij}}{\partial x}\right)^2\right]-\sum_{\alpha=1}^{n}\left(h_\alpha^0+Cp.T_{ij}\right)w_\alpha \qquad \text{(IV-59)}$$

w_α est le terme source de l'équation de conservation des espèces donné par :

$$w_\alpha = S_{Y_\alpha} = a_\alpha Y_\alpha + b_\alpha \qquad \text{(IV-60)}$$

IV.7- Algorithme de résolution des équations discrétisées :

La difficulté principale, lors de la résolution des équations de Navier- Stokes est la vérification de l'équation de continuité à chaque pas de temps. En effet, se basant sur les équations de quantité de mouvement discrétisées, celles-ci étant pleinement explicites, on pourrai se contenter à chaque itération de déduire le champ de vitesse au temps t+dt à partir des champs de vitesse et de pression au temps t.

Cependant, il y a fort à croire que le champ ainsi calculé ne respecte pas la condition de conservation de la masse. On serait d'autre part dans l'incapacité de déduire l'évolution du champ de pression à partir de la seule équation de continuité. Si l'écoulement est compressible, l'équation de continuité devient l'équation de transport de la masse volumique et l'équation d'énergie est l'équation de transport de la température, et à partir de la loi des gaz parfait on peut calculer le champ de pression (en incompressible le champ de pression n'est pas connu, et on a besoin des algorithmes de type couplage pression-vitesse).

L'astuce numérique que nous allons mettre en œuvre pour pallier à cette difficulté repose sur une méthode développée par Chorin et Temam et est basé sur un fractionnement du pas de temps. Réécrivons l'équation de conservation de la quantité de mouvement comme suit :

$$-\left(\rho U.\nabla\right).U - \nabla P + S_u + \mu.\nabla^2 U = \frac{\partial \rho U}{\partial t} = \frac{\rho U^{n+1} - \rho U^n}{dt} = \frac{\rho U^{n+1} - \rho U^{n+1/2}}{dt} + \frac{\rho U^{n+1/2} - \rho U^n}{dt} \qquad \text{(IV-61)}$$

$$\frac{\rho U^{n+1/2} - \rho U^n}{dt} = -\left(\rho U.\nabla\right).U + \mu.\nabla^2 U + S_u \qquad \text{(IV-62)}$$

$$\frac{\rho U^{n+1} - \rho U^{n+1/2}}{dt} = -\nabla.P \qquad \text{(IV-63)}$$

La résolution de l'équation (IV-62) représente l'étape dite de prédiction, elle permet, après discrétisation en espace, l'obtention d'un champ provisoire de vitesse $U^{n+1/2}$ calculé uniquement à partir du champ U^n. Ce champ provisoire ne vérifie à priori pas l'équation de continuité.

Passant à la divergence pour l'équation (IV-63), et considérant le champ de pression pris en compte est celui en t+dt, on obtient :

$$\nabla.\left(\frac{\rho U^{n+1} - \rho U^{n+1/2}}{dt}\right) = -\nabla.\left(\nabla.P^{n+1}\right) \qquad \text{(IV-64)}$$

ce qui nous permet de faire intervenir la condition de continuité en t+dt,

$$\nabla.\rho U^{n+1} = 0 \qquad \text{(IV-65)}$$

On calcule donc un champ de pression en t+dt satisfaisant :

$$\Delta P = \frac{\nabla.\rho U^{n+1/2}}{dt} \qquad \text{(IV-66)}$$

Le membre de droite étant une fonction connue des variables d'espaces, on est donc en présence d'une équation de Poisson. On la résout de manière itérative en évaluant à chaque itération la valeur de la pression en un point à partir des valeurs calculées à l'itération précédente pour les points voisins, et ce jusqu'à un certain seuil de convergence fixé.

Notant :

$$div\rho U_{i,j} = \frac{\rho u_{i+1,j}^{n+1/2} - \rho u_{i-1,j}^{n+1/2}}{2\Delta x} + \frac{\rho v_{i,j+1}^{n+1/2} - \rho v_{i,j-1}^{n+1/2}}{2\Delta y} \qquad \text{(IV-67)}$$

où u et v sont les composantes de la vitesse selon x et y.

le schéma correspond à l'équation de poisson pour la pression s'écrit :

$$P^{n+1}(i,j) = \frac{1}{2\left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}\right)}\left[\frac{P^{n+1}(i+1,j) + P^{n+1}(i-1,j)}{\Delta x^2} + \frac{P^{n+1}(i,j+1) + P^{n+1}(i,j-1)}{\Delta y^2} - \frac{div\rho U(i,j)}{dt}\right]$$

(IV-68)

Sa résolution nécessite évidemment de fixer des conditions aux limites. On choisira une condition de type Neumann sur le gradient de pression au niveau des frontières du domaine :

$$\frac{\partial P}{\partial n} = 0$$

Après convergence, on recalcule les pressions aux frontières du domaine, en les extrapolant à partir du champ en aval.

La dernière étape de la méthode consiste évidement à réinjecter le champ de pression P^{n+1}, calculé ci-dessus, dans l'équation (IV-63), ce qui permet d'obtenir le champ de vitesse U^{n+1} en t+dt, celui-ci satisfaisant aussi bien à l'équation de quantité de mouvement qu'à l'équation de continuité. C'est l'étape de projection qui a donné son nom à la méthode :

$$U^{n+1} = U^{n+1/2} - dt.\nabla \qquad \text{(IV-69)}$$

Il y en a d'autre algorithme qui résolu l'équation pression-vitesse comme : Simple, Simpler, Simplec, Piso…

Chapitre V :
Résultats Et Discussion

V.1- Formulation du problème :

Cette étude a pour objectif de configurer une simulation numérique bidimensionnelle temporelle d'un écoulement instationnaire d'un polluant éjecté d'une cheminé en atmosphère libre qui donne naissance à des mouvements dynamiques aléatoires. La configuration étudiée est montrée sur la figure ci-dessous. Il s'agit d'une cheminée éjectant d'une façon permanente un polluant dans l'atmosphère. Les conditions aux limites pour la fraction massique sont définies dans les paragraphes suivants.

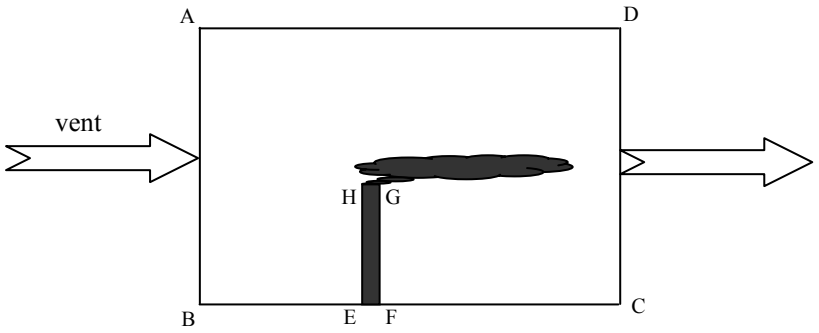


Figure V-1 : Schéma représentatif du domaine d'étude.

V.2- Modèle mathématique :

On considère une cheminée de hauteur h et de diamètre d qui émet un mélange de dioxyde d'azote et d'air avec une vitesse d'éjection Vo, à une température To et une fraction massique du polluant (dans notre cas No2) Y_0. Ce panache est soumis à un vent de vitesse u_∞, la température ambiante est T_∞.

Les hypothèses simplificatrices suivantes forment la base de l'étude :

* l'écoulement est considéré bidimensionnel, incompressible, obéissant à l'approximation de Boussinesq, turbulent et instationnaire.
* les gaz en présence sont réactifs.
* la vitesse du vent est considérée constante.
* on ne tient pas compte des gradients de température existant dans l'atmosphère.
* le site étudié est un domaine rectangulaire.

Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho U_j\right) = 0 \qquad \text{(V-1)}$$

Equation de conservation de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i U_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(P + \frac{2}{3}\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left((\mu + \mu_t)\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)\right) + S_{vitesse} \qquad \text{(V-2)}$$

Equation d'énergie:

$$\frac{\partial\left(\rho C_p T\right)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\rho C_p U_j T\right)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left((\lambda + \frac{\mu_t}{\mathrm{Pr}_t})\frac{\partial T}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(U_i \tau_{ij}\right) - \sum_{\alpha=1}^{n}\left(h_\alpha^0 + h\right) w_\alpha \qquad \text{(V-3)}$$

$$\text{Où :} \quad \tau_{ij} = \mu\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right) ; \quad h = \sum_{\alpha=1}^{n} Y_\alpha h_\alpha \; ; \quad h_\alpha = \int_{T_{ref}}^{T} cp_\alpha . dT$$

Equation d'état:

$$P = \rho T \sum_{\alpha=1}^{n} \frac{Y_\alpha . R}{M_\alpha}$$

Conservation des espèces :

Dans ce travail, on a considéré comme une simple illustration de la chimie dans la couche limite atmosphérique le mécanisme réactionnel suivant, décrivant l'évolution des oxydes d'azotes en atmosphère :

$$H_2O \rightarrow OH^* + H^* \qquad (k_1)$$

$$NO_2 + OH^* \rightarrow NO + HO_2^* \qquad (k_2)$$

$$NO_2 + H^* \rightarrow NO + OH^* \qquad (k_3)$$

$$NO + OH^* \rightarrow \frac{1}{2}N_2 + HO_2^* \qquad (k_4)$$

Le fluide est composé d'un mélange d'espèces d'où la nécessité de résoudre les équations de transport pour chaque espèce. Ces équations ont la forme suivante :

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial\left(\rho U_j Y_\alpha\right)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left((\rho D_m + \frac{\mu_t}{Sc_\alpha})\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial x_j}\right) + w_\alpha \qquad (5)$$

Avec Yi est la fraction massique de chaque espèce i, D_m est le coefficient de diffusion de chaque espèce i dans le mélange et w_α est la vitesse de production des espèces i:

$$w_\alpha = -a_\alpha Y_\alpha + b_\alpha \qquad (6)$$

$$\text{où: } a_2 = k_3 Y_4 \text{ , } b_2 = k_1 Y_1 \text{ ; } a_3 = \left(k_2 Y_4 + k_4 Y_5\right) \text{ , } b_3 = k_3 Y_2 . Y_4 + k_1 Y_1$$

$$a_4 = \left(k_2 Y_3 + k_3 Y_2\right), b_4 = 0 \text{ ; } \quad a_5 = k_4 Y_3 \text{ , } b_5 = k_2 Y_3 . Y_4 + k_3 Y_2 . Y_4$$

$$a_6 = 0,\ b_6 = k_2 Y_3.Y_4 + k_4 Y_3.Y_5 ; \qquad a_7 = 0,\ b_7 = \frac{1}{2} k_4 Y_3.Y_5 .$$

V.2.1- le model k-ε

L'introduction des grandeurs fluctuantes rend ce système ouvert. Sa fermeture nécessite l'utilisation d'un modèle de turbulence. Dans notre travail, on utilise le modèle de l'énergie cinétique turbulente et du taux de dissipation de l'énergie cinétique, dit modèle (k-ε) standard, pour modéliser la viscosité turbulente μ_t :

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{7}$$

Avec k est l'énergie cinétique turbulente et ε la dissipation de l'énergie cinétique. On a besoin donc de deux équations de transport pour k et ε:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left((\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k + G_b - \rho\varepsilon \tag{8}$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left((\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \rho C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k}\left(G_k + C_{3\varepsilon} G_b \right) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k_b} \tag{9}$$

$$G_k = \left(\mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} ; \quad G_b = \beta g_i \frac{\mu}{\mathrm{Pr}_t} \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} \right)$$

$$Y_m = 2\rho\varepsilon M_t^2 ; \quad M_t = \sqrt{\frac{k}{a^2}}$$

Dans ces équations , G_k représente la production de l'énergie cinétique turbulente due à des gradients de vitesses moyennes, G_b est la production de l'énergie cinétique turbulente due à la flottabilité , σ_k et σ_ε sont les nombres de Prandtl turbulent pour k and ε respectivement

Avec les constantes empiriques suivantes: $C_\mu = 0.09$; $C_{\varepsilon 1} = 1.44$; $C_{\varepsilon 2} = 1.92$; $\sigma_k = 1$; $\sigma_\varepsilon = 1.3$; $\sigma_t = 1$; $\sigma_f = 1$

Les nombres adimensionnels utilisés dans nos simulations sont:

Le nombre de Damkôhler "Da": exprime l'effet cinétique ; le nombre de Reynolds exprimant la nature de l'écoulement et basé sur la hauteur du domaine (H), le nombre de Schmidt exprime les propriétés physiques du polluant (Sc=0.45) et les nombres de Grashof , massique et thermique : $Gr_m = Re^2$, $Gr_T = Re^2$.

V.3- Conditions aux limites :

Les conditions aux limites utilisées dans ce modèle sont:

$$\begin{cases} AB : u = u_\infty , T = T_\infty , v = k = Y_\alpha = \varepsilon = 0 \ ; \\ BE, FC : u = v = \dfrac{\partial T}{\partial y} = \dfrac{\partial Y_\alpha}{\partial y} = \dfrac{\partial k}{\partial y} = \dfrac{\partial \varepsilon}{\partial y} = 0 \\ FG, EH : u = 0, v = 0, \dfrac{\partial T}{\partial x} = \dfrac{\partial Y_\alpha}{\partial x} = \dfrac{\partial k}{\partial x} = \dfrac{\partial \varepsilon}{\partial x} = 0 \ ; \\ HG : u = 0, v = v_\alpha , T = T_\alpha , Y_\alpha = Y_0 , k = 10^{-3} u_0^2 , \varepsilon = k_0^{3/2} \Big/ 0.5.d \quad , d = HG \\ CD : \dfrac{\partial u}{\partial y} = \dfrac{\partial v}{\partial y} = \dfrac{\partial T}{\partial y} = \dfrac{\partial Y_\alpha}{\partial y} = \dfrac{\partial k}{\partial y} = \dfrac{\partial \varepsilon}{\partial y} = 0 \\ AL : \dfrac{\partial u}{\partial y} = \dfrac{\partial v}{\partial y} = \dfrac{\partial T}{\partial y} = \dfrac{\partial Y_\alpha}{\partial y} = \dfrac{\partial k}{\partial y} = \dfrac{\partial \varepsilon}{\partial y} = 0 \end{cases}$$

V.4- Discussions des résultats de simulation:

L'étude de la dispersion des polluants est très complexe et nécessite, la compréhension du comportement de l'écoulement en présence de la cinétique chimique. En effet, ces deux phénomènes vont interagir et influencer sa dispersion. Dans notre travail on a construit un programme qui permet de résoudre le problème de la dispersion des polluants en atmosphère, en se basant sur les équations différentielles régissant ce phénomène. La méthode des volumes finis a été adoptée pour résoudre ces équations en utilisant le schéma hybride. Une technique de couplage pression-vitesse développé par Chorin est utilisée.

Les simulations numériques ont été effectuées dans un domaine allant de la position X=0 jusqu'à la position X=400H. la hauteur et l'épaisseur de la cheminée sont considérées constantes(H=0.2, e=0.01). le fluide porteur du contaminant est l'air (Sc=0.45).

Les nombres adimensionnels caractérisant les différents phénomènes et utilisés dans cette simulation sont :

Le nombre de Reynolds (basé sur la hauteur du domaine d'étude) varie dans la gamme $1000 \le Re \le 100000$ et la vitesse de sortie du polluant est considéré constant à l'entrée de la cheminée. Le nombre de Grashof massique $Gr_m = Re^2$. Le nombre de Damkohler qui prend en considération la vitesse de la réaction et l'interaction entre l'écoulement et les échelles de temps de produit chimique.

V.4.1- Profils des lignes de courants :

Sur la figure (1) on présente les lignes de courants obtenus pour des nombres de Reynolds de l'ordre de 10^5. L'examen de cette figure montre que l'état du fluide est toujours caractérisé par un tourbillon qui se forme derrière la cheminée qui présente un obstacle devant l'écoulement. La présence de ce tourbillon joue un rôle néfaste sur l'évacuation des polluants éjectés par la cheminée. En effet, une bonne partie des particules des polluants ce trouve piégés dans le tourbillon, ce qui conduit ainsi à une accumulation de particules près de la cheminée.

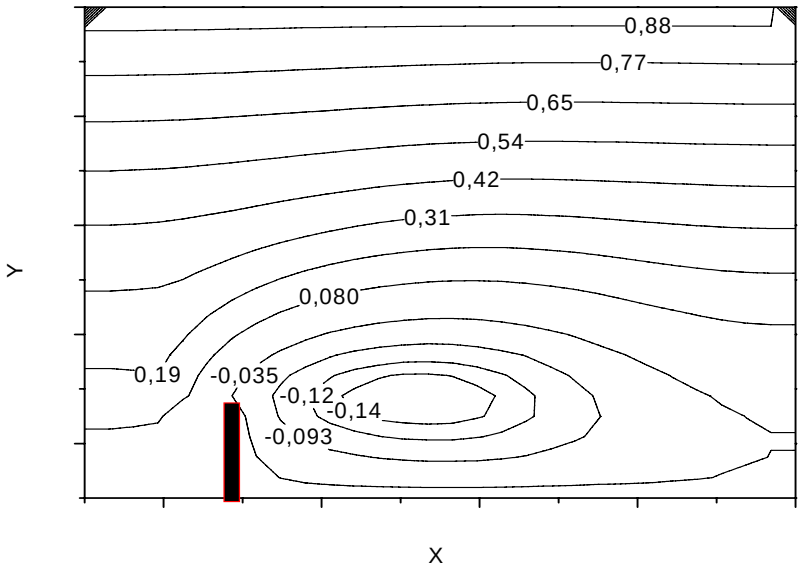


Figure V-2 : les isovaleurs des lignes de courant pour Re=10^5

V.4.2- Profils de vitesses moyennés:

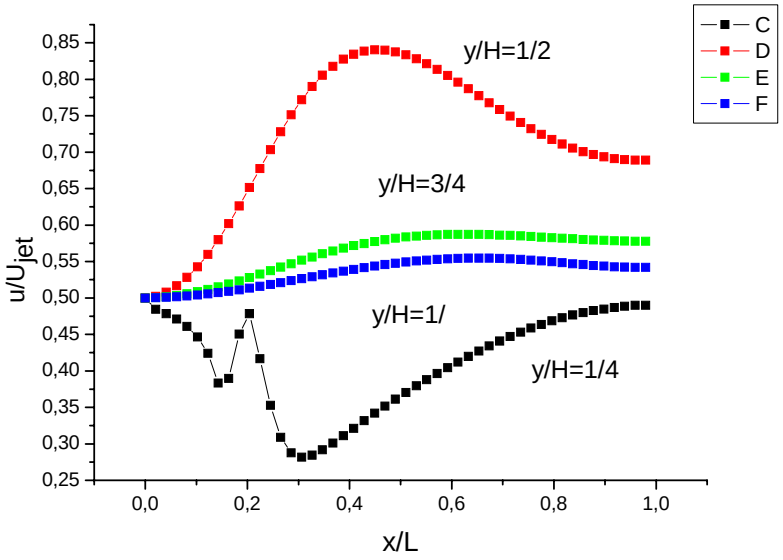


Figure V-3: Vitesse en fonction de x

Cette figure représente le profiles de vitesse longitudinale en fonction de x dans différentes positions. On remarque qu'il y a deux pics de vitesses inférieur et supérieur. Le premier correspond au niveau de la cheminée qui présente un obstacle pour l'écoulement donc on a une diminution de la vitesse juste derrière l'obstacle (x/L=0.2) où il y a une zone de recirculation, puis elle augmente au fur et à mesure en déplaçant vers l'amont où elle atteint la vitesse de l'air (u/ujet=0.5)(régime établie). le deuxième pic correspond à un niveau situé à y/H=0.5 où la vitesse représente la résultante des deux vitesses (de l'air et de jet). Si on monte encore (y/H=0.75 et y/H=1) la vitesse devient égale environ la vitesse de l'air.

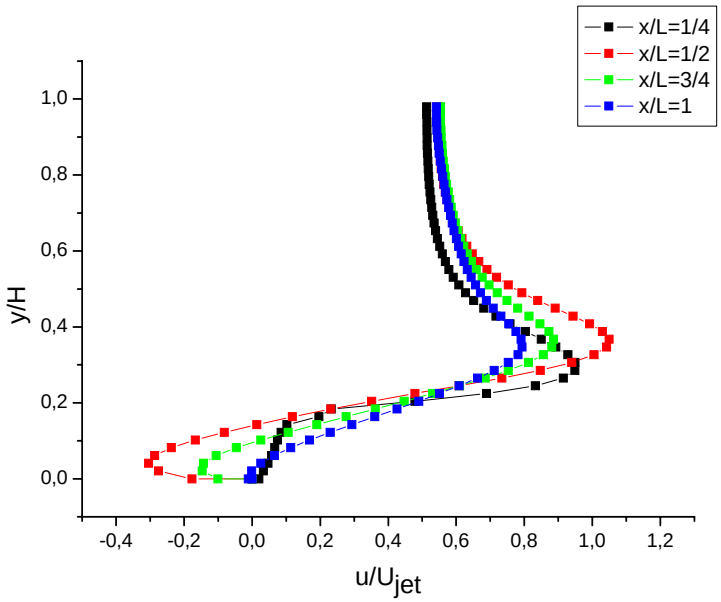


Figure V-4 : Vitesse en fonction de y

Cette figure représente le profile longitudinale de la vitesse moyenne, rapportée à l a vitesse du jet en fonction de y dans différentes positions de x.. Juste après la position de la cheminée le profile de vitesse moyenne présentent une augmentation, par contre si en déplaçant vers l'amont les profiles indiquent une région de vitesse moyenne négative, ca signifie qu'il y a une séparation de la couche limite précisément en x/L=0.5 et x/L=0.75, car il y a une dépression dans cette zone (c'est-à-dire zone de recirculation), puis elle disparaît au fur et à mesure en s'éloignant de cette zone (x/L=1).

V.4.3- L'énergie cinétique turbulente :

La figure montre les profils de l'énergie cinétique turbulente k en fonction de x pour différentes positions de y. l'évolution des profils confirment celle des vitesses moyennes, marqué par une intensification de la turbulence liée à un gradient de vitesse plus élevée proche de la cheminée, on remarque un très faible niveau de l'énergie cinétique turbulente ailleurs.

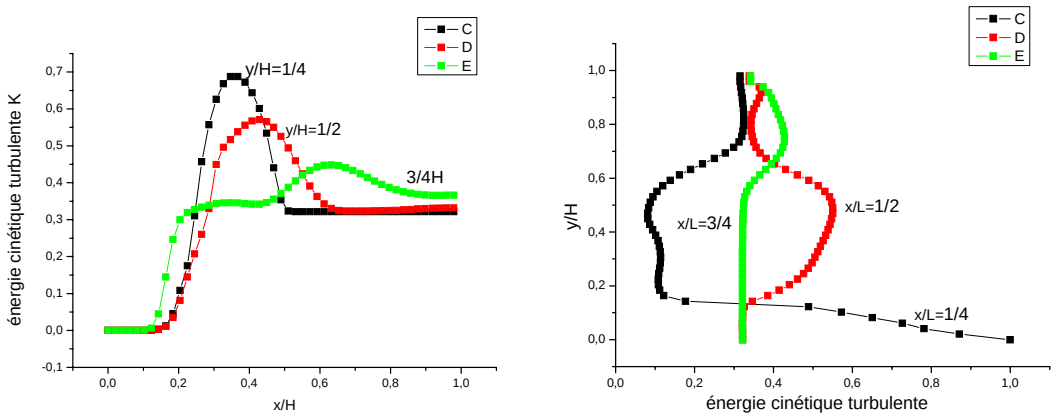


Figure V-5 : Profils de k en fonction : (a) de x,(b) de y

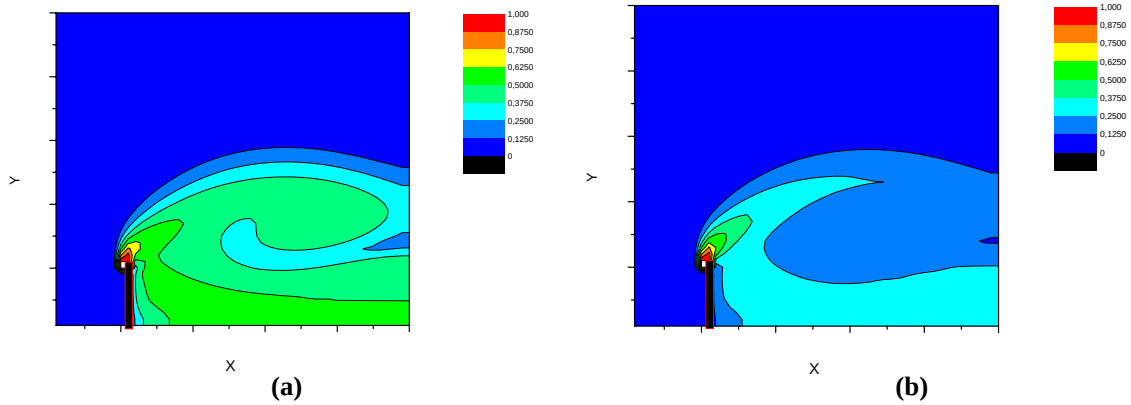


Figure V-6 : Contours de : (a) énergie cinétique turbulente, (b) sa dissipation

Ces deux figures illustrent les contours de l'énergie cinétique turbulente (k) et de sa dissipation (ε). Pour $\mathrm{Re}_H = 10^5$, k et ε évolue avec la même vitesse de convection, les secteurs foncés représentent des régions où k et ε ont des valeurs plus élevées. On remarque que k est transporté en aval le long du domaine. Au contraire, une valeur maximum de ε est vue juste à la sortie du polluant. Cependant, elle disparaît lentement au fur et à mesure que l'écoulement progresse en aval.

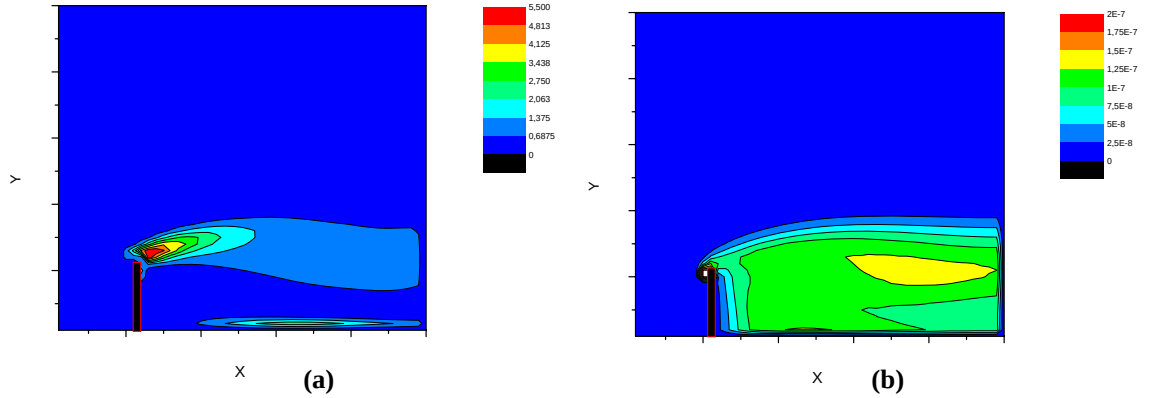


Figure V-7 : contours du terme : (a) de production Pk, (b) de flottabilité Pb.

Les contours de la production de l'énergie cinétique turbulente (P_k) et le terme de la flottabilité est présentée. La production de l'énergie cinétique turbulente est importante à la sortie de la cheminée du à la vitesse du jet. Tandis que l'énergie de flottabilité est importante dans la région de recircultaion à cause de l'accumulation des polluants à cette zone.

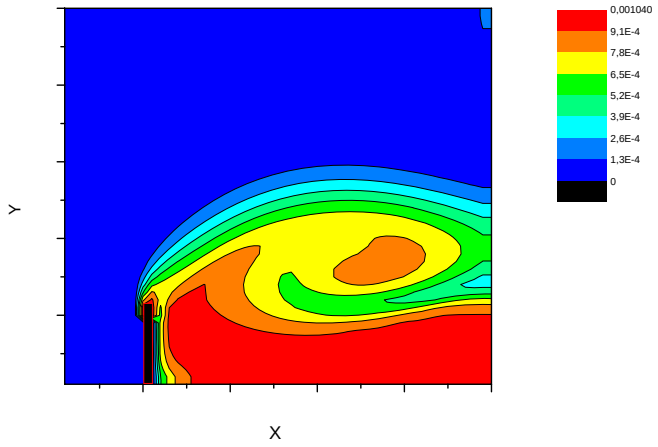


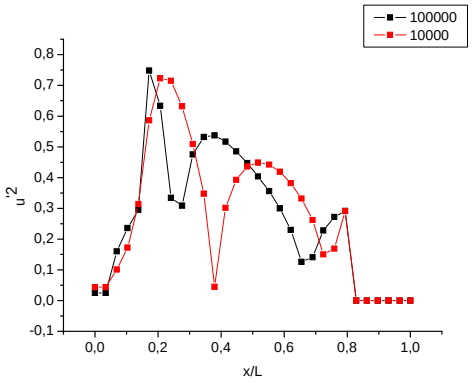
Figure V-8 : Contour de la Viscosité turbulente

Cette figure montre le contour de la viscosité turbulente. On remarque une distribution hétérogène de celle-ci le long du domaine où elle importante dans la zone de recirculation ou il y a une valeur maximale de l'énergie cinétique, puis elle est diminue en se déplaçant vers le haut.

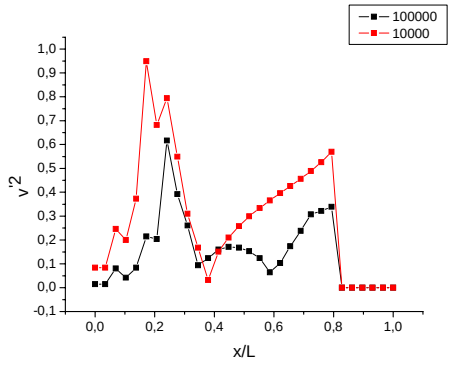
V.4.4- Profils de contrainte de Reynolds

La figure représente les profils des contraintes de Reynolds, en ce qui concerne les doubles corrélations u'^2 et v'^2, l'allure générale des courbes est similaire à celle de k, les pics correspondent à la zone de mélange où l'air est le polluant se confrontés, alors que les creux

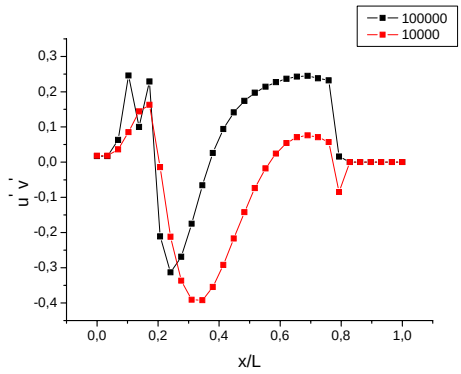
correspond . On note ici que le modèle $k-\varepsilon$ ne capte pas bien l'anisotropie des contraintes de Reynolds. Pour le profil de contrainte $u'v'$ le premier pic est négatif dû au gradient de vitesse moyenne positif, puis i devient positif là où il y a un gradient de vitesse négatif. Ensuite elle diminue progressivement jusqu'à ce qu'elle s'annule dans la zone de l'écoulement libre, où on peut négliger l'effet de la turbulence.



(a)



(b)



(c)

Figure V-9 : Profil du carré de la fluctuation : (a) u'^2 ,(b) v'^2 et (c) $u'v'$

V.4.5- Température

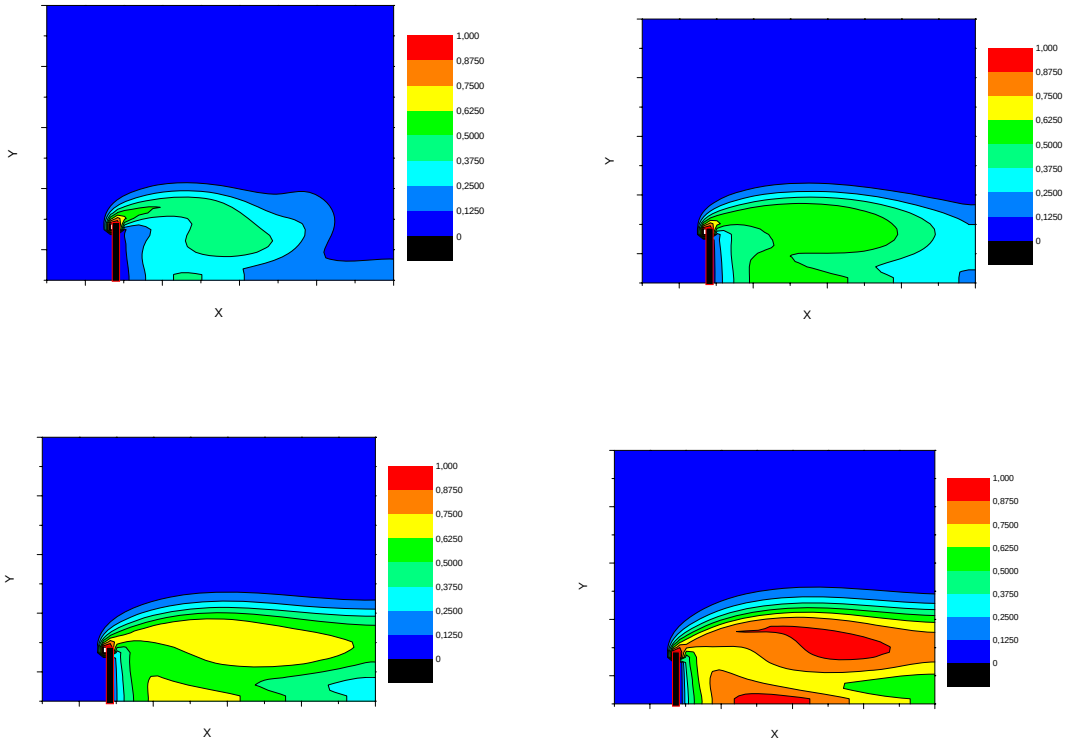


Figure V-10 : Les isovaleurs de température pour différents temps adimensionnel

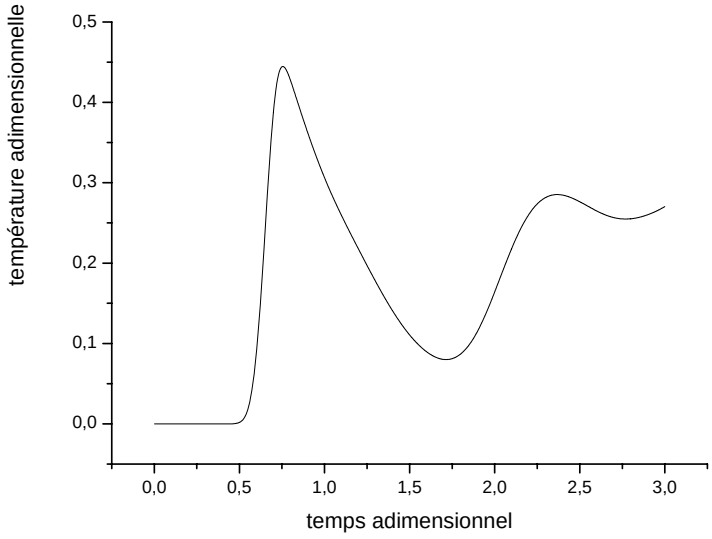


Figure V-11 : Evolution temporelle de la température du centre du domaine

V.4.6- Evolution de la concentration en fonction du temps des différents constituants de la réaction des NOx

La résolution de l'équation de masse aux conditions de Re= 10000 ; $[NO_2]^*$= 0.1 ; $[H_2O]^*$= 1 en régime cinétique seul, donne les résultats rassemblés sur la figure (*1) illustrant la variation des concentrations des réactifs et des produits du mécanisme réactionnel étudié.

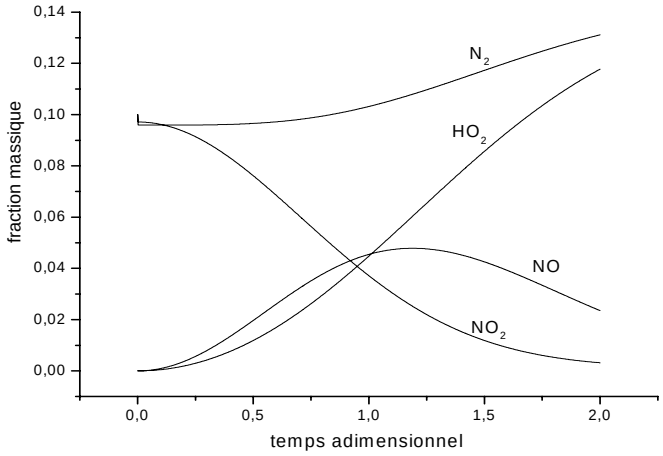


Figure V-12: Evolution temporelle des différentes constituants de la réaction en régime cinétique

On remarque dans la figure (12), qu'en présence d'une quantité non stoechiométrique et importante du réactif réagissant avec le polluant, conduit à une diminution importante (0.1 à 0) de la concentration du polluant. Alors que sur la figure (13), lorsque la quantité du réactif est égal à celle du polluant, il y a une diminution moins importante (0.1 à 0.08).

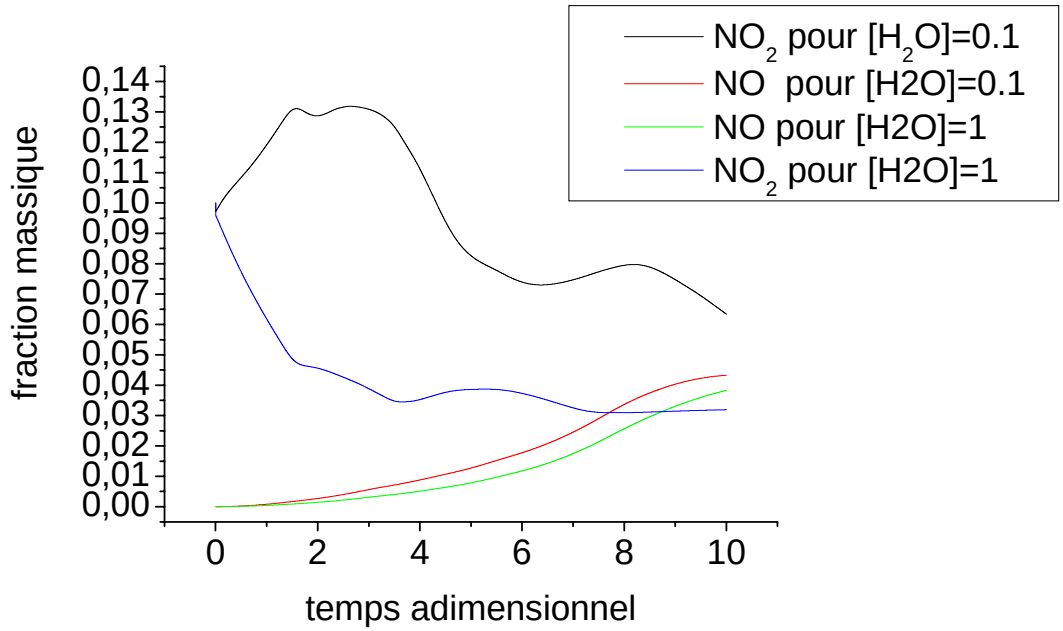


Figure V-13 : Effet de la concentration du réactif H2Osur l'évolution de la concentration du polluant NO_2

L'analyse de la courbe (14) permet de voir l'effet de l'écoulement sur la réactivité du polluant en atmosphère. Cette observation est confirmée dans le cas où on présente les deux courbes d'évolution de NO_2 ; celle où seule la cinétique est prise en considération et celle où les deux modes sont présents (courbes de la figure 15). On constate ainsi que si on néglige l'effet de transport, le temps de séjour du polluant dans le volume de contrôle diminue. Alors qu'en présence du transport, la réactivité du polluant diminue et le temps de séjour augmente.

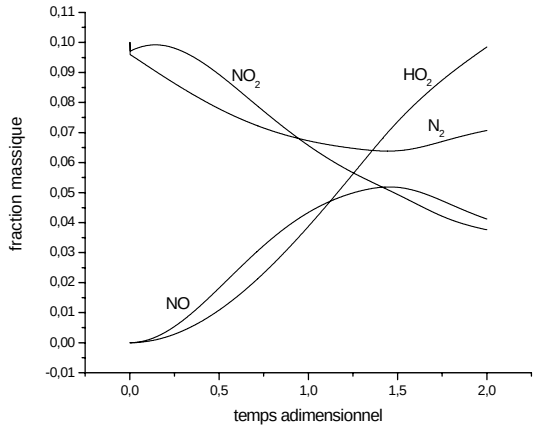


Figure V-14 : Evolution temporelle des différentes espèces en présence des deux modes cinétique et transport

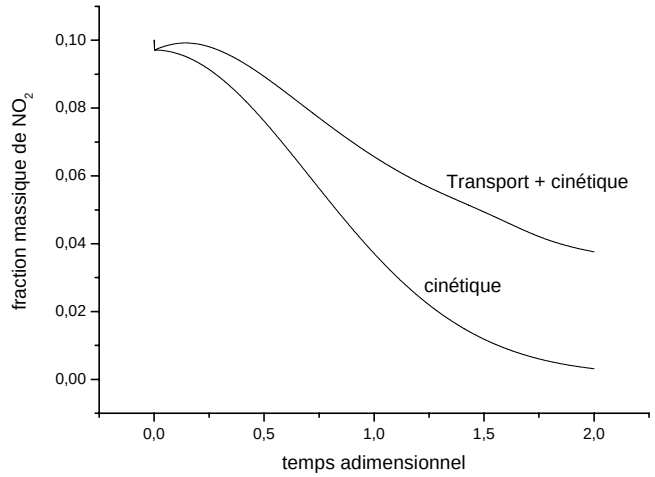


Figure V-15-a : Courbe comparative de la réactivité des NO_2 en présence et sans présence du transport : $[H_2O]= 1$

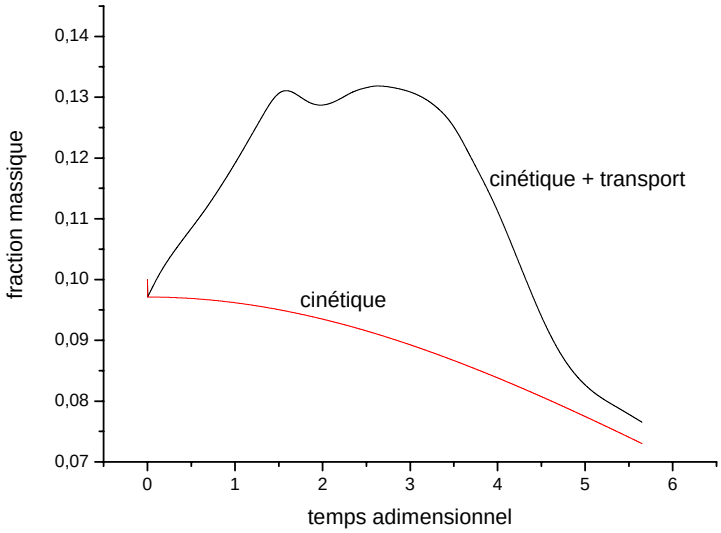


Figure V-15-b : Courbe comparative de la réactivité des NO_2 en présence et sans présence du transport : $[H_2O]= 0.1$

Les figures (16, 17, 18, 19 , 20) représentent la distribution spatiale des différentes espèces du mécanisme (NO_2, NO , OH, H et HO_2). On remarque que la distribution spatiale du

polluant primaire NO_2(courbe *5) est hétérogène et qu'il y a une accumulation de ce polluant dans la zone de recirculation caractérisée par des structures tourbillonnaires contrarotatives.

Sur les figures (21, 22), on donne l'évolution de la concentration de l'air pollué pour différentes sections de l'écoulement, la position du maximum de la concentration se situe à peu près à x/H= y/H= 1/4 du cheminée.

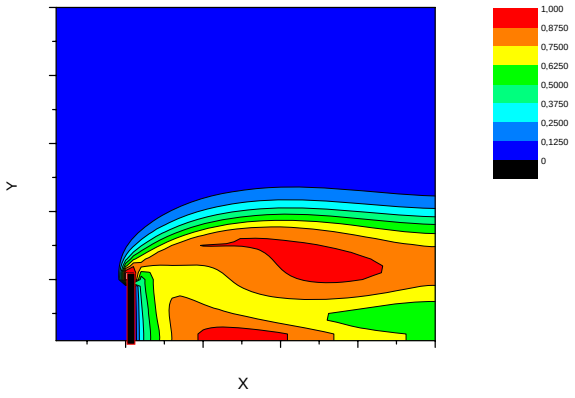


Figure V-16 : Isovaleurs de NO2

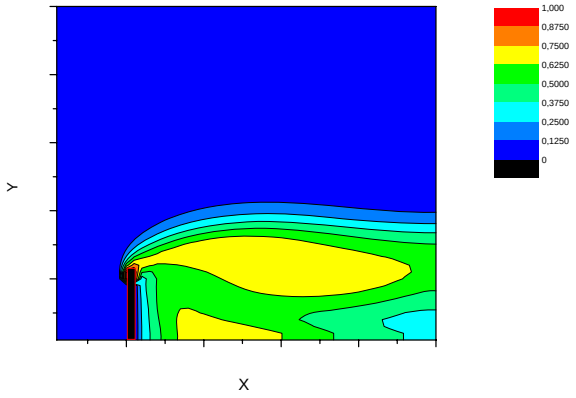


Figure V-17 : Isovaleurs de NO

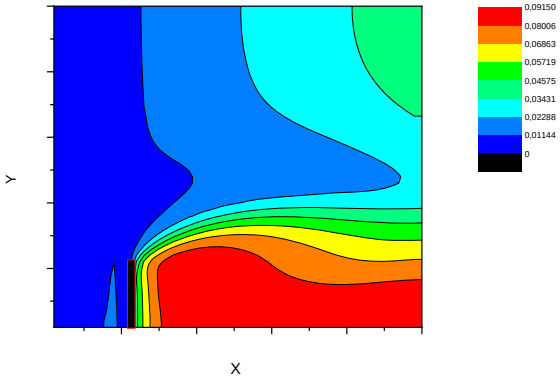


Figure V-18 : Isovaleurs de H

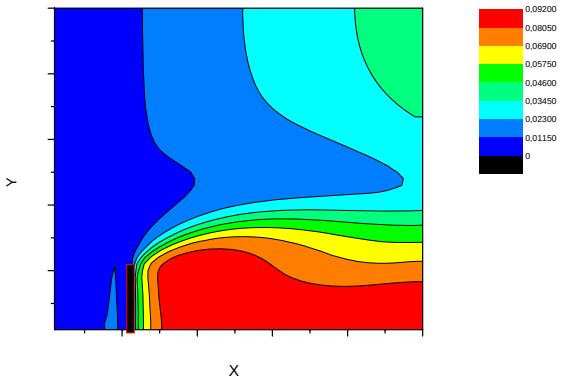


Figure V-19 : Isovaleurs de OH

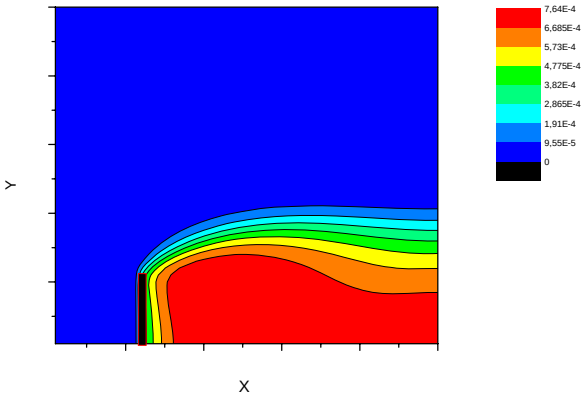


Figure V-20 :: Isovaleurs de HO2

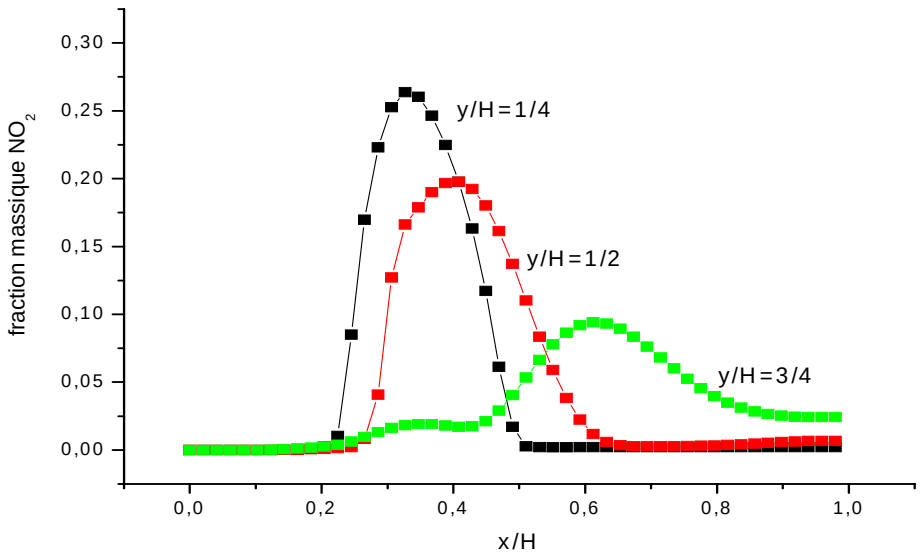


Figure V-21 : Profile du fraction massique en fonction de x pour différentes stations de y

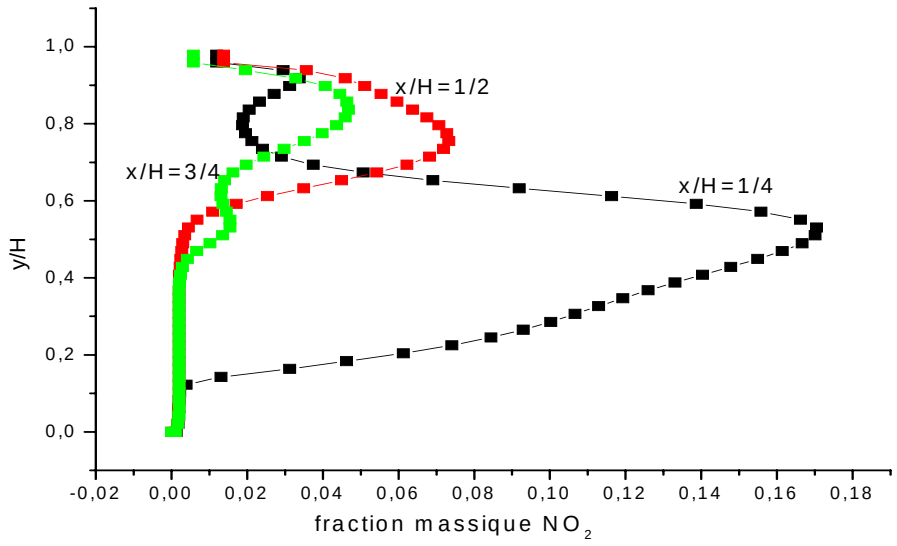


Figure V-22 : Profile du fraction massique en fonction de y pour différentes stations de x

Dans cette étude, nous sommes également intéressés à l'influence du nombre de Reynolds (basé sur la hauteur du volume de contrôle et de la vitesse maximum de l'air) sur la distribution du polluant éjecté par la cheminée. On fait varier ainsi le nombre de Reynolds 1000 à 100000. On remarque que l'évolution du panache présenté par les courbes (23,24 et 25) montre que si la cinétique chimique est prise en considération (Da=1) et si le nombre de Reynolds est égal à 100000, on remarque que le rapport entre le produit consommé comparé au produit formé est inférieur à l'unité ce qui augmente le temps de séjour du panache en atmosphère.

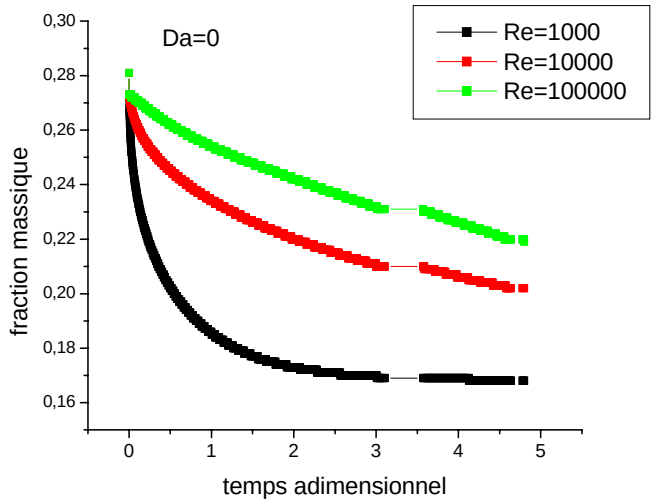


Figure V-23 : Evolution du panache sans présence de la cinétique (Da=0)

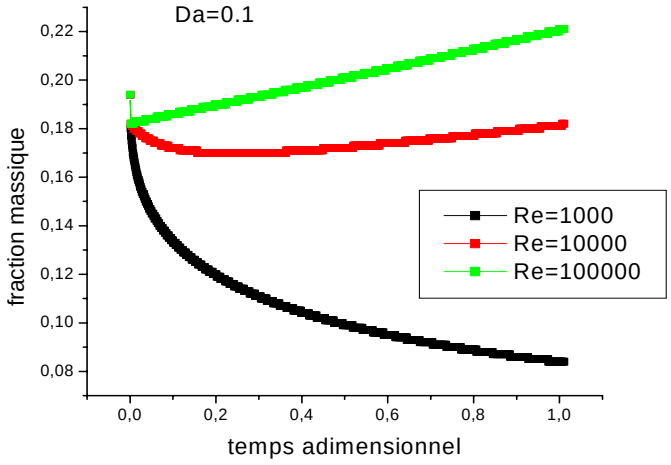


Figure V-24 : Evolution du panache en présence de la cinétique (Da=0.1)

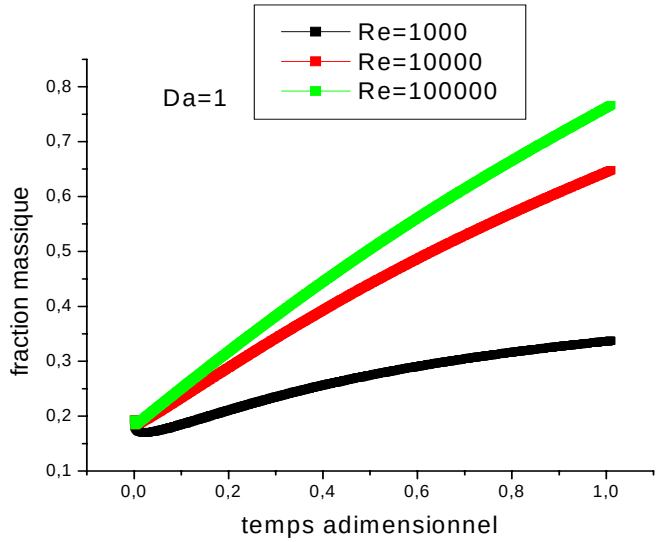


Figure V-25 : Evolution du panache en présence de la cinétique (Da= 1)

Conclusion générale

Conclusion Générale :

La modélisation numérique peut nous aider à répondre en partie à ces questions puisqu'un modèle peut donner une estimation de l'état de pollution hors des zones couvertes par la mesure, cohérente avec notre connaissance des lois d'évolution du système. Cependant, vu la complexité des phénomènes, qui sont étudiés, les modèles numériques ne sont que des représentations approximatives de la réalité, et contiennent ainsi des erreurs.

La modélisation de la pollution atmosphérique à l'échelle de la ville et à l'échelle régionale doit faire face à des difficultés importantes. En effet :

- L'inventaire des émissions de polluants est complexe, demande du temps et implique la gestion d'un nombre important de données et leurs réactualisations ;
- Les phénomènes sont complexes et liés les uns aux autres et s'étendent sur une très grande variété d'échelle de temps et d'espace. L'étendue spatio-temporelle impliquée est plus grande que celle pouvant être prise en compte par l'état des connaissances et les moyens de calcul dont nous disposons ;
- Les modèles employés doivent être choisis de manière à bien représenter la plus grande variété de situations possibles.

Annexe I

Résolution des systèmes différentiels régissant les écoulements réactifs :

Splitting des équations :

Les méthodes numériques présentées ici sont propres aux équations de transport couplées par un terme non linéaire de production chimique (équation III-1). Nous utilisons une technique répandue dans la modélisation des problèmes de transport de polluants associés à une cinétique chimique, à savoir une technique de splitting [rapports]. Elle consiste à découper les équations selon la contribution physique de chacun de ses termes : termes d'advection, de diffusion et production/destruction chimique. On est amené à résoudre alors successivement trois systèmes d'équations (éq. 1 à 3) auxquels sont associées des méthodes numériques bien adaptées à leur nature.

$$\frac{\partial \rho \overline{Y}}{\partial t} + \overline{\mathrm{u}} \nabla \left(\rho \overline{Y} \right) = 0 \qquad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \overline{Y}}{\partial t} = \nabla . ((D\mathrm{I} + \mathrm{K}) \nabla \overline{Y}) \qquad (2)$$

$$\frac{\partial \overline{Y}}{\partial t} = R \qquad (3)$$

Le choix de la méthode de résolution du premier système (équation 1) est, comme nous l'avons déjà vu au chapitre IV (Modèle Numérique).

Le second système (équation 2) résout la partie diffusion de l'équation. C'est l'opérateur d'un point de vue numérique le plus simple à traiter. Pour des raisons de stabilité, les schémas explicites ne sont pas conseillés car ils conduisent à des pas de temps trop petits. Ce système est donc résolu par une méthode implicite, de la même façon que les équations de Navier-Stokes ou de la turbulence.

Donc la résolution du terme chimique des équations de transport (système 3) obéit à un jeu d'équations différentielles ordinaires s'écrivant sous la forme :

$$\frac{dC}{dt} = P_i \left(C_i , t \right) - L_i \left(C_i , t \right) * C_i$$

Où P_i est la matrice de production des espèces chimiques, et L_i est le vecteur de disparition des espèces.

Donc comme il est mentionné précédemment, on a besoin des solveurs numériques performants pour résoudre l'équation précédente.

Le solveur QSSA (Quasi Steady State Approximation):

Il a été longtemps utilisé en pollution atmosphérique, est à la fois simple à implémenter et a une précision acceptable. Son seul défaut est d'entraîner des temps de calcul plus longs que autres schémas qu'on va voir plus tard. Ce solveur s'appuie sur une comparaison du pas de temps de calcul par rapport à un temps caractéristique τ , c'est-à-dire que la méthode d'intégration de l'équation pour l'espèces i dépend de son temps caractéristique d'évolution τ_i qui est défini par:

$$\tau_i = \frac{1}{L_i}$$

- Si le temps caractéristique est suffisamment petit devant le temps d'intégration, alors l'espèce chimique est considérée comme quasi-stationnaire, donc:

$$\frac{\Delta t}{\tau_i} > 10 \qquad C_i^{n+1} = P_i \times \tau_i^n$$

- Si P_i et L_i sont supposés constants sur Δt , alors l'équation est résolue de façon analytique:

$$0.01 < \frac{\Delta t}{\tau_i} < 10 \qquad C_i^{n+1} = P_i^n \times \tau_i^n + \left(C_i^n - P_i^n \times \tau_i^n\right) \times \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_i^n}\right)$$

- Si le temps d'intégration est suffisamment petit devant le temps caractéristique, alors une résolution explicite de type Euler est appliquée:

$$\frac{\Delta t}{\tau_i} < 0.01 \qquad C_i^{n+1} = C_i^n + \Delta t \times \left(P_i^n - \frac{C_i^n}{\tau_i^n}\right)$$

- Pour améliorer la précision, Odman et al. (1991), suggèrent une résolution supplémentaire en fonction du schéma hybride de Young et Boris (1979):

$$0.01 < \frac{\Delta t}{\tau_i} < 0.085 \qquad C_i^{n+1} = \frac{C_i^n \times \left(2\tau_i^n - \Delta t\right) + 2 \times P_i^n \times \Delta t \times \tau_i^n}{2 \times \tau_i^n + \Delta t}$$

Cette méthode est satisfaisante en précision de calcul, par contre elle nécessite un temps de calcul long. En effet c'est l'utilisateur qui fixe le pas de temps,QSSA étant non conservatif, il introduit des erreurs sur les résultats des équations différentielles raides lorsque le pas de temps

Méthode de Rosenbrock:

C'est une méthode de résolution numérique pouvant s'appliquer au cas de la chimie atmosphérique. Pour une espèce, l'équation autonome s'écrit:

$C_i^{n+1} = C_i^n + k \qquad k = \tau \times W\left(C^n\right) + \tau \times A \times k$

Où A représente la matrice Jacobienne$W'\left(C^n\right)$, on obtient donc un système linéaire défini par le vecteur d'incrément k. Rosenbrock propose de généraliser cette approche en implicite de façon à gagner un ordre de consistance (schéma stable et convergent) plus grand. ce qu se généralise pour toutes les espèces à:

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \sum_{i=1}^{n} b_i k_i \qquad k_i = \tau \times W\left(C^n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} k_j\right) + \tau \times A \times \sum_{j=1}^{n} \gamma_{ij} k_j$$

Nous représentons ici la méthode de Rosenbrock2, c'est-à-dire avec i=1,2, seule méthode de Rosenbrock qui dans le cas linéaire permet d'assurer des concentrations positives. Elle s'écrit sous la forme :

$$C^{n+1} = C^n + \frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2$$

$$k_1 = \tau W\left(C^n\right) + \gamma\tau A k_1$$

$$k_2 = \tau W\left(C^n + \tau k_1\right) \times 2\gamma\tau A k_1 + \gamma\tau A k_1$$

Avec $\gamma = 1 + 1/\sqrt{2}$

Schéma chimique Twostep

D'autres auteurs conseillent la méthode Twostep pour sa simplicité d'implémentation au sein d'un programme. Twostep est un schéma explicite (car résolu avec une méthode de type Gauss Seidel), il est dit à deux pas, car il prend en compte les valeurs des concentrations aux deux pas de temps précédents. Il s'écrit sous la forme :

$$C^{n+1} = Y^n + \gamma\tau . f\left(t^n, C^{n+1}\right)$$

Avec

$$\tau = t^{n+1} - t^n$$

$$\gamma = \frac{\kappa+1}{\kappa+2} = \frac{\Delta t_{old} + \Delta t}{\Delta t_{old} + 2\Delta t}$$

$$\kappa = \frac{t^n - t^{n-1}}{t^{n+1} - t^n} = \frac{\Delta t_{old}}{\Delta t}$$

$$Y^n = \frac{(\kappa+1)^2 \times C^n - C^{n-1}}{\kappa^2 + 2\kappa}$$

On applique donc la technique de Gauss Seidel sur le système $C^{n+1} = F\left(C^{n+1}\right)$ qui devient :

$$\left(Id+\gamma\tau L\left(t^{n+1},C^{n+1}\right)\right)\times C^{n+1}=Y^{n}+\gamma\tau P\left(t^{n+1},C^{n+1}\right)$$

Où L est la matrice de disparition des espèces et P est le vecteur de la production des espèces. La matrice L étant diagonale, le schéma de Gauss Seidel est simplifié, puisque les termes extra diagonaux disparaissent du schéma. Il est à noter que lorsque le nombre d'itérations de Gauss Seidel vaut cinq, les résultats concordent avec ceux calculés par la méthode QSSA. Il est donc possible de s'affranchir du critère de convergence de la résolution par une méthode de Gauss Seidel en fixant le nombre d'itérations supérieur à trois.

Méthode de résolution de Gauss Seidel à pas de temps constant

Dans une version avec un pas de temps constant les formules précédentes sont données par :

$$C^{n+1}=Y^{n}+\frac{2}{3}\tau.f\left(C^{n+1}\right)=\frac{4}{3}C^{n}-\frac{1}{3}C^{n-1}+\frac{2}{3}\tau.f\left(C^{n+1}\right)$$

$$C^{n+1}=\left(\frac{4}{3}C^{n}-\frac{1}{3}C^{n-1}+\frac{2}{3}\tau.P\left(C^{n+1}\right)\right)\times\left(Id+\frac{2}{3}\tau L\left(C^{n+1}\right)\right)^{-1}$$

Annexe II

Introduction :

La description d'écoulements turbulents en tout point de l'espace et du temps est difficile à réaliser en général. On effectue depuis quelques années des simulations directes de la turbulence, mais uniquement dans des configurations géométriques simples et pour des nombres de Reynolds peu élevés.

Les temps de calcul requis sont considérables, mais ils diminuent constamment avec l'amélioration des performances des ordinateurs. Il semble possible d'envisager l'utilisation, dans un avenir proche, des méthodes de simulation directe pour le traitement de problèmes pratiques. Actuellement, les méthodes les plus courantes restent fondées sur une approche statistique. On décompose toutes les variables qui décrivent l'écoulement en une valeur moyenne et une fluctuation. On peut ainsi établir un système d'équation qui décrit le champ d'écoulement moyen. Ces équations moyennées font apparaître un ensemble de moments d'ordre deux, les contraintes turbulentes ou contraintes de Reynolds, qui représentent les transferts turbulents associés aux fluctuations.

La résolution des équations moyennées nécessite la modélisation des contraintes turbulentes.

L'approche statistique est présentée, dans le cas des écoulements de fluide incompressibles newtoniens. On passe d'abord en revue les définitions de la moyenne d'une variable. La décomposition de Reynolds est introduite et les équations de Reynolds sont établies.

* La résolution directe des équations de Navier-Stokes ne peut se faire que pour des cas simple et du nombre de Reynolds relativement faible. Elle nécessite de plus une puissance de calcul considérable.

* On applique pour cela l'opérateur moyenne d'ensemble aux équation du mouvement en pratiquant une décomposition de Reynolds sur les inconnues du problème.

Les nouvelles équations obtenues sont qualifiées du terme "moyennées " par opposition aux équations du mouvement dites "instantanées".

Rappel des équations instantanées

Equations principales:

- incompressibilité (continuité):

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \qquad (0.1)$$

- Navier-stokes

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + \frac{\partial U_j U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j} \qquad (0.2)$$

Les équations de mouvement moyen :

Les équations moyennées s'obtiennent en introduisant la décomposition de Reynolds dans les équations instantanées puis en prenant la moyenne.

Incompressibilité du champ moyen :

En introduisant la décomposition de Reynolds dans l'équation de continuité, on obtient :

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \text{ Et } \frac{\partial u_i'}{\partial x_i} = 0 \qquad (0.3)$$

La partie moyenne et la partie fluctuante vérifie toutes les deux l'équation de continuité.

Navier-Stokes moyennée

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + \frac{\partial U_j U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j} \qquad (0.4)$$

Remarques :

La dérivée temporelle et la valeur moyenne de la vitesse(ou d'une autre grandeur) n'est pas forcement nulle (moyenne d'ensemble moyennes temporelle). De même, la moyenne d'un produit de valeurs fluctuantes n'est pas nulle :

$$\left.\begin{array}{l} \overline{u_i'} = 0 \\ \overline{u_j'} = 0 \end{array}\right\} \text{et } \overline{u_i' u_j'} \neq 0$$

On définit le tenseur de Reynolds :

$$R_{ij} = -\rho \overline{u_i' u_j'}$$

L'équation de Navier- Stokes moyennée s'écrit finalement :

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + \frac{\partial U_j U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\tau_{ij}} + R_{ij}\right) \qquad (0.5)$$

Les composantes R_{ij} sont appelées contraintes de Reynolds ou tension de Reynolds, elles sont analogues à des contraintes supplémentaires issues du mouvement d'agitation (analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses).

- le tenseur de Reynolds est symétrique :

$$R_{ij} = -\rho \begin{bmatrix} \overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{v'u'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'} \\ \overline{w'u'} & \overline{w'v'} & \overline{w'w'} \end{bmatrix} \qquad (0.6)$$

Il introduit 6 inconnues supplémentaires dont il n'est pas possible d'obtenir les équations sans introduire encore de nouvelles inconnues.

$\rightarrow$ Problème de fermeture des équations (modèle de turbulence)

-en situation de turbulence développée (loin de parois), le tenseur de Reynolds est prépondérant devant le tenseur des contraintes visqueuses : $R_{ij} \gg \overline{\tau_{ij}}$

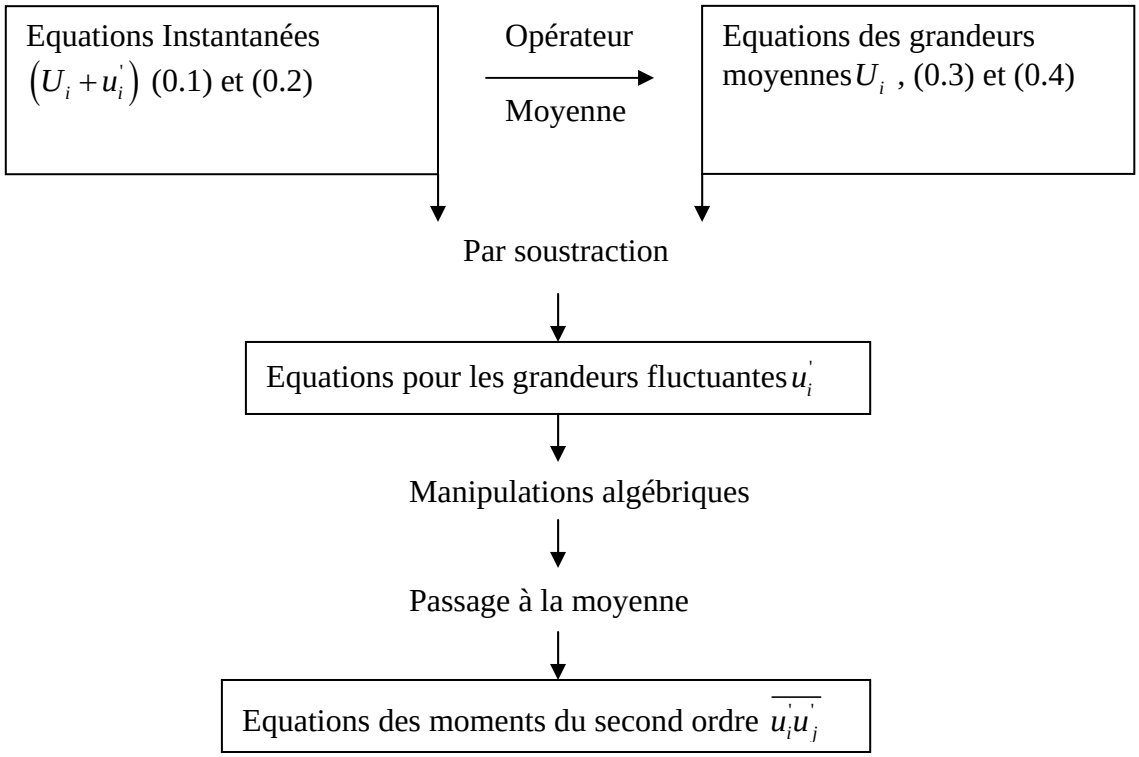
$\rightarrow$Forte influence des tensions de Reynolds sur le champ moyen.

Equations des grandeurs fluctuantes :

Les équations des grandeurs fluctuantes s'obtiennent en introduisant la décomposition de Reynolds dans les équations instantanées et en soustrayant les équations moyennes correspondantes. Toutefois, il est plus intéressant d'obtenir de nouvelles équations pour les contraintes de Reynolds $\overline{u_i'u_j'}$ (moments d'ordre 2) que pour les fluctuations elles- mêmes (u_i'). On travaille avec des moyennes statistiques.

Equation de transport des tensions de Reynolds :

Les équations de départ sont les équations (0.1) et (0.2) dans lesquelles on a introduit la décomposition de Reynolds.



Détails des calculs :

On part de l'équation (0.2)

$$\frac{\partial\left(U_i + u_i^{'}\right)}{\partial t} + \left(U_k + u_k^{'}\right)\frac{\partial\left(U_i + u_i^{'}\right)}{\partial x_k} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial\left(P + p^{'}\right)}{\partial x_i} + \nu\frac{\partial^2\left(U_i + u_i^{'}\right)}{\partial x_k \partial x_k} \tag{0.7}$$

On fait la différence (0.13)-(0.7) en tenant compte de (0.6) : $\frac{\partial u_i^{'}}{\partial x_i} = 0$

$$\frac{\partial u_i^{'}}{\partial t} + U_k\frac{\partial u_i^{'}}{\partial x_k} + u_k^{'}\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_k^{'}u_i^{'} - \overline{u_k^{'}u_i^{'}}}{\partial x_k} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p^{'}}{\partial x_i} + \nu\frac{\partial^2 u_i^{'}}{\partial x_k \partial x_k} \tag{0.8}$$

On peut écrire (0.14) pour l'indice j :

$$\frac{\partial u_j^{'}}{\partial t} + U_k\frac{\partial u_j^{'}}{\partial x_k} + u_k^{'}\frac{\partial U_j}{\partial x_j} + \frac{\partial u_k^{'}u_j^{'} - \overline{u_k^{'}u_j^{'}}}{\partial x_k} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p^{'}}{\partial x_j} + \nu\frac{\partial^2 u_j^{'}}{\partial x_k \partial x_k} \tag{0.9}$$

On multiplie (0.8) par $u_j^{'}$ et (0.9) par $u_i^{'}$ et on somme les deux équations obtenues. En regroupant certains termes, il vient :

$$\frac{\partial u_i' u_j'}{\partial t} + U_k \frac{\partial u_i' u_j'}{\partial x_k} + u_k' u_j' \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + u_k' u_i' \frac{\partial U_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_i' u_j' u_k'}{\partial x_k} - u_j' \frac{\partial \overline{u_i' u_k'}}{\partial x_k}$$
$$- u_i' \frac{\partial \overline{u_j' u_k'}}{\partial x_k} = -\frac{1}{\rho}\left(u_j' \frac{\partial p'}{\partial x_i} + u_i' \frac{\partial p'}{\partial x_j} \right) + \nu \left(u_j' \frac{\partial^2 u_i'}{\partial x_k \partial x_k} + u_i' \frac{\partial^2 u_j'}{\partial x_k \partial x_k} \right)$$

Le passage à la moyenne dans cette équation fait disparaître les termes de la forme :

$$\overline{u_i' \frac{\partial \overline{u_j' u_k'}}{\partial x_k}} = \overline{u_i'} . \frac{\partial \overline{u_j' u_k'}}{\partial x_k} = 0$$

On obtient alors une équation pour le moment d'ordre 2 $\left(u_i' u_j'\right)$ qui peut se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial t} + U_k \frac{\partial \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_k} = P_{ij}^u + T_{ij}^u + \Pi_{ij}^u + D_{ij}^u - \varepsilon_{ij}^u \qquad (0.10)$$

Cette équation est appelée équation des tensions de Reynolds ou équation de transport de Reynolds.

Le membre à gauche de l'équation (0.10) représente la variation totale des contraintes de Reynolds, $\overline{u_i' u_j'}$. Le membre de droite se décompose en différents termes :

$$P_{ij}^u = -\left(\overline{u_i' u_k'} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} + \overline{u_j' u_k'} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \right) \qquad \text{Production}$$

$$T_{ij}^u = -\frac{\partial \overline{u_i' u_j' u_k'}}{\partial x_k} \qquad \text{Transport turbulent}$$

$$\Pi_{ij}^u = -\frac{1}{\rho}\left(\overline{u_i' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u_j' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} \right) \qquad \text{Gradient de pression- vitesse}$$

$$D_{ij}^u = \nu \frac{\partial^2 \overline{u_i' u_j'}}{\partial x_k \partial x_k} \qquad \text{Diffusion visqueuse}$$

$$\varepsilon_{ij}^u = 2\nu \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k} \frac{\partial u_j'}{\partial x_k}} \qquad \text{Tenseur de dissipation}$$

Remarques :

On a donc introduit des équations supplémentaires pour les contraintes de Reynolds (0.6). Cependant le système des équations de Navier- Stokes moyennées n'est toujours pas fermé. En effet, l'équation (0.10) fait apparaître de nouvelles inconnues :

-corrélations triples : $\overline{u_i' u_j' u_k'}$

-corrélation pression- vitesse : $\overline{u_i' \frac{\partial p'}{\partial x_j}}$

-corrélation gradient de vitesse : $\overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k} \frac{\partial u_j'}{\partial x_k}}$

Le problème de fermeture est alors repousse et reste entier.

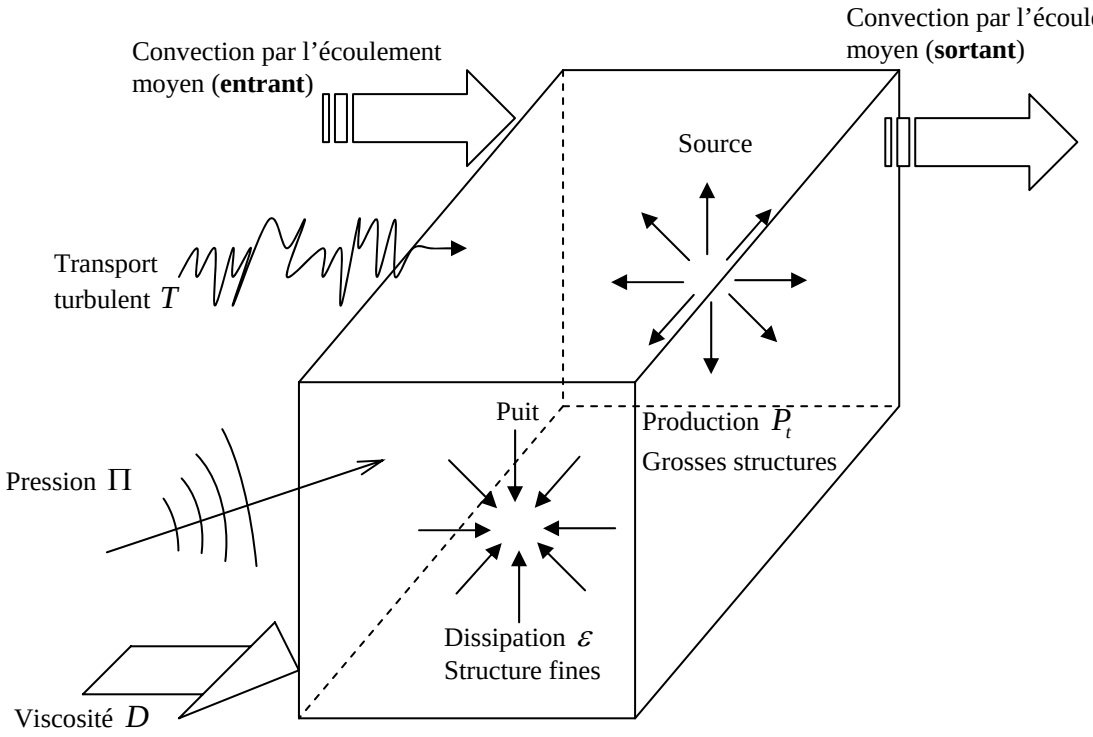
Equation de l'énergie cinétique fluctuante :

En imposant $i = j$ dans l'équation des tensions de Reynolds (0.10), on obtient l'équation pour l'énergie cinétique fluctuante, $k = \frac{1}{2}\overline{u_i' u_i'}$.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_k \frac{\partial k}{\partial x_k} = \overbrace{-\overline{u_i' u_k'} \frac{\partial U_i}{\partial x_k}}^{P_t} \overbrace{-\frac{1}{2}\frac{\partial \overline{u_i' u_j' u_k'}}{\partial x_k}}^{T} \overbrace{-\frac{1}{\rho}\frac{\partial \overline{u_k' p'}}{\partial x_k}}^{\Pi} + \overbrace{\nu \frac{\partial^2 k}{\partial x_k \partial x_k}}^{D} \overbrace{-\nu \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k}\frac{\partial u_i'}{\partial x_k}}}^{\varepsilon} \qquad (0.11)$$

La variation totale de l'énergie turbulente (membre de gauche) est balancée par :

- P_t, appelé terme de production turbulente. Il caractérise les échanges d'énergie par interaction avec le mouvement moyen. cette énergie est en général cédée par l'écoulement moyen $P_t > 0$.
- T, transport turbulent. Il s'agit d'une diffusion par effet des fluctuations de la vitesse.
- Π, transfert d'énergie cinétique par l'interaction pression- vitesse.
- D, diffusion visqueuse, transfert d'énergie cinétique par viscosité.
- ε, dissipation turbulente. L'énergie cinétique est dissipée sous forme de chaleur. Ce terme conduit toujours à une décroissance de l'énergie cinétique fluctuante $\varepsilon > 0$.



Les problèmes de fermeture des équations :

Bilan des équations et des inconnues :

La décomposition de Reynolds dans les équations de Navier- Stokes a permis de trouver un certain nombre d'équations pour les inconnues du problème.

Cependant, à chaque étape, on introduit des inconnues supplémentaires. Le nombre d'inconnues est toujours supérieur aux nombres d'équations disponibles. Il s'agit du problème de fermeture des équations.

Inconnues à calculer	Equations disponibles	Nombre d'équations	Inconnues supplémentaires	Nombre total d'inconnues
Champ de vitesse moyen U_i (3) Pression moyenne P (1)	(1) continuité (3) N.S. moyennée	4	Tension de Reynolds $\overline{u_i' u_j'}$ (6)	10
Champ de Vitesse moyen U_i (3) Pression moyenne P (1) Tension de Reynolds $\overline{u_i' u_j'}$ (6)	(1) continuité (3)N.S. moyennée (6) équations des tensions de Reynolds	10	Corrélations triples $\overline{u_i' u_j' u_k'}$ (10) Corrélation pression-vitesse $\overline{u_i' \frac{\partial p'}{\partial x_j}}$ (9) Corrélations gradient	35

			de vitesse $\overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_k}\frac{\partial u_j'}{\partial x_k}}$ (6)	

- on pourrait poursuivre la démarche, on trouverait de nouvelles équations qui introduiraient à leur tour de nouvelles inconnues. Ainsi, l'équation exacte d'un moment d'ordre n $\left(\overline{u_{i_1}' u_{i_1}' u_{i_1}' ... u_{i_n}'}\right)$ implique nécessairement un moment d'ordre supérieur.
- Il est donc nécessaire de « modéliser » les inconnues supplémentaires à l'aide de « lois » complémentaires n'introduisant pas de nouvelles inconnues : modèles de fermeture.

Critères de choix et classification :

On distingue deux grandes catégories de modélisation :

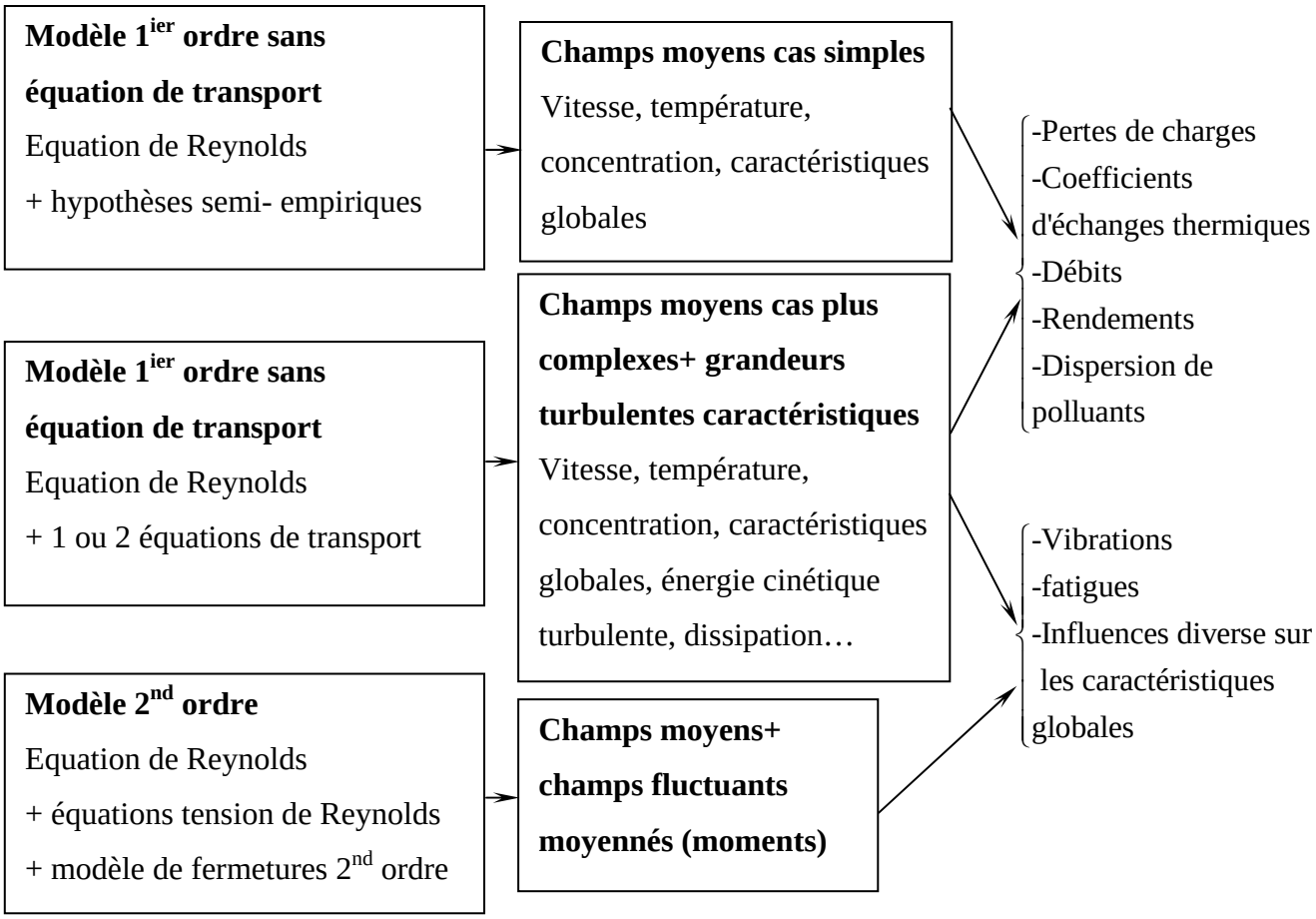
- Modèles à viscosité turbulente (modèle du 1er ordre) basé sur l'hypothèse de Boussinesq qui consiste à modéliser directement les tensions de Reynolds à l'aide de la viscosité turbulente μ_t . Relativement facile à utiliser mais la qualité de modélisation de μ_t influe directement sur la qualité de l'écoulement moyen.
- Modèle du 2nd ordre : les tensions de Reynolds sont calculées directement, la modélisation se porte alors sur des moments d'ordre supérieur. La mise en œuvre est plus délicate mais les résultats sont de meilleure qualité.

On pratique également une distinction selon le nombre d'équations d'évolution supplémentaires du modèle (n'introduisant pas de nouvelles inconnues).

-0 équation (longueur de mélange)
-1 équation (k, énergie cinétique turbulente)
-2 équations ($k-\varepsilon, k-w, ...$)
} Modèle du 1^{ier} ordre

-7 équations ($R_{ij}-\varepsilon, ...$)
} Modèle du 2^{ième} ordre

-Le choix entre ces différentes modélisations doit s'effectuer en fonction du problème à traiter.



Ils existent d'autres voies d'approches et d'autres types de modèles adaptés à des configurations particulières. La multiplicité des modèles traduit leur manque d'université.

Modèles du 1er ordre, hypothèse de fermeture semi- empirique

Concept de viscosité turbulente : l'hypothèse de Boussinesq :

Par analogie à la loi de comportement reliant le tenseur des contraintes visqueuses au champ de vitesse :

$$\tau_{ij} = \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)$$

Boussinesq a proposé de relier le tenseur de Reynolds au champ moyen en écrivant :

$$R_{ij} = \mu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)$$

Avec :

μ_t : Viscosité turbulente

La quantité scalaire μ_t ainsi défini dépend à priori de $\vec{x}$ et de t. l'hypothèse $\mu_t = cte$ n'est en général pas correcte ; les transferts turbulents se font sur de multiples échelles et ne sont pas locaux.

L'objet de la modélisation de la turbulence dans le cadre de l'hypothèse de Boussinesq est d'obtenir une relation entre $\mu_t(\vec{x},t)$ et les autres inconnues du problèmes afin de fermer le système d'équations à résoudre.

Remarques sur l'hypothèse de Boussinesq

Cette hypothèse est très facile à mettre en défaut :

$$R_{11} = -\rho\overline{u'u'} = 2\mu_t \frac{\partial U}{\partial x}$$

$$R_{22} = -\rho\overline{v'v'} = 2\mu_t \frac{\partial V}{\partial y}$$

$$R_{33} = -\rho\overline{w'w'} = 2\mu_t \frac{\partial W}{\partial z}$$

La condition d'incompressibilité du champ moyen s'écrit $\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} = 0$

On a alors dans ce cas :

$k = \frac{1}{2}\left(\overline{u'u' + v'v' + w'w'}\right) = 0$, l'énergie cinétique turbulente serait nulle (absurde). Pour éviter ce résultat, on retranche couramment la trace du tenseur :

$$R_{ij} = \mu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\rho k \delta_{ij}$$

Dans le cas d'un écoulement moyen unidirectionnel, la vérification de cette hypothèse reformulée impose néanmoins :

$\overline{u'u'} = \overline{v'v'} = \overline{w'w'}$, égalité non vérifiée pour un écoulement non- homogène.

De façon générale, on observe ;

Directions principales de $R_{ij} \neq$ Directions principales de $\overline{D_{ij}}$

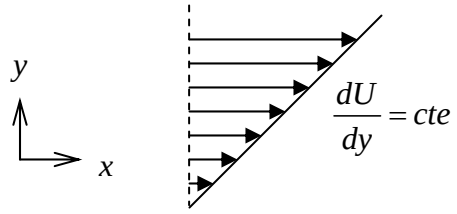
D'autres formulations semi- empiriques existent, elles sont basées pour la plupart sur des résultats expérimentaux. Leurs applications restent donc très spécifiques.

La modélisation de la turbulence dans le cadre de l'hypothèse de Boussinesq consiste à fermer le problème en construisant μ_t avec pertinence.

Toujours dans le cadre de l'hypothèse de Boussinesq, on va chercher à construire la viscosité turbulente μ_t non plus avec des paramètres extérieurs semi empiriques, mais avec des inconnues supplémentaires (énergie cinétique turbulente, dissipation...). L'introduction de nouvelles inconnues doit évidemment s'accompagner de nouvelles équations (équations de transport). Le problème de fermeture se portera alors sur des quantités d'ordre plus élevé.

Idées directives pour la construction de μ_t :

On se place dans le cadre idéal d'une turbulence homogène en présence d'un cisaillement constant.



En première approximation, un tel équilibre peut se vérifier localement dans écoulement cisaillé mince inhomogène.

Hypothèse de Bradshaw : proportionnalité entre $\overline{u'v'}$ et k

$\pm\overline{u'v'} = k\sqrt{c}$, c constant.

Par définition :

$P_t = -\overline{u'v'}\dfrac{dU}{dy}$ D'où $\varepsilon_t = -\overline{u'v'}\dfrac{dU}{dy}$

En multipliant ε par $\overline{u'v'}$ et en utilisant l'hypothèse précédente

$$\overline{u'v'}\varepsilon = -ck^2\frac{dU}{dy}$$

A partir de l'hypothèse de Boussinesq écrite sur R_{12}

$$-\rho\overline{u'v'} = \mu_t\frac{dU}{dy}$$

On obtient une expression de la viscosité turbulente :

$\mu_t = \rho c\dfrac{k^2}{\varepsilon}$ ou encore $\nu_t = c\dfrac{k^2}{\varepsilon}$

Cette expression introduit deux nouvelles inconnues k et ε. Celles-ci vont satisfaire deux équations supplémentaires. Il s'agit alors d'un modèle de fermeture du 1er ordre à deux équations de transport.

Les équations supplémentaires pour le modèle $k-\varepsilon$

L'équation pour k

Dans l'équation exacte de k, certains termes font intervenir des quantités autres que les inconnues (U_i, P, k, ε)

$$\frac{\partial k}{\partial t}+U_j\frac{\partial k}{\partial x_j}=\overbrace{-\overline{u_i'u_j'}\frac{\partial U_i}{\partial x_j}}^{\text{à modéliser}}\overbrace{-\frac{1}{2}\frac{\partial\overline{u_i'u_i'u_j'}}{\partial x_j}}^{\text{à modéliser}}\overbrace{-\frac{1}{\rho}\frac{\partial\overline{u_j'p'}}{\partial x_j}}^{\text{à modéliser}}+\nu\frac{\partial^2 k}{\partial x_j\partial x_j}-\varepsilon$$

La modélisation de ces termes est nécessaire pour fermer les équations.

La modélisation du premier terme s'obtient en utilisant directement l'hypothèse de Boussinesq en retranchant la trace du tenseur:

$$-\overline{u_i'u_j'}\frac{\partial U_i}{\partial x_j}=\left[\nu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j}+\frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}k\delta_{ij}\right]\frac{\partial U_i}{\partial x_j}$$

Le deuxième terme peut être reformulé

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial\overline{u_i'u_i'u_j'}}{\partial x_j}=-\frac{\partial\overline{k'u_j'}}{\partial x_j}\ \text{avec}\ k'=\frac{1}{2}u_i'u_i'$$

Attention : dans cette natation, on a $k'\neq k,\ k=\overline{k'}\neq 0$

On relie k' à sa valeur moyenne k en exprimant le terme de diffusion par un terme proportionnel au gradient :

$$-\overline{k'u_j'}=\frac{\nu_t}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_j}$$

Enfin on constate que les effets du troisième terme sont similaires à ceux du deuxième, ce qui incite à modéliser globalement leurs effets en posant :

$$-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{2}\frac{\partial\overline{u_i'u_i'u_j'}}{\partial x_j}+\frac{1}{\rho}\overline{u_j'p'}\right)=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\nu_t}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_j}\right)$$

On a donc finalement une équation modèle pour k de la forme :

$$\frac{\partial k}{\partial t}+U_j\frac{\partial k}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\left(\nu+\frac{\nu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right)+\nu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j}+\frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)\frac{\partial U_i}{\partial x_j}-\varepsilon$$

L'équation pour ε

L'équation exacte de ε s'écrit

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}+U_k\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k}=\overbrace{-2\nu\frac{\partial U_i}{\partial x_j}\left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_k}\frac{\partial u_j'}{\partial x_k}+\frac{\partial u_k'}{\partial x_j}\frac{\partial u_k'}{\partial x_i}\right)}^{\text{à modéliser}}\overbrace{-2\nu\overline{u_k'\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}\frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j\partial x_k}}}^{\text{à modéliser}}$$

$$\underbrace{-2\nu\overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}\frac{\partial u_i'}{\partial x_k}\frac{\partial u_k'}{\partial x_j}}}_{\text{à modéliser}}\underbrace{-\overline{\frac{\partial u_k'\varepsilon'}{\partial x_k}}}_{\text{à modéliser}}\underbrace{-2\frac{\nu}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\frac{\partial p'}{\partial x_j}\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}}\right)}_{\text{à modéliser}}$$

$$+\nu\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial x_k\partial x_k}\underbrace{-2\nu^2\overline{\frac{\partial^2 u_i'}{\partial x_j\partial x_k}\frac{\partial^2 u_i'}{\partial x_j\partial x_k}}}_{\text{à modéliser}}$$

Où ε' est la fluctuation (non- centrée) de dissipation avec

$$\varepsilon'=\nu\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}$$

Le travail de modélisation à effectuer sur cette équation est assez conséquent et comporte de nombreuses hypothèses plus ou moins justifiables. L'équation modèle la plus utilisée est de la forme :

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}+U_j\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right)+C_{\varepsilon 1}\nu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j}+\frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)\frac{\partial U_i}{\partial x_j}\frac{\varepsilon}{k}-C_{\varepsilon 2}\frac{\varepsilon^2}{k}$$

Remarques :

La modélisation de l'équation de ε doit faire face à un problème particulièrement difficile à traiter. Dans cette équation, deux termes tendent vers l'infini avec un signe opposé quand le nombre de Reynolds augmente. La difficulté est de représenter cette différence de la meilleure façon.

Bilan sur les équations à résoudre pour le modèle $k-\varepsilon$

Pour un écoulement incompressible et sans tenir compte de l'effet thermique et le terme de flottabilité, on a le bilan des équations suivant.

Les inconnues sont les 6 champs scalaires (U_i, P, k, ε) . La viscosité turbulente est reliée directement aux inconnues par la relation algébrique suivante :

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

Les 6 équations disponibles sont :

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0$$

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left((\nu + \nu_t)\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) - \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x_i}$$

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right)\frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \nu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)\frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \varepsilon$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + U_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{\varepsilon 1}\nu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)\frac{\partial U_i}{\partial x_j}\frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2}\frac{\varepsilon^2}{k}$$

Le problème est fermé

Les valeurs des 5 constantes $(C_\mu, C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, \sigma_k, \sigma_\varepsilon)$ sont déterminées en se référant à des données expérimentales pour les écoulements simple (turbulence en décroissance libre, écoulement en canal, …). Ces valeurs sont obtenues soit de façon directe, soit par une procédure d'optimisation basée sur des compositions

calculs issus du modèle $\Leftrightarrow$ *expériences*

Les résultats numériques sont également confrontés à des calculs analytiques pour des configurations simples (couche limite sur une plaque plane, gradient inverse sur une plaque plane,…).

Les valeurs les plus courantes sont :

$C_\mu = 0.09$; $C_{\varepsilon 1} = 1.44$; $C_{\varepsilon 2} = 1.92$; $\sigma_k = 1$; $\sigma_\varepsilon = 1.3$

Le modèle $k-\varepsilon$ peut être écrit sous une forme plus générale, où d'autres termes sont apparais dans leurs formules, à cet effet ce modèle est appelé le modèle $k-\varepsilon$ standard.

Le Model $k-\varepsilon$ Standard

Le modèle $k-\varepsilon$ standard est un modèle semi empirique basé sur les équations de transport pour l'énergie cinétique turbulente (k) et son le taux de dissipation (ε). L'équation de transport pour (k)est dérivée des équations exactes, alors que l'équation de transport pour (ε) était obtenue en utilisant le raisonnement physique et soutient peu de ressemblance à ses contreparties mathématiquement exactes.

Dans la dérivation du modèle $k-\varepsilon$ standard, on l'a supposé que l'écoulement est entièrement turbulent, et les effets de la viscosité moléculaire sont négligeables.

Equations de Transport pour le Model $k-\varepsilon$ Standard

L'énergie cinétique turbulente k , et son taux de dissipation ε, sont obtenus à partir des équations de transport suivantes :

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho k U_j\right)=+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right)+G_k+G_b-\rho\varepsilon-Y_M+S_k$$

Et

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho \varepsilon U_j\right)=+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right)+C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}(G_k+C_{3\varepsilon}G_b)-C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k}+S_\varepsilon$$

Dans ces équations,G_k représente la génération de l'énergie cinétique turbulente due aux gradients de vitesses moyennes, G_b est la génération de l'énergie cinétique turbulente due à la flottabilité, Y_M représente la contribution de la dilatation de fluctuation dans la turbulence compressible au taux global de dissipation. S_k et S_ε sont les termes source définies pour l'utilisateur.

Modélisation de la viscosité Turbulent

La viscosité turbulente μ_t , est calculée par la combinaison de k et ε comme suit :

$$\mu_t=\rho C_\mu\frac{k^2}{\varepsilon}$$

Où C_μ est une constante.

Les constantes du modèles $C_{1\varepsilon}=1.44, C_{2\varepsilon}=1.92, C_\mu=0.09, \sigma_k=1.0$ et $\sigma_\varepsilon=1.3$.

Ces valeurs par défaut ont été déterminées à partir des expériences avec de l'eau, l'air et pour des écoulements turbulents fondamentaux cisaillés comprenant des écoulements homogènes

et la turbulence isotrope. Elles se sont avérées pour fonctionner assez bien pour un éventail de mur délimité et des écoulements de cisaillement libre.

Modélisation des termes de production turbulente pour le modèle $k-\varepsilon$:

Le terme G_k , représentant la production de l'énergie cinétique turbulente, ce terme peut être définie comme :

$$G_k = -\overline{\rho u_i' u_j'} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$$

Pour évaluer G_k en quelque sorte conformé à l'hypothèse de Boussinesq,

$$G_k = \mu_t S^2$$

Où S est le module du tenseur moyen de taux de contrainte de déformation, défini comme

$$S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}}$$

L'effet de la flottabilité sur la turbulence dans le modèle $k-\varepsilon$ standard:

Quand un champ de gravité différent de zéro et un gradient de température sont présent simultanément, le modèle $k-\varepsilon$ expliquent la génération k d'en raison de la flottabilité G_b , et la contribution correspondante à la production de ε . La génération de la turbulence due à la flottabilité est donnée :

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{\mathrm{Pr}_t} \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

Où Pr_t est le nombre de Prandtl turbulent et g_i est la composante de la gravité dans la direction i , β Le coefficient de dilatation thermique, est défini comme

$$\beta = -\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P$$

Pour les gaz idéaux, l'expression de G_b réduit à:

$$G_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho \mathrm{Pr}_t} \frac{\partial \rho}{\partial x_i}$$

Il peut voir des équations de transport pour k que l'énergie cinétique turbulente tend à être augmentée ($G_b > 0$) dans la stratification instable. Pour la stratification stable, la flottabilité tend à supprimer la turbulence ($G_b < 0$).

Les effets de la flottabilité sur la génération de k sont toujours inclus quand tu as un champ de pesanteur différent de zéro et un gradient de température différent de zéro. Tandis que les effets de flottabilité sur la génération de k sont comprise relativement bonne, l'effet ε est allumé moins clair Le degré qui affecte l'effet de la flottabilité sur ε est la constante $C_{3\varepsilon}$.

Effets de la compressibilité sur la turbulence dans le modèle k- ϵ standard :

Pour des écoulements à grand nombre de Mach, la compressibilité affecte la turbulence par le prétendu "dissipation de la dilatation", qui est normalement négligé dans le modèle des écoulements incompressibles. Négliger la dissipation de la dilatation et ne prévoit pas la diminution observée dans le taux de propagation avec l'augmentation du nombre de mach pour le mélange compressible et d'autres couches de cisaillement libres. Pour expliquer ces effets en modèle $k-\varepsilon$, le terme de dissipation de la dilatation Y_M , est inclus dans l'équation de K . Ce terme est modélisé selon une proposition par Sarkar :

$$Y_M = 2\rho\varepsilon M_t^2$$

Où M_t est le nombre de mach turbulent, défini comme:

$$M_t = \sqrt{\frac{k}{a^2}}$$

Où $a = \sqrt{\gamma RT}$ est la vitesse du bruit.

Cette modification de compressibilité a toujours effet quand la forme compressible de la loi des gaz parfait.

Il existe d'autres modèles développé se basant sur le modèle $k-\varepsilon$, on site :

* Le modèle $k-\varepsilon$ RNG (Renormalisation Groupe).

* Le modèle $k-\varepsilon$ réalisable.

Bibliographie

Thèse :

[1] ***Yahaya Saleye***, « Dynamique de la couche limite de Surface semi-aride : Approche des caractéristiques turbulentes par Anémométrie a coupelles Et Effets des traitements de surface du sol », thèse de doctorat de l'université paris 7 - Denis Diderot, spécialité sciences physiques de la terre. 2004.

[2] ***Maher abdallah***, « Modélisation tridimensionnelle du transport de polluants dans les écoulements a surface libre ».Thèse doctorat de université Claude Bernard-Lyon1 spécialité mécanique 1992.

[3] ***Ludovic Ferrand*** « Modélisation et expérimentation des fours De réchauffage sidérurgiques équipes de Brûleurs régénératifs à oxydation sans flamme ». Thèse doctorat de l'école des mines de paris, Spécialité énergétique. 2003.

[4] Laurent Menut. « Etude expérimentale et théorique de La couche limite atmosphérique en Agglomération parisienne ». Thèse doctorat de l'université Pierre et marie curie, Spécialité *:* physique de l'atmosphère. 1997.

[5] ***Guillaume Brulfert*** « Modélisation des circulations atmosphériques pour l'étude de la pollution des vallées alpines » thèse Doctorat de L'Université Joseph Fourier - Grenoble I, Spécialité : mécanique des milieux géophysiques et environnement. 2004.

[6] ***Nadege Blond***.« Assimilation de données photochimiques et prévision de la pollution troposphérique » Doctorat de l'école polytechnique, Spécialité: physique et chimie de l'atmosphère. 2002.

[7] ***Stephane Glockner***. « Contribution à la modélisation de la pollution Atmosphérique dans les villes » Doctorat L'Université Bordeaux I Ecole doctorale De sciences physiques et de l'ingénieur. Spécialité : mécanique. 2000

[8] ***M. Jean-michel Bernard*** « Simulation expérimentale De la chimie atmosphérique de titan : Suivi des espèces produites et Comparaison a un modèle cinétique ». Thèse Doctorat Université paris 7 – Denis Diderot U.Fr de chimie Ecole doctorale sciences de l'environnement – Ile de France, Spécialité : chimie de la pollution atmosphérique
Et physique de l'environnement. 2004

[9] ***Helene Brogniez*** . « Humidité de la troposphère libre africaine : Elaboration d'une archive metéosat, analyse Climatique et évaluation de modèles ». Thèse doctorat de l'Université Paris VI - Pierre Et Marie Curie, Spécialité Méthodes physiques en télédétection. 2004

[10] ***Anthony Ung***. « Cartographie de la pollution atmosphérique en Milieu urbain a l'aide de données multisources ». Doctorat de l'université paris 7 – Denis Diderot, Ecole doctorale sciences de l'environnement d'Ile de France, Spécialité : méthodes physiques en télédétection. 2003.

[1] ***H. Khechouf.*** « Pollution et dynamique de l'atmosphère : les modèles analytiques des réactions de NO, NO2 et O3 ». Thèse d'ingénieur de l'institut d'hygiène et sécurité industrielle université El hadj Lakhdar Batna. Algérie. 2005.

[11] ***C. Abdou***. « Conception d'un code de calcul pour la simulation numérique d'écoulement réactifs ». Thèse de magistère à l'université de Constantine, département de chimie industrielle. 2001.

Rapport:

[12] ***E. J. Spee, J. G. Vewer, P.M. de Zeeuw, J.G. Blom, W. Hundsdorfer*** «A numerical study for global atmospheric Transport-Chemistry problems ». Rapport du Centrum voor Wiskunde en informatica. Spécialité: Modelling, analysis and simulation (MAS). Copyright Stiching Mathematish centrum1997.

[13] ***J. G. Vewer, W. Hundsdorfer and J.G. Blom***.. «Numerical time integration for air pollution models ». Rapport du Centrum voor Wiskunde en informatica. Spécialité: Modelling, analysis and simulation (MAS) Copyright Stiching Mathematish centrum1998.

[14] ***D. Lanser, J. G. Vewer***.. «analysis of operator splitting for advection-diffusionreaction problems from air pollution modelling». Rapport du Centrum voor Wiskunde en informatica. Spécialité: Modelling, analysis and simulation (MAS) Copyright Stiching Mathematish centrum1998.

[15] ***M.A. Botchev, J. G. Vewer***. «improving approximate matrix factorizaations for implicit time integration in air pollution modelling». Rapport du Centrum voor Wiskunde en informatica. Spécialité: Modelling, analysis and simulation (MAS) Copyright Stiching Mathematish centrum 2000.

[16] ***J.G. Blom, W.M. Lioen***. «HPCN and air quality modelling ». Rapport du Centrum voor Wiskunde en informatica. Spécialité: Modelling, analysis and simulation (MAS) Copyright Stiching Mathematish centrum1998.

[17] ***P.J.F. Berkvens, M.A. Botchev, J. G. Vewer, M.C. Krol, W. Peters***. « Solving vertical transport and chemistry in air pollution models ». Rapport du Centrum voor Wiskunde en informatica. Spécialté: Modelling, analysis and simulation (MAS) Copyright Stiching Mathematish centrum 2000.

[18] ***J. G. Vewer, E. J. Spee, G. Blom, W.H. Hundesdorfer***.. «A second order rosenbrock method applied to photochemical dispersion problems». Rapport du Centrum voor Wiskunde en informatica. Spécialité: Modelling, analysis and simulation (MAS) Copyright Stiching Mathematish centrum1997.

[19] ***M. van Loon, A.W. Heemink***.. «Kalman filtering for nonlinear atmospheric chemistry models: first experiences». Rapport du Centrum voor Wiskunde en informatica. Spécialté: Modelling, analysis and simulation (MAS) Copyright Stiching Mathematish centrum1997

[20] ***S. Chaudorne***. « Rayonnement thermique : transfert de chaleur couplés » DEA d'énergétique physique de Grenoble 2002-2003.

Cours :

[21] ***J.l. Estivalezes***. « Notes de cours »11 octobre 2005

[22] ***I. Descamps, M.A. Meunier, J.L. Harion***. « Modèles de dispersion de particules en Milieu urbain ». Étude de Ecole des mines de Douai, Département énergétique industrielle. 2000.

[23] ***L. Vervisch*** . « Turbulent combustion modeling ». Cours de l'Institut national des sciences appliquées de Rouen ,CNRS et école centrale paris.2003.

[24] ***B. Sportisse et V. Mallet***. « Calcul scientifique pour l'environnement ». Cours ENSTA centre d'enseignement et de recherche sur l'environnement atmosphérique. Laboratoire commun. 2005.

[25] ***B. Sportisse*** « Modélisation de la pollution atmosphérique ».Cours de l'école nationale des Ponts et Chaussées. Centre d'enseignement et de recherche en environnement atmosphérique, laboratoire commun. 2003.

[26] ***L. Menut*** « Introduction à la modélisation en Dynamique et chimie de l'atmosphère ». Cours du Laboratoire de météorologie dynamique, chimie de la pollution atmosphérique et physique de l'environnement 2001.

Articles :

[27] ***S. Alhamdani, A. bendou, A. Benhamou, A. Mir, H. El Ihssini***. « Etude de la dispersion d'un polluant dans un écoulement d'air le long d'un canal ».Proceding Tétouan-Maroc. 2002

[28] ***N. Mahjoub, H. Mhini, S. El Golli, G. Le Palec et P. Bournot***. « Dispersion autour d'un bâtiment d'un polluant Issu d'une cheminée ». Revue Energétique Ren : journées e thermique page 139-144. 2001.

Livres :

[29] ***R. Borghi, M. Destriau et G. De Soete***. « La combustion et les flammes ». ouvrage publié avec le concours du ministère de l'éducation nationale, de l'enseignement supérieur, de la recherche et de l'insertion professionnelle (DISTB). Editions Techni-Paris 1995

[30] ***R. Borghi et M. Champion***. « Modélisation et théorie des flammes ».éditions Technip, paris, 2000.

[31] ***P. Antoine Bois***. « Introduction à la mécanique théorique des fluides » Ellipses édition marketing S. A, 2000

[32] ***P. Arnaud*** « chimie physique » cours 4ème édition , Dunod, Paris. 1998

[33] ***J.P. moulin, D. Pareau, M. Rakib et M. Stambouli***. « Cinétique du transfert de matière entre deux phases » technique de l'ingénieur J 1075 (1-20).

Résumé

Ce travail a pour objectif de modéliser et simuler la dispersion d'un polluant éjecté par une cheminé en atmosphère. Les équations différentielles régissant ce phénomène sont été discrétisé en utilisant des méthodes numériques tels que la méthode des différences finies et celle des volumes finis. Les formules algébriques résultantes de la discrétisation sont ainsi résolues par des méthodes de résolution des systèmes linéaires en utilisant un langage de programmation VISUAL FORTRAN. Enfin les résultats ainsi obtenus nous donne des informations concernant la distribution du polluant en atmosphère pour différents temps, aussi bien pour différentes positions et bien sur les zones à faibles concentrations et à concentration élevées.

ملخص:

الهدف من هذا العمل هو دراسة انتشار ملوث نفذ من مدخنة في الجو. المعادلات التفاضلية التي تخضع لها هذه الظاهرة تحول إلى معادلات خطية باستخدام طرق رقمية منها طريقة الفروق المنتهية وكذلك الأحجام المنتهية. و المعادلات الخطية التي نتحصل عليها نحلها باستخدام طرق أخرى لحل الأنظمة الخطية وذلك بالاستعانة ببرنامج إعلام آلي فورترون. والنتائج التي نتحصل عليها تعطينا فكرة عن أماكن انتشار الملوث بدلالة الزمن.