



HAL
open science

**Dispersion et mélange turbulents de particules solides et de gouttelettes par une simulation des grandes échelles et une modélisation stochastique lagrangienne.
Application à la pollution de l'atmosphère.**

Ivana Vinkovic

► **To cite this version:**

Ivana Vinkovic. Dispersion et mélange turbulents de particules solides et de gouttelettes par une simulation des grandes échelles et une modélisation stochastique lagrangienne. Application à la pollution de l'atmosphère.. Océan, Atmosphère. Ecole Centrale de Lyon, 2005. Français. NNT : . tel-00077281

HAL Id: tel-00077281

<https://theses.hal.science/tel-00077281>

Submitted on 30 May 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE DE DOCTORAT

présentée devant

L'ECOLE CENTRALE DE LYON
ECOLE DOCTORALE : MEGA

pour obtenir le titre de DOCTEUR

Spécialité : MECANIQUE

par

Ivana VINKOVIC

*Dispersion et mélange turbulents de particules solides et de gouttelettes
par une simulation des grandes échelles et une modélisation stochastique
lagrangienne.
Application à la pollution de l'atmosphère*

Soutenue le mardi 12 juillet 2005

Jury : MM.

CHOLLET J. P., Professeur, Université Joseph Fourier, Grenoble I
GENCE J.-N., Professeur, Université Claude Bernard, Lyon I
GOROKHOVSKI M., Professeur, Université de Rouen
MESTAYER P., Directeur de Recherche CNRS, Ecole Centrale de Nantes
OESTERLÉ B., Professeur, Université Henri Poincaré, Nancy I
PINHO BRASIL JUNIOR A.C., Professeur, Université de Brasilia
SIMOËNS S., Chargé de Recherche CNRS, Ecole Centrale de Lyon
WALLACE J.M., Professeur, University of Maryland

Je tiens à remercier avant tout Serge Simoëns d'avoir dirigé cette thèse. Sans son soutien amical et tous les efforts qu'il a su me consacrer, ce travail n'aurait pas abouti.

Je remercie aussi chaleureusement Michel Ayrault pour m'avoir donné envie de faire une thèse, suite à mon séjour à Tsinghua. Je le remercie également de m'avoir soutenu et conseillé dans la suite.

Mes remerciements vont par ailleurs à Monsieur J.-P. Chollet, pour avoir accepté d'être rapporteur de cette thèse, ainsi qu'à Monsieur M. Gorokhovski, également rapporteur, pour le travail que nous avons réalisé ensemble. Je tiens à remercier l'ensemble des membres du jury, en particulier Messieurs J. Wallace et A.C. Pinho Brasil Junior, venus de loin. En outre, je remercie Monsieur J.-N. Gence pour ses nombreux conseils tout au long de cette thèse.

Danke Lukas et Nathalie, grazie Valeria, gracias Sam et Xavier pour tous les bons moments partagés au labo et surtout ailleurs. Un saludo especial para Cesar y su familia. Mille mercis pour tous les autres amis du labo.

Hvala roditeljima i najbližima za svakodnevnu podršku i sto puta hvala Eriku na strpljenju i pažnji.

Enfin, je remercie tout le personnel du L.M.F.A. pour l'accueil.

RESUME

Afin de simuler la dispersion atmosphérique de polluants (scalaires passifs ou particules) et de prédire les pics de pollution et les interactions entre particules (collisions, coalescence et fragmentation, ...), nous avons choisi d'utiliser une simulation des grandes échelles. Cette démarche est particulièrement intéressante pour simuler la dispersion, les réactions chimiques, les interactions entre particules et le mélange turbulent, parce qu'elle permet la prise en compte de l'évolution séparée des grandes échelles ne participant pas nécessairement à une dynamique modélisable simplement.

Cependant, de nombreux processus physico-chimiques ont lieu à une échelle beaucoup plus petite que l'échelle minimale résolue par la simulation des grandes échelles. Il est donc nécessaire de modéliser le comportement sous-maille du scalaire passif et des particules transportées. Pour ceci, la simulation des grandes échelles est couplée avec une équation stochastique de LANGEVIN. Le modèle stochastique est reformulé en terme de grandeurs filtrées et il est exprimé uniquement en fonction des grandeurs obtenues par la simulation des grandes échelles. Ce couplage est appliqué à la simulation de la dispersion d'un panache de scalaire passif issu d'une source élevée. L'ensemble est confronté à l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

L'équation de mouvement d'une sphère rigide dans un écoulement turbulent est introduite. Des particules solides et des gouttelettes sont suivies. Dans l'équation de transport des particules par un écoulement non uniforme, la vitesse du fluide à la position de la particule est donnée par une partie grande échelle et une partie sous-maille. La vitesse sous-maille des particules est déterminée par analogie avec le modèle stochastique de sous-maille pour le scalaire passif. La modification de l'écoulement par la présence des particules ainsi que les collisions interparticulaires sont prises en compte. L'ensemble est confronté aux expériences de laboratoire de NALPANIS et al. (1993) et de TANIÈRE et al. (1997) relatives au transport de particules de sable et à l'érosion éolienne.

Un modèle probabiliste de coalescence et de fragmentation, inspiré du modèle stochastique de fragmentation de APTE et al. (2003), est développé. On considère le phénomène de coalescence et fragmentation sous l'hypothèse de symétrie d'échelle, initialement proposée par KOLMOGOROV (1941). Dans ces conditions, l'évolution de la distribution de taille des gouttelettes satisfait une équation de FOKKER-PLANCK. A chaque pas de temps, la distribution de taille des gouttelettes au sein de la maille est donnée par la solution de cette équation. Les paramètres du modèle sont calculés de manière locale et instantanée, en fonction de la dynamique des gouttelettes. Au sein de chaque maille, la conservation de la masse est appliquée. Le modèle est développé pour une turbulence homogène isotrope et confronté aux résultats de HO & SOMMERFELD (2002) pour le seul cas de la coalescence, à ceux de APTE et al. (2003) pour la fragmentation et à ceux de LASHERAS et al. (1998) pour un cas mixte. Une fois la validation terminée, le modèle est introduit dans la simulation des grandes échelles et l'ensemble est appliqué à la dispersion d'un panache de gouttelettes. Les résultats sont comparés aux profils expérimentaux relatifs à un scalaire passif. Il est en effet difficile d'obtenir des données complètes, relatives au transport atmosphérique de gouttelettes.

Afin de mieux comprendre les mécanismes de transport des particules solides ou liquides dans un écoulement de couche limite, l'évolution d'un ensemble de particules qui initialement sont distribuées uniformément dans l'écoulement, est étudiée. Ce cas test simple représente une première approche dans la compréhension des phénomènes ayant lieu à l'intérieur des vents de sable ou lorsque un brouillard se lève sous les effets du vent. La taille et la périodicité des zones de concentration et sédimentation préférentielle sont répertoriées. Ces régions de forte concentration représentent un intérêt majeur pour l'étude de la pollution, car elles peuvent être à l'origine des pics de pollution dans une atmosphère peu polluée par ailleurs.

ABSTRACT

In order to study atmospheric pollution and the dispersion of industrial stack emissions, a large eddy simulation with the dynamic Smagorinsky-Germano subgrid-scale model is coupled with Lagrangian tracking of fluid particles containing scalar, solid particles and droplets.

The movement of fluid particles at a subgrid level is given by a three-dimensional LANGEVIN model. The stochastic model is written in terms of subgrid-scale statistics at a mesh level. By introducing a diffusion model, the coupling between the large-eddy simulation and the modified three-dimensional LANGEVIN model is applied to passive scalar dispersion. The results are validated by comparison with the wind-tunnel experiments of FACKRELL & ROBINS (1982).

The equation of motion of a small rigid sphere in a turbulent flow is introduced. Solid particles and droplets are tracked in a Lagrangian way. The velocity of solid particles and droplets is considered to have a large scale component (directly computed by the large-eddy simulation) and a subgrid scale part. Because of inertia and gravity effects, solid particles and droplets, deviate from the trajectories of the surrounding fluid particles. Therefore, a modified Lagrangian correlation timescale is introduced into the LANGEVIN model previously developed for the subgrid velocity of fluid particles. Two-way coupling and collisions are taken into account. The results of the large-eddy simulation with solid particles are compared with the wind-tunnel experiments of NALPANIS et al. (1993) and of TANIÈRE et al. (1997) on sand particles in saltation and in modified saltation, respectively.

A model for droplet coalescence and breakup is implemented which allows to predict droplet interactions under turbulent flow conditions in the frame of the Euler/Lagrange approach. Coalescence and breakup are considered as a stochastic process with simple scaling symmetry assumption for the droplet radius, initially proposed by KOLMOGOROV (1941). At high-frequency of breakup/coalescence phenomena, this stochastic process is equivalent to the evolution of the probability density function of droplet radii, which is governed by a FOKKER-PLANCK equation. The parameters of the model are obtained dynamically by relating them to the local resolved properties of the dispersed phase compared to the main fluid. Within each grid cell, mass conservation is applied. The model is validated by comparison with the agglomeration model of HO & SOMMERFELD (2002), the stochastic model for secondary breakup of APTE et al. (2003) and the experimental results on secondary breakup in a coaxial jet of LASHERAS et al. (1998). The large-eddy simulation coupled with Lagrangian particle tracking and the model for droplet coalescence and breakup is applied to the study of the atmospheric dispersion of wet cooling tower plumes. The simulations are done for different droplet size distributions and volume fractions. We focused on the influence of these parameters on mean concentration, concentration variance and mass flux profiles.

In order to gain insight into the transport of solid particles and droplets in a turbulent boundary layer flow, the evolution of particles that were initially distributed in an uniform way in the flow, is analysed. This simple test case represents a first approach for understanding the phenomena that take place within large clouds of pollution, sand storms or when fog disappears under the influence of a rising wind. The period and the size of regions of preferential concentration are determined. This regions are of particular interest in the study of atmospheric dispersion of particles because they can lead to pollution peaks in an otherwise, not polluted atmosphere.

Table des matières

Notations	15
Introduction	24
1 Pollution et physico-chimie de l'atmosphère	29
1.1 Aérosols	29
1.1.1 Généralités	29
1.1.2 Origine des particules	30
1.1.3 Cycle des particules	30
1.1.4 Formation, durée de vie et disparition des particules atmosphériques	31
1.1.5 Impact des particules atmosphériques sur l'environnement	34
1.2 La dynamique de l'atmosphère	36
1.2.1 La couche limite atmosphérique	36
1.2.2 La couche limite urbaine	38
1.2.3 La canopée urbaine	39
1.3 Notre approche et modélisation	42
1.3.1 Simulation des grandes échelles	42
1.3.2 Couplage d'un modèle stochastique de sous-maille avec une simulation des grandes échelles	42
1.3.3 Modèle de coalescence/fragmentation	43
1.3.4 Plan de l'étude	43
2 Simulation des grandes échelles	45
2.1 Hypothèses de base et approximations	45
2.2 Équations du modèle	46
2.2.1 État de référence	46
2.2.2 Équations de quantité de mouvement	46
2.2.3 Équation d'évolution de la perturbation de pression	47
2.2.4 Équation d'évolution de la perturbation de température potentielle	48
2.2.5 Diffusion artificielle	48
2.3 Modèle de turbulence	48
2.3.1 Équations filtrées	48
2.3.2 Modèles de sous-maille	49
2.4 Paramétrisation des flux	54
2.5 Grille de discrétisation spatiale	54
2.6 Schéma temporel	54
2.7 Conditions aux limites	55
2.7.1 Conditions latérales	56

2.7.2	Conditions au sol et au sommet	57
2.7.3	Couche de RAYLEIGH	57
2.8	Application à la couche limite de FACKRELL & ROBINS (1982)	58
2.8.1	Caractéristiques de la couche limite	58
2.8.2	Résultats et comparaisons	59
3	Couplage d'un modèle stochastique lagrangien sous-maille avec la simulation des grandes échelles	64
3.1	Introduction	64
3.2	Modèles stochastiques en turbulence inhomogène isotrope	65
3.2.1	Introduction et démarche générale	65
3.2.2	Modèle stochastique en turbulence inhomogène, formulation continue	65
3.2.3	Équation de FOKKER-PLANCK	66
3.2.4	Détermination des coefficients α_{ij} , β_{ij} et γ_i	68
3.3	Modèle stochastique couplé avec une SGE	70
3.3.1	Équation de FOKKER-PLANCK	71
3.3.2	Moments eulériens et grandeurs filtrées	72
3.3.3	Suivi lagrangien de particules fluides et schéma d'interpolation	74
3.4	Validation - dispersion de scalaire passif	74
3.4.1	Résultats - caractéristiques du panache et concentration moyenne	74
3.4.2	Résultats - variance de concentration	77
3.4.3	Résultats - moments d'ordre supérieur et densité de probabilité de présence	78
3.4.4	Résultats - flux de masse	78
4	Transport de particules solides et de gouttelettes	86
4.1	Équation du mouvement d'une particule isolée	87
4.1.1	Équation du mouvement d'une sphère rigide dans un écoulement non uniforme, MAXEY & RILEY (1983)	87
4.1.2	Les forces appliquées à une sphère rigide dans un écoulement non uniforme	88
4.1.3	Cas d'une particule solide ou d'une gouttelette	90
4.1.4	Le cas étudié dans cette thèse	91
4.2	Modélisation du transport sous-maille des particules	92
4.2.1	Transport des particules et simulation des grandes échelles	92
4.2.2	Suivi lagrangien de particules fluides	95
4.2.3	Modèle stochastique modifié	96
4.3	Influence des particules sur l'écoulement du fluide	99
4.3.1	Modulation de la turbulence par les particules	100
4.3.2	Termes sources pour la vitesse moyenne	101
4.3.3	Termes sources traduisant la modulation de la turbulence	102
4.4	Collisions inter-particules	105
4.4.1	Introduction	105
4.4.2	Importance des collisions interparticulaires	105
4.4.3	Occurrence des collisions	106
4.4.4	Génération du partenaire de collision	107
4.4.5	Modification de la vitesse des particules due aux collisions	107
4.5	Interactions au sol	108
4.6	Application à l'érosion éolienne	108
4.6.1	Mécanismes de transport et érosion éolienne	108

4.6.2	Nombres adimensionnels et classification des différents modes de transport . . .	113
4.6.3	Validation du couplage - simulation des particules en saltation et comparaison avec l'expérience de NALPANIS et al. (1993)	114
4.6.4	Simulation des particules en saltation modifiée, comparaison avec l'expérience de TANIÈRE et al. (1997)	121
5	Modèle de coalescence/fragmentation	128
5.1	Revue des modèles de coalescence	129
5.1.1	Modélisation de la coalescence par une approche déterministe, HO & SOMMERFELD (2002)	129
5.1.2	Modélisation déterministe de la coalescence au coeur d'un jet, LASHERAS et al. (1998)	131
5.1.3	Modélisation de la coalescence par une approche globale	132
5.2	Revue des modèles de fragmentation	135
5.2.1	Modélisation de la fragmentation par une approche probabiliste, APTE et al. (2003) et GOROKHOVSKI & SAVELIEV (2003)	135
5.2.2	Fragmentation secondaire au coeur d'un jet, LASHERAS et al. (1998)	137
5.2.3	Autres modèles de fragmentation secondaire	137
5.3	Revue des expériences sur la collision des gouttes	142
5.3.1	L'expérience de ADAM et al. (1968)	144
5.3.2	L'expérience de BRAZIER-SMITH et al. (1972)	145
5.3.3	L'expérience de ASHGRIZ & POO (1990)	145
5.3.4	L'expérience de QIAN & LAW (1997)	146
5.4	Le modèle de coalescence/fragmentation	149
5.4.1	Approche probabiliste et équation d'évolution de la d.d.p. de taille des gouttelettes	149
5.4.2	Structure du modèle	150
5.4.3	Choix des paramètres $\langle \xi \rangle$ et $\langle \xi^2 \rangle$	151
5.4.4	Fréquence de coalescence/fragmentation	151
5.5	Validation du modèle	152
5.5.1	Coalescence dans une turbulence homogène et isotrope, comparaison avec le modèle de HO & SOMMERFELD (2002)	152
5.5.2	Atomisation d'un spray, comparaison avec le modèle de APTE et al. (2003)	153
5.5.3	Fragmentation dans un jet coaxial, comparaison avec l'expérience de LASHERAS et al. (1998)	157
5.6	Application à la dispersion d'un panache de gouttelettes	159
5.6.1	Distribution de taille, d.d.p. de vitesse relative et d.d.p. du nombre de WEBER	159
5.6.2	Concentration moyenne	161
5.6.3	Variance de concentration	161
5.6.4	Flux de masse	161
6	Analyse du transport de particules solides ou liquides dans un écoulement de couche limite	166
6.1	Analyse du champ de vitesse	167
6.1.1	Description du champ de vitesse	167
6.1.2	Autocorrélations du champ de vitesse et comparaisons avec les résultats expérimentaux de KROGSTAD & ANTONIA (1994)	167
6.2	Analyse du champ de concentration de particules solides	175
6.2.1	Description du champ de concentration	177

6.2.2	Distribution des particules et concentration préférentielle	182
	Conclusion	187
	Annexes	190
I	Méthodes d'interpolation	191
I.1	Schéma d'interpolation tri-linéaire des polynômes quadratiques de LAGRANGE	191
I.2	Méthode d'interpolation barycentrique	192
II	Dispersion de scalaire passif	196
II.1	Influence du schéma d'interpolation	196
II.2	Correction du modèle stochastique	196
II.3	Source au sol	198
II.4	Prise en compte de la diffusion	198
III	Particules solides en saltation - étude de paramètres	202
III.1	Vitesse extérieure	202
III.2	Paramètres d'envol, rebond et éjection	202
III.3	Collisions et <i>"two-way coupling"</i>	204
III.4	Modèle stochastique de sous-maille	206
IV	Dispersion d'un panache de gouttelettes	208
IV.1	Émission par bouffées	208
IV.2	Fraction volumique élevée	208
V	Reconnaissance de structures tourbillonnaires à l'aide du critère $\Gamma_2(\vec{x})$	211
	Bibliographie	213

Table des figures

1.1	Les trois composantes de l'aérosol atmosphérique, RENOUX & BOULAND (1998).	32
1.2	Mode de dépôt des particules atmosphériques en fonction de leur taille, MADELAINE (1982).	33
1.3	Pénétration des particules dans l'appareil respiratoire, d'après CITEPA (2000)	35
1.4	Structure de la couche limite atmosphérique STULL (1988)	36
1.5	Structure de la couche limite urbaine MESTAYER & ANQUETIN (1994)	39
1.6	Structure des écoulements derrière des bâtiments OKE (1988)	40
2.1	Schéma d'une maille de calcul avec le positionnement des variables du modèle de type Arakawa C-grid.	55
2.2	Profils verticaux de vitesse moyenne à $x = 3.3\delta$	60
2.3	Profils verticaux de l'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse $x = 3.3\delta$	61
2.4	Profils verticaux de vitesse moyenne à $x = 5\delta$	62
2.5	Profils verticaux de l'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse $x = 5\delta$	63
3.1	Représentation instantanée du panache.	75
3.2	Profils verticaux de concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$	76
3.3	Concentration maximale, concentration au sol et demie-largeur du panache	77
3.4	Profils verticaux de variance de concentration rapportée à sa valeur maximale à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$	79
3.5	Densité de probabilité de présence de la concentration à $y/\delta = 0$, pour différentes hauteurs et différentes distances du sol.	80
3.6	Skewness en fonction du kurtosis.	80
3.7	Profils verticaux de flux de masse à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$	82
3.8	Profils verticaux du coefficient de diffusion turbulente scalaire à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$	83
3.9	Profils verticaux de flux de masse, $\overline{w\bar{c}}$ et du modèle $-k_z\partial\bar{C}/\partial z$ à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$	85
4.1	Classification selon ELGHOBASHI (1994) des écoulements particulaires établie pour une turbulence homogène isotrope.	101
4.2	Différents modes de transport des particules de sable.	109
4.3	Profils verticaux de vitesse moyenne, d'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse à $x = 20\delta$	116
4.4	Profils verticaux de vitesse moyenne, d'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse à $x = 30\delta$	117
4.5	Profils verticaux de concentration des particules solides à $x = 20\delta$ et à $x = 30\delta$	119
4.6	Évolution de la hauteur de saltation.	120

4.7	Évolution de la vitesse d'impact.	120
4.8	Évolution de l'angle d'impact.	121
4.9	Nombres caractéristiques du système pour deux hauteurs de couche limite et pour deux sortes de particules.	122
4.10	Profils verticaux de vitesse moyenne, d'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse à $x = 27\delta$	124
4.11	Profil vertical de vitesse moyenne des particules.	125
4.12	Profil vertical de fluctuation de vitesse des particules.	126
4.13	Profil vertical de concentration des particules.	126
5.1	Efficacité de collision dans le modèle de HO & SOMMERFELD (2002)	130
5.2	Configuration de collision interparticulaire dans le modèle de HO & SOMMERFELD (2002)	130
5.3	Modes de fragmentation d'une goutte en fonction du nombre de WEBER, PILCH & ERDMAN (1987).	138
5.4	Rebond, coalescence, rupture ou fragmentation suite à la collision de deux gouttes, ORME (1997).	143
5.5	Exemples de collisions entre gouttelettes illustrant l'effet de la vitesse d'impact et de l'angle d'impact, ORME (1997).	144
5.6	Schéma des paramètres de collision, ORME (1997).	145
5.7	Schéma des différents régimes de collision possibles pour les gouttelettes d'eau, ADAM et al. (1968).	146
5.8	Schéma des différents régimes de collision pour les gouttelettes d'eau, ASHGRIZ & POO (1990).	148
5.9	Schéma des différents régimes de collision pour les gouttelettes d'hydrocarbure.	148
5.10	Densité de probabilité de présence de la vitesse relative entre deux gouttelettes pour différentes valeurs de l'énergie cinétique turbulente.	153
5.11	Évolution en temps de la distribution de taille des gouttelettes en coalescence.	154
5.12	Évolution en temps du diamètre de SAUTER pour trois vitesses du jet d'eau.	156
5.13	Évolution en temps du diamètre de SAUTER pour trois vitesses du jet d'eau.	158
5.14	Distribution de taille, d.d.p. de vitesse relative et d.d.p. du nombre de WEBER pour les gouttelettes de $d_p = 60\mu m$, à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$	160
5.15	Distribution de taille, d.d.p. de vitesse relative et d.d.p. du nombre de WEBER pour les gouttelettes de $d_p = 12\mu m$, à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$	160
5.16	Profils verticaux de concentration moyenne de gouttelettes rapportée à sa valeur maximale à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$	162
5.17	Profils verticaux de variance de concentration des gouttelettes rapportée à sa valeur maximale à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$	163
5.18	Profils verticaux de flux de masse des gouttelettes à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$	164
6.1	Visualisation de la composante longitudinale de la vitesse instantanée.	168
6.2	Isocontours de l'autocorrélation de la vitesse longitudinale u et transverse v dans le plan (xy) à $z/\delta = 0.24$	172
6.3	Isocontours de l'autocorrélation de la vitesse longitudinale u et verticale w dans le plan (xz) à $y/\delta = 1.13$	173
6.4	Isocontours de l'autocorrélation de la vitesse longitudinale u et verticale w dans le plan (xz) à $y/\delta = 1.13$	174

6.5	Évolution en fonction de z de la taille de l'isocontour 0.3 de l'autocorrélation de la vitesse longitudinale u et transverse v dans le plan (xy)	176
6.6	Visualisation de la concentration instantanée de particules solides de $37\mu m$ de diamètre.	179
6.7	Visualisation de la concentration instantanée de particules solides de $7.4\mu m$ de diamètre.	180
6.8	Visualisation de la concentration instantanée de particules solides de $37\mu m$ de diamètre sans modèle stochastique en sous-maille.	181
6.9	Densité de probabilité de présence du nombre de particules par boîte du plan (xy) à $z/\delta = 0.04$	184
6.10	Densité de probabilité de présence du nombre de particules par boîte du plan (xy) à $z/\delta = 0.3$	185
I.1	Schéma d'interpolation tri-linéaire des polynômes quadratiques de LAGRANGE.	193
I.2	Schéma d'interpolation barycentrique.	195
II.1	Profils verticaux de concentration moyenne de gouttelettes rapportée à sa valeur maximale.	197
II.2	Profils verticaux de concentration moyenne de scalaire passif rapportée à sa valeur maximale.	199
II.3	Profils verticaux de concentration moyenne de scalaire passif rapportée à sa valeur maximale.	200
II.4	Profils verticaux de concentration moyenne de scalaire passif rapportée à sa valeur maximale.	201
III.1	Particules en saltation pour différentes vitesses de l'écoulement extérieur.	203
III.2	Particules en saltation pour différentes conditions d'envol, de rebond et d'éjection.	205
III.3	Particules en saltation sans modèle de collision et sans retour des particules sur l'écoulement porteur.	206
III.4	Particules en saltation - tests sur le modèle stochastique de sous-maille.	207
IV.1	Profils verticaux de concentration moyenne de gouttelettes rapportée à sa valeur maximale.	209
IV.2	Profils verticaux de concentration moyenne de gouttelettes rapportée à sa valeur maximale.	210
V.1	Structures tourbillonnaires et vorticité de l'écoulement.	212

Liste des tableaux

.1	Principaux polluants de l'air ambiant, leurs origines et les effets nocifs sur l'organisme, d'après l'ADEME.	25
1.1	Estimation globale des émissions des principaux aérosols, SEINFELD & PANDIS (1998).	30
4.1	Ordre de grandeur des forces mises en jeu dans le mouvement d'une particule dans une couche limite.	91
4.2	Caractéristiques des particules étudiées.	122
5.1	Temps de désintégration d'une gouttelette en fonction du nombre de WEBER, modèle de PILCH & ERDMAN (1987).	141
5.2	Résumé des expériences sur le rebond, la coalescence et la rupture des gouttelettes.	147
5.3	Caractéristiques de la turbulence et des particules étudiées.	152
5.4	Caractéristiques du jet coaxial étudié.	155
5.5	Modifications de K_2 et ν_c afin d'ajuster les évolutions du diamètre de SAUTER.	156
5.6	Caractéristiques du jet coaxial étudié, LASHERAS et al. (1998).	158
6.1	Caractéristiques des deux couches limites étudiées par KROGSTAD & ANTONIA (1994)	169
6.2	Écarts relatifs entre les résultats de nos simulations et les expériences de KROGSTAD & ANTONIA (1994) pour différents isocontours du plan (xy)	171
6.3	Écarts relatifs entre les résultats de nos simulations et les expériences de KROGSTAD & ANTONIA (1994) pour différents isocontours du plan (xz)	171
6.4	Caractéristiques des particules solides	177

Notations

Lettres latines

Symbole	Unité	Définition
a_i	$m s^{-2}$	coefficient intervenant dans le modèle stochastique, $a_i = \gamma_i + \alpha_{ij}(v_j - \bar{u}_j)$
A	$kg m^2 s^{-2}$	la constante de HAMAKER, $A = 5.0 \times 10^{-19} kg m^2 s^{-2}$
b	–	paramètre d'impact
b_{ij}	$m s^{-1}$	coefficient du terme aléatoire intervenant dans le modèle stochastique
B	$m s^{-2}$	terme de flottabilité dans les équations de ARPS
c'	$g m^{-3}$	fluctuation de concentration
c_s	$m s^{-1}$	vitesse du son de référence
c_ϕ	$m s^{-1}$	vitesse de phase
C	$g m^{-3}$	concentration du scalaire
C_D	–	coefficient de traînée
C_p	$m^2 s^{-2} K^{-1}$	chaleur spécifique de l'air sec à pression constante ($C_p = 1004 m^2 s^{-2} K^{-1}$)
C_s	–	constante de SMAGORINSKY dans le modèle de sous-maille SMAGORINSKY (1963)
C_{bag}	–	constante dans le modèle de fragmentation de PILCH & ERDMAN (1987)
C_{dm}	–	coefficient de transfert de quantité de mouvement
C_{dh}	–	coefficient de transfert de chaleur sensible
C_ϵ	–	coefficient de dissipation dans le modèle de sous-maille 1.5 tke
C_k	–	coefficient d'énergie cinétique turbulente dans le modèle de sous-maille 1.5 tke
C_{strip}	–	constante dans le modèle de fragmentation de PILCH & ERDMAN (1987)
C_v	$m^2 s^{-2} K^{-1}$	chaleur spécifique de l'air sec à volume constant ($C_v = 718 m^2 s^{-2} K^{-1}$)
C_{SL}	–	constante locale et instantanée dans le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991)
C_0	–	constante de KOLMOGOROV
C_{max}	$g m^{-3}$	concentration maximale

Symbole	Unité	Définition
D	$m^2 s^{-2}$	fonction de structure temporelle du champ de vitesse
D_g	m	diamètre du jet de gaz dans un jet coaxial
D_l	m	diamètre du jet liquide dans un jet coaxial
D_{Ray}	$m s^{-2}$	terme de dissipation dans la couche d'amortissement de RAYLEIGH
d_{cr}	m	diamètre critique
d_{init}	m	diamètre initiale de la distribution de gouttelettes
d_p	m	diamètre des particules solides et des gouttelettes
d_s	m	diamètre de la source de scalaire
d_{sauter}	m	diamètre de SAUTER donné par l'équation (5.66)
d_{max}	m	diamètre limite critique dans le modèle de coalescence de LASHERAS et al. (1998)
dt	s	grand pas de temps dans ARPS
e	–	coefficient de restitution pour un choc inélastique entre deux particules, $e = 0.4$
E_i	$kg m^2 s^{-2}$	énergie cinétique moyenne d'une particule de classe i
$f(r; t)$	–	distribution de taille des gouttelettes
$f(Re_p)$	–	terme de correction du coefficient de traînée
f_c	s^{-1}	fréquence de collision
f_d	–	coefficient de frottement dynamique pour un choc inélastique avec frottement
f_0	–	coefficient de frottement statique pour un choc inélastique avec frottement
\vec{f}^{SGS}	$m kg s^{-2}$	force supplémentaire due aux fluctuations de sous-maille, exercée sur les particules solides ou sur les gouttelettes dans le modèle de FUKAGATA (2000)
\vec{g}	$m s^{-1}$	accélération de la pesanteur $(g_1, g_2, g_3) = (0, 0, g)$, avec $g = 9.81m s^{-1}$
g_{ij}	m^3	distribution radiale des particules dans le modèle de collision de particules de READE & COLLINS (2000)
G	m^{-1}	filtre physique dans ARPS
h_{max}	m	hauteur des bonds pour le sable en saltation
H	m	hauteur de la couche limite
k	$m^2 s^{-2}$	énergie cinétique turbulente
k_v	–	constante de VON KARAMAN
k_z	$m^2 s^{-1}$	coefficient de diffusion turbulente du scalaire
K	–	coefficient d'aplatissement
K_m	$m^2 s^{-1}$	viscosité turbulente de sous-maille
K_{ij}	$m^3 s^{-1}$	taux de collision entre les particules de classe i et les particules de classe j
K_θ	$m^2 s^{-1}$	diffusivité turbulente de sous-maille
K_{H_2}	–	coefficient de mélange artificiel horizontal d'ordre 2
K_{H_4}	–	coefficient de mélange artificiel horizontal d'ordre 4
K_{V_2}	–	coefficient de mélange artificiel vertical d'ordre 2
K_{V_4}	–	coefficient de mélange artificiel vertical d'ordre 4
l	m	longueur de mélange sous-maille
l_0	m	longueur du plat nécessaire pour générer une couche limite δ

Symbole	Unité	Définition
L_{ij}	$m^2 s^{-2}$	tenseur de LEONARD dans le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991)
m	—	rapport de flux de masse entre le jet d'air et le jet d'eau dans un jet coaxial
m_f	kg	masse d'une particule fluide
m_p	kg	masse d'une particule solide ou d'une gouttelette
M_{ij}	$m^2 s^{-2}$	tenseur de sous-maille du filtre test et du champ résolu dans le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991)
n_i	m^{-3}	nombre de particules de classe i par unité de volume
n_p	m^{-3}	nombre de particules par unité de volume
N	s^{-1}	fréquence de BRUNT-VÄISÄLÄ
N_p	—	nombre total de particules dans le domaine d'étude
p	P_a	pression instantanée
p_L	$m^{-6} s^3$	densité de probabilité de présence dans l'espace des phases d'une particule fluide
p_{L1}	m^{-3}	densité de probabilité de présence d'une particule fluide
p_{ij}	m	d.d.p. de la distance entre deux gouttes de classe i et j dans le modèle de collision de particules de READE & COLLINS (2000)
$\mathcal{P}_{\mathcal{L}}$	$m^{-6} s^3$	densité de probabilité de présence locale (relative à une maille) dans l'espace des phases d'une particule fluide
p_r	P_a	état de référence pour la pression dans ARPS
P_{coll}	—	probabilité pour qu'une particule solide ou une gouttelette rentrent en collision avec une autre particule
$P_{j\theta}$	$K m s^{-1}$	tenseur de sous-maille de flux de température potentielle pour le filtre test et le champ résolu dans le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991)
P_{pl}	P_a	pression limite de contact, $P_{pl} = 5.0 \times 10^9 P_a$
Pr	—	nombre de PRANDTL
Pr_t	—	nombre de PRANDTL turbulent
$Q(\alpha)$	—	d.d.p. de présence de α
r	m	rayon des gouttelettes
r_{stable}	m	rayon critique dans le modèle de fragmentation de REITZ & DIWAKAR (1987)
Re_p	—	nombre de REYNOLDS relatif associé à l'écoulement autour d'une particule
Re_τ	—	nombre de REYNOLDS de l'écoulement obtenu à partir de u_* et δ
$R_{j\theta}$	$K m s^{-1}$	tenseur de sous-maille de flux de température potentielle pour le filtre test et le champ résolu dans le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991)
S	—	skewness
S_{ij}	s^{-1}	taux de déformation de l'écoulement
S_k	$m^2 s^{-4}$	terme source pour l'énergie cinétique turbulente induit par la présence de particules solides ou de gouttelettes dans l'écoulement

Symbole	Unité	Définition
S_{u_i}	$m s^{-2}$	terme source pour la vitesse moyenne induit par la présence de particules solides ou de gouttelettes dans l'écoulement
St_L	–	nombre de STOKES défini à partir de l'échelle intégrale T_L
St_η	–	nombre de STOKES défini à partir de l'échelle de KOLMOGOROV τ_η
t_{coll}	s	temps caractéristique de collision entre deux gouttes dans le modèle de coalescence de LASHERAS et al. (1998)
t_{strip}	s	temps caractéristique dans le modèle de fragmentation de REITZ & DIWAKAR (1987)
T	s	constante de désintégration d'une gouttelette dans le modèle de fragmentation de PILCH & ERDMAN (1987)
T_a	s	échelle de temps intégrale de l'accélération
T_{air}	s	temps caractéristique de l'écoulement de la couche d'air entre deux gouttelettes en contact dans le modèle de coalescence de LASHERAS et al. (1998)
T_{mE}	s	temps intégral eulérien dans un référentiel mobile
T_E	s	temps intégral eulérien de la vitesse
T_{ij}	$m^2 s^{-2}$	tenseur de sous-maille pour le filtre test dans le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991)
$T_{j\theta}$	$K m s^{-1}$	tenseur de sous-maille de flux de température potentielle pour le filtre test dans le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991)
T_L	s	échelle de temps intégrale de la vitesse
T_L^p	s	échelle intégrale de la particule fluide à la position de la particule solide ou de la gouttelette
u_*	$m s^{-1}$	vitesse de frottement à la surface
\vec{u}	$m s^{-1}$	vecteur vitesse du fluide
\vec{u}^{vol}	$m s^{-1}$	vecteur vitesse du fluide localement non perturbé par la particule solide ou la gouttelette, intégré sur le volume
\vec{u}^{surf}	$m s^{-1}$	vecteur vitesse du fluide localement non perturbé par la particule solide ou la gouttelette, intégré sur la surface
\vec{u}_{rel}	$m s^{-1}$	vecteur vitesse relative entre deux gouttelettes
u_{relcr}	$m s^{-1}$	vitesse relative critique entre deux gouttelettes
\vec{u}_r	$m s^{-1}$	vecteur vitesse de la gouttelette par rapport au fluide environnant
$u_{r,j}$	$m s^{-1}$	vitesse de la gouttelette par rapport au fluide environnant dans la direction j
u_s	$m s^{-1}$	vitesse caractéristique des échelles de sous-maille dans le modèle de FUKAGATA (2000)
U_g	$m s^{-1}$	vitesse du gaz dans un jet coaxial
U_e	$m s^{-1}$	vitesse extérieure dans un écoulement de couche limite
U_l	$m s^{-1}$	vitesse du liquide dans un jet coaxial
\vec{U}_g	$m s^{-1}$	vent géostrophique $(U_{g1}, U_{g2}, U_{g3}) = (U_g, V_g, 0)$
\vec{v}	$m s^{-1}$	vecteur vitesse de la particule fluide
\vec{v}_p	$m s^{-1}$	vecteur vitesse de la particule solide ou de la gouttelette
v_{cr}	$m s^{-1}$	vitesse relative critique dans le modèle de coalescence de HO & SOMMERFELD (2002)

Symbole	Unité	Définition
\vec{v}_{lim}	$m s^{-1}$	vecteur vitesse de chute d'une particule solide ou d'une gouttelette ($\vec{v}_{lim} = \tau_p \vec{g}$)
v_{ej}	$m s^{-1}$	norme de la vitesse des nouvelles particules mises en mouvement par l'impact d'une particule solide
v_{imp}	$m s^{-1}$	norme de la vitesse des particules solides ou des gouttelettes avant l'impact au sol
v_{reb}	$m s^{-1}$	norme de la vitesse des particules solides ou des gouttelettes après l'impact au sol
V	m^3	volume du domaine d'étude
V_g	$m s^{-1}$	composante transversale du vent géostrophique
V_p	m^3	volume d'une particule solide ou d'une gouttelette
V_{maille}	m^3	volume d'une maille
w_{ij}	$m s^{-1}$	vitesse radiale entre deux particules de classe i et j dans le modèle de collision de particules de READE & COLLINS (2000)
We	—	nombre de WEBER
$We_{r,j}$	—	nombre de WEBER calculé en fonction de la vitesse de la gouttelette par rapport au fluide environnant dans la direction j
We_{rel}	—	nombre de WEBER calculé en fonction de la vitesse relative entre deux gouttelettes
We_{relcr}	—	nombre de WEBER critique calculé en fonction de la vitesse relative entre deux gouttelettes
x	m	coordonnée longitudinale
\vec{x}	m	vecteur position de la particule fluide
$\vec{x}^{(m)}$	m	vecteur position du centre de la maille où se trouve la particule fluide
$\vec{x}^{(pm)}$	m	vecteur position de la particule fluide par rapport au centre de la maille
\vec{x}_p	m	vecteur position d'une particule solide ou d'une gouttelette
$\vec{\mathcal{X}}$	$[\vec{\mathcal{X}}]$	vecteur position de la particule fluide dans l'espace des phases, $\vec{\mathcal{X}} = (\vec{x}, \vec{v})$
y	m	coordonnée transversale
y_c	m	distance radiale de la plus petite goutte à l'axe du mouvement relatif des deux gouttes en collision au moment de l'impact dans le modèle de coalescence de HO & SOMMERFELD (2002)
z	m	coordonnée verticale
z_0	m	hauteur de rugosité
z_1	m	hauteur de la première maille
z_d	m	hauteur de déplacement
z_s	m	hauteur de la source
z_T	m	hauteur du sommet du domaine
z_{ct}	m	distance de contact dans le modèle de coalescence de HO & SOMMERFELD (2002), $z_{ct} = 4.0 \times 10^{-10} m$
z_{Ray}	m	hauteur de base de la couche d'absorption de RAYLEIGH
Z	—	nombre d'OHNESORGE

Lettres grecques

Symbole	Unité	Définition
α	—	rapport de taille entre la gouttelette avant et après coalescence ou fragmentation
α_d	$m^4 kg^{-1} s^{-1}$	coefficient du terme artificiel de divergence dans les équations de quantité de mouvement
α_{ej}	$^\circ$	angle des particules mises en mouvement par l'impact d'une particule solide
α_{imp}	$^\circ$	angle d'impact au sol des particules solides ou des gouttelettes
α_{reb}	$^\circ$	angle de rebond au sol des particules solides ou des gouttelettes
α_F	—	coefficient de sous-maille dans le modèle de FUKAGATA (2000)
α_{ij}	s^{-1}	coefficient intervenant dans le modèle stochastique
α_{Ray}	s^{-1}	fréquence d'amortissement de la couche d'absorption de RAYLEIGH
α_{grav}	—	coefficient de gravité dans le modèle stochastique de sous-maille pour les particules solides ou les gouttelettes
α_{inert}	—	coefficient d'inertie dans le modèle stochastique de sous-maille pour les particules solides ou les gouttelettes
β	—	coefficient de gravité dans le modèle stochastique de sous-maille pour les particules solides ou les gouttelettes, $\beta = 2T_L/T_E$ dans la direction perpendiculaire à la gravité et $\beta = T_L/T_E$ dans les autres directions
η_p	—	efficacité de collision dans le modèle de coalescence de HO & SOMMERFELD (2002)
β_F	—	coefficient de sous-maille dans le modèle de FUKAGATA (2000)
β_{ij}	$m s^{-1}$	coefficient aléatoire intervenant dans le modèle stochastique
δ	m	épaisseur de la couche limite turbulente
δ_{ij}	—	symbole de KRÖNEKER ($\delta_{ij} = 1$ si $i = j$ et $\delta_{ij} = 0$ sinon)
δ_y	m	demie-largeur transversale du panache
δ_z	m	demie-largeur verticale du panache
Δ	m	longueur caractéristique du filtre sous-maille
Δx	m	taille des mailles dans la direction x
Δy	m	taille des mailles dans la direction y
Δz	m	taille des mailles dans la direction z
Δz_{min}	m	taille de la plus petite maille à la paroi dans la direction z
Δz_{moy}	m	taille moyenne des mailles dans la direction z
$\Delta\phi$	$[\phi]$	écart de la variable ϕ à sa valeur de référence ϕ_r
ϵ_{ijk}	—	symbole de LEVI CIVITA
ε	$m^2 s^{-3}$	dissipation turbulente
η_j	—	bruit blanc gaussien isotrope de moyenne nulle et de variance dt

Symbole	Unité	Définition
η_k	m	longueur de KOLMOGOROV
Φ_p	—	fraction volumique des particules solides ou des gouttelettes
γ	—	paramètre de gravité
γ_i	$m s^{-1}$	coefficient déterministe dans le modèle stochastique
λ	$^\circ$	latitude
μ	$kg m^{-1} s^{-1}$	viscosité dynamique du fluide
ν	$m^2 s^{-1}$	viscosité cinématique du fluide
ν_b	s^{-1}	fréquence de fragmentation
ν_c	s^{-1}	fréquence de coalescence et fragmentation
ν_L	s^{-1}	fréquence à laquelle une structure turbulente d'échelle de longueur l est vue par une particule solide ou une gouttelette
ν_{strip}	s^{-1}	fréquence de fragmentation dans le modèle de fragmentation de REITZ & DIWAKAR (1987)
Π	—	efficacité de coalescence dans le modèle de coalescence de LASHERAS et al. (1998)
Π_s	—	paramètre de saltation
σ	$kg m s^{-2}$	tension superficielle, pour l'eau $\sigma = 72.8 kg m s^{-2}$
σ_i	$m s^{-1}$	fluctuation de la $i^{ième}$ composante de la vitesse
σ_s	$m s^{-1}$	écart-type de la vitesse de la particule solide ou de la gouttelette dans le modèle de FUKAGATA (2000)
θ_r	K	état de référence pour la température potentielle dans ARPS
θ_s	K	température potentielle calculée au sol
θ_{2s}	K	température potentielle calculée au premier niveau au-dessus du sol
ρ	$kg m^3$	masse volumique du fluide
ρ_p	$kg m^3$	masse volumique des particules solides et des gouttelettes
ρ_r	$kg m^3$	état de référence pour la masse volumique du fluide dans ARPS
$\rho_{u'u'}$	—	autocorrélation spatiale en deux dimensions de la composante u de la vitesse
$\rho_{v'v'}$	—	autocorrélation spatiale en deux dimensions de la composante v de la vitesse
$\rho_{w'w'}$	—	autocorrélation spatiale en deux dimensions de la composante w de la vitesse
τ_c	s	durée entre deux collisions
τ_f	s	temps caractéristique de l'histoire des particules dans le modèle de collision de ZHOU et al. (1998)
τ_h	s	temps caractéristique d'un bond
τ_p	s	temps de réponse des particules solides et des gouttelettes
τ_η	s	échelle de temps de KOLMOGOROV
τ_{ij}	$m^2 s^{-2}$	tenseur des contraintes sous-maille
$\tau_{i\theta}$	$m K s^{-1}$	tenseur des flux thermiques de sous-maille
$\vec{\omega}$	s^{-1}	vecteur vorticité, $\vec{\omega} = \nabla \times \vec{u}$
Ω	$rad s^{-1}$	vitesse angulaire de la Terre ($\Omega = 7.25 \times 10^{-2} rad s^{-1}$)
$\vec{\Omega}$	$rad s^{-1}$	vecteur rotation de la Terre ($\vec{\Omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) = (\Omega \cos \lambda, \Omega \sin \lambda, 0)$)
Ψ_i	—	paramètre d'inertie dans le modèle de coalescence de HO & SOMMERFELD (2002)
ξ	—	variable aléatoire comprise entre -1 et 1

Indices et exposants

Indices et exposants	Définition
ϕ_{ad}	valeur normalisée de la grandeur ϕ
ϕ_b	grandeur relative à la fragmentation
ϕ_c	grandeur relative à la coalescence
ϕ_{coll}	grandeur relative à la collision de particules
ϕ_{cr}	valeur limite critique de la grandeur ϕ
ϕ_{ej}	valeur de la grandeur ϕ relative à la mise en mouvement des grains de sable
ϕ_E	grandeur eulérienne
ϕ_f	grandeur relative au fluide
ϕ_g	grandeur relative au gaz
ϕ_i	$i^{ième}$ composante du vecteur $\vec{\phi}$
ϕ_{ij}	composante du tenseur ϕ située à la $i^{ième}$ ligne et à la $j^{ième}$ colonne
ϕ_{imp}	valeur de la grandeur ϕ relative à l'impact au sol
ϕ_{init}	valeur de la grandeur ϕ relative à l'instant initial
ϕ_l	grandeur relative au liquide
ϕ_L	grandeur lagrangienne
ϕ_{max}	valeur maximale de la grandeur ϕ
ϕ_p	grandeur relative à la particule solide ou à la gouttelette
ϕ_r	grandeur correspondant au mouvement de la particule solide ou de la gouttelette par rapport au fluide environnant
ϕ_{reb}	valeur de la grandeur ϕ relative au rebond au sol
ϕ_{rel}	grandeur correspondant au mouvement relatif d'une paire de particules solides ou d'une paire de gouttelettes
ϕ_s	grandeur relative à la source
ϕ_η	grandeur relative à l'échelle de KOLMOGOROV
$\phi^{(m)}$	valeur de la grandeur ϕ au centre de la maille
$\phi^{(pm)}$	valeur de la grandeur ϕ par rapport au centre de la maille

Opérateurs et autres notations

Opérateurs	Définition
$\bar{\phi}$	valeur moyenne au sens des statistiques de REYNOLDS de la grandeur ϕ
$\tilde{\phi}$	valeur filtrée de la grandeur ϕ , filtre spatial noté $G(\vec{r})$
$\hat{\phi}$	valeur filtrée de la grandeur ϕ , filtre spatial plus grand que $G(\vec{r})$
ϕ'	fluctuation instantanée par rapport à la valeur moyenne ou à la valeur filtrée de la grandeur ϕ
$ \phi $	norme de la grandeur ϕ

Opérateurs	Définition
$\phi(\vec{x}_p(t), t)$	valeur de la grandeur ϕ à la position $\vec{x}_p(t)$ de la particule solide ou de la gouttelette
$\langle \phi^n \rangle$	moment d'ordre n de la grandeur ϕ obtenu à partir de d.d.p. de présence de ϕ
$\frac{D}{Dt}$	dérivée lagrangienne $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i}$

Introduction

La pollution générée par la circulation automobile au coeur de la ville, par les activités industrielles à sa périphérie et par le chauffage domestique, est un problème important des grandes cités urbaines dans lesquelles nous vivons. Les répercussions sur le bien être de leurs habitants sont nombreuses mais, bien au-delà, ce sont ses conséquences sur la santé publique qui deviennent préoccupantes.

Le problème de la pollution atmosphérique peut être décomposé en trois grandes étapes :

- l'émission des gaz et des particules polluantes,
- la transformation et le transport des polluants comprenant les interactions entre particules ainsi que les réactions chimiques,
- l'impact sur l'environnement et la santé publique.

Une fois émis dans l'atmosphère par les véhicules ou les usines, les polluants, alors dits primaires, sont soumis à deux types de modifications : d'une part ils interagissent ou subissent des réactions chimiques entre eux, ce qui modifie leur concentration et leurs caractéristiques et donne naissance à de nouvelles espèces appelées polluants secondaires ; d'autre part, ils sont transportés dans l'atmosphère par les vents locaux et dominants. Ce transport peut amener au dépôt du polluant sur le sol, les bâtiments, la végétation ou bien à l'accumulation dans certaines zones de la ville.

Un polluant en particulier montre bien le jeu de ces deux derniers phénomènes. Il s'agit de l'ozone O_3 , créée par la photo-dissociation du dioxyde d'azote (NO_2), tout au long de la journée il est transporté à la périphérie de la ville. Apparaissent ainsi des pics de concentration en ozone au milieu de l'après-midi suite à un pic d'émission au début de la matinée correspondant à l'heure de pointe.

Les actions nocives des polluants sur l'organisme, résumées dans le tableau suivant sont nombreuses et de plus ou moins grande gravité. Lors des épisodes de forte concentration en polluants, ce sont en premier lieu les personnes fragiles (nourrissons, personnes âgées, asthmatiques) qui en subissent les conséquences.

Moins graves, mais montrant tout aussi bien la nocivité de la pollution, sont les dégâts causés aux matériaux ou à la végétation. Ce sont les fortes concentrations en particules et fumées qui sont responsables de ce phénomène. Quant à l'ozone, il est particulièrement actif en détériorant les caoutchoucs. Ceci a été remarqué à Los Angeles où le taux de remplacement des pneumatiques était plus élevé que dans d'autres villes moins polluées à l'ozone, SEINFELD (1986). Les polluants phytotoxiques, comme le SO_2 (dioxyde de soufre) ou les PAN (peroxyacetylnitrates), une fois dans la feuille de la plante détruisent la chlorophylle et perturbent la photosynthèse, causant ainsi une réduction de la croissance de la plante ou bien son dépérissement.

TAB. .1 – Principaux polluant de l’air ambiant, leur origine et les effets nocifs sur l’organisme, d’après l’ADEME.

Principaux polluants de l’air ambiant	Origine en France	Risques
Dioxyde de soufre (SO_2)	80% industrie, 10% chauffage urbain	Affections respiratoires, à l’origine des pluies acides
Particules en suspension	10% transport routier	Irritations des voies respiratoires, risque cancérogène
Dioxyde d’azote (NO_2)	50% transport routier, 25% industrie et 5% chauffage urbain	Perturbe la fonction respiratoire, troubles respiratoires chroniques, à forte dose peut provoquer des lésions
Monoxyde de carbone (CO)	30% transport routier, 30% chauffage urbain et 30% industrie	Perturbe le transport de l’oxygène dans le sang : peut provoquer des anémies, des vertiges, des migraines et être mortel à forte dose
Ozone (O_3)	Polluant secondaire résultant de la transformation photochimique de certains polluants (NO_x et COV) en présence de rayonnement solaire (UV)	Irritations oculaires, altérations pulmonaires, dommages sur les végétaux, contribue à l’effet de serre

La réduction de la visibilité qui accompagne généralement les hauts niveaux de pollution est peut être le caractère le plus évident. Elle est provoquée par la diffusion et l'absorption de la lumière par les polluants gazeux et particulaires. Elle dépend de la position du soleil dans le ciel, ce qui fait que le smog peut avoir différentes couleurs selon le moment de la journée. Le dioxyde d'azote NO_2 est le principal polluant gazeux qui absorbe le rayonnement solaire mais à des taux relativement faibles par rapport à l'absorption particulaire.

Moyens d'action. La question se pose alors de savoir comment minimiser l'impact de la pollution atmosphérique sur les populations. La réponse n'est pas unique, plusieurs approches sont considérées et généralement menées de front : il faut viser une meilleure fluidité du trafic automobile, développer les transports en commun, mettre en place des réseaux de capteurs de polluants, favoriser le transport en vélo, sensibiliser la population, améliorer les technologies automobiles et les carburants. Ces mesures ont été suivies avec plus ou moins de réussite et ont conduit à une diminution des concentrations pour certains polluants (disparition du plomb dans l'essence, réduction des émissions de CO ,...).

Pourquoi modéliser ? Une approche originale est celle de la modélisation, qui conduit à la réalisation d'un modèle de qualité de l'air permettant de déterminer les niveaux de pollution aux différentes échelles d'une ville. Un modèle de qualité de l'air peut être un outil d'aide à la décision pour les municipalités : il permet en effet de mesurer la répercussion sur les niveaux de pollution de toute modification apportée au système de voirie ou à la politique de transport en commun. La modification initialement prévue pourra, selon les résultats du modèle, être effectuée ou au contraire revue pour une amélioration. Des simulations de scénarios type de pollution sont aussi réalisables, afin d'arriver à une meilleure compréhension des phénomènes physiques rencontrés ainsi qu'à la mise en place d'une politique d'urgence la plus adaptée à la situation.

Problème multidisciplinaire. La réalisation d'un modèle de qualité de l'air est à l'interface de plusieurs disciplines que sont notamment la physico-chimie atmosphérique, le transport par la turbulence et les transferts thermiques. Le préalable à l'étude de la qualité de l'air générale est une bonne connaissance de ces processus et des écoulements en canopée urbaine. Celle-ci est définie comme étant le domaine comprenant la ville et dont l'épaisseur est la mince couche d'atmosphère habitée. Cette couche s'étend sur quelques centaines de mètres de la surface.

Problème d'échelle. Nous sommes de toute évidence face à un problème d'échelle tant les ordres de grandeurs des phénomènes physiques sont variables. Quelques exemples de ceux-ci sont donnés ici :

- Hauteur de la couche limite urbaine : $1 - 3km$
- Hauteur de la troposphère : $15km$
- Hauteur de l'atmosphère : $130km$ (MESTAYER & ANQUETIN (1994))
- Hauteur d'inhalation des polluant : $1.7m$
- Largeur d'une rue : $20m$
- Durée de vie de l'ozone : $2h$
- Durée de vie du radical hydroxyle OH^- : $1s$
- Longueurs caractéristiques de la turbulence : du millimètre au kilomètre
- Diamètre caractéristique des aérosols : $0.1\mu m - 100\mu m$

Face à ces échelles variées, il existe différents modèles généralement classés selon des échelles caractéristiques spatiales des phénomènes modélisés. Pour les écoulements atmosphériques, plusieurs classifications existent dont celles D'ORLANSKI (1975) et de SMAGORINSKY (1974). Ce dernier définit les échelles suivantes :

- échelle micro : $10^{-2} - 10^3m$

- échelle locale : $10^2 - 5.10^4 m$
- échelle méso : $10^4 - 2.10^5 m$
- échelle macro : $10^5 - 10^8 m$

Interactions entre particules, réactions chimiques et mélange turbulent. Au cours d'une réaction chimique mettant en jeu plusieurs constituants ou au cours des interactions entre particules (coalescence, évaporation, fragmentation), la non uniformité des espèces réactantes ou des particules mises en jeu aura une influence sur la vitesse effective de la réaction ou du processus physique en cours. En présence de la turbulence, on peut considérer la corrélation des fluctuations de concentration entre deux espèces réactantes. Une corrélation négative correspond à un état inhomogène du mélange. Si la turbulence a eu le temps d'agir et de permettre le mélange, la corrélation devient positive. Pour une réaction donnée, ainsi que pour un processus physique d'interaction entre particules, on souhaite tenir compte de la vitesse propre du processus, étudier l'efficacité du mélange par la turbulence et, le cas échéant, les effets des inhomogénéités de concentration sur le phénomène.

Notre approche. Afin de simuler la dispersion atmosphérique de polluants (scalaires passifs ou particules) et de prédire les taux de ségrégation, les pics de pollution et les interactions entre particules (collisions, coalescence et fragmentation, ...), nous avons choisi d'utiliser une simulation des grandes échelles (SGE). Depuis DEARDORFF (1970), on étudie les écoulements turbulents ou stratifiés MÉTAIS & LESIEUR (1992), le transport turbulent de scalaires passifs SYKES & HENN (1992) ou réactifs SYKES et al. (1992), MEEDER & NIEUWSTADT (2000) et le transport de particules solides, WANG & SQUIRES (1996) et SHAO & LI (1999) à l'aide de la SGE. Cette démarche est particulièrement intéressante pour simuler la dispersion, les réactions chimiques, les interactions entre particules et le mélange turbulent parce qu'elle permet la prise en compte de l'évolution séparée des grandes échelles ne participant pas forcément à une dynamique modélisable simplement. Cependant, nombreux processus physico-chimiques ont lieu à une échelle beaucoup plus petite que l'échelle minimale résolue par la SGE. Il est donc nécessaire de modéliser le comportement sous-maille du scalaire passif et des particules transportées par la SGE. Pour ceci, nous proposons de coupler la SGE avec une équation stochastique de LANGEVIN. Le modèle stochastique est reformulé en termes de grandeurs filtrées et il est exprimé uniquement en fonction des grandeurs obtenues par la SGE. D'autre part, un modèle de coalescence et fragmentation de gouttelettes transportées par la turbulence atmosphérique est développé. L'ensemble est introduit dans la SGE et l'étude de la dispersion d'un panache de scalaire passif et de particules est réalisée.

Le premier chapitre de cette étude est consacré à la description de la SGE. Le chapitre deux présente le couplage du modèle stochastique de LANGEVIN avec la SGE. Ce couplage est appliqué à la simulation de la dispersion d'un panache de scalaire passif issu d'une source élevée. L'ensemble est confronté à l'expérience. Dans le troisième chapitre on introduit la modélisation du transport de particules solides et de gouttelettes. Dans l'équation de transport des particules par un écoulement non uniforme, la vitesse du fluide à la position de la particule est donnée par une partie grande échelle et une partie sous-maille. La vitesse sous-maille des particules est déterminée par analogie avec le modèle stochastique de sous-maille pour le scalaire passif. La modification de l'écoulement par la présence des particules ainsi que les collisions interparticulaires sont introduites dans ce chapitre. Enfin, l'ensemble est confronté à deux expériences de laboratoire relatives au transport de particules de sable et à l'érosion éolienne, NALPANIS et al. (1993) et TANIÈRE et al. (1997). Le quatrième chapitre est consacré au développement d'un modèle probabiliste de coalescence et fragmentation de gouttelettes. Le modèle est établi pour une turbulence homogène isotrope et confronté aux résultats de HO & SOMMERFELD (2002) pour le seul cas de la coalescence, de APTE et al. (2003) pour la fragmentation

et de LASHERAS et al. (1998) pour un cas mixte. Une fois la validation terminée, le modèle est introduit dans la SGE et l'ensemble est appliqué à la dispersion d'un panache de gouttelettes. Les résultats sont comparés aux profils expérimentaux relatifs à un scalaire passif. Enfin, le dernier chapitre traite des mécanismes de transport des particules solides dans un écoulement de couche limite. Les particules sont distribuées uniformément sur le premier tiers de la couche limite à l'instant initial. Pour trois différents cas tests les évolutions du champ de concentration sont analysées.

Chapitre 1

Pollution et physico-chimie de l'atmosphère

Introduction

La pollution de l'air à l'intérieur de la canopée urbaine fait intervenir des mécanismes complexes prenant en compte la multiplicité des espèces chimiques mises en jeu ainsi que leurs réactions et transformations éventuelles. Plusieurs centaines d'espèces chimiques existent dans l'air (FRAIGNEAU (1996)) en phase gazeuse, liquide et solide.

La modélisation de la dispersion et du mélange de polluants dans la couche limite atmosphérique est nécessaire afin de déterminer la qualité de l'air et son évolution en temps et en espace. Afin de prédire des grandeurs locales et instantanées comme les pics de pollution, cette modélisation doit être instationnaire. Elle doit prendre en compte l'évolution séparée des grandes échelles de la turbulence atmosphérique ne participant pas forcément à une dynamique modélisable simplement. D'autre part, les interactions physico-chimiques entre les différentes espèces présentes dans la canopée peuvent modifier la nature des aérosols conduisant à différentes dynamiques de dispersion. Les processus physico-chimiques (réactions chimiques, collisions entre particules solides, coalescence ou fragmentation des gouttelettes, évaporation,...) doivent être pris en compte dans la modélisation du transport.

1.1 Aérosols

Le paragraphe qui suit présente quelques caractéristiques générales sur les aérosols les plus fréquemment rencontrés, les transformations possibles qu'ils peuvent subir et les effets sur la santé.

1.1.1 Généralités

Le terme d'aérosol désigne toutes les particules solides ou liquides en suspension dans un milieu gazeux et présentant une vitesse de chute négligeable. Dans l'air et dans des conditions normales, ceci correspond à des particules de dimension inférieure à $100\mu m$, les plus fines faisant quelques fractions de nanomètres, SEINFELD (1986).

On désigne comme aérosol primaire, les composés émis directement dans l'atmosphère, comme par exemple SO_2 (émis par les sources de combustion), les poussières naturelles ou le sable émis par les régions en désertification, et comme aérosol secondaire les composés ayant subi pendant leur

TAB. 1.1 – Estimation globale des émissions des principaux aérosols, SEINFELD & PANDIS (1998).

Sources	Estimation des émissions ($10^{12}g/an$)	Catégorie de taille des particules
Sources naturelles		
Croûte terrestre et érosion éolienne	1500	grosses particules
Océans (sel)	1300	accumulation et grosses particules
Volcans	30	grosses particules
Déchets biologiques	50	grosses particules
Sulphates dérivés des gaz biogéniques	130	particules très fines
Sulphates dérivés des gaz volcaniques	20	particules très fines
Matières organiques	60	particules très fines
Nitrates dérivés des NO_x	30	particules très fines
Total des sources naturelles	3100	
Sources anthropiques		
Poussières industrielles	100	particules très fines et grosses
Suie	10	particules très fines
Sulphates dérivés de SO_2	190	particules très fines
Feux	90	particules très fines
Nitrates dérivés des NO_x	50	grosses particules
Matières organiques	10	particules très fines
Total des sources anthropiques	450	
Total des deux sources	3600	

transport dans l'atmosphère des réactions chimiques (par exemple, l'ozone qui est issu de réactions photochimiques à partir de l'azote).

1.1.2 Origine des particules

L'origine des aérosols peut être soit naturelle soit anthropique (tableau 1.1). Les sources naturelles sont les océans, les volcans, les feux de forêt, les particules arrachées à la croûte terrestre par érosion éolienne, la végétation (le pollen). Les sources anthropiques sont variées : transports, industries, incinération d'ordures ménagères, usines électriques, chauffage domestiques, etc...

1.1.3 Cycle des particules

L'origine et le devenir des particules sont conditionnés par leur taille. C'est pourquoi, outre le classement effectué en fonction de leur origine naturelle ou anthropique, un autre classement est réalisé en fonction de leur granulométrie. Se pose alors le problème de la définition de la taille des

particules.

Le problème de la définition de la taille des particules à partir de leur diamètre suppose qu'elles soient toutes de forme sphérique or ce n'est pas systématiquement le cas. Par conséquent, il faut définir un diamètre équivalent applicable à tous types de particules quelle que soit leur forme. Le diamètre le plus souvent utilisé est le diamètre aérodynamique moyen. Il correspond à celui d'une sphère ayant la même vitesse de chute que la particule et une masse spécifique égale à $1g/cm^3$, SEINFELD (1986). D'un point de vue réglementaire, les particules d'un diamètre aérodynamique moyen inférieur à $10\mu m$ sont appelées PM_{10} .

1.1.4 Formation, durée de vie et disparition des particules atmosphériques

WITHBY (1973) considère que les aérosols atmosphériques sont composés de :

- noyaux d'AIKTEN - $0.001\mu m < d_p < 0.1\mu m$.
- noyaux de condensation - $0.1\mu m < d_p < 2\mu m$.
- particules géantes - $d_p > 2\mu m$.

On admet désormais que l'aérosol atmosphérique est répertorié selon trois modes dépendants de leur processus de formation (figure 1.1) :

- le mode "nucléation" comportant les noyaux d'AIKTEN. Ce sont essentiellement des particules primaires de condensation et des noyaux provenant de la nucléation homogène ;
- le mode "accumulation", constitué des noyaux de condensation en grossissement et des particules du mode "nucléation" coagulées ;
- le mode "grosses particules" résultant de phénomènes mécaniques, tels que le vent, le sable, les embruns.

Pour simplifier, on distingue les particules de diamètre aérodynamique moyen supérieur à $2\mu m$ et celles dont le diamètre aérodynamique est inférieur à $2\mu m$:

- Particules de diamètre supérieur à $2\mu m$ dites "grosses ou géantes". Ces particules sont produites par des moyens mécaniques tels que le vent, le sable, les embruns. Elles ont une durée de vie moyenne courte (de quelques heures pour les particules de diamètre supérieur à $10\mu m$, JAENICKE (1984)) ;
- Particules fines de diamètre inférieur à $2\mu m$. Elles ont toutes directement ou indirectement une origine qui est soit la nucléation homogène hétéro-moléculaire soit la condensation.

La presque totalité des aérosols provenant des transformations gaz/particules se trouve dans le domaine de dimensions des particules fines. Les principales impuretés gazeuses responsables de ces aérosols fins et ultra-fins sont le dioxyde de soufre, le dihydroxyde de soufre, le trihydroxyde d'azote et les hydrocarbures (FUCHS (1964), SEINFELD (1986) et FRIEDLANDER (2000)).

Les deux classes d'aérosols atmosphériques, bien souvent de nature chimique dissemblable, évoluent de façon indépendante et disparaissent de l'atmosphère par des mécanismes séparés : la diffusion sur les surfaces, le lessivage par les gouttes de pluie, la pluie, la condensation de la vapeur d'eau sur les sites de nucléation formés par les aérosols d'acide nitrique ou sulfurique (HIDY (1984)), pour les plus petites et par gravité pour les plus grosses (figure 1.2).

Dans la basse atmosphère, le temps de séjour le plus long est environ 10 jours pour les aérosols de $0.1\mu m$ à $1\mu m$. Les particules les plus grosses ($> 10\mu m$) et les aérosols ultra-fins ou nanométriques

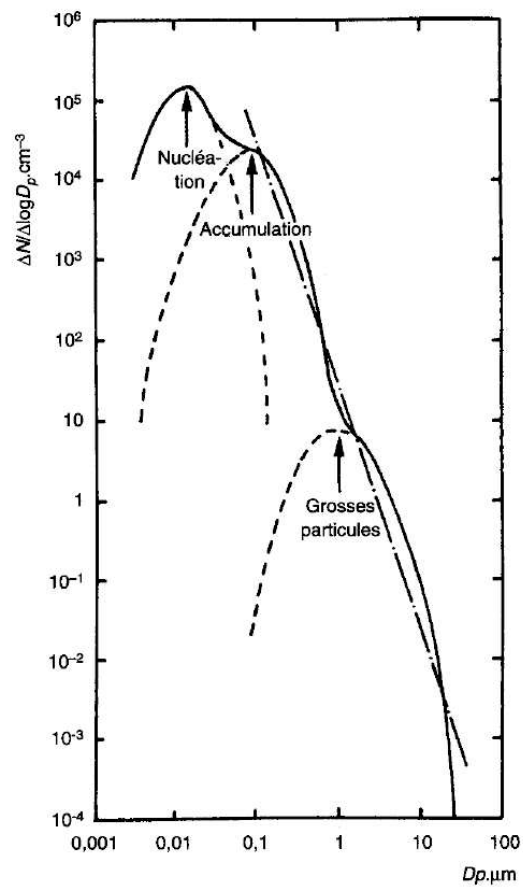


FIG. 1.1 – Les trois composantes de l'aérosol atmosphérique, RENOUX & BOULAND (1998). ΔN est le nombre de particules par cm^3 et D_p le diamètre aérodynamique moyen.

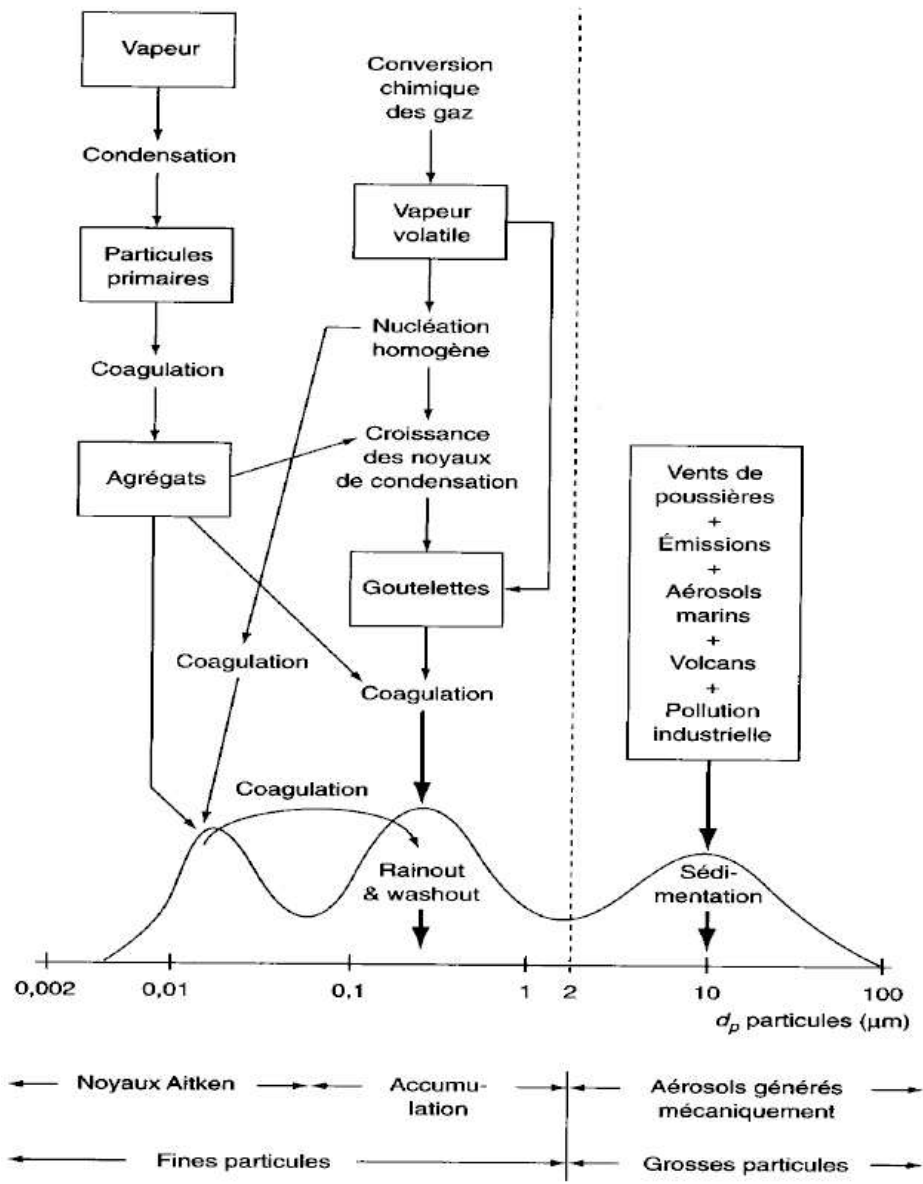


FIG. 1.2 – Mode de dépôt des particules atmosphériques en fonction de leur taille, MADELAINE (1982).

ont un temps de séjour identique de quelques minutes à quelques heures. A nos latitudes, la durée de vie moyenne d'un aérosol atmosphérique est d'environ une semaine ce qui lui permet d'être transporté sur des longues distances et de participer à la pollution transfrontalière.

1.1.5 Impact des particules atmosphériques sur l'environnement

Impact à l'échelle globale

L'étude de COLBECK (1995) a montré que les particules pouvaient avoir une influence sur le bilan radiatif de l'atmosphère et donc jouer un rôle dans le changement climatique global. Les particules agissent de deux manières sur le bilan radiatif de l'atmosphère :

- par un effet direct des aérosols qui dépend de leur quantité et de leurs propriétés optiques. Les particules d'aérosol diffusent la lumière solaire et renvoient vers l'espace une partie du rayonnement solaire avant qu'il ne participe au chauffage de la Terre ;
- par un effet indirect par le biais des nuages. Les aérosols servent de "noyaux de condensation" pour la formation des nuages. Dans une atmosphère fortement chargée en aérosols, une même quantité d'eau peut se répartir sur un plus grand nombre de gouttes, qui sont alors plus petites. Or, un nuage formé de petites gouttes plus nombreuses réfléchit plus le rayonnement solaire vers l'espace. Par ailleurs, on peut penser que les petites gouttes vont moins facilement conduire à des précipitations, induisant ainsi l'augmentation de la durée de vie du nuage. Les résultats de l'étude révèlent que se sont essentiellement les activités humaines (aérosols d'origine anthropique provenant des pratiques agricoles, industrielles, domestiques et de transport) qui génèrent l'effet observé sur les nuages.

Ainsi, les particules atmosphériques exercent un forçage négatif sur le bilan radiatif de la Terre en diminuant l'apport global d'énergie solaire.

Une fois émis dans l'atmosphère, les aérosols s'intègrent dans la circulation générale et peuvent être transportés sur des longues distances. Ils peuvent venir s'ajouter à la colonne d'eau océanique et sédimenter au fond des océans (CHESTER et al. (1996)) modifiant ainsi les cycles bio-géochimiques de l'océan en limitant la productivité biologique (GUIEU et al. (1997)). Des aérosols atmosphériques sont également retrouvés au niveau des pôles (PLANCHON et al. (2002)), ce qui permet d'étudier l'impact global de l'homme (DAVIDSON et al. (1993)). Les aérosols transportés peuvent être d'origine terrigène, venant et formant des loess (YAALON (1987)), ou marine et avoir des effets positifs telle que contribuer à la fertilisation des sols.

Outre les rôles sur le forçage négatif du bilan radiatif de l'atmosphère, l'insertion des particules au sein des processus bio-géochimiques océaniques, de contamination ou de fertilisation des sols, les aérosols sont aussi impliqués dans de nombreux processus de transformation atmosphérique à cause de l'interface qu'ils possèdent avec le gaz. Les grosses particules agissent sur l'atmosphère par une action catalytique et par l'adsorption et l'absorption des polluants gazeux (SEINFELD (1986)). Les particules servent de véhicules aux éléments toxiques comme les métaux lourds ou les gaz s'adsorbant sur leur surface. Elles peuvent également contenir des métaux lourds à l'intérieur même de la structure cristalline des minéraux.

Impact à l'échelle locale

Les aérosols sont la cause de la réduction de la visibilité dans les zones urbaines et industrielles à cause de la discontinuité de l'indice de réfraction à la surface de la particule ou à travers du gaz,

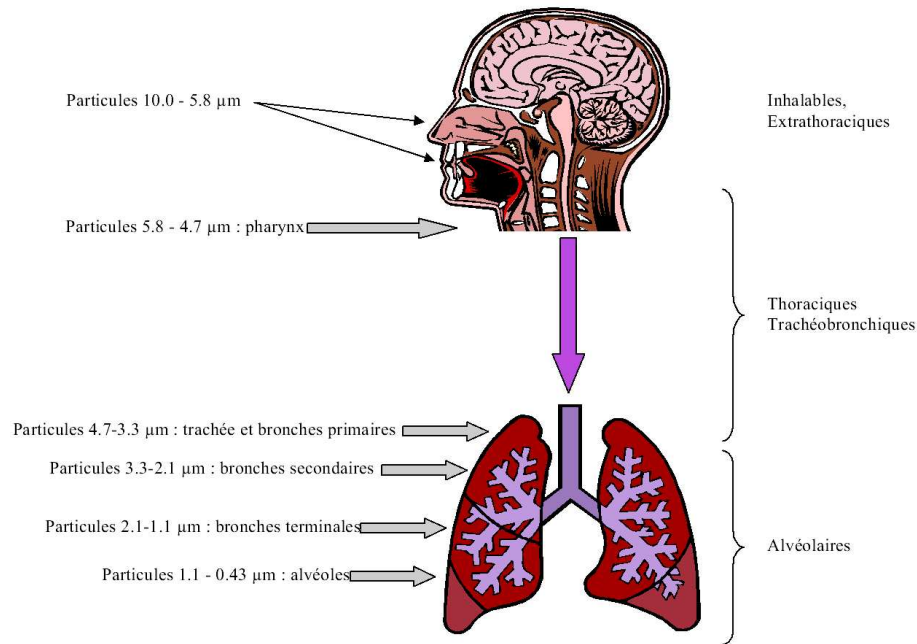


FIG. 1.3 – Pénétration des particules dans l'appareil respiratoire, d'après CITEPA (2000)

SEINFELD (1986). Les sulfates, les nitrates, tous les acides rejetés par les industries contribuent à l'acidification des pluies détruisant les forêts. Ces pluies acides et les particules détériorent le patrimoine bâti en provoquant l'apparition de zones blanches puis grises et enfin noires sur les pierres alors fragilisées face aux attaques chimiques et au ruissellement de l'eau. De plus, les métaux subissent une corrosion ou perte de matière dans les couches supérieures ainsi qu'une modification de leurs propriétés physiques.

Impact sur l'homme

Dans l'histoire, plusieurs événements ont fait prendre conscience des troubles de santé occasionnés par les aérosols atmosphériques. L'épisode de "smog" à Londrès en 1952, "*The Great Smog*", qui fit 4000 morts (*Ministry of Health*, 1954) en est un des plus célèbres. Ce phénomène se produit dans tous les lieux où les conditions météorologiques (le brouillard, "*fog*") se combinent aux rejets industriels et des transports routiers ("*smoke*").

L'impact sanitaire des particules est dépendant de leur taille qui influence la pénétrabilité de la particule dans le système respiratoire humain et son assimilation (figure 1.3). D'après la figure 1.3 ce sont les particules de diamètre inférieur à $10\mu\text{m}$ qui ont un impact sur l'organisme humain : les grosses particules ($10\mu\text{m} < d_p < 5.8\mu\text{m}$) affectant principalement le système respiratoire supérieur, les particules de diamètre compris entre $5.8\mu\text{m}$ et $4.7\mu\text{m}$ les voies thoraciques et enfin les particules de diamètre inférieur à $4.7\mu\text{m}$ le système respiratoire inférieur (les poumons). De plus, diverses études menées aux États-Unis ont montré qu'une exposition prolongée ou même de courte durée aux PM_{10} provoquait des affections respiratoires : bronchite, diminution de la fonction pulmonaire, réduction de l'espérance de vie.

Afin d'évaluer en partie l'impact des aérosols sur la qualité de l'air, il faut pouvoir modéliser le transport des particules par la turbulence atmosphérique. Étant donné que de nombreux pro-

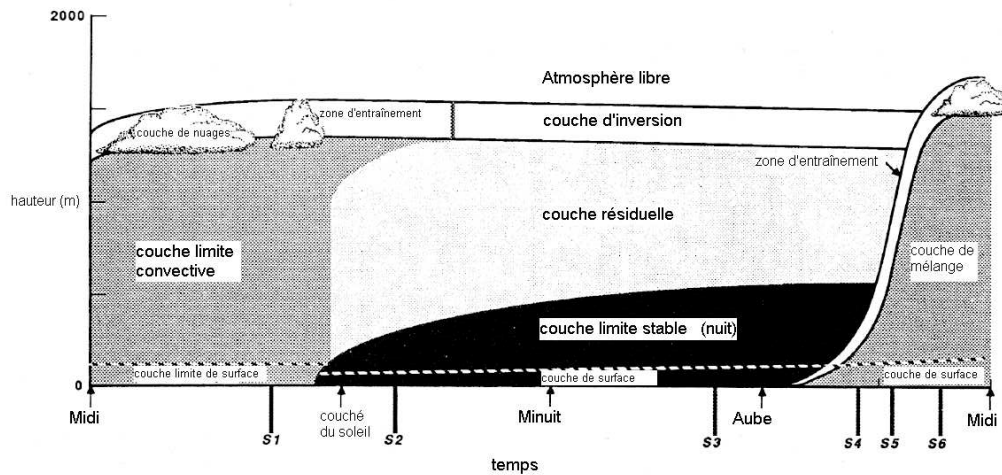


FIG. 1.4 – Structure de la couche limite atmosphérique STULL (1988)

cessus physico-chimiques sont essentiels dans la formation, la disparition et la caractérisation d'un nuage de particules, il est important aussi de tenir compte le plus possible du mélange turbulent dans la modélisation du transport solide. Avant de détailler les différents modèles adoptés dans cette étude, nous décrirons brièvement la couche limite atmosphérique et les caractéristiques dynamiques des écoulements y existant.

1.2 La dynamique de l'atmosphère

Cette partie n'a pas la prétention de décrire l'intégralité de la dynamique de l'atmosphère mais plutôt les mécanismes relatifs à la dispersion de polluants en canopée urbaine.

1.2.1 La couche limite atmosphérique

De nombreux ouvrages traitent de la couche limite atmosphérique. Nous citerons notamment ceux de STULL (1988) et de DE MOOR (1983). La troposphère est scindée en deux parties : une couche limite dans sa partie basse coiffée d'une couche limite libre (figure 1.4).

La couche limite libre est la partie supérieure de la troposphère dans laquelle le vent est déterminé par de grands mouvements d'ensemble à l'échelle de la planète. Il résulte de l'équilibre entre les forces de pression et la force de CORIOLIS due à la rotation de la Terre. Le vent est appelé dans cette zone vent géostrophique.

Origines de la turbulence dans la couche limite atmosphérique

A mesure que l'on se rapproche de la surface, les forces de frottement de l'air sur la surface terrestre deviennent non négligeables. D'un point de vue dynamique, la couche limite atmosphérique (CLA) est la zone de l'atmosphère au voisinage du sol dans laquelle se répercute directement, par viscosité, l'adhérence au sol de l'écoulement. Elle donne alors naissance à des couches cisailées. Les gradients de vitesse moyenne ainsi créés sont à l'origine d'une production d'énergie cinétique turbulente issue de phénomènes mécaniques.

D'un point de vue thermique, la CLA est la zone de l'atmosphère au voisinage de la surface terrestre dans laquelle la variation diurne du rayonnement solaire est directement perceptible. Ainsi, le profil thermique de la CLA change en fonction des variations du rayonnement solaire, diurne et nocturne, été et hiver. On observera selon les cas un profil thermique avec un maximum de température au sol, un gradient de température à signe constant, ou bien en altitude, un gradient de température de signe variable. L'existence de la stratification thermique et la forme du profil de température associé peut être à l'origine de mouvements convectifs.

En l'absence de mouvement de l'atmosphère, une particule d'air subit l'action de trois forces :

- son poids dirigé vers le bas qui dépend de sa température propre (masse volumique variable avec la température),
- la poussée d'ARCHIMÈDE qui dépend de la température de l'atmosphère,
- la force de viscosité qui s'oppose au déplacement relatif de la particule d'air dans l'atmosphère qui l'entoure.

Alors pour un profil de température donné, au point de température le plus élevé les particules d'air ont une densité plus faible, plus légères elles ont tendance à s'élever dans l'atmosphère sous l'effet de la poussée d'ARCHIMÈDE.

Une température maximum au sol induit une répartition instable des densités volumiques des particules d'air. Les particules qui se trouvent en bas sont plus dilatées et vont avoir tendance à se déplacer vers le haut où elles vont se refroidir puis redescendre. On constate un mouvement de convection libre et le régime est qualifié d'instable. Maintenant si ce maximum de température est au-dessus du sol, en dessous de ce point, les particules les plus légères sont au dessus des particules les plus lourdes. La répartition des densités volumiques est stable et le gradient de température n'est pas à l'origine d'un mouvement de convection.

Écoulement atmosphériques induits

La stratification thermique est à l'origine de trois régimes d'écoulements dans la couche limite superficielle :

- Instable. La température moyenne décroît quand l'altitude augmente. La température est maximum au sol ce qui correspond par exemple à une journée ensoleillée l'été. Lorsque le soleil se couche les rayonnements des habitations et sols chauffés pendant la journée réchauffent la basse atmosphère. L'écoulement est dit de convection libre et permet les échanges de flux de température et de masse entre les différentes couches de l'atmosphère. La dispersion atmosphérique des polluants urbains est donc favorisée.
- Stable. La température moyenne augmente avec l'altitude. La température est maximum en altitude au-dessus du sol. On retrouve ces conditions en hiver et de nuit, par exemple lorsque qu'après une journée ensoleillée le sol se refroidit plus vite que l'air situé au-dessus. Cette inversion de température a pour conséquence une production thermique négative de turbulence qui va détruire la production dynamique. Le régime stable a donc tendance à laminariser les écoulements et va donc à l'encontre de la dispersion turbulente. Ce phénomène peut se produire en hiver par un temps ensoleillé et pour des vents faibles, de l'ordre de quelques m/s (MESTAYER & ANQUETIN (1994)). La couche d'inversion est de quelques dizaines de mètres d'épaisseur et les polluants urbains s'y trouvent piégés.
- Neutre. La température moyenne est à peu près constante avec l'altitude. Il n'y a pas de production thermique d'énergie cinétique turbulente. La turbulence est totalement issue de facteurs dynamiques. Le régime est celui de la convection forcée. Une analyse de la couche limite turbulente

montre que le profil vertical de vitesse moyenne longitudinale suit une loi logarithmique :

$$\bar{U}(z) = \frac{u_*}{k_v} \ln \left(\frac{z - z_d}{z_0} \right)$$

où u_* est la vitesse de frottement, $k_v = 0,4$ est la constante de KARMAN, z_d est la hauteur de déplacement et z_0 la longueur de rugosité. La longueur de rugosité z_0 est, d'après MONIN (1970) de l'ordre du mètre en ville. La hauteur de déplacement z_d correspond à la position d'une origine fictive du profil du fait de la présence des rugosités. Elle est nulle pour un relief faible. Pour un relief plus marqué, comme en ville, z_d vaut deux tiers de la hauteur moyenne des immeubles.

L'étude du régime neutre permet, dans un premier temps, de n'aborder que les facteurs dynamiques. Il correspond à la dispersion de polluants en ville en présence de vent et en l'absence de stratification thermique. De surcroît ce régime est le plus fréquemment rencontré.

Rôle des flux turbulents

Les flux turbulents assurent l'essentiel du transport vertical des grandeurs physiques en jeu. En effet, excepté au voisinage immédiat du sol (présence d'obstacles), la vitesse verticale moyenne est à peu près négligeable et ce sont les fluctuations de vitesse verticale qui vont assurer le transport des fluctuations des autres grandeurs physiques perpendiculairement au sol.

La structure de la couche limite atmosphérique

La structure de la CLA pour les zones à hautes pressions est représentée sur la figure 1.4. Elle est variable selon l'heure de la journée. Elle se compose le jour d'une couche de mélange dominée par les phénomènes turbulents favorisant les mélanges des quantités étudiées, la nuit d'une couche résiduelle moins turbulente de stratification neutre et d'une couche nocturne rendue stable par le contact d'un sol froid. Celle-ci est peu turbulente. Les forces déterminant le vent dans cette zone sont les forces de pression, de frottement, de CORIOLIS et d'ARCHIMÈDE.

Tout près du sol est présente une couche de surface épaisse de quelques dizaines de mètres dans laquelle les caractéristiques de l'atmosphère varient de moins de 10%. La couche de surface est composée d'une couche rugueuse dont l'épaisseur est de l'ordre de 1 à 3 fois la hauteur des éléments de rugosité et dont les caractéristiques très irrégulières sont fortement influencées par les dimensions et la répartition des éléments rugueux. Au-dessous de la couche rugueuse, se trouve la couche laminaire qui n'a que quelques centimètres d'épaisseur : elle se trouve en contact direct avec la surface et est dominée par les effets visqueux.

Enfin, la couche limite atmosphérique est coiffée par une zone d'entraînement, qui attire l'atmosphère, moins turbulente présente au-dessus de la couche de mélange, ce qui augmente la hauteur de cette dernière. La zone d'entraînement est souvent caractérisée par une zone de stabilité thermique qui bloque les ascensions d'air. C'est donc une zone par laquelle les polluants ne s'échappent pas.

1.2.2 La couche limite urbaine

La couche limite urbaine (CLU) est un cas particulier de la couche limite atmosphérique. L'allure de la CLU varie en permanence entre deux extrêmes : par vent fort, celle classique d'une couche limite sur plaque plane et par vent faible celle d'un dôme dominé par les effets thermiques (figure 1.5).

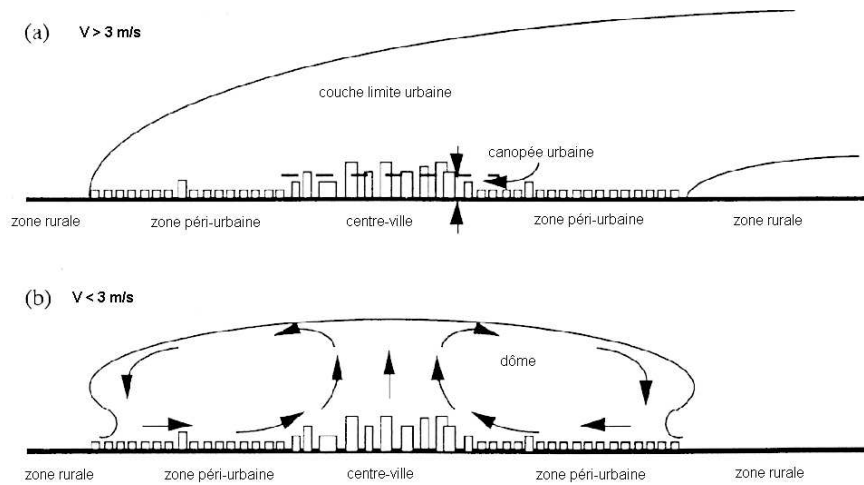


FIG. 1.5 – Structure de la couche limite urbaine MESTAYER & ANQUETIN (1994)

Ce qui différencie principalement la CLU de la couche limite atmosphérique est l'existence au-dessus des villes d'un îlot de chaleur, caractérisé par des températures plus élevées qu'au-dessus de la campagne environnante. Nous pouvons constater ce phénomène en hiver en observant la quantité de givre sur les pare brises des voitures. Les véhicules sortant de l'agglomération en sont généralement dépourvus alors que ceux venant de la périphérie sont couverts d'une pellicule blanche. Des écarts de température (fonction du vent et du nombre d'habitants) allant jusqu'à 12°C ont été constatés, OKE (1972).

Les causes d'un tel phénomène sont multiples :

- l'activité anthropique - chauffage domestique, rejets de polluants,... réchauffent l'atmosphère et altèrent le bilan radiatif.
- la diminution des vents due à la présence des constructions réduit l'apport d'air frais.
- la modification du bilan thermique de la surface en raison de la présence des bâtiments. On observe au niveau des villes une absorption accrue des radiations solaires provoquant une diminution de l'albédo de surface des villes.

1.2.3 La canopée urbaine

C'est la partie basse de la couche limite urbaine à proximité directe du sol dans laquelle sont étudiés les écoulements entre les bâtiments. De part l'hétérogénéité de la topographie des villes, il s'agit d'écoulements particulièrement complexes, composées de couches de cisaillement, de recirculations, de sillages,...

En raison d'un intérêt accru pour les problèmes environnementaux, nombreuses études sur les écoulements et la dispersion de polluants en canopée urbaine, ont été réalisées dans les dernières années. Les régimes d'écoulement présents dans une canopée urbaine dépendent fortement de plusieurs facteurs, comme la configuration des immeubles, les effets thermiques et la circulation automobile, par exemple. OKE (1988) et HUNTER et al. (1992) ont étudié en soufflerie l'écoulement dans une rue bordée de deux immeubles et ont montré l'existence de trois régimes fonction de la dimension des bâtiments et de la distance les séparant (figure 1.6). Si les bâtiments sont bien espacés les uns des autres, l'écoulement s'apparente à une succession de structures identiques isolées. Lorsque l'écart diminue, les

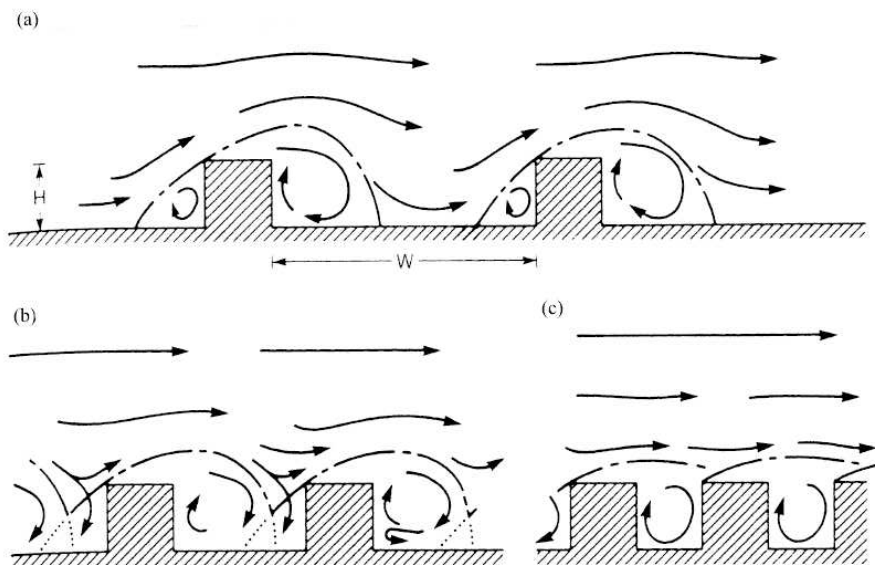


FIG. 1.6 – Structure des écoulements derrière des bâtiments OKE (1988). (a) écoulement structures isolées, (b) écoulement sillages perturbés, (c) écoulement rasant.

sillages sont perturbés. L'écoulement en aval d'un bâtiment est renforcé par une déflexion au niveau de la face amont du bâtiment suivant. Lorsque le rapport W/H est encore plus faible, la rue se referme et une recirculation identique d'une rue à l'autre s'établit. L'écoulement est alors dit rasant.

Études en laboratoire sur la dispersion de polluants en canopée urbaine

Des études expérimentales en soufflerie ont été réalisées afin de mieux comprendre les différents phénomènes mis en jeu dans la dispersion de polluants en canopée urbaine. Cependant, en raison de la grande complexité de la géométrie des immeubles et du terrain, nombreuses hypothèses simplificatrices sont souvent employées.

HOYDYSH & DABBERDT (1988) ont étudié les caractéristiques de la dispersion à l'échelle d'une rue. Plus tard, DABBERDT & HOYDYSH (1991) ont mesuré les propriétés d'un écoulement dans une rue avec des immeubles carrés, rectangulaires et à espacement variable. MERONEY et al. (1996) se sont intéressés à la dispersion d'une source linéique pour différentes largeurs d'une rue. Ils n'ont utilisé que des immeubles de rapport de taille $W/H = 1$. Plus récemment, PAVAGEAU & SCHATZMANN (1999) ont étudié la distribution de la concentration d'un polluant dans une rue à l'aide d'une soufflerie avec une rugosité équivalente à celle d'une ville. KASTNER-KLEIN & PLATE (1999) ont réalisé le même type d'étude pour différentes tailles et configurations d'immeubles et aussi pour différentes géométries de toits. Des expériences en soufflerie ont aussi été réalisées par GERDES & OLIVARI (1999) afin de déterminer l'impact de la rugosité, de l'espacement et de la hauteur des immeubles sur le profil de vitesse et de concentration dans une rue.

Les travaux de BARLOW & BELCHER (2002) sur la dispersion de scalaires passifs au-dessus d'une canopée urbaine ont pour objectif de quantifier les flux de masse entre l'intérieur d'une rue et l'écoulement externe. L'intérieur d'une rue est recouvert de naphthalène qui peut subir une sublimation à température ambiante. En mesurant la quantité de naphthalène restant sur les parois, les auteurs

ont pu évaluer le flux moyen surfacique de scalaire en sortie de la rue et avoir une estimation du taux de ventilation.

Une étude détaillée de la dispersion d'un scalaire passif en amont d'un bâtiment a été réalisée par VINÇONT (1999). Plus récemment SIMOËNS et al. (2003) ont réalisé le même type d'étude entre deux bâtiments d'espacement variable.

Une des hypothèses simplificatrices principales de la plupart des études citées ci-dessus, est l'utilisation des immeubles de même taille. Dans ce cas, la vitesse du vent au-dessus du toit des immeubles est toujours parallèle au sol et il y a formation d'un tourbillon. Celui-ci induit une forte concentration de polluants du côté du premier immeuble et une faible concentration du côté du deuxième immeuble si on se déplace dans le sens de l'écoulement perpendiculairement à la rue.

Études “*in situ*” sur la dispersion de polluants en canopée urbaine

Les premières mesures complètes de dispersion de scalaire datent de DRIVAS & SHAIR (1974), qui ont mesuré la concentration d'un traceur passif dans le sillage d'un immeuble cubique. Plus tard, DEPAUL & SHEIH (1986) ont utilisé des ballons à la place d'un traceur passif afin de caractériser de manière qualitative l'écoulement à l'intérieur d'une rue lorsque le vent souffle perpendiculairement à celle-ci. Enfin, DAVIDSON et al. (1995) ont observé la dispersion d'un panache à travers un réseau de cubes dans une expérience “*in situ*”.

Depuis quelques années, les niveaux de pollution atmosphérique sont mesurés par des réseaux de surveillance et d'alerte gérés par des associations multipartites (Union européenne, État, collectivités territoriales, industriels et associations d'usagers). En France la plupart des grandes villes en sont pourvues, on peut citer la COPARLY pour la région lyonnaise qui détermine les niveaux de pollution en continu sur des sites fixes et mobiles (camion laboratoire). Dans les dernières années, de nombreuses campagnes de mesures de polluants chimiques ainsi que de particules d'aérosol ont été financées par l'Union européenne, et des dispositifs sont mis en place afin d'améliorer la qualité de l'air et réduire les niveaux de pollution dans les villes. Les différentes campagnes de mesures, les modèles d'émission, les inventaires des sources de pollution, les outils de prédiction et les systèmes d'alerte sont décrits tous les deux ans à la conférence internationale de “*Urban Air Quality*”, qui s'est déroulé à Valence en Espagne en 2005.

Modèles et simulations numériques de la dispersion de polluants en canopée urbaine

De nombreux auteurs ont utilisé des simulations numériques basées sur un modèle de $k - \varepsilon$ pour la turbulence afin de décrire la dispersion de scalaires passifs dans la canopée urbaine (JOHNSON & HUNTER (1995), LEE & PARK (1994), BAIK & KIM (1999) et SINI et al. (1996)). LEE & PARK (1994) se sont servis des résultats de ces simulations pour formuler une expression du temps de résidence des polluants en fonction de la géométrie de la rue, du nombre de REYNOLDS et du nombre de PECLET. De même, KIM & BAIK (1999) ont calculé la quantité de polluant restant dans la rue après une certaine période de ventilation en fonction de la géométrie de la rue. Enfin, SINI et al. (1996) ont simulé l'évolution en temps de la concentration de polluant après pénétration d'un nuage de pollution dans la rue.

LAKEHAL et al. (1995) se sont intéressés à la trajectoire des gouttes de pluie à l'intérieur d'une cavité représentant la rue. Ils ont adopté une approche lagrangienne et la partie fluctuante de la vitesse des gouttelettes a été obtenue par un modèle stochastique. Le suivi lagrangien des particules fluides

porteuses de scalaire a été adopté par XIA & LEUNG (2001) aussi, où la dynamique a été résolue par un modèle en deux dimensions pour le profil de vent.

Bien que l'objectif de notre étude soit la modélisation de la dispersion de particules et de scalaire passif ou réactifs en canopée urbaine, dans ce travail nous n'avons modélisé que les écoulements en couche limite. Il s'agit d'une géométrie simple, dans laquelle l'introduction de différents modèles de transport et d'interaction entre particules a pu être validé. Des études en géométrie plus complexe se trouvent dans AGUIRRE (2005).

1.3 Notre approche et modélisation

1.3.1 Simulation des grandes échelles

Nous avons noté l'importance de la turbulence et des phénomènes instationnaires dans les écoulements atmosphériques. Afin de pouvoir correctement modéliser le transport de scalaire passif et de particules, nous avons choisi d'utiliser une simulation des grandes échelles (SGE). Depuis DEARDORFF (1970), on étudie les écoulements turbulents ou stratifiés MÉTAIS & LESIEUR (1992), le transport turbulent de scalaires passifs SYKES & HENN (1992) ou réactifs SYKES et al. (1992), MEEDER & NIEUWSTADT (2000) et le transport de particules solides, WANG & SQUIRES (1996) et SHAO & LI (1999) à l'aide de la SGE. Cette démarche est particulièrement intéressante pour simuler la dispersion atmosphérique de polluants, la prédiction des taux de ségrégation ou des pics de pollution XIE et al. (2004), parce qu'elle permet la prise en compte de l'évolution séparée des grandes échelles ne participant pas forcément à une dynamique modélisable simplement.

Cependant, de nombreux processus physico-chimiques ont lieu à une échelle beaucoup plus petite que l'échelle minimale résolue par la SGE. Il est donc nécessaire de modéliser le comportement sous-maille du scalaire passif et des particules transportées par la SGE.

1.3.2 Couplage d'un modèle stochastique de sous-maille avec une simulation des grandes échelles

La SGE est utilisée pour étudier la dispersion de scalaires passifs, des particules solides et des gouttelettes dans une couche limite turbulente. Le problème est abordé par une approche lagrangienne. Les particules fluides contenant le scalaire ainsi que les particules solides et les gouttelettes se déplacent suivant l'écoulement grande-échelle directement résolu par la SGE. Cependant, de nombreux processus physico-chimiques, comme les réactions chimiques à la surface des gouttes, les collisions interparticulaires, la coalescence, la fragmentation ou l'évaporation des gouttelettes ont lieu à des échelles bien plus petites que la maille. Il est donc nécessaire de modéliser le transport sous-maille des particules, POZORSKI et al. (2004). Pour ce faire, dans l'équation de transport des particules par un écoulement non uniforme, la vitesse du fluide à la position de la particule est donnée par une partie grande échelle et une partie sous-maille.

L'équation stochastique de LANGEVIN est utilisée pour déterminer la composante sous-maille (petite échelle) de la vitesse des particules dans la SGE, fournissant la composante grande échelle. Afin de réaliser le couplage entre la SGE et le modèle de LANGEVIN, celui-ci est reformulé en termes de grandeurs filtrées dans la maille pour simuler les petites échelles présentes en sous-maille de la SGE. Le modèle stochastique est ainsi exprimé uniquement en fonction des grandeurs obtenues par la SGE avec le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991).

La modélisation stochastique est bien adaptée à l'étude de la dispersion de scalaires passifs, DURBIN (1983). Elle permet de traiter les sources ponctuelles et les géométries complexes. D'autre part, l'introduction de la diffusion moléculaire, SIMOËNS et al. (1997), et des réactions chimiques se fait à moindre coût, même si ce coût reste initialement important à cause du grand nombre de particules injectées. Par ailleurs, la vitesse du fluide à la position de la particule solide ou de la gouttelette peut être obtenue en analogie avec le modèle stochastique classique développé pour les particules fluides, AGUIRRE et al. (2004).

1.3.3 Modèle de coalescence/fragmentation

Comme nous l'avons vu dans la première partie de ce chapitre, les propriétés physico-chimiques des nuages, des brouillards mais aussi des panaches industriels sont étroitement liées aux interactions entre gouttelettes. La coalescence et la fragmentation jouent un rôle prépondérant dans la détermination de la distribution de taille des aérosols. L'apparition locale de grandes gouttes peut entraîner le dépôt des polluants contenus dans ces gouttes. De même, suite à la fragmentation, de très petites gouttelettes sont créées, pouvant être transportées par la turbulence atmosphérique loin de la source de pollution.

Afin d'introduire la coalescence et la fragmentation dans la SGE du transport de particules solides et de gouttelettes, nous proposons ici un modèle probabiliste de coalescence et de fragmentation inspiré du modèle stochastique de fragmentation de APTE et al. (2003). Par définition de la SGE, les phénomènes ayant lieu à l'intérieur de la maille sont inconnus. On considère donc la coalescence/fragmentation sous l'hypothèse de symétrie d'échelle. Dans ce cas, l'évolution de la distribution de taille des gouttelettes satisfait une équation de FOKKER-PLANCK. A chaque pas de temps, la distribution de taille des gouttelettes au sein de la maille est donnée par la solution de cette équation de FOKKER-PLANCK. Les paramètres du modèle sont calculés de manière locale et instantanée en fonction de la dynamique des gouttelettes. Au sein de chaque maille la conservation de la masse est appliquée.

1.3.4 Plan de l'étude

Le premier chapitre de cette étude est consacré à la description de la SGE. Le chapitre deux présente le couplage du modèle stochastique de LANGEVIN avec la SGE. Ce couplage est appliqué à la simulation de la dispersion d'un panache de scalaire passif issu d'une source élevée. L'ensemble est confronté à l'expérience.

Dans le troisième chapitre on introduit la modélisation du transport de particules solides et de gouttelettes. Dans l'équation de transport des particules par un écoulement non uniforme, la vitesse du fluide à la position de la particule est donnée par une partie grande échelle et une partie sous-maille. La vitesse sous-maille des particules est déterminée par analogie avec le modèle stochastique de sous-maille pour le scalaire passif. La modification de l'écoulement par la présence des particules ainsi que les collisions interparticulaires sont introduites dans ce chapitre. Enfin, l'ensemble est confronté à trois expériences de laboratoire relatives au transport de particules de sable et à l'érosion éolienne, NALPANIS et al. (1993), ZHANG et al. (2004) et TANIÈRE et al. (1997).

Le quatrième chapitre est consacré au développement d'un modèle probabiliste de coalescence et de fragmentation de gouttelettes. Le modèle est établi pour une turbulence homogène isotrope et confronté aux résultats de HO & SOMMERFELD (2002) pour le seul cas de la coalescence, de APTE et al. (2003) pour la fragmentation et de LASHERAS et al. (1998) pour un cas mixte. Une fois la validation

terminée, le modèle est introduit dans la SGE et l'ensemble est appliqué à la dispersion d'un panache de gouttelettes. Les résultats sont comparés aux profils expérimentaux relatifs à un scalaire passif par manque de données expérimentales propres.

Enfin, dans le dernier chapitre nous étudions les mécanismes de transport des particules solides dans une couche limite. A l'instant initial, les particules sont uniformément réparties dans le domaine d'étude. L'évolution du champ de concentration et la formation de régions de concentration préférentielle sont analysées.

Conclusion

En conclusion, les particules atmosphériques peuvent avoir des conséquences importantes sur l'environnement. Par conséquent, la dispersion et les caractéristiques de l'aérosol atmosphérique sont fondamentales pour définir la nature positive ou négative de cet impact. Les caractéristiques physico-chimiques des aérosols modifient la chimie de l'atmosphère mais aussi le comportement des aérosols mêmes. Les particules possèdent des pouvoirs nocifs sur l'organisme de manière intrinsèque auxquels s'ajoute le caractère toxique des composés chimiques qu'elles transportent. Afin de modéliser la dispersion atmosphérique des particules, il est donc nécessaire de prendre en compte, dans la modélisation, le mélange et les divers processus d'interactions et de réactions chimiques pouvant avoir lieu entre les particules.

Dans ce travail, la SGE est utilisée pour étudier la dispersion de scalaires passifs, des particules solides et des gouttelettes dans une couche limite turbulente. Étant donné que de nombreux processus physico-chimiques, comme les réactions chimiques à la surface des gouttes, les collisions interparticulaires, la coalescence, la fragmentation ou l'évaporation des gouttelettes ont lieu à des échelles bien plus petites que la maille, l'équation stochastique de LANGEVIN est utilisée pour déterminer la composante sous-maille (petite échelle) de la vitesse des particules fluides, soient porteuses de scalaire, soient relatives au mouvement des particules solides ou liquides dans le cadre de l'équation du mouvement d'une sphère dans un écoulement turbulent. Le modèle stochastique est exprimé uniquement en fonction des grandeurs obtenues par la SGE avec le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991). Enfin, la coalescence et la fragmentation sont introduites dans la SGE du transport de particules solides et de gouttelettes, par un modèle probabiliste de coalescence et de fragmentation inspiré du modèle stochastique de fragmentation de APTE et al. (2003). Les résultats des différents modèles introduits sont confrontés à diverses expériences de laboratoire.

Chapitre 2

Simulation des grandes échelles

Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons l’outil numérique utilisé au cours de cette étude. Le code de calcul atmosphérique SUBMESO, code communautaire de recherche développé au sein d’une collaboration nationale MESTAYER et al. (1995), est l’outil fondamental à partir duquel ces travaux ont été réalisés. Ce code est issu du modèle atmosphérique ARPS (Advanced Regional Prediction System) version 4.5.2, XUE et al. (2000) et XUE et al. (2001), développé au *Center of Analysis and Prediction of Storms* (CAPS) de l’Université de l’Oklahoma, aux Etats-Unis. Au sein de la communauté française, le code a été développé dans le but de simuler la dynamique et la thermodynamique d’écoulements atmosphériques à des échelles spatiales - dites petites méso-échelles - situées entre les échelles micro et méso, soit typiquement de quelques dizaines de mètres à quelques dizaines de kilomètres. Par soucis de clarté et de concision, nous nous limitons à la description de la simulation des grandes échelles et aux modèles de turbulence associés que nous avons mis en oeuvre. On pourra se reporter au manuel d’utilisation du code, DROEGEMEIER et al. (1995), pour la description d’autres modèles disponibles.

Tout d’abord, une description du modèle et du code SUBMESO fournit les hypothèses de base et les équations sur lesquelles le code est fondé, ainsi que les différentes fermetures de sous-maille. Ensuite, sont détaillés les conditions aux limites, les conditions initiales et les principaux éléments techniques. La dernière partie de ce chapitre est consacrée à l’application du code à une couche limite de laboratoire et à la validation de cette application. Notons que dans AGUIRRE (2005), nous trouverons les détails du modèle dynamique et les modifications que nous avons implantées dans ARPS.

2.1 Hypothèses de base et approximations

Le modèle atmosphérique non-hydrostatique ARPS est fondé sur la résolution des équations tri-dimensionnelles de NAVIER-STOKES d’un écoulement compressible, et adaptées aux simulations atmosphériques. Comme pour tout modèle numérique, un certain nombre d’hypothèses et d’approximations permettent de réduire la complexité du système d’équations décrivant l’écoulement.

La plus restrictive de ces approximations est celle dite de BOUSSINESQ, qui consiste essentiellement à négliger les variations de densité du fluide par rapport à une densité de référence définie au préalable, dans tous les termes des équations dynamiques et thermodynamiques, à l’exception du terme de flottabilité. L’approximation de BOUSSINESQ impose par définition que le terme instationnaire soit négligé dans l’équation de continuité, ce qui caractérise un système anélastique.

Le caractère non-hydrostatique du modèle introduit une souplesse supplémentaire par rapport à un modèle hydrostatique. En effet, l'hypothèse hydrostatique limiterait le modèle à la simulation d'écoulements s'écartant peu de l'état hydrostatique, autrement dit dont les mouvements verticaux sont petits devant les mouvements horizontaux.

Le modèle utilise en outre l'approximation quasi-compressible afin de réduire les temps de calcul. ARPS est doté d'un schéma explicite d'intégration en temps de type "*time-splitting*", à deux pas de temps. Cette technique consiste à calculer les termes dit "acoustiques" des équations, c'est-à-dire les termes affectés par les ondes acoustiques susceptibles de se développer dans le domaine du fait de la compressibilité de l'écoulement, à chaque petit pas de temps, subdivision d'un grand pas de temps, auquel sont calculés les termes non acoustiques. Ces ondes ne présentent pas d'intérêt aux échelles spatio-temporelles qui nous concernent. Il n'est pas utile de résoudre correctement les modes acoustiques qui sont plutôt pénalisants en temps de calcul. Ainsi, la réduction artificielle de la vitesse du son intervenant dans l'équation de pression et le terme de flottabilité, typiquement jusqu'à un facteur 2 dans le cas où les ondes de gravité sont peu importantes, permet d'augmenter le pas de temps du schéma de résolution sans dégrader la qualité de l'écoulement simulé : c'est ce que l'on appelle l'approximation quasi-compressible.

D'autres approximations simplifiant le système d'équations sont précisées dans la suite de ce travail.

2.2 Équations du modèle

Dans cette étude, nous travaillons toujours en atmosphère sèche. Les équations du modèle ARPS présentées ici sont écrites pour de l'air sec, bien que l'humidité soit prise en compte sous toutes ses formes dans le modèle complet. Nous posons ici les équations du modèle qui sont établies en détail par AGUIRRE (2005).

2.2.1 État de référence

La pression p , la densité ρ et la température potentielle θ sont définies comme la somme d'une valeur de référence p_r , ρ_r et θ_r , l'état de référence (ou état de base), et de l'écart à cette valeur Δp , $\Delta \rho$ et $\Delta \theta$, la perturbation. L'état de référence est supposé homogène horizontalement dans tout le domaine, en équilibre hydrostatique et invariant dans le temps. L'hypothèse hydrostatique implique que la pression vérifie :

$$\frac{\partial p_r}{\partial z} = -\rho g . \quad (2.1)$$

L'état de référence qui est défini à l'initialisation constitue également, dans la plupart des cas, l'état initial des variables ρ , p et θ . A la différence de la pression et de la température potentielle pour lesquelles c'est la perturbation qui intervient essentiellement dans les équations du modèle, pour le vecteur vitesse c'est le champ total (état de référence et perturbation).

2.2.2 Équations de quantité de mouvement

L'équation de quantité de mouvement s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_r} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Delta p - \alpha_d \frac{\partial \rho_r u_j}{\partial x_j} \right) - 2\omega_j \epsilon_{ijk} (u_k - U_{gk}) + B\delta_{i3} + \nu \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_j} , \quad (2.2)$$

où $i = 1, 2, 3$, $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$, $(u_1, u_2, u_3) = (u, v, w)$ sont les trois composantes du vecteur vitesse, α_d est le coefficient du terme artificiel de divergence, ω_j est la composante dans la direction j du vecteur rotation de la Terre $\vec{\Omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) = (\Omega \cos \lambda, \Omega \sin \lambda, 0)$, λ étant la latitude, ϵ_{ijk} est le symbole de LEVI CIVITA, U_{gk} est la composante dans la direction k du vent géostrophique, B est le terme de flottabilité, ν la viscosité de l'air et S_{ij} le tenseur de déformation de l'écoulement.

Dans le premier terme de droite de l'équation (2.2) seule la perturbation de pression Δp apparaît. En effet, dans les équations pour u et v , la pression de référence est homogène horizontalement donc ses gradients horizontaux sont nuls, et dans l'équation pour w , le gradient vertical de la pression de référence se combine - selon l'hypothèse hydrostatique de l'état de référence - avec le terme de gravité pour former le terme de flottabilité (troisième terme de droite). Il est toutefois possible d'imposer un gradient de pression moyen par l'intermédiaire des composantes du vent géostrophique $(U_{g1}, U_{g2}, U_{g3}) = (U_g, V_g, 0)$ qui apparaissent dans le terme de CORIOLIS (deuxième terme de droite). La divergence de la vitesse pondérée par la densité dans le premier terme de droite est introduite afin d'amortir les modes ne vérifiant pas l'approximation anélastique. En effet, des modes acoustiques instables peuvent, d'après SKAMAROCK & KLEMP (1992), être excités par la méthode de "time-splitting" et sont efficacement atténués en rajoutant ce terme de divergence. Le contrôle de cet amortissement est assuré au moyen du coefficient α_d .

Le terme de flottabilité (troisième terme de droite) s'écrit :

$$B\delta_{i3} = -g_i \frac{\Delta\rho}{\rho_r}, \quad (2.3)$$

$$= -g_i \left(\frac{\Delta\theta}{\theta_r} - \frac{C_v}{C_p} \frac{\Delta p}{p_r} \right). \quad (2.4)$$

Cette écriture fait intervenir simultanément trois approximations : celle de BOUSSINESQ $\Delta\rho/\rho_r \ll 1$ d'une part, et les approximations $\Delta p/p_r \ll 1$ et $\Delta\theta/\theta_r \ll 1$ d'autre part. Cela revient à supposer que les champs ρ , p et θ s'écartent peu de leur état de base. Ces hypothèses impliquent que l'état de base doit être défini avec soin afin de rester cohérent avec le type d'écoulement simulé.

Enfin, le dernier terme de droite, dit des contraintes visqueuses, fait intervenir le taux de déformation de l'écoulement :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.5)$$

2.2.3 Équation d'évolution de la perturbation de pression

Une équation d'évolution de la pression est établie à partir de la dérivation de l'équation d'état, de la définition de la température potentielle et de l'équation de continuité, AGUIRRE (2005) :

$$\frac{\partial \Delta p}{\partial t} + \frac{\partial u_j \Delta p}{\partial x_j} = \rho_r c_s^2 \left(\frac{1}{\theta_r} \frac{\partial \theta_r}{\partial t} - \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) + \rho_r g w. \quad (2.6)$$

Dans le premier terme de droite, $c_s = \sqrt{\gamma p_r / \rho_r}$ est la vitesse de référence du son, que l'on considère comme étant la vitesse du son partout dans l'écoulement, quel qu'il soit. Cette approximation revient à supposer que la densité et la pression s'écartent peu de leur état de référence. Ceci revient à remplacer ρ_r par ρ en facteur dans le premier terme à droite. La dérivé temporelle de la température est le terme de chauffage diabatique. Le deuxième terme à droite provient du gradient de pression de référence, selon la relation hydrostatique (2.1) et en considérant l'homogénéité horizontale de ce champ.

2.2.4 Équation d'évolution de la perturbation de température potentielle

De la même façon une équation d'évolution est établie pour la température potentielle :

$$\frac{\partial \Delta \theta}{\partial t} + u_j \frac{\partial \Delta \theta}{\partial x_j} = -w \frac{\partial \theta_r}{\partial z}. \quad (2.7)$$

2.2.5 Diffusion artificielle

Afin de réduire puis d'éteindre les modes numériques de haute fréquence éventuellement excités par le schéma spatio-temporel utilisé, des termes de diffusion artificielle sont introduits dans les équations de quantité de mouvement et de température potentielle. Ces termes D_2 et D_4 , d'ordres respectifs 2 et 4 en espace, s'écrivent :

$$\begin{aligned} D_2 &= K_{H_2} \left(\frac{\partial^2 \rho_r \Delta \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho_r \Delta \phi}{\partial y^2} \right) + K_{V_2} \frac{\partial^2 \rho_r \Delta \phi}{\partial z^2}, \\ D_4 &= K_{H_4} \left(\frac{\partial^4 \rho_r \Delta \phi}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 \rho_r \Delta \phi}{\partial y^4} \right) + K_{V_4} \frac{\partial^4 \rho_r \Delta \phi}{\partial z^4}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

ϕ représente une des trois composantes du vecteur vitesse ou de la température potentielle. La diffusion d'ordre 4 est plus sélective que celle d'ordre 2.

Le réglage des diffusivités K_{H_2} , K_{V_2} , K_{H_4} et K_{V_4} est délicat, car il est préférable qu'elles soient les plus faibles possible pour ne pas altérer la physique de l'écoulement. En outre, le choix de diffusivités trop grandes peut conduire au développement d'instabilités numériques. Les valeurs conseillées pour filtrer les ondes de période $2\Delta x$ sont, ARPS (1994) et PIELKE (1984) :

$$\begin{aligned} K_{H_2} &= \frac{1}{20\Delta t} \left(\frac{\Delta x^2}{\pi^2} + \frac{\Delta y^2}{\pi^2} \right) \text{ et } K_{V_2} \left(\frac{\Delta z}{\pi} \right)^2, \\ K_{H_4} &= \frac{1}{20\Delta t} \left(\frac{\Delta x^4}{\pi^4} + \frac{\Delta y^4}{\pi^4} \right) \text{ et } K_{V_4} \left(\frac{\Delta z}{\pi} \right)^4. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Dans la plupart de nos simulations, K_{H_4} et K_{V_4} sont imposées. Elles sont généralement choisies égales aux valeurs conseillées.

2.3 Modèle de turbulence

Dans le code ARPS, la turbulence est décrite par la simulation des grandes échelles (SGE). Dans la suite on décrira ce type de modélisation et les modèles de sous-maille associés, existants à l'origine dans le code. La technique de résolution par simulation des grandes échelles consiste à filtrer les équations de NAVIER-STOKES et à modéliser la contribution à l'écoulement de la partie non résolue, dite de sous-maille. Par cette méthode, on décrit l'évolution des structures turbulentes instationnaires dont l'échelle est supérieure à la taille des mailles. Les modèles statistiques, ne donnent pas accès à cette information.

2.3.1 Équations filtrées

Les variables ρ , u_i , p et θ sont filtrées spatialement. La longueur caractéristique du filtre est $\Delta = (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{1/3}$. Ces variables se décomposent en une partie filtrée grande échelle $\tilde{\rho}$, \tilde{u}_i , \tilde{p} ou $\tilde{\theta}$

explicitement résolue par les équations et une partie sous-maille ρ' , u'_i , p' ou θ' . Pour la vitesse, par exemple, ceci revient à écrire :

$$\tilde{u}_i(\vec{x}, t) = \int_V u_i(\vec{x} - \vec{r}, t) G(\vec{r}) d\vec{r} \quad \text{avec} \quad (2.10)$$

$$u_i(\vec{x}, t) = \tilde{u}_i(\vec{x}, t) + u'_i(\vec{x}, t) . \quad (2.11)$$

\vec{r} est le rayon du filtre, V le volume d'intégration et le filtre physique $G(\vec{r})$ est défini par :

$$G(\vec{r}) = \begin{cases} 1/\Delta & \text{si } |\vec{x} - \vec{r}| < \Delta/2 \\ 0 & \text{sinon .} \end{cases} \quad (2.12)$$

Après filtrage des équations (2.2), (2.6) et (2.7), on obtient le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\tilde{\rho}_r} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tilde{\Delta p} - \alpha_d \frac{\partial \tilde{\rho}_r \tilde{u}_j}{\partial x_j} \right) - 2\omega_j \epsilon_{ijk} \left(\tilde{u}_k - \tilde{U}_{gk} \right) + \tilde{B} \delta_{i3} + \nu \frac{\partial \tilde{S}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} , \\ \frac{\partial \tilde{\Delta p}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_j \tilde{\Delta p}}{\partial x_j} = \tilde{\rho}_r c_s^2 \left(\frac{1}{\tilde{\theta}_r} \frac{\partial \tilde{\theta}_r}{\partial t} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} \right) + \tilde{\rho}_r g \tilde{w} , \\ \frac{\partial \tilde{\Delta \theta}}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{\Delta \theta}}{\partial x_j} = -\tilde{w} \frac{\partial \tilde{\theta}_r}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{j\theta}}{\partial x_j} . \end{cases} \quad (2.13)$$

Dans ces équations apparaissent les termes dits de ‘‘sous-maille’’ que sont le tenseur de REYNOLDS $\tau_{ij} = \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \widetilde{u_i u_j}$ et le flux turbulent de température potentielle $\tau_{j\theta} = \tilde{u}_j \tilde{\theta} - \widetilde{\theta u_j}$. Ces tenseurs doivent être modélisés en fonction des grandeurs résolues afin de fermer ce système d'équations.

2.3.2 Modèles de sous-maille

Le code donne le choix d'utilisation de trois modèles de sous-maille différents. Il y a le modèle de SMAGORINSKY (1963), le modèle de SMAGORINSKY dynamique décrit par GERMANO et al. (1991), et le modèle à une équation pour l'énergie cinétique de sous-maille. Dans les deux premiers cas, il s'agit de modèles de viscosité purement dissipatifs où la viscosité et la diffusivité de sous-maille sont exprimées en fonction du tenseur des contraintes. Pour la troisième modélisation, l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente est résolue et la fermeture est appliquée au niveau de cette équation. La version du modèle SMAGORINSKY dynamique a été implantée par AGUIRRE (2005).

Modèle de SMAGORINSKY (1963)

Les deux tenseurs τ_{ij} et $\tau_{j\theta}$ sont donnés par un modèle de viscosité :

$$\tau_{ij} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk} = K_m \tilde{S}_{ij} , \quad (2.14)$$

$$\tau_{j\theta} = K_\theta \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial x_j} . \quad (2.15)$$

La viscosité et la diffusivité ‘‘sous-maille’’ K_m et K_θ sont données en fonction des grandeurs résolues par un modèle basé sur l'hypothèse d'équilibre local entre la production et la dissipation à petite échelle. De l'écriture de cet équilibre, on déduit les formulations suivantes pour K_m et K_θ :

$$K_m = (C_s \Delta)^2 \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij} - \frac{N^2}{Pr_t}} , \quad (2.16)$$

$$K_\theta = \frac{K_m}{Pr_t} . \quad (2.17)$$

L'influence de la stratification de l'atmosphère entre en compte dans la formulation de la viscosité turbulente par l'intermédiaire du terme N^2/P_r , suggéré par LILLY (1967). Cela fait intervenir la fréquence de BRUNT-VÄISÄLÄ N :

$$N = \left(-\frac{g}{\rho} \frac{d\rho}{dz} \right)^{1/2}, \quad (2.18)$$

et le nombre de PRANDTL turbulent Pr_t . Celui-ci est exprimé à partir de la longueur de mélange :

$$Pr_t = \frac{1}{1 + \frac{2l}{\Delta}}. \quad (2.19)$$

L'échelle de longueur sous-maille l , correspond à la taille maximale des tourbillons non-résolus. Pour la stratification neutre ou instable, on suppose $l = \Delta$ et $Pr_t = 1/3$. En d'autres termes, la diffusivité sous-maille est trois fois plus importante que la viscosité sous-maille. Si la stratification est stable, la longueur de mélange est réduite de manière à tenir compte du confinement de l'écoulement par la stratification, DEARDORFF (1980) :

$$l = 0.76 \sqrt{\tilde{k}} \left| \frac{g}{\theta_r} \frac{\partial \theta_r}{\partial z} \right|^{-1/2}. \quad (2.20)$$

Cette expression impose au Pr_t d'être compris entre 1/3 et 1. Cela permet de prendre en compte la réduction de l'échelle de la diffusion turbulente du scalaire par la stratification. Dans tous les cas étudiés ici la stratification de l'écoulement est neutre, donc $l = \Delta$ et $Pr_t = 1/3$.

D'autre part, dans une turbulence homogène et isotrope, LILLY (1967) propose de prendre la constante C_s égale à 0.23. Cependant, dans le cas des écoulement cisailés, cette valeur provoque une surestimation de la dissipation des petites échelles. Numériquement, DEARDORFF (1970) a trouvé que dans un écoulement en canal la valeur $C_s = 0.1$ est la plus adéquate. En raffinant le maillage, MASON & CALLEN (1986) trouvent que $C_s = 0.2$ donne de meilleurs résultats que $C_s = 0.1$. MOIN & KIM (1982) utilisent une fonction d'amortissement de VAN DRIEST (1956) pour tenir compte du fait que la viscosité turbulente devient négligeable en proche paroi. PIOMELLI et al. (1988) proposent encore une fois la valeur de $C_s = 0.1$, et utilisent aussi une fonction de paroi. Nous concluons, comme GERMANO et al. (1991), que le paramètre C_s du modèle de viscosité est non-universel et peut varier d'un écoulement à l'autre mais aussi d'une région de l'écoulement à l'autre. Ces derniers développent une approche dynamique qui consiste à déterminer C_s de manière locale et instantanée à partir des propriétés des petites échelles turbulentes du champ résolu. C'est cette modélisation (AGUIRRE (2005)) que nous utilisons pour toute la suite.

Modèle de Smagorinsky dynamique, GERMANO et al. (1991)

Afin d'obtenir la constante de Smagorinsky variable localement et instantanément, les équations filtrées de NAVIER-STOKES (2.13) sont filtrées une deuxième fois avec un filtre test. Celui-ci est de même type que le filtre $G(\vec{r})$ (2.12), mais il a une largeur supérieure. Le rapport entre les largeurs des deux filtres est l'unique paramètre (supplémentaire) de cette modélisation. Il doit être le gage d'une certaine convergence.

En appliquant le filtre test noté $(\widehat{\cdot})$, d'épaisseur $\hat{\Delta}$, sur l'équation de transport de quantité de mouvement du champ résolu (2.13), on obtient :

$$\frac{\partial \hat{u}_i}{\partial t} + \hat{u}_j \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\hat{\rho}_r} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\widehat{\Delta p} - \alpha_d \frac{\partial \hat{\rho}_r \hat{u}_j}{\partial x_j} \right) - 2\omega_j \epsilon_{ijk} \left(\hat{u}_k - \hat{U}_{gk} \right) + \hat{B} \delta_{i3} + \nu \frac{\partial \hat{S}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2.21)$$

où $T_{ij} = \widehat{\hat{u}_i \hat{u}_j} - \widehat{\widehat{u}_i \widehat{u}_j}$ est l'équivalent du tenseur de sous-maille τ_{ij} pour le filtre test. Par analogie avec le modèle de SMAGORINSKY (1963), τ_{ij} et T_{ij} sont modélisés par :

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tau_{kk} = 2C_{SL}(x, y, z, t)\Delta^2|\tilde{S}|\tilde{S}_{ij}, \quad (2.22)$$

$$T_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}T_{kk} = 2C_{SL}(x, y, z, t)\hat{\Delta}^2|\hat{S}|\hat{S}_{ij}. \quad (2.23)$$

où $|\tilde{S}| = (2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij})^{1/2}$. En filtrant le tenseur de sous-maille τ_{ij} à l'aide du filtre test, GERMANO et al. (1991) construisent le tenseur L_{ij} . Celui-ci peut être calculé directement en appliquant le filtre test au champ de vitesse résolu par la SGE. En effet, L_{ij} est donné par :

$$L_{ij} = T_{ij} - \hat{\tau}_{ij}, \quad (2.24)$$

$$= -\widehat{\hat{u}_i \hat{u}_j} + \hat{u}_i \hat{u}_j, \quad (2.25)$$

qui peut être calculé directement en appliquant le filtre test au champ de vitesse résolu par la SGE. D'autre part, les deux fermetures sous-maille proposées pour les tenseurs τ_{ij} et T_{ij} (2.22 et 2.23 respectivement) conduisent à :

$$L_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}L_{kk} = 2C_{SL}(x, y, z, t)\left(\hat{\Delta}^2|\hat{S}|\hat{S}_{ij} - \Delta^2|\widehat{|\tilde{S}|\tilde{S}_{ij}}|\right), \quad (2.26)$$

$$= 2C_{SL}(x, y, z, t)M_{ij}. \quad (2.27)$$

Ainsi, $C_{SL}(x, y, z, t)$ peut être calculée de manière locale et instantanée. Cependant, (2.24) est un système de cinq équations indépendantes avec une inconnue. Afin d'obtenir $C_{SL}(x, y, z, t)$, LILLY (1992) propose de minimiser l'erreur avec l'approche des moindres carrés. En définissant Q comme le carré de l'erreur :

$$Q = \left(L_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}L_{kk} - 2C_{SL}(x, y, z, t)M_{ij}\right)^2, \quad (2.28)$$

en posant $\partial Q/\partial C_{SL} = 0$, $C_{SL}(x, y, z, t)$ est donnée par :

$$C_{SL}(x, y, z, t) = \frac{1}{2} \frac{L_{ij}M_{ij}}{M_{ij}^2}. \quad (2.29)$$

L'approche développée par LILLY (1992) diffère de l'approche initiale de GERMANO et al. (1991). Ces derniers ont multiplié l'équation (2.26) des deux côtés par \tilde{S}_{ij} :

$$C_{SL}(x, y, z, t) = \frac{1}{2} \frac{L_{ij}\tilde{S}_{ij}}{M_{ij}\tilde{S}_{ij}}. \quad (2.30)$$

Ce faisant, GERMANO et al. (1991) n'obtiennent qu'une projection de $C_{SL}(x, y, z, t)$.

Par ailleurs, il se peut que localement $C_{SL}(x, y, z, t)$ atteigne des valeurs négatives trop grandes, de sorte que la viscosité totale $\nu + K_m$ puisse devenir négative. Cela génère des instabilités numériques. Pour éviter ce phénomène, il est possible de calculer une valeur de la variable $C_{SL}(x, y, z, t)$, qui sera, par exemple, la moyenne de $C_{SL}(x, y, z, t)$ dans les directions d'homogénéité de l'écoulement. Dans notre cas, cette moyenne est faite sur un plan horizontal car nous étudions principalement des écoulement en couche limite.

Ci-dessous est établie, de la même façon, la fermeture dynamique du tenseur de sous-maille de flux de température potentielle $\tau_{j\theta} = \widetilde{u_j\theta} - \theta u_j$, MOIN et al. (1991) et LILLY (1992). Le filtre test est appliqué à l'équation d'évolution de la perturbation de la température potentielle filtrée et on obtient :

$$\frac{\partial \widehat{\Delta\theta}}{\partial t} + \widetilde{u}_j \frac{\partial \widehat{\Delta\theta}}{\partial x_j} = -\widehat{w} \frac{\partial \theta_r}{\partial z} + \frac{\partial T_{j\theta}}{\partial x_j}, \quad (2.31)$$

où $T_{j\theta} = \widehat{\widetilde{u}_j\theta} - \widehat{u}_j\theta$. Les tenseurs $\tau_{j\theta}$ et $T_{j\theta}$ sont obtenus par analogie avec le modèle de SMAGORINSKY (1963) :

$$\tau_{j\theta} = \frac{2C_{SL}\Delta^2}{Pr_t} |\widetilde{S}| \frac{\partial \widetilde{\theta}}{\partial x_j}, \quad (2.32)$$

$$T_{j\theta} = \frac{2C_{SL}\widehat{\Delta}^2}{Pr_t} |\widehat{S}| \frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial x_j}. \quad (2.33)$$

En considérant le tenseur de flux de température potentielle lié au filtre test

$$P_{j\theta} = T_{j\theta} - \widehat{\tau}_{j\theta}, \quad (2.34)$$

$$= \widehat{\widetilde{u}_j\theta} - \widehat{u}_j\theta, \quad (2.35)$$

et en appliquant la minimisation de l'erreur avec l'approche des moindres carrés, on obtient (LILLY (1992)) l'expression suivante pour le nombre de PRANDTL turbulent :

$$\frac{1}{Pr_t} = \frac{1}{2C_{SL}} \frac{P_{j\theta} R_{j\theta}}{R_{j\theta}^2}, \quad (2.36)$$

$$= \frac{M_{ik}^2}{L_{ik} M_{ik}} \frac{P_{j\theta} R_{j\theta}}{R_{j\theta}^2}, \quad (2.37)$$

où l'équation (2.29) a été utilisée pour obtenir l'égalité et où $R_{j\theta}$ est donné par :

$$R_{j\theta} = \widehat{\Delta}^2 |\widehat{S}| \frac{\partial \widehat{\theta}}{\partial x_j} - \Delta^2 |\widetilde{S}| \frac{\partial \widetilde{\theta}}{\partial x_j}. \quad (2.38)$$

Dans le cadre de la dispersion atmosphérique de polluants en canopée, où interviennent entre autre des écoulements de paroi, des effets de convection, la présence d'obstacles doit être prise en compte. Les modèles de sous-maille sans une constante dynamique donnent alors de moins bons résultats à cause des fortes inhomogénéités, MURAKAMI (1996).

Compte tenu de l'objectif de ce travail, dans toutes nos simulations, on utilise le modèle dynamique de sous-maille. Notons que nous n'étudions que des cas neutres mais que la résolution de l'équation de transport de la température potentielle (2.13) est maintenue.

Modèle à une équation pour l'énergie cinétique turbulente de sous-maille (DEARDORFF 1980)

Cette approche est censée améliorer la prise en compte du transport des petits tourbillons générés par les creux, les bosses et les inhomogénéités thermiques. Elle est basée sur la notion de longueur de mélange de sous-maille l , qui dépend de la stratification de l'atmosphère et de l'énergie cinétique de sous-maille. Les deux tenseurs de sous-maille sont à nouveau donnés par le modèle de viscosité,

équations (2.14) et (2.15). À la différence du modèle de SMAGORINSKY (1963), la viscosité et la diffusivité, K_m et K_θ , sont fonctions de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille et non plus du tenseur des contraintes résolues.

L'équation de transport de l'énergie cinétique de sous-maille \tilde{k} , est obtenue à partir de l'équation d'évolution de la vitesse sous-maille. En faisant la différence entre l'équation de conservation de la quantité de mouvement non filtrée (2.2) et l'équation filtrée (2.13), on obtient l'équation de transport des fluctuations de vitesse en sous-maille u'_i . Cette équation est ensuite multipliée par u'_j , et l'équation de transport de u'_j est multipliée par u'_i . En appliquant le filtrage à la somme de ces deux équations, on obtient l'équation de transport du tenseur de sous-maille, $\widetilde{u'_i u'_j}$. Enfin, en prenant $i = j$, l'équation de transport de \tilde{k} est établie. Après simplification et modélisation des corrélations triples et des corrélations pression-vitesse $\widetilde{u_i \Delta p}$ l'équation d'évolution de \tilde{k} devient :

$$\frac{\partial \tilde{k}}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} = -\tau_{ij} \tilde{S}_{ij} + \frac{g}{\theta_r} \tau_{3\theta} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(2K_m \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right) - \tilde{\varepsilon}. \quad (2.39)$$

Dans le deuxième membre, en allant de gauche à droite, on reconnaît les termes de production par cisaillement, de production ou de destruction par effet de flottabilité, de diffusion et de dissipation visqueuse de l'énergie cinétique sous-maille. Le terme de diffusion modélise le transport en sous-maille de \tilde{k} , et des corrélations $\widetilde{u_i \Delta p}$. C'est l'hypothèse la plus contestable de cette modélisation, car on utilise la viscosité sous-maille K_m comme coefficient de proportionnalité.

La viscosité et la diffusivité turbulentes sont déterminées à partir de l'énergie cinétique \tilde{k} par :

$$\begin{aligned} K_m &= C_k l \sqrt{\tilde{k}}, \\ K_\theta &= \frac{K_m}{Pr_t}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

La définition (2.17) de K_θ reste inchangée. La longueur de mélange l et le nombre de PRANDTL turbulent Pr_t sont toujours donnés par (2.20) et (2.19), respectivement. La constante C_k est déterminée de façon optimale par MOENG ET WYNGAARD (1988), à partir de la théorie de la turbulence et des simulations de convection libre à forte résolution spatiale. Elle vaut $C_k = 0.1$.

La dissipation de \tilde{k} est donnée par (DEARDORFF (1980)) :

$$\tilde{\varepsilon} = C_\varepsilon \frac{\tilde{k}^{3/2}}{l}, \quad (2.41)$$

où C_ε est une constante qui d'après DEARDORFF (1980) vaut :

$$C_\varepsilon = \begin{cases} 3.9 & \text{à la paroi,} \\ 0.7 & \text{ailleurs.} \end{cases} \quad (2.42)$$

C_ε est fixée à 3.9 au sol, pour tenir compte de l'anisotropie locale, DEARDORFF (1980). Afin de réduire le pic d'énergie cinétique turbulente à la paroi, la valeur de C_ε a été réajustée près du sol, AGUIRRE (2005). Une décroissance exponentielle est introduite entre $C_\varepsilon = 0.7$ et $C_\varepsilon = 3.9$ sur les dix premières mailles. Le sol reste néanmoins un problème crucial.

Dans toutes nos simulations, même si on utilise le modèle dynamique de sous-maille (GERMANO et al. (1991)), nous résolvons l'équation d'évolution de l'énergie cinétique turbulente (2.39). En effet, comme cela sera décrit dans le deuxième chapitre, cette grandeur de la turbulence nous est indispensable pour la modélisation stochastique des particules fluides porteuses de scalaire en sous-maille.

2.4 Paramétrisation des flux

Les flux verticaux de quantité de mouvement τ_{i3} et le flux de chaleur sensible $\tau_{3\theta}$ au sol sont évalués par des modèles inspirés de BUSINGER et al. (1971) sous forme analytique (BYUN (1990)). Ces flux interviennent en tant que condition à la limite inférieure du domaine pour les flux de quantité de mouvement τ_{13} et τ_{23} et le flux de chaleur sensible $\tau_{3\theta}$ dans l'équation (2.13). Les flux de surface sont donnés par :

$$\begin{aligned} (\tau_{13})_s &= -\rho_r C_{dm} \max[|u|, |u|_{min}] u , \\ (\tau_{23})_s &= -\rho_r C_{dm} \max[|u|, |u|_{min}] v , \\ (\tau_{3\theta})_s &= -\rho_r C_{dh} \max[|u|, |u|_{min}] (\theta_{2s} - \theta_s) . \end{aligned} \quad (2.43)$$

Le module de la vitesse $|\vec{u}| = (u^2 + v^2)^{1/2}$ intervenant dans ces formulations est limité par $|u|_{min}$ pour éviter que ces flux s'annulent en cas de vent nul. θ_s désigne la température potentielle à la surface, spécifiée par l'utilisateur ou calculée par le modèle de rayonnement inclus dans le modèle de sol, et θ_{2s} est la température potentielle calculée au premier niveau au-dessus du sol. Les coefficients de transferts C_{dm} et C_{dh} sont issus, dans nos simulations, des formulations de BYUN (1990) et LOUIS (1981) pour un écoulement en stratification neutre :

$$C_{dm} = \left(\frac{k_v}{\ln\left(\frac{z_1}{z_0}\right)} \right)^2 , \quad (2.44)$$

$$C_{dh} = \frac{1}{Pr_t} \left(\frac{k_v}{\ln\left(\frac{z_1}{z_0}\right)} \right)^2 . \quad (2.45)$$

où k_v est la constante de VON KARAMAN, z_0 est la hauteur de rugosité et z_1 est la hauteur de la première maille.

2.5 Grille de discrétisation spatiale

Les équations (2.13) qui régissent l'écoulement sont écrites en coordonnées généralisées de type *Gal-Chen*, GAL-CHEN & SOMMERVILLE (1975), c'est-à-dire avec suivi de terrain et homogénéité horizontale du maillage. Le maillage peut être étiré progressivement selon la direction verticale afin d'augmenter la résolution dans la zone proche du sol. Les équations du modèle (2.13) sont discrétisées par une méthode de différences finies sur une grille où les variables ont un positionnement entrelacé de type *Arakawa-C*. La figure 2.1 schématise une maille de calcul sur laquelle sont disposés les positions relatives des variables. Le schéma de discrétisation spatial utilisé dans ARPS est un schéma centré du second ordre sur maillage cartésien régulier et de premier ordre sur maillage curviligne.

2.6 Schéma temporel

Un schéma centré de second ordre en temps, de type *leapfrog* (KLEMP & WILHELMSON (1978)), est utilisé pour l'intégration en temps des équations (2.13). Ce schéma assure l'intégration sur un grand

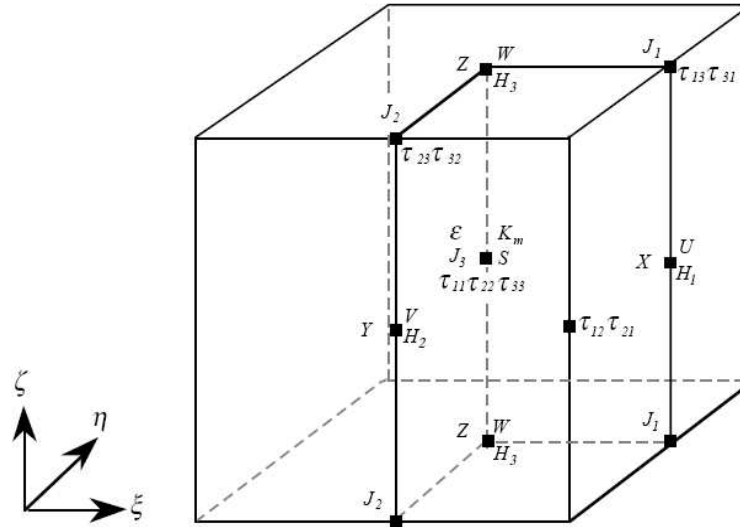


FIG. 2.1 – Schéma d’une maille de calcul avec le positionnement des variables du modèle de type Arakawa C-grid.

pas de temps à partir des champs aux deux instants précédents. Il est associé à la technique de “*time-splitting*” déjà évoquée au paragraphe 2.2.2. L’ordre 2 en temps de ce schéma nécessite l’application d’un filtre Asselin (KLEMP & WILHELMSON (1978)) couplant les deux modes résolus, l’un numérique et l’autre solution physique de l’équation d’advection, à la fin de chaque pas de temps.

Le technique de “*time-splitting*” induit l’utilisation de deux pas de temps d’intégration. L’intégration sur le petit pas de temps est effectuée au moyen d’un schéma amont-aval explicite du premier ordre (KLEMP & WILHELMSON (1978)). Le gradient de pression et la divergence de vitesse intervenant dans les équations de quantité de mouvement et de pression (2.13) sont intégrés sur le petit pas de temps. Ce sont les termes dits “acoustiques”. Les équations de quantité de mouvement et de pression sont ainsi résolues à chaque petit pas de temps, alors que l’équation pour la température potentielle (2.13) est résolue à chaque grand pas de temps.

2.7 Conditions aux limites

Cinq types de conditions latérales différentes sont disponibles dans ARPS. Au sommet du domaine on a le choix entre trois d’entre elles, qui peuvent être couplées avec une couche absorbante à l’intérieur du domaine. Les conditions aux limites sont imposées par l’intermédiaire des points extérieurs au domaine physique. Nous ne détaillerons ici que les conditions limites utilisées dans nos simulations numériques, i.e. :

- forçage extérieur à l’entrée du domaine,
- condition radiative à la sortie du domaine,

- paroi rigide sans frottement couplée avec une fonction d’amortissement (VAN DRIEST (1956)) au sol,
- condition d’amortissement sur la limite supérieure,
- conditions périodiques dans la direction transverse.

2.7.1 Conditions latérales

L’utilisation de points extérieurs au domaine physique permet de garder la même expression du schéma d’advection pour l’ensemble du domaine. Cinq conditions limites sont définies :

- paroi rigide sans frottement,
- condition périodique,
- condition de type gradient nul,
- condition radiative,
- forçage extérieur.

Dans ce qui suit nous décrirons brièvement les conditions limites latérales choisies dans nos simulations.

Périodique

La condition limite de type périodique donne au calcul une dimension infinie dans la direction de périodicité. Pour la direction x , cette condition se traduit par le système suivant :

$$\begin{aligned}
 u(1, j, k) &= u(nx - 2, j, k) , & u(nx, j, k) &= u(3, j, k) \\
 v(1, j, k) &= v(nx - 2, j, k) , & v(nx - 1, j, k) &= v(2, j, k) \\
 w(1, j, k) &= w(nx - 2, j, k) , & w(nx - 1, j, k) &= w(2, j, k) \\
 \theta(1, j, k) &= \theta(nx - 2, j, k) , & \theta(nx - 1, j, k) &= \theta(2, j, k) .
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

Afin d’éviter tout effet de bord, dans la direction transversale on utilise des conditions périodiques.

Radiative

La formulation de cette condition est basée sur les conditions limites de type SOMMERFELD où l’on suppose que la propagation de la variable ϕ est décrite par une équation d’onde :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + c_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 , \tag{2.47}$$

où c_ϕ est la vitesse de phase tenant compte de la vitesse locale d’advection et de la vitesse de propagation d’onde pour chacune des variables ϕ (vitesse normale et pression). Pour les autres variables (les vitesses parallèles, température et scalaire), le même système d’équations qu’à l’intérieur du domaine est appliqué. c_ϕ est obtenue par la méthode d’ORLANSKI (1976). Cette condition est appliquée à la fin du domaine dans la direction de l’écoulement. Elle empêche le retour d’ondes dans le domaine et permet d’obtenir une couche limite stable en temps, à la différence d’une condition de périodicité.

Forçage extérieur, AGUIRRE (2005)

Pour nos simulations les valeurs de toutes les variables sont fixées à l’entrée du domaine. On impose à la vitesse grande échelle un profil logarithmique de type :

$$\begin{aligned}
 \tilde{u}(x, y, z, t) &= \frac{u_\star}{k_v} \ln \left(\frac{z}{z_0} \right) \\
 \tilde{v}(x, y, z, t) &= 0 \\
 \tilde{w}(x, y, z, t) &= 0 .
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

A l'instant initial une aléatorisation du profil grande échelle de vitesse est appliquée. Cette aléatorisation est obtenue à partir des profils expérimentaux des trois composantes diagonales du tenseur de REYNOLDS, $\sqrt{u'^2}$, $\sqrt{v'^2}$ et $\sqrt{w'^2}$. Ainsi, à l'instant initial le profil de forçage à l'entrée du domaine s'écrit :

$$\begin{aligned}\tilde{u}(x, y, z, t) &= \frac{u_*}{k_v} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) + \sqrt{u'^2} \xi \\ \tilde{v}(x, y, z, t) &= \sqrt{v'^2} \xi \\ \tilde{w}(x, y, z, t) &= \sqrt{w'^2} \xi ,\end{aligned}\tag{2.49}$$

où ξ est une variable aléatoire comprise entre -1 et 1 . Aux instants ultérieurs, pour tenir compte des fluctuations de sous-maille dans le forçage en entrée, les valeurs de $\sqrt{u'^2}$, $\sqrt{v'^2}$ et $\sqrt{w'^2}$ sur une section située au tiers du domaine sont réintroduites en entrée. Nous n'avons pas choisi la section correspondant à la fin du domaine pour pouvoir traiter le cas des écoulements autour d'obstacles.

2.7.2 Conditions au sol et au sommet

Les conditions limites disponibles suivant la verticale sont de trois types :

- paroi rigide sans frottement,
- conditions périodiques,
- condition de type gradient nul.

Paroi rigide sans frottement

Au sol on applique la condition de paroi rigide sans frottement couplée avec une fonction d'amortissement de la viscosité turbulente, VAN DRIEST (1956). La condition limite de paroi rigide sans frottement s'écrit :

$$\begin{aligned}u(i, j, 1) &= u(i, j, 2) \\ v(i, j, 1) &= v(i, j, 2) \\ w(i, j, 1) &= -w(i, j, 3) \\ \theta(i, j, 1) &= \theta(i, j, 2) .\end{aligned}\tag{2.50}$$

2.7.3 Couche de RAYLEIGH

Afin d'éviter les réflexions d'onde sur la limite supérieure du domaine de calcul, une condition d'amortissement existe dans ARPS. Pour les écoulements qui génèrent des ondes de gravité (écoulements stratifiés au-dessus d'une topographie, par exemple, ANQUETIN et al. (1999)), mais également pour les écoulements qui présentent des zones convectives, l'amortissement des ondes sur la limite supérieure est très important.

Le principe de cette couche, appelée couche de RAYLEIGH, est d'amortir progressivement les longueurs d'ondes présentes dans cette partie du domaine de calcul. Un terme de dissipation est rajouté dans les équations du mouvement et dans l'équation de température (2.13) sous la forme :

$$D_{Ray} = -R_D(z) \Delta \phi ,\tag{2.51}$$

où $R_D(z)$ est l'inverse de l'échelle de temps d'amortissement et $\Delta \phi$ est la perturbation du champ de

vitesse ou du champ de température. Le profil de $R_D(z)$ est donné par KLEMP & LILLY (1978) :

$$R_D(z) = \begin{cases} 0 & \text{pour } z < z_{Ray} \\ \frac{\alpha_{Ray}}{2} \left\{ 1 - \cos \left(\frac{\pi (z - z_{Ray})}{z_T - z_{Ray}} \right) \right\} & \text{pour } z \geq z_{Ray} . \end{cases} \quad (2.52)$$

z_{Ray} est la hauteur de base de la couche, z_T et la hauteur du sommet du domaine et α_{Ray} est la fréquence d'amortissement, de l'ordre de 10 à 50 fois le pas de temps. Typiquement, dans les simulations de cette thèse, $\alpha_{Ray} = 1/(20\Delta t)$.

2.8 Application à la couche limite de FACKRELL & ROBINS (1982)

L'objectif de nos travaux est l'étude de la dispersion de particules solides ou liquides dans les écoulements atmosphériques. Afin de valider les différentes modélisations adoptées ou que nous avons développées, nous avons besoin de données expérimentales les plus complètes possibles. C'est ainsi que nous sommes amenés à simuler des expériences de laboratoire. Étant donné que ARPS est un code adapté aux échelles spatiales allant de quelques dizaines de mètres à quelques dizaines de kilomètres l'application de celui-ci à une couche limite de soufflerie n'est pas immédiate est nécessite une étape de validation. Pour ce faire nous avons choisi l'expérience menée par FACKRELL & ROBINS (1982). Il ne s'agit pas de l'unique expérience de couche limite ni de la plus détaillée d'un point de vue dynamique. Cependant, elle porte aussi sur la dispersion d'un scalaire passif, ce qui nous permettra de valider le couplage entre la SGE et la modélisation stochastique de sous-maille du transport de particules fluides. Cette modélisation stochastique intervient dans la résolution de l'équation du mouvement des particules solides et liquides pour le calcul de la vitesse relative des particules par rapport à l'air.

2.8.1 Caractéristiques de la couche limite

On envisage l'expérience menée par FACKRELL & ROBINS (1982). Il s'agit du rejet d'un gaz passif issu d'une source ponctuelle placée dans une couche limite neutre. Dans cette partie on ne montrera que les résultats relatifs à la dynamique. La dispersion de scalaire passif sera traitée dans le chapitre suivant. L'épaisseur de la couche limite δ , la vitesse extérieure U_e , la vitesse de frottement u_* et la rugosité z_0 valent respectivement :

$$\begin{cases} \delta = 1.2m \\ U_e = 4m/s \\ u_* = 0.047U_e \\ z_0 = 2.4 \times 10^{-4}m . \end{cases} \quad (2.53)$$

Afin de simuler cette couche limite, un maillage de $72 \times 32 \times 32$ mailles a été utilisé. Les mailles dans les direction x et y ont la même taille, $\Delta x = 0.1m$ et $\Delta y = 0.1m$. Dans la direction verticale, le maillage est raffiné à la paroi suivant une loi en tangente hyperbolique. La taille moyenne des mailles verticales est $\Delta z_{moy} = 0.1m$, la plus petite maille à la paroi est $\Delta z_{min} = 3mm$. Le pas de temps, dans cette simulation est $dt = 2.10^{-4}s$.

FACKRELL & ROBINS (1982) ne constatent pas d'épaississement de couche limite. Dans nos simulation on considère que les profils de couche limite mesurés sont vérifiés à l'abscisse de la source $x_s = 1.05m$. Pour la condition de forçage en entrée, on applique les profils mesurés en tenant compte

de l'épaississement de couche limite, suivant la loi, SCHLICHTING (1968) :

$$\delta(x) = 0.37(l_0 + x) \left(\frac{U_e(l_0 + x)}{\nu} \right)^{-0.2} \quad (2.54)$$

$$u_* = 0.99U_e \frac{k_v}{\ln \frac{\delta(x)}{z_0}} \quad (2.55)$$

$$l_0 = \left(\frac{\delta}{0.37} \right)^{5/4} \left(\frac{U_e}{\nu} \right)^{1/4} - x_\delta, \quad (2.56)$$

où l_0 est la longueur du plat nécessaire pour générer une couche limite de $1.2m$ avec une vitesse extérieure de $4m/s$ à une distance de $x_\delta = 1.05m$. Ici, $l_0 = 97.9m$. Les détails du forçage sont décrits dans AGUIRRE (2005).

2.8.2 Résultats et comparaisons

Les profils verticaux de la vitesse moyenne à $x = 3.3\delta (= 4m)$ et à $x = 5\delta (= 6m)$ sont reportés figure 2.2 et figure 2.4, respectivement. Les adimensionnalisations sur les deux sections différentes tiennent compte de l'épaississement de couche limite suivant les équations (2.54) et (2.55). Les moyennes sont prises sur les plans horizontaux et sur un intervalle de temps ($10T_L$) suffisamment long pour avoir des statistiques stables en temps. Pour les deux sections, les profils de vitesse moyenne sont en bon accord avec les résultats expérimentaux dans la zone logarithmique et dans la zone externe. Dans nos simulations, la première maille se trouve à $z^+ = 37.6$, ce qui correspond à $10z_0$. La sous-couche visqueuse n'apparaît pas car elle est détruite par la présence de rugosités.

Les profils verticaux de l'énergie cinétique turbulente moyenne, et de la moyenne des trois composantes diagonales du tenseur de REYNOLDS à $x = 3.3\delta (= 4m)$ et à $x = 5\delta (= 6m)$ sont reportés figure 2.3 et figure 2.5, respectivement. L'énergie cinétique turbulente obtenue à partir des échelles résolues est légèrement sous-estimée (figures 2.3(a) et 2.5(a)). En rajoutant la contribution de sous-maille, obtenue en résolvant l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille (équation 2.39), on retrouve les profils expérimentaux. Il en est de même pour les trois composantes des fluctuations de vitesse, $\overline{u'^2}$, $\overline{v'^2}$ et $\overline{w'^2}$. Tout de même, la correction apportée reste faible comparée à l'énergie cinétique turbulente résolue et on peut considérer que la simulation numérique résout la plus grande partie du champs. Les données de FACKRELL & ROBINS (1982) s'arrêtent à $z^+ = 300$. Ainsi, ils n'ont probablement pas pu mesurer la valeur maximale de l'énergie cinétique et de la composante longitudinale de la fluctuation de vitesse. Manifestement nos simulations surestiment les valeurs de ces deux grandeurs à la paroi. Entre différentes sections du domaine, les profils des cinq grandeurs présentées ici n'évoluent pas. La couche limite est stable en espace et en temps.

Les simulations réalisées ont permis d'obtenir les profils de vitesse moyenne, de l'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse dans les trois directions, à différentes sections. On a pu vérifier que les résultats obtenus sont en bon accord avec l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982). La couche limite ainsi simulée peut être utilisée pour la simulation de la dispersion de scalaire passif et la validation du couplage entre la SGE et la modélisation stochastique de sous-maille du transport de particules solides ou liquides.

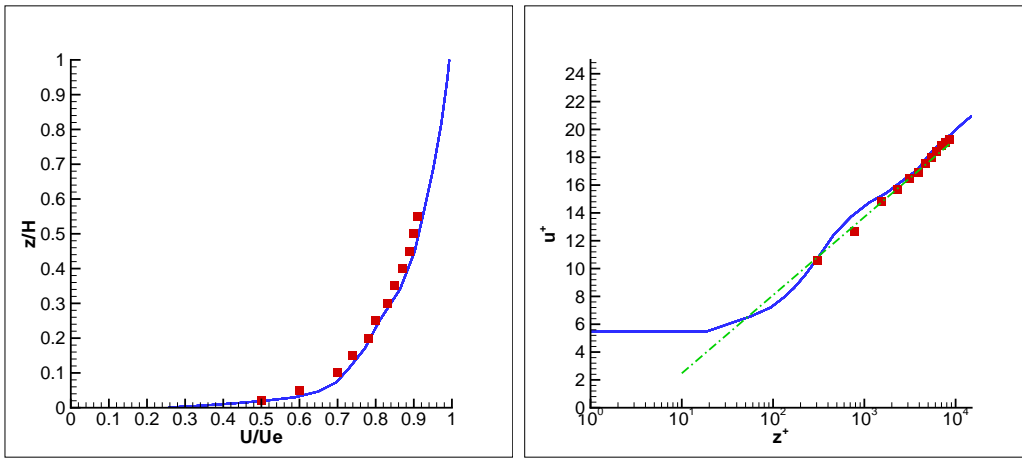


FIG. 2.2 – Profils verticaux de vitesse moyenne à $x = 3.3\delta$. —, ARPS ; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) ; — · —, loi $\log u/u_* = 1/k \log(z/z_0)$

Conclusion

Le code de calcul ARPS avec le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991), a été utilisé pour simuler la couche limite rugueuse de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982). Bien que le code ait été développé pour des échelles atmosphériques, l'application à une couche limite de laboratoire conduit à des résultats satisfaisants. Les profils de vitesse moyenne, d'énergie cinétique turbulente et des trois composantes des fluctuations de vitesse sont en bon accord avec les profils expérimentaux. Ainsi, l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) sera utilisée pour la suite de nos validations, notamment pour le couplage entre la SGE et la modélisation stochastique de sous-maille dans l'étude du transport de scalaire passif, des particules solides et des gouttelettes.

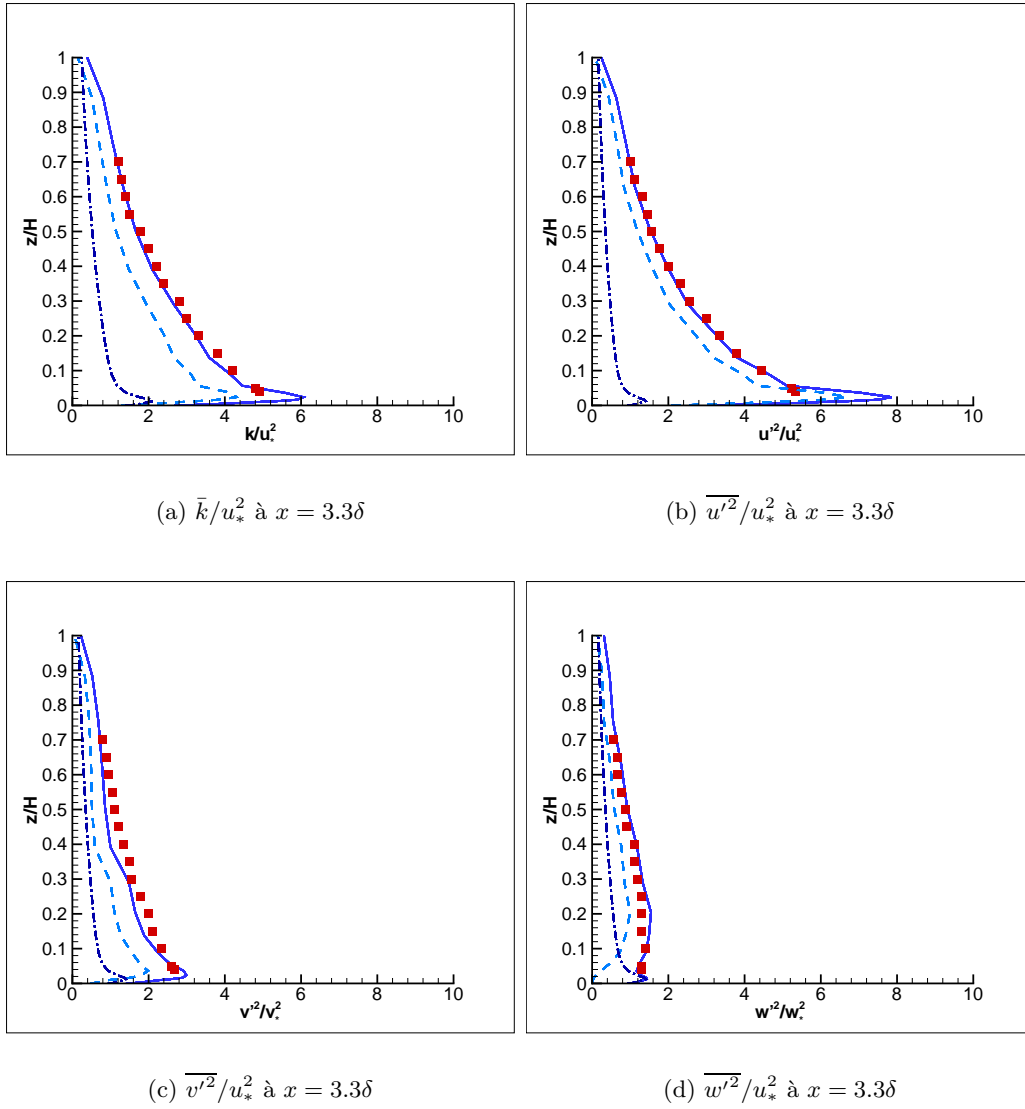


FIG. 2.3 – Profils verticaux de l'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse $x = 3.3\delta$. Lignes, ARPS : ---, résolue; - · -, sous-maille; —, totale; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

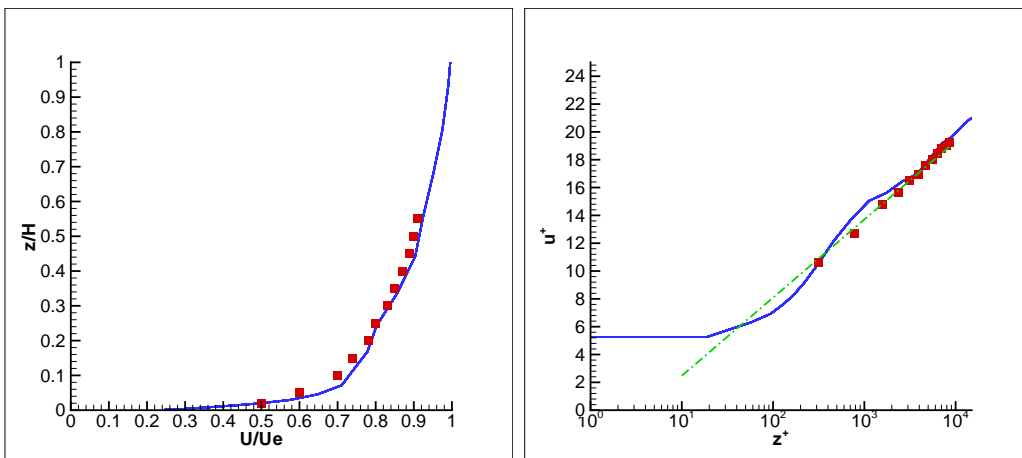


FIG. 2.4 – Profils verticaux de vitesse moyenne à $x = 5\delta$. —, ARPS; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982); - · -, loi $\log u/u_* = 1/k \log(z/z_0)$

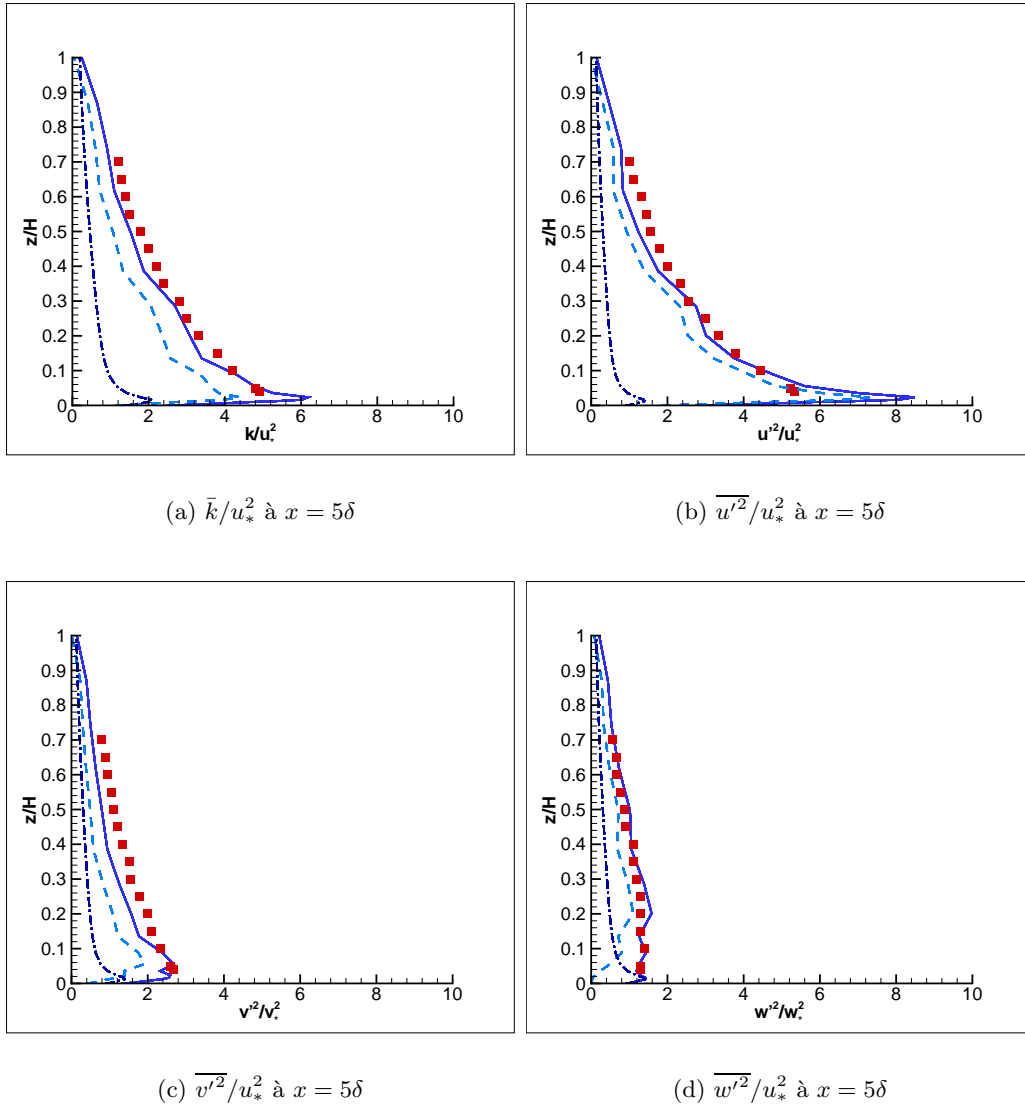


FIG. 2.5 – Profils verticaux de l'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse $x = 5\delta$. Lignes, ARPS : ---, résolue; - · -, sous-maille; —, totale; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

Chapitre 3

Couplage d'un modèle stochastique lagrangien sous-maille avec la simulation des grandes échelles

3.1 Introduction

La SGE est utilisée pour étudier la dispersion de scalaires passifs, de particules solides et de gouttelettes dans une couche limite turbulente. Le problème est abordé par une approche lagrangienne. Les particules fluides contenant le scalaire ainsi que les particules solides et les gouttelettes se déplacent suivant l'écoulement grande-échelle directement résolu par la SGE. L'approche que nous présentons dans ce travail a pour objectif de concilier au mieux le transport, d'une part, et les processus chimiques ou les interactions entre particules solides et gouttelettes, d'autre part. La chimie et les interactions entre particules étant des processus locaux, nous sommes amenés à modéliser le déplacement et la vitesse sous-maille des particules en question. Afin de déterminer cette vitesse sous-maille, une équation stochastique de LANGEVIN est utilisée. Le modèle stochastique est reformulé en termes de grandeurs filtrées et il est exprimé uniquement en fonction des grandeurs obtenues par la SGE. Ce chapitre ne traite que du modèle stochastique pour les particules fluides.

Bien que l'étude de la dispersion de scalaire passif ne soit pas l'objectif principal de ce travail, la modélisation de la vitesse sous-maille des particules fluides contenant le scalaire est indispensable car elle est préliminaire à la détermination de la vitesse sous-maille pour les particules solides et les gouttelettes (chapitre 4). En effet, pour ces dernières, nous résolvons l'équation du mouvement où intervient la vitesse relative entre le fluide et les particules solides ou liquides. La vitesse du fluide à la position de la particule solide ou liquide est obtenue localement comme la vitesse grande échelle plus la vitesse petite échelle issue du modèle stochastique.

Tout d'abord, dans ce chapitre nous décrivons brièvement le modèle stochastique tridimensionnel inhomogène dans le cas classique de la décomposition de REYNOLDS. Ensuite, nous détaillons le couplage et la formulation du modèle stochastique tridimensionnel que nous avons adapté à une SGE en turbulence inhomogène. Enfin, la SGE couplée avec le modèle stochastique en sous-maille est appliquée à l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) sur la dispersion de scalaire passif dans une couche limite turbulente. Les profils de concentration moyenne, de la variance de la concentration ainsi que des flux de masse sont comparés aux résultats expérimentaux.

3.2 Modèles stochastiques en turbulence inhomogène isotrope

3.2.1 Introduction et démarche générale

Soit une source ponctuelle située en \vec{x}_0 . On fait l'hypothèse que chaque particule suivie est constituée d'un ensemble indissociable de n_0 molécules de l'espèce A . Ceci revient à supprimer l'effet de la diffusivité moléculaire de l'espèce. Soient :

- $\vec{x}_L(t|\vec{x}_0; t_0)$ la position au cours du temps d'une particule issue de la source à l'instant t_0 ,
- $p_{L_1}(\vec{x}; t|\vec{x}_0; t_0)$ la densité de probabilité (dans toute la suite on utilisera la notation d.d.p.) de présence d'une particule définie par

$$p_{L_1}(\vec{x}; t|\vec{x}_0; t_0) d\vec{x} = \text{Proba}(\vec{x} \leq \vec{x}_L(t|\vec{x}_0; t_0) < \vec{x} + d\vec{x}) , \quad (3.1)$$

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

Connaître $p_{L_1}(\vec{x}; t|\vec{x}_0; t_0)$ revient à connaître pour toute réalisation la fonction :

$$\vec{x} = \vec{x}_L(t|\vec{x}_0; t_0) , \quad (3.2)$$

solution de :

$$\begin{cases} \vec{x}(t_0) = \vec{x}_0 , \\ \frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u}(\vec{x}, t) , \end{cases} \quad (3.3)$$

où \vec{u} est solution de l'équation de NAVIER-STOKES. La connaissance exacte de $p_{L_1}(\vec{x}; t|\vec{x}_0; t_0)$ nécessite donc celle de \vec{u} sur un nombre infini de réalisations. La valeur instantanée de \vec{u} dans un écoulement turbulent étant quasiment impossible à calculer, elle est modélisée de manière dynamique en respectant certaines propriétés statistiques du champ de vitesse, telles que sa valeur moyenne, son écart type, l'échelle de temps intégrale, ... C'est cette approche qui est adoptée par les modèles stochastiques lagrangiens, à ceci près qu'ils raisonnent avec la vitesse lagrangienne d'une particule $\vec{v}_L(t|\vec{x}_0; t_0)$, reliée à la vitesse eulérienne par :

$$\vec{v}_L(t|\vec{x}_0; t_0) = \vec{u}_L(\vec{x}_L(t|\vec{x}_0; t_0), t) . \quad (3.4)$$

3.2.2 Modèle stochastique en turbulence inhomogène, formulation continue

Le modèle lagrangien caractérisant la trajectoire aléatoire d'une particule dans un écoulement turbulent est issu d'une analogie avec le modèle de déplacement microscopique d'une molécule suivant la théorie du mouvement brownien. L'idée, initialement proposée sous forme discrète par TAYLOR (1921), est de représenter le mouvement turbulent d'une particule fluide par l'équation de LANGEVIN. Ce modèle ne simule pas le champ de vitesse physique, mais un champ de vitesse vérifiant certaines propriétés statistiques du champ réel. C'est donc uniquement au niveau statistique que le modèle peut être interprété.

Dans ce type de modèle, on fait l'hypothèse que la position de la particule fluide dans l'espace des phases évolue de façon markovienne, c'est-à-dire que la position future ne dépend que de son état présent et non de ses états antérieurs. Il faut alors supposer que les variations de la vitesse à deux instants successifs sont décorréées, soit en d'autres termes, que l'échelle de temps intégrale T_a de l'accélération est beaucoup plus petite que l'échelle de temps intégrale T_L de la vitesse.

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

$$T_a = Re_L^{-1/2} T_L . \quad (3.5)$$

La condition $T_a \ll T_L$, n'est donc vérifiée que pour un nombre de REYNOLDS grand.

Dans un écoulement turbulent la vitesse d'une particule fluide peut être écrite sous la forme suivante :

$$v_i(t) = \bar{u}_i(\vec{x}(t), t) + v'_i(t) , \quad (3.6)$$

où v_i est la vitesse lagrangienne de la particule fluide dans la direction x_i , et u_i la vitesse eulérienne du fluide à la position $\vec{x}(t)$ de la particule fluide. Le signe barre caractérise la moyenne d'ensemble. v'_i est la fluctuation lagrangienne autour de la valeur moyenne eulérienne \bar{u}_i . Dans un écoulement où le nombre de REYNOLDS est suffisamment grand, on pourra faire l'hypothèse que le processus aléatoire donnant la position (\vec{x}, \vec{v}) de la particule fluide dans l'espace des phases est markovien. Si on suppose de plus que :

– \vec{x} et \vec{v} sont des fonctions continues du temps avec

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v} ; \quad (3.7)$$

– le processus a la même structure locale qu'un processus à incréments indépendantes ; le processus (\vec{x}, \vec{v}) peut alors être décrit par le système d'équations stochastiques (THOMSON (1987)) :

$$\begin{cases} dx_i = v_i dt , \\ dv_i = a_i(\vec{x}, \vec{v}, t) dt + b_{ij}(\vec{x}, \vec{v}, t) \eta_j(t) , \end{cases} \quad (3.8)$$

où $\eta_j(t)$ est un bruit blanc gaussien isotrope de moyenne nulle et de variance dt , tel que :

$$\overline{\eta_i(t') \eta_j(t'')} = \delta_{ij} \delta(t' - t'') dt . \quad (3.9)$$

avec δ_{ij} et $\delta(t' - t'')$ des fonctions DIRAC. La vitesse de chaque particule fluide comporte une partie déterministe $a_i(\vec{x}, \vec{v}, t)$ et une partie aléatoire $b_{ij}(\vec{x}, \vec{v}, t) \eta_j(t)$. Étant donné que la vitesse d'une particule fluide dans un écoulement turbulent est donnée par l'équation (3.6), on peut simplifier le système d'équations stochastiques (3.8) sous la forme :

$$\begin{cases} dx_i = v_i dt , \\ dv_i = (\gamma_i + \alpha_{ij} (v_j - \bar{u}_j(\vec{x}, t))) dt + \beta_{ij} \eta_j(t) , \end{cases} \quad (3.10)$$

Dans la formulation de THOMSON (1987), ceci revient à supposer que la dépendance de $a_i(\vec{x}, \vec{v}, t)$ en \vec{v} est de la forme $a_i(\vec{x}, \vec{v}, t) = \gamma_i + \alpha_{ij} (v_j - \bar{u}_j)$ et que $b_{ij}(\vec{x}, \vec{v}, t)$ ne dépend pas de (\vec{x}, \vec{v}, t) , $b_{ij}(\vec{x}, \vec{v}, t) = \beta_{ij}$, où α_{ij} , β_{ij} et γ_i sont des constantes. Ceci représente une simplification de la formulation générale de THOMSON (1987) mais elle est nécessaire pour la détermination des coefficients en question. On écrit ainsi une équation pour la vitesse totale de la particule fluide, où la vitesse moyenne est portée par γ_i .

3.2.3 Équation de FOKKER-PLANCK

Soient

$$\vec{\mathcal{X}} = (\vec{x}, \vec{v}) \quad (3.11)$$

le vecteur position instantanée de la particule marquée dans l'espace des phases, et $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$ la d.d.p. lagrangienne de $\vec{\mathcal{X}}$ conditionnée sur la position initiale $\vec{\mathcal{X}}_0 = (\vec{x}_0, \vec{v}_0)$. Cette d.d.p. est associée à l'événement "La particule se trouve en (\vec{x}, \vec{v}) , dans l'espace des phases, à l'instant t sachant qu'elle était en (\vec{x}_0, \vec{v}_0) à l'instant initial t_0 ". Étant donné que $\vec{\mathcal{X}} = (\vec{x}, \vec{v})$ est un processus de MARKOV, le développement de KRAMER-MOYAL conduit à l'équation d'évolution de $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$ suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) = & - \frac{\partial}{\partial \mathcal{X}_i} \left(D_i^{(1)}(\vec{\mathcal{X}}, t) p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{X}_i \partial \mathcal{X}_j} \left(D_{ij}^{(2)}(\vec{\mathcal{X}}, t) p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) \\ & - \frac{1}{3!} \frac{\partial^3}{\partial \mathcal{X}_i \partial \mathcal{X}_j \partial \mathcal{X}_k} \left(D_{ijk}^{(3)}(\vec{\mathcal{X}}, t) p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) + \dots , \end{aligned} \quad (3.12)$$

où on a posé :

$$\overline{(\mathcal{X}_i(t+\tau) - \mathcal{X}_i(t))} = D_i^1(\vec{\mathcal{X}}, t)\tau + \mathcal{O}(\tau^2) , \quad (3.13)$$

$$\overline{(\mathcal{X}_i(t+\tau) - \mathcal{X}_i(t)) (\mathcal{X}_j(t+\tau) - \mathcal{X}_j(t))} = D_{ij}^2(\vec{\mathcal{X}}, t)\tau + \mathcal{O}(\tau^2) , \quad (3.14)$$

$$\overline{(\mathcal{X}_i(t+\tau) - \mathcal{X}_i(t)) (\mathcal{X}_j(t+\tau) - \mathcal{X}_j(t)) (\mathcal{X}_k(t+\tau) - \mathcal{X}_k(t))} = D_{ijk}^3(\vec{\mathcal{X}}, t)\tau + \mathcal{O}(\tau^2) . \quad (3.15)$$

En outre, faire l'hypothèse que $\vec{\mathcal{X}}$ est un processus de MARKOV de partie aléatoire suivant une loi gaussienne permet d'affirmer :

$$D_{i_1, \dots, i_n}^{(n)}(\vec{\mathcal{X}}, t) = 0 \text{ pour } n \geq 3 . \quad (3.16)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) = & - \frac{\partial}{\partial \mathcal{X}_i} \left(D_i^{(1)}(\vec{\mathcal{X}}, t) p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{X}_i \partial \mathcal{X}_j} \left(D_{ij}^{(2)}(\vec{\mathcal{X}}, t) p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) . \end{aligned} \quad (3.17)$$

Or, d'après les systèmes (3.8) et (3.10) :

$$\begin{aligned} D_{\vec{v}}^1(\vec{\mathcal{X}}, t) &= a_i(\vec{x}, \vec{v}, t) , \\ &= \gamma_i + \alpha_{ij}(v_j - \bar{u}_j) , \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$D_{\vec{x}}^1(\vec{\mathcal{X}}, t) = v_i , \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} D_{\vec{v}\vec{v}}^2(\vec{\mathcal{X}}, t) &= b_{ik}(\vec{x}, \vec{v}, t) b_{jk}(\vec{x}, \vec{v}, t) , \\ &= \beta_{ik} \beta_{jk} , \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$D_{\vec{x}\vec{x}}^2(\vec{\mathcal{X}}, t) = 0 , \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} D_{\vec{v}\vec{x}}^2(\vec{\mathcal{X}}, t) &= D_{\vec{x}\vec{v}}^2(\vec{\mathcal{X}}, t) , \\ &= 0 . \end{aligned} \quad (3.22)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) = & - \frac{\partial}{\partial v_l} \left((\gamma_l + \alpha_{lq}(v_q - \bar{u}_q)) p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial x_l} \left(v_l p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_l \partial v_q} \left(\beta_{lk} \beta_{qk} p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) \right) . \end{aligned} \quad (3.23)$$

La d.d.p. de présence $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$ est conditionnée par la position initiale de la particule fluide. Afin de déterminer les coefficients du système stochastique en procédant comme VAN DOP et al. (1985), il faut établir l'équation d'évolution de la d.d.p. de présence non conditionnée $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t)$. On sait que :

$$p_L(\vec{\mathcal{X}}, \vec{\mathcal{X}}_0; t, t_0) = p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0) p_L(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0) . \quad (3.24)$$

D'autre part, on a :

$$p_L(\vec{\mathcal{X}}; t) = \int_{\vec{\mathcal{X}}_0=-\infty}^{+\infty} \int_{t_0=-\infty}^{+\infty} p_L(\vec{\mathcal{X}}, \vec{\mathcal{X}}_0; t, t_0) d\vec{\mathcal{X}}_0 dt_0 . \quad (3.25)$$

Sachant que l'équation de FOKKER-PLANCK (3.23) est linéaire en $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t | \vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$, on peut la multiplier par $p_L(\vec{\mathcal{X}}_0; t_0)$ et intégrer sur $\vec{\mathcal{X}}_0$ et t_0 . On obtient alors la même équation de FOKKER-PLANCK satisfaite par $p_L(\vec{\mathcal{X}}; t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (p_L(\vec{\mathcal{X}}; t)) = & - \frac{\partial}{\partial v_l} (\gamma_l + \alpha_{lq} (v_q - \bar{u}_q) p_L(\vec{\mathcal{X}}; t)) \\ & - \frac{\partial}{\partial x_l} (v_l p_L(\vec{\mathcal{X}}; t)) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_l \partial v_q} (\beta_{lk} \beta_{qk} p_L(\vec{\mathcal{X}}; t)) . \end{aligned} \quad (3.26)$$

Enfin, en intégrant l'équation (3.26) par rapport à \vec{x} on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (p_L(\vec{v}; t)) = & - \frac{\partial}{\partial v_l} (\gamma_l + \alpha_{lq} (v_q - \bar{u}_q) p_L(\vec{v}; t)) \\ & - \left[v_l p_L(\vec{\mathcal{X}}; t) \right]_{x_i=-\infty}^{x_i=+\infty} \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_l \partial v_q} (\beta_{lk} \beta_{qk} p_L(\vec{v}; t)) . \end{aligned} \quad (3.27)$$

Le deuxième terme de droite de l'équation (3.27) s'annule car la probabilité de trouver des particules fluides à l'infini est nulle, et l'équation d'évolution de la d.d.p. de présence de \vec{v} , $p_L(\vec{v}; t)$ s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (p_L(\vec{v}; t)) = & - \frac{\partial}{\partial v_l} (\gamma_l + \alpha_{lq} (v_q - \bar{u}_q) p_L(\vec{v}; t)) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_l \partial v_q} (\beta_{lk} \beta_{qk} p_L(\vec{v}; t)) . \end{aligned} \quad (3.28)$$

3.2.4 Détermination des coefficients α_{ij} , β_{ij} et γ_i

Dans cette partie, nous allons décrire brièvement le raisonnement développé par VAN DOP et al. (1985) pour déterminer les coefficients du système d'équations stochastiques à partir de l'équation d'évolution de $p_L(\vec{v}; t)$ (3.28) et les caractéristiques du champ eulérien. D'autres méthodes de détermination de l'équation stochastique complète existent, POPE (1985) ou THOMSON (1987), mais celle-ci conduit au modèle de LANGEVIN généralisé et sera facilement adaptée à la décomposition en grandes échelles et échelles de sous-maille propre à la SGE.

Tous les moments statistiques de \vec{v} sont calculés à partir de la d.d.p. de présence $p_L(\vec{v}; t)$:

$$\overline{v_{i_1} \dots v_{i_n}(t)} = \int_{\mathbb{R}^3} v_{i_1} \dots v_{i_n} p_L(\vec{v}; t) dv_v . \quad (3.29)$$

En multipliant l'équation d'évolution de $p_L(\vec{v};t)$ (3.28) par $v_{i_1} \dots v_{i_n}$ et en l'intégrant, on obtient l'équation d'évolution du moment statistique d'ordre n de \vec{v} . Ainsi, par exemple, les équations d'évolution des deux premiers moments de \vec{v} s'écrivent :

$$\frac{d\bar{v}_i}{dt} = \gamma_i + \alpha_{iq} (\bar{v}_q - \bar{u}_q) , \tag{3.30}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{v}_i \bar{v}_j}{dt} &= \gamma_i \bar{v}_j + \gamma_j \bar{v}_i \\ &+ \alpha_{jq} (\bar{v}_i \bar{v}_q - \bar{v}_i \bar{u}_q) + \alpha_{iq} (\bar{v}_j \bar{v}_q - \bar{v}_j \bar{u}_q) \\ &+ \frac{1}{2} (\beta_{ik} \beta_{jk} + \beta_{jk} \beta_{ik}) . \end{aligned} \tag{3.31}$$

Le raisonnement de VAN DOP et al. (1985) consiste à dire que à t_0 et en \vec{x}_0 , à l'endroit où se situe la particule fluide, il y a égalité exacte entre la vitesse eulérienne et la vitesse lagrangienne :

$$v(t_0) = u_i(\vec{x}_0, t_0) , \tag{3.32}$$

$$\left(\frac{dv_i}{dt} \right)_{t_0} = \left(\frac{du_i}{dt} \right)_{(\vec{x}_0, t_0)} . \tag{3.33}$$

En moyennant les deux égalités précédentes sur un ensemble de N réalisations, la moyenne de la vitesse lagrangienne en un point et à un instant donné s'exprime en fonction de la moyenne de la vitesse eulérienne suivant :

$$\bar{v}(t_0) = \bar{u}_i(\vec{x}_0, t_0) , \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\bar{v}_i}{dt} \right)_{t_0} &= \left(\frac{d\bar{u}_i}{dt} \right)_{(\vec{x}_0, t_0)} , \\ &= \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}'_i \bar{u}'_j}{\partial x_j} \right)_{(\vec{x}_0, t_0)} . \end{aligned} \tag{3.35}$$

Ainsi, d'après (3.34), (3.35) et sachant (3.30), le coefficient γ_i devient :

$$\begin{aligned} \gamma_i &= \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}'_i \bar{u}'_j}{\partial x_j} \right)_{(\vec{x}_0, t_0)} , \\ &= \left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} \right)_{(\vec{x}_0, t_0)} . \end{aligned} \tag{3.36}$$

D'autre part, on a :

$$\frac{d\bar{v}_i \bar{v}_j}{dt} = \frac{d\bar{v}_i \bar{v}_j}{dt} + \frac{d\bar{v}'_i \bar{v}'_j}{dt} , \tag{3.37}$$

d'où, connaissant la relation (3.31) :

$$\frac{d\bar{v}'_i \bar{v}'_j}{dt} = \alpha_{jq} \overline{v'_i v'_q} + \alpha_{iq} \overline{v'_j v'_q} + \frac{1}{2} (\beta_{ik} \beta_{jk} + \beta_{jk} \beta_{ik}) . \tag{3.38}$$

Si on admet que à t_0 et en \vec{x}_0 $u(\vec{x}_0, t_0) = v(t_0)$, on aura aussi $\overline{v'_i v'_j}(t_0) = \overline{u'_i u'_j}(\vec{x}_0, t_0)$, où $\overline{u'_i u'_j}$ est le tenseur de REYNOLDS. Ainsi :

$$\alpha_{ij} + \alpha_{ji} = \frac{1}{\overline{u'_i u'_j}(\vec{x}_0, t_0)} \left(\frac{d\overline{u'_i u'_j}}{dt} - \frac{3}{4} (\beta_{ik} \beta_{jk} + \beta_{jk} \beta_{ik}) \right)_{(\vec{x}_0, t_0)} . \tag{3.39}$$

Si maintenant on suppose que la turbulence est dans un état statistique voisin de l'isotropie, on peut choisir β_{ik} de la forme, THOMSON (1987) :

$$\beta_{ik} = \sqrt{C_0 \varepsilon(\vec{x}_0, t_0)} \delta_{ik} , \quad (3.40)$$

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

$$\begin{aligned} D(\tau) &= \left\langle (u_i(t + \tau) - u_i(t))^2 \right\rangle , \\ &= C_0 \varepsilon \tau . \end{aligned} \quad (3.41)$$

Or, (3.8) conduit à la fonction de structure relative au modèle :

$$D^{modele}(\tau) = \beta_{ik}^2 \tau + \mathcal{O}(\tau^2) . \quad (3.42)$$

En identifiant (3.41) et (3.42), on trouve l'expression de β_{ik} souhaitée, équation (3.40).

Par l'hypothèse d'isotropie, les trois composantes de la vitesse données par (3.10) ne sont par ailleurs pas couplées entre elles. Le tenseur α_{ij} est donc isotrope et on a :

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ji} , \quad (3.43)$$

d'où :

$$\alpha_{ij} = \frac{3}{2 \overline{u'_i u'_j}(\vec{x}_0, t_0)} \left(\frac{1}{3} \left(\frac{d \overline{u'_i u'_j}}{dt} \right)_{(\vec{x}_0, t_0)} - \frac{C_0 \varepsilon(\vec{x}_0, t_0)}{2} \right) \delta_{ij} . \quad (3.44)$$

Tout calcul fait, le système d'équations donnant la variable markovienne (\vec{x}, \vec{v}) est donc :

$$\begin{cases} dx_i = v_i dt , \\ dv_i = \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_j} + \frac{3}{2} \frac{v_j - \bar{u}_j}{2 \overline{u'_i u'_j}} \left(\frac{1}{3} \frac{d \overline{u'_i u'_j}}{dt} - \frac{C_0 \varepsilon}{2} \right) \right) dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} \eta_i(t) . \end{cases} \quad (3.45)$$

D'après l'équation (3.45), chaque particule fluide possède une vitesse moyenne et une vitesse fluctuante. La résolution de cette équation nécessite de modéliser tous les termes dans l'équation eulérienne. En particulier, il s'agit de modéliser tous les termes des équations de transport du tenseur de REYNOLDS $\overline{u'_i u'_j}$ et du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε . Ces modélisations sont en dehors du sujet de cette thèse. Cette approche des modèles stochastiques a été détaillée ici car elle peut être adaptée à la décomposition propre au filtrage de la SGE, où les termes eulériens relatif aux grandes échelles sont à priori résolus.

3.3 Modèle stochastique couplé avec une SGE

L'équation stochastique de LANGEVIN est utilisée pour déterminer la composante petite échelle en sous-maille de la vitesse totale des particules, la composante grande échelle étant fournie par la SGE.

Afin de réaliser ce couplage, le modèle de LANGEVIN est reformulé en termes de grandeurs filtrées dans la maille pour simuler les petites échelles présentes en sous-maille de la SGE. Le modèle stochastique est ainsi exprimé en fonction des grandeurs obtenues par la SGE avec le modèle dynamique de sous-maille, GERMANO et al. (1991). Dans cette partie nous allons détailler le couplage réalisé à l'aide de la notion de d.d.p. locale adaptée à la SGE.

Dans un écoulement turbulent, la vitesse d'une particule fluide peut être écrite sous la forme suivante :

$$v_i(t) = \tilde{u}_i(\vec{x}(t), t) + v'_i(t) , \quad (3.46)$$

où, comme dans le paragraphe précédent, v_i est la vitesse lagrangienne de la particule fluide et u_i la vitesse eulérienne du fluide à la position $\vec{x}(t)$ de la particule fluide. Le signe tilde traduit l'opération de filtrage spatial définie par l'équation (2.12). v'_i est la fluctuation lagrangienne de la vitesse autour de la valeur eulérienne grande échelle \tilde{u}_i . A chaque instant t , la position d'une particule fluide est notée :

$$\vec{x}(t) = \vec{x}^{(m)} + \vec{x}^{(pm)} , \quad (3.47)$$

où $\vec{x}^{(m)}$ est la position du centre de la maille où se trouve la particule fluide et $\vec{x}^{(pm)}$ celle de la particule fluide par rapport au centre de cette maille. Pour modéliser le mouvement de la particule fluide à l'intérieur d'une maille on utilise le modèle de LANGEVIN (3.10) paramétré par $\vec{x}^{(m)}$:

$$\begin{cases} dx_i^{(pm)} = v_i dt , \\ dv_i = (\gamma_i(\vec{x}^{(pm)}, \vec{x}^{(m)}, t) + \alpha_{ij}(\vec{x}^{(pm)}, \vec{x}^{(m)}, t) (v_j - \tilde{u}_j(\vec{x}^{(m)}, t))) dt + \beta_{ij}(\vec{x}^{(pm)}, \vec{x}^{(m)}, t) \eta_j(t) . \end{cases} \quad (3.48)$$

où $\eta_j(t)$ est un bruit blanc gaussien isotrope de moyenne nulle et de variance dt , défini par (3.9). Par l'hypothèse de base de la SGE, au sein de la maille, la turbulence est supposée homogène. Ainsi, les coefficients α_{ij} , β_{ij} et γ_i , ne dépendent pas de $\vec{x}^{(pm)}$. L'appartenance à la maille locale est traduite par la variable $\vec{x}^{(m)}$ dont on tient compte pour déterminer les coefficients de (3.48).

3.3.1 Équation de FOKKER-PLANCK

De même que dans le cas classique décrit plus haut, nous allons essayer de construire une équation d'évolution de la d.d.p. de présence du couple $(\vec{x}^{(pm)}, \vec{v})$. Pour ce faire, nous définissons une d.d.p. locale $\mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{x}^{(pm)}, \vec{v}; \vec{x}^{(m)}, t)$ des vitesses \vec{v} et positions $\vec{x}^{(pm)}$ des particules fluides dans une maille, à partir des seules particules fluides constituant cette maille. Étant construite à partir de tous les couples $(\vec{x}^{(pm)}, \vec{v})$ relatifs aux particules au sein d'une maille, cette d.d.p. de présence n'est plus conditionnée sur la position initiale dans l'espace des phases.

Le couple

$$\vec{\mathcal{X}} = (\vec{x}^{(pm)}, \vec{v}) \quad (3.49)$$

étant markovien, l'évolution de la d.d.p. locale est donnée par une équation de FOKKER-PLANCK, de même type que (3.26) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{\mathcal{X}}; \vec{x}^{(m)}, t) \right) = & - \frac{\partial}{\partial v_l} \left(\gamma_l + \alpha_{lq} (v_q - \tilde{u}_q) \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{\mathcal{X}}; \vec{x}^{(m)}, t) \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial x_l} \left(v_l \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{\mathcal{X}}; \vec{x}^{(m)}, t) \right) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_l \partial v_q} \left(\beta_{lk} \beta_{qk} \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{\mathcal{X}}; \vec{x}^{(m)}, t) \right) . \end{aligned} \quad (3.50)$$

En intégrant l'équation (3.50) par rapport à $\vec{x}^{(pm)}$, on obtient l'équation d'évolution de la d.d.p. lagrangienne locale de \vec{v} , $\mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}^{(m)}, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}^{(m)}, t)}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial v_l} \left[\left(\gamma_l + \alpha_{lq}(v_q - \tilde{u}_q(\vec{x}^{(m)}, t)) \right) \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}^{(m)}, t) \right] \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_l \partial v_q} \left(\beta_{lk} \beta_{qk} \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}^{(m)}, t) \right) . \end{aligned} \quad (3.51)$$

Cette d.d.p. de présence détermine les propriétés statistiques de \vec{v} au sein d'une maille. En multipliant l'équation (3.51) par $v_{i_1} \dots v_{i_n}$, et après intégration on peut obtenir l'évolution de tous les moments statistiques de \vec{v} . Ce sont des moments lagrangiens locaux, définis par :

$$v_{i_1} \widetilde{\dots v_{i_n}}(\vec{x}^{(m)}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} v_{i_1} \dots v_{i_n} \mathcal{P}_{\mathcal{L}}(\vec{v}; \vec{x}^{(m)}, t) dv_v . \quad (3.52)$$

Le signe tilde représente ainsi une moyenne prise sur l'ensemble statistique de particules fluides constituant le fluide à l'intérieur de la maille centrée en $\vec{x}^{(m)}$. Ce processus de moyenne correspond au filtrage spatial propre à la SGE. Avec (3.52) et (3.51) on obtient alors :

$$\frac{d\tilde{v}_i}{dt} = \gamma_i + \alpha_{iq}(\tilde{v}_q - \tilde{u}_q) , \quad (3.53)$$

$$\frac{d\widetilde{v_i v_j}}{dt} = \gamma_i \tilde{v}_j + \gamma_j \tilde{v}_i + \alpha_{iq}(\widetilde{v_j v_q} - \tilde{v}_j \tilde{u}_q) + \alpha_{jq}(\widetilde{v_i v_q} - \tilde{v}_i \tilde{u}_q) + \frac{1}{2} (\beta_{ik} \beta_{jk} + \beta_{jk} \beta_{ik}) . \quad (3.54)$$

3.3.2 Moments eulériens et grandeurs filtrées

La SGE ne permet d'accéder qu'aux moments eulériens des grandeurs filtrées. Afin de déterminer α_{ij} , β_{ij} et γ_i , les quantités lagrangiennes \tilde{v}_i et $\widetilde{v_i v_j}$ sont supposées égales aux moments eulériens correspondant calculés avec la SGE. Nous procédons ainsi de façon analogue à la démarche de VAN DOP et al. (1985), décrite dans le paragraphe 3.2.4, pour les fluctuations de vitesse dans le cadre de la décomposition de REYNOLDS. Dans l'esprit du modèle de VAN DOP et al. (1985), à un instant donné, t_0 , et pour une maille donnée centrée en $\vec{x}^{(m)}$, à l'échelle de cette maille les statistiques eulériennes et les statistiques lagrangiennes sont confondues. On a alors :

$$\tilde{v}_i(\vec{x}^{(m)}, t_0) = \tilde{u}_i(\vec{x}^{(m)}, t_0) \quad \text{et} \quad \left(\frac{d\tilde{v}_i(\vec{x}^{(m)}, t)}{dt} \right)_{t=t_0} = \left(\frac{d\tilde{u}_i(\vec{x}, t)}{dt} \right)_{(\vec{x}=\vec{x}^{(m)}, t=t_0)} , \quad (3.55)$$

$$\widetilde{v_i v_j}(\vec{x}^{(m)}, t_0) = \widetilde{u_i u_j}(\vec{x}^{(m)}, t_0) \quad \text{et} \quad \left(\frac{d\widetilde{v_i v_j}(\vec{x}^{(m)}, t)}{dt} \right)_{t=t_0} = \left(\frac{d\widetilde{u_i u_j}(\vec{x}, t)}{dt} \right)_{(\vec{x}=\vec{x}^{(m)}, t=t_0)} . \quad (3.56)$$

En appliquant l'opération de filtrage (2.10) à la dérivée particulaire de la vitesse eulérienne (équation de NAVIER-STOKES filtrée (2.13)) on obtient par ailleurs :

$$\left(\frac{d\tilde{u}_i}{dt} \right)_{(\vec{x}=\vec{x}^{(m)}, t=t_0)} = \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \right)_{(\vec{x}=\vec{x}^{(m)}, t=t_0)} , \quad (3.57)$$

où τ_{ij} est le tenseur de sous-maille donné par le modèle dynamique de sous-maille, équations (2.22) et (2.29), de GERMANO et al. (1991) et modifié par LILLY (1992). Compte tenu de (3.53), (3.55) et (3.57), on déduit :

$$\gamma_i(\vec{x}^{(m)}, t_0) = \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \right)_{(\vec{x}=\vec{x}^{(m)}, t=t_0)} . \quad (3.58)$$

Comme $\tilde{v}_i(t_0) = \tilde{u}_i(\vec{x}^{(m)}, t_0)$ et sachant que $v_i = \tilde{u}_i + v'_i$:

$$\frac{d\widetilde{v'_i v'_j}}{dt} = \alpha_{iq} \widetilde{v'_j v'_q} + \alpha_{jq} \widetilde{v'_i v'_q} + \frac{1}{2} (\beta_{ik} \beta_{jk} + \beta_{jk} \beta_{ik}) . \quad (3.59)$$

Par une des hypothèses de base de la SGE, on admet que les structures qui constituent les fluctuations de sous-maille sont dans un état statistique voisin de l'isotropie $\widetilde{v'_i v'_j} = 2/3 \tilde{k} \delta_{ij}$, où \tilde{k} est l'énergie cinétique turbulente de sous-maille. On obtient ainsi :

$$\alpha_{ij}(\vec{x}^{(m)}, t_0) + \alpha_{ji}(\vec{x}^{(m)}, t_0) = \frac{1}{\tilde{k}(\vec{x}^{(m)}, t_0)} \left(\frac{d\tilde{k}}{dt} \delta_{ij} - \frac{3}{4} (\beta_{ik} \beta_{jk} + \beta_{jk} \beta_{ik}) \right)_{(\vec{x}=\vec{x}^{(m)}, t=t_0)} . \quad (3.60)$$

Sous ces mêmes conditions, par analogie au cas classique de la turbulence homogène isotrope (THOMSON (1987)), on peut choisir au sein de la maille un terme β_{ik} de la forme (3.40) :

$$\beta_{ik}(\vec{x}^{(m)}, t_0) = \sqrt{C_0 \tilde{\varepsilon}(\vec{x}^{(m)}, t_0)} \delta_{ik} , \quad (3.61)$$

où C_0 est la constante de Kolmogorov et $\tilde{\varepsilon}$ le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. En raison de l'hypothèse d'isotropie de la SGE, les trois composantes de la vitesse données par l'équation (3.48) ne sont pas couplées entre elles. Le tenseur α_{ij} est donc isotrope, et on a $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$, d'où :

$$\alpha_{ij}(\vec{x}^{(m)}, t_0) = \frac{3}{2\tilde{k}(\vec{x}^{(m)}, t_0)} \left(\frac{1}{3} \left(\frac{d\tilde{k}}{dt} \right)_{(\vec{x}^{(m)}, t_0)} - \frac{C_0 \tilde{\varepsilon}(\vec{x}^{(m)}, t_0)}{2} \right) \delta_{ij} . \quad (3.62)$$

Tout calcul fait, on obtient pour v_i :

$$dv_i = \left[\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{3}{2} \frac{v_i - \tilde{u}_i}{\tilde{k}} \left(\frac{1}{3} \frac{d\tilde{k}}{dt} - \frac{C_0 \tilde{\varepsilon}}{2} \right) \right] dt + \sqrt{C_0 \tilde{\varepsilon}} \eta_i(t) dt . \quad (3.63)$$

Chaque particule fluide possède une vitesse grande échelle associée à une vitesse petite échelle (sous-maille). La vitesse grande échelle est obtenue par interpolation du champ eulérien filtré \tilde{u}_i , directement résolu au sein de la maille où se trouve la particule fluide (annexe I). La composante petite échelle est déterminée par le modèle stochastique en utilisant les grandeurs instantanées \tilde{u}_i , \tilde{k} , $\tilde{\varepsilon}$ et τ_{ij} dans la maille où se trouve la particule fluide. Le tenseur τ_{ij} est donné par la fermeture de sous-maille, équations (2.22) et (2.29), GERMANO et al. (1991) et LILLY (1992). L'énergie cinétique turbulente de sous-maille est son taux de dissipation sont obtenues à partir de l'équation (2.39), DEARDORFF (1980).

Remarques

GICQUEL et al. (2002) proposent une équation de transport de la d.d.p. filtrée de la vitesse du fluide. Celle-ci est fermée de différentes manières en ce qui concerne les termes visqueux. La résolution de cette équation se fait via une équation de LANGEVIN globale pour la vitesse i.e. : non localisée à une maille. Les coefficients de l'équation de LANGEVIN globale sont obtenus par identification aux équations eulériennes filtrées déduites de l'équation de transport de la d.d.p. filtrée. Cette résolution n'utilise pas un modèle de sous-maille dynamique. Or, dans le cadre de la dispersion atmosphérique de polluants, où interviennent des écoulements de paroi, des effets de convection, et où la présence d'obstacles doit être prise en compte, les modèles de sous-maille sans une constante dynamique (variable en temps et en espace) donnent de moins bons résultats à cause des fortes inhomogénéités, MURAKAMI et al. (1996).

De plus, GICQUEL et al. (2002) ne peuvent obtenir les coefficients α_{ij} , β_{ij} et γ_i car ils n'ont aucune statistique d'ensemble disponible à un instant.

3.3.3 Suivi lagrangien de particules fluides et schéma d'interpolation

Le suivi lagrangien de particules fluides permet d'étudier la dispersion d'un scalaire passif dans un écoulement turbulent et permet d'accéder aux statistiques du champ de concentration. Nous venons de voir que l'équation (3.48) qui détermine le mouvement des particules fluides fait intervenir des grandeurs statistiques de la dynamique eulérienne filtrée. Cette équation (3.48) est résolue simultanément aux équations de NAVIER-STOKES (2.13) à l'aide d'un schéma de RUNGE-KUTTA d'ordre 2.

Les grandeurs statistiques intervenant dans (3.48), \tilde{u}_i , \tilde{k} , $\tilde{\varepsilon}$ et τ_{ij} , n'étant calculées qu'en des points discrets du domaine (points du maillage), il est nécessaire de les interpoler sur les trajectoires des particules fluides. Nous avons choisi les schémas testés par CASULLI & CHENG (1992), qui utilisent 27 points du maillage autour de la position du point d'interpolation. Il s'agit d'une méthode tri-linéaire des polynômes quadratiques de LAGRANGE. Les détails relatifs à cette méthode se trouvent dans l'annexe I. Enfin, AGUIRRE (2005) a vérifié que l'utilisation d'un schéma d'interpolation d'ordre plus élevé n'apporte pas d'amélioration sensible aux résultats et que la méthode d'interpolation barycentrique est aussi performante dans notre cas que le schéma des polynômes de LAGRANGE.

3.4 Validation - dispersion de scalaire passif

Le modèle ((2.13) et (3.48)) est confronté à l'expérience menée par FACKRELL & ROBINS (1982) pour un scalaire passif émis par une source au sein d'une couche limite neutre. Cette expérience est décrite dans le premier chapitre, paragraphe 2.8, où sont présentés aussi les profils dynamiques de la couche limite simulée (figure 2.2 - 2.5). Une source ponctuelle élevée est placée dans cette couche limite. La côte de la source z_s et son diamètre d_s valent respectivement :

$$\begin{cases} z_s = 0.19\delta \\ d_s = 7.08 \times 10^{-3}\delta \end{cases}, \quad (3.64)$$

où $\delta = 1.2m$ est la hauteur de couche limite. Des particules fluides sont rejetées à la source de manière continue. A chaque pas de temps ($dt = 2.10^{-4}s$) 10 nouvelles particules fluides sont injectées dans le domaine. Les particules qui sortent du domaine sont réinjectées à la source. En régime stationnaire il y a 210.000 particules dans le domaine. Les particules qui impactent le sol subissent un rebond symétrique.

Dans ce travail, la diffusion et les phénomènes moléculaires sont négligés car on ne s'intéresse pas au mélange de constituants réactifs mais juste au déplacement sous-maille des particules fluides. Un modèle de diffusion (MICHELOT (1996)) a été introduit par AGUIRRE (2005). Ce modèle est décrit dans l'annexe II. Les caractéristiques du panache auxquelles on s'intéresse (profils de concentration moyenne, de variance de concentration et de flux de masse) ne sont pas modifiées par la prise en compte de la diffusion (annexe II).

3.4.1 Résultats - caractéristiques du panache et concentration moyenne

Une photographie instantanée du panache est représentée figure 3.1.

Les profils de concentration moyenne rapportée à leur valeur maximale à l'abscisse considérée, soit à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.82\delta$ et $x = 4.79\delta$, en aval de la source sont reportés figure 3.2. Ils sont en bon accord avec les résultats expérimentaux de FACKRELL & ROBINS (1982). Lorsque

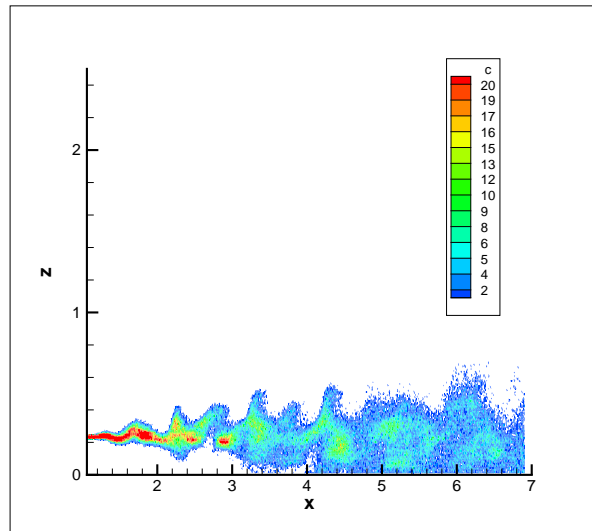


FIG. 3.1 – Représentation instantanée du panache. Les différentes couleurs correspondent aux différentes concentrations en particules fluides transportant le scalaire.

le panache atteint le sol, la concentration au sol et la dispersion loin de la paroi sont légèrement sous-estimées (figure 3.2) pour les deux dernières sections. Globalement, le panache issu de nos simulations est en “retard” par rapport au panache expérimental. En effet, il atteint le sol et a un comportement de panache de surface plus loin de la source. SYKES & HENN (1992) adoptent l’approche eulérienne et résolvent l’équation de transport de la concentration filtrée. Leurs résultats présentent une sous-estimation plus importante de la concentration au sol. Ceci est probablement dû au léger déficit de la vitesse moyenne de leur simulation entre $z/\delta = 0$ et $z/\delta = 0.1$. Notons que SYKES & HENN (1992) modifient la rugosité de la couche limite simulée pour approcher les résultats expérimentaux ce que nous ne faisons pas. Jusqu’à la deuxième station, $x = 1.92\delta$, le panache moyen n’atteint pas le sol. Au-delà, la transition vers un panache de surface commence.

Les variations de la concentration maximale C_m et de la concentration au sol C_0 avec la distance à la source sont comparées aux résultats expérimentaux et à ceux de la simulation de SYKES & HENN (1992) (figure 3.3). Les données expérimentales ont été normalisées par le débit de scalaire passif. Cette grandeur n’est pas explicitée dans l’article. Pour cette raison, la concentration maximale est arbitrairement adimensionnalisée par la concentration maximale à la deuxième station de mesure. Bien que la valeur absolue de la concentration maximale ne soit pas comparable avec celle des expériences, l’évolution en fonction de la distance à la source est la même. Par ailleurs, on constate que, à la différence de SYKES & HENN (1992) on ne sous-estime pas la concentration au sol sur les sections proches de la source. Ceci est en accord avec les profils verticaux de concentration moyenne.

Sur le côté droit de la figure 3.3 est représentée l’évolution en fonction de la distance à la source de la demie-largeur verticale δ_z et transversale δ_y du panache. Les deux demie-largeurs ont vraisemblablement le même comportement et la même valeur. En raison de la présence de la paroi, la demie-largeur transversale devrait être plus grande que la demie-largeur verticale. Dans nos simulations, ceci est le cas lorsqu’on s’éloigne de la source, c’est-à-dire lorsque le panache atteint le sol. Au voisinage de la source, la demie-largeur transversale est sous-estimée par nos simulations. SYKES & HENN (1992) surestiment la différence entre les deux demi-largeurs. Par ailleurs, qu’il s’agisse de la concentration maximale ou des demi-largeurs, à cause de la discrétisation spatiale de la méthode

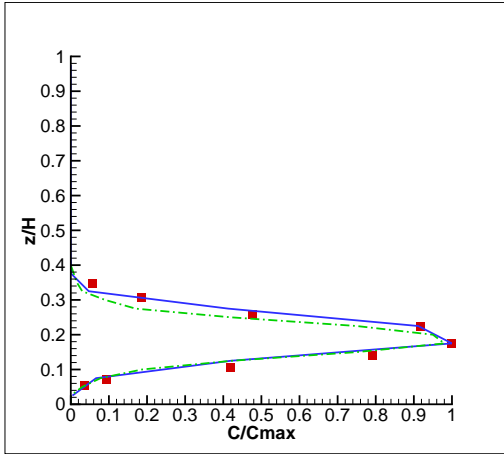
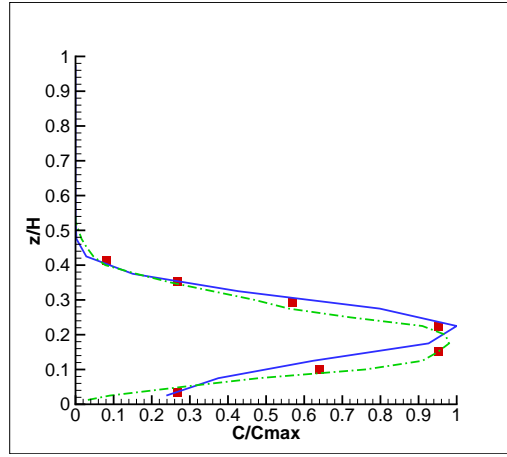
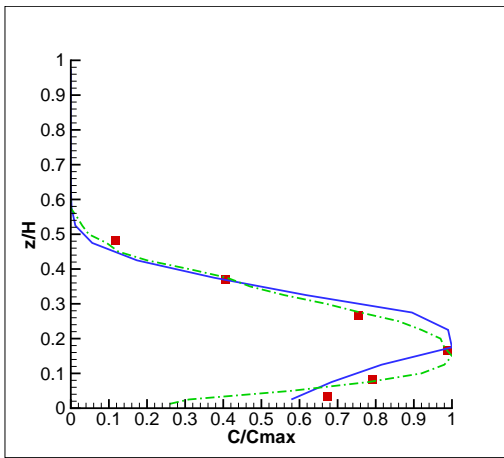
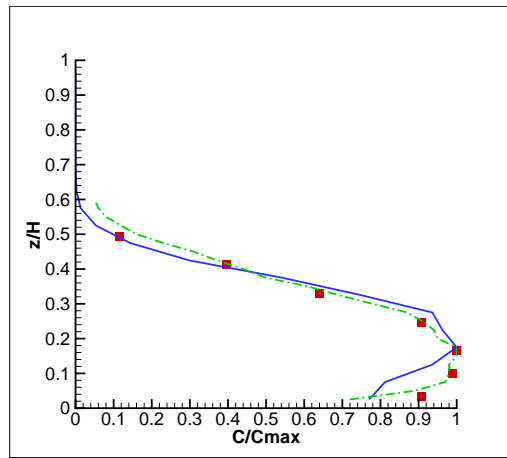
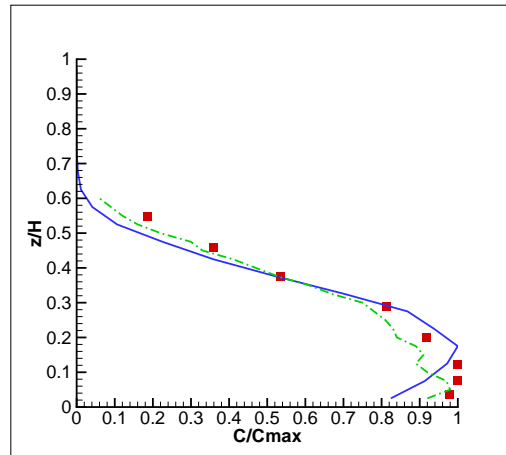
(a) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 0.96\delta$ (b) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 1.92\delta$ (c) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 2.88\delta$ (d) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 3.83\delta$ (e) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 4.79\delta$

FIG. 3.2 – Profil de concentration moyenne rapportée à sa valeur maximale à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$. —, ARPS avec modèle stochastique en sous-maille; - · -, SGE de SYKES & HENN (1992); ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

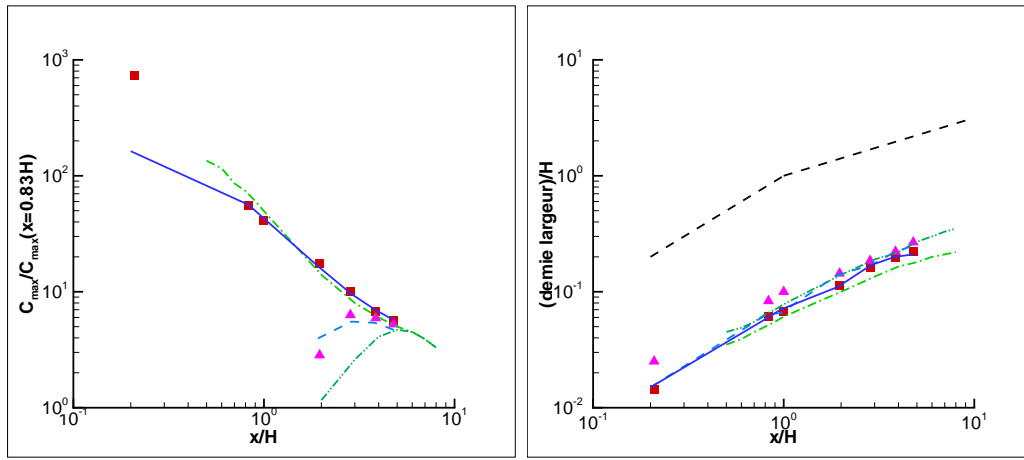


FIG. 3.3 – Gauche - Concentration maximale et concentration au sol. Concentration maximale —, ARPS; ■, FACKRELL & ROBINS (1982); - · - ·, SYKES & HENN (1992). Concentration au sol - - - -, ARPS; ▲, FACKRELL & ROBINS (1982); - · · - ·, SYKES & HENN (1992). Droite - Demie-largeur du panache δ_z et δ_y . Demie-largeur verticale —, ARPS; ■, FACKRELL & ROBINS (1982); - · · - ·, SYKES & HENN (1992). Demie-largeur horizontale - - - -, ARPS; ▲, FACKRELL & ROBINS (1982); - · - ·, SYKES & HENN (1992); - - -, x/δ et $x/\delta^{0.5}$ avec rupture de pente à $x\delta = 1$.

eulérienne employée pour la résolution de leur champ de concentration, SYKES & HENN (1992) n'ont pas de résultats très près de la source. Avec une approche lagrangienne, le champ de concentration peut être décrit entièrement autour de la source. Comme FACKRELL & ROBINS (1982), on trouve que δ_y et δ_z évoluent proportionnellement à x près de la source et à $x^{1/2}$ loin de la source.

3.4.2 Résultats - variance de concentration

Les profils verticaux de la variance de concentration $\overline{c'^2}$, rapportée à sa valeur maximale, à cinq différentes distances de la source sont présentés figure 3.4. Cette variance n'est pas calculée seulement avec les statistiques du champ filtré contrairement aux SGE de XIE et al. (2004) ou de SHARATH & ZHOU (1995). Elle tient compte ici des fluctuations induites par les petites échelles et fournit donc les valeurs instantanées des champs. Ainsi, les statistiques de REYNOLDS présentées dans les travaux expérimentaux de référence (SHLIEN & CORRSIN (1976), BROWN & BILGER (1996), COPPIN et al. (1986)) sont obtenues. Les autres moments du champ de concentration peuvent aussi être calculés sans fermeture supplémentaire.

Les profils verticaux de la variance de concentration sont en bon accord avec les résultats expérimentaux sur les trois premières sections. Une fois que le panache atteint le sol les profils se dégradent, traduisant soit le défaut de résolution de la SGE près du sol soit un problème plus important lié à l'anisotropie. L'énergie cinétique turbulente résolue est sous-estimée (figures 2.3 et 2.5). Cette sous-estimation est plus importante près de la paroi. Cela induit un défaut de fluctuation turbulente au sol, qui peut se traduire par une sous-estimation de la variance de la concentration lorsque le panache atteint la paroi. Ainsi, on constate l'apparition d'un deuxième pic du profil de variance de concentration près du sol (figure 3.4). SYKES & HENN (1992) n'ont pas ce problème car la résolution de leur champ de concentration est entièrement découplée de la dynamique. D'autre part, en ajustant le diffusivité turbulente de sous-maille, ils peuvent forcer l'augmentation de la variance de concentration. Dans notre modèle, tout défaut dynamique se répercute systématiquement sur le champ scalaire. Rappelons qu'ici

la diffusion moléculaire n'est pas prise en compte.

Remarque

Notons de plus que la détermination de la variance scalaire en SGE est rare.

3.4.3 Résultats - moments d'ordre supérieur et densité de probabilité de présence

Densité de probabilité de présence

Les d.d.p. de présence de la concentration pour trois hauteurs et trois distances de la source sont représentées sur la figure 3.5. Près de la paroi, les d.d.p. de présence tendent vers une distribution gaussienne. Les points expérimentaux dans cette région ont été approchés par une distribution log-normale. Lorsqu'on s'éloigne du sol, la d.d.p. de présence prend une forme exponentielle. Par ailleurs, lorsque la distance à la source augmente, la d.d.p. de présence passe d'une distribution log-normale à une distribution exponentielle. FACKRELL & ROBINS (1982) ont mesuré la d.d.p. de présence de la concentration pour une seule distance de la source, à $x/\delta = 4.79$. Ils trouvent que la distribution est gaussienne uniquement à la première station de mesure en z , tout près de la paroi (jusqu'à $z/\delta = 0.13$). Dans nos simulations, à $x/\delta = 4.79$, la distribution reste gaussienne jusqu'à $z/\delta = 0.38$. Comme constaté précédemment, dans nos simulations, les effets du sol ont un impact même lorsqu'on s'éloigne de la paroi. SYKES & HENN (1992), n'ont pas pu calculer ces résultats à cause de leur modélisation.

Coefficient d'aplatissement et skewness

La figure 3.6 illustre le coefficient d'aplatissement K en fonction du skewness S pour différentes distances de la source. Les cinq profils coïncident sur la même parabole. Cette propriété a déjà été constatée par MOLE & CLARKE (1995) et CHATWIN & SULLIVAN (1990) pour la dispersion de scalaires dans un écoulement cisailé. D'après leur analyse mathématique, ils trouvent que, quelque soit la forme de la d.d.p. de présence du scalaire, le coefficient d'aplatissement en fonction du skewness vérifie la relation $K \geq S^2 + 1$. D'après eux, l'égalité est vérifiée lorsque la diffusion moléculaire est négligée, ce qui est le cas dans cette simulation.

3.4.4 Résultats - flux de masse

L'obtention du flux de masse

Un avantage important de la modélisation stochastique du transport sous-maille des particules fluides est la détermination des flux de masse turbulents. Comme pour la variance ou les moments d'ordre supérieur à 2 du champ de concentration, les flux de masse turbulents sont obtenus directement et sans modélisation supplémentaire, à la différence des approches eulériennes de SYKES & HENN (1992), XIE et al. (2004) ou SHARATH & ZHOU (1995).

Le calcul des flux de masse turbulents nécessite la connaissance simultanée de la vitesse et du champ de concentration. Or, dans notre simulation numérique les seules particules fluides suivies sont celle qui transportent le scalaire. Le champ de vitesse complet, c'est-à-dire comprenant la partie grande échelle ainsi que les fluctuations en sous-maille, modélisées par le modèle stochastique, n'est connu qu'à l'intérieur du panache (sinon on a des particules fluides ne transportant pas de scalaire). La détermination des covariances des fluctuations de vitesse et de concentration aux instants où la concentration et la vitesse sont connues conduit donc à des covariances conditionnées par la présence ou non des particules issues de la source. L'écoulement étant stationnaire en moyenne il existe cependant

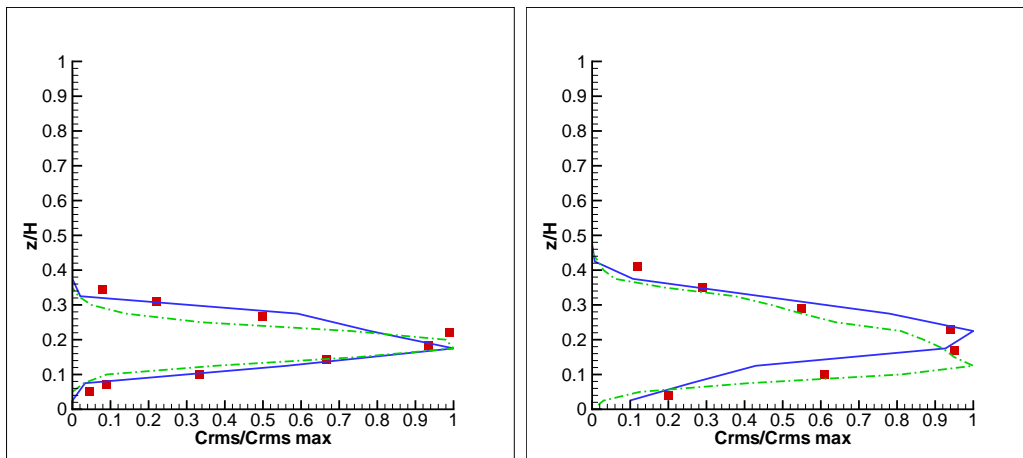
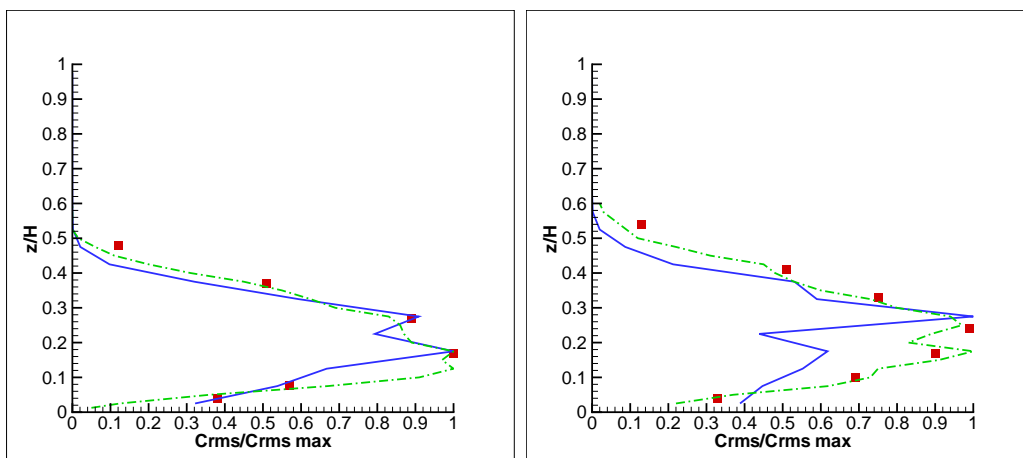
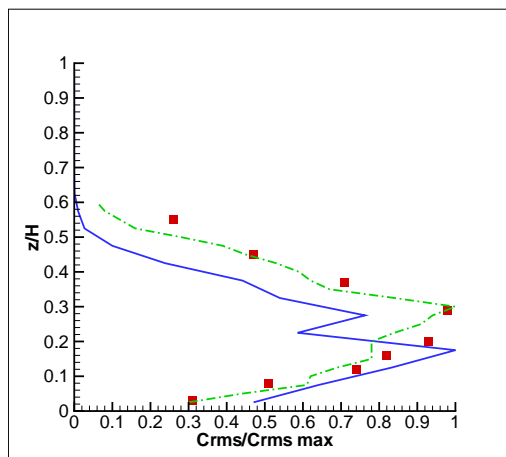
(a) $\overline{c'^2}/\overline{c'^2}_{max}$ à $x = 0.96\delta$ (b) $\overline{c'^2}/\overline{c'^2}_{max}$ à $x = 1.92\delta$ (c) $\overline{c'^2}/\overline{c'^2}_{max}$ à $x = 2.88\delta$ (d) $\overline{c'^2}/\overline{c'^2}_{max}$ à $x = 3.83\delta$ (e) $\overline{c'^2}/\overline{c'^2}_{max}$ à $x = 4.79\delta$

FIG. 3.4 – Profils verticaux de variance de concentration rapportée à sa valeur maximale à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$. —, ARPS avec modèle stochastique en sous-maille; - · -, SGE de SYKES & HENN (1992); ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

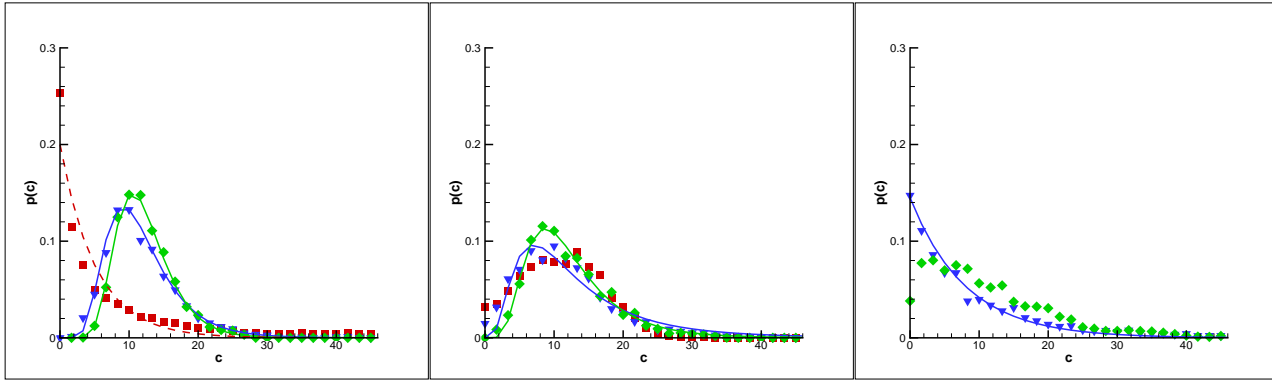


FIG. 3.5 – Densité de probabilité de présence de la concentration à $y/\delta = 0$, pour différentes hauteurs et différentes distances du sol. Gauche : $z/\delta = 0.06$; Symboles : ARPS ; \blacksquare , $x/\delta = 0.96$; \blacktriangledown , $x/\delta = 2.88$; \blacklozenge , $x/\delta = 4.79$; —, distribution log-normale ; - - -, distribution exponentielle. Centre : $z/\delta = 0.21$; Symboles : ARPS ; \blacksquare , $x/\delta = 0.96$; \blacktriangledown , $x/\delta = 2.88$; \blacklozenge , $x/\delta = 4.79$; —, distribution log-normale. Droite : $z/\delta = 0.38$; Symboles : ARPS ; \blacktriangledown , $x/\delta = 2.88$; \blacklozenge , $x/\delta = 4.79$; —, distribution exponentielle.

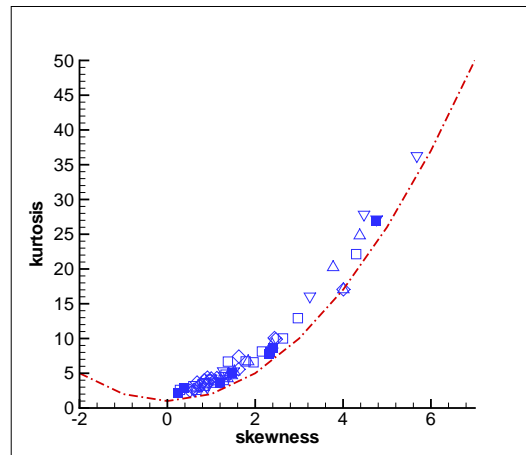


FIG. 3.6 – Skewness en fonction du kurtosis. \blacksquare , $x = 0.96\delta$; \triangle , $x = 1.92\delta$; \blacktriangledown , $x/\delta = 2.88$; \square , $x/\delta = 3.83$; \blacklozenge , $x/\delta = 4.79$; - . - , $S^2 + 1$.

une solution à ce problème de conditionnement des mesures. D'après VINÇONT et al. (2000), l'identité suivante est vérifiée :

$$\overline{u_i c} = \overline{U_i C} - \bar{U}_i \bar{C} . \quad (3.65)$$

Le membre de gauche de l'identité précédente est le flux de masse non conditionné et que l'on souhaite déterminer. Le premier terme du membre de droite est la moyenne du produit instantané de la composante de vitesse, U_i , et de la concentration instantanée C . Le second terme est le produit de la vitesse moyenne \bar{U}_i par la concentration moyenne \bar{C} . La valeur instantanée de la vitesse ne peut pas être déterminée en l'absence de particules. En revanche, le produit instantané de la vitesse et de la concentration est toujours connu puisqu'en l'absence de particules, la concentration est considérée comme nulle et que multipliée par la vitesse instantanée inconnue le produit est nécessairement nul. Ainsi la valeur moyenne du premier terme, $\overline{U_i C}$, est correcte bien que la vitesse, U_i , n'ait pu être déterminée à tous les instants. En revanche, on ne peut pas utiliser les mesures de vitesse dans le panache pour déterminer \bar{U}_i car les valeurs obtenues seraient conditionnées par l'intermittence du panache. Par conséquent \bar{U}_i est déterminé indépendamment à partir du champ grande échelle résolu par SGE.

Les profils de flux de masse verticaux $\overline{w c}$ sont présentés sur la figure 3.7. Les valeurs sont normalisées par la vitesse de frottement et la concentration maximale sur chaque section. Les résultats de la simulation numérique sont en bon accord avec les mesures. On observe essentiellement que :

1. Il existe une inversion de signe des profils à environ $z = z_s$.
2. Le flux est positif au-dessus de $z = z_s$ et admet une valeur maximale. Ce maximum se produit à l'intérieur de la région de mélange c'est à dire là où les gradients de vitesse moyenne longitudinale \bar{U} et de concentration moyenne \bar{C} sont les plus élevés.
3. Le flux est négatif en dessous de $z = z_s$ et après un maximum en valeur absolue revient à zéro à la paroi. Le signe de $\overline{w c}$ en fonction de z correspond à des types de transports à gradient ou à contre gradient, privilégiés des fluctuations de concentration par les fluctuations de vitesse (VINÇONT et al. (2000)).
4. Lorsqu'on s'éloigne de la source et lorsque le panache atteint le sol l'antisymétrie disparaît et le flux près du sol devient nul. Il y a ici transition entre deux types de sources.

Comparaisons avec modèle à gradient

Le flux de masse vertical peut être modélisé en fonction du gradient vertical de concentration moyenne, WYNGAARD (1981) :

$$\overline{w c} = k_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} , \quad (3.66)$$

où k_z est le coefficient de diffusion turbulente du scalaire. Ainsi les valeurs de k_z obtenues par nos simulations, sont données par :

$$k_z = \frac{\overline{w c}}{\frac{\partial \bar{C}}{\partial z}} , \quad (3.67)$$

et sont représentées sur la figure 3.8. Elles sont en bon accord avec les valeurs obtenues à partir des mesures de FACKRELL & ROBINS (1982).

D'autre part, on peut ajuster les coefficients de diffusion turbulente pour chaque profil afin de suivre l'évolution des profils $\overline{w c}$ simulés. On obtient alors la modélisation de $\overline{w c}$ pour les profils verticaux

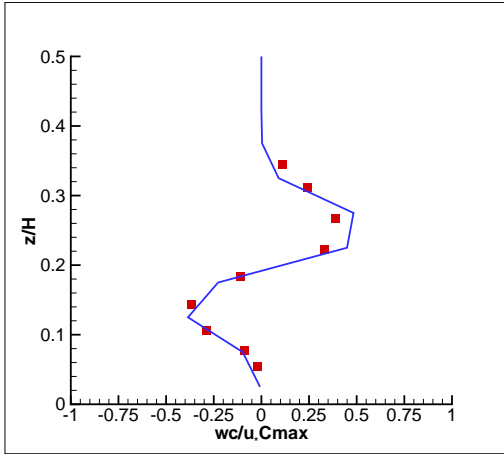
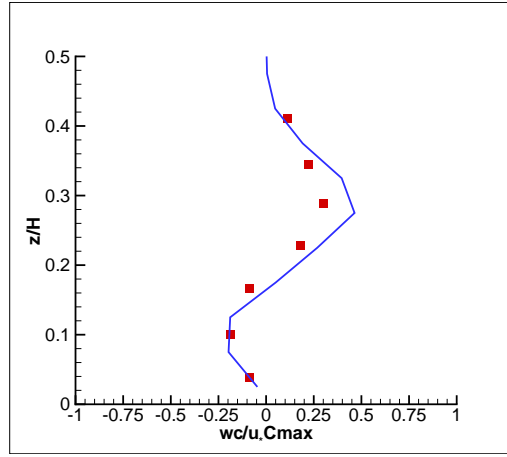
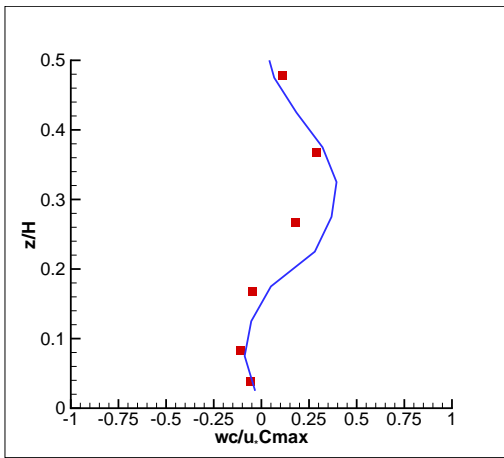
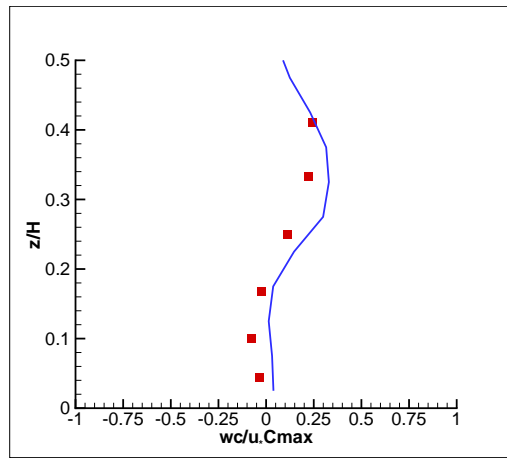
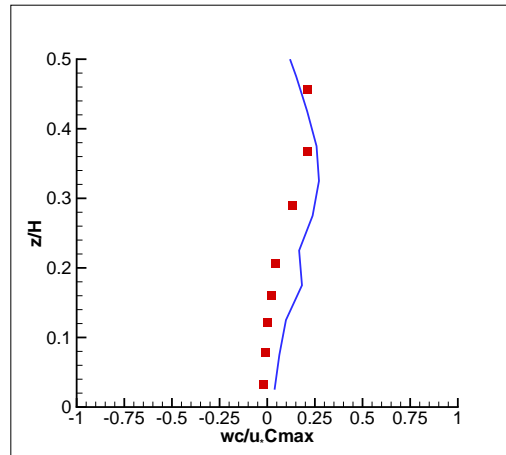
(a) $\overline{w\bar{c}}/u_*\bar{C}_{max}$ à $x = 0.96\delta$ (b) $\overline{w\bar{c}}/u_*\bar{C}_{max}$ à $x = 1.92\delta$ (c) $\overline{w\bar{c}}/u_*\bar{C}_{max}$ à $x = 2.88\delta$ (d) $\overline{w\bar{c}}/u_*\bar{C}_{max}$ à $x = 3.83\delta$ (e) $\overline{w\bar{c}}/u_*\bar{C}_{max}$ à $x = 4.79\delta$

FIG. 3.7 – Profils verticaux de flux de masse à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$. —, ARPS avec modèle stochastique en sous-maille; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

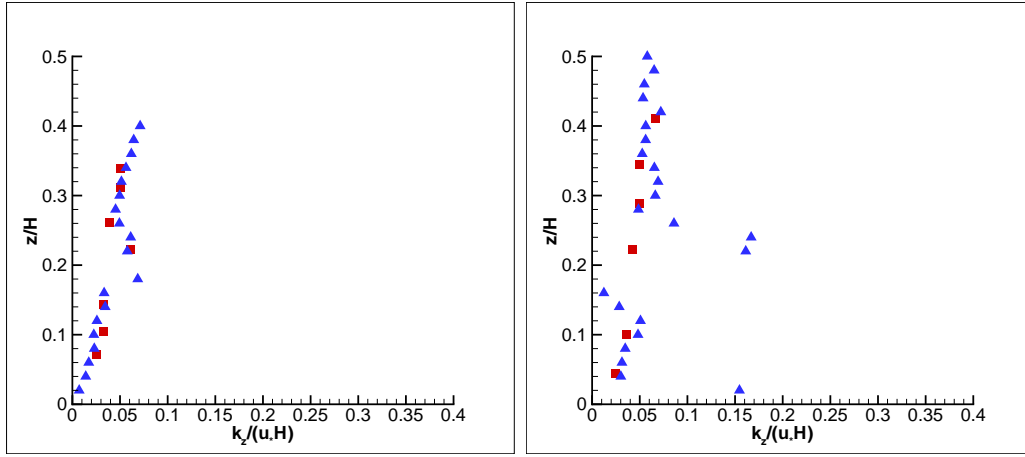
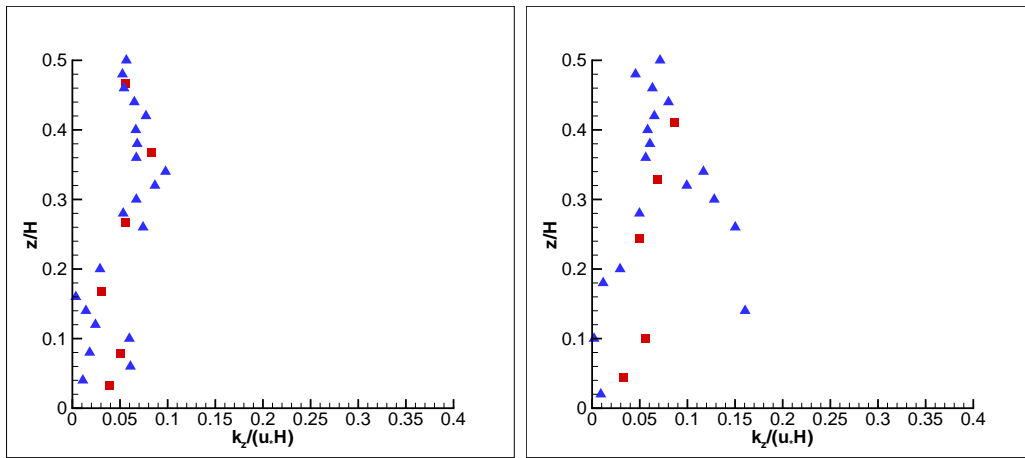
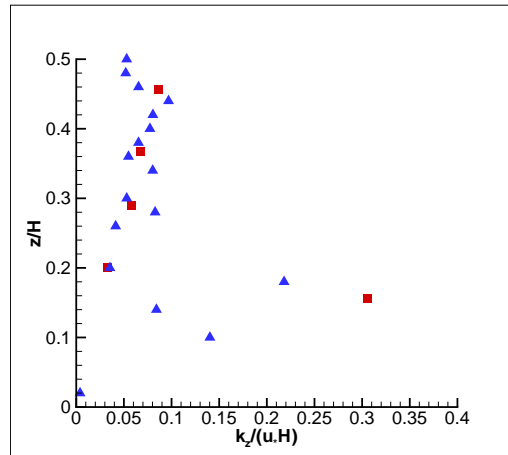
(a) $k_z/u_*\delta$ à $x = 0.96\delta$ (b) $k_z/u_*\delta$ à $x = 1.92\delta$ (c) $k_z/u_*\delta$ à $x = 2.88\delta$ (d) $k_z/u_*\delta$ à $x = 3.83\delta$ (e) $k_z/u_*\delta$ à $x = 4.79\delta$

FIG. 3.8 – Profils verticaux du coefficient de diffusion turbulente scalaire à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$. \blacktriangle , ARPS avec modèle stochastique en sous-maille ; \blacksquare , expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

des cinq sections (figure 3.9). Le coefficient de diffusion utilisé pour l'ajustement est $k_z = 0.002U_e\delta \approx 100\text{cm}^2/\text{s}$. Ce coefficient est ici considéré comme constant. VINÇONT et al. (2000) ont fait des mesures PIV de concentration issue d'une source linéique en amont d'un obstacle, dans une couche limite turbulente. Par la même approche, ils obtiennent $k_z = 0.008U_e\delta = 13.8\text{cm}^2/\text{s}$, en aval de l'obstacle, loin de la zone de recirculation, et $k_z = 0.005U_e\delta = 7.59\text{cm}^2/\text{s}$ dans la zone de recirculation. L'ordre de grandeur des valeurs trouvées dans nos simulations est le même que celui des valeurs expérimentales de VINÇONT et al. (2000).

Pourtant, des études à l'échelle atmosphérique (PASQUILL & SMITH (1983), BUSINGER (1981) et WYNGAARD (1981)) montrent qu'on peut utiliser un coefficient de diffusion qui varie avec l'altitude (loi de puissance ou fonction exponentielle par exemple).

Conclusion

La SGE est appliquée à l'étude de la dispersion de scalaires passifs dans un écoulement turbulent afin de valider le couplage entre la SGE et le modèle stochastique. Les particules fluides contenant le scalaire sont suivies à chaque instant, donc la description est lagrangienne. Une équation stochastique de LANGEVIN est utilisée pour déterminer la composante petite échelle de la vitesse des particules en sous-maille. Par rapport à l'utilisation classique en décomposition de REYNOLDS, ce modèle stochastique est reformulé en termes de grandeurs filtrées. Il est donc exprimé uniquement en fonction des grandeurs obtenues par la SGE. Les résultats de la dynamique et du scalaire sont confrontés à l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) sur la dispersion de scalaire passif dans une couche limite turbulente.

Le couplage entre la SGE et le modèle stochastique de sous-maille semble bien adapté à la modélisation du mouvement des particules fluides dans une maille. Il permet d'obtenir directement la concentration moyenne et la variance. Cette variance n'est pas calculée seulement avec les statistiques du champ filtré contrairement aux SGE classiques SYKES & HENN (1992), XIE et al. (2004) ou SHARATH & ZHOU (1995). Elle tient compte ici des fluctuations induites par les petites échelles et donc fournit les valeurs instantanées des champs. Moyennant des calculs suffisamment longs, les statistiques au sens de REYNOLDS classiquement présentes dans les travaux expérimentaux de référence sont obtenues. Le flux de masse ainsi que tous les autres moments du champ de concentration peuvent aussi être calculés sans fermeture supplémentaire.

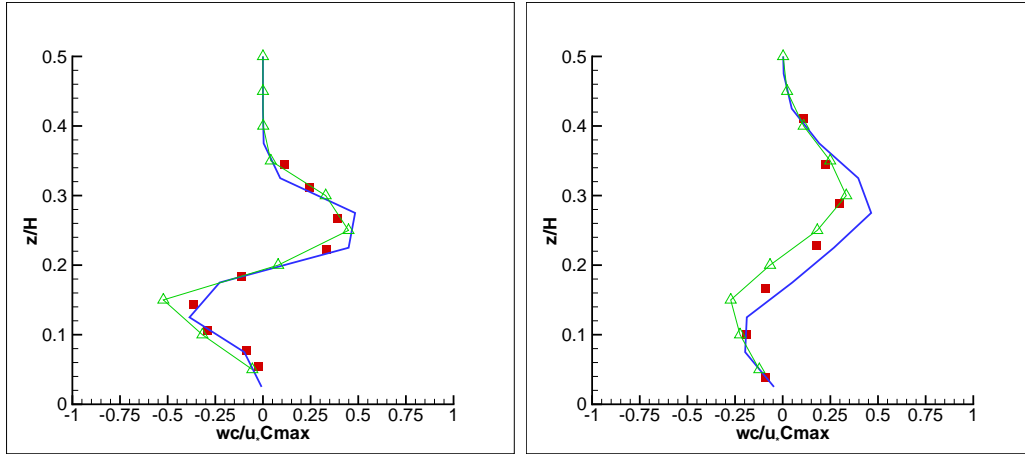
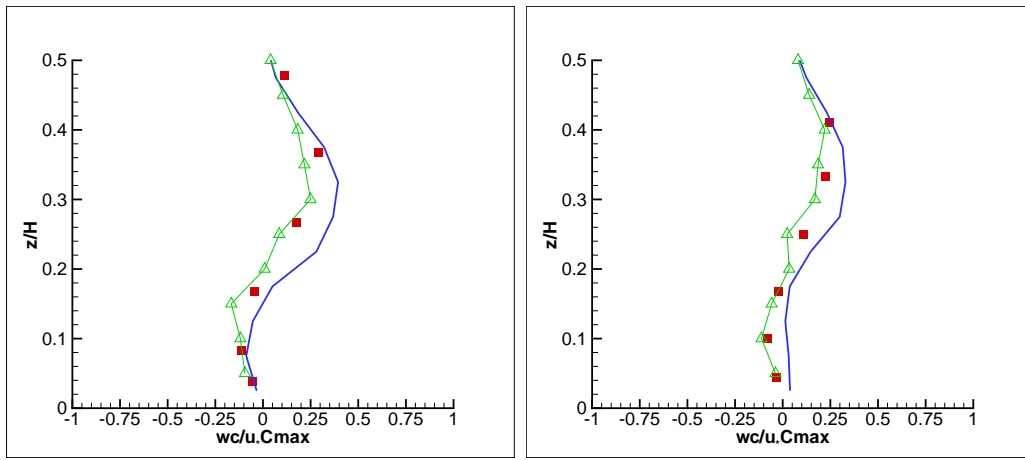
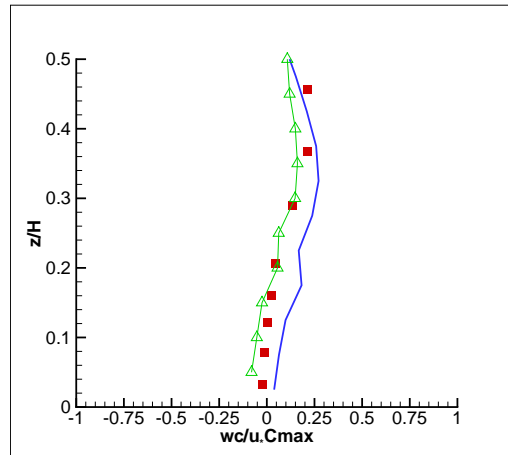
(a) $\overline{w\bar{c}}$ et $-k_z\partial\bar{C}/\partial z$ à $x = 0.96\delta$ (b) $\overline{w\bar{c}}$ et $-k_z\partial\bar{C}/\partial z$ à $x = 1.92\delta$ (c) $\overline{w\bar{c}}$ et $-k_z\partial\bar{C}/\partial z$ à $x = 2.88\delta$ (d) $\overline{w\bar{c}}$ et $-k_z\partial\bar{C}/\partial z$ à $x = 3.83\delta$ (e) $\overline{w\bar{c}}$ et $-k_z\partial\bar{C}/\partial z$ à $x = 4.79\delta$

FIG. 3.9 – Profils verticaux de flux de masse, $\overline{w\bar{c}}$ et du modèle $-k_z\partial\bar{C}/\partial z$ à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$. —, ARPS avec modèle stochastique en sous-maille; Δ , $-k_z\partial\bar{C}/\partial z$; \blacksquare , expérience de FACKRELL & ROBINS (1982).

Chapitre 4

Transport de particules solides et de gouttelettes

Introduction

La dispersion des gouttelettes et des particules solides constitue une étape prépondérante dans l'étude de la pollution atmosphérique en milieu urbain. En effet, dès lors que l'on s'intéresse à la pollution automobile (poussières), aux sites industriels induisant des brouillards fréquents (micro gouttelettes) ou au lessivage par la pluie (gouttes), il faut résoudre le transport des particules par la turbulence atmosphérique et modéliser toutes les interactions fluide/particules et particules/particules. Dans cette partie, le suivi lagrangien de particules solides et de gouttelettes est introduit dans la SGE. Celle-ci fournit l'information relative aux grandes échelles responsables de l'advection des particules. Cependant, de nombreux processus physiques, comme les réactions chimiques à la surface des gouttes, les collisions interparticulaires, la coalescence, la fragmentation ou l'évaporation des gouttelettes ont lieu à des échelles bien plus petites que la maille. Il est donc nécessaire de modéliser le transport sous-maille des particules, POZORSKI et al. (2004). Pour ce faire, dans l'équation de transport des particules par un écoulement non uniforme, la vitesse du fluide à la position de la particule est donnée par une partie grande échelle et une partie petite échelle en sous-maille, comme explicité dans le chapitre 3 pour les particules fluides contenant le scalaire. La vitesse grande échelle est directement obtenue par la SGE. La vitesse petite échelle en sous-maille des particules est déterminée à partir de la vitesse sous-maille des particules fluides (chapitre 3), par analogie avec le modèle stochastique de sous-maille développé au chapitre précédent.

Dans cette partie, on décrira d'abord l'équation de transport d'une particule solide ou d'une gouttelette dans un écoulement non uniforme, MAXEY & RILEY (1983). Ensuite, on présentera la modélisation des effets de sous-maille sur le transport des particules. La modification de l'écoulement par la présence des particules ainsi que les collisions interparticulaires sont introduites dans ce chapitre. Enfin, l'ensemble est confronté à deux expériences de laboratoire relatives au transport de particules de sable et à l'érosion éolienne, NALPANIS et al. (1993) et TANIÈRE & OESTERLÉ (1997).

4.1 Équation du mouvement d'une particule isolée

4.1.1 Équation du mouvement d'une sphère rigide dans un écoulement non uniforme, MAXEY & RILEY (1983)

Le mouvement de translation d'une particule dans un écoulement fluide est décrit suivant l'approche lagrangienne, dans le cadre de la mécanique classique. La démarche pour obtenir l'expression de la force résultante sur une particule isolée dans un écoulement, consiste à exprimer cette force en fonction des propriétés du champ de vitesse de l'écoulement localement non perturbé par la présence de la particule. Les premières études sur cette force de traînée subie par une particule sphérique dans un fluide au repos ont été réalisées par STOKES (1851), BASSET (1888), BOUSSINESQ (1885) et OSEEN (1927) pour des petites valeurs du nombre de REYNOLDS particulaire. TCHEN (1947) introduit des modifications à l'équation obtenue par BASSET (1888), BOUSSINESQ (1885) et OSEEN (1927) (équation BBO) afin de modéliser le mouvement des particules dans un écoulement instationnaire. Il élargit la formulation aux écoulements non uniformes. Cependant, cette dernière amélioration possède des incohérences, signalées par CORRISIN & LUMLEY (1956). Plus tard, BUEVICH (1966) et RILEY (1971) apportent une correction à l'équation de TCHEN (1947). Enfin, MAXEY & RILEY (1983) présentent l'équation de mouvement d'une particule solide, sphérique et de taille inférieure ou comparable aux échelles de KOLMOGOROV dans un champ instationnaire et non uniforme :

$$\begin{aligned}
m_p \frac{d\vec{v}_p}{dt} = & m_f \left(\frac{D\vec{u}}{Dt} \right)_{\vec{x}_p(t)} + (m_p - m_f) \vec{g} \\
& - \frac{1}{2} m_f \frac{d}{dt} \left\{ \vec{v}_p(t) - \vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - \frac{d_p^2}{40} \nabla^2 \vec{u}(\vec{x}_p(t), t) \right\} \\
& - 3\pi d_p \mu \left\{ \vec{v}_p(t) - \vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - \frac{d_p^2}{24} \nabla^2 \vec{u}(\vec{x}_p(t), t) \right\} \\
& - \frac{3\pi d_p^2 \mu}{2} \int_0^t \left(\frac{d}{d\tau} \left\{ \vec{v}_p(\tau) - \vec{u}(\vec{x}_p(\tau), \tau) + \frac{d_p^2}{24} \nabla^2 \vec{u}(\vec{x}_p(\tau), \tau) \right\} \right) \frac{d\tau}{\sqrt{\pi\nu(t-\tau)}} . \quad (4.1)
\end{aligned}$$

L'équation est formulée en décomposant la force exercée sur une particule en deux parties (les deux premiers termes à droite de l'équation (4.1) d'une part et les autres termes à droite, d'autre part). La première partie représente la force qui s'exerce sur un élément fluide qui serait à la place de la particule. La deuxième est la force qui résulte de la perturbation du champ de vitesse du fluide provoquée par la présence de la particule. $\vec{u}(\vec{x}_p(t), t)$ est la vitesse du fluide localement non perturbé par la présence de la particule. C'est la vitesse du fluide à la position de la particule, $\vec{x}_p(t)$.

L'opérateur D/Dt est la dérivée du champ en suivant un élément fluide :

$$\left(\frac{D\vec{u}}{Dt} \right)_{\vec{x}_p(t)} = \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \vec{u}}{\partial x_j} \right)_{\vec{x}_p(t)} , \quad (4.2)$$

alors que l'opérateur d/dt est la dérivée du champ en suivant la particule solide :

$$\frac{d\vec{u}}{dt}(\vec{x}_p(t), t) = \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + v_{pj} \frac{\partial \vec{u}}{\partial x_j} \right)_{\vec{x}_p(t)} . \quad (4.3)$$

Les différents termes à droite de l'équation (4.1) représentent respectivement :

- les forces dues au gradient de pression du champ non-perturbé,
- la flottabilité,
- la force de masse ajoutée,
- la traînée visqueuse de STOKES,
- la force de BASSET.

Les termes de FAXEN $\nabla \vec{u}$ proviennent de la non uniformité du champ de vitesse du fluide à l'échelle de la particule.

Selon le même formalisme que MAXEY & RILEY (1983), GATIGNOL (1983) obtient l'équation de mouvement d'une particule dans un écoulement non-uniforme, lorsque le diamètre de la particule est du même ordre que l'échelle de longueur de KOLMOGOROV :

$$\begin{aligned}
m_p \frac{d\vec{v}_p}{dt} = & m_f \left(\frac{D\vec{u}^{vol}}{Dt} \right)_{\vec{x}_p(t)} + (m_p - m_f) \vec{g} \\
& - \frac{1}{2} m_f \frac{d}{dt} \left\{ \vec{v}_p(t) - \vec{u}^{vol}(\vec{x}_p(t), t) \right\} \\
& - 3\pi d_p \mu \left\{ \vec{v}_p(t) - \vec{u}^{surf}(\vec{x}_p(t), t) \right\} \\
& - \frac{3\pi d_p^2 \mu}{2} \int_0^t \left(\frac{d}{d\tau} \left\{ \vec{v}_p(\tau) - \vec{u}^{surf}(\vec{x}_p(\tau), \tau) + \frac{d_p^2}{24} \nabla^2 \vec{u}(\vec{x}_p(\tau), \tau) \right\} \right) \frac{d\tau}{\sqrt{\pi\nu(t-\tau)}} \quad (4.4)
\end{aligned}$$

où $\vec{u}^{vol}(\vec{x}_p(t), t)$ et $\vec{u}^{surf}(\vec{x}_p(\tau), \tau)$ représentent respectivement la vitesse du fluide localement non perturbé par la particule, mais intégrée respectivement sur le volume ou sur la surface de la particule. Par un développement limité au premier ordre, on retrouve les termes de FAXEN :

$$\vec{u}^{vol}(\vec{x}_p(t), t) = \vec{u}(\vec{x}_p(t), t) + \frac{d_p^2}{40} \nabla^2 \vec{u}(\vec{x}_p(t), t) + \mathcal{O}(d_p^4 \nabla^2 \vec{u}) \quad , \quad (4.5)$$

$$\vec{u}^{surf}(\vec{x}_p(t), t) = \vec{u}(\vec{x}_p(t), t) + \frac{d_p^2}{24} \nabla^2 \vec{u}(\vec{x}_p(t), t) + \mathcal{O}(d_p^4 \nabla^2 \vec{u}) \quad . \quad (4.6)$$

L'équation du mouvement d'une particule isolée dans un écoulement non-uniforme peut aussi être obtenue à partir d'un bilan des forces exercées sur la particule. Un aperçu de l'ensemble de ces forces est donné par SOMMERFELD (2000), pour une particule sphérique, de taille petite ou comparable à l'échelle de longueur de KOLMOGOROV et dans un écoulement infini. En négligeant la contribution des termes de FAXEN, par cette approche on obtient la même équation de mouvement (équation 4.1).

Dans ce qui suit nous allons décrire brièvement les différentes forces agissant sur la particule. Les particules étant petites, nous ne tenons pas compte de la contribution des termes de FAXEN.

4.1.2 Les forces appliquées à une sphère rigide dans un écoulement non uniforme

Gradient de pression et force de flottabilité

Ces forces correspondent aux forces exercées sur un élément fluide qui serait à la place de la particule. Il s'agit des forces de gradient de pression et de cisaillement qui peuvent être exprimées à partir des équations de NAVIER-STOKES en fonction de l'accélération du fluide et de la gravité. En incluant la force de pesanteur sur la particule, on obtient l'expression :

$$\left(\frac{D\vec{u}}{Dt} \right)_{\vec{x}_p(t)} + (m_p - m_f) \vec{g} \quad . \quad (4.7)$$

Force de traînée

La contribution des termes de FAXEN est négligée. La force de traînée de STOKES :

$$3\pi d_p \mu (\vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - \vec{v}_p(t)) = m_p \frac{\vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - \vec{v}_p(t)}{\tau_p}, \quad (4.8)$$

est liée aux contraintes visqueuses exercées par le fluide sur la surface de la particule, où τ_p est le temps de relaxation de la particule :

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu}. \quad (4.9)$$

En faisant intervenir le coefficient de traînée C_D , la force de traînée s'écrit sous la forme classique :

$$\frac{\pi \rho_p d_p^2}{8} C_D |\vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - \vec{v}_p(t)| (\vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - \vec{v}_p(t)). \quad (4.10)$$

Le coefficient de traînée prend en compte la traînée de forme et de frottement. Il dépend, en particulier du nombre de REYNOLDS liée à la particule, CLIFT et al. (1978), défini par :

$$Re_p = \frac{|\vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - \vec{v}_p(t)| d_p}{\nu}. \quad (4.11)$$

Pour de petits nombres de REYNOLDS particulières ($Re_p \leq 1$), les effets visqueux sont dominants et STOKES (1851) obtient une solution analytique du coefficient de traînée pour une particule sphérique et solide, avec la condition d'adhérence sur la paroi de la particule :

$$C_D = \frac{24}{Re_p}. \quad (4.12)$$

Pour des nombres de REYNOLDS plus grands ($1 < Re_p < 1000$), les effets d'inertie sont plus importants et l'écoulement autour de la particule devient instable. SCHILLER & NAUMAN (1935) proposent l'extension semi-empirique suivante :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}). \quad (4.13)$$

Lorsque Re_p est plus grand que 1000, la forme du sillage derrière la particule ne change quasiment plus et le coefficient de traînée devient constant :

$$C_D = 0.44. \quad (4.14)$$

Enfin, une diminution brutale de C_D se produit à $Re_p \approx 2.5 \times 10^5$ lorsque la couche limite autour de la particule passe du régime laminaire au régime turbulent.

Lorsqu'il existe une vitesse de glissement à la surface des particules, ce qui n'est pas le cas dans ce travail mais est le cas pour les bulles, le coefficient de traînée est différent de celui de particules solides ou de gouttelettes. Dans le cas des bulles indéformables et sans impureté, le coefficient de traînée s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} C_D = \frac{16}{Re_p} & \text{si } Re_p < 1, \text{ HADAMARD (1911), RIBZCZYNSKI (1991)} \\ C_D = \frac{16}{Re_p} \left(1 + 0.16 Re_p^{1/2}\right) & \text{si } 1 < Re_p < 60, \text{ MAGNAUDET et al. (1995)} \\ C_D = \frac{48}{Re_p} \left(1 + 2.21 Re_p^{-1/2}\right) & \text{si } Re_p > 60, \text{ MOORE et al. (1963)}. \end{array} \right. \quad (4.15)$$

Forces de masse ajoutée

La force de masse ajoutée a pour origine les accélérations et décélérations successives de la particule qui entraînent des accélérations et décélérations du fluides environnant. Dans le cas d'un fluide rotationnel non visqueux, AUTON et al. (1988) expriment cette force sous la forme :

$$\frac{1}{2}m_f \left(\frac{d\vec{v}_p}{dt} - \left(\frac{D\vec{u}}{Dt} \right)_{\vec{x}_p(t)} \right). \quad (4.16)$$

Cette expression diffère de celle obtenue par MAXEY & RILEY (1983) par l'opérateur de dérivée appliqué au champ fluide. Dans le cas des particules très petites devant les échelles de KOLMOGOROV et pour des faibles nombres de REYNOLDS particulières, MINIER (1988) montre que les deux opérateurs D/Dt et d/dt sont identiques. En dehors de ces conditions, ceci n'est, pas le cas.

Force de Basset

La force de BASSET est liée à l'histoire des accélérations passées de la particule. Elle résulte du retard de l'écoulement par rapport aux changements des conditions dans la couche limite de la particule. La force de BASSET est très importante dans le cas de forte accélération du fluide, elle révèle le caractère instationnaire de l'écoulement.

Force de portance

Les forces de portance apparaissent lorsqu'il existe une dissymétrie de l'écoulement du fluide autour de la particule par rapport à l'axe de translation relatif fluide-particule. Il existe, en particulier, deux phénomènes contribuant à la production d'une force de portance :

- l'effet MAGNUS induit par la rotation propre de la particule. Dans un écoulement en canal ou de couche limite, d'importantes vitesse de rotation peuvent être générées par les collisions des particules avec les parois.
- un effet lié à la présence de vorticit  dans l'écoulement du fluide non perturb , SAFFMAN (1965).

Dans le formalisme de MAXEY & RILEY (1983), les forces de portance sont n glig es.

4.1.3 Cas d'une particule solide ou d'une gouttelette

Ordre de grandeur des forces mises en jeu dans le mouvement d'une particule

Dans le cas de cette  tude, on s'int resse   la dispersion de particules dans une couche limite atmosph rique, de hauteur δ , de vitesse de frottement u_* et dont le nombre de REYNOLDS associ  est :

$$Re_\tau = \frac{u_*\delta}{\nu}. \quad (4.17)$$

En supposant que u_* et δ sont des grandeurs d'adimensionnalisation courantes de cette couche limite, les forces dues au gradient de pression, en ordre de grandeur, sont  quivalentes   :

$$\begin{aligned} \left| \frac{D\vec{u}}{Dt} \right| &\approx \left| \frac{d\vec{u}}{dt} \right|, \\ &\approx \frac{u_*^2}{\delta}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

TAB. 4.1 – Ordre de grandeur des forces mises en jeu dans le mouvement d'une particule dans une couche limite.

Force	Ordre de grandeur
Gradient de pression	$\approx (d_p/\delta)^2 Re_\tau$
Masse ajoutée	$\approx (d_p/\delta)^2 Re_\tau$
BASSET	$\approx (d_p/\delta) Re_\tau^{1/2}$
termes de FAXEN	$\approx (d_p/\delta)^2$

Le rapport entre les forces de gradient de pression et la traînée visqueuse est alors donné par :

$$\frac{\left| \rho \frac{D\vec{u}}{Dt} \right|}{\left| \frac{\rho_p (\vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - \vec{v}_p(t))}{\tau_p} \right|} \approx \frac{d_p^2 u_*}{\nu \delta},$$

$$= \left(\frac{d_p}{\delta} \right)^2 Re_\tau. \quad (4.19)$$

Le rapport des autres forces (masse ajoutée, force de BASSET) ainsi que des termes de FAXEN est estimé de la même manière. Le tableau 4.1 illustre les résultats obtenus par cette analyse.

Nombre de STOKES

Le nombre de STOKES compare le temps de relaxation des particules τ_p au temps caractéristique des échelles de la turbulence. Par exemple, il peut être défini sur l'échelle intégrale :

$$St_L = \frac{\tau_p}{T_L}, \quad (4.20)$$

ou sur l'échelle de KOLMOGOROV :

$$St_\eta = \frac{\tau_p}{\tau_\eta}. \quad (4.21)$$

Lorsque le nombre de STOKES relatif à une échelle donnée est plus petit que 1 les particules ont un temps de réponse équivalent au temps caractéristique de cette échelle. De même, lorsque ce nombre de STOKES est plus grand que 1 le temps de réponse des particules est supérieur à l'échelle de temps caractéristique des fluctuations de vitesse subie par cette échelle et la trajectoire des particules n'est pas affectée de la même façon que le fluide par celles-ci. Dans ce cas, les particules ont des trajectoires lisses et ne sont pas soumises de la même façon aux fluctuations turbulentes. Les différents régimes définis par les deux nombres de STOKES dans le cas des particules solides sont décrit en détails dans la partie 4.6.1.

4.1.4 Le cas étudié dans cette thèse

Dans le cadre de cette thèse, nous considérons des particules solides et des gouttelettes dans un écoulement turbulent. Elles sont supposées sphériques et de tailles inférieures ou comparables aux échelles de KOLMOGOROV, de masses volumiques bien plus grandes que celle du fluide ($\rho_p/\rho > 1000$), et pour des nombres de STOKES variant principalement entre 0.01 et 100. Les forces de gradient de

pression, de masse ajoutée et de BASSET sont donc négligées. De plus, du fait de la petite taille des particules devant l'échelle de longueur de KOLMOGOROV des écoulements étudiés, les forces de portance et les termes de FAXEN sont aussi négligés. Ainsi, l'équation (4.1) de mouvement d'une particule est réduite à :

$$\frac{d\vec{v}_p}{dt} = \frac{\vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - \vec{v}_p(t)}{\tau_p} f(Re_p) + \vec{g}, \quad (4.22)$$

où τ_p est le temps de relaxation de la particule, donné par l'équation (4.9). D'autre part, qu'il s'agisse des gouttelettes ou des particules solides, le nombre de REYNOLDS particulaire est toujours inférieur à 100. Le terme de correction du coefficient de traînée est donné par :

$$\begin{cases} f(Re_p) = 1 & \text{si } Re_p \leq 1 \\ f(Re_p) = (1 + 0.15Re_p^{0.687}) & \text{sinon,} \end{cases} \quad (4.23)$$

et correspond à (4.12) et (4.13).

4.2 Modélisation du transport sous-maille des particules solides et des gouttelettes

4.2.1 Transport des particules et simulation des grandes échelles

La SGE fournit le champ instantané des échelles plus grandes que la maille. De nombreux processus physiques comme les réactions chimiques à la surface des particules, les collisions interparticulaires, la coalescence, la fragmentation ou l'évaporation des gouttelettes ont lieu aux échelles plus petites que la maille. Les effets du champ de vitesse sous-maille sur le mouvement des particules doivent donc être modélisés.

En filtrant les résultats pour des particules solides portées par le champ de vitesse obtenu à l'aide d'une simulation numérique directe d'un écoulement en canal ARMENIO et al. (1999) trouvent que les statistiques de dispersion des particules fluides et des particules avec inertie telles que τ_p est de l'ordre de l'échelle de KOLMOGOROV (τ_η) sont altérées par le filtrage. L'inertie atténuée la différence entre les statistiques de dispersion obtenues par la simulation numérique directe et par la simulation numérique directe filtrée. Cependant, dans le cas d'un filtrage du champ obtenu par la simulation numérique directe correspondant à une SGE où l'énergie cinétique turbulente de sous-maille représente 20% de l'énergie cinétique turbulente totale, l'erreur commise sur la dispersion est de 15% dans la direction verticale à la paroi. En outre, ARMENIO et al. (1999) concluent que pour τ_p de l'ordre de l'échelle de KOLMOGOROV la réponse des particules inertielles aux fluctuations de sous-maille peut avoir un effet de résonance par rapport à la réponse des particules fluides.

POZORSKI et al. (2004) réalisent aussi des tests de SGE *a priori*, en filtrant les résultats d'une simulation numérique directe en turbulence homogène isotrope. C'est sur la concentration préférentielle de particules ayant des nombres de STOKES variables, allant de 0.7 à 4, qu'ils estiment l'impact du filtrage. Pour une coupure où l'énergie cinétique turbulente de sous-maille représente 35%, ils constatent une modification des champs de concentration et concluent sur la nécessité de modéliser la vitesse de sous-maille des particules solides, ce que nous faisons ici.

On considère donc ici que la vitesse de la particule fluide $\vec{u}(\vec{x}_p(t), t)$ à la position de la particule solide est donnée par :

- une partie grande échelle, $\tilde{u}_i(\vec{x}_p(t), t)$,

- une partie petite échelle en sous-maille, $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$.

La partie grande échelle à la position de la particule est directement obtenue par interpolation du champ eulérien résolu par la SGE. La méthode d'interpolation utilisée est la même que pour les particules fluides (paragraphe 3.3.3). La partie petite échelle en sous-maille peut être déterminée de différentes manières.

Quelques études sur la prise en compte des fluctuations de sous-maille sur la dispersion de particules solides ou de gouttelettes dans un écoulement turbulent ont déjà été réalisées. Les principaux auteurs ayant proposé une modélisation du transport sous-maille de particules solides ou de gouttelettes sont : WANG & SQUIRES (1996), POZORSKI et al. (2004), FUKAGATA (2000) et SANKARAM & MENON (2002).

Modélisation proposée par WANG & SQUIRES (1996)

WANG & SQUIRES (1996) simulent un écoulement en canal avec un nombre de REYNOLDS $Re_\tau = 640$ à l'aide d'une SGE. Ils proposent de modéliser $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$ par :

$$u'_i(\vec{x}_p(t), t) = \sqrt{\frac{2\tilde{k}(\vec{x}_p(t), t)}{3}} \xi, \quad (4.24)$$

où ξ est un nombre aléatoire généré par une distribution gaussienne de moyenne nulle et d'écart-type 1. L'énergie cinétique turbulente de sous-maille est obtenue en résolvant l'équation de transport donnée par SCHUMANN (1991). Cette modélisation de $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$ correspond à une aléatorisation du champ grande échelle en fonction de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille. Elle ne tient pas compte des fluctuations de vitesse à l'instant précédent et ne peut pas introduire des effets de mémoire. Néanmoins, elle est moins coûteuse en temps de calcul car elle ne nécessite pas la sauvegarde de $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$ entre deux instants consécutifs.

Les auteurs constatent que l'introduction de $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$ apporte moins de 1% de changement sur la variance de la vitesse verticale des particules et ils finissent par négliger cette contribution. L'écoulement en canal qu'ils étudient est à très bas nombre de REYNOLDS ($Re_\tau = 640$) et ils réalisent une SGE avec une très forte résolution où l'énergie cinétique turbulente de sous-maille, \tilde{k} , représente moins de 10% de l'énergie cinétique turbulente résolue. Ainsi, WANG & SQUIRES (1996) font remarquer que dans les écoulements à plus grand nombre de REYNOLDS ou avec une résolution plus faible, l'influence des effets en sous-maille sur les particules solides doit être reconsidérée. En outre, le test présenté ne porte que sur les particules de lycopode ayant un temps de relaxation normalisé $\tau_p^+ = 28$. Les particules ayant des temps de relaxation plus petits sont plus susceptibles de subir les effets des fluctuations de sous-maille ¹. Enfin, WANG & SQUIRES (1996) ont analysé les effets de $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$ sur les fluctuations de la vitesse verticale au sol. Ils n'ont pas regardé l'impact de $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$ sur d'autres statistiques plus sensibles aux fluctuations en sous maille comme sur les moments d'ordre supérieur à 2 du champ de concentration ou sur le flux de masse $\overline{u'_i c'}$.

L'approche de POZORSKI et al. (2004)

Par analogie avec le modèle stochastique pour le mouvement de particules fluides dans le cadre de la décomposition de REYNOLDS, POZORSKI & MINIER (1998), supposent que $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$ est donnée

¹Dans la couche limite de FACKRELL & ROBINS (1982), les gouttelettes ayant un diamètre de $12\mu m$ ont un temps de relaxation adimensionnel moyen $\tau_p^+ = 1.1$

par une équation de LANGEVIN :

$$du'_i(\vec{x}_p(t), t) = -\frac{u'_i}{T_L^p} dt + \sqrt{\frac{2\tilde{\sigma}^2}{T_L^p}} \eta, \quad (4.25)$$

où η est un bruit blanc gaussien. $\tilde{\sigma}$ est la fluctuation de vitesse caractéristique du mouvement sous-maille de la particule fluide et T_L^p est l'échelle intégrale de la particule fluide à la position de la particule solide. $\tilde{\sigma}$ et T_L^p sont données par :

$$\tilde{\sigma} = \sqrt{\frac{2}{3}\tilde{k}} \quad \text{et} \quad T_L^p = \frac{T_L}{\sqrt{1 + \beta^2 \frac{\vec{u} - \vec{u}_p}{\tilde{\sigma}}}}. \quad (4.26)$$

Dans le cas de la décomposition de REYNOLDS classique, $\beta = 2T_L/T_E$ dans la direction perpendiculaire à la gravité et $\beta = T_L/T_E$ dans les autres directions. Pour la SGE POZORSKI et al. (2004) supposent que $T_L = T_E$ où T_L est l'échelle intégrale de sous-maille :

$$T_L = \frac{4\tilde{k}}{3C_0\tilde{\varepsilon}}. \quad (4.27)$$

Pour obtenir l'échelle intégrale de la particule fluide à la position de la particule solide, T_L est modifiée par un coefficient prenant en compte les effets de gravité. Dans notre étude, la même approche est adoptée, avec en plus une formulation inhomogène du modèle stochastique et la prise en compte des effets d'inertie dans T_L^p . L'obtention de T_L^p à partir de T_L sera expliquée dans le paragraphe suivant 4.2.3.

Dans la modélisation de POZORSKI et al. (2004), les fluctuations de vitesse de sous-maille à un instant donné sont fonctions des fluctuations de vitesse de sous-maille à l'instant précédent. Les effets de mémoire sont ainsi pris en compte. Lorsque l'échelle caractéristique des particules solides ou liquides est de l'ordre de l'échelle caractéristique des fluctuations en sous-maille, les particules ne sont pas réparties aléatoirement au sein de la maille et peuvent présenter des zones de concentration préférentielle. Dans ce cas, la prise en compte des effets de mémoire présente un avantage. Cependant, comme signalé plus haut, cette méthode peut s'avérer légèrement plus coûteuse en temps de calcul car elle nécessite la sauvegarde de $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$ entre deux pas de temps.

POZORSKI et al. (2004) comparent les résultats d'une SGE *à priori*, décrite plus haut, avec le modèle de suivi sous-maille de particules solides, aux résultats d'une simulation numérique directe. Ils constatent que le modèle de suivi sous-maille des particules "aléatorise" la distribution spatiale des particules. Ceci améliore les résultats de concentration préférentielle de particules dans le cas des grands nombres de STOKES. Lorsqu'il s'agit des petits nombres de STOKES, l'inverse de l'effet voulu est obtenu. Pour des petits nombres de STOKES l'échelle de longueur caractéristique de la distribution préférentielle des particules est plus petite que l'échelle de filtrage. Ainsi, le champ filtré est moins cohérent que le champ réel. POZORSKI et al. (2004) affirment que le modèle stochastique ne permet pas de reproduire la concentration préférentielle en sous-maille. Ceci est peut-être dû au caractère homogène de la modélisation stochastique en sous-maille adoptée par les auteurs.

Modélisation de FUKAGATA (2000)

Afin de tenir compte des fluctuations de sous-maille dans le suivi lagrangien de particules solides, FUKAGATA (2000), introduit une nouvelle force dans l'équation de mouvement de la particule. Cette

approche est développée en analogie avec la force brownienne exercée par les molécules d'air sur une particule très légère. Elle est de la forme :

$$\frac{\vec{f}^{SGS}}{m_p} = \frac{\sigma_s}{dt} \xi, \quad (4.28)$$

où σ_s représente l'augmentation de l'écart-type de la vitesse de la particule due aux fluctuations de sous-maille pendant un intervalle de temps dt . σ_s est donnée par :

$$\sigma_s^2 = \frac{u_s^2}{1 + \beta_F} \left\{ 1 - e^{-\alpha_F(1+\beta_F)} \right\} - \frac{u_s^2}{1 - \beta_F} e^{-2\alpha_F} \left\{ 1 - e^{\alpha_F(1-\beta_F)} \right\}. \quad (4.29)$$

α_F et β_F sont définis par :

$$\begin{cases} \alpha_F = \frac{dt}{\tau_p} \\ \beta_F = \frac{\tau_p}{T_L^p} \end{cases}. \quad (4.30)$$

T_L^p est l'échelle intégrale de la particule fluide à la position de la particule solide. La vitesse caractéristique des échelles de sous-maille u_s est estimée en fonction du maillage et de la dissipation de sous-maille suivant :

$$u_s = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}}{C_\varepsilon} \right)^{1/3} (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{1/9}, \quad (4.31)$$

où $C_\varepsilon = 0.96$.

Cette modélisation est équivalente à l'approche de WANG & SQUIRES (1996) et présente les mêmes avantages (simplicité d'application et mise en place) et inconvénients (aléatorisation, sans effets de mémoire).

Application de la modélisation de WANG & SQUIRES (1996) aux sprays, SANKARAM & MENON (2002)

Pour la SGE d'un spray, SANKARAM & MENON (2002) introduisent aussi les fluctuations de sous-maille dans l'équation de mouvement des gouttelettes. Ils considèrent la même formulation que WANG & SQUIRES (1996), équation (4.24) où l'énergie cinétique turbulente de sous-maille est donnée par l'équation de transport décrite dans MENON et al. (1996).

Dans ce qui suit, nous développerons le modèle stochastique utilisé dans notre étude. Deux approches différentes ont été testées. Dans la première, un ensemble de particules fluides est suivi en même temps que les particules solides. C'est à partir de la vitesse sous-maille de la particule fluide la plus proche que $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$ est obtenue. La deuxième approche est une extension du modèle proposée par POZORSKI et al. (2004). Nous l'avons développée en analogie avec le cas de la décomposition de REYNOLDS, décrit dans AGUIRRE et al. (2004).

4.2.2 Suivi lagrangien de particules fluides

En parallèle du suivi lagrangien des particules solides et des gouttelettes, le domaine d'étude est rempli de particules fluides. Ces particules fluides possèdent une vitesse donnée par l'équation (3.63).

Cette vitesse a bien une partie grande échelle et une vitesse de sous-maille. La partie sous-maille de $\vec{u}(\vec{x}_p(t), t)$, $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$ est donnée par la partie sous-maille de la vitesse de la particule fluide la plus proche de la particule solide ou de la gouttelette. Cette méthode est très coûteuse en temps de calcul. Elle demande le suivi instantané d'un grand nombre de particules fluides en plus des autres particules. Pour réduire les temps de calcul une autre méthode est implantée. Il s'agit de la résolution d'une équation stochastique de LANGEVIN de type (3.63) modifiée.

4.2.3 Modèle stochastique modifié

Les détails de cette modélisation dans le cadre de la décomposition de REYNOLDS sont décrits dans AGUIRRE et al. (2004). Ici, nous n'exposerons que les idées principales.

La partie sous-maille de $\vec{u}(\vec{x}_p(t), t)$ peut être déterminée par un modèle stochastique modifié tenant compte des effets d'inertie et de gravité. En effet, $\vec{u}(\vec{x}_p(t), t)$ ne peut pas être modélisée par l'équation (3.63) car les effets d'inertie et de gravité de la particule entraînent une décorrélation entre la particule solide et la particule fluide environnante. La dispersion de particules solides et de gouttelettes dans un écoulement turbulent, est ainsi caractérisée par deux effets : l'effet d'inertie et l'effet de croisement de trajectoire auquel est associé l'effet de continuité.

Effet d'inertie

Pour mettre en évidence l'influence de l'inertie, cet effet est mesuré en l'absence de toute force extérieure. Plus la particule est lourde et plus elle met de temps à répondre aux sollicitations du fluide. Plus la particule possède une faible inertie et plus elle répond vite aux sollicitations du fluide. Le temps de relaxation τ_p , qui caractérise l'inertie de la particule, est le temps de réponse aux sollicitations. Les particules de forte inertie propre se dispersent plus vite que les particules fluides. La variation du temps de corrélation des vitesses du fluide le long de la trajectoire de la particule T_L^p , qui traduit l'effet d'inertie, doit satisfaire les deux conditions asymptotiques :

1. $T_L^p \rightarrow T_L$ quand $\tau_p \rightarrow 0$, qui représente le cas des particules de faible inertie.
2. $T_L^p \rightarrow T_{mE}$ quand $\tau_p \rightarrow \infty$, qui représente le cas des particules de forte inertie,

où T_{mE} désigne le temps intégral eulérien dans un référentiel mobile. Le rapport entre l'échelle temporelle lagrangienne et T_{mE} est donné par le coefficient β tel que :

$$\beta = \frac{T_L}{T_{mE}} < 1 . \quad (4.32)$$

Effets de croisement de trajectoires et de continuité

Lorsque le système est soumis à l'action de forces extérieures, il en résulte une vitesse relative moyenne entre les particules discrètes et leur environnement fluide, induisant l'effet de croisement de trajectoires. Ceci résulte en l'interaction de la particule avec plusieurs structures tourbillonnaires. L'effet de continuité induit une anisotropie sur les coefficients de dispersion. Par cet effet, le coefficient de dispersion dans la direction perpendiculaire à la vitesse de chute est plus petit que celui dans la direction parallèle. CSANADY (1963) montre que pour les particules lourdes, le rapport entre ces deux coefficients de dispersion tend vers 2.

Vitesse du fluide vu par la particule solide ou la gouttelette

Par analogie avec le cas des particules fluides, la vitesse $\vec{u}(\vec{x}_p(t), t)$ est évaluée à l'aide d'une équation stochastique continue, markovienne à une particule et une échelle de temps, SAWFORD

& GUESS (1991) et POZORSKI & MINIER (1998). Récemment, SHAO (1995) et REYNOLDS & COHEN (2002) montrent qu'il existe dans cette formulation une contradiction. En effet, par construction du modèle stochastique pour les particules fluides, la fonction de structure de la vitesse lagrangienne (équation 3.41) est donnée par :

$$\begin{aligned} D_{ij}(dt) &= \left\langle (u_i(t+dt) - u_j(t))^2 \right\rangle, \\ &= \delta_{ij} C_0 \varepsilon dt. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Dans la modélisation de SAWFORD & GUESS (1991), les auteurs supposent que la fonction de structure de la vitesse lagrangienne de la particule fluide le long de la trajectoire de la particule solide

$$D_{ij}(\vec{x}_p, dt) = \left\langle (u_i(\vec{x}_p(t+dt), t+dt) - u_j(\vec{x}_p(t), t))^2 \right\rangle, \quad (4.34)$$

à la même forme que $D_{ij}(dt)$ et que la seule différence réside dans le changement d'échelle de temps caractéristique (T_L^p au lieu de T_L). Or, dans le cas des particules solides ayant une vitesse de chute importante ($v_{lim} \gg \sigma$), la fonction de structure $D_{ij}(\vec{x}_p, dt)$ tend vers une fonction de structure eulérienne, donnée par :

$$D_{\parallel}(\vec{x}_p, dt) = C_1 (\varepsilon |v_{lim}| dt)^{2/3} \quad \text{dans la direction parallèle à } \vec{v}_{lim}, \quad (4.35)$$

$$D_{\perp}(\vec{x}_p, dt) = \frac{4}{3} C_1 (\varepsilon |v_{lim}| dt)^{2/3} \quad \text{dans la direction perpendiculaire à } \vec{v}_{lim}. \quad (4.36)$$

Cette contradiction peut être résolue à condition de considérer une équation de LANGEVIN fractionnaire. Cependant, cette théorie n'est pour le moment développée que pour une turbulence homogène. La modélisation décrite dans cette partie peut être considérée comme une extension des travaux de ZHUANG et al. (1989), SAWFORD & GUESS (1991) ainsi que de REYNOLDS (2000).

L'équation stochastique (3.63) régissant le mouvement d'une particule fluide dans une SGE a été établie dans le chapitre précédent. Cette formulation comporte la partie grande échelle ainsi que la partie petite échelle en sous-maille de la vitesse des particules fluides. La seule partie de sous-maille s'écrit :

$$dv'_i = \frac{3}{2} \frac{v'_i}{\tilde{k}} \left(\frac{1}{3} \frac{d\tilde{k}}{dt} - \frac{C_0 \tilde{\varepsilon}}{2} \right) dt + \sqrt{C_0 \tilde{\varepsilon}} \eta_i(t) dt. \quad (4.37)$$

Sachant que :

$$T_L = \frac{4\tilde{k}}{3C_0 \tilde{\varepsilon}}, \quad (4.38)$$

l'équation (4.37) devient :

$$dv'_i = \left(-\frac{1}{T_L} + \frac{1}{2\tilde{k}} \frac{d\tilde{k}}{dt} \right) v'_i dt + \sqrt{\frac{4\tilde{k}}{3T_L}} \eta_i(t) dt. \quad (4.39)$$

Afin d'obtenir $u'_i(\vec{x}_p(t), t)$, T_L est remplacé par un temps de corrélation des vitesses fluides le long de la trajectoire de la particule, noté T_L^p :

$$du'_i(\vec{x}_p(t), t) = \left(-\frac{1}{T_L^p} + \frac{1}{2\tilde{k}} \frac{d\tilde{k}}{dt} \right) u'_i(\vec{x}_p(t), t) dt + \sqrt{\frac{4\tilde{k}}{3T_L^p}} \eta_i(t) dt. \quad (4.40)$$

Ce temps de corrélation, plus court que le temps lagrangien T_L doit tenir compte des effets de gravité et d'inertie.

Diverses expressions ont été proposées dans le cas d'une turbulence homogène isotrope. CSANADY (1963) proposa des expressions pour la corrélation de vitesse et pour l'échelle de temps, dans le cas limite sans inertie et grande vitesse de chute. En suivant les idées de CSANADY (1963), WANG & STOCK (1993) introduisent les effets d'inertie en considérant une échelle de temps intégrale T , fonction de l'inertie. Dans l'équation établie par CSANADY (1963), ils remplacent T_L par T . Ce temps T est estimé à partir des simulations numériques.

POZORSKI & MINIER (1998), quant à eux, développent un modèle stochastique en analysant séparément les effets d'inertie et de gravité. L'échelle de temps de corrélation qu'ils considèrent fait intervenir les temps lagrangien et eulérien du fluide ainsi que le rapport entre l'écart type de la vitesse de la particule et du fluide, $x = \sigma_p/\sigma$. Le temps de corrélation proposé tient compte, à chaque pas de temps, de la vitesse relative instantanée entre la particule solide et le fluide environnant. Ce temps n'est plus fonction des propriétés statistiques de l'écoulement. Ceci est bien cohérent avec la modélisation stochastique et avec la physique de l'interaction.

Le temps de corrélation modifié, T_L^p

Le temps de corrélation modifié se met sous la forme :

$$T_L^p = \frac{T_L}{\alpha_{grav} + \alpha_{inert}} \quad \text{avec} \quad \alpha_{grav} + \alpha_{inert} \geq 1 . \quad (4.41)$$

Le coefficient de gravité est évalué selon l'approximation de CSANADY (1963). Il s'agit d'une interpolation entre la corrélation eulérienne correspondant à une grande vitesse limite de chute et la corrélation lagrangienne pour une faible vitesse limite de chute et une inertie négligeable. Dans la direction parallèle à la gravité :

$$\alpha_{grav} = \sqrt{1 + \frac{3(\beta v_{lim})^2}{2\tilde{k}}} . \quad (4.42)$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta = \frac{T_L}{T_E} \quad \text{dans la direction de la gravité ,} \\ \beta = \frac{2T_L}{T_E} \quad \text{dans les autres directions .} \end{array} \right. \quad (4.43)$$

v_{lim} est la vitesse limite de chute donnée par :

$$\vec{v}_{lim} = \tau_p \vec{g} . \quad (4.44)$$

Afin d'évaluer le coefficient d'inertie α_{inert} , on considère le cas limite d'une grande inertie avec une vitesse limite de chute négligeable. Une structure turbulente d'échelle de longueur l sera vue par la particule avec une fréquence :

$$\nu_{part} = \frac{|\vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - (\vec{v}_p - \vec{v}_{lim})|}{\sqrt{2\tilde{k}/3}} \nu_L = \alpha_{inert} \nu_L . \quad (4.45)$$

Finalement, le temps de corrélation T_L^p de la particule fluide suivant la trajectoire de la particule solide ou de la gouttelette s'écrit :

$$T_L^p = \frac{T_L}{\sqrt{1 + \frac{3(\beta v_{lim})^2}{2\tilde{k}} + \frac{|\vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - (\vec{v}_p - \vec{v}_{lim})|}{\sqrt{2\tilde{k}/3}}}}. \quad (4.46)$$

Notons que pour les trois cas limites caractéristiques, ce temps de décorrélation tend vers les valeurs physiques attendues. Lorsque les particules solides ont une inertie et une vitesse de chute infiniment petites, T_L^p tend vers le temps de corrélation de la particule fluide. Lorsque les particules solides ont une vitesse de chute ou une inertie très grande, T_L^p tend vers le temps de corrélation eulérien du fluide. Les trois cas limites sont caractérisés par :

- $\tau_p \rightarrow 0$ et $v_{lim} \rightarrow 0$ implique $T_L^p \rightarrow T_L$.
- $\tau_p \rightarrow \infty$ implique $T_L^p \rightarrow T_E$.
- $v_{lim} \rightarrow \infty$ implique $T_L^p \rightarrow T_E$.

Ce modèle a déjà été appliqué au transport des particules solides sans la SGE. Les comparaisons avec l'expérience de SNYDER & LUMLEY (1971) et celle de TANIÈRE & OESTERLÉ (1997) sont présentées dans AGUIRRE et al. (2004). La validation pour des particules de sable en saltation et la comparaison avec l'expérience de NALPANIS et al. (1993) sont décrites dans VINKOVIC et al. (2003) et plus en détails dans VINKOVIC (2002). Dans l'annexe III, un autre modèle stochastique de sous-maille est testé. Le domaine est rempli de particules fluides et pour déterminer $u_i'(\vec{x}_p(t), t)$, on utilise la vitesse sous-maille de la particule fluide la plus proche. Cette approche est très coûteuse en temps de calcul et n'apporte pas des modifications significatives.

4.3 Influence des particules sur l'écoulement du fluide

La présence de particules solides ou liquides induit des modifications sur l'écoulement gazeux aussi bien sur la vitesse moyenne que sur la turbulence. Les actions des particules sur le fluide font apparaître des termes sources ou forces supplémentaires, dans les équations de transport décrites au premier chapitre (2.13) et (2.39). Soit \tilde{S}_{u_i} le terme source introduit dans l'équation de transport de quantité de mouvement (2.13). \tilde{S}_{u_i} caractérise les échanges de quantité de mouvement entre la phase dispersée et la phase continue. Dans l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente (2.39), on introduit le terme source \tilde{S}_k . Celui-ci représente la modulation de la turbulence par la présence des particules. En toute rigueur, des termes sources devraient être introduits dans l'équation de transport de la température et du taux de dissipation. Dans cette étude, l'écoulement est considéré isotherme et les effets de température sont négligés. L'équation de transport de la dissipation n'est pas résolue. La modélisation adoptée pour le taux de dissipation (2.41) est décrite dans le paragraphe 2.3.2 et elle ne sera pas modifiée à cause de la présence des particules dans l'écoulement.

Il existe différents mécanismes qui ne sont pas indépendants les uns des autres et qui contribuent à la modulation de la turbulence :

1. La dissipation de l'énergie cinétique turbulente par les particules.
2. L'augmentation de la viscosité apparente due à la présence des particules.
3. L'étirement des tourbillons ou présence de sillage derrière la particule.
4. L'augmentation du gradient de vitesse entre les particules.

5. La concentration préférentielle des particules due à la turbulence.

La prise en compte de tous ces phénomènes dans un code de calcul est très complexe à cause des couplages et du manque de connaissances sur la génération de la turbulence. Nous allons voir dans ce qui suit la façon dont nous avons tenu compte des effets de modulation de l'écoulement grande échelle et de dissipation de l'énergie cinétique turbulente par les particules.

4.3.1 Modulation de la turbulence par les particules

Lorsque les particules sont introduites dans un écoulement turbulent, elles sont dispersées, en particulier par les fluctuations turbulentes du fluide. L'addition de particules peut augmenter ou diminuer la turbulence du fluide, affectant ainsi le comportement de l'écoulement moyen. Dans la littérature, différents critères existent pour quantifier les interactions entre les particules et la turbulence. Nous allons rapidement examiner les travaux des principaux auteurs ayant proposé une classification de ces interactions : GORE & CROWE (1989), HESTRONI (1989) et ELGHOBASHI (1994). Nous examinerons ensuite comment nous avons tenu compte de leurs avancées.

Classification proposée par GORE & CROWE (1989)

GORE & CROWE (1989) rassemblent des résultats expérimentaux et proposent de classer l'influence des particules sur le fluide en considérant le rapport entre le diamètre des particules et une longueur caractéristique de la turbulence du fluide porteur. Pour un rapport $d_p/L < 0.1$, la turbulence est réduite, alors qu'au contraire pour un rapport $d_p/L > 0.1$, la turbulence augmente. Ce critère indique que la turbulence est atténuée en présence de particules de petits diamètres et amplifiée en présence de particules de taille assez élevée. Le rapport critique qui représente la transition entre réduction et amplification est voisin de 0.1. La classification de GORE & CROWE (1989) ne peut pas prédire l'amplitude de la modification sur le champ de vitesse moyenne ou sur le niveau de turbulence.

Analyse proposée par HESTRONI (1989)

En collectant un certain nombre de résultats expérimentaux, HESTRONI (1989) indique que la turbulence est atténuée pour un diamètre de particules de $200\mu m$ et de Re_p de l'ordre de 0.10. Pour des particules de diamètres plus élevés $d_p = 3.4mm$ et Re_p de l'ordre de 1000, la turbulence est augmentée. Par contre, les particules de diamètre $500\mu m$ et Re_p de l'ordre de 100 ont un effet mixte sur la turbulence.

Classification proposée par ELGHOBASHI (1994)

La classification proposée par ELGHOBASHI (1994) est illustrée sur la figure 4.1. Ce schéma représente un diagramme de phase en fonction du nombre de STOKES et de la fraction volumique, Φ_p , donnée par :

$$\Phi_p = \frac{N_p V_p}{V}, \quad (4.47)$$

où N_p est le nombre total de particules dans le domaine, V_p est le volume d'une particule et V est le volume du domaine. On constate que :

1. Pour $\Phi_p \leq 10^{-6}$, la fraction volumique est faible. Les particules n'ont pas d'influence sur la phase fluide, d'où la dénomination *one way coupling*.
2. Pour $10^{-6} \leq \Phi_p \leq 10^{-3}$, l'influence des particules fluides ne peut pas être négligée. Pour un nombre de STOKES (St_L) supérieur à 1, il y a production de la turbulence. Au contraire pour un

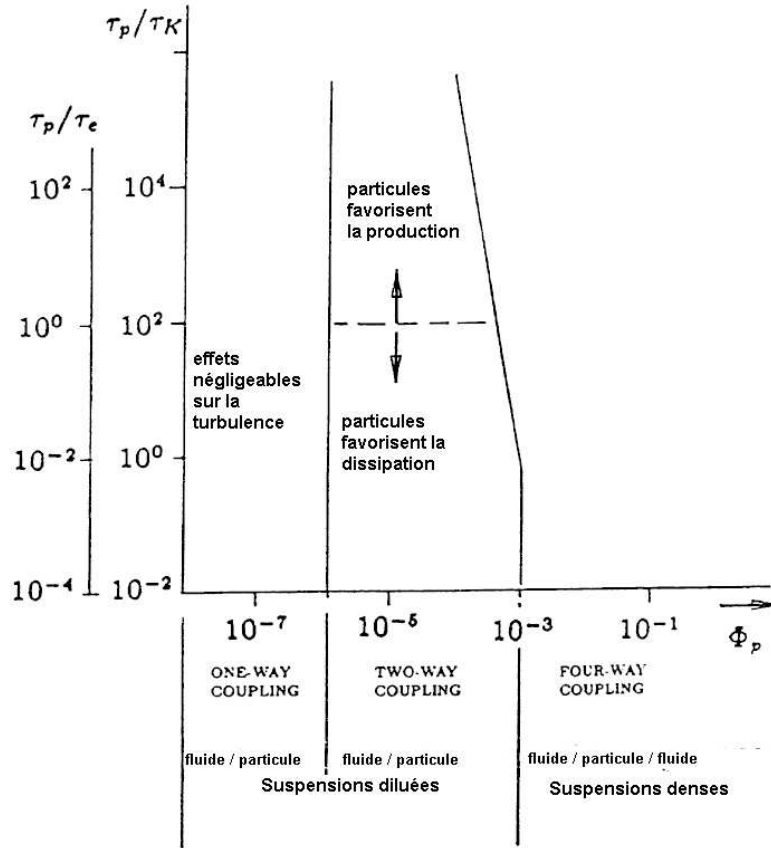


FIG. 4.1 – Classification selon ELGHOBASHI (1994) des écoulements particulaires établie pour une turbulence homogène isotrope.

nombre de STOKES inférieur à 1, il y a réduction de la turbulence. Dans cette gamme de fraction volumique, la modulation de la turbulence doit être considérée (*two way coupling*).

3. Pour $\Phi_p \geq 10^{-3}$, les interactions particules-particules doivent être également prises en compte d'où la dénomination *four way coupling*.

Dans les cas que nous allons traiter nous devons tenir compte du “*four way coupling*”.

4.3.2 Termes sources pour la vitesse moyenne

Un terme source additionnel, \tilde{S}_{u_i} , est introduit dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement de la phase fluide (2.13) pour tenir compte de la présence des particules solides ou gouttelettes. Ce terme, doit traduire les échanges de quantité de mouvement de la phase continue et de la phase dispersée au niveau des interfaces. Les forces de surface exercées par le fluide sur les particules (traînée, portance, ...) sont à l'origine des échanges de quantité de mouvement. Pour des inclusions sans changement de phase, le terme \tilde{S}_{u_i} s'exprime d'après YAMAMOTO et al. (2001) de manière classique :

$$\tilde{S}_{u_i} = -\frac{1}{\rho V_{maille}} \sum_{p=1}^{N_p} m_p \frac{u_i(\vec{x}_p(t), t) - v_{p_i}(t)}{\tau_p} f(Re_p), \quad (4.48)$$

où V_{maille} est le volume d'une maille et N_p est le nombre de particules dans la maille.

4.3.3 Termes sources traduisant la modulation de la turbulence

Afin de tenir compte de l'influence des particules sur la turbulence de la phase fluide il faut, entre autre, introduire des termes sources dans l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente du fluide. Dans la littérature on peut trouver différentes modélisations des ces termes sources. Dans ce paragraphe, nous présentons successivement la modélisation standard (BERLEMONT et al. (1990)), une modélisation plus complète (SIMONIN & SQUIRES (2001)) et une modélisation hybride (MOISSETTE (2001)) et leurs limites.

Modèle standard

La formulation standard repose sur l'hypothèse d'équilibre local qui stipule que l'énergie cinétique turbulente produite dans le sillage des particules est immédiatement dissipée. Dans l'équation de l'énergie cinétique turbulente du fluide (2.39), cette hypothèse aboutit à la formulation classique rencontrée dans la littérature, BERLEMONT et al. (1990) :

$$\tilde{S}_k = \widetilde{s'_{u_i} u'_i} . \quad (4.49)$$

Le défaut majeur de ce modèle est qu'il ne prédit qu'une atténuation de l'énergie cinétique turbulente alors que nous venons de voir, et il a été démontré expérimentalement, que les particules de grosse taille ont tendance à augmenter la turbulence. L'hypothèse selon laquelle l'énergie turbulente produite dans le sillage est immédiatement dissipée n'est donc plus valable. Cette hypothèse s'avère acceptable dans le cas de petites particules : la production due au sillage s'effectue à une échelle comparable à la taille des particules. L'énergie produite est immédiatement dissipée. Cela n'est plus vrai lorsque l'écoulement est chargé en grosses particules. Cette formulation conduit pourtant dans certains cas à de bonnes prédictions de la turbulence modifiée, TSUJI et al. (1984).

Modèle complet

Les études de CROWE et al. (1998), CROWE (2000), ou encore plus récentes, de SIMONIN & SQUIRES (2001), concernant la modélisation de \tilde{S}_k , ont mis en évidence le fait que la modélisation couramment adoptée est mal adaptée au cas des grosses particules. Les termes sources classiques ne conduisent qu'à une diminution de la turbulence. Avec ces auteurs, nous pensons en effet que la production de la turbulence par les particules est principalement due aux effets de sillage. Elle est non prise en compte dans les modèles classiques. SIMONIN & SQUIRES (2001) proposent une expression exacte pour \tilde{S}_k , établie, pour les modèles à deux fluides. D'après cette nouvelle écriture, il est possible de prédire soit une augmentation soit une atténuation de la turbulence. En effet, cette expression comporte un terme dit de "vraie modulation de turbulence" qui regroupe les mécanismes se produisant aux grandes échelles et un terme dit de "pseudo-turbulence" qui regroupe les mécanismes se produisant à des échelles comparables à la taille des particules (effet de sillage derrière la particule).

Cependant, dans cette approche, la définition du taux de dissipation reste en suspens. En effet, si la production d'énergie cinétique turbulente dans le sillage des particules n'est pas dissipée immédiatement, cela signifie que la production a lieu à une grande échelle devant la taille des structures dissipatives. Il faut donc revoir l'équation de bilan (2.39) ou proposer une estimation du taux de dissipation (CROWE (2000)).

Modèle hybride

MOISSETTE (2001) reprend le modèle complet mais il écrit en plus une équation de transport pour le taux de dissipation en faisant l'hypothèse, récemment contestée (CHAGRAS et al. (2004)), selon laquelle la production additionnelle ou la destruction de la dissipation est proportionnelle à \tilde{S}_k . Même si cette approche donne des résultats satisfaisants en comparaison avec l'expérience, BOULET & MOISSETTE (2002), les résultats varient fortement en fonction de la valeur du coefficient de proportionnalité.

Modèles récents

Malgré les nombreux travaux et les avancées qui ont été réalisés récemment, la modélisation du terme de couplage pour le taux de dissipation reste donc un problème non résolu à ce jour. SQUIRES & EATON (1994) et BOIVIN et al. (1998) montrent qu'en turbulence homogène isotrope, selon le chargement massique défini par $\Phi_p \rho_p / \rho$, le terme source de l'équation de transport du taux de dissipation peut être positif ou négatif. Le terme source de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente \tilde{S}_k , quant à lui est toujours négatif. Ce qui conduit à dire que pour une même configuration, la valeur du rapport du terme source de l'équation de transport du taux de dissipation à \tilde{S}_k peut être soit positive soit négative. Cette constatation met en évidence que la modélisation dans l'approche hybride est défailante puisque ce n'est pas possible.

Retour sur l'approche standard

Dans cette thèse, les cas étudiés sont tels que le diamètre des particules d_p , est toujours inférieur ou égal à l'échelle de KOLMOGOROV, η . La taille caractéristique de la turbulence due au sillage des particules est du même ordre de grandeur que l'échelle de dissipation. On peut considérer que la turbulence créée par les particules est donc tout de suite dissipée. L'approche standard est ainsi adoptée. Dans ce qui suit nous allons détailler l'obtention de \tilde{S}_k dans le contexte de l'approche standard et expliciter les modélisations supplémentaires nécessaires à la mise en place de ce terme dans l'équation de transport de \tilde{k} (2.39).

Lorsque le terme source \tilde{S}_{u_i} , donné par (4.48), est introduit dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (2.13), un nouveau terme apparaît dans l'équation de transport de l'énergie cinétique (2.39). En effet, pour obtenir l'équation de transport de l'énergie cinétique (2.39), on doit d'abord écrire l'équation de transport des fluctuations de vitesse en sous-maille u'_i . Celle-ci est obtenue en faisant la différence entre l'équation de conservation de la quantité de mouvement non filtrée (2.2) et filtrée (2.13). Ensuite, en multipliant l'équation de transport de u'_j par u'_i , et celle u'_i par u'_j , et en appliquant le filtrage à la somme de ces deux équations, on obtient l'équation de transport du tenseur de sous-maille, $\widehat{u'_i u'_j}$. Enfin, en prenant $i = j$, l'équation de transport de \tilde{k} est établie. Si maintenant, on rajoute le terme S_{u_i} dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (2.2), dans l'équation de transport de u'_i , apparaîtra le terme :

$$s'_{u_i} = -\frac{1}{\rho V_{maille}} \sum_{p=1}^{N_p} m_p \frac{u'_i(\vec{x}_p(t), t) - v'_{p_i}(t)}{\tau_p} f(Re_p) . \quad (4.50)$$

Lorsqu'on filtre la somme de l'équation de transport de u'_i multipliée par u'_j d'une part, et celle de u'_j

multipliée par u'_i , d'autre part, le terme source dans l'équation de transport de $\widetilde{u'_i u'_j}$, devient :

$$\widetilde{s'_{u_i} u'_j} + \widetilde{s'_{u_j} u'_i} = - \frac{1}{\rho V_{maille}} \sum_{p=1}^{N_p} m_p \frac{u'_j u'_i(\vec{x}_p(t), t) - u'_j v'_{p_i}(t)}{\tau_p} f(Re_p) \quad (4.51)$$

$$- \frac{1}{\rho V_{maille}} \sum_{p=1}^{N_p} m_p \frac{u'_i u'_j(\vec{x}_p(t), t) - u'_i v'_{p_j}(t)}{\tau_p} f(Re_p) . \quad (4.52)$$

Enfin, en prenant $i = j$, on obtient le terme source dans l'équation de transport de \tilde{k} , (2.39) :

$$\tilde{S}_k = \widetilde{s'_{u_i} u'_i} , \quad (4.53)$$

$$= - \frac{1}{\rho V_{maille}} \sum_{p=1}^{N_p} m_p \frac{u'_i u'_i(\vec{x}_p(t), t) - u'_i v'_{p_i}(t)}{\tau_p} f(Re_p) . \quad (4.54)$$

Sachant que $\Phi_p = N_p V_p / V$ est la fraction volumique des particules, le premier terme portant sur la corrélation des fluctuations de vitesse du fluide peut être modélisé par :

$$\frac{1}{\rho V_{maille}} \sum_{p=1}^{N_p} m_p \frac{u'_i u'_i(\vec{x}_p(t), t)}{\tau_p} f(Re_p) = \frac{\rho_p \Phi_p}{\rho} \frac{2\tilde{k}}{\tau_p} f(Re_p) . \quad (4.55)$$

Le deuxième terme comportant les corrélations des fluctuations de vitesse du fluide et des particules nécessite une modélisation supplémentaire. On adopte le modèle de PORAHMADI & HUMPHREY (1983) et GAVIN (1983) :

$$\widetilde{u'_i v'_{p_i}} = \frac{2\tilde{k}}{1 + \frac{\tau_p}{T_L}} . \quad (4.56)$$

Ainsi, le deuxième terme devient :

$$\frac{1}{\rho V_{maille}} \sum_{p=1}^{N_p} m_p \frac{u'_i v'_{p_i}(t)}{\tau_p} f(Re_p) = \frac{\rho_p \Phi_p}{\rho} \frac{2\tilde{k}}{\tau_p \left(1 + \frac{\tau_p}{T_L}\right)} f(Re_p) . \quad (4.57)$$

Finalement, le terme source dans l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente s'écrit :

$$\tilde{S}_k = - \frac{\rho_p \Phi_p}{\rho} \frac{2\tilde{k}}{\tau_p + T_L} f(Re_p) . \quad (4.58)$$

Dans la formulation de YAMAMOTO et al. (2001) le terme source \tilde{S}_k est négligé.

La force de traînée peut aussi s'écrire en fonction du coefficient de traînée (4.10). Dans cette expression apparaît le produit de la vitesse relative et de sa norme. Ainsi, le terme source dans l'équation filtrée de conservation de la quantité de mouvement (2.13) devient :

$$\tilde{S}_{u_i} = - \frac{\pi}{8 V_{maille}} \sum_{p=1}^{N_p} \left\{ d_p^2 m_p C_D |\vec{u}(\vec{x}_p(t), t) - \vec{v}_p(t)| (u_i(\vec{x}_p(t), t) - v_{p_i}(t)) \right\} . \quad (4.59)$$

L'écriture de ce terme dans l'équation de transport de u'_i (ce que plus haut nous avons noté s'_{u_i}) n'est plus évidente, et elle devient encore plus compliquée dès lors qu'on veut écrire \tilde{S}_k . Diverses solutions

ont été proposées dans le contexte de la modélisation de la force de traînée exercée par une canopée forestière ou urbaine. Par exemple, GETACHEW et al. (2000) font un développement limité de :

$$\overline{\left[\left(U_j + u'_j \right) \left(U_j + u'_j \right) \right]^{1/2} \left(U_i + u'_i \right)}, \quad (4.60)$$

où ils ne gardent que les termes jusqu'à l'ordre 2. Le signe “—” est ici l'opération de moyenne d'ensemble car les auteurs se placent dans le contexte de la décomposition de REYNOLDS. Toujours dans ce même contexte, LIEN et al. (2005) vont plus loin dans le développement limité et font intervenir des corrélations triples dans l'expression de $\overline{s'_{u_i} u'_j}$. Les approches citées restent tout de même assez compliquées et, à notre avis, n'apportent rien de plus dans le cas du transport de particules.

4.4 Collisions inter-particules

4.4.1 Introduction

Les collisions provoquent des changements brusques des trajectoires des particules, donc des conséquences sur leurs concentrations locales et sur leurs statistiques de vitesse. Compte tenu du couplage entre la phase particulaire et la phase fluide, les changements subis par la phase particulaire sont répercutés sur la phase fluide (profils de vitesse, agitation turbulente, ...). Il existe deux approches pour traiter les collisions entre particules. Dans la “méthode déterministe”, à chaque pas de temps et pour chaque particule, les positions et vitesses de toutes les autres particules sont interrogées afin d'obtenir le partenaire de collision. Cette méthode présente l'inconvénient d'utiliser un temps de calcul important et est limitée à un faible nombre de particules. La deuxième méthode, appelée “méthode probabiliste”, repose sur un traitement statistique des collisions par unité de volume. Cette approche, retenue pour notre étude, est particulièrement bien adaptée à la simulation numérique de configurations pratiques visant à prédire le comportement de suspensions, SOMMERFELD & ZIVKOVIC (1992). Initialement développée par SOMMERFELD & ZIVKOVIC (1992), cette approche est établie avec la génération d'un partenaire fictif de collision à partir des propriétés locales et instantanées du fluide et de la phase dispersée. La notion de contact nous semble primordiale dès lors que nous voulons réaliser des réactions chimiques. Nous avons donc adapté l'approche de SOMMERFELD & ZIVKOVIC (1992) à l'appariement de particules, afin d'introduire la notion de contact.

Dans cette partie nous donnerons les détails du modèle de collision développé par SOMMERFELD & ZIVKOVIC (1992) et nous expliquerons l'adaptation de ce modèle à l'appariement de particules. Tout d'abord, nous présenterons quelques travaux référencés à ce sujet.

4.4.2 Importance des collisions interparticulaires

TANAKA & TSUJI (1991) ont étudié, par simulation numérique, l'importance des collisions interparticulaires dans un écoulement en canal. Ils montrent que même pour des écoulements dilués (fraction volumique Φ_p de l'ordre de 10^{-4}), les collisions jouent un rôle considérable sur l'écoulement. SOMMERFELD (1995) a étudié numériquement un écoulement gaz-particules dans un canal horizontal. Son étude a conduit au même constat. Les travaux numériques réalisés par YAMAMOTO et al. (2001) dans le cas d'un écoulement gaz-solide en canal vertical descendant en utilisant les conditions expérimentales de KULICK et al. (1994), montrent que les collisions interparticulaires modifient considérablement les profils de vitesse des particules dans la direction axiale. Ils montrent également que le fait de ne pas prendre en compte les collisions conduit à une accumulation des particules en zone de proche paroi

et dans la région centrale du canal. D'autres travaux plus récents de CARMAN et al. (2003), relatifs aux écoulements gaz-particules en conduite verticale descendante ou encore de SOMMERFELD & KUSSIN (2003) pour un écoulement en canal horizontal conduisent aux mêmes observations.

CROWE (1981) propose d'estimer l'importance des collisions interparticulaires en comparant le temps de réponse de la particule, τ_p , à l'intervalle de temps moyen entre deux collisions subies par une même particule, τ_c . Deux types de régimes sont distingués :

- celui des écoulements dilués pour $\tau_p/\tau_c < 1$;
- celui des écoulements denses pour $\tau_p/\tau_c > 1$.

Ceci implique que dans un écoulement dilué, les particules ont suffisamment de temps pour répondre aux sollicitations du fluide avant une autre collision. En particulier, elles seront plus fortement affectées par la turbulence que par les collisions. Au contraire, si ce rapport est supérieur à 1 (écoulement dense), les particules n'ont pas suffisamment de temps pour répondre aux sollicitations du fluide entre deux collisions. Les collisions gouvernent alors l'agitation particulaire.

4.4.3 Occurrence des collisions

Probabilité de collision

A chaque pas de temps dt , la probabilité, $P_{coll}(dt)$, pour qu'une particule suivie entre en collision avec une autre particule est estimée par :

$$P_{coll} = 1 - e^{-f_c dt} . \quad (4.61)$$

Cette probabilité dépend du pas de temps et de la fréquence de collision $f_c = 1/\tau_c$, déterminée plus précisément ci-dessous. Elle est calculée à chaque pas de temps. Un tirage aléatoire permet de décider si la collision est effective ou non. Pour cela, un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 est généré. Si ce nombre est inférieur à la probabilité calculée, la collision est effective. Dans le cas contraire, la collision n'a pas lieu. Si la collision est effective le choc entre les deux particules est calculé pour évaluer les nouvelles caractéristiques des particules suivies.

Fréquence de collision

D'après la théorie cinétique des gaz la fréquence de collision entre une particule i et une particule j est donnée par, SOMMERFELD (2001) :

$$f_c = \frac{\pi}{4} (d_{p_i} + d_{p_j})^2 |\vec{v}_{p_i} - \vec{v}_{p_j}| n_p , \quad (4.62)$$

où n_p est le nombre de particules par unité de volume. Les principales hypothèses associées à l'équation (4.62) sont :

- la concentration de particules est assez faible pour supposer que seules les collisions binaires ont lieu,
- la concentration de particules est tout de même assez élevée pour qu'une approche statistique puisse être adoptée,
- les vitesses des particules qui rentrent en collision ne sont pas corrélées.

Lorsque il n'y a pas suivi lagrangien d'un nuage de particules, la vitesse relative et donc la fréquence de collision sont délicates à évaluer. De nombreuses formulations existent suivant les mécanismes mis en jeu dans le transport des particules (gravité, turbulence, forces électrostatiques). Lorsque le transport est fait par un écoulement turbulent, la fréquence de collision a été formulée pour deux cas limites

correspondant aux particules sans inertie (SAFFMAN & TURNER (1956)), ou aux particules avec une très grande inertie (ABRAHAMSON (1975)). Ces formulations, ainsi que d'autres études visant à introduire les effets de l'inertie, seront détaillées dans le chapitre suivant. Ici nous présentons le modèle de collision de SOMMERFELD (2001) adapté à l'appariement des particules.

4.4.4 Génération du partenaire de collision

Partenaire de collision fictif, SOMMERFELD (2001)

Dans son modèle de collision, SOMMERFELD (2001) ne suit qu'une particule à la fois. Si une collision se produit, SOMMERFELD (2001) considère que la particule suivie heurte une particule fictive dont il est nécessaire d'évaluer les caractéristiques (taille et vitesse). Ces deux paramètres sont déterminés en fonction de la densité de probabilité locale de taille et de vitesse de la phase dispersée. La densité de probabilité est réactualisée suite à une collision. Il s'agit une grandeur locale et instantanée. En adaptant le modèle de collision de SOMMERFELD (2001) à l'appariement des particules, nous avons éliminé le défaut de la génération d'un partenaire fictif.

Appariement des particules

Dans notre approche, toutes les particules sont suivies au même temps et deux par deux. Nous n'avons pas besoin de générer un partenaire de collision fictif. On réalise un appariement aléatoire des particules de la même façon que MICHELOT (1996) pour des particules fluides. Le domaine est divisé en boîtes. Dans chaque boîte les particules sont aléatoirement choisies par paires. Le nombre de particules par unité de volume n_p est calculé dans chaque boîte. Pour chaque paire on a la valeur de leur vitesse relative. On calcule ainsi la probabilité de la collision pour une paire de particules. Par tirage d'un nombre aléatoire, on décide, de la même manière que SOMMERFELD (2001), si une collision peut avoir lieu. Si c'est le cas, la vitesse de chacune des particules de la paire est modifiée.

4.4.5 Modification de la vitesse des particules due aux collisions

Les hypothèses nécessaires au traitement des collisions interparticulaires sont les suivantes :

- les collisions sont binaires.
- les particules sont parfaitement sphériques et rigides.
- le temps de collision est suffisamment court pour que l'on puisse négliger les effets hydrodynamiques pendant la durée du choc.
- le choc peut être inélastique (introduction d'un coefficient de restitution e) et avec frottement (introduction d'un coefficient de frottement statique f_0 et dynamique f_d).

L'ensemble des données avant le choc étant connues, (v_{1x}, v_{1y}, v_{1z}) et (v_{2x}, v_{2y}, v_{2z}) , les équations de conservation de quantité de mouvement permettent de calculer la vitesse des particules après le choc, $(v'_{1x}, v'_{1y}, v'_{1z})$ et $(v'_{2x}, v'_{2y}, v'_{2z})$:

$$\begin{cases} v'_{1x} = v_{1x} + \frac{J_x}{m_1} , \\ v'_{1y} = v_{1y} + \frac{J_y}{m_1} , \\ v'_{1z} = v_{1z} + \frac{J_z}{m_1} . \end{cases} \quad (4.63)$$

Si $2(v_{1y} - v_{2y}) < 7f_0(1 + e)|v_{1x} - v_{2x}|$:

$$\begin{cases} J_x = -(1 + e)(v_{1x} - v_{2x}) \frac{m_2 m_1}{m_1 + m_2} , \\ J_y = -\frac{2}{7}(v_{1y} - v_{2y}) \frac{m_2 m_1}{m_1 + m_2} , \\ J_z = 0 . \end{cases} \quad (4.64)$$

Sinon :

$$\begin{cases} J_x = -(1 + e)(v_{1x} - v_{2x}) \frac{m_2 m_1}{m_1 + m_2} , \\ J_y = -f_d |J_x| , \\ J_z = 0 , \end{cases} \quad (4.65)$$

où m_1 et m_2 sont les masses relatives aux deux particules.

Les collisions interparticulaires sont ainsi prises en compte. Cette même approche est aussi utilisée par OESTERLÉ & PETITJEAN (1993) et MOISSETTE (2001). Ce modèle de collision est utilisé seulement pour les particules solides. En ce qui concerne les gouttelettes, un modèle de coalescence ou fragmentation est développé pour les interactions interparticulaires.

4.5 Interactions au sol

La modélisation du transport de particules solides ou de gouttelettes dans une couche limite nécessite la définition des conditions à la paroi pour la phase dispersée. Suivant les phénomènes étudiés ou la nature des particules transportées, différentes conditions limites peuvent être introduites. Par ailleurs, de l'approche lagrangienne adoptée dans cette étude l'interprétation physique des conditions limites imposées est directe.

Dans cette thèse, deux cas distincts de transport de particules dans une couche limite ont été traités. Dans le premier, il s'agit de particules de sable en saltation ou en saltation modifiée, alors que le deuxième cas traite de la dispersion d'une source ponctuelle élevée d'un panache de gouttelettes. Pour chacun des cas les conditions au sol imposées aux particules changent. Deux cas sont étudiés pour la dispersion de gouttelettes. Le cas où les gouttelettes rebondissent avec une condition de symétrie et le cas où les gouttelettes restent à la paroi. Les conditions de rebond utilisées pour les particules solides sont décrites dans le paragraphe suivant.

4.6 Application à l'érosion éolienne

Avant de décrire l'application et de présenter les résultats des simulations numériques, nous allons brièvement décrire les phénomènes en jeu et les mécanismes de transport des particules de sable.

4.6.1 Mécanismes de transport et érosion éolienne

L'érosion éolienne, par définition, est l'usure d'une surface (un lit de grains de sable ou d'un autre matériau) par le vent. Le transport de sédiments par le vent est le résultat de l'interaction d'un écoulement proche d'une paroi avec un ensemble de particules solides de taille variable et arrachées à la paroi.

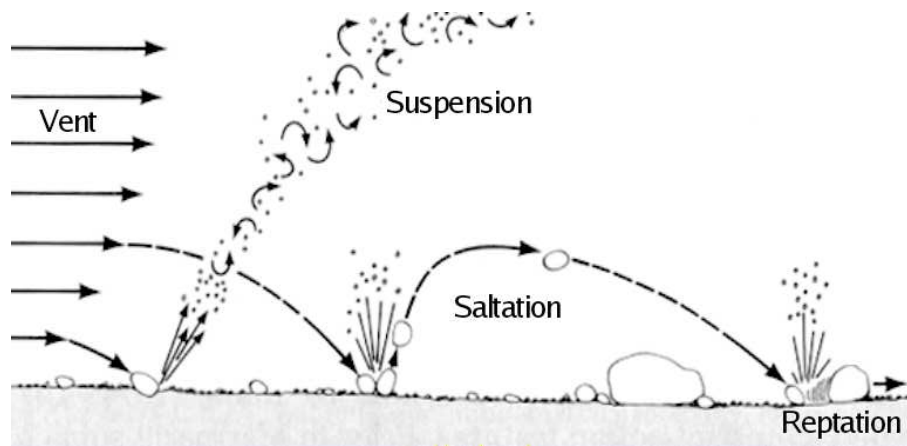


FIG. 4.2 – Différents modes de transport des particules de sable, MUTCH (1976).

Introduction

En 1941, lors de recherches concernant le déplacement des dunes dans le désert de Lybie, BAGNOLD (1941) décrit les bases des phénomènes de mise en mouvement des particules. Il fut le premier à décrire les mécanismes de l'érosion et à bâtir une théorie sur des observations effectuées au cours d'expériences réalisées en soufflerie et sur site naturel. Ses recherches ont guidé tous les auteurs qui se sont consacrés depuis à ce type d'études et elles ont servi de base à tous les modèles de transport de sédiments écrits jusqu'à présent.

CHEPIL (1945) reprend les travaux de BAGNOLD (1941) d'un point de vue géologique. Puis ZINGG (1953) réalise une étude expérimentale en soufflerie aboutissant aux résultats qui rejoignent sensiblement les précédents. Plus récemment, OWEN (1964) montre qu'il existe trois formes de déplacement d'un lit de particules selon leur diamètre (figure 4.2) :

- pour des diamètres importants, le déplacement se fait par reptation. On l'appelle "surface rampante" (*reptation ou creep*),
- pour des diamètres intermédiaires, le mouvement des particules se produit par petits bonds successifs, les particules retombant sous l'effet de leur poids. Ce mouvement est dit de "saltation",
- pour de petits diamètres, les particules se mettent en suspension car les fluctuations de la couche limite les empêchent de retomber au sol.

Le déplacement de reptation n'entre pas dans le cadre de cette étude. Il a été décrit et étudié expérimentalement par BAGNOLD (1941). BAGNOLD (1941) a également établi un modèle donnant la vitesse de frottement limite d'envol en fonction de caractéristiques des particules.

Le mouvement des particules en saltation est décrit par ANDERSON et al. (1991) dans une édition spéciale sur les derniers progrès dans le domaine. Des modèles analytiques de particules en saltation ont été développés par ANDERSON & HAFF (1991), MCEWAN & WILLETTS (1991), SORENSEN (1991) ou encore WERNER (1990). Certains de ces modèles ont servi comme base pour les simulations numériques, comme celles réalisées par ANDERSON & HAFF (1991). Les études concernant les particules en suspension sont encore peu nombreuses. On peut trouver quelques données expérimentales, concernant certaines configurations particulières, mais elles sont trop dispersées pour être utilisées comme base d'une théorie. Les modèles développés sont toujours basés sur une approche globale visant à déterminer le flux de masse total, vertical ou horizontal, SHAO & RAUPACH (1993) et (1996), SHAO & LU (1999) ou MARTICORENA & BERGAMETTI (1995) et (1997). On trouve également beaucoup d'études en tur-

bulence de grille, SNYDER & LUMLEY (1971), ces études sont difficilement applicables dans le cas du couplage entre particules solides et turbulence en proche paroi.

Saltation

On peut décomposer le mouvement par saltation en trois phases (figure 4.2) :

1. Lorsque la vitesse de l'écoulement est assez élevée, la particule s'envole en subissant une accélération verticale. Il s'agit de la phase de mise en mouvement.
2. La particule prenant de l'altitude, le gradient de vitesse local diminue ainsi que la portance correspondante. Très rapidement la force de pesanteur devient prépondérante et la vitesse verticale décroît jusqu'à s'annuler au sommet de la trajectoire.
3. Dans la dernière phase, la particule chute. Elle continue cependant d'avancer entraînée par le fluide sur une trajectoire quasi-rectiligne.
4. La particule impacte la paroi et on constate généralement l'envol d'autres particules.

De nombreux auteurs (KAFTORI et al. (1995)) ont observé que l'aspect tourbillonnaire de l'écoulement proche du lit influence l'envol des particules. L'envol d'une particule est déclenché par le gradient de vitesse de l'écoulement près de la paroi. La répartition de vitesse dissymétrique sur la surface de la particule engendre une force verticale. SAFFMAN (1965) assimile cette force à une portance. Lorsque le taux de cisaillement de la couche limite est suffisamment élevé pour produire une force de portance capable de soulever la particule, celle-ci se met en mouvement et monte sensiblement verticalement. Il existe cependant peu ou pas d'expériences donnant simultanément la vitesse fluide et celle des particules solides avec une précision suffisamment importante pour valider ces observations.

Interactions avec le sol

Au point d'impact, lorsqu'une particule retombe sur le lit, elle distribue son énergie cinétique entre la déformation du lit et parfois l'envol d'autres grains. L'écoulement qui est suffisamment intense pour faire décoller une particule de la même taille que la première, va pouvoir faire envoler une légèrement plus grosse ou un nuage de petites particules par cet apport d'énergie. Ce transfert provoque une modification de la vitesse limite d'envol des particules. Des réactions en chaîne peuvent avoir lieu lors des impacts et la structure du lit peut être modifiée. On considère que les particules en saltation sont à l'origine de l'érosion éolienne et des vents de sable, SHAO (2000). En effet, par le seul effet des forces aérodynamiques les petites poussières constituant les vents de sable ne peuvent pas être soulevées à cause des fortes forces de cohésion existant entre elles. C'est par l'impact de particules en saltation que les poussières sont mises en suspension et transportées sur des milliers des kilomètres.

En matière de modélisation des phénomènes d'impact, les approches sont souvent statistiques. WHITE & SCHULZ (1977), WILLETTS & RICE (1986), WILLETTS et al. (1991), MCEWAN et al. (1992) et MITHA et al. (1986), ont réalisé des essais en observant les trajectoires au niveau des impacts. Les résultats (tableau en annexe) portent sur la vitesse et l'angle d'impact, la vitesse et l'angle de rebond, les caractéristiques des particules mises en mouvement suite à l'impact, etc. Dans leur étude expérimentale, NALPANIS et al. (1993) enregistrent les trajectoires des particules par photographie stroboscopée. Ils obtiennent ainsi, certains des paramètres (moyenne et écart type de l'angle et de la vitesse avant et après l'impact) nécessaires dans les modèles statistiques. Malheureusement, ils ne font pas la différence entre les statistiques portant sur le rebond des particules et celle sur la mise en mouvement suite à un impact.

Par ailleurs, SHAO & LU (1999) adoptent une approche déterministe pour modéliser la mise en suspension de poussières par une grosse particule qui impacte le sol. En fonction de la vitesse d'impact, de la taille de la particule et des propriétés élastiques du sol, ils déterminent le volume du trou formé par le déplacement de la particule dans le sol. Le nombre de poussière mis en suspension est égale au nombre de petites particules contenues dans ce volume. En ce qui concerne nos simulations, il est illusoire d'avoir cette approche trop coûteuse en temps de calcul et capacité de mémoire.

Modèle statistique d'interaction avec le sol

En raison de cette complexité, nous avons choisi de modéliser les interactions avec le sol par une approche statistique. Celle-ci semble bien adaptée à une étude locale du phénomène où nous ne nous intéressons pas aux détails des interactions mais où nous cherchons à reproduire statistiquement, sur un ensemble de particules, le comportement global. Les lois statistiques utilisées ici dérivent des modèles proposés par ANDERSON & HAFF (1991) et SORENSEN (1991). Ces lois ont été adaptées aux résultats trouvés dans l'expérience considérée (NALPANIS et al. (1993)). Les détails des expériences mais aussi des différents tests réalisés sont développés dans VINKOVIC (2002). Différents modèles d'interactions avec le sol ont été testés dans le cadre du travail de VINKOVIC (2002), en particulier couplé avec la modélisation stochastique du transport de particules en saltation. Le modèle d'interactions avec le sol est ici implanté dans la SGE sans aucune modification. Voici une description rapide.

Chaque particule qui impacte le sol rebondit. La norme de la vitesse et l'angle de rebond sont donnés en fonction des conditions d'impact :

$$\begin{cases} |v_{reb}| = 0.3|v_{imp}| \pm 0.25|v_{imp}| , \\ \alpha_{reb} = 30^\circ \pm 15^\circ . \end{cases} \quad (4.66)$$

Cette approche du rebond est généralement suivie par la description du phénomène. NALPANIS et al. (1993) trouvent que la vitesse de rebond représente 50% à 60% de la vitesse d'impact. ANDERSON & HAFF (1991) et MCEWAN & WILLETTS (1991) obtiennent les mêmes résultats alors que MITHA et al. (1986) mesurent entre 16% et 20%. Ces résultats sont très divers. Nous avons lors de la validation et comparaison avec l'expérience, ajustés l'angle et le pourcentage de vitesse dans le cadre de l'ensemble de ces travaux. En ce qui concerne les angles tous les auteurs cités sont d'accord avec la valeur moyenne de 30°.

Si l'impact de la particule est suffisamment fort ($|v_{imp}| \geq |v_{cr}|$), de nouvelles particules sont mises en mouvement (figure 4.2). A nouveau leur vitesse initiale ainsi que l'angle sont déterminés par les conditions d'impact :

$$\begin{cases} |v_{ej}| = 0.3|v_{imp}| \pm 0.5|v_{ej}| , \\ \alpha_{ej} = 60^\circ . \end{cases} \quad (4.67)$$

Dans leurs expériences en soufflerie, NALPANIS et al. (1993) n'ont pu suivre les particules que jusqu'à une certaine distance du sol et ils n'ont pas pu faire la différence entre les particules qui rebondissent et celles qui sont éjectées par la particule qui impacte le sol. Dans les simulations numériques, ANDERSON & HAFF (1991) trouvent que la vitesse initiale des particules éjectées vaut 10% de la vitesse d'impact. Le rapport entre la vitesse initiale d'éjection et la vitesse d'impact est le deuxième paramètre que nous avons ajusté. Concernant l'angle de 60° les résultats des différents auteurs coïncident.

D'autre part, d'après le modèle analytique de SORENSEN (1991), le nombre de particules éjectées k suit une loi de Poisson en fonction de la vitesse verticale d'impact $v_{3,imp}$, à partir d'une vitesse verticale critique qu'il estime autour de $0.5m/s$:

$$p(k/v_{3,imp}) = \frac{(2.9v_{3,imp})^k e^{-2.9v_{3,imp}}}{k!} . \quad (4.68)$$

Ainsi, la probabilité pour qu'une particule soit mise en mouvement par l'impact d'une autre particule est

$$p_{ej} = 1 - p(0/v_{3,imp}) = 1 - e^{-2.9v_{3,imp}} . \quad (4.69)$$

Nous avons donc utilisé la modélisation suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} |v_{reb}| = 0.3|v_{imp}| \pm 0.25|v_{imp}| , \\ \alpha_{reb} = 30^\circ \pm 15^\circ , \\ |v_{ej}| = 0.3|v_{imp}| \pm 0.5|v_{ej}| , \\ \alpha_{ej} = 60^\circ , \\ p(k/v_{3,imp}) = \frac{(2.9v_{3,imp})^k e^{-2.9v_{3,imp}}}{k!} . \end{array} \right. \quad (4.70)$$

Une étude de sensibilité du modèle est présentée dans l'annexe III.

Modélisation de l'envol

Le manque de résolution spatiale de nos simulations à la paroi d'une part, et la complexité des forces agissant sur une particule dans un lit de sable, d'autre part, ne permettent pas la résolution directe et instantanée de l'envol par la SGE. De même que pour les conditions de rebond et d'éjection, dans le cas de l'entraînement aérodynamique, de nombreuses incertitudes persistent concernant la vitesse initiale et l'angle. Afin de contourner ce problème un modèle statistique est formulé pour l'envol. Les paramètres choisis dérivent des données expérimentales de NALPANIS et al. (1993) :

$$\left\{ \begin{array}{l} v_{1,init} = 4u_* \pm 2u_* \\ v_{2,init} = 0 \\ v_{3,init} = 2u_* \pm u_* . \end{array} \right. \quad (4.71)$$

Expérimentalement, WHITE & SCHULTZ (1977) trouvent que pour des particules de quartz de $350\mu m$ de diamètre, la vitesse d'envol est $0.5u_*$. Les analyses numériques de SHAO & LI (1999) montrent que si la vitesse verticale initiale $v_{3,init}$ est inférieure à u_* les particules se trouvent dans un régime de "saltation faible". Dans ce cas, la hauteur maximale atteinte par les particules est très faible. Les particules font des bonds de plus en plus petits et finissent par rester au sol. Dans le cas où $v_{3,init}$ est supérieure à u_* , SHAO & LI (1999) affirment que les particules sont dans un régime de "saltation forte", correspondant à la saltation observée expérimentalement. FOUCAUT & STANISLAS (1996) et FOUCAUT & STANISLAS (1997) ont essayé de déterminer la vitesse de frottement critique, u_{*c} , à partir de laquelle les particules sont mises en mouvement. Malheureusement, ils n'ont pas mesuré la vitesse d'envol des particules.

Suspension

Les particules susceptibles de se déplacer en suspension sont essentiellement de petites tailles. Elles s'envolent de la même façon qu'en saltation ou elles sont mises en mouvement suite à l'impact

d'autres particules plus grosses. Une fois dans l'écoulement, elles sont fortement influencées par les effets de la turbulence. Les forces de gravité sont négligeables devant les forces d'interaction avec le fluide et les particules ne sédimentent pas. Ces particules sont transportées sur des très longues distances. Par ailleurs, elles représentent un danger pour la santé de l'homme car à cause de leur petite taille (diamètre inférieur à $70\mu m$) elles ne sont pas piégées dans le nez mais peuvent descendre très loin dans les organes respiratoires. Enfin, la plupart des particules constituant les vents de sable, les aérosols atmosphériques, ou d'autres nuages de pollution (particules issues des pots d'échappement ou des cheminées industrielles) sont des particules en suspension.

Roulement et reptation

Les particules ayant un diamètre supérieur à $500\mu m$ roulent le long du lit. Elles peuvent faire des petits bonds et mettre en mouvement des particules présentes au sol après impact. WILLETTS et al. (1991) suggèrent que toutes les particules passent par une phase de roulement avant l'envol. Cependant, peu d'études du mouvement de reptation ont été réalisées. Cela est dû aux extrêmes difficultés météorologiques d'observation des phénomènes près du sol et à l'intérieur du lit fluidisé.

4.6.2 Nombres adimensionnels et classification des différents modes de transport

Les différents mécanismes de transport des particules dans un écoulement turbulent peuvent être classifiés en fonction du nombre de STOKES. Comme décrit dans la partie 4.1.3, le nombre de STOKES est le rapport du temps de relaxation de la particule à un temps caractéristique de la turbulence (St_L pour l'échelle intégrale et St_η pour l'échelle de KOLMOGOROV). Ce nombre adimensionnel caractérise principalement les effets d'inertie des particules :

- Si $St_\eta \ll 1$, les fluctuations de vitesse de la particule sont quasiment les mêmes que les fluctuations de vitesse du fluide. Les particules sont en suspension pure.
- Si $St_L \gg 1$, les particules ne subissent pas l'influence de la turbulence. Leur mouvement est principalement déterminé par la gravité et les interactions au sol. Les particules sont en saltation pure.

Entre ces deux cas de figure, lorsque τ_p est de l'ordre de T_L ou de τ_η on peut avoir des régimes intermédiaires, TANIÈRE & OESTERLÉ (1997). Dans ce cas, le mouvement des particules est influencé par les forces de gravité et d'inertie. On utilise alors le paramètre de croisement de trajectoires ou le paramètre de gravité pour séparer les différents régimes :

$$\gamma = \frac{v_{lim}}{\sigma_3}, \quad (4.72)$$

où v_{lim} est la vitesse de chute définie par (4.44) et σ_3 représente l'écart-type des fluctuations de vitesse verticale. Ainsi, TANIÈRE & OESTERLÉ (1997) distinguent deux nouveaux régimes :

- Si $\gamma < 1$, suspension modifiée.
- Si $\gamma > 1$, saltation modifiée.

Un dernier paramètre peut être utilisé :

$$\Pi_s = \frac{\tau_p}{\tau_h}, \quad (4.73)$$

où $\tau_h = 2v_0/g$ représente le temps caractéristique d'un bond.

- Si $\Pi_s \ll 1$, les particules sont en suspension.
- Si $\Pi_s \gg 1$, les particules sont en saltation.

Nous utilisons, pour notre part, le nombre de STOKES et le paramètre de gravité pour caractériser le mode de transport des particules solides et liquides.

Dans ce qui suit, nous allons détailler une validation réalisée pour la saltation et une autre pour la saltation modifiée.

4.6.3 Validation du couplage - simulation des particules en saltation et comparaison avec l'expérience de NALPANIS et al. (1993)

Le transport des particules solides combiné à la SGE et comprenant :

- la modélisation stochastique du transport de particules solides en sous-maille, équations (4.40) et (4.46),
- la modulation de l'écoulement par la présence des particules (*two-way coupling*), équations (4.48) et (4.58),
- le modèle de collision, équations (4.62), (4.63), (4.64) et (4.65),
- le modèle de rebond et d'envol de nouvelles particules, équation (4.70),

est confronté à l'expérience de NALPANIS et al. (1993). C'est une expérience où les particules sont en saltation au-dessus d'un lit de sable. Il s'agit là de valider la saltation.

Caractéristiques de l'expérience

NALPANIS et al. (1993) ont étudié le mouvement de grains de sable en saltation dans une couche limite neutre. L'épaisseur de la couche limite, la vitesse extérieure, la vitesse de frottement et la rugosité valent respectivement :

$$\begin{cases} \delta = 0.2m \\ U_e = 6.3m/s \\ u_* = 0.35m/s \\ z_0 = 1.0 \times 10^{-4}m . \end{cases} \quad (4.74)$$

Les particules de sable étudiées ont une densité de $2650kg/m^3$ et un diamètre moyen de $188\mu m$. La distribution de taille suit une loi-log d'écart type $1.18\mu m$. Des profils de concentration sont mesurés à $2m$, $4m$ et $6m$ à partir du début du lit de sable. Seuls les résultats à $6m$ sont présentés dans leur article. Les auteurs affirment qu'il n'y a pas beaucoup de différence entre les deux dernières sections. Dans nos simulations numériques, il n'y a pas de différence entre les profils sur les deux dernières section. Cependant, le profil à la section $x = 2m$ correspond à la région où la saltation n'est pas encore établie et il diffère des deux autres profils présentant une plus forte dispersion loin de la paroi.

Afin de simuler cette expérience, un maillage de $156 \times 32 \times 32$ mailles est utilisé. Comme pour la simulation de la couche limite de FACKRELL & ROBINS (1982) (chapitre 2), les mailles dans les directions x et y ont la même taille, $\Delta x = 0.04m$ et $\Delta y = 0.04m$. Dans la direction verticale, le maillage est raffiné à la paroi suivant une loi en tangente hyperbolique. La taille moyenne des mailles verticales est $\Delta z_{moy} = 0.02m$, la plus petite maille à la paroi est $\Delta z_{min} = 5mm$. Le pas de temps, dans cette simulation est $dt = 2 \cdot 10^{-4}s$. De même que pour la simulation de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) on considère qu'il y a épaissement de la couche limite suivant les lois présentées paragraphe 2.8.1.

Résultats - vitesse moyenne, énergie cinétique turbulente et fluctuations de vitesse

Les profils verticaux de la vitesse moyenne à $x = 20\delta (= 4m)$ et à $x = 30\delta (= 6m)$ sont reportés sur les figures 4.3 et 4.4, respectivement. Les adimensionnalisations sur les deux sections tiennent compte de l'épaississement de couche limite suivant les équations (2.54) et (2.55). Les moyennes sont prises sur les plans horizontaux et sur un intervalle de temps suffisamment long pour avoir des statistiques stables en temps. Les résultats de la simulation numérique sont comparés aux résultats expérimentaux de NALPANIS et al. (1993), mais aussi aux résultats normalisés des expériences de FACKRELL & ROBINS (1982). Pour les deux sections, les profils de vitesse moyenne sont en bon accord avec les résultats expérimentaux dans la zone logarithmique et dans la zone externe. La fraction volumique des particules au sol étant assez faible, $\Phi_p \sim 10^{-5}$, les particules ne modifient pas les propriétés de l'écoulement. La modulation de l'écoulement par la présence des particules est dans ce cas test négligeable. Les résultats d'une simulation avec une fraction volumique élevée ($\Phi_p = 10^{-2}$) sont présentés dans l'annexe III.

Les profils verticaux de l'énergie cinétique turbulente moyenne, et de la moyenne des trois composantes diagonales du tenseur de Reynolds à $x = 20\delta (= 4m)$ et à $x = 30\delta (= 6m)$ sont aussi reportés sur les figures 4.3 et 4.4, respectivement. Ces grandeurs n'ont pas été mesurées par NALPANIS et al. (1993) en présence des particules. Pour les caractéristiques de la couche limite, ils se réfèrent à la couche limite de COUNIHAN (1969). Comme les mesures de COUNIHAN (1969) ont été faites pour une couche limite lisse et sans particules, nous avons préféré comparer les résultats des simulations avec les profils normalisés de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982). L'énergie cinétique turbulente obtenue à partir des échelles résolues est sous-estimée de 10% à $z = 0.15\delta$, pour $x = 20\delta$, et de 34% à la même hauteur pour $x = 30\delta$. La sous-estimation augmente lorsqu'on s'approche de la paroi, pour atteindre 56% pour $x = 20\delta$ et 71% pour $x = 30\delta$, au point de mesure le plus proche du sol ($z = 0.04\delta$). En rajoutant une estimation de la contribution de sous-maille, obtenue en résolvant l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille (équation 2.39), l'énergie cinétique turbulente devient surestimée de 24% à $z = 0.16\delta$ de la première section. Pour $x = 6m$, comme il y a une décroissance générale de l'énergie cinétique turbulente, les profils simulés après correction approchent les résultats expérimentaux. Alors que la partie résolue de la composante longitudinale des fluctuations de vitesse est surévaluée, les parties résolues des deux autres composantes sont un peu sous-estimées. Ceci est probablement dû à la mauvaise résolution près de la paroi où le maillage est assez grossier. En effet, alors que dans la simulation de la couche limite de FACKRELL & ROBINS (1982) la première maille se situe à $z^+ = 37$, ici elle est à $z^+ = 117$. Le code est dimensionnel et comporte des paramètres de stabilité numérique qui sont eux aussi dimensionnels et adaptés aux échelles caractéristiques de l'atmosphère. Le fait d'imposer une première maille à $z^+ = 37$, ce qui équivaut à $z_{min} = 1mm$ pour la couche limite de NALPANIS et al. (1993), nous oblige à utiliser un pas de temps de $10^{-7}s$. Sachant qu'une itération dure 2.9s sur le calculateur du laboratoire, il aurait fallu 2460 heures de calcul pour obtenir un temps de retournement. Nous avons donc préféré perdre en résolution de la turbulence en proche paroi et augmenter la taille de la première maille.

Résultats - concentration, hauteur de saltation et caractéristiques de l'impact

Dans cette même expérience, NALPANIS et al. (1993) ont obtenu les flux de masse. Le nombre de STOKES et le paramètre de gravité pour les particules étudiées ici valent, respectivement :

$$\begin{aligned} St_L &= 0.97 \\ St_\eta &= 88.6 \\ \gamma &= 5.9 . \end{aligned} \tag{4.75}$$

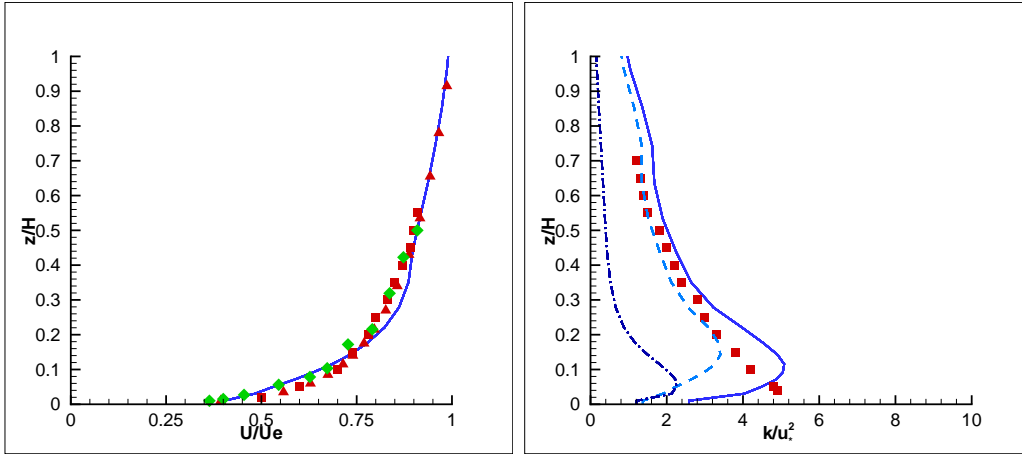
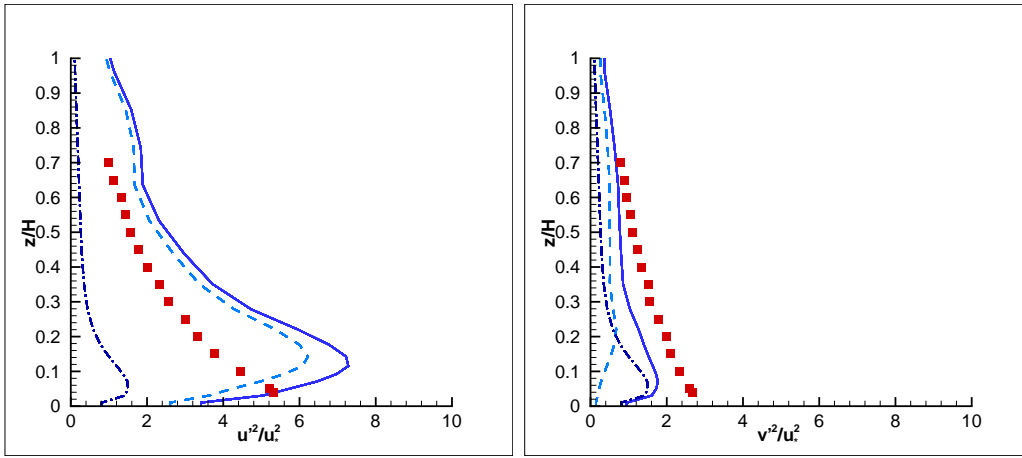
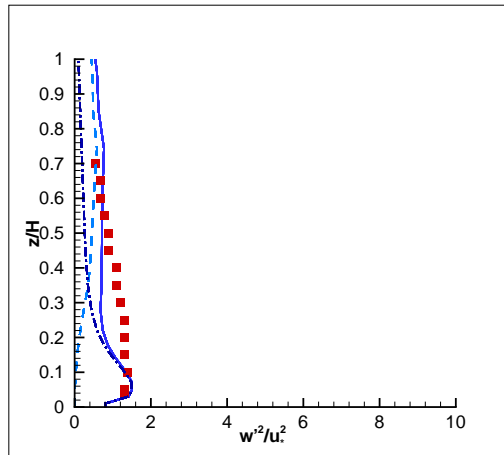
(a) \bar{U}/U_e à $x = 20\delta$ (b) k/u_*^2 à $x = 20\delta$ (c) $\overline{u'^2}/u_*^2$ à $x = 20\delta$ (d) $\overline{v'^2}/u_*^2$ à $x = 20\delta$ (e) $\overline{w'^2}/u_*^2$ à $x = 20\delta$

FIG. 4.3 – Profils verticaux de vitesse moyenne, d'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse à $x = 20\delta$. —, ARPS; ■, FACKRELL & ROBINS (1982); ▲, loi $\log u/u_* = 1/k \log(z/z_0)$; ◆, NALPANIS et al. (1993); ---, partie résolue de k et $\overline{u_i'^2}$; - · -, partie sous-maille de k et $\overline{u_i'^2}$; —, la somme de la partie résolue et de la partie sous-maille. Rappelons que NALPANIS et al. (1993) ne fournit pas la turbulence.

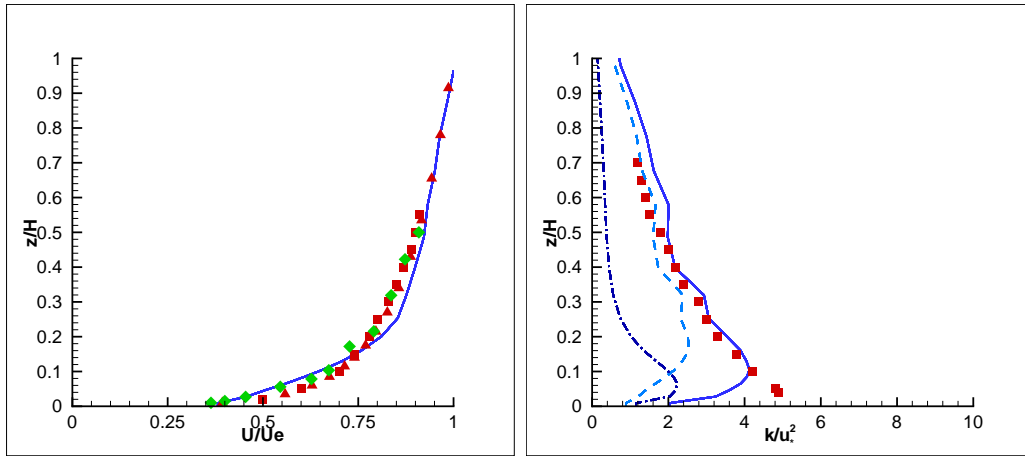
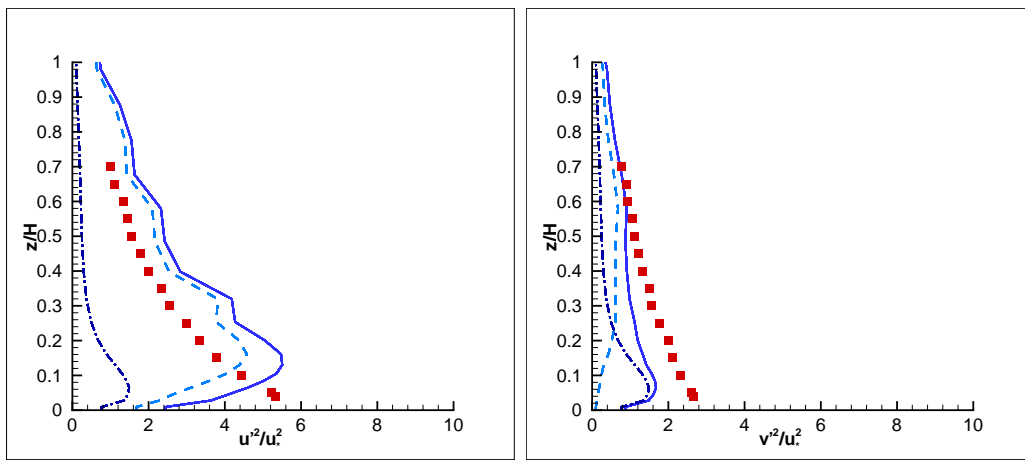
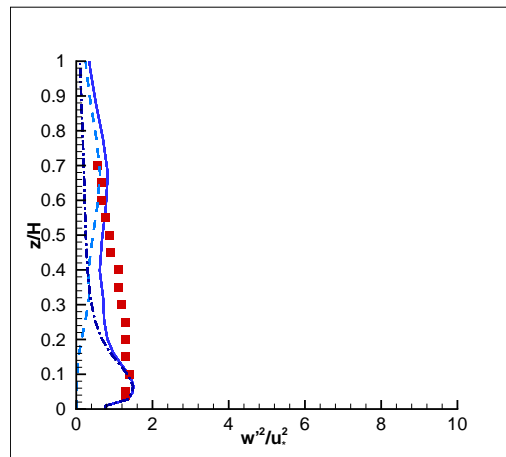
(a) \bar{U}/U_e à $x = 30\delta$ (b) k/u_*^2 à $x = 30\delta$ (c) $\overline{u'^2}/u_*^2$ à $x = 30\delta$ (d) $\overline{v'^2}/u_*^2$ à $x = 30\delta$ (e) $\overline{w'^2}/u_*^2$ à $x = 30\delta$

FIG. 4.4 – Profils verticaux de vitesse moyenne, d'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse à $x = 30\delta$. —, ARPS; ■, FACKRELL & ROBINS (1982); ▲, loi $\log u/u_* = 1/k \log(z/z_0)$; ◆, NALPANIS et al. (1993); ---, partie résolue de k et $\overline{u_i'^2}$; - · -, partie sous-maille de k et $\overline{u_i'^2}$; —, la somme de la partie résolue et de la partie sous-maille. Rappelons que NALPANIS et al. (1993) ne fournit pas la turbulence.

Les particules sont en saltation et leurs trajectoires ne sont pas influencées par la turbulence. La turbulence à la paroi n'a donc pas d'effets importants sur le transport des particules.

A l'aide des trappes à sable isocinétiques posées à la fin du lit de particules, NALPANIS et al. (1993) mesurent la concentration des particules en fonction de la distance au sol. Les profils de concentration obtenus par nos simulations, les résultats de NALPANIS et al. (1993) ainsi que ceux de ZHANG et al. (2004) sont reportés sur la figure 4.5. ZHANG et al. (2004) ont mesuré les caractéristiques des particules en saltation à l'aide de mesures par Vélocimétrie par Images de Particules (VIP). Dans nos simulations, à la fin du lit de sable, la section est divisée en boîtes et on compte le nombre de particules par boîte. Dans la simulation numérique il n'y a pas de grande différence entre le profil de concentration à $4m$ et celui à $6m$. Ceci est en accord avec les observations expérimentales de NALPANIS et al. (1993).

Les résultats de la figure 4.5(a) ont été obtenus avec 100 boîtes de comptage sur toute la hauteur de la couche limite. De même que NALPANIS et al. (1993), nous constatons qu'il n'y a pas de différence entre le profil de concentration à $4m$ et celui à $6m$. Étant donné que la taille des trappes à sable utilisées par NALPANIS et al. (1993) est de $10mm$ et que le premier point mesuré se situe à $z/\delta = 0.07$, nous avons décalé la position de la première boîte à $3mm$ du sol (figure 4.5(b)). Après décalage, les résultats numériques sont en meilleur accord avec le profil mesuré.

Une deuxième incertitude réside dans la détermination de la concentration au sol. La première mesure de NALPANIS et al. (1993) se situe à $15mm$ du sol. Par ailleurs, les auteurs affirment que la hauteur de la couche de saltation est de $20mm$. Les premières mesures sont donc très loin de la paroi. Afin de normaliser les profils de concentration, les auteurs proposent de faire une extrapolation du profil jusqu'au sol. Sur les figures 4.5(a), 4.5(b) et 4.5(d) nous avons estimé la concentration au sol par extrapolation basée sur les quatre points les plus proches au sol. On obtient un concentration au sol de $0.27kg/m^2$. NALPANIS et al. (1993) font une extrapolation basée sur les sept points expérimentaux et trouvent $0.59kg/m^2$. Le profil de concentration correspondant à une concentration au sol de $0.59kg/m^2$, comparé à nos simulations est reporté sur la figure 4.5(c). En changeant l'estimation de la concentration au sol, le profil se décale et les résultats numériques sont en meilleur accord avec les résultats expérimentaux.

La dernière incertitude expérimentale est liée à l'estimation de la hauteur de couche limite. Le profil de concentration de NALPANIS et al. (1993) est donné en fonction d'une hauteur en millimètre. La hauteur de couche limite est estimée sans les particules en saltation autour de $20cm$. Lorsqu'on normalise les résultats de NALPANIS et al. (1993) par $\delta = 28cm$ et les résultats de ZHANG et al. (2004) par $\delta = 43cm$, on obtient les profils de la figure 4.5(d). ZHANG et al. (2004) n'ont pas mesuré la hauteur de couche limite, ils estiment qu'elle est autour de $0.12m$.

L'évolution temporelle de la moyenne de la hauteur des bonds (hauteur de saltation) est représentée sur la figure 4.6. NALPANIS et al. (1993) mesurent la hauteur de saltation et la normalisent par l'énergie cinétique verticale par unité de masse de la particule après impact. En supposant que la vitesse verticale après impact est proche de u_* , ils trouvent que $\langle h \rangle / (u_*^2 g)$ est entre 1.4 et 1.6. De son côté OWEN (1964), trouve que $\langle h \rangle \sim 0.8u_*^2/g$. Dans nos simulations, la hauteur de saltation diminue lorsque le temps augmente car il a de plus en plus de particules faisant de petits bonds très près du sol qui sont prises en compte dans la moyenne.

L'évolution en temps de la vitesse d'impact des particules est représentée sur la figure 4.7. NALPANIS

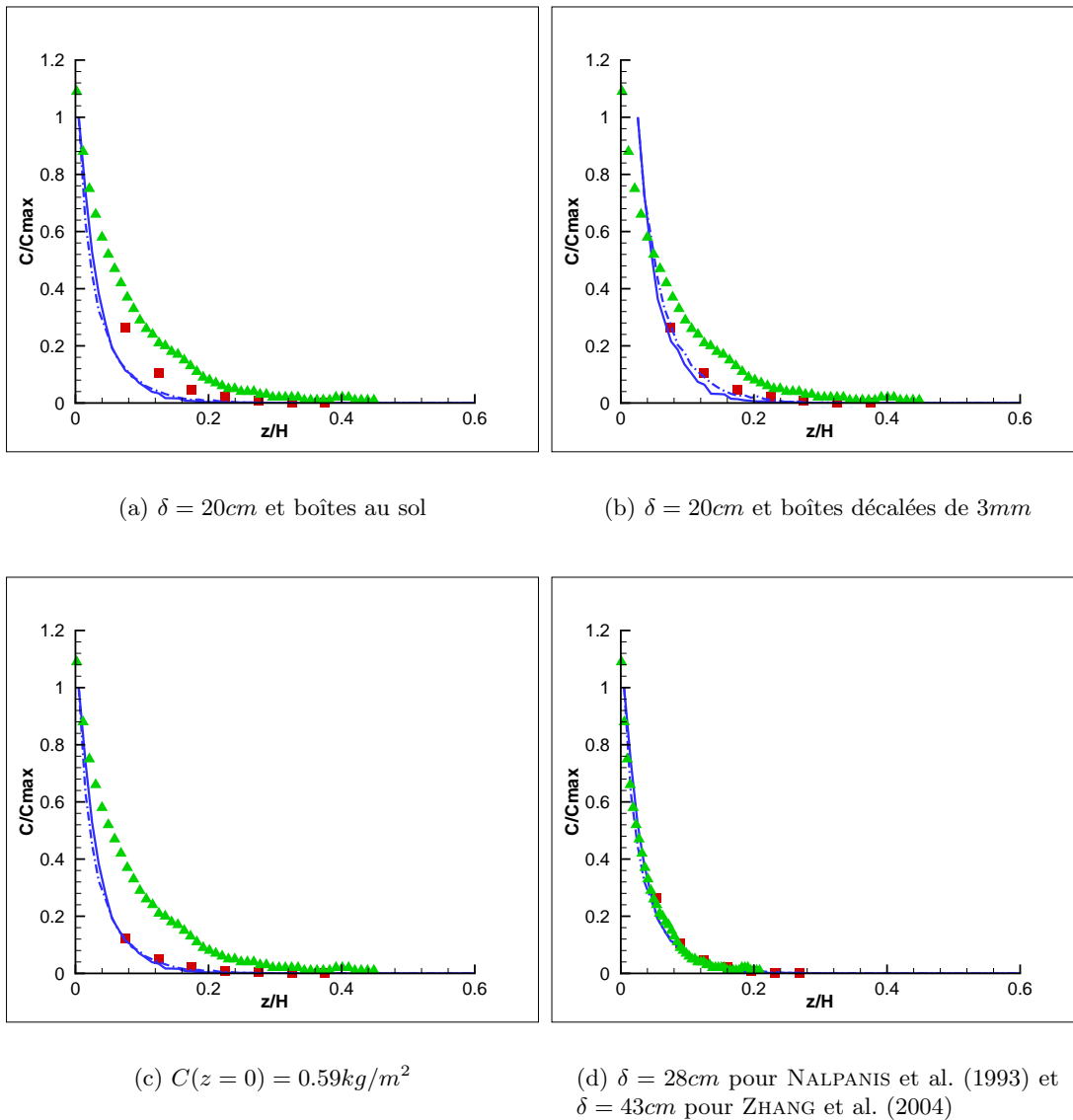


FIG. 4.5 – Profils verticaux de concentration des particules solides à $x = 20\delta$ et à $x = 30\delta$. —, ARPS à $x = 30\delta$; — · —, ARPS à $x = 20\delta$; ■, expérience de NALPANIS et al. (1993) à $x = 30\delta$; ▲, expérience de ZHANG et al. (2004) à $x = 30\delta$.

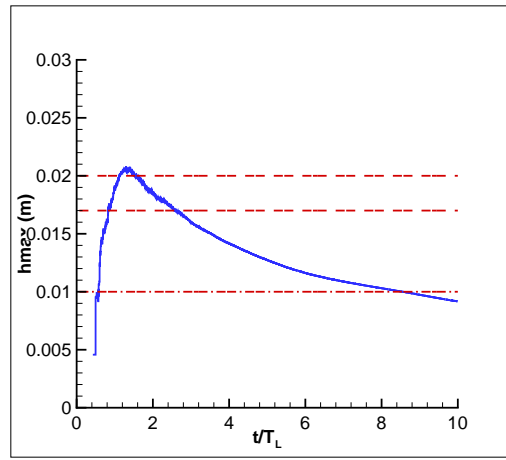


FIG. 4.6 – Évolution de la hauteur de saltation. —, ARPS; - - -, NALPANIS et al. (1993); — · —, OWEN (1964).

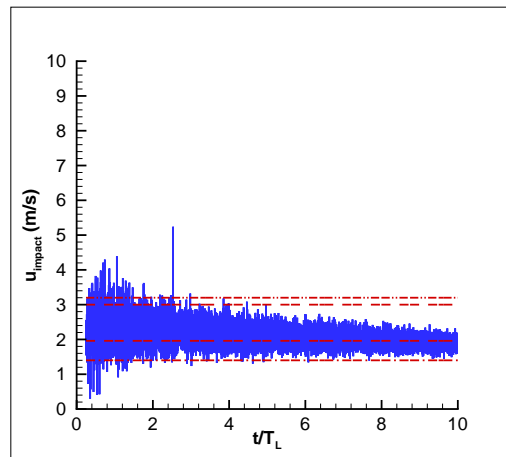


FIG. 4.7 – Évolution de la vitesse d'impact. —, ARPS; - - -, NALPANIS et al. (1993); — · —, WHITE & SCHULZ (1977); — · · —, WILLETTS & RICE (1985).

et al. (1993) trouvent que la vitesse d'impact est 1.6 à 2 fois supérieure à la vitesse après impact parce que pendant la chute, la traînée augmente la norme de la vitesse des particules. Ils trouvent, par ailleurs, que la vitesse après impact est comprise entre $3.5u_*$ et $4.4u_*$. Les résultats de nos simulations sont en bon accord avec les résultats de NALPANIS et al. (1993). Par ailleurs, WILLETTS & RICE (1985) ont photographié le mouvement des grains de sable près de la paroi. Ils trouvent que la vitesse d'impact est de l'ordre de $9u_*$. A partir des photographies des particules de verre, WHITE & SCHULZ (1977) obtiennent $4u_*$ pour la vitesse d'impact des particules en saltation. A part pour les expériences de WILLETTS & RICE (1985) qui trouvent une vitesse d'impact assez élevée, nos simulations reproduisent bien les observations de NALPANIS et al. (1993) et de WHITE & SCHULZ (1977).

L'angle d'impact des particules par rapport au sol mesuré par NALPANIS et al. (1993) et celui obtenu par nos simulations sont montrés sur la figure 4.8. NALPANIS et al. (1993) trouvent un angle compris entre 11° et 14° , alors que dans nos simulations l'angle est plutôt de l'ordre de 3° à 4° . Ceci est probablement dû au fait que dans le calcul de l'angle moyen à chaque pas de temps on prend en

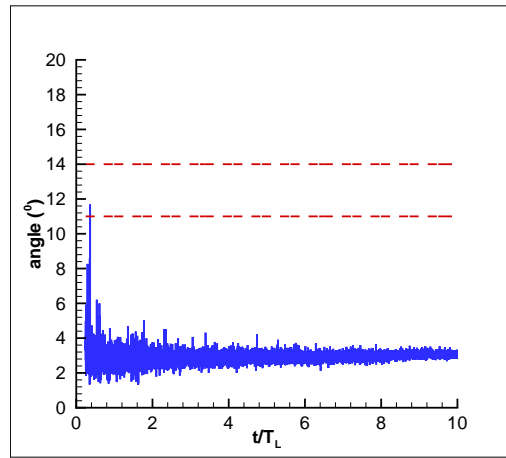


FIG. 4.8 – Évolution de l’angle d’impact. —, ARPS ; - - -, NALPANIS et al. (1993).

compte toutes les particules, même celles qui font des petits bonds et qui dans la réalité font plutôt partie du lit fluidisé et ne peuvent être pris en compte métrologiquement par NALPANIS et al. (1993).

Bien que les résultats des simulations numériques soient globalement en bon accord avec l’expérience de NALPANIS et al. (1993), de nombreuses incertitudes persistent. En particulier, les grandeurs de normalisation (concentration au sol et hauteur de couche limite) sont inconnues et peuvent varier suivant la méthode de mesure et d’estimation adoptée. Par ailleurs, l’expérience de NALPANIS et al. (1993) ne traite que des particules en saltation ne subissant pas les effets de la turbulence. Dans ce qui suit, nous confrontons les résultats de nos simulations à l’expérience de TANIÈRE et al. (1997) qui porte sur la dispersion de particules en saltation modifiée et en suspension.

4.6.4 Simulation des particules en saltation modifiée, comparaison avec l’expérience de TANIÈRE et al. (1997)

TANIÈRE et al. (1997) étudient la dispersion de grains de sable puis de particules de PVC dans une couche limite. Les particules sont introduites dans le domaine en un point par un injecteur de particules et il n’y a pas de lit de particules sur la paroi inférieure de la couche limite contrairement à NALPANIS et al. (1993) et à ZHANG et al. (2004). Dans cette simulation, nous n’allons pas traiter l’impact et l’envol de nouvelles particules. On suppose que les particules qui impactent la paroi rebondissent en respectant les conditions de symétrie parce que les particules étudiées sont en saltation modifiée. Elles subissent les fluctuations turbulentes. La résolution de la turbulence de couche limite est importante et ne peut pas être négligée. La simulation numérique se fera donc en similitude pour avoir une meilleure précision spatiale car l’expérience de TANIÈRE et al. (1997) impose une épaisseur de couche limite de 7cm .

Caractéristiques de l’expérience

Dans l’expérience, l’épaisseur de la couche limite, la vitesse extérieure et la vitesse de frottement valent respectivement :

$$\begin{cases} \delta = 0.07\text{m} \\ U_e = 10.6\text{m/s} \\ u_* = 0.39\text{m/s} . \end{cases} \quad (4.76)$$

TAB. 4.2 – Caractéristiques des particules étudiées.

	Sable	PVC
Diamètre moyen	$d_p = 60\mu m$	$d_p = 130\mu m$
Écart type	$18\mu m$	$46.2\mu m$
Densité	$\rho_p = 2500kg/m^3$	$\rho_p = 1430kg/m^3$
St_L	0.41	0.87
St_η	27.9	58.5
γ	0.64	1.33

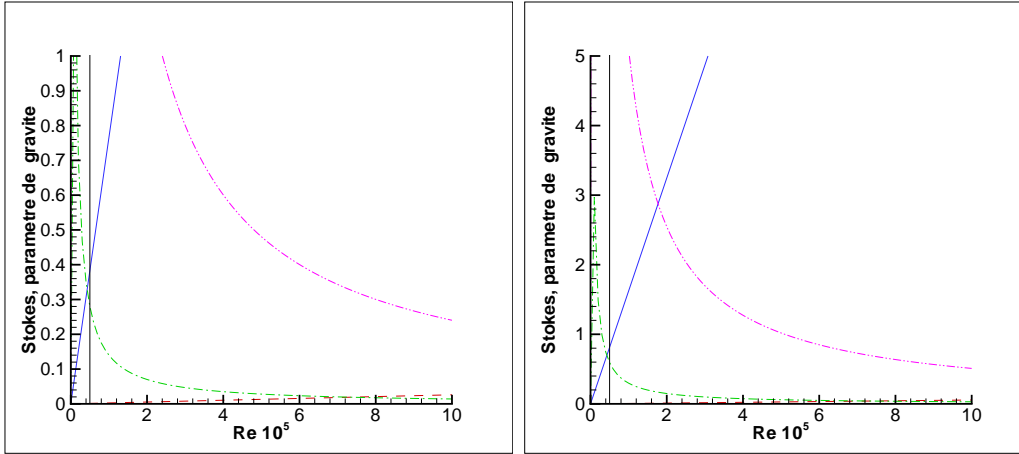


FIG. 4.9 – Nombres caractéristiques du système pour les deux hauteurs de couche limite ($\delta = 0.07$ et $\delta = 1.2m$) et pour les deux sortes de particules, sables (gauche) et PVC (droite). —, St_L pour $\delta = 0.07m$; - - -, St_L pour $\delta = 1.2m$; — · —, γ pour $\delta = 0.07m$; — · · —, γ pour $\delta = 1.2m$; le trait vertical représente le régime de l'expérience

Deux sortes de particules sont étudiées, les particules de sable et les particules de PVC. Les caractéristiques des deux sortes de particules sont représentées sur le tableau 4.2. Dans les deux cas, les particules ont un nombre de STOKES, St_L plus petit que 1. Il est important de bien résoudre la turbulence dans ce cas. Or la couche limite a une hauteur de $7cm$. Afin d'avoir au moins 10 mailles dans la couche limite, il faudrait des mailles de $\Delta z = 7mm$. Cela entraînerait un pas de temps de $10^{-7}s$. Nous allons donc, simuler cette expérience en similitude en augmentant la hauteur de couche limite à $1.2m$ (hauteur de la couche limite dans l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982)).

Les trois nombres caractéristiques du système sont le nombre de REYNOLDS, le nombre de STOKES et le paramètre de gravité. La figure 4.9 illustre les évolutions des deux derniers en fonction du nombre de REYNOLDS pour les deux hauteurs de couche limite ($\delta = 0.07$ et $\delta = 1.2m$ correspondant à l'expérience et à la simulation respectivement) et pour les deux types de particules. On constate que si on veut respecter la similitude sur les particules on ne peut pas conserver le nombre de REYNOLDS. Par ailleurs, les valeurs exactes du nombre de STOKES et du paramètre de gravité ne peuvent pas être respectées. On cherchera à conserver le même régime. Ainsi, si on choisit $1.2m$ comme hauteur de couche limite, avec une vitesse extérieure de $10.6m/s$, le nombre de REYNOLDS équivalent sera

8.5×10^5 . Dans ce cas, les deux nombres caractéristiques relatifs aux particules valent, pour le sable :

$$\begin{aligned} St_L &= 0.02 \\ \gamma &= 0.03 . \end{aligned} \tag{4.77}$$

et pour le PVC :

$$\begin{aligned} St_L &= 0.04 \\ \gamma &= 0.6 . \end{aligned} \tag{4.78}$$

Même si les trois nombres ne sont pas conservés, les régimes ne changent pas et on doit retrouver le même résultat en similitude.

Des profils de concentration et de vitesse des particules sont mesurés à $x = 27\delta$ de la source.

Afin de simuler cette expérience, un maillage de $330 \times 32 \times 32$ mailles est utilisé. La taille des mailles et l'étirement suivant la verticale sont identiques à la simulation de FACKRELL & ROBINS (1982) (paragraphe 2.8.1). La vitesse extérieure étant $10.6m/s$, le pas de temps dans cette simulation est $dt = 1.10^{-4}s$. De même que pour la simulation de l'expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) on considère qu'il y a épaissement de la couche limite suivant les lois présentées au paragraphe 2.8.1.

Résultats - vitesse moyenne, énergie cinétique turbulente et fluctuations de vitesse

Les profils verticaux de la vitesse moyenne, de l'énergie cinétique turbulente et des trois composantes des fluctuations à $x = 27\delta = 1.89m$ sont reportés sur la figure 4.10. L'adimensionnalisation tient compte de l'épaississement de couche limite suivant les équations (2.54) et (2.55). Les moyennes sont prises sur les plans horizontaux et sur un intervalle de temps suffisamment long ($10T_L$) pour avoir des statistiques stables en temps. Les résultats des simulations sont comparés aux résultats expérimentaux de TANIÈRE et al. (1997) mais aussi à ceux de FACKRELL & ROBINS (1982). Les profils de vitesse moyenne sont en moins bon accord avec les résultats expérimentaux que dans le cas de la couche limite de FACKRELL & ROBINS (1982) (paragraphe 2.8.1). Ici, la station de mesure se situe à 27δ alors que dans le cas de FACKRELL & ROBINS (1982) elle était à 6δ . L'épaississement de couche limite est conséquent. Les résultats sont malgré tout nettement meilleurs par rapport à la simulation de la couche limite de NALPANIS et al. (1993) où l'erreur commise était de 30% à 40% sur $\overline{u'^2}/u_*^2$ (figure 4.3(c)), alors que ici elle ne dépasse pas 30% (figure 4.10(c)).

L'énergie cinétique turbulente obtenue à partir des échelles résolues est légèrement sous-estimée (figure 4.10(b)). En rajoutant la contribution de sous-maille, obtenue en résolvant l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille (équation 2.39), on retrouve les profils expérimentaux. Il en est de même pour les trois composantes des fluctuations de vitesse, $\overline{u'^2}$, $\overline{v'^2}$ et $\overline{w'^2}$ (figures 4.10(c), 4.10(d) et 4.10(e)). Dans l'expérience de TANIÈRE et al. (1997), loin de la paroi ainsi qu'au sol, la composante longitudinale des fluctuations de vitesse est surévaluée par rapport aux résultats de FACKRELL & ROBINS (1982) alors qu'a priori elle devrait être du même ordre. Dans leur expérience, les mesures sans particules sont réalisées à l'aide d'un fil chaud.

La fraction volumique des particules étant inférieure à 10^{-4} , même à la paroi, on constate que les profils de vitesse ne sont pas modifiés en présence des particules.

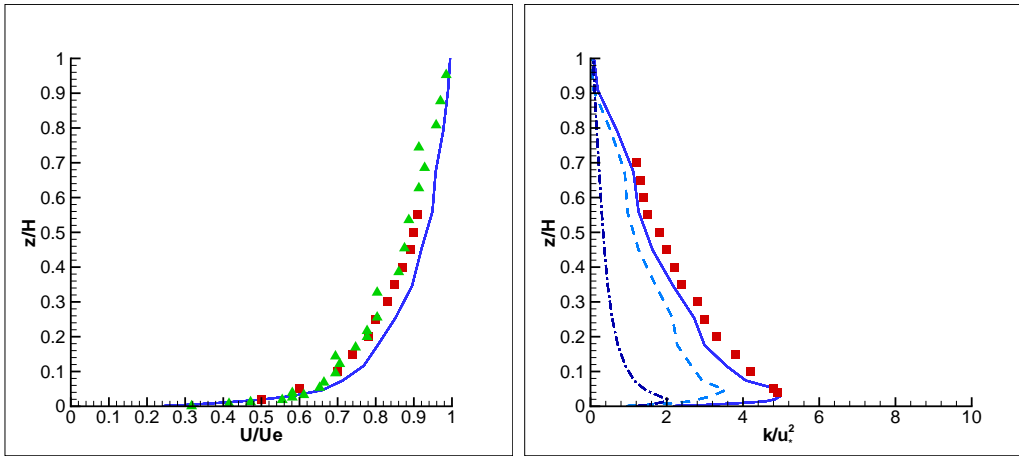
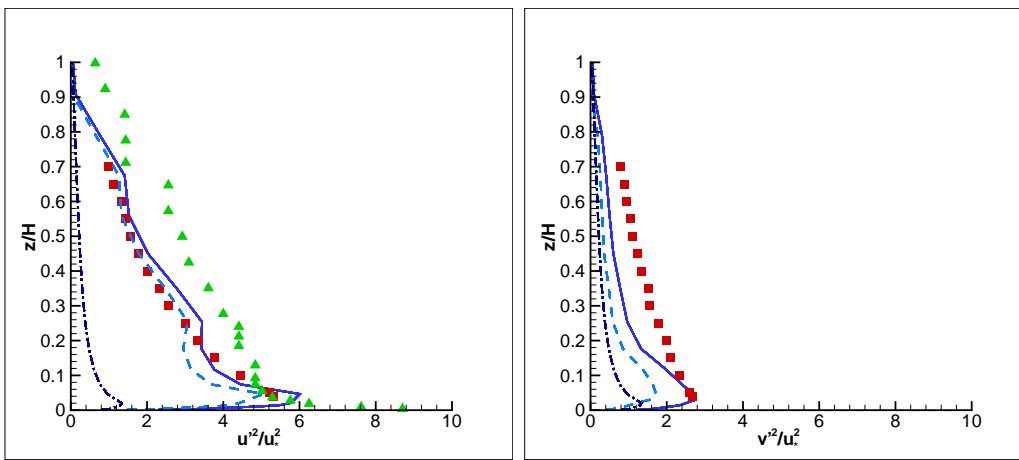
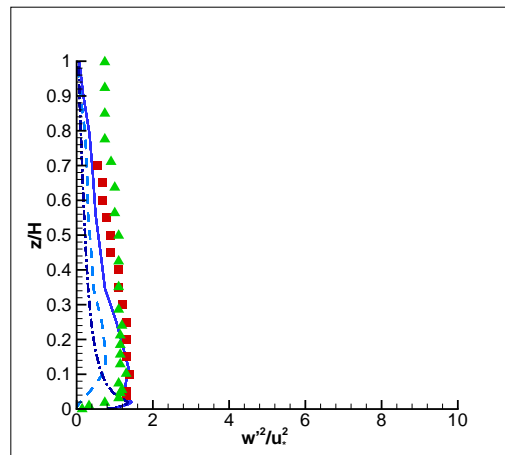
(a) \bar{U}/U_e à $x = 27\delta$ (b) k/u_*^2 à $x = 27\delta$ (c) $\overline{u'^2}/u_*^2$ à $x = 27\delta$ (d) $\overline{v'^2}/u_*^2$ (e) $\overline{w'^2}/u_*^2$ à $x = 27\delta$

FIG. 4.10 – Profils verticaux de vitesse moyenne, d'énergie cinétique turbulente et des fluctuations de vitesse à $x = 27\delta$. —, ARPS; ■, FACKRELL & ROBINS (1982); ▲, TANIÈRE et al. (1997); ---, partie résolue de k et $\overline{u_i'^2}$; - · -, partie sous-maille de k et $\overline{u_i'^2}$; —, la somme de la partie résolue et de la partie sous-maille.

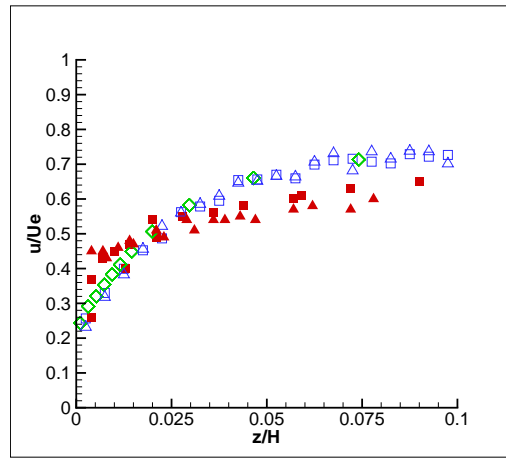


FIG. 4.11 – Profil vertical de vitesse moyenne des particules. \square , ARPS particules de sable; \triangle , ARPS particules de PVC; \diamond , ARPS fluide; \blacksquare , TANIÈRE et al. (1997) sable; \blacktriangle , TANIÈRE et al. (1997) PVC.

Résultats - concentration et vitesse de la phase solide

La vitesse moyenne des particules à différentes distances de la source est calculée une fois le régime stationnaire atteint. Les résultats comparés au profil expérimental de TANIÈRE et al. (1997) sont illustrés sur la figure 4.11. Les profils de vitesse moyenne des particules et du fluide sont très proches. Par rapport aux résultats expérimentaux, la vitesse moyenne des particules dans nos simulations semble être légèrement surestimée. TANIÈRE et al. (1997), trouvent que près de la paroi la vitesse moyenne des particules est inférieure à la vitesse moyenne du fluide. Très près de la paroi, pour $z/\delta < 0.008$ ils observent que la vitesse moyenne des particules devient supérieure à la vitesse moyenne du fluide. Ceci est dû au rebond des particules.

Les profils verticaux des fluctuations de vitesse longitudinale et verticale sont représentés sur la figure 4.12. Les résultats des simulations sont assez proches des profils expérimentaux. A partir de $z/\delta > 0.3$ il n'y a plus assez de particules dans la simulation et les fluctuations obtenues par la simulation sont bruitées. Il en faudrait 5 ou 10 fois plus de particules en temps. Les fluctuations de vitesse des particules prennent en compte les effets d'inertie et de gravité. Ainsi, près de la paroi où les effets de gravité deviennent prépondérants, les fluctuations de vitesse des particules solides dépassent les fluctuations de vitesse du fluide. Ceci a été constaté par TANIÈRE et al. (1997) et KAFTORI et al. (1995).

L'évolution de la concentration avec la distance au sol est représentée sur la figure 4.13. La concentration diminue lorsqu'on s'éloigne du sol et le profil présente une décroissance exponentielle. Des profils de concentration similaires ont été trouvés par KAFTORI et al. (1995), pour des particules solides dans un canal d'eau. Il s'agit de profils caractéristiques des particules en saltation modifiée. Lorsque les particules sont en suspension, elles sont distribuées de manière plus homogène dans l'écoulement et les profils de concentration présentent un pic, relatif à la paroi, moins prononcé.

L'expérience de TANIÈRE et al. (1997) relative à la dispersion des particules de sable et de PVC en couche limite, a été simulée en similitude. Les différents régimes définis par les trois nombres adimensionnels caractéristiques du système (nombre de REYNOLDS, nombre de STOKES et paramètre de gravité) ont été respectés pour bâtir la similitude. Les profils de vitesse moyenne, des fluctuations

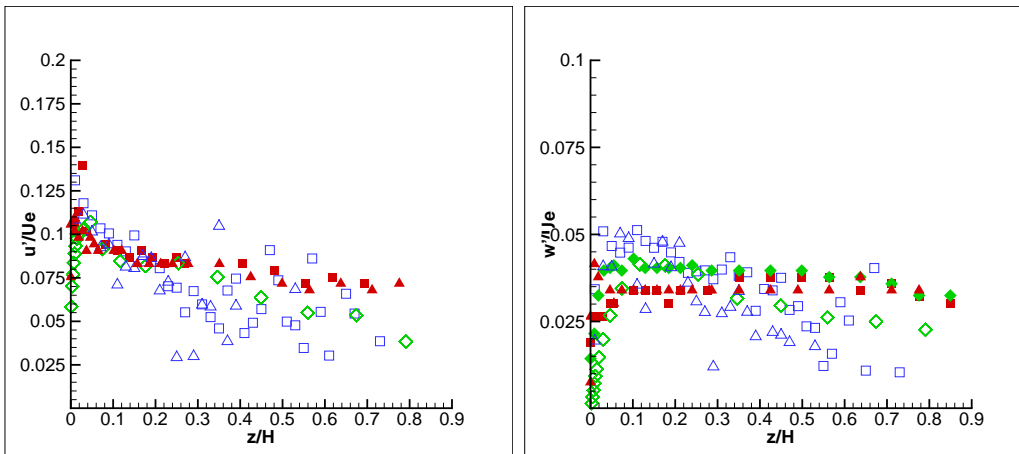


FIG. 4.12 – Profil vertical de fluctuation de vitesse des particules. \square , ARPS particules de sable; \triangle , ARPS particules de PVC; \diamond , ARPS fluide; \blacksquare , TANIÈRE et al. (1997) sable; \blacktriangle , TANIÈRE et al. (1997) PVC; \blacklozenge , TANIÈRE et al. (1997) fluide.

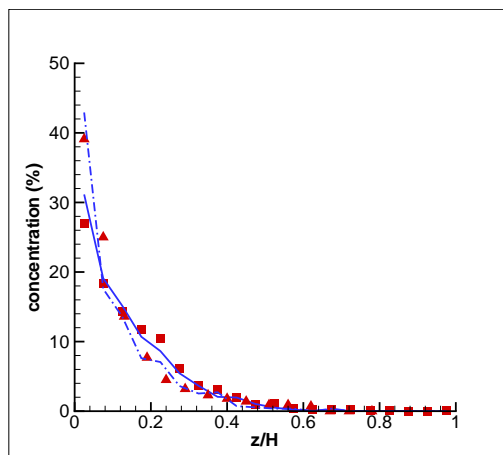


FIG. 4.13 – Profil vertical de concentration des particules. —, ARPS particules de sable; - · -, ARPS particules de PVC; \blacksquare , TANIÈRE et al. (1997) sable; \blacktriangle , TANIÈRE et al. (1997) PVC.

de vitesse et de concentration des particules sont en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit l'équation régissant le mouvement d'une particule dans un écoulement turbulent. Cette équation prend une forme simplifiée dans le cas où la masse volumique des particules est très grande devant la masse volumique du fluide porteur, ce qui est le cas dans cette étude. Nous avons vu que pour résoudre cette équation de mouvement, il est nécessaire de connaître les vitesses instantanées du fluide environnant en chaque point de la trajectoire de la particule, d'où la nécessité d'utiliser une modélisation des fluctuations de vitesse petite échelle du fluide en sous-maille, à la position de la particule. Un modèle stochastique analogue à celui utilisé pour les particules fluides porteuses de scalaire est développé.

L'influence des particules sur l'écoulement moyen est abordée par l'approche standard. Des termes sources sont introduits dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique turbulente (YAMAMOTO et al. (2001) et FUKAGATA (2000)). Les collisions entre particules sont prises en compte par un modèle d'appariement de particules similaire au modèle de SOMMERFELD (2001). Un modèle statistique d'interaction avec la paroi est développé.

L'ensemble est appliqué à l'étude du mouvement des particules de sable en saltation et suspension. Les simulations numériques sont confrontées à deux expériences. Celle de NALPANIS et al. (1993) est relative aux particules en saltation alors que celle de TANIÈRE et al. (1997) concerne les grains de sable et les particules de PVC en saltation modifiée. Les résultats des simulations sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. De nombreuses incertitudes expérimentales existent, cependant. En particulier, les grandeurs de normalisation des profils de concentration moyenne (concentration au sol et hauteur de couche limite) peuvent varier suivant la méthode de mesure ou d'estimation. Par ailleurs, la mesure des grandeurs caractéristiques des interactions avec le sol (vitesse de rebond, vitesse d'éjection et angle d'impact) peut être fortement perturbée par la présence d'un très grand nombre de particules constituant le lit fluidisé. Le couplage de la SGE avec :

- le transport de particules, équation (4.22),
- la modélisation stochastique du transport de particules solides en sous-maille, équations (4.40) et (4.46),
- la modulation de l'écoulement par la présence des particules, équations (4.48) et (4.58),
- le modèle de collision, équations (4.62), (4.63), (4.64) et (4.65),
- le modèle de rebond et envol de nouvelles particules, équation (4.70),

est ainsi validé. Dans le chapitre suivant nous étendrons l'approche aux gouttelettes. Nous ajouterons donc à cet ensemble un modèle original de coalescence/fragmentation que nous détaillerons avant de montrer une validation.

Chapitre 5

Modèle de coalescence/fragmentation

Introduction

Les propriétés physiques des nuages, des brouillards mais aussi des panaches industriels sont étroitement liées aux interactions entre gouttelettes. La coalescence et la fragmentation jouent un rôle prépondérant dans la détermination de la distribution de taille des aérosols. L'apparition locale de grandes gouttes peut entraîner le dépôt des polluants contenus dans ces gouttes. De même, suite à la fragmentation, des très petites gouttelettes sont créées, pouvant être transportées par la turbulence atmosphérique loin de la source de pollution.

Nous avons vu dans le chapitre précédent le transport de particules à l'aide d'une SGE. Le transport des gouttelettes en diffère parce qu'il contient lors de la collision inter-particule un problème éventuel de fragmentation ou de coalescence.

Afin d'introduire la coalescence et la fragmentation dans la SGE décrite dans les chapitres précédents, nous proposons ici un modèle probabiliste de coalescence et de fragmentation inspiré du modèle stochastique de fragmentation de APTE et al. (2003). Par définition de la SGE, les phénomènes ayant lieu à l'intérieur de la maille sont intégrés sur le volume représenté par la maille. On considère que la coalescence/fragmentation est un processus discret et aléatoire où les événements à deux instants successifs sont décorrélés. Dans ces conditions, l'évolution de la distribution de taille des gouttelettes satisfait une équation de FOKKER-PLANCK. A chaque pas de temps, la distribution de taille des gouttelettes au sein de la maille est donnée par la solution de cette équation de FOKKER-PLANCK. Les paramètres du modèle sont calculés de manière locale et instantanée en fonction de la dynamique des gouttelettes. Au sein de chaque maille la conservation de la masse est appliquée.

Avant de procéder au couplage avec la SGE, le modèle est développé pour une turbulence homogène isotrope et confronté aux résultats de HO & SOMMERFELD (2002) pour le seul cas de la coalescence, à ceux de APTE et al. (2003) pour la fragmentation et à ceux de LASHERAS et al. (1998) pour un cas mixte. Une fois la validation terminée, le modèle est introduit dans la SGE et l'ensemble est appliqué à la dispersion d'un panache de gouttelettes. Les résultats sont comparés aux profils expérimentaux relatifs à un scalaire passif. Il est en effet, difficile d'obtenir des données complètes relatives au transport atmosphérique de gouttelettes. Cependant, nous amènerons des éléments de discussion dans le cas de panaches d'aéroréfrigérants.

5.1 Revue des modèles de coalescence

Dans ce paragraphe nous présenterons un aperçu de différents modèles de coalescence que l'on trouve dans la littérature. De nombreuses approches existent. On peut distinguer deux grands groupes :

- l'approche déterministe, où l'issue de chaque rencontre est obtenue à l'aide d'une description déterministe des processus entrant en jeu pour une collision ;
- l'approche globale visant à déterminer un taux global de coalescence dans un volume élémentaire et par unité de temps. Cette approche permet ensuite d'introduire une vision probabiliste des processus entrant en jeu pour une collision.

5.1.1 Modélisation de la coalescence par une approche déterministe, HO & SOMMERFELD (2002)

HO & SOMMERFELD (2002) adoptent une approche stochastique pour la modélisation de la coalescence des gouttelettes. Cette modélisation est une extension de l'approche développée pour la collision et décrite dans le chapitre précédent au paragraphe 4.4.

Le principe du modèle de coalescence est le même que celui du modèle de collision. A chaque pas de temps un partenaire de coalescence fictive est généré. Les propriétés (vitesse et diamètre) du partenaire fictif sont estimées en fonction des vitesses et diamètres des particules environnantes. Les propriétés du partenaire fictif sont alors générées de façon aléatoire, en suivant une distribution de moyenne et d'écart type donnés par la moyenne et l'écart type des caractéristiques environnantes.

Une fois le partenaire de coalescence généré, l'occurrence de la coalescence est déterminée à partir de la fréquence de collision basée sur la théorie cinétique des gaz :

$$P_{coll} = \frac{\pi}{4} (d_{p,1} + d_{p,2})^2 |\vec{u}_{p,1} - \vec{u}_{p,2}| n_p \Delta t , \quad (5.1)$$

$\vec{u}_{rel} = |\vec{u}_{p,1} - \vec{u}_{p,2}|$ est la vitesse relative instantanée entre la gouttelette et le partenaire fictif et n_p est le nombre de particules par unité de volume. Cette probabilité est obtenue en considérant un cylindre de collision où l'axe du cylindre est aligné avec la direction de la vitesse relative et le diamètre du cylindre est $d_{p,1} + d_{p,2}$. Un premier tirage d'un nombre aléatoire compris entre 0 et 1, est réalisé. Si le nombre aléatoire généré est inférieur à P_{coll} la coalescence peut avoir lieu.

Lorsque deux gouttelettes se rencontrent la trajectoire de la plus petite peut être déviée par la présence de la grosse (figure 5.1). L'efficacité de la collision, η_p , est donc fonction du paramètre d'inertie, ψ_i :

$$\psi_i = \frac{\rho_p |\vec{u}_{p,1} - \vec{u}_{p,2}| d_{p1}^2}{18\mu d_{p2}} , \quad (5.2)$$

où d_{p2} est le diamètre de la grande particule. L'efficacité de collision s'écrit :

$$\eta_p = \left(\frac{\psi_i}{\psi_i + a} \right)^b , \quad (5.3)$$

a et b étant des paramètres qui dépendent du nombre de REYNOLDS. D'après LOFFLER (1988) $a = 0.65$ et $b = 3.7$. L'efficacité de collision peut aussi être exprimée comme le rapport de deux surfaces :

$$\eta_p = \left(\frac{2y_c}{d_{p1}} \right)^2 , \quad (5.4)$$

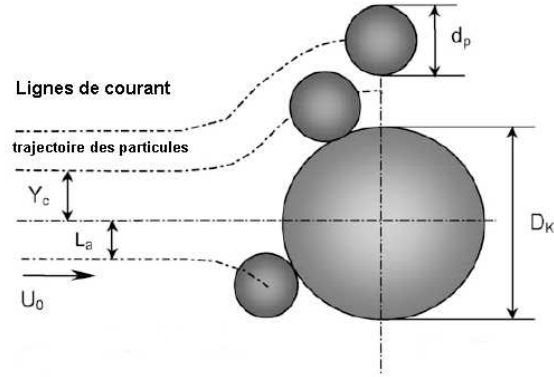


FIG. 5.1 – Efficacité de collision dans le modèle de HO & SOMMERFELD (2002). Image prise de HO & SOMMERFELD (2002).

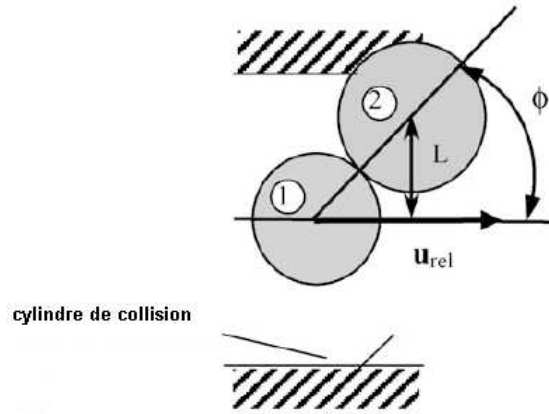


FIG. 5.2 – Configuration de collision interparticulaire dans le modèle de HO & SOMMERFELD (2002). Image prise de HO & SOMMERFELD (2002).

où y_c est la distance radiale de la plus petite goutte à l'axe du mouvement relatif des deux gouttes en collision au moment de l'impact. Connaissant les caractéristiques de la gouttelette et de son partenaire de coalescence fictive, on peut calculer ψ_i et η_p à partir de (5.2) et (5.3). y_c est ensuite obtenue avec la relation (5.4). Le point d'impact pour deux particules qui rentrent en collision est donné par un tirage aléatoire (figure 5.2) :

$$\begin{cases} xx = rand \\ zz = rand \\ L_a = \sqrt{xx^2 + zz^2} . \end{cases} \quad (5.5)$$

Si $L_a < y_c$ la coalescence peut avoir lieu. Autrement, les particules rebondissent. Le tirage aléatoire de L_a revient à faire un tirage aléatoire de l'angle d'impact des deux gouttelettes, Φ . Suivant si le choc est frontal ou tangentiel la probabilité de coalescence n'est la même. Ceci est en accord avec les observations expérimentales décrites au paragraphe 5.3 de ce chapitre.

La dernière condition pour la coalescence porte sur la vitesse relative entre les deux particules. La coalescence aura lieu seulement si la composante normale de la vitesse normale entre les deux

gouttelettes est inférieure à la vitesse critique, donnée par :

$$v_{cr} = \frac{1}{d_p} \frac{\sqrt{1-e^2}}{e^2} \frac{A}{\pi z_{ct}^2 \sqrt{6P_{pl}\rho_p}}, \quad (5.6)$$

où e est le coefficient de restitution d'énergie, A est la constante de HAMAKER, P_{pl} la pression limite de contact et z_{ct} la distance de contact. Cette expression de la vitesse critique est obtenue en considérant que seules les forces de VAN DER WAALS agissent entre les gouttelettes. Si la coalescence n'a pas lieu on considère qu'il y a simple collision entre les gouttelettes et les mêmes lois de collision que dans le paragraphe 4.4 s'appliquent.

Si la coalescence a lieu, le diamètre de la particule résultante est obtenu par conservation de la masse entre la gouttelette et le partenaire fictif. La vitesse de la nouvelle gouttelette, $\vec{u}'_{p,1}$, est donnée par :

$$\vec{u}'_{p,1} = \vec{u}_{p,1} \frac{m_{p,1}}{m_{p,1} + m_{p,2}}, \quad (5.7)$$

dans le système de coordonnées relatif à la plus grande gouttelette.

Même si cette approche est basée sur une génération stochastique de l'angle de contact, nous la qualifierons de déterministe car la détermination des propriétés de la gouttelette issue de la coalescence est entièrement donnée par les deux gouttelettes qui la constituent.

5.1.2 Modélisation déterministe de la coalescence au coeur d'un jet, LASHERAS et al. (1998)

Il s'agit ici d'une approche déterministe de la coalescence. Lorsque deux particules rentrent en contact il existe un film d'air entre les surfaces des deux gouttelettes. Si le temps de contact entre les deux gouttelettes est suffisant la couche d'air pourra s'écouler et les particules rentreront en coalescence. LASHERAS et al. (1998) considèrent que le temps caractéristique de l'écoulement de la couche d'air est donné par :

$$\bar{T}_{air} \approx \frac{\mu}{\rho_p} \varepsilon^{-2/3} d_p^{-2/3}, \quad (5.8)$$

et le temps caractéristique de la collision est donné par :

$$\bar{t}_{coll} \approx \varepsilon^{-1/3} d_p^{2/3}. \quad (5.9)$$

L'efficacité de coalescence est exprimée en fonction du rapport de ces deux temps caractéristiques :

$$\Pi \approx e^{-\bar{T}_{air}/\bar{t}_{coll}}. \quad (5.10)$$

Lorsque le temps de collision \bar{t}_{coll} est petit devant le temps de drainage \bar{T}_{air} , la coalescence ne peut pas avoir lieu. Inversement, lorsque le temps de contact est suffisant, la coalescence a lieu. Ainsi, LASHERAS et al. (1998) définissent un diamètre limite critique d_{max} , donné quand $\bar{t}_{coll} = \bar{T}_{air}$, par :

$$d_{max} \approx \frac{\mu}{\rho_p} \varepsilon^{-1/4}. \quad (5.11)$$

D'après ce raisonnement :

- Si $d_p < d_{max}$, il n'y a pas de coalescence.
- Si $d_p > d_{max}$, la coalescence a lieu.

L'efficacité de coalescence, Π , définie par LASHERAS et al. (1998), s'applique une fois que la rencontre a eu lieu. Afin d'obtenir un modèle plus global il faut au préalable définir une fréquence de rencontre. Ainsi, d'après LASHERAS et al. (1998) l'évolution en temps de la distribution de taille des gouttelettes due à la coalescence peut être calculée comme le produit entre la fréquence de collision et l'efficacité de coalescence, Π .

5.1.3 Modélisation de la coalescence par une approche globale

L'évolution en temps de la distribution de taille des gouttelettes est donnée par l'équation intégrodifférentielle, SEINFELD (1986) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} &= \frac{1}{2} \int_{v_0}^{v-v_0} K(v-\tilde{v}, \tilde{v}) n(v-\tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \\ &- \int_{v_0}^{\infty} K(\tilde{v}, v) n(v, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} , \end{aligned} \quad (5.12)$$

où v est le volume d'une particule, $n(v, t)dv$ est le nombre de particules par unité de volume ayant un volume compris entre v et $v + dv$ et $K(v, \tilde{v})$ est le taux de collision entre les particules de volume v et celles de volume \tilde{v} . Suivant le mécanisme moteur du mouvement des gouttelettes (mouvement brownien, cisaillement, turbulence, gravité, forces de VAN DER WAALS, forces électrostatiques, ...), le coefficient de collision, $K(v, \tilde{v})$, s'exprime différemment. Le problème réside dans la détermination de ce coefficient et dans la prise en compte correcte des paramètres prépondérants dans sa formulation.

Forme discrète de l'équation de coalescence

L'évolution en temps de la distribution de taille des particules qui rentrent en coalescence (équation 5.12) a d'abord été écrite sous sa forme discrète à partir d'un bilan de population par SMOLUCHOWSKI (1917) :

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i-1}^{j=1} K_{i-j, j} n_{i-j} n_j - n_i \sum_{\infty}^{j=1} K_{ij} n_j . \quad (5.13)$$

où n_i est le nombre de particules de classe i par unité de volume. La classe 1 correspond aux particules initialement présentes dans le nuage de particules et qui n'ont pas subi de coalescence. La classe i correspond aux particules formées à partir de i particules de la classe 1.

Le premier terme à droite traduit l'augmentation du nombre de particules de la classe i par coalescence de particules des classes inférieures alors que le deuxième terme traduit la diminution du nombre de particules de la classe i par coalescence de ces particules avec les particules de toutes les autres classes. K_{ij} est le taux de collision entre les particules de la classe i et celles de la classe j . Ce coefficient dépend du mécanisme de transport des particules. De nombreuses formulations de K_{ij} existent pour différents mécanismes de transports :

- mouvement brownien, FUCHS (1964)
- cisaillement, SMOLUCHOWSKI (1917)
- turbulence, SAFFMAN & TURNER (1956)
- gravité, SEINFELD (1986)
- forces de VAN DER WAALS, HIRSCHFELDER et al. (1954) et HAMAKER (1937)
- forces électrostatiques, SEINFELD (1986)
- ...

Les expressions de K_{ij} dans les différents cas sont décrites dans SEINFELD (1986). Ici, nous ne détaillerons que le cas où le mécanisme de transport des gouttelettes est la turbulence.

Taux de collision de particules sans inertie dans un écoulement turbulent, SAFFMAN & TURNER (1956)

En étudiant les effets de la turbulence sur la coalescence des gouttes dans les nuages, SAFFMAN & TURNER (1956) ont été les premiers à proposer une expression du taux de collision, K_{ij} , dans un écoulement turbulent. En supposant que le gradient de vitesse, responsable du mouvement des gouttelettes dans une turbulence, s'écrit :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \left(\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{1/2}, \quad (5.14)$$

SAFFMAN & TURNER (1956) proposent la formulation suivante pour le coefficient de collision :

$$K_{ij} = \sqrt{\frac{\pi}{120}} \frac{\varepsilon}{\nu} (d_{p,i} + d_{p,j})^3, \quad (5.15)$$

L'approche de SAFFMAN & TURNER (1956) revient à supposer que les gouttelettes n'ont pas d'inertie et qu'elles sont transportées comme un scalaire passif. La forme proposée par SAFFMAN & TURNER (1956) est souvent citée comme le cas limite de "zéro inertie".

Taux de coalescence de particules fortement inertielles dans un écoulement turbulent, ABRAHAMSON (1975)

Dans l'autre cas limite où les particules sont supposées avoir une inertie infinie, ABRAHAMSON (1975) propose :

$$K_{ij} = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \left(\frac{E_i + E_j}{2}\right) (d_{p,i} + d_{p,j})^2, \quad (5.16)$$

où E_i est l'énergie cinétique moyenne d'une particule de classe i . Cette formulation dérive de la théorie des chocs moléculaires (ABRAHAMSON (1975)).

Taux de collision de particules avec inertie, READE & COLLINS (2000)

Pour étudier le taux de coagulation des particules avec une inertie finie, SUNDARAM & COLLINS (1997) introduisent dans la formulation du taux de collision, la distribution radiale de particules g_{ij} , et la densité de probabilité de la vitesse relative conditionnée par la distance entre deux gouttes $p_{ij}(r/w_{ij})$:

$$K_{ij} = \pi (d_{p,i} + d_{p,j})^2 g_{ij}(d_{p,i} + d_{p,j}) \int_{-\infty}^0 -w_{ij} p_{ij} \left(\frac{d_{p,i} + d_{p,j}}{w_{ij}}\right) dw_{ij}. \quad (5.17)$$

D'après les simulations numériques directes SQUIRES & EATON (1991) et WANG & MAXEY (1993), les auteurs estiment que la concentration préférentielle des particules dans un écoulement turbulent est principalement due à leur inertie. READE & COLLINS (2000) introduisent alors la distribution radiale de particules g_{ij} , dans l'expression de K_{ij} . A partir des résultats des simulations numériques directes SUNDARAM & COLLINS (1997) et READE & COLLINS (2000) proposent des formulations analytiques de g_{ij} et $p_{ij}(r/w_{ij})$.

Taux de collision de particules avec inertie, ZHOU et al. (1998)

D'une autre façon, en exprimant la vitesse relative à la surface de la particule en fonction des propriétés du fluide environnant, ZHOU et al. (1998) proposent une autre forme pour le taux de collision dans le cas d'une distribution monodisperse de particules avec inertie intermédiaire :

$$\begin{aligned} \langle K_i \rangle &= \frac{\pi}{4} d_{p,i}^3 \left\langle \left| \frac{\partial u_1}{\partial x_1} - \tau_p \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial u_1}{\partial t} + \vec{u} \nabla u_1 \right) \right| \left[1 + \tau_p \tau_f \left(S_{ij} S_{ij} - \frac{\omega^2}{2} \right) \right]^2 \right\rangle \\ &+ \frac{\pi d_{p,i}^3}{12} \tau_p \left\langle d_{p,i} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(S_{ij} S_{ij} - \frac{\omega^2}{2} \right) \left[1 + \tau_p \tau_f \left(S_{ij} S_{ij} - \frac{\omega^2}{2} \right) \right]^2 \right\rangle . \end{aligned} \quad (5.18)$$

Dans le premier terme à droite, la partie sous le signe de valeur absolue représente la vitesse relative. La deuxième partie entre crochets permet de tenir compte de la concentration préférentielle de particules avec inertie dans un écoulement turbulent. τ_f est un temps caractéristique de l'histoire des particules, S_{ij} le tenseur de déformations du champ de vitesse et $\vec{\omega} = \nabla \times \vec{u}$ la vortacité. Tous les termes de l'équation (5.18) ne peuvent être résolus qu'en simulation numérique directe.

Taux de collision de particules avec inertie, ZAICHIK et al. (2003)

De même que les auteurs cités dans les deux paragraphes précédents, ZAICHIK et al. (2003) prennent en compte l'inertie des particules en introduisant la distribution radiale des particules dans l'écoulement turbulent, $g_{ii}(r)$:

$$K = \frac{\pi d_p^2}{2} \langle |w_{ii}(r)| \rangle g_{ii}(r) , \quad (5.19)$$

où $\langle |w_{ii}(r)| \rangle$ est la moyenne de la valeur absolue de la vitesse relative radiale entre les particules, r est le rayon des particules et K_{ij} est noté K ici parce que le modèle est établi pour une distribution monodisperse. ZAICHIK et al. (2003) développent deux approches pour la détermination de K . La première conduit à un modèle dit analytique de K et l'autre conduit à un modèle dit différentiel. Dans le modèle analytique, K est donné par :

$$K = 4\pi^{1/2} r^2 u' \sqrt{f_u [1 - f_u (1 - f_u f(r))]} , \quad (5.20)$$

où r est le rayon des particules, f_u le coefficient de réponse de la particule aux fluctuations de vitesse du fluide, u' , et $f(r)$ est la fonction de l'autocorrélation de vitesse du fluide. Pour établir cette expression de K , ZAICHIK et al. (2003) expriment les fluctuations de vitesse de la phase solide en fonction de l'énergie cinétique turbulente et du coefficient de réponse de la particule aux fluctuations de vitesse du fluide.

Dans le modèle différentiel le taux de collision est obtenu en résolvant un système de trois équations différentielles portant sur les composantes longitudinales (S_{pll}) et verticales (S_{pmm}) de la fonction de structure de la vitesse des particules solides et sur la distribution radiale des particules, $g_{ii}(r)$:

$$K = (8\pi S_{pll}(r))^{1/2} r^2 g_{ii}(r) . \quad (5.21)$$

Le système résolu dérive de l'équation différentielle que vérifie la densité de probabilité de la vitesse relative d'une paire de particules dans une turbulence homogène et isotrope.

5.2 Revue des modèles de fragmentation

La majeure partie des modèles de fragmentation a été développée dans le cadre de l'atomisation des sprays. On ne présentera ici que les études relatives à la fragmentation secondaire, c'est-à-dire à la fragmentation des gouttelettes une fois que le corps initial du jet a été atomisé parce que c'est a priori le seul type de fragmentation qui a lieu dans les cas que nous pourrions traiter.

5.2.1 Modélisation de la fragmentation par une approche probabiliste, APTE et al. (2003) et GOROKHOVSKI & SAVELIEV (2003)

APTE et al. (2003) et GOROKHOVSKI & SAVELIEV (2003) développent une modélisation stochastique de l'atomisation secondaire dans un jet. La stochastique de fragmentation est décrite sous l'hypothèse de KOLMOGOROV (1941) d'une symétrie d'échelle. Dans ces conditions, la distribution de taille des gouttelettes $f(r; t)$, vérifie une équation de FOKKER-PLANCK.

Un tirage aléatoire du rayon des gouttelettes est réalisé. Si r est le rayon de la gouttelette avant le tirage aléatoire et ρ le rayon de la gouttelette après le tirage, on pose :

$$\alpha = \frac{\rho}{r} . \quad (5.22)$$

α est un facteur multiplicatif compris entre $]0; 1]$, de d.d.p. de présence $Q(\alpha)$, telle que :

$$\int_0^1 Q(\alpha) d\alpha = 1 . \quad (5.23)$$

D'après GOROKHOVSKI & SAVELIEV (2003), si on considère la fragmentation sous l'hypothèse de KOLMOGOROV (1941) d'une symétrie d'échelle, la distribution de taille normalisée $f(r; t)$ évolue suivant l'équation intégral-différentielle :

$$\frac{\partial f(r; t)}{\partial t} = \nu_b \int_0^1 f\left(\frac{r}{\alpha}; t\right) Q(\alpha) \frac{d\alpha}{\alpha} - \nu_b f(r; t) , \quad (5.24)$$

où ν_b est la fréquence de fragmentation et :

$$\int_0^\infty f(r; t) dr = 1 . \quad (5.25)$$

En faisant le développement limité de $\frac{1}{\alpha} f\left(\frac{r}{\alpha}; t\right)$ suivant $\ln \alpha$, une nouvelle équation d'évolution de $f(r; t)$ est obtenue. Dans cette équation apparaissent tous les moments de $\ln \alpha$. Cependant, GOROKHOVSKI & SAVELIEV (2003) montrent que sous l'hypothèse de symétrie d'échelle, la somme normalisée de ces termes est entièrement donnée par les deux premiers moments de $Q(\alpha)$. Ainsi, l'équation d'évolution de $f(r; t)$ (5.24), devient exactement égale à :

$$\frac{\partial f(r; t)}{\partial t} = -\nu_b \langle \xi \rangle \frac{\partial}{\partial r} (r f(r; t)) + \nu_b \langle \xi^2 \rangle \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} (r f(r; t)) . \quad (5.26)$$

Ici, les deux premiers moments de $Q(\alpha)$ sont notés :

$$\langle \xi \rangle = \langle \ln \alpha \rangle \quad \text{et} \quad \langle \xi^2 \rangle = \langle \ln^2 \alpha \rangle . \quad (5.27)$$

La solution de l'équation (5.26) s'écrit :

$$f(r;t) = \frac{1}{r} \int_0^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle \xi^2 \rangle \nu_b t}} \exp \left\{ -\frac{\left(\ln \frac{r}{R} - \langle \xi \rangle \nu_b t \right)^2}{2 \langle \xi^2 \rangle \nu_b t} \right\} f_0(R) dR, \quad (5.28)$$

où $f_0(R)$ est la distribution initiale avant le début du processus de fragmentation. Lorsque la taille de la gouttelette avant la fragmentation est connue, la distribution initiale dans (5.28) est une fonction DIRAC :

$$f_0(R) = \delta(R - r_0), \quad (5.29)$$

et la solution de l'équation (5.26) devient :

$$f(r;t) = \frac{1}{r} \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle \xi^2 \rangle \nu_b t}} \exp \left\{ -\frac{\left(\ln \frac{r}{r_0} - \langle \xi \rangle \nu_b t \right)^2}{2 \langle \xi^2 \rangle \nu_b t} \right\}. \quad (5.30)$$

A chaque pas de temps, si la durée de vie d'une gouttelette est supérieure à l'inverse de la fréquence de fragmentation $1/\nu_b$ et si le nombre de WEBER local :

$$We_j = \frac{r_j \rho u_{r,j}^2}{\sigma}, \quad (5.31)$$

est supérieur à un nombre de WEBER critique, We_{cr} , la fragmentation a lieu. $u_{r,j}$ est la vitesse de la gouttelette par rapport au fluide environnant, r_j est le rayon des gouttelettes et σ la tension superficielle. La taille des nouvelles gouttelettes formées est donnée par l'équation (5.30). Le nombre de nouvelles gouttelettes est obtenu en appliquant la conservation de la masse.

Le nombre de WEBER critique lié à la fragmentation, égal à 6, a été donné par PILCH & ERDMAN (1987). La fréquence de fragmentation est donnée par, O'ROURKE (1981) :

$$\frac{1}{\nu_b} = \sqrt{\frac{3\rho}{\rho_p}} \frac{r_j}{|u_{r,j}|}, \quad (5.32)$$

Les deux paramètres nécessaires pour connaître l'évolution de $f(r;t)$ en (5.30) sont $\langle \xi \rangle$ et $\langle \xi^2 \rangle$. Ils sont déterminés en analogie avec la cascade d'énergie en turbulence :

$$\begin{cases} \langle \xi \rangle = K_1 \log \left(\frac{We_{cr}}{We_j} \right), \\ \frac{\langle \xi^2 \rangle}{\langle \xi \rangle} = \log \left(\frac{We_{cr}}{We_j} \right), \end{cases} \quad (5.33)$$

où $K_1 \sim 1$.

Pour bâtir un modèle de coalescence/fragmentation, nous nous sommes inspirés de cette approche. Le modèle est étendu au cas de la coalescence et adapté à l'appariement des particules. Les détails des modifications et adaptations sont expliqués dans le paragraphe 5.4 de ce chapitre. Il est à noter que APTE et al. (2003) appliquent ce modèle à tout le problème de fragmentation dans les sprays.

5.2.2 Fragmentation secondaire au coeur d'un jet, LASHERAS et al. (1998)

LASHERAS et al. (1998) proposent une expression pour le diamètre critique des plus petites gouttelettes pouvant exister dans un écoulement turbulent. Le diamètre critique, correspondant au nombre de WEBER critique, We_{cr} est donné par :

$$d_{cr} = \left(\frac{\sigma We_{cr}}{\rho} \right)^{3/5} \varepsilon^{-2/5}, \quad (5.34)$$

où σ est la tension superficielle de la gouttelette et ε la dissipation turbulente. Cette expression provient de la définition du nombre de WEBER critique où l'on a supposé que la vitesse relative de la particule par rapport au fluide environnant est donnée par :

$$u(\bar{d}_p)^2 \approx (\varepsilon d_p)^{2/3}, \quad (5.35)$$

Dans l'approche de APTE et al. (2003) la vitesse relative en question est supposée de la forme :

$$\langle u_{r,j}^2 \rangle \approx \varepsilon \tau_p. \quad (5.36)$$

Dans les deux cas, les auteurs supposent que les gradients des fluctuations de vitesse au sens de la décomposition de REYNOLDS sont à l'origine de l'étirement des gouttelettes et de la fragmentation. Or, dans certaines régions de l'écoulement, les gouttelettes peuvent aussi être étirées par des structures plus grandes.

La fréquence de fragmentation est donnée en fonction de la dissipation turbulente et du diamètre de la goutte. MARTÍNEZ-BAZÁN et al. (1999) supposent que la période de fragmentation est donnée par l'accélération de la déformation qui est fonction de la différence entre les forces de déformation et les forces de cohésion de la goutte :

$$\frac{\nu_b}{l} = K_g \frac{\sqrt{8.2(\varepsilon d_p)^{2/3} - 12 \frac{\sigma}{\rho d_p}}}{d_p} \quad (5.37)$$

Afin de déterminer la distribution de taille des particules formées par la fragmentation LASHERAS et al. (1998) proposent plusieurs approches :

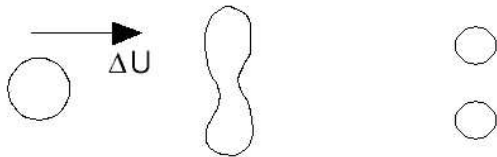
- approche phénoménologique - seulement deux particules sont formées par la fragmentation d'une particule mère. La taille des deux gouttes est inversement proportionnelle à l'énergie de surface créée pendant la fragmentation (TSOURIS & TALVARIDES 1994).
- approche statistique - la distribution de taille des gouttes donnée par une loi statistique.
- approche mixte - trois gouttelettes sont formées par la fragmentation de la goutte mère. Leur taille est proportionnelle à l'énergie contenue dans les échelles turbulentes correspondant aux tailles.

LASHERAS et al. (1998) supposent que ce sont uniquement les interactions avec la turbulence qui conduisent à la fragmentation des gouttelettes. Or, dans les sprays, la densité de gouttelettes étant très importante, les collisions entre les gouttes peuvent aussi être à l'origine de la fragmentation. Ce point de vue est adopté dans notre modèle, décrit au paragraphe 5.4 de ce chapitre.

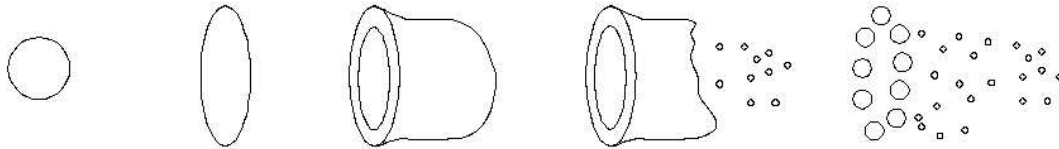
5.2.3 Autres modèles de fragmentation secondaire

Ces modèles de fragmentation sont issus des corrélations données par NICHOLLS sur les effets d'une onde de choc sur une goutte liquide. Ce travail revient à étudier la fragmentation d'une goutte dans

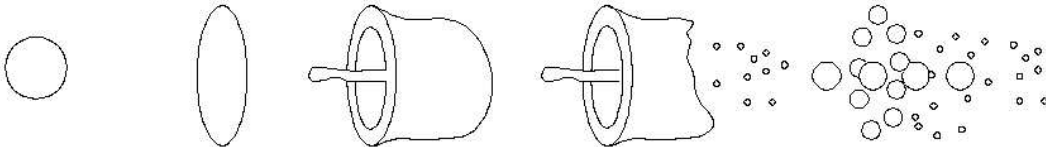
a) Fragmentation par vibration : $12 < We$



b) Fragmentation en poche : $12 < We < 50$



c) Fragmentation en poche avec présence d'un jet : $50 < We < 100$



d) Fragmentation par arrachement : $100 < We < 350$



e) Fragmentation catastrophique : $We < 350$

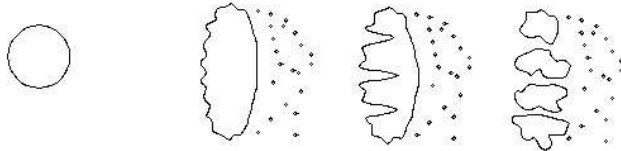


FIG. 5.3 – Modes de fragmentation d'une goutte en fonction du nombre de WEBER, PILCH & ERDMAN (1987).

un écoulement gazeux à forte vitesse. Certains résultats relatifs à ces observations sont utilisés par APTE et al. (2003).

PILCH & ERDMAN (1987) dressent une classification des modes de fragmentation de la goutte en fonction du nombre de WEBER (figure 5.3). Ceux-ci sont, pour les nombres de WEBER croissants :

Fragmentation par vibration (“*vibrational breakup*”)

Pour les petites vitesses d'air, la goutte entre en résonance et se brise.

Fragmentation en poche (“*bag breakup*”)

La goutte est déformée par l’écoulement et forme un “sac” qui éclate en petites gouttes ne laissant qu’un anneau lui même cassé en gouttes un peu plus grosses. Ce régime de fragmentation a lieu pour :

$$We_j = \frac{r_j \rho u_{r,j}^2}{\sigma} > 6 . \quad (5.38)$$

Le temps de rupture ou temps de vie des gouttelettes associées est alors donné par la relation :

$$\frac{1}{\nu_b} = C_{bag} \sqrt{\frac{\rho_p d_p^3}{\sigma}} , \quad (5.39)$$

C_{bag} étant une constante de modélisation égale à $\pi/2$.

Fragmentation en poche avec un jet (“*bag and jet breakup*”)

Ce mode est aussi appelé “*umbrella breakup*”. Par rapport au mode précédent, un jet se forme au centre et se brise plus tard.

Fragmentation par arrachement (“*stripping breakup*”)

La violence de l’arrachement devient plus importante. Ce type de fragmentation se produit pour :

$$We_j > \frac{\sqrt{Re_p}}{2} , \quad (5.40)$$

avec

$$\frac{We_j}{\sqrt{Re_p}} = \frac{\sqrt{\rho^2 u_{r,j}^3 d_p / 2\nu}}{\sqrt{2}\sigma} . \quad (5.41)$$

Il n’y a pas de formation d’un “sac”, mais cette fois il y a création de fragments liquides à la périphérie. Ces ligaments liquides se retrouvent très vite fractionnés en très petites gouttes. La durée de vie de la gouttelette, dans ce régime est donnée par :

$$\frac{1}{\nu_b} = C_{strip} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho}} \frac{d_p}{2|u_{r,j}|} , \quad (5.42)$$

REITZ & DIWAKAR (1986) proposent une valeur de $C_{strip} = 20$ alors que les travaux originaux de NICHOLLS proposaient $C_{strip} = 8$.

Fragmentation catastrophique (“*catastrophic breakup*”)

Si le nombre de WEBER, ($We_j > 350$), augmente encore, on arrive alors au régime de rupture catastrophique. Des vagues de courte longueur d’onde et de grande amplitude sont formées sur la face exposée à l’air, puis sont érodées par le courant d’air. Le mode “catastrophique” correspond au moment où les vagues sont d’amplitude suffisante pour casser la goutte mère. Ce processus se répète en cascade jusqu’à un nombre de WEBER critique.

Modèle de REITZ & DIWAKAR (1986)

Le modèle de fragmentation secondaire de REITZ & DIWAKAR (1986) fonctionne de la manière suivante. Pour chaque particule considérée, on vérifie les critères (5.38) ou (5.40). Si l'un de ces critères est vérifié pendant un temps égal au temps de rupture (durée de vie) correspondant, alors on a fragmentation de la particule. Le nouveau rayon de la gouttelette formée est calculé en transformant les inégalités (5.38) ou (5.40) en égalité. Le modèle suppose donc que les nouvelles gouttes formées sont stables initialement.

REITZ & DIWAKAR (1987) ont modifié cette dernière partie de leur modèle en ne supposant plus que, lors de l'atomisation secondaire par arrachement ("*stripping breakup*"), le rayon des gouttelettes passe brusquement de r à r_{stable} après une durée $t_{strip} = 1/\nu_{strip}$. Cette transformation se fait de manière continue selon la relation suivante :

$$\frac{dr}{dt} = \frac{r - r_{stable}}{t_{strip}} . \quad (5.43)$$

Modèle de PILCH & ERDMAN (1987)

Il existe de nombreux modèles tant de fragmentation primaire que secondaire, qui se basent sur les corrélations de PILCH & ERDMAN (1987) afin de déterminer le temps de désintégration d'une gouttelette. Ce temps correspond au moment où la gouttelette ne subira plus aucune rupture. Par rapport aux modèles précédents, le modèle de PILCH & ERDMAN (1987) prend en compte la viscosité de la phase liquide dans le calcul du nombre de WEBER critique We_{cr} en dessous duquel il n'y a pas de fragmentation. Ce nombre est défini par :

$$We_{cr} = 12 (1 + 1.077Z^{1.6}) , \quad (5.44)$$

où le nombre de WEBER est défini à partir du diamètre des gouttelettes. Z est le nombre d'OHNESORGE caractérisant le rapport entre les forces de viscosité du liquide et de tension de surface. Il s'écrit :

$$Z = \frac{\mu_p}{\sqrt{\sigma \rho_p d_p}} , \quad (5.45)$$

où μ_p est la viscosité dynamique de la goutte, σ la tension superficielle, ρ_p la masse volumique et d_p le diamètre. La relation (5.44) traduit le fait que plus la viscosité du liquide est importante, plus la fragmentation de la gouttelette sera difficile. On remarque, par ailleurs que lorsque la viscosité du liquide est négligée, on retrouve bien l'expression du nombre de WEBER critique (5.38) donné par REITZ & DIWAKAR (1986).

Le temps de désintégration s'écrit ici :

$$\frac{1}{\nu_b} = T \frac{d_p}{u_{r,j}} \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho}} . \quad (5.46)$$

Cette fois, et contrairement au modèle précédent, T n'est plus constant mais fonction du nombre de WEBER. T est défini pour un nombre de WEBER égale à 12 en considérant que $Z < 0.1$ (tableau 5.1).

Enfin, r_{stable} n'est plus défini comme dans le paragraphe précédent. PILCH & ERDMAN (1987) supposent qu'il doit dépendre de la variation de la vitesse relative de la gouttelette par rapport au

TAB. 5.1 – Temps de désintégration d’une gouttelette en fonction du nombre de WEBER, modèle de PILCH & ERDMAN (1987).

$T = 6 (We_j - 12)^{-0.25}$	$12 \leq We_j \leq 18$
$T = 2.45 (We_j - 12)^{-0.25}$	$18 \leq We_j \leq 45$
$T = 14.1 (We_j - 12)^{-0.25}$	$45 \leq We_j \leq 351$
$T = 0.766 (We_j - 12)^{-0.25}$	$351 \leq We_j \leq 2670$
$T = 5$	$We_j \leq 2670$

fluide, et qui est due à la fragmentation. La nouvelle relation pour r_{stable} , s’écrit alors :

$$r_{stable} = \frac{2We_{cr}\sigma}{\rho (u_{r,j} - u'_{r,j})^2}, \quad (5.47)$$

où $u'_{r,j}$ est la vitesse relative entre les gouttelettes et le gaz après fragmentation.

Modèle de PATTERSON & REITZ (1998)

Ce modèle est une extension du modèle se basant sur le développement d’une onde de surface de type KELVIN-HELMHOLTZ à la surface d’un jet liquide proposé par REITZ. En plus de cette perturbation liée au cisaillement aérodynamique à la surface du liquide, PATTERSON & REITZ (1998) ont pris en compte la présence d’instabilités de type RAYLEIGH-TAYLOR liées à l’accélération du liquide. Ces instabilités sont dues aux accélérations normales à la surface d’une interface entre deux fluides. Dans leur modèle, on a une compétition entre ce type d’instabilité et celle prise en compte plus classiquement comme l’instabilité de KELVIN-HELMHOLTZ liée à la différence de vitesse entre le liquide et le gaz. L’instabilité qui créera l’onde produisant la déstabilisation la plus rapide sera utilisée pour traiter la fragmentation.

Le temps de rupture est alors donné par :

$$\frac{1}{\nu_b} = \sqrt{\frac{8\rho_p}{C_D\rho}} \sqrt{\frac{2}{C_D We_j}}, \quad (5.48)$$

où C_D est le coefficient de traînée.

Modèle de T.A.B. (*Taylor Analogy Brakup*)

Le modèle de fragmentation T.A.B., O’ROURKE & AMSDEN (1987), est sans doute l’un des plus anciens modèles de fragmentation de gouttes. Ce modèle est basé sur une analogie faite par TAYLOR entre les oscillations d’une gouttelette et un système masse-ressort. On connaît l’équation représentant le mouvement d’un oscillateur forcé :

$$m\ddot{x} + d\dot{x} + kx = F, \quad (5.49)$$

x représente le déplacement de l’équateur de la goutte par rapport à sa position d’équilibre. TAYLOR propose les équivalences suivantes pour la constante de rappel, l’amortissement et le terme de forçage :

- Constante de rappel $k/m = C_k \sigma / (\rho_p r^3)$. La tension superficielle s'oppose à la fragmentation et tend à ramener la gouttelettes vers sa position d'équilibre.
- Amortissement $d/m = C_d \mu_p (\rho_p r^2)$. La viscosité du liquide a tendance à décaler l'instant de fragmentation et à amortir la perturbation à la surface de la gouttelette.
- Terme de forçage $F/m = C_F \rho u_{r,j}^2 / (\rho_p r)$. Les forces aérodynamiques sont les forces motrices et elle excitent la gouttelette.

Si on fait l'hypothèse que chacun des coefficients restent constants au cours d'un pas de temps, on se retrouve avec une simple équation aux dérivées ordinaires à coefficients constants. La solution de cette équation dans le cas d'un nombre de WEBER grand devant 1 conduit à l'expression suivante pour le temps de rupture :

$$\frac{1}{\nu_b} = \sqrt{\frac{3\rho}{\rho_p}} \frac{r}{|u_{r,j}|} . \quad (5.50)$$

Ceci est l'expression utilisée dans le modèle de APTE et al. (2003) pour la durée de vie d'une gouttelette. Si cette fois on suppose que $We_j < 1$, alors en négligeant le terme de viscosité on obtient :

$$\frac{1}{\nu_b} = \frac{\pi}{\sqrt{8}} \sqrt{\frac{\rho_p r^3}{\sigma}} . \quad (5.51)$$

Dans tous les modèles décrits ici, les auteurs supposent que les mécanismes à l'origine de la fragmentation sont les instabilités hydrodynamiques à la surface des gouttelettes. Ceci peut être le cas lorsque une très grande goutte ou un jet liquide rentre en contact avec un gaz au repos, à faible vitesse relative. Dès qu'il s'agit de vitesses relatives plus importantes (grand nombre de WEBER) ou dès que le gaz environnant est turbulent, les forces de contact à l'interface des deux fluides ne sont plus prépondérantes et les mécanismes de fragmentation deviennent de plus en plus complexes. En particulier, les structures turbulentes impactent la surface des gouttes ou du jet liquide et provoquent la fragmentation. D'autre part, dans la région d'atomisation secondaire, le nombre de gouttelettes par unité de volume étant très élevé, les collisions entre gouttelettes sont aussi à l'origine de la fragmentation.

Les observations expérimentales de LIU & REITZ (1993), montrent que dans la région d'atomisation secondaire il n'y a pas d'échelle caractéristique privilégiée des gouttelettes entre le diamètre initial des gouttelettes et un diamètre critique. Ainsi, l'ensemble des interactions entre les gouttelettes peut être envisagé sous l'hypothèse de symétrie d'échelle, KOLMOGOROV (1941) (GOROKHOVSKI & SAVELIEV (2003)). Dans ce travail, la fragmentation mais aussi la coalescence seront donc décrites par une modélisation stochastique sous l'hypothèse de symétrie d'échelle, KOLMOGOROV (1941), où l'échelle critique limite sera fonction des mécanismes d'interaction prépondérants. Afin de déterminer cette échelle critique, dans ce qui suit nous détaillerons les résultats des différentes expériences réalisées sur les interactions entre gouttelettes.

5.3 Revue des expériences sur le rebond, la coalescence et la fragmentation des gouttelettes

Lorsque deux gouttes rentrent en contact, plusieurs issues sont possibles. Les gouttelettes peuvent rebondir, rentrer en coalescence stable ou rentrer en coalescence temporaire puis se séparer en formant des fragments résiduels. C'est ce que l'on voit schématiquement sur la figure 5.4.

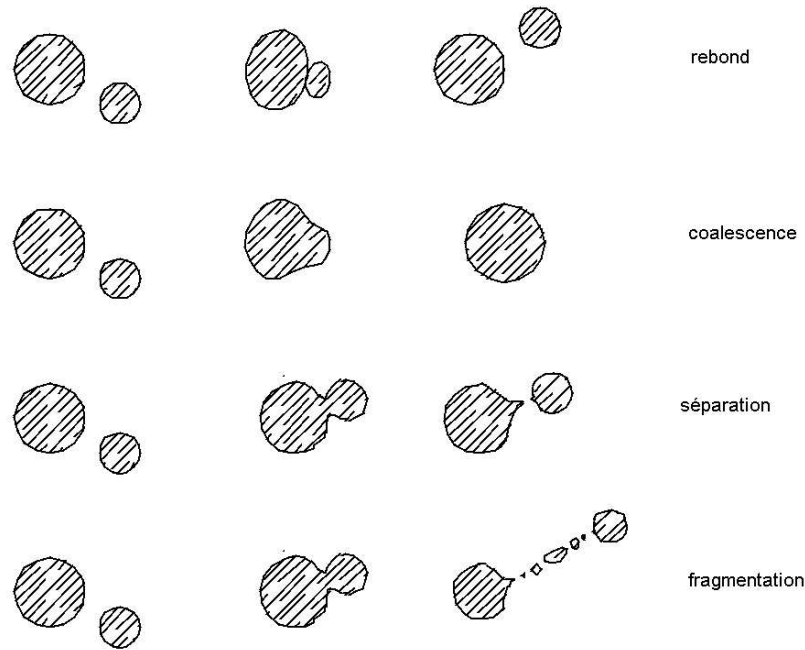


FIG. 5.4 – Rebond, coalescence, rupture ou fragmentation suite à la collision de deux gouttes, ORME (1997)

La présence d'une fine couche d'air peut empêcher le contact entre les surfaces des gouttes qui interagissent. Dans ce cas, les surfaces des gouttelettes sont aplaties et elles ne rentrent pas en contact car l'énergie cinétique relative n'est pas suffisante pour expulser le film d'air présent entre les deux particules. Les gouttes rebondissent.

Lorsque l'épaisseur de la couche d'air présente entre les gouttelettes devient très faible les particules rentrent en coalescence. Cette coalescence peut être permanente ou temporaire suivant l'énergie cinétique relative disponible avant la rencontre. Une coalescence temporaire a lieu lorsque l'énergie cinétique du choc est plus grande que l'énergie nécessaire à la coalescence. Dans ce cas, après la coalescence les gouttelettes se séparent. Cette séparation peut provoquer la formation de filaments et l'apparition de petites gouttelettes résiduelles. Si l'énergie cinétique de la collision est encore plus importante les deux gouttes fragmentent après le choc formant un nuage de gouttelettes.

L'issue d'une rencontre ne dépend pas uniquement de la norme de la vitesse relative de la paire de gouttelettes ou de l'énergie cinétique mais aussi de l'angle d'impact. Pour une énergie cinétique donnée différentes interactions peuvent être observées si le choc est frontal ou tangent (figure 5.5).

La compréhension de la coalescence des gouttelettes est primordiale pour l'étude des phénomènes aussi différents que la combustion des sprays, la synthèse des matériaux, la peinture, la retombée de gouttes chargées au sein d'une canopée, les insecticides et la croissance des gouttes au sein des nuages. Dans cette partie, nous détaillerons les différentes expériences menées au sujet de la coalescence, du rebond et de la fragmentation des gouttes. L'objectif principal des expériences décrites est l'étude des différentes issues d'une collision et la caractérisation de ces issues. D'autre part, il

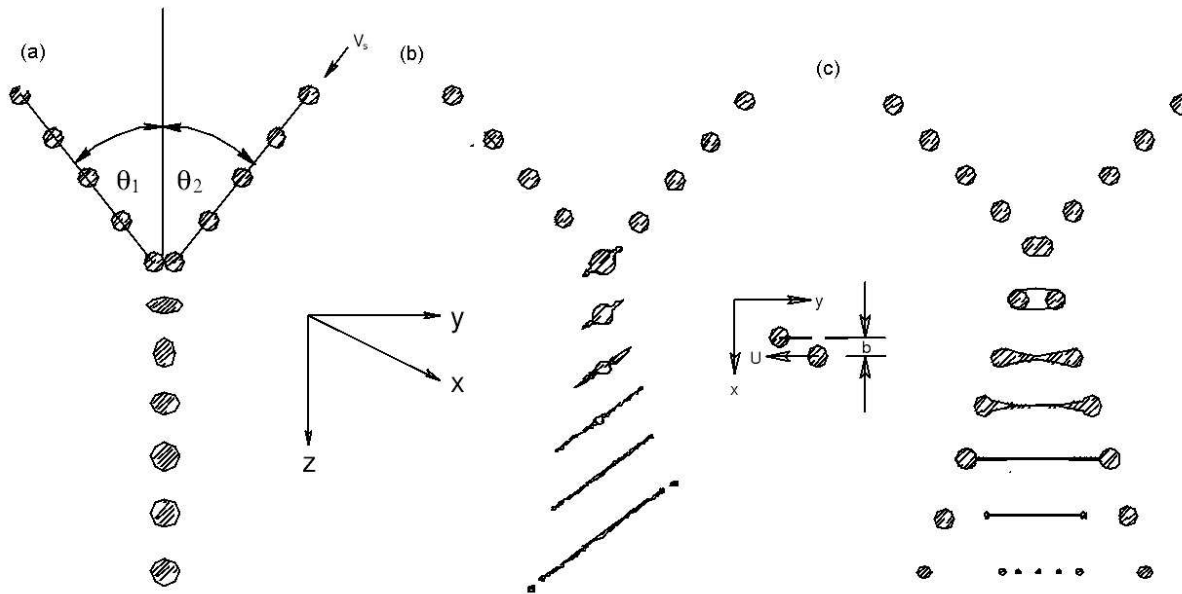


FIG. 5.5 – Exemples de collisions entre gouttelettes illustrant l’effet de la vitesse d’impact et du paramètre d’impact, ORME (1997). (a) - faible vitesse d’impact et $b = 0$, conduisant à une coalescence permanente; (b) - forte vitesse d’impact et $b \neq 0$ (avec déphasage entre les deux gouttes) conduisant à une coalescence instable suivie de la formation de résidus; (c) - forte vitesse d’impact et $b \neq 0$ (sans déphasage entre les deux gouttes) conduisant à une coalescence instable suivie de la formation de résidus.

s’agit de définir les paramètres et les limites entre le rebond, la coalescence stable et la rupture. Nous résumerons les différentes observations parce que nous en tiendrons compte dans notre modèle de coalescence/fragmentation. En particulier, les nombres de WEBER critiques nécessaires à juger si lors de la collision on a fragmentation ou coalescence, en seront déduits.

5.3.1 L’expérience de ADAM et al. (1968)

ADAM et al. (1968) ont observé le comportement de deux gouttes en collision. Deux filets de gouttelettes allant de $120\mu\text{m}$ à $600\mu\text{m}$ de diamètre sont dirigés l’un vers l’autre et les issues des collisions sont comptabilisées. Différentes inclinaisons des filets ont permis d’étudier l’influence du paramètre d’impact b (figure 5.6). Les expériences ont été réalisées pour des vitesses relatives allant de 1m/s à 8m/s . Les nombres de WEBER bâtis sur la vitesse relative de la paire de gouttes, notés We_{rel} , sont donc compris, dans cette expérience, entre 1.64 et 526.

ADAM et al. (1968) établissent des diagrammes de phase où les limites entre les différents régimes possibles à partir de leurs observations sont tracées en fonction du nombre de WEBER et du paramètre d’impact, b/D , D étant le diamètre de la plus grande goutte. Un schéma des diagrammes obtenus est donné sur la figure 5.7. Nous constatons que :

- à partir de $We_{rel} \sim 10$, il n’y a plus de rebond quelque soit le paramètre d’attaque,
- à partir de $We_{rel} \sim 100$, il n’y a plus de coalescence permanente quelque soit le paramètre d’attaque,
- plus la vitesse relative est élevée plus le nombre de fragments résiduels formés est élevé,
- plus la vitesse relative est faible plus la taille des fragments résiduels formés est petite,

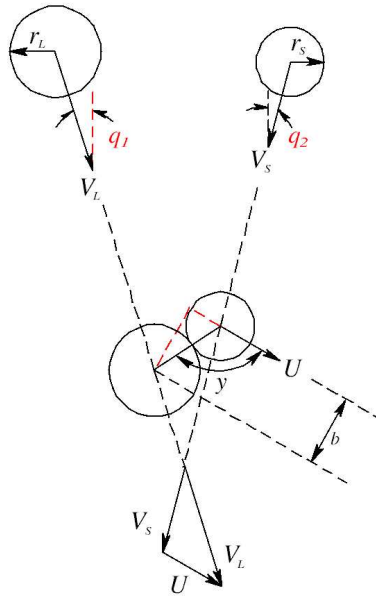


FIG. 5.6 – Schéma des paramètres de collision, ORME (1997).

- $We_{rel} \sim 12$ suffit pour avoir une fragmentation suite à la collision,
- très peu de rebonds ont été observés.

Ces constatations sont en accord avec les expériences de WOODS & MASON (1965) qui trouvent que les gouttelettes de diamètre inférieur à $70\mu m$ rebondissent alors que les gouttelettes de diamètre supérieur à $70\mu m$ rentrent en coalescence.

5.3.2 L'expérience de BRAZIER-SMITH et al. (1972)

BRAZIER-SMITH et al. (1972) ont étudié les collisions entre deux filets de gouttelettes dans l'air. Ils ont produit des gouttelettes de taille allant de $300\mu m$ à $1500\mu m$ en diamètre. A la différence de ADAM et al. (1968) ils ont étudié les collisions entre gouttelettes de différents rapports de taille $1 \leq d_{p,1}/d_{p,2} \leq 2.5$ et ils se sont limités aux faibles vitesses relatives allant de $0.3m/s$ à $3m/s$. Ils ont constaté que le rebond a lieu à faible vitesse relative.

De la même façon, en étudiant le rebond de gouttelettes de $800\mu m$ impactant avec une vitesse relative de $0.3m/s$, SARTOR & ABBOTT (1968) affirment que le nombre de WEBER critique en dessous duquel il y a toujours rebond est proche de 0.96. Cette constatation est en accord avec les observations de SHOTLAND (1960) et LIST & WHELPDALE (1971) qui ont mené des expériences où des petites gouttes micrométriques sont projetées sur une surface d'eau et sur une grande goutte millimétrique, respectivement. Les premières expériences de GUNN (1965) confirment l'ordre de grandeur du nombre de WEBER critique entre le rebond et la coalescence. Par ailleurs, ARKHIPOV et al. (1978) observent un rebond pour $0.7 < We_{rel} < 1.5$ dans le cas de gouttelettes où le rapport de taille est $d_{p,1}/d_{p,2} = 1.9$. Malheureusement, ARKHIPOV et al. (1978) ne disent rien sur le paramètre d'attaque.

5.3.3 L'expérience de ASHGRIZ & POO (1990)

Toutes les expériences décrites jusqu'à présent ont été réalisées avec des gouttelettes d'eau. JIANG et al. (1990) ont complété les diagrammes de phase existants en étudiant des gouttes d'alcane. Ils ont

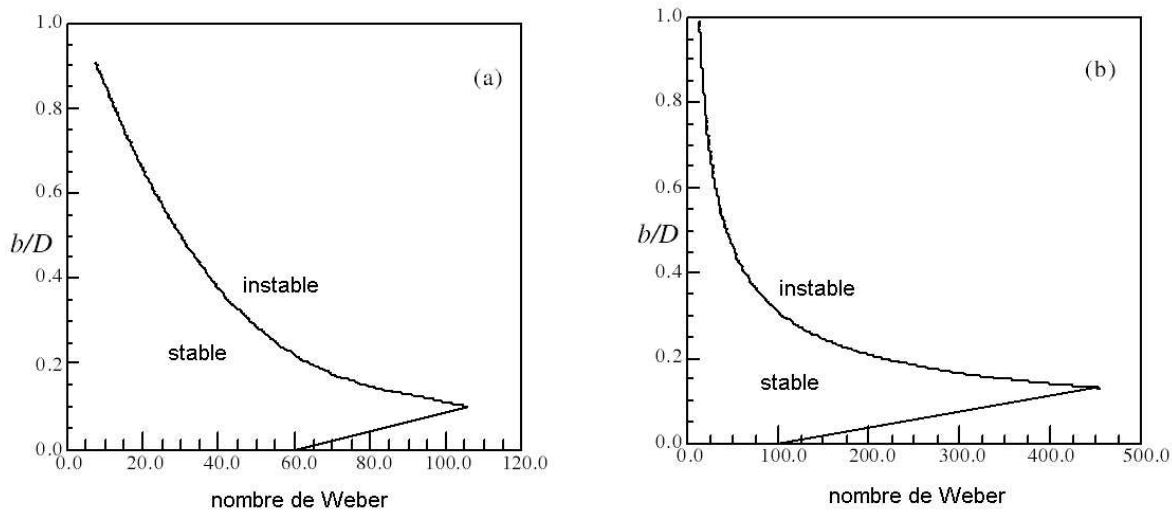


FIG. 5.7 – Schéma des différents régimes de collision possibles pour les gouttelettes d'eau, ADAM et al. (1968). (a) - gouttelettes de $120\mu\text{m}$ de diamètre; (b) - gouttelettes de $600\mu\text{m}$ de diamètre.

montré que les collisions entre deux gouttes d'alcane sont différentes des collisions des gouttelettes d'eau. ASHGRIZ & POO (1990) ont mené une des études quantitatives les plus complètes avec les gouttelettes d'hydrocarbure (heptane, decane, dodecane, tetradecane et hexadecane).

En analysant les collisions des paires de gouttes de différentes couleurs, ASHGRIZ & POO (1990) étudient les transferts de masse qui peuvent avoir lieu pendant une coalescence temporaire. Les expériences sont menées pour une gamme de nombre de WEBER relatif allant de 1 à 10, FIG 5.8. Trois rapports de taille sont étudiés, 1, 0.5 et 0.75. En observant la couleur des filaments résiduels et des gouttelettes issues des interactions ils développent plusieurs formalismes pour décrire les mécanismes de coalescence et de rupture. A partir de ces formalismes, les auteurs proposent des lois décrivant les limites entre différentes issues possibles en fonction du nombre de WEBER, du rapport de taille et du paramètre d'impact.

5.3.4 L'expérience de QIAN & LAW (1997)

Plus tard, QIAN & LAW (1997) étudient les effets de la pression, la densité et la viscosité de l'air ambiant sur les collisions de gouttelettes d'hydrocarbure. Les gouttelettes étudiées ont des diamètres de $200\mu\text{m}$ à $400\mu\text{m}$. Les auteurs trouvent que la limite entre la coalescence stable et la coalescence temporaire n'est pas monotone dans le diagramme (We_{rel}, B) comme dans le cas de l'eau, (figure 5.9). Ils concluent que les mécanismes de collision sont plus compliqués que ce qui a été constaté pour les gouttelettes d'eau et rajoutent une ramification dans le diagramme de phase (figure 5.9). Enfin, ils constatent que la coalescence de gouttes d'eau peut être fortement favorisée en présence de vapeur d'eau. Cela signifierait que l'humidité relative doit être prise en compte, ce que nous ne ferons pas ici.

Les résultats des différentes expérience citées sont résumés dans le tableau 5.2.

TAB. 5.2 – Résumé des expériences sur le rebond, la coalescence et la rupture des gouttelettes.

	ADAM et al. (1968)	ASHGRIZ & POO (1990)	QIAN & LAW (1997)	PODVYSOTSKY & SHRAIKER (1984)	ARKHIPOV et al. (1978)	BRAZIER et al. (1977)
diamètres	$d = 120\mu m$ $d = 600\mu m$	$\Delta \in \{0.5; 0.75; 1\}$	$200\mu m - 400\mu m$	$200\mu m - 1500\mu m$ $2000\mu m - 5000\mu m$	$1.1 < \Delta < 2.7$	$300\mu m$ $1 < \Delta$
vitesse relative	$1m/s - 8m/s$	-	-	$7.5m/s - 300m/s$	-	$0.3m/s$
Nombre de Weber	$1.6 < We < 526$	$1 < We < 100$	-	$154 < We < 1.3 \cdot 10^6$	$1.5 < We < 50$	$0.4 < We$
Rebond	$We = 5$ - dernier rebond mesuré	pas de rebond enregistré	$We = 25$ - dernier rebond mesuré	pas de rebond enregistré	$0.7 < We < 1.5$	$We < 4$
Coalescence et séparation	$We > 8$ pour $d = 120\mu m$	$We > 19$ pour $\Delta = 1$ $We > 34$ pour $\Delta = 0.5$	$We > 19$ $We_c = 30Z + 15$	Pas de séparation définie entre coalescence et fragmentation	$2 < We < 15$ - coalescence $15 < We < 50$ séparation	$We > 6$
Fragmentation	$We > 93$ $d = 120\mu m$ $We > 450$ $d = 600\mu m$	-	-	Pas de séparation définie entre coalescence et fragmentation	$We > 50$	
Remarques	$We = 12$ suffit pour que la fragmentation ait lieu. Le diamètre moyen diminue à cause de la fragmentation	Dans le plan $b = f(We)$ le domaine de coalescence augmente quand le rapport des diamètres diminue	Présence de vapeur d'eau favorise la coalescence	Présence d'un écoulement externe favorise la fragmentation après collision de deux gouttes	pas de mesures du paramètre d'impact	lois pour les régimes entre We_{rel} , b

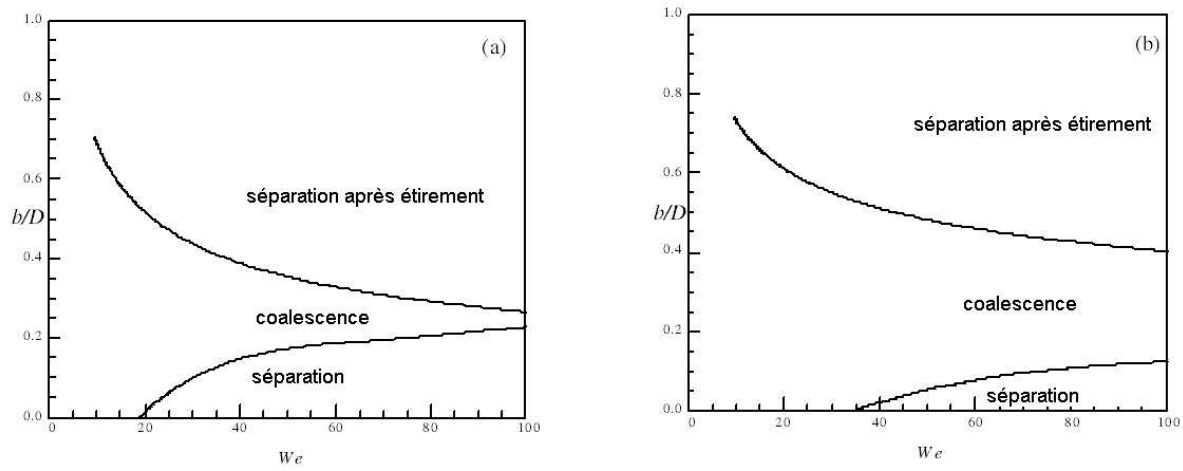


FIG. 5.8 – Schéma des différents régimes de collision pour les gouttelettes d'eau, ASHGRIZ & POO (1990). (a) - gouttelettes de même taille ; (b) - gouttelettes avec un rapport de taille de 2.

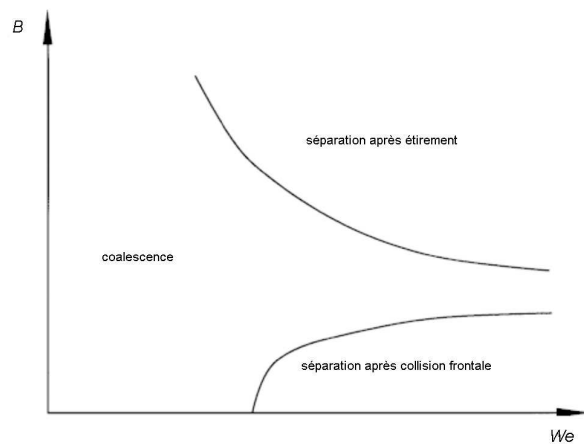


FIG. 5.9 – Schéma des différents régimes de collision pour les gouttelettes d'hydrocarbure.

5.4 Le modèle de coalescence/fragmentation

Afin d'introduire la coalescence et la fragmentation des gouttelettes dans la SGE, nous avons développé un modèle probabiliste de coalescence/fragmentation qui reprend les caractéristiques du modèle stochastique de fragmentation de APTE et al. (2003) et de GOROKHOVSKI & SAVELIEV (2003), mais aussi de celui de HO & SOMMERFELD (2002) pour la coalescence. D'autre part, toutes les observations expérimentales décrites précédemment nous ont servi pour fixer les paramètres du modèle. Enfin, nous avons introduit une notion nouvelle de contact au travers de l'appariement des gouttelettes. Cela permettra de façon directe de tenir compte de tout phénomène de contact au travers de paramètres clés plutôt qu'au travers d'une prise en compte déterministe avec une vision géométrique.

La coalescence et la fragmentation sont considérées comme des processus stochastiques sous l'hypothèse de symétrie d'échelle. A très grande fréquence de coalescence/fragmentation, le processus stochastique est équivalent à l'évolution de la distribution de taille des gouttelettes qui satisfait une équation de FOKKER-PLANCK. Les paramètres du modèle sont calculés de manière locale et instantanée en fonction de la dynamique des gouttelettes. Au sein de chaque maille, la conservation de la masse est appliquée.

5.4.1 Approche probabiliste et équation d'évolution de la d.d.p. de taille des gouttelettes

Bien que chaque coalescence ou fragmentation soit un processus complexe, lorsque le nombre de ces phénomènes élémentaires devient grand par unité de temps, un scénario simple de coalescence/fragmentation visant à reproduire les caractéristiques essentielles du phénomène, indépendamment des détails de chaque processus élémentaire peut être établi. La coalescence et la fragmentation sont considérées sous l'hypothèse de symétrie d'échelle. Ainsi, chaque processus élémentaire est réduit à une diminution (dans le cas de la fragmentation) ou à une augmentation (dans le cas de la coalescence) d'une longueur caractéristique (par exemple, le rayon) de la paire de gouttelettes mères. Si on note r le rayon d'une gouttelette avant la coalescence ou la fragmentation, on considère que :

$$r \Rightarrow \alpha r , \quad (5.52)$$

où α est un facteur multiplicatif positif de d.d.p. de présence $Q(\alpha)$, telle que :

$$\int_0^1 Q(\alpha) d\alpha = 1 . \quad (5.53)$$

Sous l'hypothèse de symétrie d'échelle, la distribution de taille $f(r; t)$ des nouvelles gouttelettes évolue suivant l'équation intégral-différentielle (GOROKHOVSKI & SAVELIEV (2003)) :

$$\frac{\partial f(r; t)}{\partial t} = \nu_c \int_0^1 f\left(\frac{r}{\alpha}; t\right) Q(\alpha) \frac{d\alpha}{\alpha} - \nu_c f(r; t) , \quad (5.54)$$

où ν_c est la fréquence de coalescence/fragmentation et :

$$\int_0^\infty f(r; t) dr = 1 . \quad (5.55)$$

Si on fait un développement limité de $\frac{1}{\alpha} f\left(\frac{r}{\alpha}, t\right)$ suivant $\ln \alpha$, on obtient :

$$\frac{1}{\alpha} f\left(\frac{r}{\alpha}; t\right) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial r} r\right)^n f(r; t) \ln^n \alpha . \quad (5.56)$$

Avec l'expression (5.56), l'équation d'évolution (5.54) devient :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\nu_c} \frac{\partial f(r;t)}{\partial t} = & - \frac{\langle \ln \alpha \rangle}{1!} \frac{\partial}{\partial r} r f(r;t) + \frac{\langle \ln^2 \alpha \rangle}{2!} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} r f(r;t) \\ & - \frac{\langle \ln^3 \alpha \rangle}{3!} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} r f(r;t) + \dots , \end{aligned} \quad (5.57)$$

Afin de résoudre l'équation (5.57), il est nécessaire de connaître tous les moments de $Q(\alpha)$. Cependant, GOROKHOVSKI & SAVELIEV (2003) ont démontré que, bien que chaque terme de l'équation (5.57) puisse devenir important, la somme normalisée de tous les termes, sous l'hypothèse de symétrie d'échelle, est entièrement déterminée par les deux premiers moments de $Q(\alpha)$. Ainsi, l'équation (5.57) devient exactement équivalente à l'équation de FOKKER-PLANCK :

$$\frac{\partial f(r;t)}{\partial t} = -\nu_c \langle \xi \rangle \frac{\partial}{\partial r} (r f(r;t)) + \nu_c \langle \xi^2 \rangle \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} (r f(r;t)) . \quad (5.58)$$

Ici, les deux premiers moments de $Q(\alpha)$ sont donnés par :

$$\begin{aligned} \langle \xi \rangle &= \langle \ln \alpha \rangle , \\ \langle \xi^2 \rangle &= \langle \ln^2 \alpha \rangle . \end{aligned} \quad (5.59)$$

La solution de l'équation (5.58) s'écrit :

$$f(r;t) = \frac{1}{r} \int_0^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle \xi^2 \rangle \nu_c t}} \exp \left\{ -\frac{\left(\ln \frac{r}{R} - \langle \xi \rangle \nu_c t \right)^2}{2 \langle \xi^2 \rangle \nu_c t} \right\} f_0(R) dR , \quad (5.60)$$

où $f_0(R)$ est la distribution de taille avant le début du processus de coalescence/fragmentation. Si on suppose que la taille des gouttelettes mères est connue, la distribution initiale dans (5.60) est une fonction DIRAC :

$$f_0(R) = \delta(R - r_0) . \quad (5.61)$$

Dans ce cas, la solution (5.60) devient :

$$f(r;t) = \frac{1}{r} \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle \xi^2 \rangle \nu_c t}} \exp \left\{ -\frac{\left(\ln \frac{r}{r_0} - \langle \xi \rangle \nu_c t \right)^2}{2 \langle \xi^2 \rangle \nu_c t} \right\} . \quad (5.62)$$

Nous pouvons voir que $f(r;t)$ est une loi log-normale de moyenne $\ln r_0 + \langle \xi \rangle \nu_c t$ et de variance $\langle \xi^2 \rangle \nu_c t$.

Ici, la procédure numérique de simulation de la fragmentation donnée par APTE et al. (2003) est étendue par un choix différent des paramètres $\langle \xi \rangle$, $\langle \xi^2 \rangle$ et ν_c . Ceci nous permet de traiter à la fois la coalescence et la fragmentation et d'introduire le contact entre les gouttelettes.

5.4.2 Structure du modèle

On considère un ensemble de N_p particules dans un écoulement turbulent. A chaque instant, les particules sont aléatoirement sélectionnées par paires. Une paire de particules sélectionnées peut subir

une coalescence/fragmentation seulement si la durée de vie des deux particules est supérieure à l'inverse de la fréquence ν_c du phénomène.

Soit la paire de gouttelettes $(m; n)$. Initialement, le temps de vie de chaque gouttelette est zéro. Lorsque $t_m \geq 1/\nu_c$ et $t_n \geq 1/\nu_c$, la paire sélectionnée peut subir une coalescence/fragmentation.

Pour chaque paire de gouttelettes le nombre de WEBER est calculé :

$$We_{rel} = \frac{\rho u_{rel}^2 r}{\sigma} , \quad (5.63)$$

où $u_{rel} = |\vec{u}_{p,m} - \vec{u}_{p,n}|$ est la vitesse relative des deux gouttes et σ la tension superficielle. Suivant la valeur de ce nombre de WEBER il y aura coalescence, fragmentation ou juste rebond des gouttelettes. Dans le cas d'une coalescence ou d'une fragmentation, de nouvelles gouttelettes sont créés. Leur taille est donnée par la densité de probabilité $f(r; t)$ qui évolue suivant (5.62). Enfin, localement, la conservation de la masse est appliquée.

5.4.3 Choix des paramètres $\langle \xi \rangle$ et $\langle \xi^2 \rangle$

Le point de vue adopté ici est entièrement probabiliste. On considère que les seuls paramètres pouvant retarder le processus de coalescence et de fragmentation sont la tension superficielle et la vitesse relative. Le nombre de WEBER, We_{rel} , sera donc l'unique facteur limitant du phénomène étudié. Par analogie avec l'expression proposée par APTE et al. (2003) pour l'atomisation des sprays, équation (5.33) on suppose que :

$$\begin{cases} \langle \xi \rangle = K_1 \log \left(\frac{We_{rel_{cr}}}{We_{rel}} \right) , \\ \frac{\langle \xi^2 \rangle}{\langle \xi \rangle} = K_2 \log \left(\frac{We_{rel_{cr}}}{We_{rel}} \right) , \end{cases} \quad (5.64)$$

où $We_{rel_{cr}}$ est le nombre de WEBER critique, fixé en accord avec les observations expérimentales sur les collisions entre gouttes, ADAM et al. (1968), ASHGRIZ & POO (1990) et QIAN & LAW (1997). K_1 et K_2 sont deux constantes proches de 1.

La différence entre notre approche et celle de APTE et al. (2003) réside dans l'appariement de gouttelettes. Dans notre cas, ce ne sont pas les forces aérodynamiques qui sont à l'origine de la fragmentation ou de la coalescence. Le mécanisme moteur est le mouvement relatif des gouttelettes et leur contact, comme décrit par les expériences citées dans le paragraphe précédent (5.3). Pour cette raison, le nombre de WEBER dans cette modélisation est obtenu à partir de la vitesse relative. Dans le modèle de APTE et al. (2003), le nombre de WEBER utilisé est lié à une seule gouttelette et il est calculé en fonction de la vitesse de la gouttelette par rapport au fluide environnant.

5.4.4 Fréquence de coalescence/fragmentation

La formulation discrète du modèle est rendue indépendante du pas de temps par la fréquence de coalescence/fragmentation ν_c . Cette fréquence est supposée égale à la fréquence de collision par unité de volume définie d'après la théorie cinétique des gaz par SOMMERFELD (2001), équation (4.62) :

$$\nu_c = \frac{\pi}{4} (d_{p,m} + d_{p,n})^2 |\vec{u}_{p,m} - \vec{u}_{p,n}| n_p , \quad (5.65)$$

où n_p est le nombre de gouttelettes par unité de volume.

TAB. 5.3 – Caractéristiques de la turbulence et des particules étudiées.

Énergie cinétique turbulente	$k = 0.01 - 0.25m^2/s^2$
Taux de dissipation turbulente	$\varepsilon = 50m^2/s^3$
Viscosité cinématique	$\nu = 1.5 \times 10^{-5}m^2/s$
Échelle intégrale	$T_L = 6.5 \times 10^{-4} - 1.6 \times 10^{-3}s$
Diamètre des particules	$d_p = 1.0 - 100\mu m$
Masse volumique des particules	$\rho_p = 1000kg/m^3$
Temps de relaxation des particules	$\tau_p = 3.3 \times 10^{-6} - 3.3 \times 10^{-2}s$

5.5 Validation du modèle

Les résultats de notre modèle sont confrontés au modèle de coalescence de HO & SOMMERFELD (2002), au modèle d'atomisation secondaire de APTE et al. (2003) et à l'expérience de LASHERAS et al. (1998) sur l'atomisation des jets coaxiaux. Les confrontations sont faites sans SGE et le transports des gouttelettes par l'écoulement turbulent est réalisé avec le modèle stochastique modifié de AGUIRRE et al. (2004).

5.5.1 Coalescence dans une turbulence homogène et isotrope, comparaison avec le modèle de HO & SOMMERFELD (2002)

Notre modèle de coalescence/fragmentation est confronté au modèle de coalescence de HO & SOMMERFELD (2002). Notons que très peu d'expériences offrent des données suffisantes à la validation. En particulier, à notre connaissance, il n'existe pas de mesure des statistiques liées aux vitesses relatives dans ces processus.

Le suivi lagrangien de gouttelettes dans une turbulence homogène isotrope a été réalisé avec le modèle stochastique décrit dans AGUIRRE et al. (2004). Les caractéristiques de la turbulence homogène isotrope et des gouttelettes étudiées dans ce cas sont résumées dans le tableau 5.3.

Pour modéliser le transport des gouttelettes, HO & SOMMERFELD (2002) utilisent aussi un modèle stochastique. Nous avons comparé les d.d.p. de présence de la vitesse relative entre deux particules obtenues par son modèle et par le notre (figure 5.10). Notons que notre modèle est plus général et englobe en plus la fragmentation. Les résultats sont assez proches. Cependant, des différences existent et elles sont plus marquées pour les faibles valeurs de l'énergie cinétique turbulente. Ces différences sont dues plutôt à l'appariement et au calcul de la vitesse relative, qu'au modèle de transport. En effet, comme décrit dans le paragraphe 5.1.1, HO & SOMMERFELD (2002) modélisent la collision entre deux gouttelettes en générant à chaque pas de temps un partenaire fictif de collision.

La comparaison des évolutions temporelles de la distribution de taille des gouttelettes entre le présent modèle et celui de HO & SOMMERFELD (2002) est illustrée sur la figure 5.11. Même si les deux approches sont différentes, nos résultats sont comparables à ceux de HO & SOMMERFELD (2002). La distribution est initialement une gaussienne de moyenne $8\mu m$ et d'écart type $2.5\mu m$. Dans ce cas, la turbulence étant assez faible, la fragmentation n'a pas lieu. Ici nous testons la coalescence. Le nombre de WEBER critique pour la coalescence est fixé à $We_{rel,cr} = 1.25 \times 10^{-3}$. Les expériences décrites dans

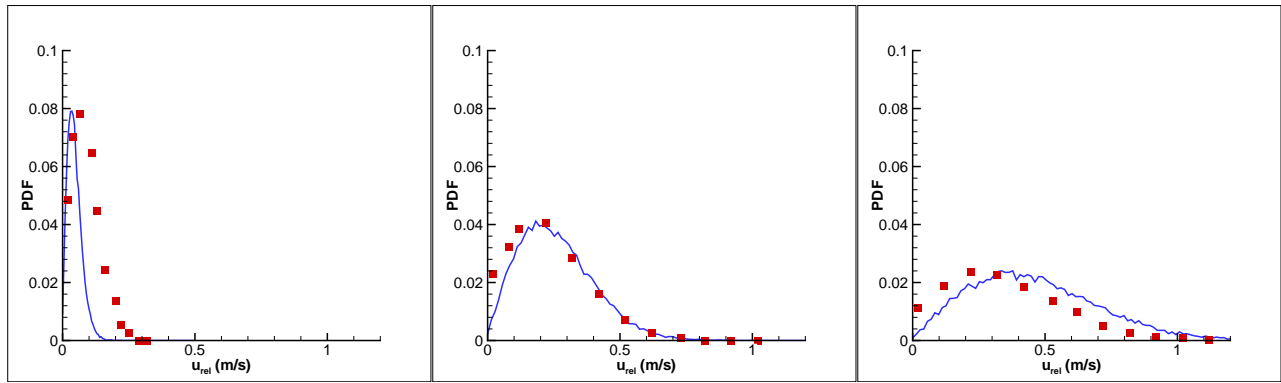


FIG. 5.10 – Densité de probabilité de présence de la vitesse relative entre deux gouttelettes pour différentes valeurs de l'énergie cinétique turbulente. —, présente simulation ; ■, modèle de HO & SOMMERFELD (2002). Gauche - $k = 0.01m^2/s^2$; Centre - $k = 0.1m^2/s^2$; Droite - $k = 0.25m^2/s^2$.

le paragraphe 5.3 n'atteignent jamais des nombres de WEBER aussi faibles. Cette valeur critique a été fixée afin de mieux ajuster nos résultats au modèle de HO & SOMMERFELD (2002), qui n'utilisent pas ce paramètre a priori. Cependant, cette valeur du nombre de WEBER critique équivaut à une vitesse relative critique $u_{rel_{cr}} = 0.15m/s$ pour les gouttelettes de $d_p = 8\mu m$. Or, dans leur modèle HO & SOMMERFELD (2002) utilisent une vitesse relative critique $u_{rel_{cr}} = 0.13m/s$ (voir paragraphe 5.1.1, équation (5.6)). Par conséquent, le nombre de WEBER critique de HO & SOMMERFELD (2002) est similaire au notre.

La confrontation avec le modèle de HO & SOMMERFELD (2002) a permis de fixer le nombre de WEBER critique pour la coalescence. Dans ce qui suit nous allons fixer le nombre de WEBER critique pour la fragmentation en comparaison avec le modèle de APTE et al. (2003).

5.5.2 Atomisation d'un spray, comparaison avec le modèle de APTE et al. (2003)

La validation de la partie concernant la fragmentation dans le présent modèle a été réalisée en comparaison avec les résultats obtenus par le modèle de APTE et al. (2003) décrit plus haut, paragraphe 5.2.1. APTE et al. (2003) considèrent que la fragmentation a lieu lorsque la vitesse de la gouttelette par rapport au fluide environnant devient assez importante. Dans notre approche, on suppose que la fragmentation des gouttelettes a lieu suite à une collision à grande vitesse relative. Le nombre de WEBER critique dans notre modélisation est donc exprimé en fonction de la vitesse relative et non pas en fonction de la vitesse de la gouttelette par rapport au fluide. En ajustant les résultats de nos simulations par rapport à ceux de APTE et al. (2003) nous allons déterminer la valeur du nombre de WEBER critique pour la fragmentation.

Le cas de comparaison est le jet coaxial de l'expérience de LASHERAS et al. (1998), décrite dans le paragraphe 5.5.3. Les vitesses et les diamètres du jet liquide (à l'intérieur) et du jet d'air (à l'extérieur) modélisées par APTE et al. (2003) sont donnés sur le tableau 5.4. On ne se place que dans la région où le corps du jet liquide n'existe plus et où il n'y a plus que de la fragmentation secondaire des gouttelettes.

Le transport de gouttelettes est simulé avec le modèle stochastique de AGUIRRE et al. (2004), où on suppose que la vitesse moyenne et les profils de turbulence dans les trois directions sont ceux

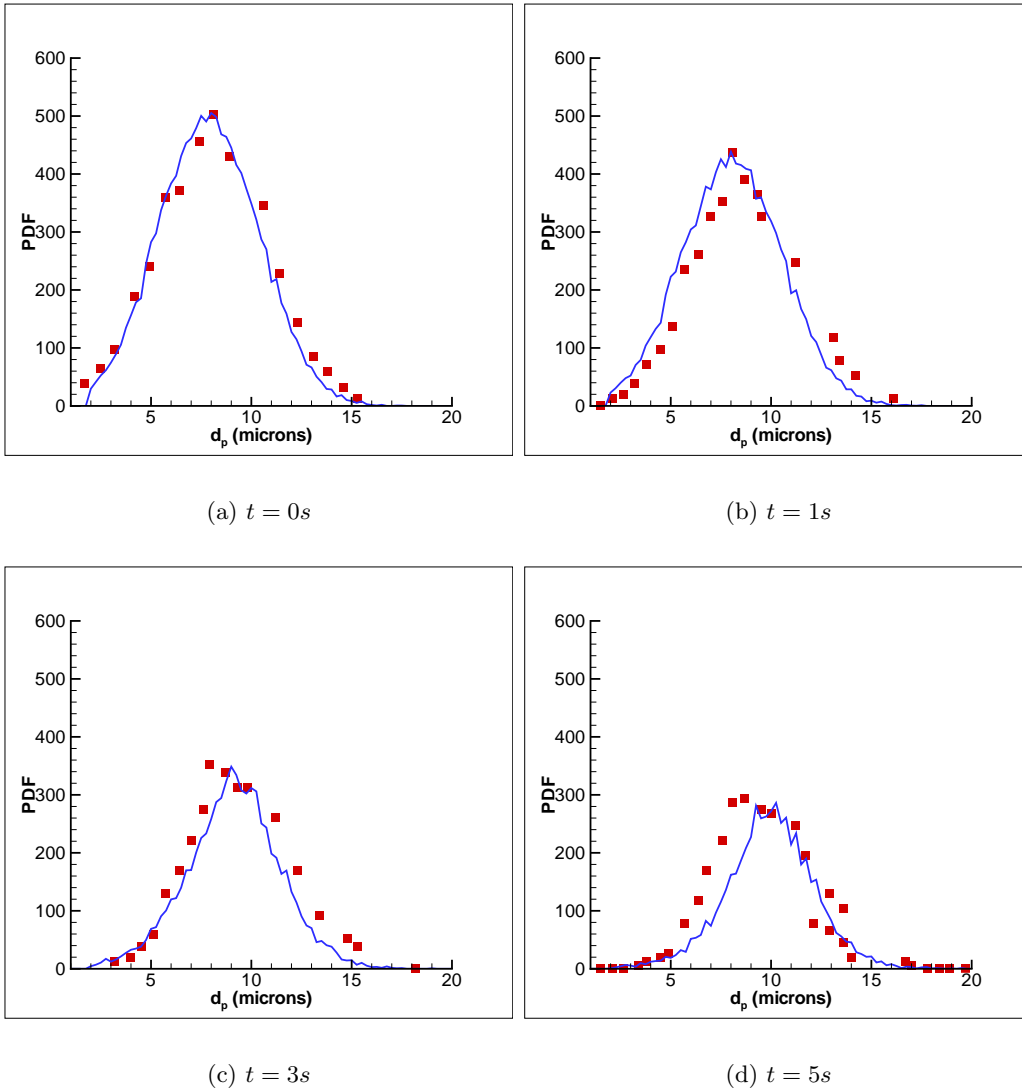


FIG. 5.11 – Évolution en temps de la distribution de taille des gouttelettes en coalescence. —, présent modèle; ■, modèle de HO & SOMMERFELD (2002).

TAB. 5.4 – Caractéristiques du jet coaxial étudié.

Vitesse du jet d'air	$U_g = 140m/s$
Diamètre du jet d'air	$D_g = 5.6mm$
Vitesse du jet d'eau	$U_l = 0.13m/s; 0.31m/s; 0.55m/s$
Diamètre du jet d'eau	$D_l = 3.8mm$
Position d'injection	$x = 2.5D_g; 6.4D_g; 10.2D_g$

d'un jet rond turbulent (RAJARTNAM 1976, ANTONIA et al. 1980) parce que nous n'avons pas de données suffisantes sur la turbulence dans le cas de jets coaxiaux. Nous considérons que l'atomisation primaire a déjà eu lieu et qu'il n'y a plus que des gouttelettes (i.e. il n'y a plus de filaments liquides) dans la zone de calcul. Nous ne nous intéressons qu'à la fragmentation secondaire. Initialement, la distribution de taille des gouttelettes est une gaussienne de moyenne $100\mu m$ et d'écart type $10\mu m$. Trois cas correspondant à trois vitesses d'injection du liquide ont été simulés. Ces cas correspondent à différentes valeurs de l'intensité turbulente. Pour chaque cas nous avons changé la position d'injection des gouttelettes en accord avec les résultats du modèle de APTE et al. (2003) (tableau 5.4).

Le diamètre de SAUTER est calculé à partir de :

$$d_{sauter} = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} d_{p,i}^3}{\sum_{i=1}^{N_p} d_{p,i}^2} . \quad (5.66)$$

Les évolutions de d_{sauter} en fonction de la distance à l'injecteur pour les trois vitesses du jet d'eau sont représentées sur la figure 5.12. Sur la première figure de 5.12, K_1 et K_2 sont fixées par rapport à l'évolution de la courbe intermédiaire ($U_{l2} = 0.31m/s$). Les deux autres cas sont obtenus en changeant la vitesse du jet d'eau. Pour $U_{l1} = 0.55m/s$ la turbulence est plus faible et la vitesse relative entre les gouttelettes aussi. Comme la fréquence de fragmentation est directement proportionnelle à la vitesse relative (équation 5.65), lorsque celle-ci diminue, le processus de fragmentation devient de plus en plus lent. Ceci explique le retard de déclenchement de la fragmentation pour $U_{l1} = 0.55m/s$.

Sur la deuxième figure de 5.12, nous avons ajusté K_2 indépendamment pour les trois vitesses du jet liquide. Pour le premier régime nous avons aussi modifié la fréquence de fragmentation. Les changements réalisés sont indiqués dans le tableau 5.5, où ν_{ref} signifie la fréquence de coalescence/fragmentation de référence donnée par l'équation (5.65). Lorsque U_l diminue, la turbulence augmente et le régime stationnaire est atteint de plus en plus rapidement. Dans notre modélisation, lorsque U_l diminue K_2 diminue. Lorsque K_2 diminue, l'écart type de la loi de forçage augmente. Or, c'est l'écart type qui règle la vitesse de convection de la d.d.p. de présence de la taille vers la d.d.p. de présence de taille finale. Autrement dit, l'écart type de la loi de forçage détermine la durée du régime transitoire. Si l'écart type augmente le régime stationnaire est atteint plus rapidement. Les changements attribués à K_2 sont donc cohérents avec l'évolution réelle du système.

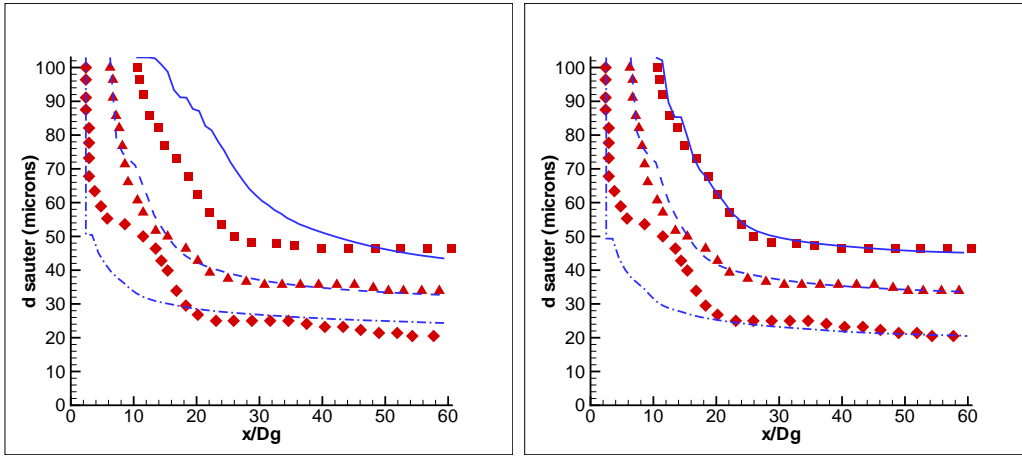


FIG. 5.12 – Évolution en temps du diamètre de SAUTER pour trois vitesses du jet d'eau. —, présent modèle $U_l = 0.55m/s$; ■, modèle de APTE et al. (2003) $U_l = 0.55m/s$; - - -, présent modèle $U_l = 0.31m/s$; ▲, modèle de APTE et al. (2003) $U_l = 0.31m/s$; — · · —, présent modèle $U_l = 0.13m/s$; ◆, modèle de APTE et al. (2003) $U_l = 0.13m/s$.

TAB. 5.5 – Modifications de K_2 et ν_c afin d'ajuster les évolutions du diamètre de SAUTER.

$U_{l1} = 0.55m/s$	$x_o = 2.5D_g$	$K_2 = 22.2$	$\nu_c = 2\nu_{ref}$
$U_{l2} = 0.31m/s$	$x_o = 6.4D_g$	$K_2 = 4.0$	$\nu_c = \nu_{ref}$
$U_{l3} = 0.13m/s$	$x_o = 10.4D_g$	$K_2 = 1.4$	$\nu_c = \nu_{ref}$

5.5.3 Fragmentation dans un jet coaxial, comparaison avec l'expérience de LASHERAS et al. (1998)

LASHERAS et al. (1998) étudient la fragmentation d'un jet liquide en un spray de gouttelettes. Le dispositif expérimental est constitué d'un jet liquide entouré par un jet d'air coaxial. Les diamètres du jet liquide et du jet d'eau sont donnés sur le tableau 5.5. Différents liquides (eau, solution d'éthanol à 95% et glycérine blanche) ont été utilisés mais nous ne présenterons ici que les résultats pour l'eau. Une caméra rapide associée à un flash est utilisée pour la visualisation du système. La vitesse des gouttelettes ainsi que leur taille sont mesurées par la technique d'anémométrie laser Doppler. Les mesures sont réalisées pour différentes vitesses du jet liquide (tableau 5.5).

Dans la partie d'atomisation secondaire de cette expérience, LASHERAS et al. (1998) constatent que la région de forte fragmentation est suivie d'une zone de coalescence. En effet, lorsqu'on s'éloigne de l'injection la turbulence diminue et la vitesse relative des gouttelettes diminue aussi. Le temps de contact augmente et devient, au delà d'une distance critique, suffisamment grand pour que deux gouttelettes en contact puissent rentrer en coalescence. Nous avons donc, utilisé cette expérience pour valider la fragmentation couplée à la coalescence dans notre modèle.

LASHERAS et al. (1998) affirment que, comme le jet d'air a un nombre de Reynolds très élevé ($R_e \approx 53000$), au centre du jet il existe une zone inertielle où le spectre d'énergie cinétique turbulente est conforme à l'hypothèse d'isotropie de KOLMOGOROV. Ils affirment aussi que dans ce cas la turbulence est entièrement caractérisée par le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε . D'autre part, dans leurs expériences ils n'ont pas caractérisé la turbulence du jet coaxial. Ainsi, pour la modélisation du transport des gouttelettes, nous prendrons dans une première approche un modèle stochastique avec une turbulence homogène, isotrope décroissante. Comme la seule information sur la turbulence de l'écoulement donnée par LASHERAS et al. (1998) est une estimation du taux de dissipation ε , c'est à travers celui-ci que toutes les autres grandeurs nécessaires pour le modèle stochastique seront déduites.

En estimant que le taux de dissipation turbulente dans le jet d'air est proportionnel au flux initial total d'énergie cinétique turbulente, LASHERAS et al. (1998) proposent la forme suivante pour ε :

$$\varepsilon \approx \frac{U_g^3}{D_g(1+m)}, \quad (5.67)$$

où m est le rapport de flux de masse entre le jet d'air et le jet d'eau :

$$m = \frac{\rho_l U_l D_l^2}{\rho U_g D_g^2}. \quad (5.68)$$

L'énergie cinétique turbulente sera exprimée de manière analogue à ε :

$$k = \frac{U_g^2}{1+m}. \quad (5.69)$$

Ainsi, si on utilise U_g et D_g comme deux grandeurs d'adimensionnalisation on obtient les expressions suivantes pour l'énergie cinétique turbulente et pour le taux de dissipation :

$$k_{ad} = \frac{1}{1+m} \text{ et } \varepsilon_{ad} = \frac{1}{1+m}. \quad (5.70)$$

Dans leurs expériences, LASHERAS et al. (1998) font varier la vitesse d'injection du jet liquide. Dans notre modèle, pour simuler les cinq différents cas, on fera varier ε suivant l'équation (5.67) et k suivant

TAB. 5.6 – Caractéristiques du jet coaxial étudié, LASHERAS et al. (1998).

$U_{l1} = 0.13m/s$	$x_o = 10D_g$	$d_{init} = 40\mu m$	$m = 0.38$	$\varepsilon_{ad} = 0.72$	$k_{ad} = 0.72$
$U_{l2} = 0.20m/s$	$x_o = 12D_g$	$d_{init} = 50\mu m$	$m = 0.58$	$\varepsilon_{ad} = 0.63$	$k_{ad} = 0.63$
$U_{l3} = 0.31m/s$	$x_o = 12D_g$	$d_{init} = 52\mu m$	$m = 0.91$	$\varepsilon_{ad} = 0.52$	$k_{ad} = 0.52$

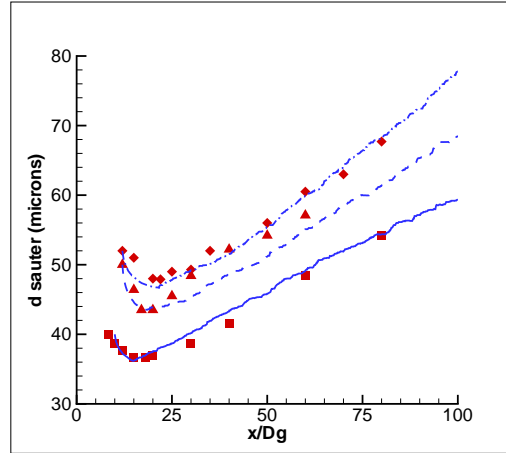


FIG. 5.13 – Évolution en temps du diamètre de SAUTER pour trois vitesses du jet d'eau. —, présent modèle $U_l = 0.13m/s$; ■, expérience de LASHERAS et al. (1998) $U_l = 0.13m/s$; - - -, présent modèle $U_l = 0.20m/s$; ▲, expérience de LASHERAS et al. (1998) $U_l = 0.20m/s$; - · · -, présent modèle $U_l = 0.31m/s$; ◆, expérience de LASHERAS et al. (1998) $U_l = 0.31m/s$.

suyant (5.69). Le tableau 5.6 résume les valeurs des grandeurs caractéristiques de la turbulence et de la taille initiale des gouttelettes pour les différents cas simulés.

La figure 5.13 représente l'évolution du diamètre de SAUTER pour les trois vitesses du jet liquide, $U_l = 0.13m/s$, $U_l = 0.20m/s$ et $U_l = 0.31m/s$. Ces évolutions ont été obtenues en fixant le nombre de WEBER critique de coalescence à 0.7 et le nombre de WEBER critique de fragmentation à 1. La première valeur du nombre de WEBER critique est en accord avec les résultats expérimentaux décrits dans le paragraphe 5.3. La valeur choisie pour le nombre de WEBER critique de fragmentation est assez faible par rapport aux observations expérimentales. Cela est due à la forte incertitude qui existe dans cette simulation sur la turbulence. Les valeurs choisies pour ε et k dérivent des estimations qui sont probablement sous-évaluées dans certaines régions. En augmentant la turbulence on peut arriver au même résultat en augmentant le nombre de WEBER critique de fragmentation. Tout de même, il est important de constater que le modèle reproduit bien le passage d'un régime où la fragmentation est prépondérante (décroissance du diamètre de SAUTER) à un régime où la coalescence l'emporte (augmentation du diamètre de SAUTER).

Nous nous intéressons aux problèmes de dispersion atmosphérique de panaches de gouttelettes. Dans ces conditions les vitesses relatives entre gouttelettes sont assez faibles et les régimes rencontrés sont plus proches du cas traité par HO & SOMMERFELD (2002) que des régimes relatifs à l'atomisation des sprays. Ainsi, dans ce qui suit, nous conserverons les nombres de WEBER critiques obtenus en

ajustant notre modèle par rapport au modèle de HO & SOMMERFELD (2002). Il est clair que le nombre de WEBER critique pour la coalescence ne doit plus être le seul paramètre défini si nous voulons généraliser totalement le modèle.

5.6 Application à la dispersion d'un panache de gouttelettes

Dans ce qui suit le modèle de coalescence/fragmentation est introduit dans la SGE comportant déjà :

- le transport de particules, équation (4.22),
- la modélisation du mouvement de sous-maille des particules transportées par les grandes échelles, équations (4.40) et (4.46),
- l'effet de la présence des particules sur l'écoulement moyen et la turbulence, équations (4.48) et (4.58).

La même modélisation que celle développée pour les particules solides est utilisée ici. La différence réside dans le fait que le modèle de collision est remplacée par le modèle de coalescence/fragmentation. L'ensemble est appliqué à l'étude de la dispersion atmosphérique d'un panache de gouttelettes. Malheureusement, nous n'avons pas trouvé de mesures in-situ ou des expériences en soufflerie relatives au transport des gouttelettes qui seraient suffisamment bien décrites pour nous permettre une validation supplémentaire directe. Les résultats des simulations sont donc confrontés aux expériences de FACKRELL & ROBINS (1982) sur le scalaire passif décrites dans le chapitre 3, paragraphe 3.4. Nous avons, tout de même essayé de choisir un panache de gouttelettes dont les caractéristiques (fraction volumique ou contenu en eau, distribution de taille des gouttelettes) restent proches de celles observées en sortie des aéroréfrigérants, HODIN et al. (1980) et HODIN (1982), dans des cas réels.

Dans un premier temps le panache de scalaire passif est remplacé par un panache de gouttelettes. Un facteur multiplicatif est appliqué au modèle de coalescence et à la modulation de l'écoulement par la présence des gouttelettes pour atteindre le contenu en eau de $0.04g/m^3$, souvent observé dans les panaches d'aéroréfrigérants, HODIN et al. (1980) et HODIN (1982). Dans ces conditions, la densité de gouttelettes est assez faible, le profil de vitesse moyenne et la turbulence ne sont pas modifiés par la présence des gouttelettes. La dynamique de la couche limite simulée reste la même que pour un scalaire passif, chapitre 2, paragraphe 2.8.1.

5.6.1 Distribution de taille, d.d.p. de vitesse relative et d.d.p. du nombre de WEBER

Des gouttelettes de $60\mu m$ et $12\mu m$ sont injectées à la source. Une fois le régime stationnaire atteint, les distributions de taille, les d.d.p. de présence de la vitesse relative ainsi que les d.d.p. de présence du nombre de WEBER à différentes sections de la source, pour les deux cas ($60\mu m$ et $12\mu m$) sont représentées sur les figures 5.14 et 5.15, respectivement. La distribution de taille en régime stationnaire à différentes sections est la même que la distribution de taille initiale. Même si localement les vitesses relatives sont suffisantes pour que la coalescence puisse avoir lieu, le contenu en eau des panaches est faible et les gouttelettes ne rentrent pas en collision. Dans ce qui suit, nous allons analyser les résultats relatifs à la concentration moyenne, à la variance de la concentration et au flux de masse des gouttelettes.

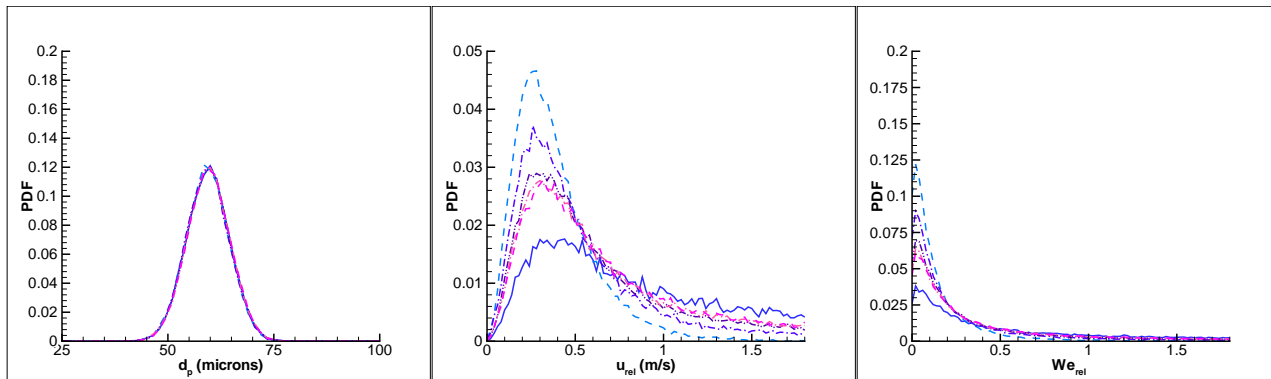


FIG. 5.14 – Distribution de taille, d.d.p. de vitesse relative et d.d.p. du nombre de WEBER pour les gouttelettes de $d_p = 60\mu m$, à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$.

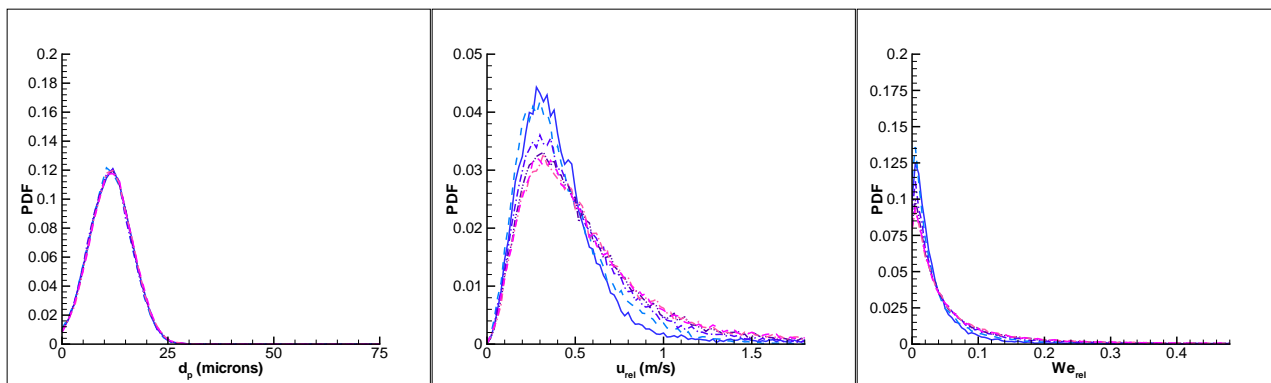


FIG. 5.15 – Distribution de taille, d.d.p. de vitesse relative et d.d.p. du nombre de WEBER pour les gouttelettes de $d_p = 12\mu m$, à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$.

5.6.2 Concentration moyenne

De même que pour le scalaire passif, les profils de concentration moyenne de gouttelettes à différentes distances de la source sont représentés sur la figure 5.16. On constate qu'à partir de $x = 2\delta$ les gouttelettes de $60\mu m$ tombent au sol. Le panache contenant des gouttelettes de $12\mu m$ garde la forme d'un panache élevé, même si par rapport au scalaire passif, les gouttelettes de $12\mu m$ sont moins dispersées loin du sol. Il est important de remarquer que la taille des gouttelettes constituant le panache peut modifier complètement le comportement de celui-ci. Il serait intéressant d'étudier un cas avec deux sources où la nouvelle source introduite serait différente de celle qui est étudiée ici. Dans des conditions favorables à la coalescence (grande fraction volumique des gouttelettes et faibles vitesses relatives, comme dans le cas présenté dans l'annexe IV), un panache qui se comporte initialement comme un scalaire passif peut retomber au sol assez rapidement. Inversement, un panache qui a plutôt tendance à retomber au sol peut, si la fraction volumique est suffisante et si les vitesses relatives deviennent importantes, voir la création de gouttelettes de plus en plus petites. Ces petites gouttes ne sédimentent plus et le polluant contenu dans les gouttes sera transporté plus loin.

5.6.3 Variance de concentration

Les profils de variance de concentration pour les deux panaches de gouttelettes à différentes distances de la source sont illustrés sur la figure 5.17. De même que pour la concentration, les caractéristiques des gouttelettes de $60\mu m$ diffèrent de celles du scalaire passif alors que les profils des gouttelettes de $12\mu m$ s'en approchent. On constate cependant, que pour le panache de $12\mu m$, alors que le profil de concentration moyenne à la quatrième station ne diffère pas du profil de scalaire passif, le profil de variance s'écarte du profil de variance du scalaire passif. A la quatrième station le profil de variance du scalaire passif ressemble au profil correspondant de concentration moyenne, tandis que le profil de variance des gouttelettes présente un pic au sol et ne ressemble pas au profil de concentration moyenne. Même si en moyenne, le comportement des très petites gouttelettes se rapproche de celui d'un scalaire passif, les moments d'ordre supérieur montrent qu'il y a des différences locales importantes. Ceci est fondamental dès lors que nous prendrons en compte des réactions de chimie atmosphérique.

5.6.4 Flux de masse

Les flux de masse de la phase liquide sont comparés aux flux de masse du scalaire passif à différentes distances de la source (figure 5.18). A la première station, alors que le panache de gouttelettes dans les deux cas ($60\mu m$ et $12\mu m$) est élevé, l'amplitude du flux de masse vertical est plus faible que pour un scalaire passif. Ceci est dû d'une part à l'inertie des gouttelettes qui a tendance à filtrer les fluctuations de vitesse et à diminuer le flux. D'autre part, la différence d'amplitude réside dans la nature même du flux. Tandis que le flux de masse du scalaire passif est calculé avec la vitesse de l'écoulement qui le transporte, le flux de masse des gouttelettes est obtenu à partir de la vitesse des gouttelettes. Lorsqu'on s'éloigne de la source, le flux de masse des gouttelettes de $12\mu m$ approche le flux de masse du scalaire alors que celui des gouttelettes de $60\mu m$ s'écrase vers zéro. Les gouttelettes de $60\mu m$ sédimentent et le flux de masse vertical devient nul. Ainsi, dans le cas de gouttelettes, le modèle de transport à gradient tel qu'il a été proposé pour le scalaire passif (chapitre 3, paragraphe 3.4.4) doit être fonction du paramètre de gravité ou de la vitesse de chute des gouttelettes.

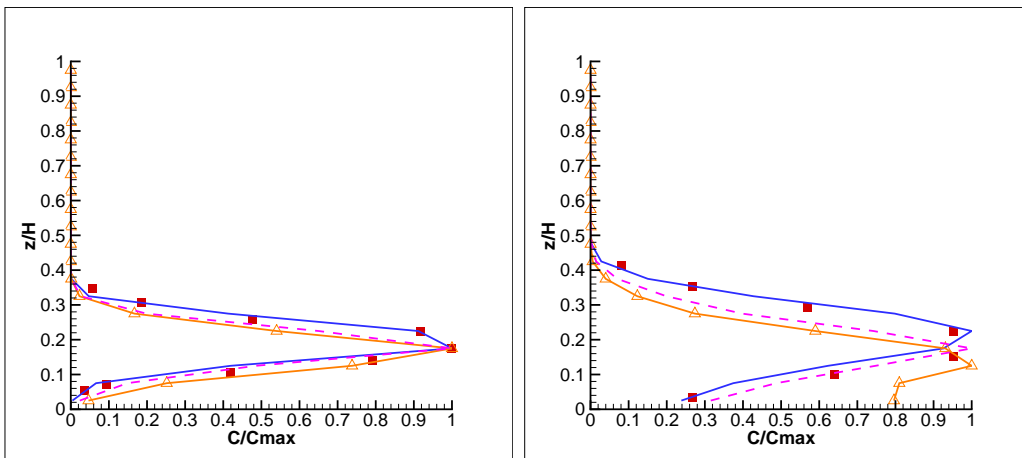
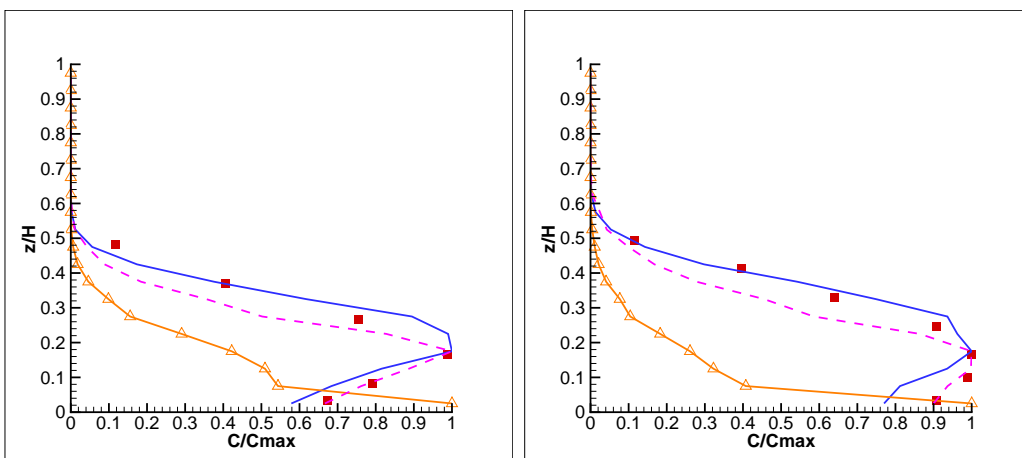
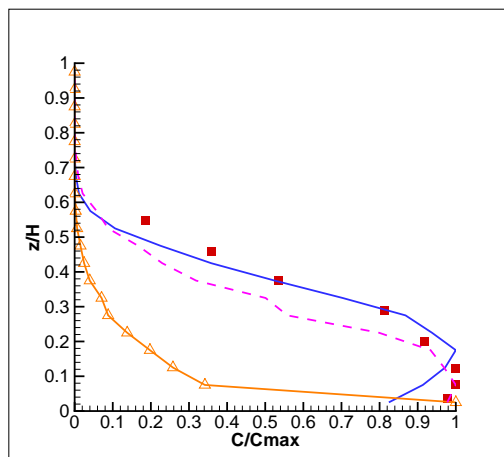
(a) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 0.96\delta$ (b) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 1.92\delta$ (c) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 2.88\delta$ (d) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 3.83\delta$ (e) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 4.79\delta$

FIG. 5.16 – Profil de concentration moyenne de gouttelettes rapportée à sa valeur maximale à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$. —, ARPS scalaire passif; - - -, Δ , ARPS gouttelettes $60\mu\text{m}$; - - -, ARPS gouttelettes $12\mu\text{m}$; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) pour le scalaire passif.

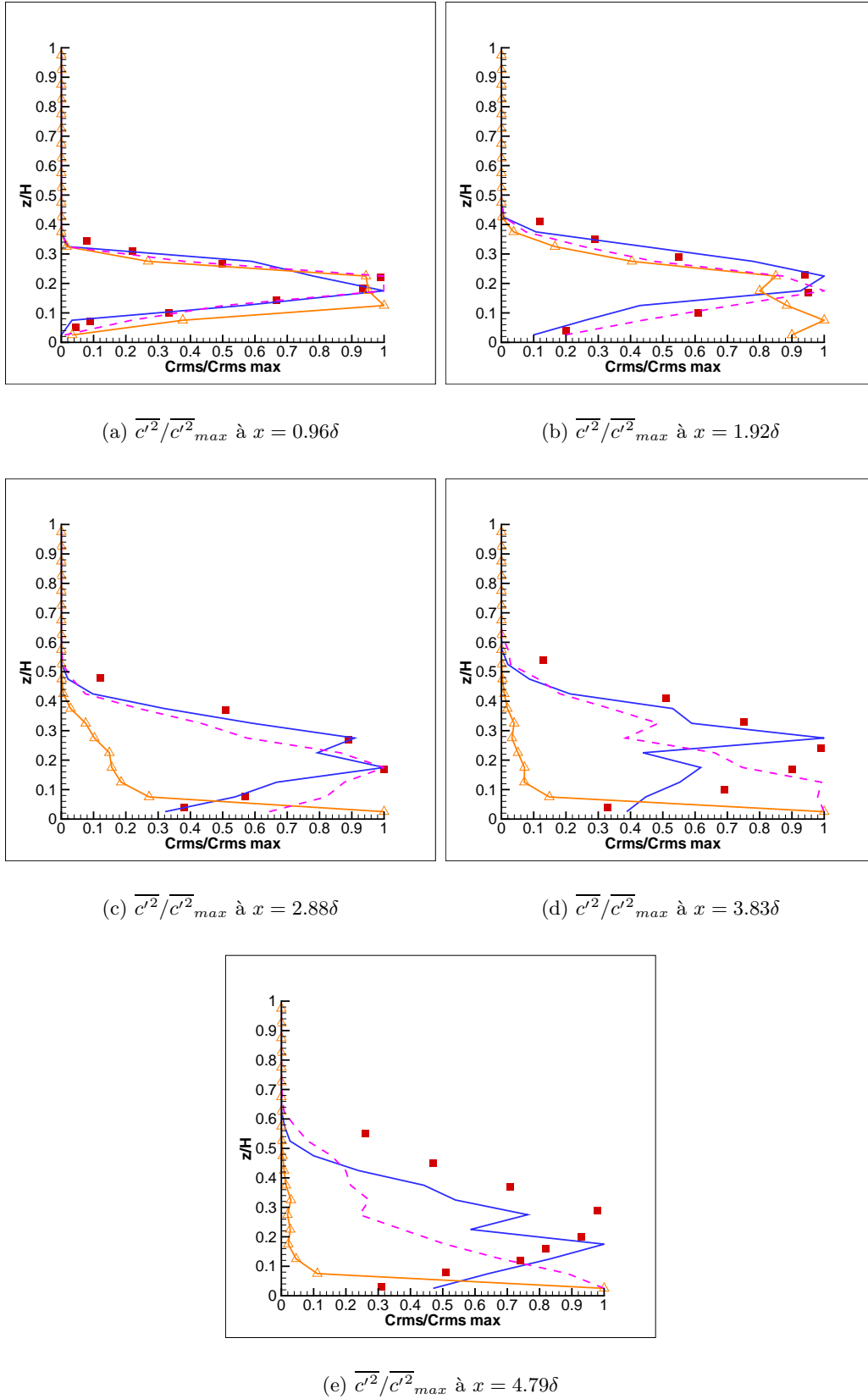


FIG. 5.17 – Profils verticaux de variance de concentration des gouttelettes rapportée à sa valeur maximale à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$. —, ARPS scalaire passif; - - - -, Δ , ARPS gouttelettes $60\mu m$; - - - -, ARPS gouttelettes $12\mu m$; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) pour le scalaire passif.

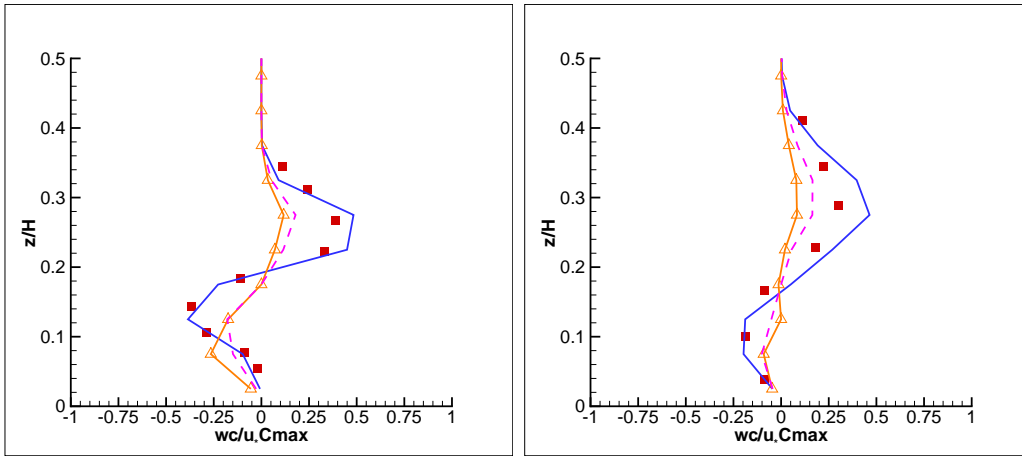
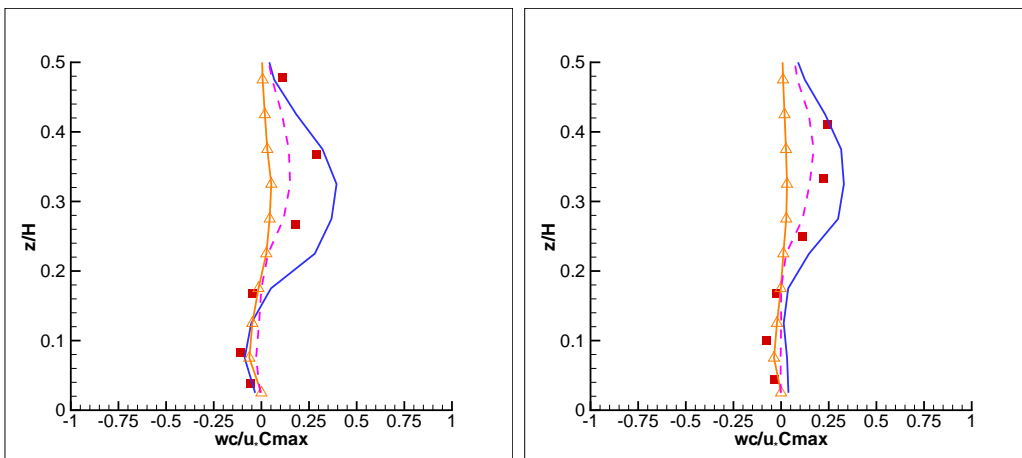
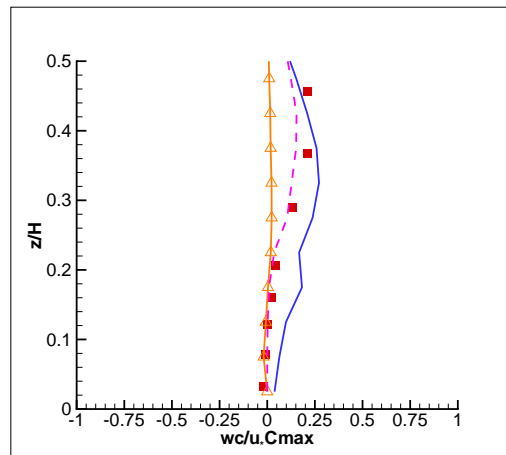
(a) $\overline{w\bar{c}}/u_*\bar{C}_{max}$ à $x = 0.96\delta$ (b) $\overline{w\bar{c}}/u_*\bar{C}_{max}$ à $x = 1.92\delta$ (c) $\overline{w\bar{c}}/u_*\bar{C}_{max}$ à $x = 2.88\delta$ (d) $\overline{w\bar{c}}/u_*\bar{C}_{max}$ à $x = 3.83\delta$ (e) $\overline{w\bar{c}}/u_*\bar{C}_{max}$ à $x = 4.79\delta$

FIG. 5.18 – Profils verticaux de flux de masse des gouttelettes à $x = 0.96\delta$, $x = 1.92\delta$, $x = 2.88\delta$, $x = 3.83\delta$ et $x = 4.79\delta$. —, ARPS scalaire passif; - - -, Δ , ARPS gouttelettes $60\mu m$; - - -, ARPS gouttelettes $12\mu m$; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) pour le scalaire passif.

Conclusion

La coalescence et la fragmentation des gouttelettes sont prises en compte par un modèle probabiliste inspiré du modèle d'atomisation secondaire de APTE et al. (2003). Dans ce modèle, la coalescence et la fragmentation sont considérées comme un processus discret et aléatoire sous l'hypothèse de symétrie d'échelles. Dans ces conditions, à chaque pas de temps, la distribution de taille des gouttelettes au sein d'une maille est donnée par la solution d'une équation de FOKKER-PLANCK.

Le modèle de coalescence/fragmentation développé ici diffère du modèle d'atomisation secondaire de APTE et al. (2003) car on réalise un appariement de gouttelettes. Dans notre cas, ce ne sont pas les forces aérodynamiques qui sont à l'origine principal de la fragmentation ou de la coalescence. Le mécanisme moteur est le mouvement relatif des gouttelettes (en l'essence la turbulence en fait partie) et leur contact, comme décrit par les expériences citées dans le paragraphe (5.3).

Le modèle de coalescence/fragmentation est introduit dans la SGE comportant déjà l'équation de transport des particules (4.22), la modélisation sous-maille de la vitesse des gouttelettes (4.40) et (4.46), et le retour des particules sur l'écoulement moyen et sur la turbulence (4.48) et (4.58). L'ensemble est appliqué à l'étude de la dispersion atmosphérique d'un panache de gouttelettes. Par défaut d'expériences en soufflerie ou de mesures in-situ, les résultats des simulations sont comparés aux résultats expérimentaux de FACKRELL & ROBINS (1982) relatifs à la dispersion d'un scalaire passif.

Même dans le cas de très petites gouttes, les caractéristiques statistiques du panache sont différentes de celles d'un panache de scalaire passif. Pour les gouttelettes de $60\mu m$, la différence apparaît dès les profils de concentration moyenne. Pour les gouttelettes de $12\mu m$, les profils de concentration moyenne ressemblent à ceux d'un scalaire passif, néanmoins les différences résident dans les moments d'ordre supérieur (écart type, ...). Ceci traduit le fait que les petites gouttes peuvent se comporter comme un scalaire passif en moyenne, tout en gardant des différences locales importantes. Dans des conditions favorables à la coalescence (grande fraction volumique des gouttelettes et faibles vitesses relatives, comme dans le cas présenté dans l'annexe IV), un panache qui se comporte initialement comme un scalaire passif peut retomber au sol assez rapidement. Inversement, un panache qui a plutôt tendance à retomber au sol peut, si la fraction volumique est suffisante et si les vitesses relatives deviennent importantes voir la création de gouttelettes de plus en plus petites. Ces petites gouttes ne sédimenteront plus et le polluant sera transporté plus loin.

La complexité des écoulements atmosphériques exige la résolution instationnaire et locale de la dynamique. De ce point de vue, la SGE est un outil bien adapté car elle permet d'obtenir en chaque point du maillage les champs de vitesse instantanés pour des écoulements à grand nombre de REYNOLDS. D'autre part, bien que coûteux en temps de calcul, le suivi lagrangien des particules solides ou liquides nous permet d'étudier en détails les interactions entre la turbulence atmosphérique et les polluants. Dans ce contexte, la modélisation de la coalescence/fragmentation par un modèle probabiliste constitue un premier pas vers la prise en compte de la physico-chimie des aérosols atmosphériques. En particulier, le modèle de coalescence/fragmentation développé dans cette étude présente un avantage car il est basé sur l'appariement des particules permettant ainsi la prise en compte directe de tout phénomène de contact au travers de paramètres définis plutôt qu'au travers d'une approche déterministe complexe.

Chapitre 6

Analyse du transport de particules solides ou liquides dans un écoulement de couche limite

Introduction

Dans les chapitres précédents, nous avons vu le transport des particules solides et des gouttelettes à l'aide d'une SGE ainsi qu'une modélisation des interactions interparticulaires (collisions dans le cas des particules solides et coalescence/fragmentation pour les gouttelettes). Deux cas de figure ont été étudiés :

- la dispersion de particules solides issues du sol (NALPANIS et al. (1993)) et d'une source au sol (TANIÈRE & OESTERLÉ (1997)),
- la dispersion de gouttelettes d'eau issues d'une source ponctuelle élevée.

Afin de mieux comprendre les mécanismes de transport des particules solides ou liquides dans un écoulement de couche limite, dans ce chapitre nous étudierons l'évolution d'un ensemble de particules qui initialement sont distribuées uniformément dans l'écoulement. En raison de la durée des calculs, les particules sont réparties au début uniquement sur le premier tiers de la couche limite. Un ensemble de 250.000 particules est suivi. Les particules sortant du domaine sont injectées à l'origine sauf à la paroi où nous considérons que le rebond a lieu. Le seul cas des particules solides est traité ici car on ne s'intéresse qu'aux mécanismes de transport et non plus aux interactions entre particules. Celles-ci ont déjà été traitées dans les chapitres précédents (chapitre 4 pour les collisions entre particules solides et chapitre 5 pour la coalescence et la fragmentation des gouttelettes).

L'analyse de l'évolution d'un ensemble de particules solides initialement distribuées de façon uniforme est tout particulièrement intéressante pour l'étude de la dispersion atmosphérique des grands nuages de pollution. Ce cas test simple représente une première approche dans la compréhension des phénomènes ayant lieu à l'intérieur des vents de sable ou lorsque un brouillard se lève sous les effets du vent. Les zones de concentration et sédimentation préférentielle représentent un intérêt majeur pour l'étude car elles peuvent être à l'origine des pics de pollution dans une atmosphère peu polluée, par ailleurs.

Dans ce chapitre, trois cas tests sont choisis pour l'analyse :

- particules solides avec un diamètre de $37\mu m$,

- particules solides avec un diamètre de $7.4\mu m$,
- particules solides avec un diamètre de $37\mu m$, transportées uniquement par la SGE sans le modèle stochastique de sous-maille.

Le choix de ces cas tests sera justifié plus bas. L'écoulement porteur est celui de la couche limite du chapitre 2.

Nous analyserons d'abord le champ de vitesse de la couche limite à l'aide des autocorrélations spatiales en deux dimensions des trois composantes de la vitesse (u, v, w) . Les résultats sont confrontés aux expériences en couche limite lisse et rugueuse de KROGSTAD & ANTONIA (1994). Les structures moyennes déduites des autocorrélations dans différentes régions de l'écoulement sont répertoriées. L'évolution du champ de concentration pour les trois cas tests cités ci-dessus est étudiée. Enfin, des conclusions sur les mécanismes de transport et la forme des zones de concentration privilégiée sont établies.

6.1 Analyse du champ de vitesse

Afin de procéder à l'étude des mécanismes de transport des particules solides, nous allons, tout d'abord décrire l'écoulement porteur. Il s'agit ici de la couche limite déjà étudiée dans le chapitre 2. Les champs de vitesse instantanée sont visualisés. Les autocorrélations spatiales en deux dimensions des trois composantes (u, v, w) de la vitesse dans différentes régions caractéristiques de l'écoulement sont comparées avec les résultats expérimentaux de KROGSTAD & ANTONIA (1994). La taille caractéristique des structures moyennes déduites des autocorrélations dans différentes régions de l'écoulement est obtenue.

6.1.1 Description du champ de vitesse

Sur la figure 6.1 est représenté le champ instantané de la composante longitudinale de la vitesse. On constate différentes formes du champ de vitesse suivant la région de l'écoulement.

Plan parallèle à la paroi, $z/\delta = 0.04$

Près de la paroi, à $z/\delta = 0.04$, le champ de vitesse longitudinale est périodique dans la direction transverse à l'écoulement. La périodicité est de $\Delta y \sim 0.25\delta$.

Plan parallèle à la paroi, $z/\delta = 0.3$

Lorsqu'on s'éloigne de la paroi, la périodicité en $\Delta y \sim 0.25\delta$ augmente et atteint $\Delta y \sim \delta$ à $z/\delta = 0.3$, comme on peut le constater sur la figure 6.1(d). Cependant, que ce soit à $z/\delta = 0.3$ ou près de la paroi dans la direction de l'écoulement on discerne une périodicité en $\Delta x \sim 0.9\delta$ des régions de vitesse longitudinale forte.

Les observations précédentes sont quantifiées dans ce qui suit.

6.1.2 Autocorrélations du champ de vitesse et comparaisons avec les résultats expérimentaux de KROGSTAD & ANTONIA (1994)

Afin de quantifier les observations décrites plus haut, les autocorrélations spatiales en deux dimensions des trois composantes du champ de vitesse dans le plan (xy) et dans le plan (xz) sont réalisées.

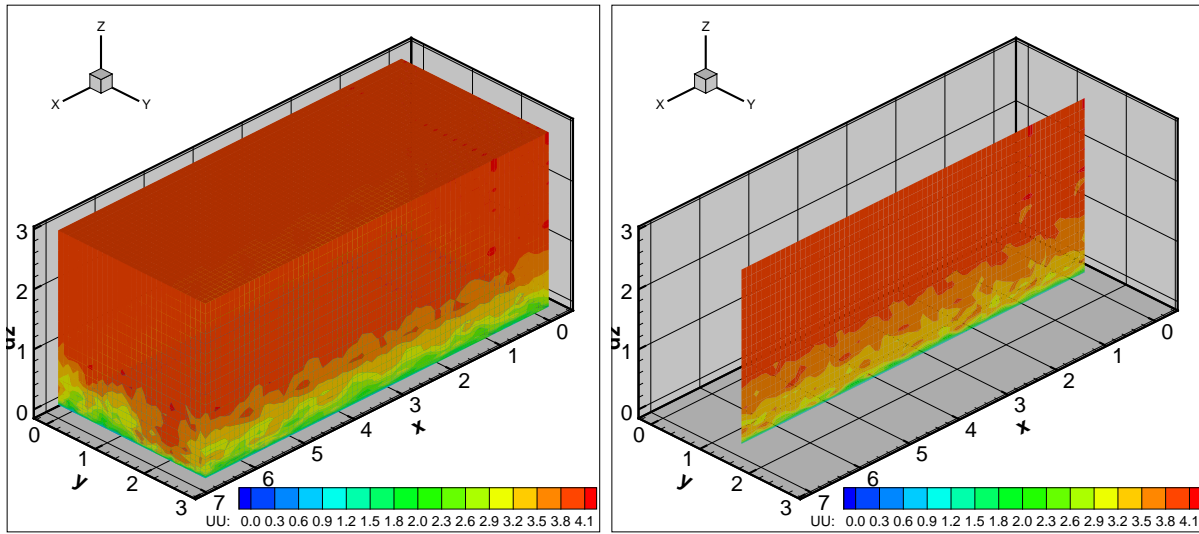
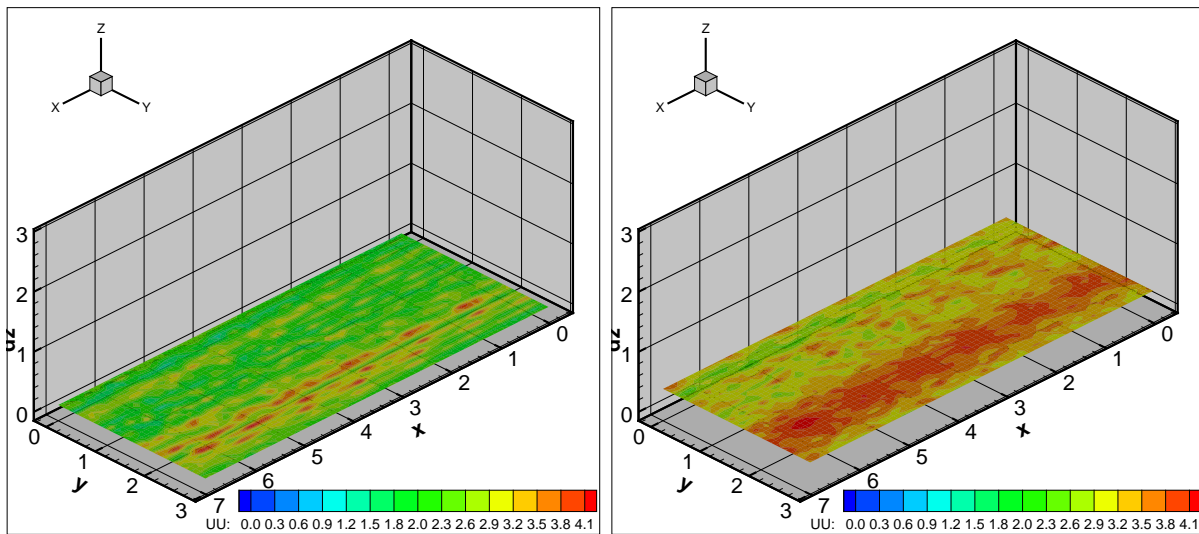
(a) u dans tout le domaine(b) u à $y/\delta = 1.3$ (c) u à $z/\delta = 0.04$ (d) u à $z/\delta = 0.3$

FIG. 6.1 – Visualisation de la composante longitudinale de la vitesse instantanée, u , sur trois plans correspondant à $y/\delta = 1.3$, $z/\delta = 0.04$ et $z/\delta = 0.3$.

TAB. 6.1 – Caractéristiques des deux couches limites étudiées par KROGSTAD & ANTONIA (1994).

	Couche limite rugueuse	Couche limite lisse
Vitesse extérieure	$U_e = 10.9m/s$	$U_e = 20m/s$
Vitesse de frottement	$u_* = 0.42m/s$	$u_* = 1m/s$
Hauteur de couche limite	$\delta = 66mm$	$\delta = 75mm$

L'autocorrélation est calculée d'après :

$$\rho_{u'_i u'_j}(\vec{x}', t) = \frac{u'_i(\vec{x}, t) u'_j(\vec{x} + \vec{x}', t)}{u'_i u'_j} . \quad (6.1)$$

La moyenne est réalisée sur une durée de $10T_L$ à partir des échantillons espacés de $1/3T_L$. Étant donné que le maillage est raffiné en tangente hyperbolique à la paroi, les champs des trois composantes de la vitesse sont projetés sur un maillage régulier de $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.05m = 0.04\delta$. Notons qu'à la paroi, dans la direction verticale, ceci correspond à un maillage plus grossier que le maillage de la simulation, alors que loin de la paroi et dans les directions longitudinales et transverses, cette projection implique un maillage plus raffiné que la résolution du calcul (chapitre 2, paragraphe 2.8.1). Les points entre les mailles sont obtenus à l'aide des barycentres.

Dans ce qui suit, les autocorrélations spatiales obtenues à partir de nos simulations numériques sont confrontées aux expériences de KROGSTAD & ANTONIA (1994) relatives à une couche limite lisse et à une couche limite rugueuse.

Caractéristiques de l'expérience de KROGSTAD & ANTONIA (1994)

KROGSTAD & ANTONIA (1994) étudient la structure d'une couche limite lisse et d'une couche limite rugueuse à l'aide de plusieurs fils chauds. Ils s'intéressent plus particulièrement aux effets de la rugosité sur l'inclinaison des structures dans la direction verticale à la paroi ainsi que sur les autocorrélations en deux points de la vitesse. Les mesures sont réalisées à l'aide d'un peigne de huit fils chauds, pouvant être disposé parallèlement ou perpendiculairement à la paroi. Le peigne peut couvrir $\pm 0.27\delta$ dans le plan (xy) et $0.02\delta - 0.55\delta$ dans le plan (xz) . Les mesures sont réalisées pour une couche limite lisse et une couche limite rugueuse. Les caractéristiques des deux couches limites figurent sur le tableau 6.1. La couche limite rugueuse est obtenue à l'aide d'un maillage de fils en acier ayant un diamètre de $d_m = 0.7mm = 0.009\delta$ et espacés de $3.18mm = 0.042\delta$. KROGSTAD et al. (1992) trouvent que cette rugosité correspond à une rugosité équivalente de type sable de $z_0 \sim 0.066\delta$. Notons que, comme décrit dans le chapitre 2, paragraphe 2.8.1, la couche limite dans nos simulations est de $\delta = 1.2m$, avec une vitesse extérieure de $U_e = 4m/s$ et une rugosité de type sable de $z_0 = 2 \times 10^{-4}\delta$.

Formes des isocontours d'autocorrélation, plan (xy) à $z = 0.23\delta$

Les isocontours de l'autocorrélation de vitesse $\rho_{u'u'}$ dans le plan (xy) à $z = 0.23\delta$ obtenus par nos simulations et par les mesures de KROGSTAD & ANTONIA (1994) pour la couche limite lisse et la couche limite rugueuse sont représentés sur les figures 6.2(a) et 6.2(b), respectivement. Dans les deux cas, l'isocontour $\rho_{u'u'} = 0.3$ obtenu par nos simulations est plus petit que celui de KROGSTAD & ANTONIA (1994). Cependant, la sous-estimation est plus faible lorsqu'on compare nos résultats à

la couche limite rugueuse. Pour l'isocontour le plus élevé $\rho_{u'u'} = 0.9$, dans les deux cas, nos résultats sont plus proches des résultats expérimentaux que pour les isocontours $\rho_{u'u'} = 0.3$ et $\rho_{u'u'} = 0.6$.

Les figures 6.2(c) et 6.2(d) représentent les isocontours de l'autocorrélation de vitesse transversale $\rho_{v'v'}$ dans le même plan. A nouveau, nos résultats sont plus proches de ceux de la couche limite rugueuse. On retrouve l'allure allongée des isocontours dans la direction transversale. Tout de même, les isocontours obtenus par nos simulations restent assez larges par rapport à ceux de KROGSTAD & ANTONIA (1994) pour la couche limite rugueuse dans la direction x . Ceci est dû à la nature différente de la rugosité des deux couches limites. En effet, dans notre cas il s'agit d'une rugosité de type sable alors que KROGSTAD & ANTONIA (1994) ont un maillage de fils d'acier.

Formes des isocontours d'autocorrélation, plan (xz)

Les isocontours de $\rho_{u'u'}$ et de $\rho_{w'w'}$ dans le plan (xz) sont représentés sur la figure 6.3. Ici les autocorrélations sont calculées sur tout le domaine en z , alors que sur la figure 6.4 les mêmes autocorrélations sont obtenues à partir des valeurs du champ de vitesse prises sur le premier tiers de la couche limite. Dans les deux cas, la taille de l'isocontour $\rho_{u'u'} = 0.6$ est sous-estimée alors que celle de l'isocontour $\rho_{u'u'} = 0.9$ est surestimée (figures 6.3(a) et 6.4(a)). Les isocontours de la vitesse verticale sont moins allongés que dans les expériences de KROGSTAD & ANTONIA (1994). Par ailleurs, lorsqu'on réduit le domaine de calcul des autocorrélations pour éviter la décroissance de l'inhomogénéité, on constate que les isocontours de $\rho_{w'w'}$ s'allongent perpendiculairement à la paroi approchant les résultats expérimentaux. Pour l'autocorrélation de u' , l'isocontour $\rho_{u'u'} = 0.1$ est réduit en taille alors qu'il était déjà sous-estimé par rapport aux observations expérimentales. Enfin, on constate que l'inclinaison des isocontours de $\rho_{u'u'}$ de nos simulation est proche de celle de KROGSTAD & ANTONIA (1994) pour le cas d'une couche limite lisse et vaut environ 18° .

Les écarts relatifs entre les résultats de nos simulations et les expériences de KROGSTAD & ANTONIA (1994) pour trois isocontours (0.3, 0.6 et 0.9) sont résumés dans les tableaux 6.2 et 6.3. Les pourcentages positifs représentent une surestimation des valeurs expérimentales alors que les pourcentages négatifs signifient une sous-estimation. Bien que sur les figures 6.2, 6.3 et 6.4, nos résultats semblent être du même ordre de grandeur que les résultats expérimentaux, on peut voir d'après les tableaux 6.2 et 6.3 que les pourcentages d'erreur sont conséquents. Ces écarts peuvent s'expliquer par des différences en termes de :

- résolution du champ de vitesse. KROGSTAD & ANTONIA (1994) utilisent un peigne de huit fils chauds alors que notre résolution numérique donne un champ plus détaillé,
- rugosité de la couche limite. Dans l'expérience de KROGSTAD & ANTONIA (1994), la rugosité est obtenue par un maillage de fils en acier alors que dans notre simulation numérique, la rugosité est de type sable.

Taille caractéristique des isocontours d'autocorrélation

Sur la figure 6.5 est représentée l'évolution de la taille en x et en y des isocontours $\rho_{u'u'} = 0.3$ et $\rho_{v'v'} = 0.3$ pour différentes distances à la paroi. Comme nous l'avons vu dans le paragraphe précédent, nos résultats sont plus proches des résultats expérimentaux de KROGSTAD & ANTONIA (1994) relatifs à la couche limite rugueuse. La taille en x de l'isocontour $\rho_{u'u'} = 0.3$ est légèrement sous-estimée par nos simulations près de la paroi. Plus haut, cette sous-estimation disparaît. Dans la direction y , par contre la sous-estimation persiste même lorsqu'on s'éloigne de la paroi. Pour la composante transverse, $\rho_{v'v'}$, les résultats de nos simulations sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux. On

TAB. 6.2 – Écart relatifs entre les résultats de nos simulations et les expériences de KROGSTAD & ANTONIA (1994) pour trois isocontours (0.3, 0.6 et 0.9) du plan (xy)

	Lisse	Rugueux
$\rho_{u'u'}=0.3$	$\delta x = -83\%$ $\delta y = -50\%$	$\delta x = -45\%$ $\delta y = -58\%$
$\rho_{u'u'}=0.6$	$\delta x = -70\%$ $\delta y = -62\%$	$\delta x = 20\%$ $\delta y = -50\%$
$\rho_{u'u'}=0.9$	$\delta x \sim 0\%$ $\delta y \sim 0\%$	$\delta x = 40\%$ $\delta y = -30\%$
$\rho_{v'v'}=0.3$	$\delta x = -30\%$ $\delta y \sim 0\%$	$\delta x = 50\%$ $\delta y = -7\%$
$\rho_{v'v'}=0.6$	$\delta x = 67\%$ $\delta y = 17\%$	$\delta x = 400\%$ $\delta y = 17\%$
$\rho_{v'v'}=0.9$	$\delta x = 50\%$ $\delta y \sim 0\%$	$\delta x = 25\%$ $\delta y \sim 0\%$

TAB. 6.3 – Écart relatifs entre les résultats de nos simulations et les expériences de KROGSTAD & ANTONIA (1994) pour trois isocontours (0.3, 0.6 et 0.9) du plan (xz)

	Lisse	Rugueux
$\rho_{u'u'}=0.3$	–	–
$\rho_{u'u'}=0.6$	$\delta x = -40\%$ $\delta y = -50\%$	$\delta x = -40\%$ $\delta y = 50\%$
$\rho_{u'u'}=0.9$	$\delta x = 400\%$ $\delta y = 50\%$	$\delta x = 175\%$ $\delta y \sim 0\%$
$\rho_{w'w'}=0.3$	$\delta x = 43\%$ $\delta y = 35\%$	$\delta x = 50\%$ $\delta y = 8\%$
$\rho_{w'w'}=0.6$	$\delta x = 25\%$ $\delta y = 7\%$	$\delta x = 150\%$ $\delta y = 43\%$
$\rho_{w'w'}=0.9$	$\delta x \sim 0\%$ $\delta y \sim 0\%$	$\delta x = 200\%$ $\delta y = 50\%$

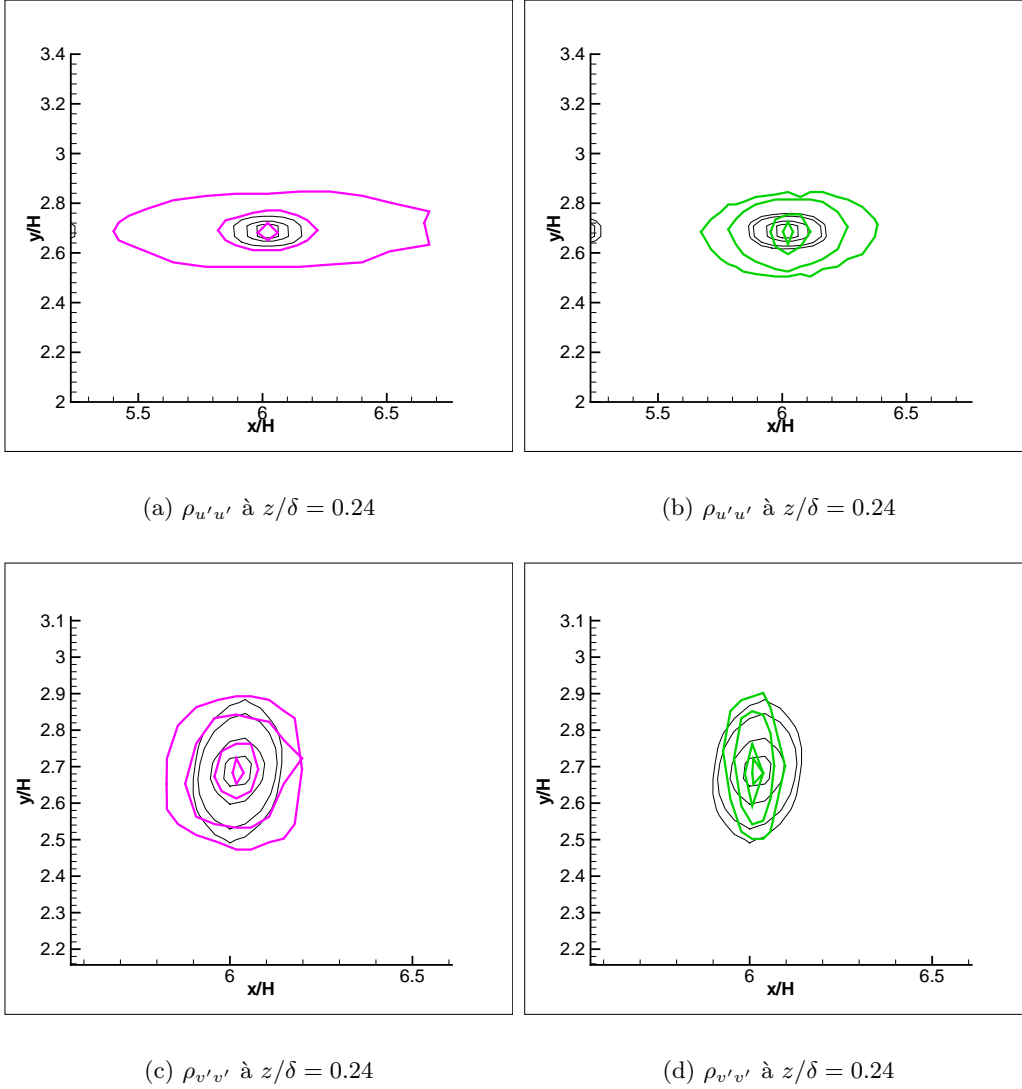


FIG. 6.2 – Isocontours de l'autocorrélation de la vitesse longitudinale u et transverse v dans le plan (xy) à $z/\delta = 0.24$. (a) : isocontours 0.3, 0.6 et 0.9 de $\rho_{u'u'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse ; Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite lisse. (b) : isocontours 0.2, 0.3, 0.6 et 0.9 de $\rho_{u'u'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse ; Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite rugueuse. (c) : isocontours 0.2, 0.3, 0.6 et 0.9 de $\rho_{v'v'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse ; Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite lisse. (d) : isocontours 0.2, 0.3, 0.6 et 0.9 de $\rho_{v'v'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse. Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite rugueuse.

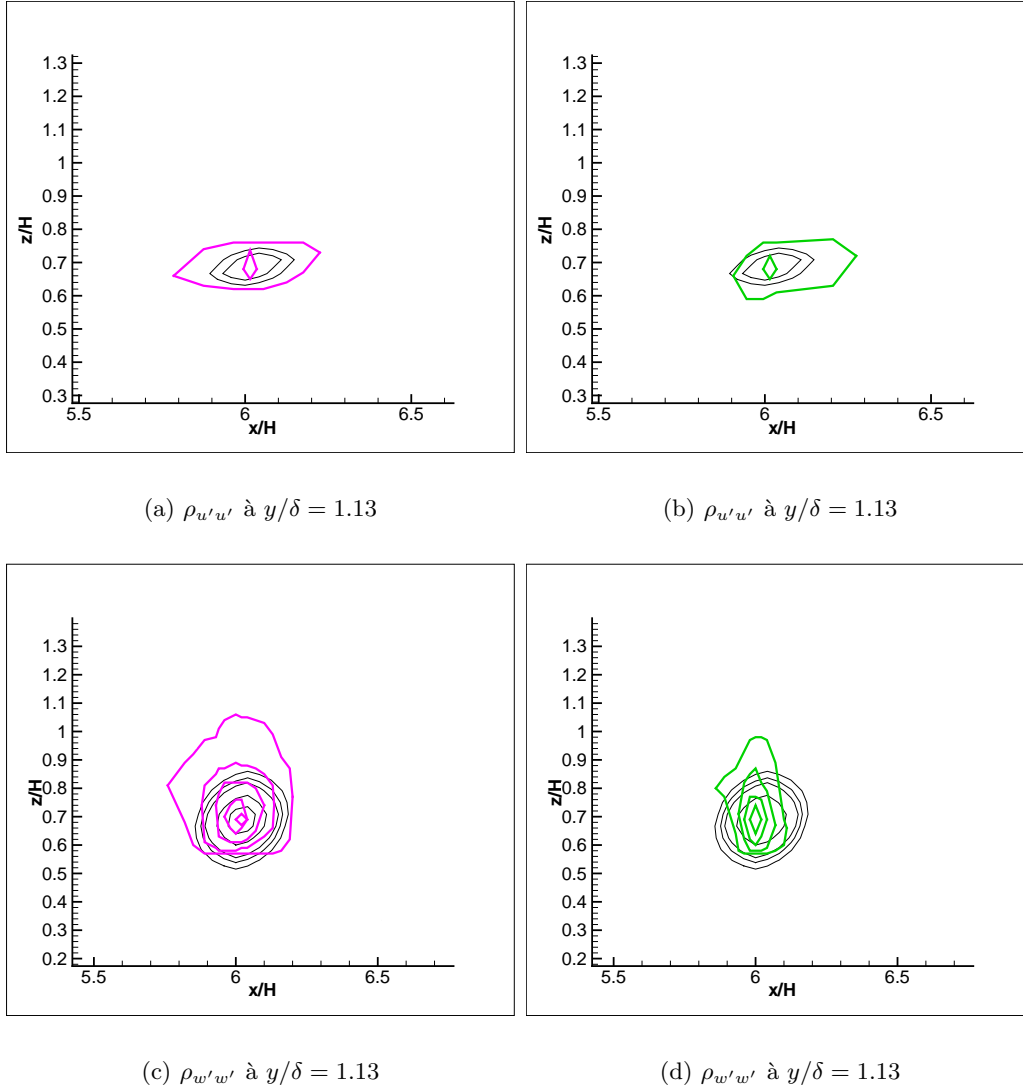


FIG. 6.3 – Isocontours de l'autocorrélation de la vitesse longitudinale u et verticale w dans le plan (xz) à $y/\delta = 1.13$. L'autocorrélation est calculée sur tout le domaine. (a) : isocontours 0.6 et 0.9 de $\rho_{u'u'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse; Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite lisse. (b) : isocontours 0.6 et 0.9 de $\rho_{u'u'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse; Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite rugueuse. (c) : isocontours 0.1, 0.2, 0.3, 0.6 et 0.9 de $\rho_{w'w'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse. Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite lisse. (d) : isocontours 0.1, 0.2, 0.3 et 0.6 de $\rho_{w'w'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse. Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite rugueuse.

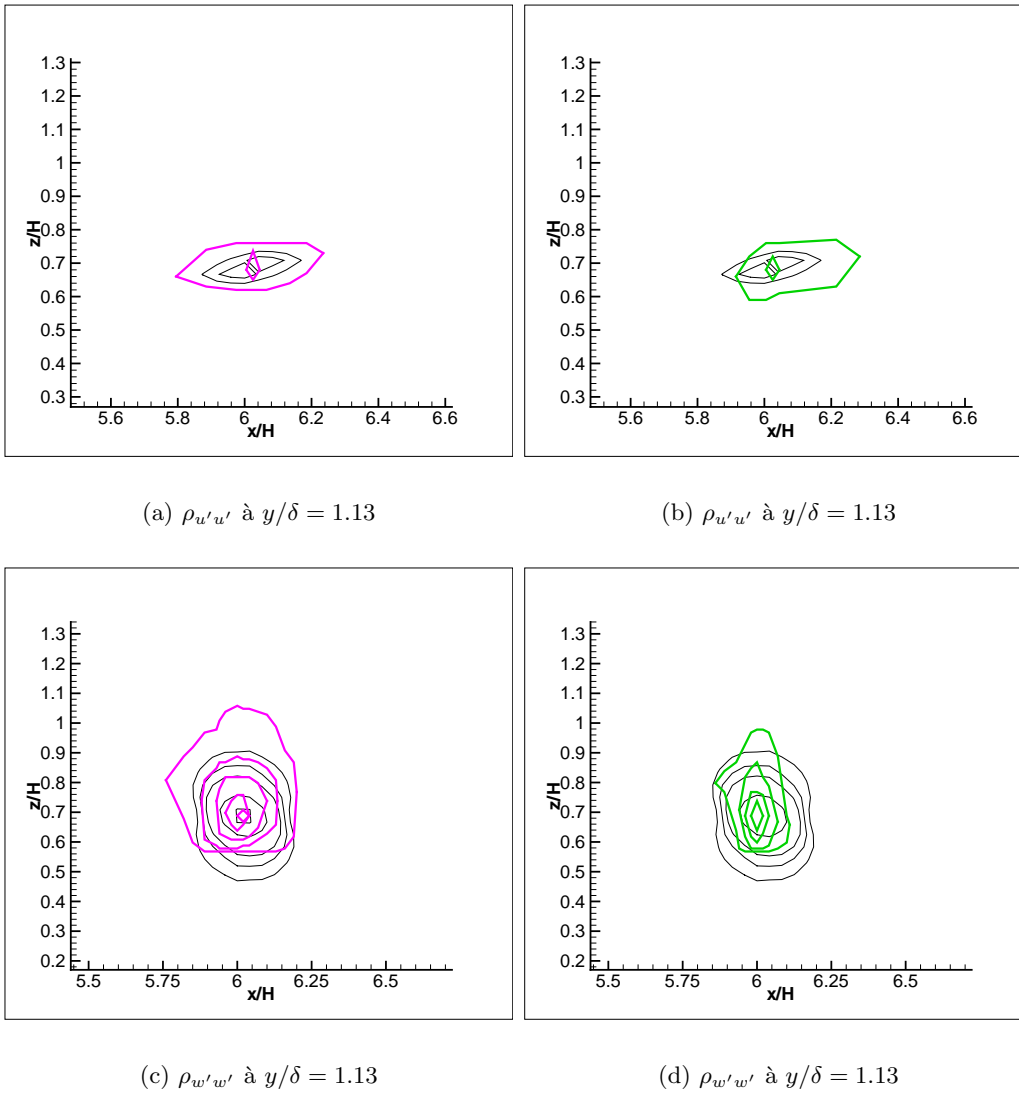


FIG. 6.4 – Isocontours de l'autocorrélation de la vitesse longitudinale u et verticale w dans le plan (xz) à $y/\delta = 1.13$. L'autocorrélation est calculée sur le premier tiers du domaine en z (proche paroi) uniquement. (a) : isocontours 0.6 et 0.9 de $\rho_{u'u'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse ; Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite lisse. (b) : isocontours 0.6 et 0.9 de $\rho_{u'u'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse ; Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite rugueuse. (c) : isocontours 0.1, 0.2, 0.3, 0.6 et 0.9 de $\rho_{w'w'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse ; Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite lisse. (d) : isocontours 0.1 0.2, 0.3 et 0.6 de $\rho_{w'w'}$. Traits fins - ARPS, couche limite rugueuse ; Traits - KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite rugueuse.

constate, que lorsque z augmente, la taille en x et en y de l'isocontour à 0.3 augmente. Ceci traduit l'augmentation de la taille des structures cohérentes lorsqu'on s'éloigne de la paroi de la couche limite.

Bien qu'il y ait des différences entre les résultats de nos simulations numériques et les expériences de KROGSTAD & ANTONIA (1994), l'analyse des isocontours d'autocorrélation nous a permis de réaliser une comparaison qualitative. Les résultats de nos simulations sont plus proches des expériences de KROGSTAD & ANTONIA (1994) relatives à la couche limite rugueuse. Dans le plan (xy) les isocontours de l'autocorrélation de la vitesse transverse sont allongées suivant y , même s'ils restent plus larges que ceux des expériences de KROGSTAD & ANTONIA (1994) dans le cas de la couche limite rugueuse. Dans le plan (xz) , de même que dans le plan (xy) , les isocontours de $\rho_{u'u'}$ sont plus petits que ceux des expériences. Par contre, les isocontours de $\rho_{w'w'}$, lorsque l'autocorrélation est réalisée pour un domaine proche de la paroi, commencent à présenter une élongation dans la direction transverse, rejoignant ainsi les isocontours expérimentaux relatifs à la couche limite rugueuse. Bien que généralement les résultats de nos simulations soient plus proches du cas rugueux des expériences KROGSTAD & ANTONIA (1994), l'inclinaison des isocontours de $\rho_{u'u'}$ dans le plan vertical est proche de 18° ce qui est entre la valeur observée par KROGSTAD & ANTONIA (1994) dans le cas lisse (10°) et dans le cas rugueux (38°). Les tailles en x et en y de l'isocontour 0.3 dans le plan (xy) et pour différentes distances à la paroi sont en bon accord avec les résultats expérimentaux relatifs à la couche limite en présence de rugosité. Malgré les différences observées par rapport à l'expérience, nous pouvons conclure que les structures observées par nos simulations ne proviennent pas d'un artefact numérique mais sont liées aux structures cohérentes présentes dans un écoulement de couche limite.

Une reconnaissance de structures tourbillonnaires à l'aide du critère $\Gamma_2(\vec{x})$ a été réalisée et les résultats figurent dans l'annexe V. Dans ce qui suit nous allons voir comment les particules solides se comportent vis à vis de ce champ de vitesse.

6.2 Analyse du champ de concentration de particules solides

Des particules solides sont introduites dans l'écoulement décrit dans le paragraphe précédent. Initialement, la distribution des particules est homogène. Les particules sont aléatoirement réparties sur le premier tiers de la couche limite à partir de la fin de la zone de pré-calcul :

$$1.05 \leq x_p \leq 7.2 , \quad (6.2)$$

$$0 \leq y_p \leq 3.0 , \quad (6.3)$$

$$0 \leq z_p \leq 0.4 . \quad (6.4)$$

Un ensemble de 250.000 particules est suivi. Comme dans le chapitre 4, pour le mouvement des particules solides, la SGE est couplée avec :

- l'équation de transport de particules, équation (4.22),
- la modélisation stochastique du transport de particules solides en sous-maille, équations (4.40) et (4.46),
- la modulation de l'écoulement par la présence des particules, équations (4.48) et (4.58),
- le modèle de collision, équations (4.62), (4.63), (4.64) et (4.65).

Une fois au sol on considère que les particules solides rebondissent en respectant les conditions de symétrie, comme dans la simulation de l'expérience de TANIÈRE & OESTERLÉ (1997), chapitre 4, paragraphe 4.6.4.

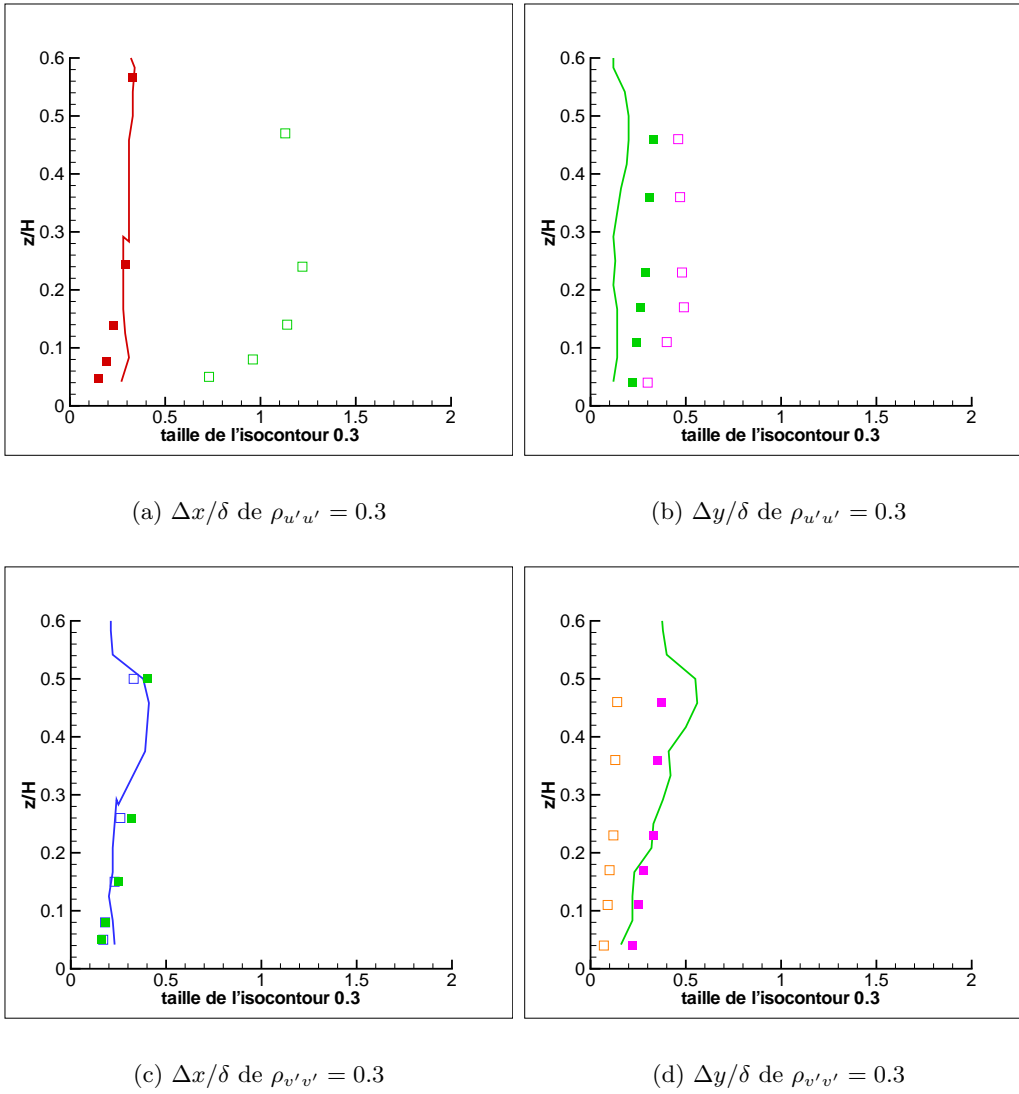


FIG. 6.5 – Évolution en fonction de z de la taille de l'isocontour 0.3 de l'autocorrélation de la vitesse longitudinale u et transverse v dans le plan (xy) . —, ARPS couche limite rugueuse; \square , KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite lisse; \blacksquare , KROGSTAD & ANTONIA (1994), couche limite rugueuse.

TAB. 6.4 – Caractéristiques des particules solides.

$d_p = 37\mu m$	$d_p = 7.4\mu m$
$\rho_p = 2650kg/m^3$	$\rho_p = 2650kg/m^3$
$\tau_p = 0.021s$	$\tau_p = 4.7 \times 10^{-4}s$
$St_L = 0.04$	$St_L = 0.002$
$St_\eta = 0.7$	$St_\eta = 0.03$
$\Phi_p = 1.2 \times 10^{-9}$	$\Phi_p = 9.5 \times 10^{-12}$
$d_{equivalent} = 60\mu m$	$d_{equivalent} = 12\mu m$

Caractéristiques des particules

L'étude est réalisée pour deux types de particules solides ayant des diamètres de $37\mu m$ et $7.4\mu m$. Les différentes caractéristiques des particules sont résumées dans le tableau 6.4. Les particules solides choisies ont les nombres adimensionnels équivalents des gouttelettes avec des diamètres $d_{equivalent} = 60\mu m$ et $d_{equivalent} = 12\mu m$, respectivement. Dans le chapitre 5, nous avons étudié la dispersion de gouttelettes de ces deux tailles en sortie d'une source élevée, et c'est pour cette raison qu'ici nous prenons des particules solides équivalentes.

Dans les deux cas étudiés, la fraction volumique des particules solides est très faible. Peu de collisions ont lieu et l'effet des particules sur l'écoulement principal et sur la turbulence est négligeable. Les collisions et le retour des particules sur l'écoulement sont cependant pris en compte afin d'avoir une modélisation complète du transport.

Un troisième cas test est introduit où les particules de $37\mu m$ sont transportées sans le modèle stochastique en sous-maille (équations (4.40) et (4.46)). Ce cas permet de voir dans quelle mesure la modélisation stochastique en sous-maille peut briser ou favoriser la concentration préférentielle des particules solides.

6.2.1 Description du champ de concentration

Nous allons tout d'abord présenter les visualisations instantanées du champ de concentration totale. Sur les figures 6.6, 6.7 et 6.8 sont représentés les champs instantanés de la concentration totale des particules solides pour les trois cas tests. Suivant la région de l'écoulement, on constate différentes formes du champ de concentration, proches des formes observées pour le champ de vitesse longitudinale (figure 6.1).

Plan transverse

Les particules de $37\mu m$ sédimentent et on constate que la concentration la plus forte pour ces particules est à la paroi. Avec ou sans le modèle stochastique en sous-maille le dépôt a lieu. Pour les particules de $7.4\mu m$, la sédimentation est moindre.

Plan parallèle à la paroi, $z/\delta = 0.04$

Près de la paroi, à $z/\delta = 0.04$, (figures 6.6(c), 6.7(c) et 6.8(c)) le champ de concentration est périodique dans la direction transverse à l'écoulement. La périodicité est de $\Delta y \sim 0.3\delta$ et elle est

équivalente à celle observée pour le champ de vitesse longitudinale (paragraphe 6.1.1). Cette périodicité est moins marquée pour les particules de $7.4\mu m$ car celles-ci sédimentent moins.

Plan parallèle à la paroi, $z/\delta = 0.3$

De même que pour la vitesse longitudinale, lorsqu'on s'éloigne de la paroi la périodicité en $\Delta y \sim 0.3\delta$ augmente et atteint $\Delta y \sim \delta$ à $z/\delta = 0.3$ (figures 6.6(d), 6.7(d) et 6.8(d)). A nouveau, cette périodicité est moins marquée pour les particules de $7.4\mu m$. Celles-ci sédimentent moins rapidement que les particules plus grandes. D'autre part, on peut voir que lorsqu'il n'y a pas de modélisation stochastique de sous-maille, les zones de fortes concentration sont plus marquées, aussi bien près de la paroi que loin de la paroi.

Sans le modèle stochastique en sous-maille pour le transport des particules solides, la périodicité transverse du champ de concentration est plus prononcée qu'avec le modèle. A la paroi, le modèle stochastique rajoute une composante aléatoire au champ de concentration, tout en respectant l'évolution de la concentration grande échelle. Dans une série de SGE *a priori* (décrites dans le chapitre 4 au paragraphe 4.2.1), POZORSKI et al. (2004) trouvent que le modèle stochastique en sous-maille "aléatorise" le champ de concentration des particules solides dont le nombre de STOKES St_η est proche de 1 et brise la concentration préférentielle. Pour le modèle stochastique employé ici, ce n'est pas le cas. Le modèle rajoute une composante aléatoire au champ de concentration mais les régions de concentration privilégiée restent assez marquées. Une explication peut résider dans la formulation du modèle stochastique. En effet, POZORSKI et al. (2004) utilisent un modèle stochastique homogène alors que le notre est inhomogène. Mais surtout, dans notre formulation, nous avons réécrit le modèle stochastique pour la décomposition propre de la SGE alors que POZORSKI et al. (2004) utilisent le modèle stochastique classique propre à la décomposition de REYNOLDS.

Par ailleurs, on constate que la région où la vitesse longitudinale est forte (figure 6.1(d)) correspond à la région où la concentration totale est faible (figures 6.6(d), 6.7(d) et 6.8(d)) et inversement. Les particules sédimentent plus rapidement dans les régions de vitesse longitudinale faible que dans les régions de vitesse longitudinale forte. Ainsi, à cause de la périodicité du champ de vitesse longitudinale, il apparaît une périodicité du champ de concentration. Cela démontre bien l'efficacité instantanée du modèle. La périodicité est entièrement liée à la sédimentation des particules. On constate que plus les particules sédimentent, plus la périodicité est marquée.

En conclusion, les visualisations du champ de concentration montrent que :

- à la paroi les champs de concentration pour les particules de $37\mu m$ présentent une périodicité en y de 0.3δ ,
- cette périodicité augmente lorsqu'on s'éloigne de la paroi pour atteindre δ à $z/\delta = 0.3$,
- la périodicité transverse du champ de concentration est plus prononcée sans le modèle stochastique en sous-maille et pour les particules de $37\mu m$,
- les champs de vitesse et de concentration présentent la même périodicité mais des amplitudes opposées (dans les régions où la vitesse est forte, la concentration est faible et inversement)

L'autocorrélation de concentration n'apporte pas des isocontours de concentration moyenne aussi nettes que pour la vitesse.

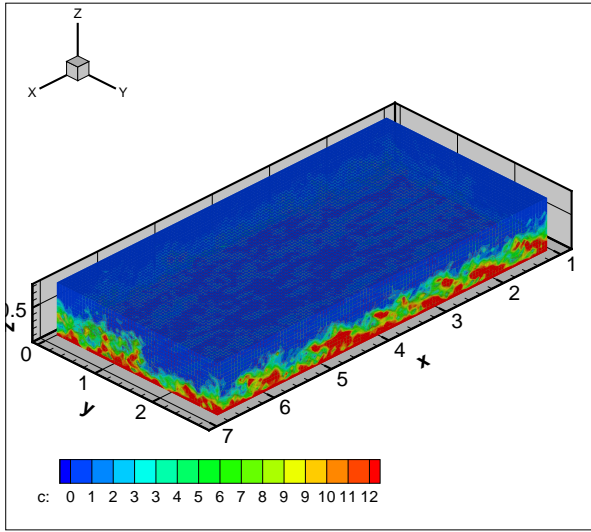
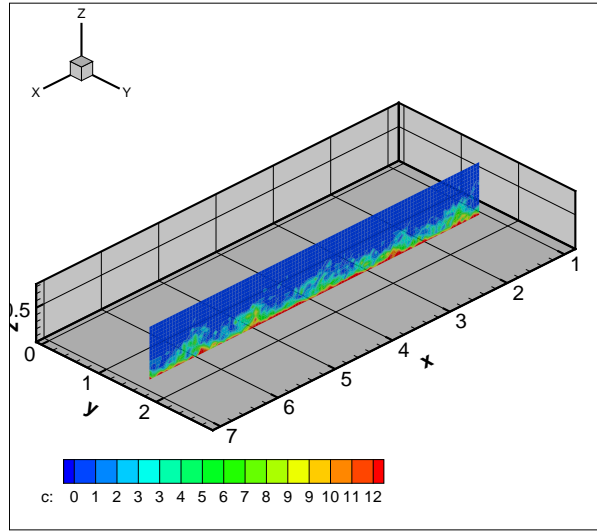
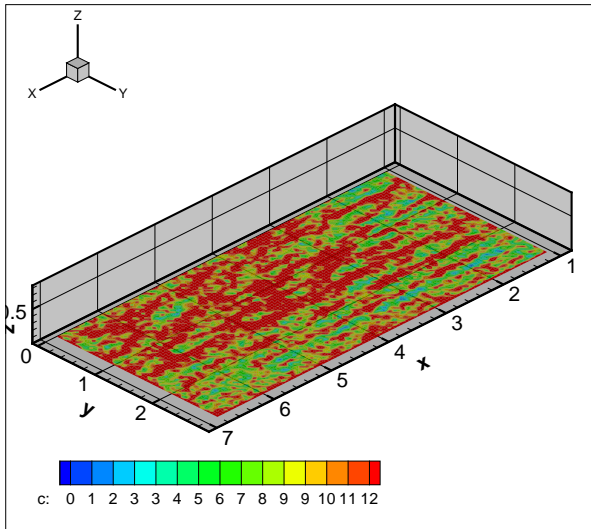
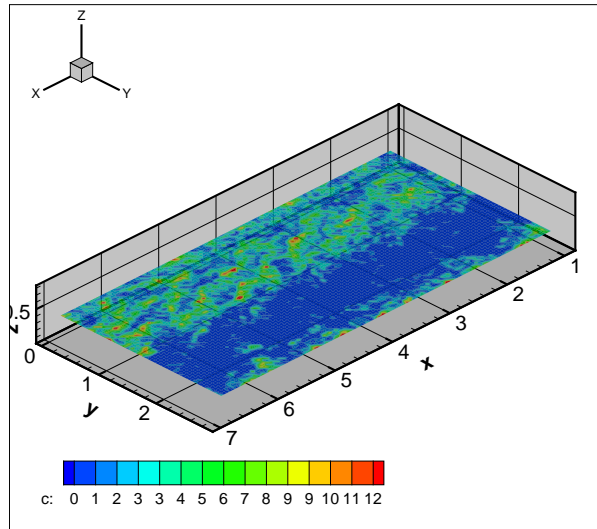
(a) c dans tout le domaine(b) c à $y/\delta = 1.3$ (c) c à $z/\delta = 0.04$ (d) c à $z/\delta = 0.3$

FIG. 6.6 – Visualisation de la concentration instantanée c de particules solides de $37\mu\text{m}$ de diamètre, sur trois plans correspondant à $y/\delta = 1.3$, $z/\delta = 0.04$ et $z/\delta = 0.3$.

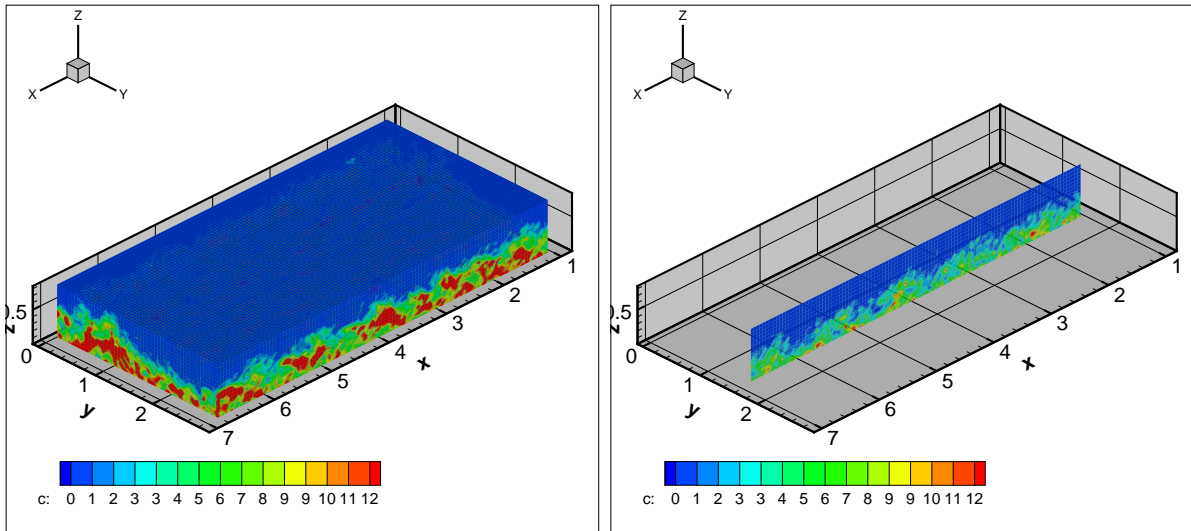
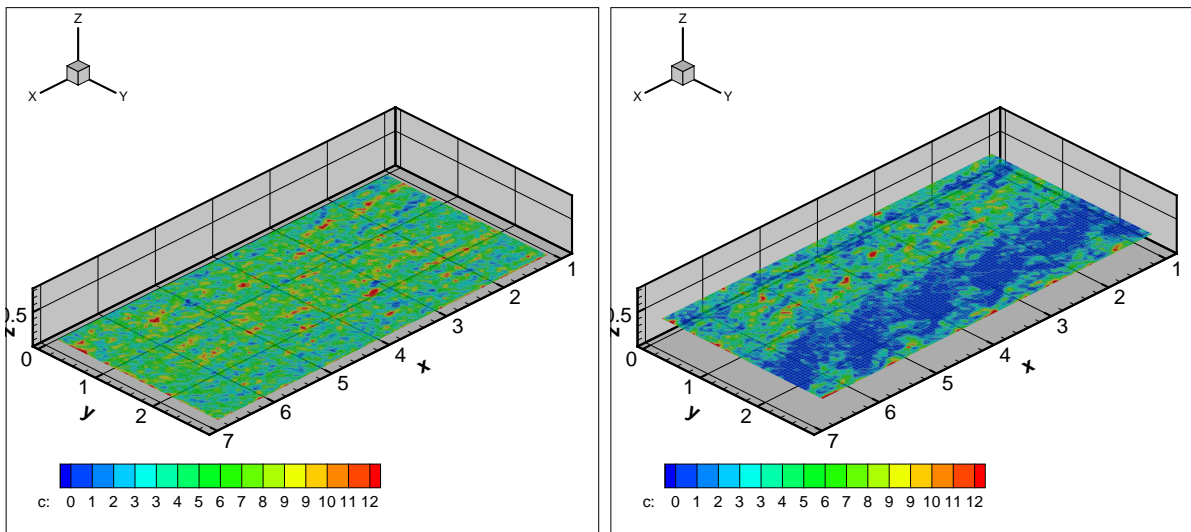
(a) c dans tout le domaine(b) c à $y/\delta = 1.3$ (c) c à $z/\delta = 0.04$ (d) c à $z/\delta = 0.3$

FIG. 6.7 – Visualisation de la concentration instantanée c de particules solides de $7.4\mu m$ de diamètre, sur trois plans correspondant à $y/\delta = 1.3$, $z/\delta = 0.04$ et $z/\delta = 0.3$.

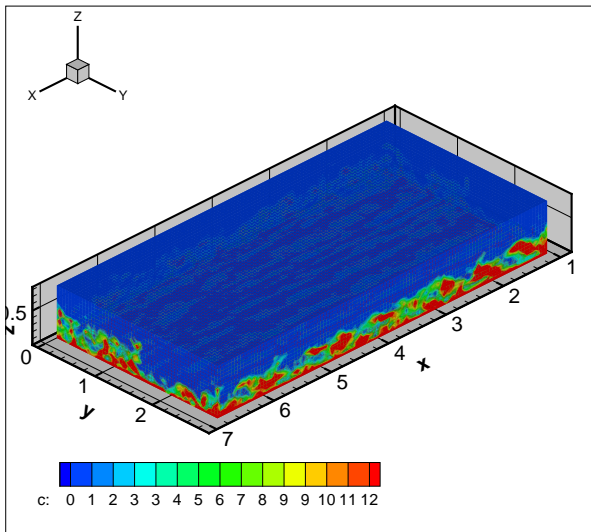
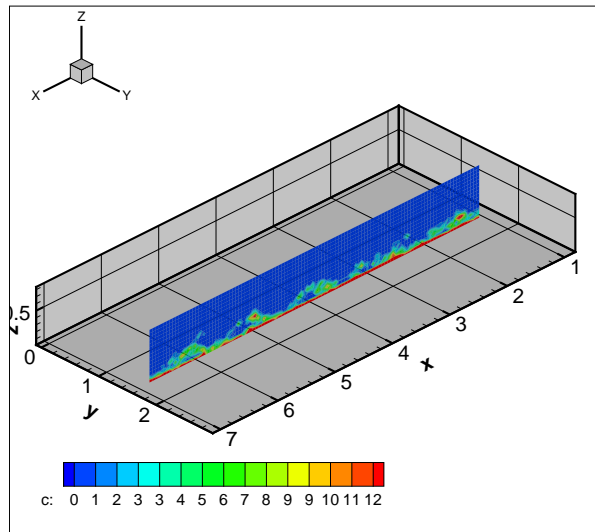
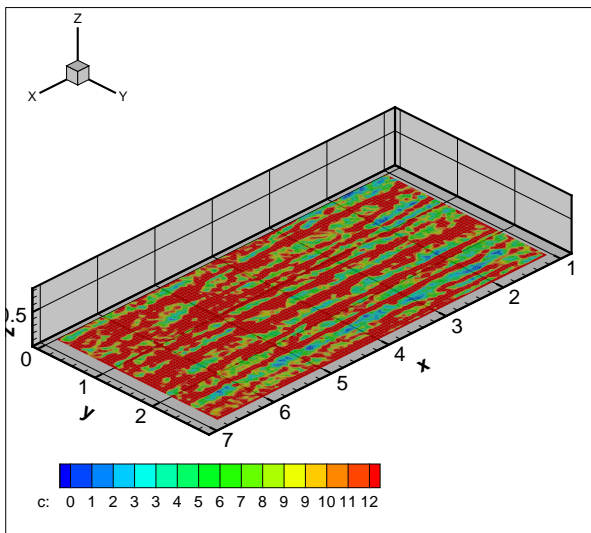
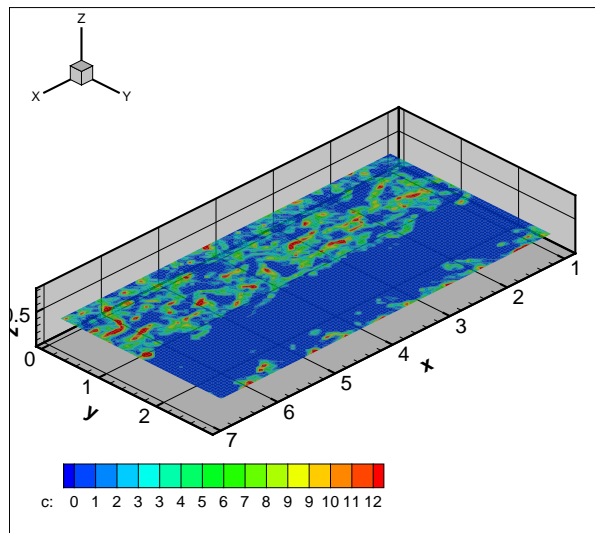
(a) c dans tout le domaine(b) c à $y/\delta = 1.3$ (c) c à $z/\delta = 0.04$ (d) c à $z/\delta = 0.3$

FIG. 6.8 – Visualisation de la concentration instantanée c de particules solides de $37\mu\text{m}$ de diamètre, sans modèle stochastique en sous-maille, sur trois plans correspondant à $y/\delta = 1.3$, $z/\delta = 0.04$ et $z/\delta = 0.3$.

6.2.2 Distribution des particules et concentration préférentielle

L'étude des champs de concentration nous a permis de détecter des régions de forte concentration qui se répètent dans l'espace et dont la période évolue en fonction de la distance à la paroi. L'existence de ces régions périodiques en espace traduit l'existence de zones de l'écoulement où les particules se regroupent. La concentration préférentielle des particules est ainsi mise en évidence. Une méthode classique (SQUIRES & EATON (1991), FESSLER et al. (1994) et WANG & SQUIRES (1996)) pour mettre en évidence l'existence des zones de concentration privilégiée est le calcul de la densité de probabilité de présence du nombre de particules par boîte.

La méthode consiste à diviser le domaine en boîtes et à calculer le nombre de particules pour chaque boîte. Pour différents plans (xy) la d.d.p. de présence de ce nombre est établie. L'écart de cette d.d.p. de présence à une loi de POISSON traduit l'existence et l'ampleur de zones de concentration privilégiée. En effet, si la d.d.p. de présence du nombre de particules par boîte suit une loi de POISSON, alors les particules sont réparties aléatoirement dans le domaine.

Revue des expériences et simulations

Cette méthode pour quantifier la concentration préférentielle des particules avec inertie dans un écoulement turbulent a déjà été utilisée par différents auteurs :

- SQUIRES & EATON (1991), réalisent une simulation numérique directe où ils étudient le comportement des particules ayant des nombres de STOKES de $St_L = 0.075$, $St_L = 0.15$ et $St_L = 0.52$ dans une turbulence homogène isotrope. Ils constatent que l'écart de la d.d.p. de présence du nombre de particules par boîte à la loi de POISSON est le plus prononcé pour les particules de $St_L = 0.15$. Les particules plus petites se comportent comme des particules fluides et ne présentent pas de régions de concentration privilégiée. Les particules plus grandes ont une inertie importante et un temps de réponse conséquent. Elle ne répondent plus aux changements de vitesse de l'écoulement et ont tendance à se distribuer uniformément dans l'écoulement.
- FESSLER et al. (1994) étudient expérimentalement le transport des particules de $St_\eta = 0.74$, $St_\eta = 2.2$, $St_\eta = 8$, $St_\eta = 19$ et $St_\eta = 41$ au centre d'un canal. Ils trouvent que l'écart maximal de la d.d.p. de présence du nombre de particules par boîte à la loi de POISSON a lieu pour les particules dont le nombre de STOKES bâti sur l'échelle de KOLMOGOROV (St_η) est proche de 1.
- WANG & SQUIRES (1996) étudient le comportement des mêmes particules que FESSLER et al. (1994), dans un canal à l'aide d'une SGE. Ils arrivent aux mêmes conclusions. Cependant, les résultats de leur SGE présentent des différences par rapport aux expériences et à la simulation numérique directe qu'ils attribuent aux collisions entre particules.
- YAMAMOTO et al. (2001) reprennent le cas test de FESSLER et al. (1994) et étudient l'effet des collisions sur la concentration préférentielle à l'aide d'une SGE. Ils obtiennent une amélioration des résultats des simulations numériques et concluent que la prise en compte des collisions est nécessaire pour approcher les résultats expérimentaux.
- Dans une SGE *a priori*, décrite dans le chapitre 4 au paragraphe 4.2.1, POZORSKI et al. (2004) étudient le transport des particules solides avec des St_η variables dans une turbulence homogène et isotrope. De même que les auteurs cités plus haut, ils trouvent que la concentration préférentielle est la plus prononcée pour les particules ayant des nombres de STOKES bâtis sur l'échelle de KOLMOGOROV, St_η proches de 1.

Les résultats de nos simulations

Les figures 6.9 et 6.10 illustrent la d.d.p. de présence du nombre de particules par boîte pour les trois cas tests étudiés ici à deux distances de la paroi, $z/\delta = 0.03$ et $z/\delta = 0.4$, respectivement. L'écart de la d.d.p. de présence est plus important pour les particules de $37\mu m$ ($St_\eta = 0.7$) que pour celles de $7.4\mu m$ ($St_\eta = 0.03$). Ceci est en accord avec les observations expérimentales et les simulations des auteurs cités plus haut.

Près de la paroi (figure 6.9), l'écart par rapport à la loi de POISSON est plus prononcé que loin de la paroi (figure 6.10), bien que loin de la paroi il reste important pour les particules de $37\mu m$ (figures 6.10(a) et 6.10(c)). En effet, la d.d.p. de présence du nombre de particules par boîte pour les particules de $37\mu m$ à $z/\delta = 0.4$ présente un pic à zéro (figures 6.10(a) et 6.10(c)), signifiant que de nombreuses boîtes sont vides et qu'il existent de nombreuses régions ou une très grande région où il n'y a pas de particules.

Sans le modèle stochastique, l'écart à la loi de POISSON est encore plus grand que dans le cas où le modèle stochastique en sous-maille est pris en compte ((a) et (c) sur les figures 6.9 et 6.10). Ceci reste vrai aussi bien loin de la paroi qu'en proche paroi. Comme nous l'avons déjà remarqué à partir des visualisations du champ de concentration, le modèle stochastique en sous-maille réduit la concentration préférentielle car il ajoute une fluctuation par rapport au champ grande échelle de la concentration. Cependant il ne brise pas entièrement l'existence de ces régions de concentration privilégiée.

Conclusion

Afin de mieux comprendre les mécanismes de transport des particules solides dans un écoulement de couche limite, nous avons étudié l'évolution d'un ensemble de particules qui initialement étaient réparties uniformément dans le domaine. Dans un premier temps, le champ de vitesse est analysé à l'aide des visualisations instantanées mais aussi à l'aide des autocorrélations. Différentes périodicités des zones de forte vitesse sont mises en évidence :

- près de la paroi le champ de vitesse est périodique en y de période $\Delta y = 0.3\delta$ pour la composantes u ,
- lorsqu'on s'éloigne de la paroi cette période augmente pour devenir $\Delta y \sim \delta$.

Les isocontours des autocorrélations de vitesse dans le plan (xy) mais aussi dans le plan (xz) sont comparés aux résultats expérimentaux de KROGSTAD & ANTONIA (1994) relatifs à une couche limite lisse et à une couche limite rugueuse. Mis à part une légère sous-estimation de la taille des isocontours de $\rho_{u'u'}$, nos résultats sont proches des résultats de KROGSTAD & ANTONIA. L'évolution de l'isocontour 0.3 en fonction de la distance à la paroi montre un très bon accord avec les résultats expérimentaux de KROGSTAD & ANTONIA pour une couche limite rugueuse. Cette comparaison nous permet d'affirmer que les structures observées ont une origine physique et ne sont pas dues à une artefact numérique.

Le champ de concentration est analysé de la même manière que le champ de vitesse. Trois cas tests sont étudiés :

- particules solides avec un diamètre de $37\mu m$,

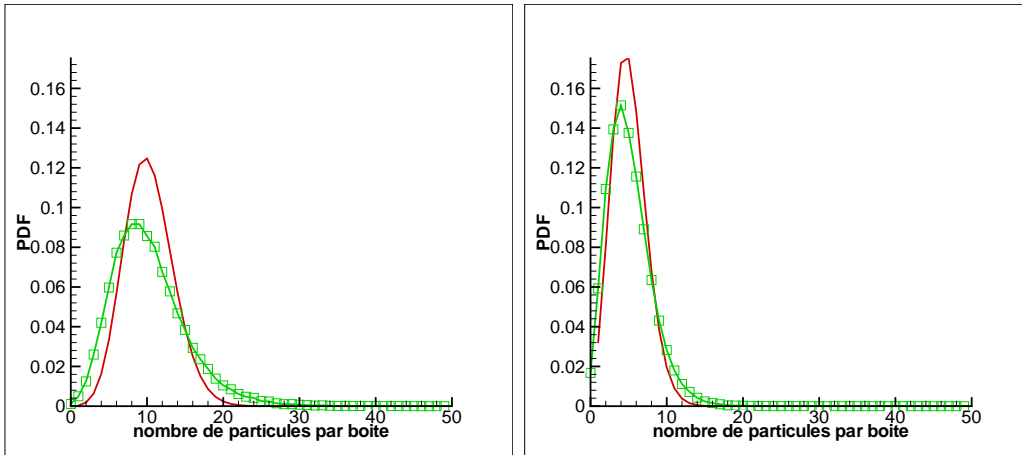
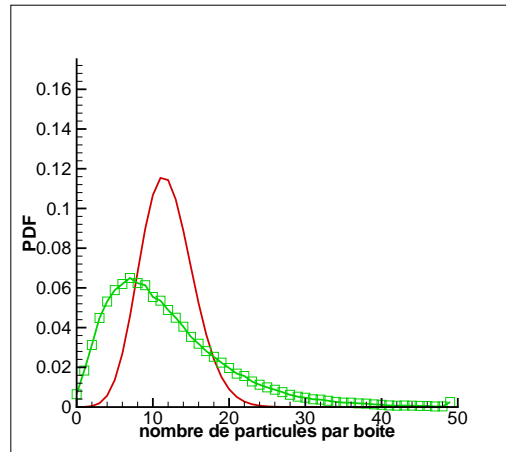
(a) $d_p = 37\mu m$ (b) $d_p = 7.4\mu m$ (c) $d_p = 37\mu m$ sans modèle stochastique en sous-maille

FIG. 6.9 – Densité de probabilité de présence du nombre de particules par boîte du plan (xy) à $z/\delta = 0.04$. —, loi de Poisson; \square , d.d.p. obtenue avec ARPS.

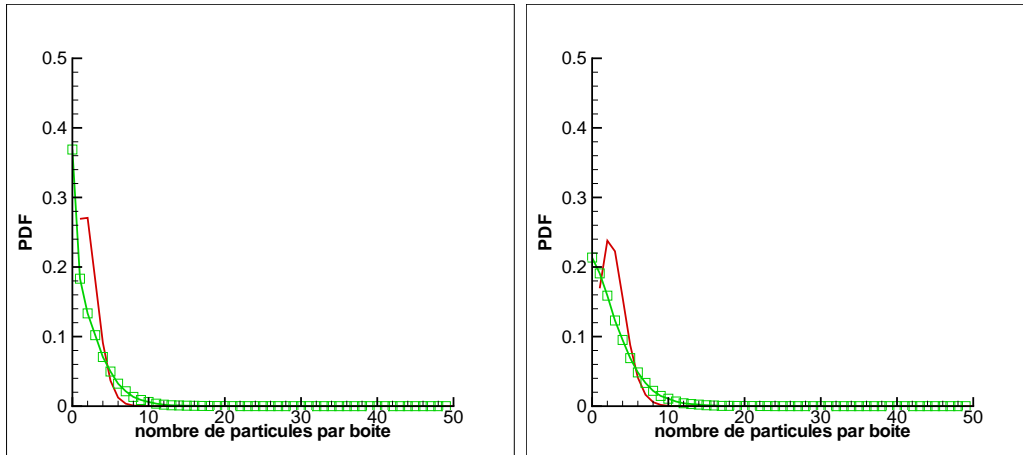
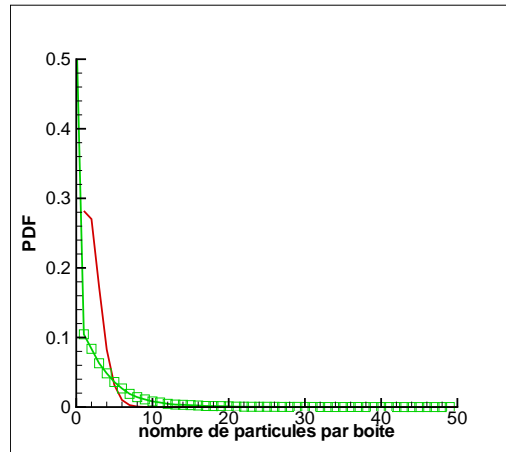
(a) $d_p = 37\mu m$ (b) $d_p = 7.4\mu m$ (c) $d_p = 37\mu m$ sans modèle stochastique en sous-maille

FIG. 6.10 – Densité de probabilité de présence du nombre de particules par boîte du plan (xy) à $z/\delta = 0.3$. —, loi de Poisson ; \square , d.d.p. obtenue avec ARPS.

- particules solides avec un diamètre de $7.4\mu m$,
- particules solides avec un diamètre de $37\mu m$, transportées uniquement par la SGE sans le modèle stochastique de sous-maille.

On constate que :

- à la paroi les champs de concentration présentent une périodicité en y de période 0.3δ ,
- cette périodicité augmente lorsqu'on s'éloigne de la paroi pour atteindre δ à $z/\delta = 0.3$.

Les régions de forte concentration et les régions de forte vitesse présentent les mêmes périodicités. Cependant, les régions de forte vitesse correspondent aux régions de faible concentration est inversement. L'existence de ses zones est plus marquée pour les particules dont le nombre de STOKES bâti sur l'échelle de KOLMOGOROV, St_η est proche de 1. D'autre part, en absence de modèle stochastique en sous-maille la concentration préférentielle est encore plus prononcée. Le modèle stochastique en sous-maille réduit la concentration préférentielle car il ajoute une fluctuation par rapport au champ grande échelle de la concentration. Cependant, il ne brise pas entièrement l'existence de ces régions de concentration privilégiée.

L'évolution de la concentration préférentielle en fonction de la distance à la paroi est aussi étudiée par la d.d.p. de présence du nombre de particules par boîte élémentaire à différents plans (xy). Les mêmes conclusions que celles obtenues à l'aide de l'analyse des autocorrélations sont obtenues. L'ensemble de ces conclusion est en accord avec les observations expérimentales de FESSLER et al. (1994) et les simulations numériques de SQUIRES & EATON (1991), WANG & SQUIRES (1996) et YAMAMOTO et al. (2001).

Conclusion

Ce travail propose une réponse partielle à la question de la compréhension des différents mécanismes de la dispersion à une échelle locale d'un scalaire passif, de particules solides et de gouttelettes qui sont les trois formes de polluants connues dans une couche limite atmosphérique :

- Une étude bibliographique, non exhaustive, a montré les principaux problèmes liés à la pollution atmosphérique urbaine au niveau de l'interaction des aérosols avec la turbulence. Il a également été présenté différents types d'approches en vue d'une modélisation des phénomènes de transport et de dispersion à méso-échelles et micro-échelles. Cette dernière échelle qui correspond à l'échelle locale est celle retenue dans le cadre de ce travail, ce qui nous permet de décrire l'écoulement à l'aide de la simulation des grandes échelles.
- Le choix s'est porté sur une simulation des grandes échelles d'un écoulement simplifié : la dispersion de scalaire passif, de particules solides et de gouttelettes dans une couche limite atmosphérique. L'approche adoptée est instationnaire et bidimensionnelle (statistiquement pour les variables turbulentes). L'étude est numérique et permet de déterminer les champs cinématiques et de concentration de scalaire passif, des particules solides et des gouttelettes. Les interactions entre particules ayant lieu à une échelle bien plus petite que l'échelle de la maille, un modèle stochastique de LANGEVIN est couplé avec la SGE. Il permet d'obtenir la vitesse instantanée petite échelle en sous-maille des particules transportées par la SGE fournissant la vitesse grande échelle. La SGE couplée avec le modèle stochastique en sous-maille est adaptée au suivi lagrangien des particules et à la résolution scalaire et particulaire à moindre coût par rapport à une simulation numérique directe.
- Le couplage entre la SGE et le modèle stochastique de sous-maille semble bien adapté à la modélisation du mouvement des particules fluides dans une maille. Il permet d'obtenir directement la concentration moyenne et la variance. Cette variance n'est pas calculée seulement avec les statistiques du champ filtré contrairement aux SGE classiques SYKES & HENN (1992), XIE et al. (2004) ou SHARATH et al. (1995). Elle tient compte ici des fluctuations induites par les petites échelles et donc fournit les valeurs instantanées des champs. Ainsi les statistiques au sens de REYNOLDS classiquement présentes dans tous les travaux expérimentaux de référence sont obtenues. Le flux de masse ainsi que tous les autres moments du champ de concentration peuvent aussi être calculés sans fermeture supplémentaire.
- Afin de simuler le transport de gouttelettes et de particules solides, l'équation régissant le mouvement d'une particule dans un écoulement turbulent est introduite. Cette équation prend une forme simplifiée dans le cas où la masse volumique des particules est très grande devant la masse volumique du fluide porteur, ce qui est le cas dans cette étude. La résolution de cette

équation de mouvement, exige la connaissance des vitesses instantanées du fluide environnant en chaque point de la trajectoire de la particule, d'où la nécessité d'utiliser une modélisation des fluctuations de vitesse sous-maille du fluide à la position de la particule. Un modèle stochastique analogue à celui utilisé pour les particules fluides est développé.

- L'influence des particules sur l'écoulement moyen est abordée par l'approche standard. Des termes sources sont introduits dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique turbulente (YAMAMOTO et al. (2001) et FUKAGATA (2000)). Les collisions entre particules sont prises en compte par un modèle d'appariement de particules similaire au modèle de SOMMERFELD (2001). Un modèle statistique d'interaction avec la paroi est développé.
- La modélisation du transport de particules solides est appliqué à l'étude du mouvement des particules de sable en saltation et en suspension. Les simulations numériques sont confrontées à deux expériences. Celle de NALPANIS et al. (1993) est relative aux particules en saltation alors que celle de TANIÈRE et al. (1997) concerne les grains de sable et les particules de PVC pour l'étude de la saltation modifiée. Les résultats des simulations sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Le couplage de la SGE avec :
 - le transport de particules,
 - la modélisation stochastique du transport de particules solides en sous-maille,
 - l'interaction entre l'écoulement et les particules,
 - le modèle de collision,
 - le modèle de rebond et d'envol de nouvelles particules
 est ainsi validé. Cela nous permet d'aborder les problèmes suivants liés à l'interaction des grandes échelles avec les particules solides.
- Étant donné l'importance des processus physico-chimiques entre gouttelettes dans la dynamique des aérosols, la coalescence et la fragmentation des gouttelettes sont prises en compte. Un modèle probabiliste inspiré du modèle d'atomisation secondaire de APTE et al. (2003) et de GOROKHOVSKI & SAVELIEV (2003), mais aussi de celui de HO & SOMMERFELD (2002) pour la coalescence, est développé. Dans ce modèle, la coalescence et la fragmentation sont considérées comme des processus discrets et aléatoires sous l'hypothèse de symétrie d'échelles, où les événements à deux instants successifs sont décorrélés. Dans ces conditions, à chaque pas de temps, la distribution de taille des gouttelettes au sein d'une maille est donnée par la solution d'une équation de FOKKER-PLANCK.
- Le modèle de coalescence/fragmentation est introduit dans la SGE comportant déjà l'équation de transport des particules, la modélisation sous-maille de la vitesse des gouttelettes et le retour des particules sur l'écoulement moyen et sur la turbulence. L'ensemble est appliqué à l'étude de la dispersion atmosphérique d'un panache de gouttelettes. Par défaut d'expériences en soufflerie ou de mesures in-situ, les résultats des simulations sont comparés aux résultats expérimentaux de FACKRELL & ROBINS (1982) relatifs à la dispersion d'un scalaire passif.
- Même dans le cas de très petites gouttes, les caractéristiques du panache sont différentes de celles d'un panache de scalaire passif. Pour les gouttelettes de $60\mu m$, la différence apparaît dès les profils de concentration moyenne. Pour les gouttelettes de $12\mu m$, les profils de concentration moyenne ressemblent à ceux d'un scalaire passif, néanmoins les différences résident dans les moments d'ordre supérieur (écart type, ...). Ceci traduit le fait que les petites gouttelettes peuvent se comporter comme un scalaire passif en moyenne, tout en gardant des différences

locales importantes. Dans des conditions favorables à la coalescence (grande fraction volumique des gouttelettes et faibles vitesses relatives), un panache qui se comporte initialement comme un scalaire passif peut retomber au sol assez rapidement. Inversement, un panache qui a plutôt tendance à retomber au sol peut, si la fraction volumique est suffisante et si les vitesses relatives deviennent importantes voir la création de gouttelettes de plus en plus petites. Ces petites gouttes ne sédimentent plus et le polluant sera transporté plus loin.

- Les mécanismes de transport des particules solides dans un écoulement de couche limite, sont analysés à partir d'un cas test où l'évolution d'un ensemble de particules, initialement réparties, de façon uniforme dans le domaine, est étudiée. Le champ de vitesse est analysé à l'aide des autocorrélations spatiales dans différents plans du domaine. Près de la paroi le champ de vitesse est périodique en y de période $\Delta y \sim 0,3\delta$. Lorsqu'on s'éloigne de la paroi cette période augmente pour devenir $\Delta y \sim \delta$. Les mêmes périodicité sont observées pour le champ de concentration. Cependant, les régions de forte vitesse correspondent aux régions de faible concentration est inversement.
- L'apparition des zones de fortes concentrations périodiques en espace, à partir d'une distribution initialement uniforme est plus marquée pour les particules dont le nombre de STOKES, bâti sur l'échelle de KOLMOGOROV, St_η , est proche de 1. En absence de modèle stochastique en sous-maille l'apparition de ces zones est encore plus prononcée. Le modèle stochastique en sous-maille réduit la concentration préférentielle car il ajoute une fluctuation par rapport au champ grande échelle de la concentration. Cependant, il ne brise pas entièrement l'existence des régions de concentration privilégiée.

Il a donc été présenté, à partir de simulations numériques et d'analyses théoriques, quelques uns des mécanismes qui caractérisent la dispersion d'un scalaire, de particules solides et de gouttelettes dans une couche limite.

Des analyses complémentaires peuvent être envisagées selon,

- la présence d'un obstacle,
- l'interaction des écoulements entre deux obstacles ou à l'intérieur de groupe d'obstacles,
- l'introduction de la stratification thermique de l'écoulement et les effets de la température,
- l'introduction de nouvelles sortes d'interactions entre particules solides et gouttelettes (lessivage, capture des poussières à la surface des gouttelettes, ...),
- la prise en compte de l'évaporation des gouttelettes,
- la modélisation des réactions chimiques à la surface de la gouttelette,
- la simulation des épisodes de pollution à l'échelle des villes,
- ...

Ces différentes études auraient pour objectif de se rapprocher un peu plus des cas réels rencontrés à l'échelle locale à l'intérieur de la canopée urbaine et d'appréhender le plus grand nombre des mécanismes en jeu. D'autre part, de nombreuses études fondamentales peuvent permettre d'étudier, à l'aide de conditionnements, les processus couplés entre les grandes échelles et le transport scalaire, solide ou liquide. Le couplage entre les micro-échelles et le transport scalaire ou particulaire, peut être approché de la même manière.

Annexes

Annexe I

Méthodes d'interpolation

Afin de modéliser le transport des particules (fluides, solides ou liquides) il est nécessaire de connaître la vitesse grande échelle de l'écoulement à la position de la particule. La SGE ne fournit le champ de vitesse que dans les noeuds du maillage. Pour obtenir la vitesse eulérienne à la position des particules une interpolation du champ eulérien grande-échelle est utilisée. Deux méthodes ont été testées :

- la méthode d'interpolation des polynômes de LAGRANGE,
- la méthode d'interpolation barycentrique.

Ici, nous allons décrire brièvement ces deux schémas d'interpolation.

I.1 Schéma d'interpolation tri-linéaire des polynômes quadratiques de LAGRANGE

La méthode d'interpolation tri-linéaire des polynômes quadratiques de LAGRANGE avec 27 noeuds est décrite par CASULLI & CHENG (1992). Les auteurs ont mis en place une méthode semi-lagrangienne d'advection pour l'écoulement stratifié stable.

Huit boîtes du maillage sont prises en compte pour simuler les lignes de courant autour de la particule. Les boîtes sont choisies de façon à ce que la particule soit située dans la boîte inférieure et en amont de l'écoulement (figure I.1). Par exemple, pour trouver la composante du champ de vitesse dans la direction $q = (1, 2, 3) \equiv (x, y, z)$ au point (x_p, y_p, z_p) on va d'abord calculer la vitesse correspondante aux 9 lignes verticales situées dans les boîtes du maillage prises en compte pour l'interpolation. La vitesse est ainsi exprimée en fonction des coordonnées relatives au point (i, j, k) du maillage :

$$\tilde{u}_p(x_p, y_p, z_p) = \tilde{u}(i - a, j - b, k - d). \quad (\text{I.1})$$

Les 9 interpolations, en suivant les lignes verticales pour la composante q de la vitesse eulérienne, sont :

$$\begin{aligned} \tilde{u}_q(i - \gamma, j - \psi, k - d) &= \mathcal{L}_{i-\gamma, j-\psi}^0 \tilde{u}_q(i - \gamma, j - \psi, k) \\ &+ \mathcal{L}_{i-\gamma, j-\psi}^1 \tilde{u}_q(i - \gamma, j - \psi, k - 1) \\ &+ \mathcal{L}_{i-\gamma, j-\psi}^2 \tilde{u}_q(i - \gamma, j - \psi, k - 2), \end{aligned} \quad (\text{I.2})$$

où les indices (i, j) dénotent la position de la ligne verticale qui va être interpolée, tandis que γ et ψ prennent les valeurs 0, 1, 2.

Les coefficients du polynôme de LAGRANGE \mathcal{L}^n pour chaque ligne (i, j) sont calculés à partir de :

$$\mathcal{L}^n = \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{m=2} \frac{z_p - z(k-m)}{z(k-n) - z(k-m)},$$

où z_p est la coordonnée verticale de la position de la particule.

L'interpolation verticale est suivie de trois interpolations horizontales suivant la direction y :

$$\begin{aligned} \tilde{u}_q(i-\gamma, j-b, k-d) &= \mathcal{L}_{i-\gamma, j}^0 \tilde{u}_q(i-\gamma, j, k-d) \\ &+ \mathcal{L}_{i-\gamma, j-1}^1 \tilde{u}_q(i-\gamma, j-1, k-d) \\ &+ \mathcal{L}_{i-\gamma, j-2}^2 \tilde{u}_q(i-\gamma, j-2, k-d). \end{aligned} \quad (\text{I.3})$$

Les coefficients de ces interpolations horizontales s'écrivent :

$$\mathcal{L}^n = \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{m=2} \frac{y_p - y(j-m)}{y(j-n) - y(j-m)}.$$

Enfin, une simple interpolation suivant la direction x est réalisée :

$$\begin{aligned} \tilde{u}_q(i-a, j-b, k-d) &= \mathcal{L}_i^0 \tilde{u}_q(i, j-b, k-d) \\ &+ \mathcal{L}_{i-1}^1 \tilde{u}_q(i-1, j-b, k-d) \\ &+ \mathcal{L}_{i-2}^2 \tilde{u}_q(i-2, j-b, k-d), \end{aligned} \quad (\text{I.4})$$

dont les coefficients de LAGRANGE sont donnés par :

$$\mathcal{L}^n = \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq n}}^{m=2} \frac{x_p - x(i-m)}{x(i-n) - x(i-m)}.$$

Sur la figure I.1 on peut voir les trois interpolations suivant la direction verticale z et dans le plan horizontal xy .

Ce processus est implémenté pour les trois composantes du champ eulérien de la vitesse $\tilde{u}_q = (\tilde{u}_1, \tilde{u}_2, \tilde{u}_3)$ et aussi pour l'énergie cinétique turbulente de sous-maille \tilde{k} et le taux de dissipation $\tilde{\varepsilon}$

I.2 Méthode d'interpolation barycentrique

La vitesse en un point n'est fonction que de la vitesse des nœuds qui l'entourent. La vitesse de chaque nœud de la maille où se trouve la particule est pondérée par l'inverse du carré de la distance qui sépare la particule des nœuds.

Soit \tilde{u}_q la composante $q = (1, 2, 3)$ de la vitesse eulérienne que l'on souhaite interpoler à la position $p = (x_p, y_p, z_p)$ de la particule et soit $\tilde{u}_q(\beta)$ la composante $q = (1, 2, 3)$ de la vitesse eulérienne calculée

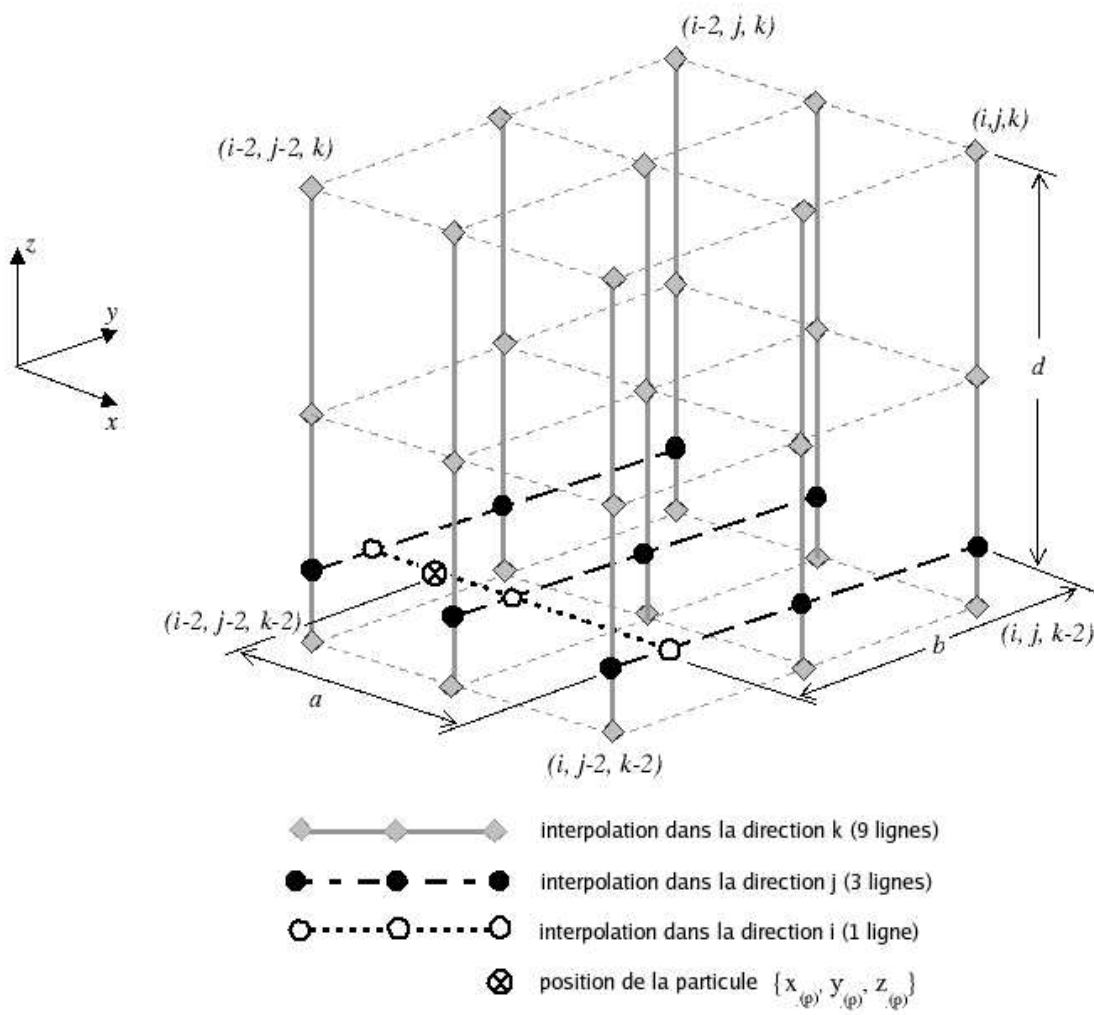


FIG. I.1 – Schéma d'interpolation tri-linéaire des polynômes quadratiques de LAGRANGE.

par le code à la position du nœud $\beta = \{1, 2, \dots, 8\}$. Si on prend les huit nœuds du maillage les plus proches de la position de la particule (figure I.2), on aura :

$$\tilde{u}_q = \tilde{u}_q(x_p, y_p, z_p), \quad (\text{I.5})$$

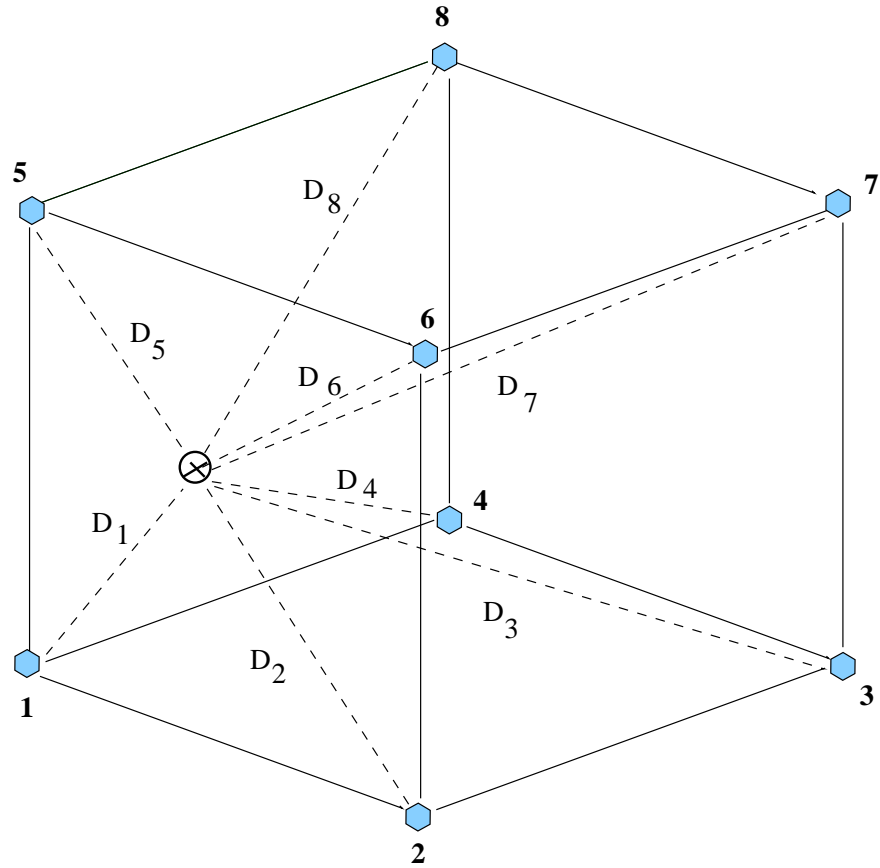
$$\tilde{u}_q(\beta) = \tilde{u}_q(x(\beta), y(\beta), z(\beta)). \quad (\text{I.6})$$

En calculant les carrés des distances entre chaque nœud de la maille et la particule :

$$\mathcal{D}_\beta = (x_p - x(\beta))^2 + (y_p - y(\beta))^2 + (z_p - z(\beta))^2, \quad (\text{I.7})$$

on obtient la valeur de la composante q de la vitesse interpolée à la position de la particule :

$$\tilde{u}_q = \frac{\sum_{\beta=1}^8 (\tilde{u}_q(\beta)/\mathcal{D}_\beta)}{\sum_{\beta=1}^8 (1/\mathcal{D}_\beta)}. \quad (\text{I.8})$$



⬡ Noeuds du maillage (β)

⊗ Position de la particule (p)

FIG. I.2 – Schéma d'interpolation barycentrique.

Annexe II

Dispersion de scalaire passif

Différents tests ont été réalisés pour la validation du transport des particules fluides dans la couche limite. En particulier, nous avons étudié l'influence sur la dispersion du panache du schéma d'interpolation utilisé. Les deux schémas d'interpolation testés sont décrits dans l'annexe I. Le deuxième test porte sur l'influence de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille \tilde{k} , intervenant dans le modèle stochastique (équation (3.63)) sur les caractéristiques de dispersion. Un troisième test présenté ici est le cas de la source au sol. Enfin, nous revenons sur la dispersion d'un panache d'une source élevée pour voir l'influence de la diffusion.

II.1 Influence du schéma d'interpolation

Deux schémas d'interpolation ont été testés :

- le schéma d'interpolation des polynômes de LAGRANGE,
- le schéma d'interpolation barycentrique.

Les deux schémas sont décrits dans l'annexe I.

La figure II.1 illustre la comparaison des deux méthodes d'interpolation du champ de vitesse sur les profils verticaux de concentration moyenne pour le cas de dispersion d'un scalaire passif. On peut constater que le schéma d'interpolation des polynômes de LAGRANGE n'apporte pas une amélioration nette des profils et conduit plutôt à une sous-estimation de la dispersion lorsqu'on s'éloigne de la source et de la paroi. Lorsqu'on utilise les polynômes de LAGRANGE, le panache de scalaire passif a tendance à atteindre le sol plus tôt. Ceci conduit à un panache qui est en "avance" par rapport au panache expérimental. D'autre part, le schéma d'interpolation des polynômes de LAGRANGE est bien plus coûteux en temps de calcul. Par souci de simplicité, nous avons donc adopté dans toute l'étude le schéma d'interpolation barycentrique.

II.2 Correction du modèle stochastique

Le modèle stochastique (équation (3.63)) couplé avec la SGE conduit à une bonne prédiction du comportement d'un panache de scalaire passif issu d'une source élevée (chapitre 3, paragraphe 3.4). Cependant, une légère sous-estimation de la concentration existe à la paroi lorsqu'on s'éloigne de la source. Cette sous-estimation est amplifiée lorsqu'il s'agit de la dispersion de scalaire passif issu d'une source au sol.

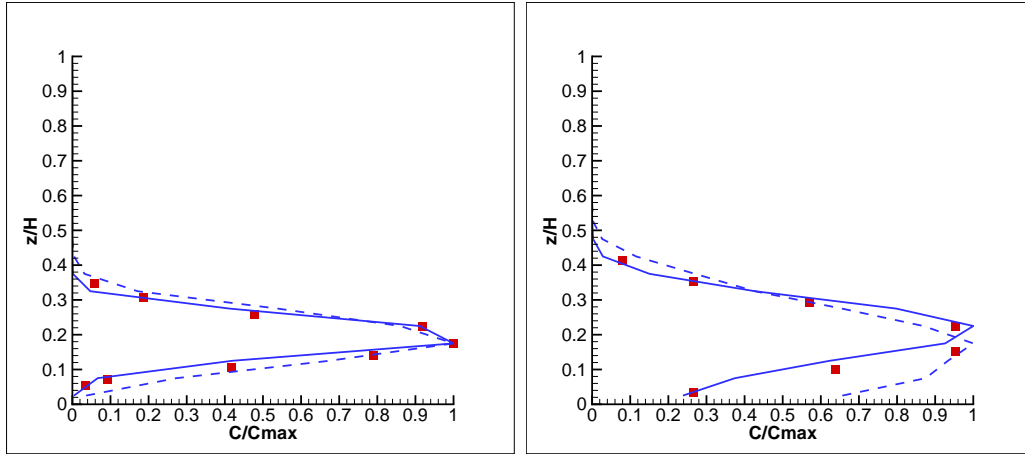
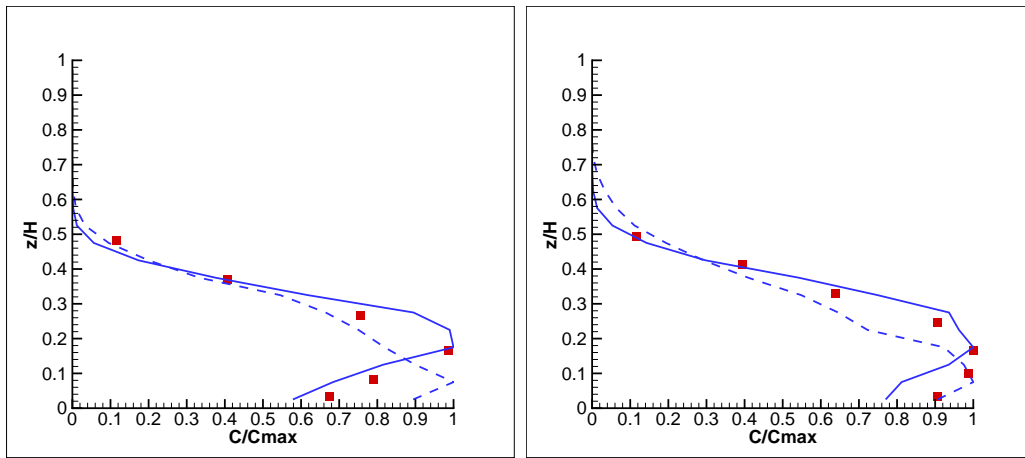
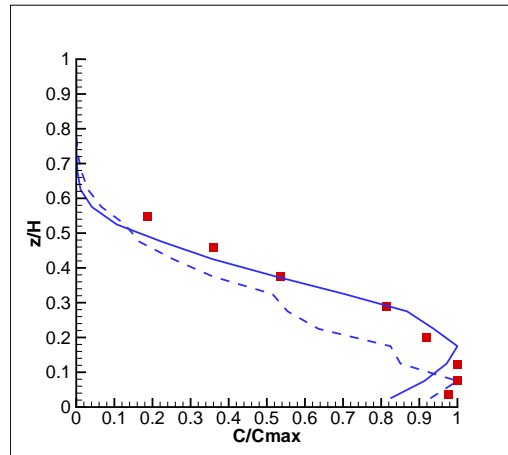
(a) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 0.96\delta$ (b) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 1.92\delta$ (c) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 2.88\delta$ (d) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 3.83\delta$ (e) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 4.79\delta$

FIG. II.1 – Profil de concentration moyenne de gouttelettes rapportée à sa valeur maximale. —, ARPS scalaire passif, interpolation barycentrique; - - -, ARPS scalaire passif, polynôme de LAGRANGE; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) pour le scalaire passif.

Nous avons pensé que c'est la sous-estimation de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille à la paroi qui peut être à l'origine de ce phénomène (paragraphe 2.8.2, figures 2.3 et 2.5). En effet, dans la simulation de la dynamique, afin d'obtenir l'énergie cinétique totale mesurée dans l'expérience il est nécessaire de rajouter une correction tenant compte de l'énergie cinétique turbulente de sous-maille \tilde{k} . Cette énergie représente à peine 10% de l'énergie totale. Nous avons pensé que c'est peut être aussi les 10% qui manquent dans le modèle stochastique.

Deux tests ont été réalisés. Dans les deux cas l'énergie cinétique de sous-maille \tilde{k} , présente dans le modèle stochastique (équation (3.63)) est pondérée par un facteur (1.1 dans un cas et 1.35 dans l'autre). La figure II.2 illustre les comparaisons entre ces deux cas test et le cas où \tilde{k} n'est pas pondérée. On peut remarquer qu'aux sections $x = 2.88\delta$ et $x = 3.83\delta$ l'augmentation de \tilde{k} conduit à une meilleure estimation de la concentration au sol. Cependant, lorsqu'on s'éloigne encore de la source (section $x = 4.79\delta$), l'augmentation de la concentration au sol n'est plus suffisante. C'est plutôt l'isotropie du modèle stochastique qui est à l'origine de ce déficit que la légère sous-estimation de l'énergie cinétique de sous-maille.

II.3 Source au sol

Les résultats de nos simulations comparés aux résultats expérimentaux de FACKRELL & ROBINS (1982) pour une source au sol sont présentés sur la figure II.3. Bien qu'initialement le panache soit au sol, lorsqu'on s'éloigne de la source dans le sens de l'écoulement, le panache s'élève et prend le profil d'un panache issu d'une source en hauteur. D'après les tests présentés dans le paragraphe précédent, ce n'est pas la légère sous-estimation de l'énergie cinétique de sous-maille qui est à l'origine de ce phénomène. Il s'agirait plutôt de l'isotropie du modèle stochastique. En effet, à la paroi, il n'y a plus isotropie de l'écoulement et le modèle stochastique (équation (3.63)) doit être réécrit afin de prendre l'anisotropie en compte (AGUIRRE (2005)).

II.4 Prise en compte de la diffusion

La diffusion est prise en compte par un modèle d'appariement des particules continu en temps. Une description détaillée de ce modèle se trouve dans MICHELOT (1996) et dans SIMOËNS et al. (1997). Le domaine est divisé en boîtes de taille petite devant les échelles caractéristiques de l'écoulement. Dans chaque boîte, les particules sont aléatoirement sélectionnées par paires. Pour chaque paire (m, n) , la concentration du scalaire passif porté évolue suivant :

$$\begin{cases} \frac{dc_m(t)}{dt} = \psi (c_n(t) - c_m(t)) \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \psi (c_m(t) - c_n(t)) \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

où ψ est le coefficient de relaxation. A partir d'une analyse théorique, MICHELOT (1996) trouve que ψ doit être une constante pour que la d.d.p de présence de la concentration puisse tendre vers une distribution gaussienne dans une turbulence isotrope. Comme suggéré par SPALDING (1971), ψ peut être exprimée sous la forme :

$$\psi = \frac{\xi}{T_{diff}}, \quad (\text{II.2})$$

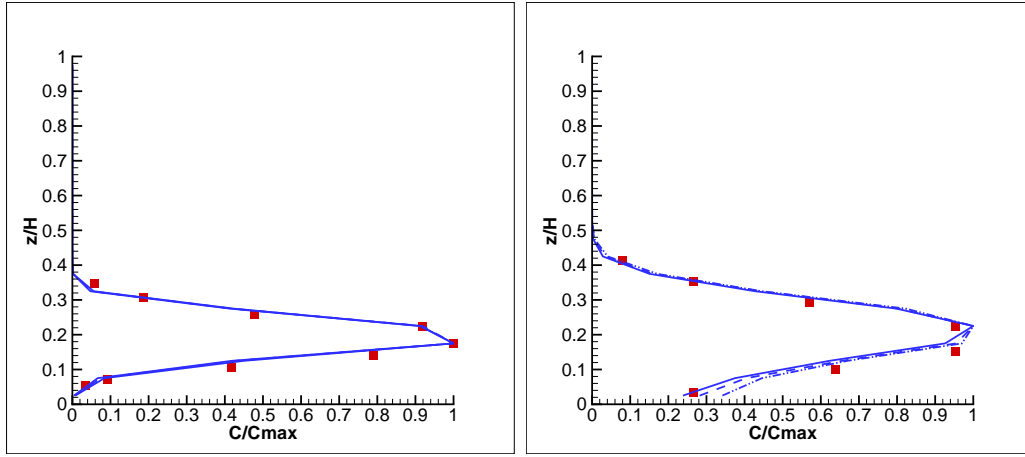
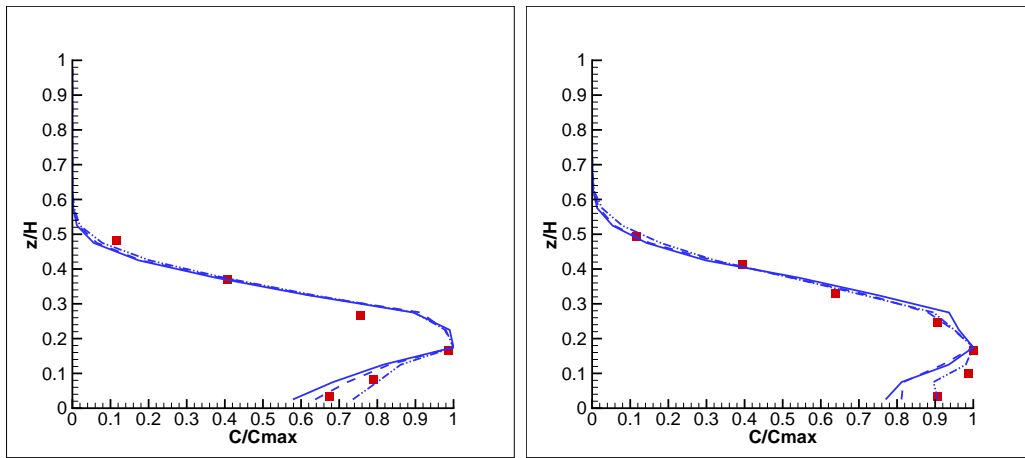
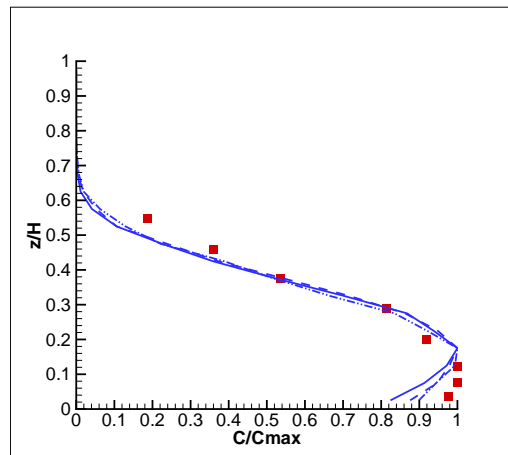
(a) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 0.96\delta$ (b) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 1.92\delta$ (c) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 2.88\delta$ (d) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 3.83\delta$ (e) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 4.79\delta$

FIG. II.2 – Profil de concentration moyenne de scalaire passif rapportée à sa valeur maximale. —, ARPS scalaire passif sans correction du modèle stochastique; - - -, ARPS scalaire passif avec correction du modèle stochastique $\tilde{k}_2 = 1.1\tilde{k}$; — · —, ARPS scalaire passif avec correction du modèle stochastique $\tilde{k}_2 = 1.25\tilde{k}$; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) pour le scalaire passif.

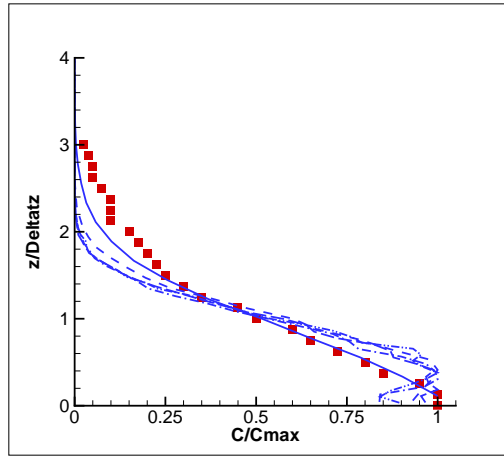


FIG. II.3 – Profil de concentration moyenne de scalaire passif rapportée. —, ARPS à $x = 0.96\delta$; - - -, ARPS à $x = 1.92\delta$; — · · —, ARPS à $x = 2.88\delta$; - - - -, ARPS à $x = 3.83\delta$; — · —, ARPS à $x = 4.79\delta$; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) pour le scalaire passif.

où ξ est un nombre aléatoire compris entre -1 et 1 et le temps de diffusion T_{diff} est donné par :

$$T_{diff} = \frac{T}{C_{diff}}, \quad (\text{II.3})$$

C_{diff} étant une constante et T le temps caractéristique des fluctuations de vitesse :

$$T = \frac{k}{\varepsilon}. \quad (\text{II.4})$$

POPE (1985) ajuste C_{diff} avec le temps de relaxation de l'écart type de la concentration σ_c . Bien que POPE (1985) ait utilisé 2 pour C_{diff} , MICHELOT (1996) propose 2.25.

Les profils verticaux de concentration moyenne à différentes distances de la source, avec et sans le modèle de diffusion, sont représentés sur la figure II.4. La prise en compte de la diffusion n'apporte presque aucune modification aux profils de concentration moyenne aussi bien loin de la source que près de la source. En raison de l'appariement des particules, le modèle de diffusion augmente le temps de calcul. Dans cette étude, la diffusion a donc été considérée comme négligeable et le modèle n'est pas pris en compte dans les simulations.

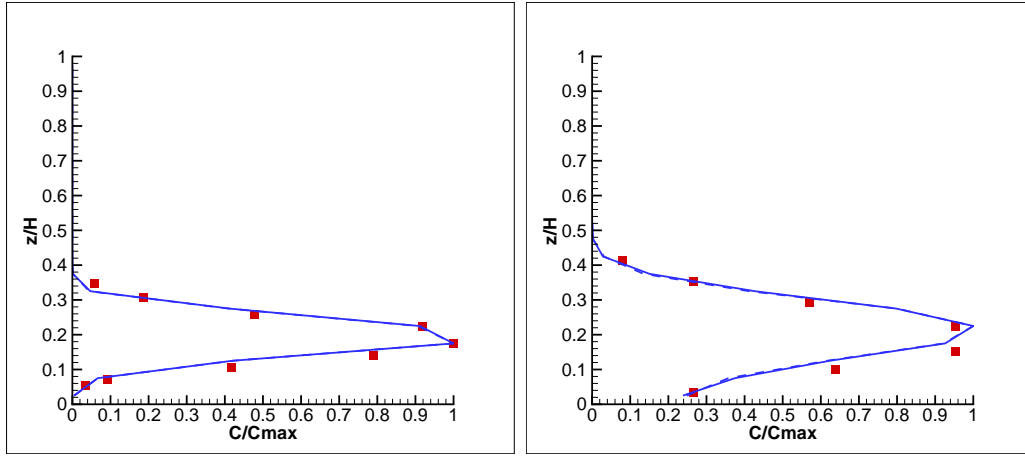
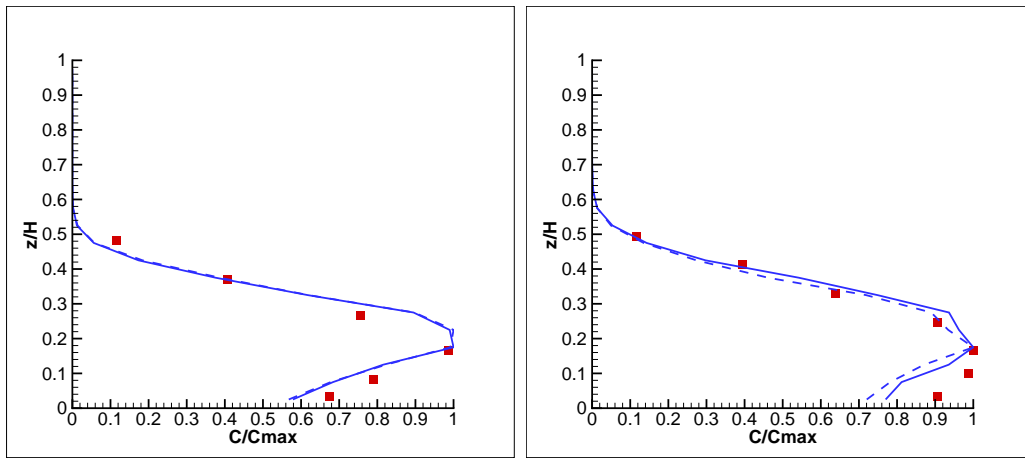
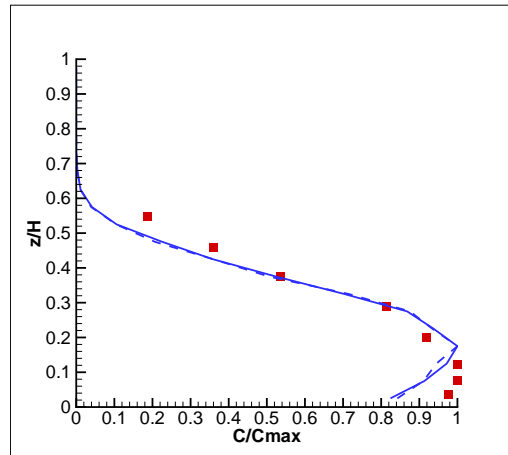
(a) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 0.96\delta$ (b) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 1.92\delta$ (c) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 2.88\delta$ (d) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 3.83\delta$ (e) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 4.79\delta$

FIG. II.4 – Profil de concentration moyenne de scalaire passif rapportée à sa valeur maximale. —, ARPS scalaire passif sans modèle de diffusion ; - - -, ARPS scalaire passif avec modèle de diffusion ; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) pour le scalaire passif.

Annexe III

Particules solides en saltation - étude de paramètres

Le cas test de l'expérience de NALPANIS et al. (1993) est repris ici et une étude paramétrique est réalisée. Tout d'abord, l'influence de la vitesse de l'écoulement extérieure sur les régimes de saltation est évaluée. Ensuite, nous avons testé l'influence des paramètres d'envol, de rebond et d'éjection. Une simulation numérique est réalisée sans le modèle de collision entre particules (équations (4.62), (4.63), (4.64) et (4.65)), une autre sans le retour des particules sur l'écoulement principal (équations (4.48) et (4.58)) et une dernière avec une fraction volumique 1000 supérieure aux conditions de l'expérience. Enfin, le modèle stochastique de sous-maille (équations (4.40) et (4.46)) est remplacé par une autre méthode de détermination des fluctuations de vitesse sous-maille à la position de la particule solide.

III.1 Vitesse extérieure

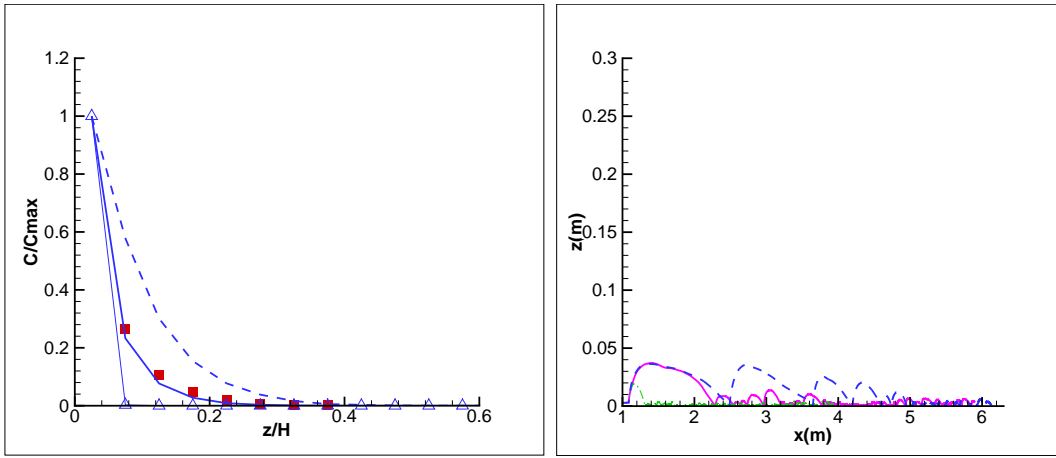
Afin de déterminer l'influence de la vitesse de l'écoulement extérieur sur les régimes de saltation, deux cas tests sont conduits. La vitesse extérieure dans le cas de référence étant de $6.3m/s$, nous avons fait deux simulations avec :

- $U_e = 4m/s$,
- $U_e = 8m/s$.

Les profils de concentration moyenne pour les trois vitesses extérieures comparés aux résultats expérimentaux de NALPANIS et al. (1993) et de ZHANG et al. (2004) sont présentés sur la figure III.1(a). Comme prévu, lorsque la vitesse extérieure augmente plus de particules sont mises en mouvement et la dispersion augmente. Inversement, lorsque la vitesse de l'écoulement extérieur diminue, les particules s'envolent moins et le profil de concentration moyenne s'écrase. Les tracés des trajectoires d'une particule solide dans chacun des trois cas confirment ces observations (figure III.1(b)). Enfin, une fois le régime de saltation établi, nous avons calculé la hauteur moyenne des particules en fonction de x . Lorsque U_e diminue, la hauteur moyenne diminue aussi.

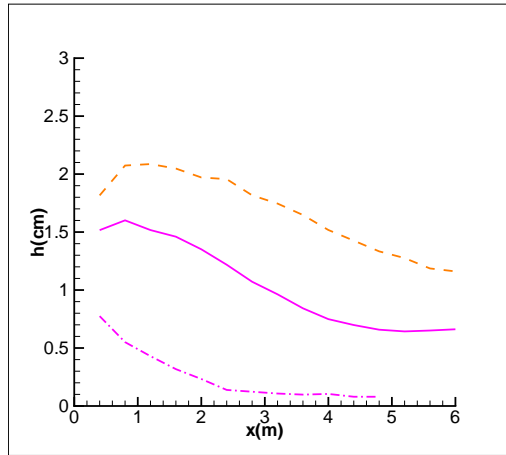
III.2 Paramètres d'envol, rebond et éjection

Une des indéterminations principales de la modélisation des particules de sable en saltation sont les conditions au sol. Lorsqu'une particule impacte le sol, suivant l'énergie cinétique disponible, elle peut rester au sol, rebondir ou mettre en mouvement des nouvelles particules (ce qu'on appellera éjection), chapitre 4 paragraphe 4.6.1. Dans cette étude, nous avons choisi une approche probabiliste



(a) concentration

(b) trajectoires



(c) hauteur moyenne

FIG. III.1 – Particules en saltation pour différentes vitesses de l'écoulement extérieur. ■, expérience de NALPANIS et al. (1993); ▲, expérience de ZHANG et al. (2004); (a) —, $U_e = 6.3 m/s$; - - - -, $U_e = 8 m/s$; Δ , $U_e = 4 m/s$. (b) et (c) —, $U_e = 6.3 m/s$; - - - -, $U_e = 8 m/s$; - · · -, $U_e = 4 m/s$.

pour le modèle d'interaction avec le sol. Le modèle est décrit dans 4.6.1. Ici nous présentons l'étude paramétrique des différents coefficients mis en jeu dans ce modèle.

Sur la figure III.2(a) sont présentés trois cas correspondant aux variations de la vitesse d'envol des particules solides. Le cas de référence est $v_{3,init} = 2u_*$ et les deux cas testés correspondent à :

- $v_{3,init} = 3u_*$,
- $v_{3,init} = 4u_*$.

D'après la figure III.2(a) on peut voir que peu de différences existent entre les trois profils de concentration moyenne. La vitesse verticale d'envol n'est pas un paramètre déterminant dans notre modélisation.

Les conditions de rebond sont testées par l'intermédiaire de la norme de la vitesse après le rebond. Celle-ci est obtenue à partir de la norme de la vitesse d'impact après multiplication par un coefficient. Dans le cas de référence le coefficient vaut 0.3. Sur la figure III.2(b) sont présentés les résultats pour un coefficient de 0.2 et de 0.4. On constate que le profil de concentration moyenne change complètement allant d'une forte dispersion obtenue pour 0.4 à un écrasement des particules au sol pour 0.2. Le modèle d'interaction au sol choisi dans cette étude est donc très sensible au coefficient de rebond.

Enfin, le dernier paramètre étudié est le coefficient d'éjection. De même que pour le rebond, la norme de la vitesse d'éjection est obtenue à partir de la norme de la vitesse d'impact après multiplication par le coefficient d'éjection. Dans le cas de référence celui-ci vaut 0.3. Nous avons fait des simulations pour un coefficient d'éjection de 0.15 et 0.4. D'après la figure III.2(c), on constate que ce coefficient n'a pas d'influence sur le profil de concentration moyenne.

Nous avons, ainsi conclu que le paramètre auquel le modèle d'interaction au sol est le plus sensible est le coefficient de rebond.

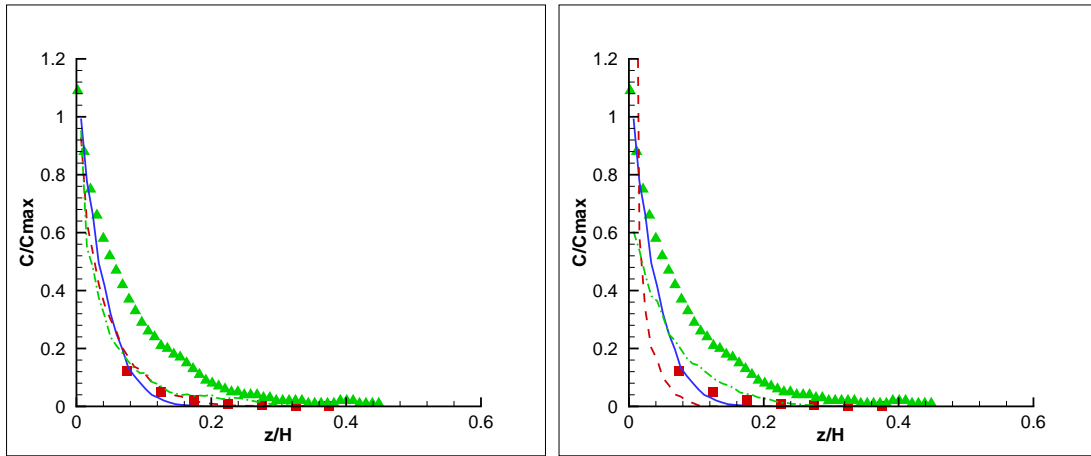
III.3 Collisions et “two-way coupling”

Trois simulations numériques sont réalisées :

- dans la première, il n'y a pas de modèle de collision entre particules (équations (4.62), (4.63), (4.64) et (4.65)),
- dans la deuxième, la modification de l'écoulement en présence des particules n'est pas prise en compte (équations (4.48) et (4.58)),
- dans la troisième, la fraction volumique Φ_p est multipliée par 1000 par rapport à la valeur dans l'expérience et les collisions et le “two-way coupling” sont pris en compte.

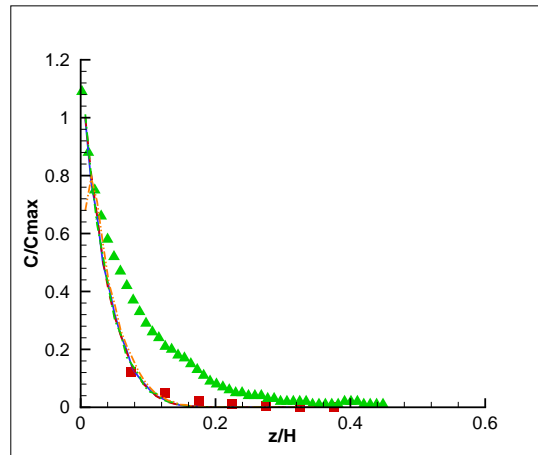
Les résultats sont comparés au cas de référence où les deux modèles sont considérés et où $\Phi_p = 10^{-5}$. Les profils de concentration moyenne correspondants sont illustrés sur la figure III.3. Comme attendu, étant donné que la fraction volumique des particules est faible (figure III.3(a)), même près de la paroi, il y a très peu de collisions et la présence des particules ne modifie pas l'écoulement principal. Les profils de concentration moyenne dans le cas sans collisions et sans retour des particules sur l'écoulement principal restent inchangés.

Sur la figure III.3(b) sont présentés les résultats pour une fraction volumique de $\Phi_p = 10^{-2}$. On constate que lorsque la fraction volumique augmente, le profil de concentration moyenne s'écrase. En effet, plus la fraction volumique est importante, plus les particules vont exercer une force de traînée importante sur l'écoulement, réduisant ainsi la vitesse et donc le transport et la dispersion des particules.



(a) envol

(b) rebond



(c) éjection

FIG. III.2 – Particules en saltation pour différentes conditions d’envol, de rebond et d’éjection. ■, expérience de NALPANIS et al. (1993); ▲, expérience de ZHANG et al. (2004); (a) —, $v_{3,init} = 2u_*$, cas de référence; - - -, $v_{3,init} = 3u_*$; — · · —, $v_{3,init} = 4u_*$. (b) —, $|v_{reb}| = 0.3|v_{imp}|$, cas de référence; - - -, $|v_{reb}| = 0.2|v_{imp}|$; — · · —, $|v_{reb}| = 0.4|v_{imp}|$. (c) —, $|v_{ej}| = 0.3|v_{imp}|$, cas de référence; - - -, $|v_{ej}| = 0.15|v_{imp}|$; — · · —, $|v_{ej}| = 0.40|v_{imp}|$.

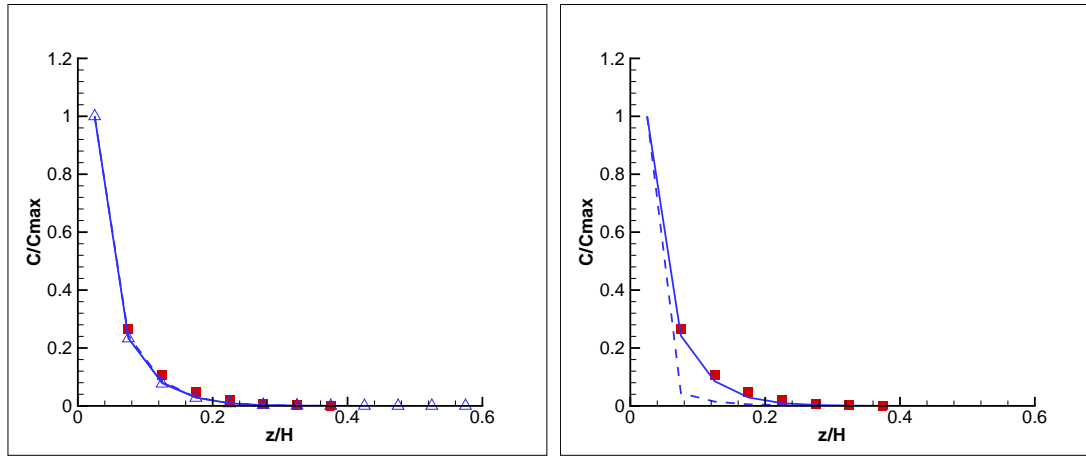
(a) $\Phi_p = 10^{-5}$ (b) $\Phi_p = 10^{-2}$

FIG. III.3 – Particules en saltation sans modèle de collision et sans retour des particules sur l'écoulement porteur. (a) - —, avec collisions et avec “two-way coupling”, cas de référence; - - -, sans collisions et sans “two-way coupling”; Δ , sans collisions et avec “two-way coupling”; \blacksquare , expérience de NALPANIS et al. (1993). (b) - —, avec collisions et avec “two-way coupling”, $\Phi_p = 10^{-5}$ cas de référence; - - -, avec collisions et avec “two-way coupling”, $\Phi_p = 10^{-2}$; \blacksquare , expérience de NALPANIS et al. (1993).

III.4 Modèle stochastique de sous-maille

Un autre modèle stochastique de sous-maille est testé. Au lieu d'écrire le modèle stochastique de sous-maille directement pour la particule fluide qui suit la trajectoire de la particule solide (équations (4.40) et (4.46)), nous avons appliqué le modèle de sous-maille aux particules fluides (équation (3.63)). Pour déterminer la vitesse sous-maille du fluide à la position de la particule solide, nous avons pris la vitesse sous-maille de la particule fluide la plus proche. Cette méthode nécessite le suivi simultané d'un grand nombre de particules fluides et est très coûteuse en temps de calcul.

Sur la figure III.4 sont présentés les profils de concentration moyenne pour les deux modèles de sous-maille. On constate qu'il n'y a pas de différence entre les deux cas étudiés. Nous avons donc opté pour la modélisation sous-maille de la vitesse de la particule fluide qui suit la trajectoire de la particule solide (équations (4.40) et (4.46)).

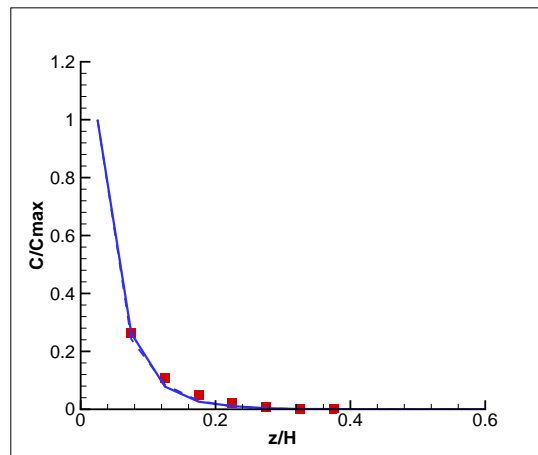


FIG. III.4 – Particules en saltation - tests sur le modèle stochastique de sous-maille. —, particules fluide modifiée, cas de référence; - - -, particules fluides dans tout le domaine; ■, expérience de NALPANIS et al. (1993).

Annexe IV

Dispersion d'un panache de gouttelettes

Afin d'étudier la coalescence et la fragmentation au sein d'un panache d'aéroréfrigérant, différents cas tests sont simulés. Dans un premier temps, tout en conservant la fraction volumique observée dans les panaches d'aéroréfrigérants, nous avons réalisé une émission par bouffées. Dans un deuxième cas test, nous avons augmenté la fraction volumique du panache afin d'observer la coalescence ou la fragmentation et leur impact sur la dispersion.

IV.1 Émission par bouffées

La fraction volumique des gouttelette au sein d'un panache d'aéroréfrigérant étant très faible, peu de collisions ont lieu et la coalescence n'est pas prépondérante. Cependant, l'émission des tours peut se faire par bouffées conduisant à une fraction volumique locale très élevée et donc, à une forte augmentation locale de la probabilité de coalescence. Nous avons donc, simulé un cas d'émission par bouffées.

Sur la figure IV.1 sont représentés les profils de concentration à différentes distances de la source pour les gouttelettes de $d_p = 12\mu m$, dans le cas d'une émission continue et d'une émission par bouffées. La fraction volumique des gouttelettes entre les deux cas est conservée. On constate que pour l'émission par bouffées, les profils de concentration à partir de $x = 2.88\delta$ ont une concentration au sol plus élevée. Ceci traduit la formation de gouttelettes plus grandes qui sédimentent plus rapidement. Notre simulation confirme que lorsque l'émission se fait par bouffées, la coalescence est favorisée.

IV.2 Fraction volumique élevée

Nous avons voulu étudier l'évolution d'un panache de gouttelettes avec une fraction volumique élevée. La figure IV.2 illustre à travers les profils de concentration moyenne, la comparaison entre les évolutions d'un panache avec une fraction volumique de $\Phi_p = 4 \times 10^{-8}$ et un de $\Phi_p = 4 \times 10^{-4}$. Comme attendu, lorsque la fraction volumique est élevée, la coalescence est favorisée et il y a formation de grosses gouttes. Celles-ci sédimentent et la panache correspondant s'écrase vers le sol plus rapidement.

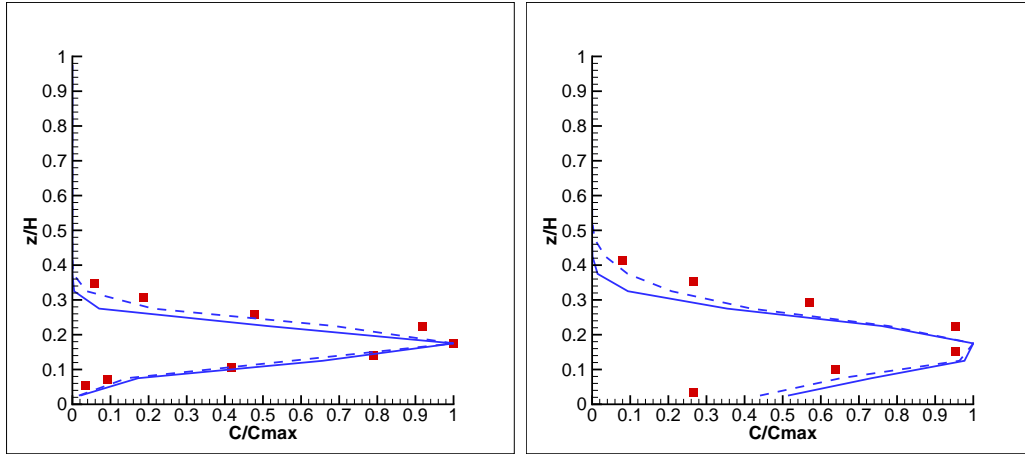
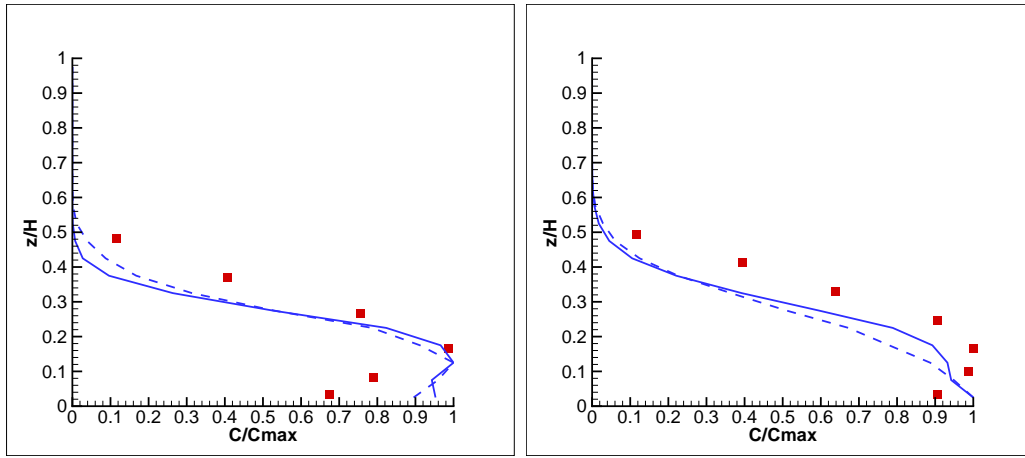
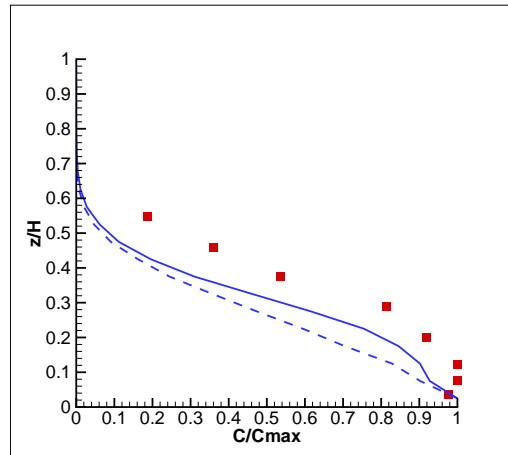
(a) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 0.96\delta$ (b) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 1.92\delta$ (c) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 2.88\delta$ (d) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 3.83\delta$ (e) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 4.79\delta$

FIG. IV.1 – Profil de concentration moyenne de gouttelettes rapportée à sa valeur maximale. —, ARPS gouttelettes de $d_p = 12\mu\text{m}$ émission continue; - - -, ARPS gouttelettes $d_p = 12\mu\text{m}$ émission par bouffées; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) pour le scalaire passif.

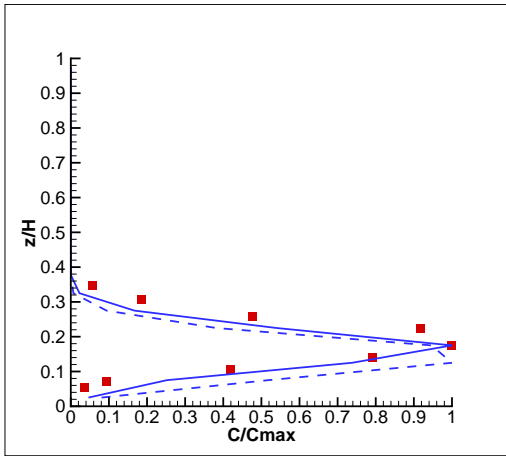
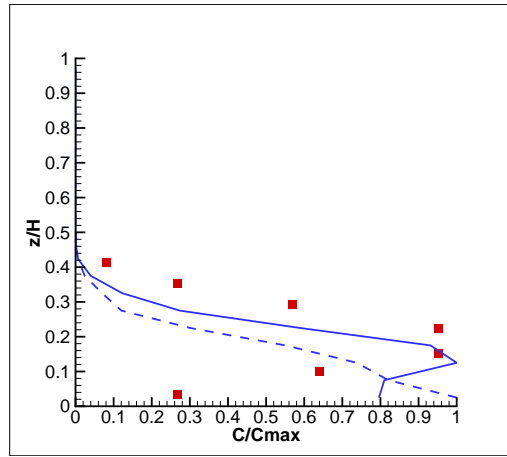
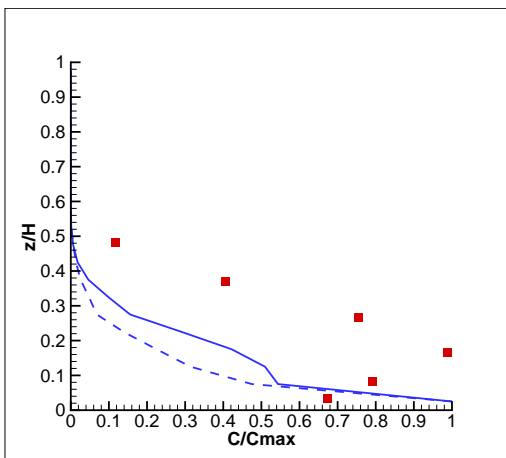
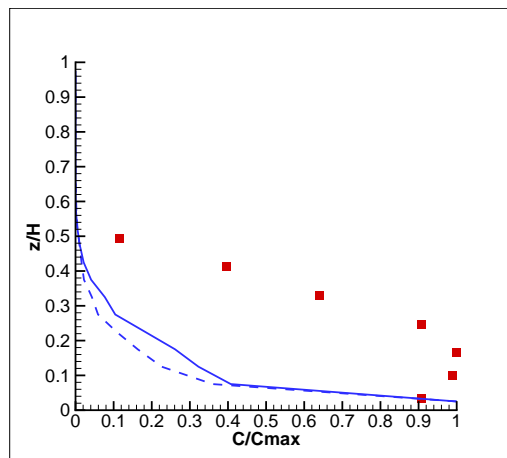
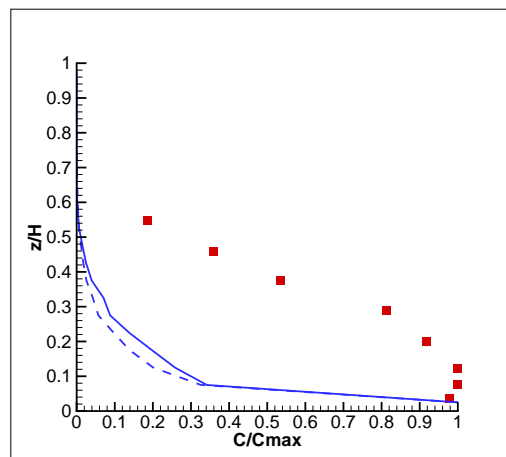
(a) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 0.96\delta$ (b) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 1.92\delta$ (c) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 2.88\delta$ (d) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 3.83\delta$ (e) \bar{C}/\bar{C}_{max} à $x = 4.79\delta$

FIG. IV.2 – Profil de concentration moyenne de gouttelettes rapportée à sa valeur maximale. —, ARPS gouttelettes de $d_p = 60\mu m$, fraction volumique $\Phi_p = 4 \times 10^{-8}$; - - -, ARPS gouttelettes de $d_p = 60\mu m$, fraction volumique $\Phi_p = 4 \times 10^{-4}$; ■, expérience de FACKRELL & ROBINS (1982) pour le scalaire passif.

Annexe V

Reconnaissance de structures tourbillonnaires à l'aide du critère $\Gamma_2(\vec{x})$

Pour visualiser les structures tourbillonnaires, une fonction indicatrice Γ_2 définie par GRAFTIEAUX et al. (2001) est utilisée. Cette fonction est calculée en chaque point de l'écoulement par la relation :

$$\Gamma_2 = \frac{1}{S} \int_S \sin(\theta) d\vec{x} , \quad (\text{V.1})$$

où S est un cercle de rayon R et de centre \vec{x} . La définition de GRAFTIEAUX et al. (2001) a été modifiée par FAVELIER (2002) en définissant θ comme étant l'angle formé entre $\vec{x}' - \vec{x}$ et $\vec{u}(\vec{x}') - \vec{u}(\vec{x})$. Une structure tourbillonnaire est alors définie comme une région où la fonction sans dimension Γ_2 vérifie $2/\pi \leq |\Gamma_2| \leq 1$. La valeur seuil $2/\pi$ permet donc d'identifier toutes les structures présentes dans l'écoulement, indépendamment de leur intensité.

Les figures V.1(a), V.1(b) et V.1(c), illustrent les résultats de cette méthode pour la composante longitudinale de la vitesse en trois plans, (xz) à $y/\delta = 1.13$, (xy) à $z/\delta = 0.04$ et (xy) à $z/\delta = 0.3$, respectivement. La couleur du fond des trois figures correspond aux différentes intensités de la vorticité perpendiculaire au plan. Les structures de période 0.85δ suivant x sont les plus importantes, aussi bien dans le plan (xz) que dans les deux plans (xy) présentés ici. Dans le plan perpendiculaire à la paroi (figure V.1(a)), on peut voir que les structures en proches paroi sont différentes de celles loin de la paroi. D'autre part, dans le plan (xy) à $z/\delta = 0.04$ (figure V.1(b)), en plus des structures périodiques suivant x à raison de 0.85δ , on constate une périodicité en y de $\Delta y \sim 0.3\delta$. Enfin, dans le plan (xy) à $z/\delta = 0.3$, mise à part la périodicité en x on peut discerner une périodicité transverse de $\Delta y \sim \delta$. Ces observations sont corroborées avec les visualisations instantanées du champ de vitesse, (figure 6.1).

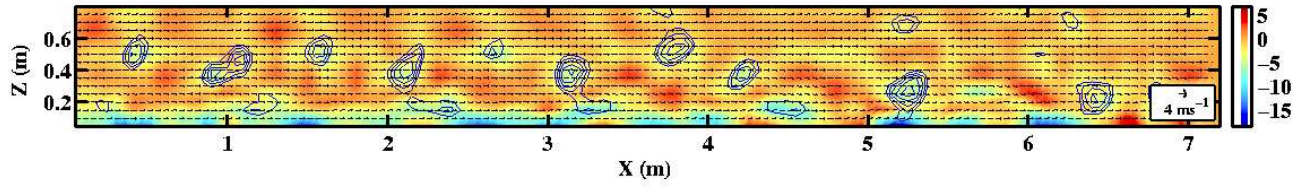
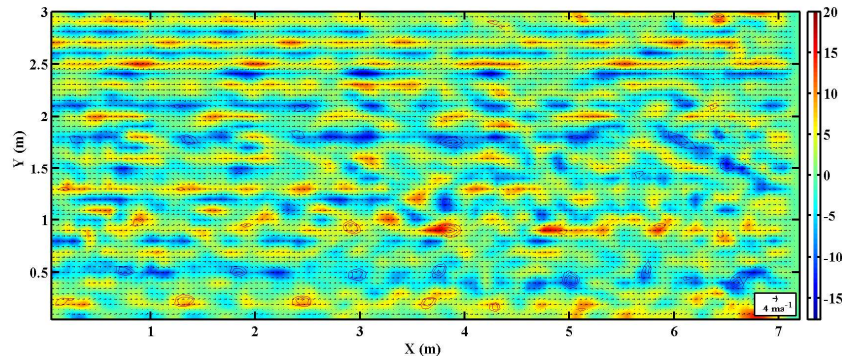
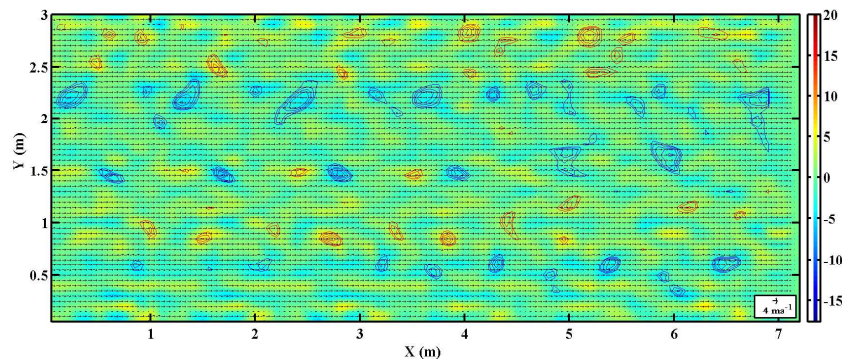
(a) Plan (xz) à $y/\delta = 1.13$ (b) Plan (xy) à $z/\delta = 0.04$ (c) Plan (xy) à $z/\delta = 0.3$

FIG. V.1 – Structures tourbillonnaires et vorticité de l'écoulement.

Bibliographie

- ABRAHAMSON, J. 1975 Collision rate of small particles in a vigorously turbulent fluid. *Chem. Engng. Sci.* **30** , 1371-1379.
- ADAM, J. R., LINDBLAD, N. R. & HENDRICKS, C. D. 1968 The collision, coalescence, and disruption of water droplets. *J. Appl. Phys.* **14** , 11, 5173-5180.
- AGUIRRE, C. 2005 Dispersion et mélange atmosphérique euléro-lagrangien de particules fluides réactives. Application à des cas simples et complexes. *Thèse de doctorat de l'Université Claude Bernard, Lyon I*.
- AGUIRRE, C., GUO, Y. & AYRAULT, M. 2004 Dispersion de particules solides en mouvement de saltation dans un écoulement turbulent. *C. R. Acad. Sci.* **332** , 627-632.
- ANDERSON, R. S. & HAFF, P. K. 1991 Wind modification and bed response during saltation of sand in air. *Acta Mechanica, Suppl.* **1** , 21-51.
- ANDERSON, R. S., SORENSEN, M. & WILLETTS, B. B. 1991 A review of recent progress in our understanding of aeolian sediment transport. *Acta Mechanica, Suppl.* **1** , 1-19.
- ANQUETIN, S., GUILBAUD, C. & CHOLLET, J. P. 1999 Thermal valley inversion impact on the dispersion of a passive pollutant in a complex mountainous area. *Atmospheric Environment* **33** , 3953-3959.
- ANTONIA, R. A., SATYAPRAKASH, B. R. & HUSSAIN, A. K. M. F. 1980 Measurements of dissipation rate and some other characteristics of turbulent plane and circular jets. *Phys. Fluids* **23** , 4, 695-700.
- APTE, S. V., GOROKHOVSKI, M. & MOIN, P. 2003 LES of Atomizing Spray with Stochastic Modeling of Secondary Breakup. *J. Multiphase Flow* **29** , 1503-1522.
- ARKHIPOV, V. A., RATANOV, G. S. & TROFIMOV, V. F. 1978 Experimental investigation of the interaction of colliding droplets. *J. Appl. Mech. Techn. Phys.* **2** , 201-204.
- ARMENIO, V., PIOMELLI, U. & FIOROTTO, V. 1999 Effect of the subgrid scales on particle motion. *Phys. Fluids* **11** , 10, 3030-3042.
- ASHGRIZ, N. & POO, J. Y. 1990 Coalescence and separation in binary collisions of liquid drops. *J. Fluid Mech.* **221** , 183-204.
- AUTON, T. R., HUNT, J. C. R. & PRUD'HOMME, M. 1988 The force exerted on a body in inviscid unsteady non-uniform rotating flow. *J. Fluid Mech.* **197** , 241-257.
- AYRAULT, M. & SIMOENS, S. 1993 Effects of obstacles on the dispersion of dense gas plumes. *STEP-FLADIS report*
- BAGNOLD, R. A. 1941 The Physics of Blown Sand and Desert Dunes. *Methuen, London*

- BAIK, J. J. & KIM, J. J. 1999 A numerical study of flow and pollutant dispersion characteristics in urban street canyons *J. Appl. Meteorol.* **38** , 1576-1589.
- BASSET, A. B. 1888 On the motion of a sphere in a viscous liquid. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **179** , 43-63.
- BERLEMONT, A., DESJONQUERES, P. & GOUEBET, G. 1990 Particle Lagrangian simulation in turbulent flows. *J. Multiphase Flow* **16** , 1, 19-34.
- BOIVIN, M., SIMONIN, O. & SQUIRES, K. D. 1998 Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.* **375** , 235-263.
- BOULET, P. & MOISSETTE, S. 2002 Influence of the particle-turbulence modulation modeling in the simulation of a non-isothermal gas-solid flow. *Int. J. Heat and Mass Transfer* **45** , 4201-4216.
- BOUSSINESQ, J. 1885 Sur la résistance qu'oppose un liquide indéfini en repos sans pesanteur, au mouvement varié d'une sphère solide qu'il mouille sur toute sa surface, quand les vitesses restent bien continues et assez faibles pour que leurs carrés et produits soient négligeables. *C. R. Acad. Sci.* **100** , 935-937.
- BRAZIER-SMITH, P. R., JENNINGS, S. G. & LATHAM, J. 1972 The interaction of falling water drops : coalescence. *Proc. R. Soc. Lond. A* **326** , 393-408.
- BROWN, R. J. & BILGER, R. W. 1996 An experimental study of a reactive plume in grid turbulence. *J. Fluid Mech.* **312** , 373-407.
- BUEVICH, Y. A. 1966 Motion resistance of a particle suspended in a turbulent medium. *Fluid Dynam.* **1** , 119.
- BUSINGER, J.A. 1981 Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling. *D. Reidel Publishing Company; Nieuwstadt, F.T.M. & Van Dop, H. (eds).* , 1-36.
- BUSINGER, J. A., WYNGAARD, J. C., IZUMI, Y. & BRADLEY, E. F. 1971 Flux profiles relationship in the atmospheric surface layer. *J. Atmos. Sci.* **28** , 181-189.
- BYUN, D. W. 1990 On the analytical solutions of flux-profile relationship for the atmospheric surface layer. *J. Appl. Meteor.* **29** , 652-657.
- CARAMAN, N., BORÉE, J. & SIMONIN, O. 2003 Effect of collisions on the dispersed phase fluctuation in a dilute tube flow : Experimental and theoretical analysis. *Phys. Fluids* **15** , 12, 3602-3612.
- CASULLI, V. & CHENG, R. T. 1992 Semi-implicit finite difference methods for the three-dimensional shallow water flow. *Int. J. Num. Meth. Fluids* **15** , 629-648.
- CHAGRAS, V., OESTERLÉ, B. & BOULET, P. 2003 Influence des collisions dans un écoulement gaz-solide anisotherme en conduite verticale et horizontale. *Mécanique et Industries* **4** , 385-389.
- CHATWIN, P. C. & SULLIVAN, P. J. 1990 A simple and unifying physical interpretation of scalar fluctuation measurements from many turbulent shear flows. *J. Fluid Mech.* **212** , 533-556.
- CHEPIL, W. S. 1945 dynamics of wind erosion : I. nature of movement of soil by wind. *Soil. Sci.* **60** , 305-320.
- CHESTER, R., NIMMO, M. & KEYSE, S., 1996 The influence of saharan and middle eastern desert-derived dust on the trace metal composition of mediterranean aerosols and rainwaters : an overview. The impact of desert dust across the Mediterranean. *Kluwer Academic Publishers* , 253-273.
- CHOLLET, J. P., & LESIEUR, M. 1981 Parameterization of small scales of three-dimensional isotropic turbulence utilizing spectral closures. *J. Atmos. Sci.* **38** , 2747-2757.
- CLIFT, R., GRACE, J. R. & WEBER, M. E. 1978 Bubbles, Drops and Particles. *Academic Press, New York*

- COLBECK, I. 1995 Particle emission from outdoor and indoor sources. *Airborne particulate matter, Samara.* , 1-34.
- COPPIN, P. A., RAUPACH, M. R. & LEGG, B. J. 1986 Experiments on scalar dispersion within a model plant canopy. Part II : An elevated plane source *Boundary-Layer Meteorol.* **35** , 167-191.
- CORRSIN, S. & LUMLEY, J. 1956 On the equation of motion for a particle in a turbulent fluid. *Appl. Sci. Res.* **6** , 114-116.
- COUNIHAN, J. 1969 An improved method of simulating an atmospheric boundary layer wind tunnel. *Atmos. Environ.* **3** , 197-214.
- CROWE, C. T., SOMMERFELD, M. & TSUJI, Y. 1998 Multiphase Flows with Droplets and Particles. *CRC Press*
- CROWE, C. T. 1981 On the relative importance of particle-particle collisions in gas-particle flows. *Proceedings of the Conference on gas borne particles.* **paper C78/81** , 135-137.
- CROWE, C. T. 2000 On the models for turbulence modulation in fluid-particle flows. *Int. J. Multiphase Flow* **26** , 719-727.
- CSANADY, G. T. 1963 Turbulent diffusion of heavy particles in the atmosphere. *J. Atmos. Sci.* **20** , 201-208.
- CURL, R. L. 1963 Dispersed Phase Mixing : I. Theory and effects in Simple Reactors. *A.I.Ch.E. Journal* **9** , 2, 175-181.
- DABBERDT, W. F. & HOYDYSH, W. G. 1991 Street canyon dispersion : sensitivity to blockshape and entrainment. *Atmos. Environment* **25** , 1143-1153.
- DAVIDSON, C. I., JAFFREZO, J. -L., MOSHER, B. W., DIBB, J. E., BORYS, R. D., BODHAINE, B. A., RASMUSSEN, R. A., BOUTRON, C. F., GORLACH, U. & CACHIER, H. 1993 Chemical constituents in the air and snow at Dye 3, Greenland-I. Seasonal variations. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics* **27** , 2709-2722.
- DAVIDSON, M. J., MYLNE, K. R., JONES, C. D., PHILLIPS, J. C., PERKINS, R. J., FUNG, J. C. H. & HUNT, J. C. R. 1995 Plume dispersion through large groups of obstacles A field investigation *Atmos. Environment* **29** , 3245-3256.
- DEARDORFF, J. W. 1970 A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers. *J. Fluid Mech.* **41** , 453-480.
- DEARDORFF, J. W. 1980 Stratocumulus-capped mixed layer derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorol.* **18** , 495-527.
- DE MOOR, G. 1983 Les théories de la turbulence dans la couche limite atmosphérique. *Ministère des transports, direction de la météorologie.*
- DEPAUL, F. T. & SHEIH, C. M. 1986 Measurements of wind velocities in a street canyon *Atmos. Environment* **20** , 455-459.
- DRIVAS, P. J. & SHAIR, F. H. 1974 Probing the air flow within the wake downwind of a building by means of a tracer technique *Atmos. Environment* **8** , 1165-1175.
- DROEGEMEIR, K. K., XUE, M., JOHNSON, K., O'KEEFE, M., SAWDEY, A., SABOT, G., WHOLEY, S., MILLS, K. & LIN, N. T. 1995 Weather prediction : a scalable storm-scale model. *High Performance Computing, Addison-Wesley.* , 45-92.
- DURBIN, P. A. 1983 Stochastic Differential Equations and Turbulent Dispersion. *NASA Reference Publication* **1103** , 1-69.
- ELGHOBASHI, S. 1994 On predicting particle-laden turbulent flows. *Appl. Sci. Res.* **52** , 309-329.

- FACKRELL, J. E. & ROBINS, A. G. 1982 Concentration fluctuations and fluxes in plumes from point sources in a turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.* **117** , 1-26.
- FAVELIER, T. 2002 Elaboration d'un critère de reconnaissance de structures tourbillonnaires dans un écoulement. *Rapport de DEA, Ecole Centrale de Lyon, Lyon.*
- FESSLER, J. R., KULICK, J. D. & EATON, J. K. 1994 Preferential concentration of heavy particles in a turbulent channel flow. *Phys. Fluids* **6** , 3742-3749.
- FOUCAUT, J. M. & STANISLAS, M. 1996 Take-off threshold velocity of solid particles lying under a turbulent boundary layer. *Exp. Fluids* **20** , 377-382.
- FOUCAUT, J. M. & STANISLAS, M. 1996 Experimental study of saltating particle trajectories. *Exp. Fluids* **22** , 321-326.
- FRAIGNEAU, Y.C. 1996 Etudes numériques de l'évolution diurne de l'ozone dans la région d'une agglomération. *Thèse de doctorat de la Faculté des sciences de l'Université de Rouen.*
- FRIEDLANDER, S. K. 200 Smoke, Dust, and Haze. *Dover Publications, New York*
- FUCHS, N. A. 1964 The Mechanics of Aerosols. *Oxford University Press, New York*
- FUKAGATA, K. 2000 Large eddy simulation of particulate turbulent channel flows. *Technical Reports from Kungl. Tekniska Hogskolan, FaxénLaboratoriet, Stockholm, Sweden.*
- GAL-CHEN, T. & SOMMERVILLE, R. C. J. 1975 On the use of a coordinate transformation for the solution of the Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.* **17** , 209-228.
- GATIGNOL, R. 1983 The Faxen formulae for a rigid particle in an unsteady non-uniform Stokes flow. *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée* **1** , 143-160.
- GAVIN, L. B., NAUMOV, V. A. & NIKULIN, N. M. 1983 Use of an equation describing the transport of the energy of turbulent pulsations to calculate two-phase jets. *Fluid Dynam.* **16** , 34.
- GERDES, F. & OLIVARI, D. 1999 Analysis of pollutant dispersion in an urban street canyon. *J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn.* **82** , 105-124.
- GENCE, J. N. 1990 Cours de D.E.A.
- GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P. & CABOT, W. H. 1991 A dynamic subgrid-scale viscosity model. *Phys. Fluids* **3** , 1760-1765.
- GETACHEW, D., MINKOWYCZ, W. J. & LAGE, J. L. 2000 A modified form of the $k - \epsilon$ model for turbulent flows of an incompressible fluid in porous media. *Int. J. Heat Mass Transfer* **43** , 2909-2915.
- GICQUEL, L. Y. M., GIVI, P., JABERI, F. A. & POPE, S. B. 2002 Velocity filtered density function for large eddy simulation of turbulent flows. *Phys. Fluids* **14** , 1196-1213.
- GORE, R. A. & CROWE, C. T. 1989 Effect of particle size on the modulating turbulent intensity. *J. Multiphase Flow* **15** , 2, 279-285.
- GOROKHOVSKI, M. A. & SAVELIEV, V. L. 2003 Analyses of Kolmogorov's model of breakup and its application into Lagrangian computation of liquid sprays under air-blast atomization *Phys. Fluids* **15** , 1, 184-192.
- GRAFTIEAUX, L., MICHARD, M. & GROSJEAN, N. 2001 Combining PIV, POD and vortex identification algorithms for the study of unsteady turbulent swirling flows *Measurement. Science and Technology* **12** , 1422-1429
- GUIEU, C., CHESTER, R., NIMMO, M., MARTIN, J. M., GUERZONI, S., NICOLAS, E., MATEU, J. & KEYSE, S. 1997 Atmospheric input of dissolved and particulate metals to the northwestern Mediterranean. *Deep-Sea Research Part II - Topical Studies in Oceanography* **44** , 655-674.

- GUNN, R. 1965 Thunderstorm electrification and raindrop collisions and disjunction in an electric field. *Science* **150** , 888-889.
- HADAMARD, J. S. 1911 Mouvement permanent lent d'une sphère liquide et visqueuse dans un liquide visqueux. *C. R. Acad. Sci.* **152** , 1735-1738.
- HAMAKER, H. C. 1937 The London-van der Waals attraction between spherical particles *Physica* **4** , 1058-1072.
- HESTRONI, G. 1989 Particle-turbulence interaction. *J. Multiphase Flow* **15** , 735-746.
- HIDY, G. M. 1984 Aerosols. An Industrial and Environmental Science. *Academic Press, New York*
- HIRSCHFELDER, J. O., CURTISS, C. F. & BIRD, R. B. 1954 Molecular Theory of Gases and Liquids *Wiley, New York*
- HO, C. A. & SOMMERFELD, M. 2002 Modeling of Micro-Particle Agglomeration in Turbulent Flows. *Chem. Engng. Sci.* **57** , 3073-3084.
- HODIN, A. 1982 The influence of a power station on local climate : a study of the Bugey cooling tower plumes. *Rapport EDF HE-32/82.26, Electricité de France, Chatou, France.*
- HODIN, A., MERY, P. & SAAB, A. 1980 Meteorological influence of wet cooling tower plumes : its measuring, modeling, and forecasting. *Rapport EDF HE-32/80.21, Electricité de France, Chatou, France.*
- HOYDYSH, W. G. & DABBERDT, W. F. 1988. Kinematics and dispersion characteristics of flows in asymmetric street canyons. *Atmos. Environment* **22** , 2677-2689.
- HSU, A. T. & CHEN, J.-Y. 1991 A continuous mixing model for p.d.f. simulations and its applications to combusting shear flows. *Eighth Symposium on turbulent shear flows* , 22.4.1-22.4.5.
- HUNTER, L. J., WATSON, I. D. & JOHNSON, G.T. 1992 An investigation of three-dimensional characteristics of flow regimes with the urban canopy. *Atmos. Environment* **26** , 425-432.
- JAENICKE, R. 1984 Our knowledge about the atmospheric aerosol. 11th *International Conference on Atmospheric Aerosol, Condensation and Ice Nuclei, Budapest* , 99-107
- JIANG, Y. J., UMEMURA, A. & LAW, C. K. 1992 An experimental investigation on the collision behavior of hydrocarbon droplets. *J. Fluid Mech.* **234** , 171-190.
- JOHNSON, G. T. & HUNTER, L. J. 1995 A numerical study of dispersion of passive scalars in city canyons *Boundary-Layer Meteorol.* **75** , 235-262.
- KAFTORI, D., HESTRONI, G. & BANERJEE, S. 1995 Particle behavior in the turbulent boundary layer. I. Motion, deposition and entrainment. *Phys. Fluids* **7** , 5, 1095-1106.
- KAFTORI, D., HESTRONI, G. & BANERJEE, S. 1995 Particle behavior in the turbulent boundary layer. I. Velocity and distribution profiles. *Phys. Fluids* **7** , 5, 1107-1121.
- KASTNER-KLEIN, P. & PLATE, E.J. 1999 Wind-tunnel study of concentration fields in street canyons. *Atmos. Environment* **33** , 3973-3979.
- KIM, J. J. & BAIK, J. J. 1999 A numerical study of thermal effects on flow and pollutant dispersion in urban street canyons *J. Appl. Meteorol.* **38** , 1249-1261.
- KLEMP, J. B. & LILLY, D. K. 1978 Numerical simulation of hydrostatic mountain waves. *J. Atmos. Sci.* **35** , 78-107.
- KLEMP, J. B. & WILHELMSON, R. B. 1978 The simulation of three-dimensional convective storm dynamics. *J. Atmos. Sci.* **35** , 1070-1096.
- KOLMOGOROV, A. N. 1941 On the log-normal distribution of particles sizes during breakup process. *Dokl. Akad. Nauk., SSSR XXXI* **2** , 99-101.

- KROGSTAD, P. A., ANTONIA, R. A. & BROWNE, L. W. B. 1992 Comparison between rough- and smooth-wall turbulent boundary layer *J. Fluid. Mech.* **245** , 599-617.
- KROGSTAD, P. A., & ANTONIA, R. A. 1994 Structure of turbulent boundary layers on smooth and rough walls. *J. Fluid. Mech.* **277** , 1-21.
- KULICK, J. D., FESSLER, J. R. & EATON, J. K. 1994 Particle response and turbulent modification in fully developed channel flow. *J. Fluid. Mech.* **277** , 109-134.
- LAKEHAL, D., MESTAYER, P. G., EDSON, J. B. & ANQUETIN, S. 1995 Euler-Lagrangian simulation of raindrop trajectories and impacts within the urban canopy *Atmos. Environment* **29** , 3501-3517.
- LASHERAS, J. C., VILLERMAUX, E. & HOPFINGER, E. J. 1998 Break-up and atomization of a round water jet by a high-speed annular air jet. *J. Fluid Mech.* **357** , 351-379.
- LEE, I. Y. & PARK, H. M. 1994 Parameterization of the pollutant transport and dispersion in urban street canyons *Atmos. Environment* **28** , 2343-2349.
- LIEN, F. S., YEE, E. & WILSON, D. J. 2005 Numerical modelling of the turbulent flow developing within and over a 3-D building array. Part II : mathematical foundation for a distributed force approach. *Boundary-Layer Meteorol.* **114** , 245-285.
- LILLY, D. K. 1967 The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. *IBM Computational Symposium on Environmental Science, New York* , 195-210.
- LILLY, D. K. 1992 A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids* **4** , 633-635.
- LIST, R. & WHELPDALE, D. M. 1969 A preliminary investigation of factors affecting the coalescence of colliding water drops. *J. Atmos. Sci.* **28** , 305-308.
- LIU, A. B. & REITZ, R. D. 1993 Mechanism of air-assisted liquid atomization. *J. Atomization and Sprays* **3** , 55.
- LOFFLER, F. 1988 Staubabscheiden. *Stuttgart, Georg Thieme Verlag*
- LOUIS, J. F., TIEDTKE, M. & GELEYEN, J. F. 1981 A short history of the PBL parameterization at ECMWF. *Workshop on Planetary Boundary Layer Parameterization, European Centre for Medium Range Weather Forecasts*
- MADELAINÉ, G. 1982 Mesure de l'aérosol troposphérique. *IV symposium sur la recherche en matière de pollution atmosphérique.*
- MAGNAUDET, J., RIVERO, M. & FABRE, J. 1995 Accelerated flows past a solid sphere or a spherical bubble. Part I : Steady straining flow. *J. Fluid Mech.* **284** , 97-135.
- MARTICORENA, B. & BERGAMETTI, G. 1995 Modeling the atmospheric dust cycle : 1. Design of a soil-derived dust emission scheme. *J. Geophys. Res.* **100** , 16, 415-430.
- MARTICORENA, B., BERGAMETTI, G. & AUMONT, B. 1997 Modeling the atmospheric dust cycle : 2. Simulation of Sahara dust sources. *J. Geophys. Res.* **102** , 4387-4404.
- MARTÍNEZ-BAZÁN, C., MONTANÉS, J. L. & LASHERAS, J. C. 1999 on the breakup frequency of an air bubble injected into a fully developed turbulent flow. *J. Fluid Mech.* **401** , 157-182.
- MASON, P. J. & CALLEN, N. S. 1986 On the magnitude of the subgrid-scale eddy coefficient in large-eddy simulations of turbulent channel flow. *J. Fluid Mech.* **162** , 439-462.
- MAXEY, R. & RILEY, J. 1983 Equation of motion of a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Phys. Fluids* **26** , 4, 883-889.

- MC EWAN, I. K. & WILLETS, B. B. 1991 Numerical model of the saltation cloud. *Acta Mechanica, Suppl.* **1** , 53-66.
- MC EWAN, I. K., WILLETS, B. B. & RICE, M. A. 1992 The grain/bed collision in sand transport by wind. *Sedimentology* **39** , 971-981.
- MEEDER, J. P. & NIEUWSTADT, F. T. M. 2000 Large-eddy simulation of the turbulent dispersion of a reactive plume from a point source into a neutral atmospheric boundary layer. *Atmos. Environment* **34** , 3563-3573.
- MENON, S., YEUNG, P. K. & KIM, W. W. 1996 Effect of subgrid models on the computed interscale energy transfer in isotropic turbulence. *Comput. Fluids* **25** , 80-165.
- MERONEY, R. N., PAVAGEAU, M., RAFAILIDIS, S. & SCHATZMANN, M. 1996 Study of line source characteristics for 2-D physical modelling of pollutant dispersion in street canyons. *J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn.* **62** , 37-56.
- MESTAYER, P.G. & ANQUETIN, S. 1994 Atmospheric mesoscale flow fields - VII Climatology of cities. *Ed. Rys, F.S. & Gyr, A., Atmospheric library, Kluwer Academic Publishers* , 165-189.
- MESTAYER, P. M., CHOLLET, J. P., COPALLE, A., GEORGE, J., CHAUMERLIAC, N., AYRAULT, M., TOUPANE, G., MARTIN, B., SACRÉ, C., CRISSIMO, B. & COURTY, J. C. 1995 Modélisation de la dynamique, la physique et la photochimie de l'atmosphère urbaine. *Le projet Sub-Méso. In : Fontan J, Elichegaray C (Eds.), Pollution Atmosphérique à l'échelle locale et régionale. ADEME-CNRS PIR Villes - CNRS Programme Environnement Vie et Société - Ministère de l'Environnement*
- MÉTAIS, O. & LESIEUR, M. 1992 Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably stratified turbulence. *J. Fluid Mech.* **239** , 157-194.
- MICHELOT C. 1996 Développement d'un modèle stochastique lagrangien. Application à la dispersion et à la chimie de l'atmosphère *Thèse de doctorat de l'Ecole Centrale de Lyon, Lyon*
- MINIER, J. P. 1988 Construction de la trajectoire d'une particule dans un écoulement turbulent. *Rapport EDF HE-44/88.16, Electricité de France, Chatou, France.*
- MITHA, S., TRAN, M. Q., WERNER, B. T. & HAFF, P. K. 1986 The grain-bed impact in aeolian saltation. *Acta Mechanica* **63** , 267-278.
- MOENG, C. H. & WYNGAARD, J. C. 1988 Spectral analysis of large-eddy simulation of the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.* **45** , 3573-3587.
- MOIN, P. & KIM, J. 1982 Numerical investigation of the turbulent channel flow. *J. Fluid Mech.* **118** , 341-377.
- MOIN, P., SQUIRES, K., CABOT, W. & LEE, S. 1991 A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids* **A3** , 2746-2757.
- MOISSETTE S. 2001 Etude dynamique et thermique par modélisation eulérienne-lagrangienne des effets liés aux interactions turbulence-particules dans un écoulement gaz-solide en conduite verticale non-isotherme. *Thèse de doctorat de l'Université Henri Poincaré, Nancy I*
- MOLE, N. & CLARKE, E. D. 1995 Relationships between higher moments of concentration and of dose in turbulent dispersion. *Boundary-Layer Meteorol.* **73** , 35-52.
- MONIN, A. S. 1970 The atmospheric boundary layer. *Ann. Rev. Fluid Mech.* , 225-250.
- MONIN, A. S. & YAGLOM, A. M. 1975 Statistical Fluid Mechanics. *MIT Press Vol I et II.*
- MOOR, D. W. 1963 The boundary layer on a spherical gas bubble. *J. Fluid Mech.* **16** , 161-176.
- MURAKAMI, S. 1996 Current status and future trends in CWE. *2nd International Symposium on Computational Wind Engineering, Colorado* , 30

- MUTCH, T. A. 1976 The Geology of Mars *Princeton University Press*
- NALPANIS, P., HUNT, J. C. R. & BARRETT, C. F. 1993 Saltating particles over flat beds. *J. Fluid Mech.* **251** , 661-685.
- OESTERLÉ, B. & PETITJEAN, A. 1993 Simulation of particle-to-particle interactions in gas-solid flow. *Int. J. Multiphase Flow* **19** , 199-211.
- OKE, T. R. 1988 Street design and urban canopy layer climate. *Energy and Buildings* **11** , 103-113.
- OKE, T. R. & FUGGLE, R. F. 1972 Comparaison of urban/rural counter and net radiation at night. *Boundary-Layer Meteorol.* **2** , 290-308.
- ORLANSKI, I. 1975 A rational subdivision of scales for atmospheric processes. *Bull. Amer. Meteor. Soc.* **56** , 529-530.
- ORLANSKI, I. 1976 A simple boundary condition for unbounded hyperbolic flows. *J. Comp. Phys.* **21** , 251-269.
- ORME, M. 1997 Experiments on droplet collisions, bounce, coalescence and disruption. *Prog. Energy Combust. Sci.* **23** , 65-79
- O'ROURKE, P. J. 1981 Collective drop effects on vaporizing liquid sprays. *Doctoral dissertation, Princeton University*
- O'ROURKE, P. J. & AMSDEN, A. A. 1987 The T.A.B. method for numerical calculation of spray droplet breakup. *SAE 872089*
- OSEEN, C. 1927 Hydromechanik. *Leipzig : Akademische Verlag.*
- OWEEN, R. P. 1964 Saltation of uniform grains in air. *J. Fluid Mech.* **20** , 225-242.
- PASQUILL, F. & SMITH, F.B. 1983 Atmospheric diffusion - Study of the dispersion of wind borne material from industrial and other sources. *Ellis Horwood Series in Environmental Science, 3rd edition.*
- PATTERSON, M. A. & REITZ, R. D. 1998 Modeling the effect of fuel spray characteristics on Diesel engine combustion and emission. *SAE 980131*
- PAVAGEAU, M. & SCHATZMANN, M. 1999 Wind tunnel measurements of concentration fluctuations in an urban street canyon. *Atmos. Environment* **33** , 3961-3971.
- PIELKE, R. A. 1984 Mesoscale Meteorological Modeling *Academic Press* , 612.
- PILCH, M. & ERDMAN, C. A. 1987 Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *Int. J. Multiphase Flow* **13** , 6, 741-757.
- PIOMELLI, U., FERZIGER, J. H. & MOIN, P. 1988 Model consistency in large eddy simulation of turbulent channel flows. *Phys. Fluids* **31** , 1884-1891.
- PLANCHON, F. A. M., BOUTRON, C. F., BARBANTE, C., COZZI, G., GASPARI, V., WOLFF, E. W., FERRARI, C. P. & CESCONE, P. 2002 Short-term variations in the occurrence of heavy metals in Antarctic snow from Coats Land since the 1920s. *The Science of The Total Environment* **300** , 129-142.
- PODVYSOTSKY, A. M. & SHRAIBER, A. A. 1984 Coalescence and break-up of droplets in two-phase flows. *Int. J. Multiphase Flow* **10** , 2, 195-209.
- POPE, S. B. 1985 P.D.F. methods for turbulent reactive flows. *Prog. Energy Combust. Sci.* **11** , 119-192.
- PORAHMADI, F., & HUMPHREY, J. A. 1983 P.D.F. methods for turbulent reactive flows. *Prog. Energy Combust. Sci.* **11** , 119-192.

- POZORSKI, J. & MINIER, J. P. 1998 On the Lagrangian turbulent dispersion models based on the Langevin equation. *Int. J. Multiphase Flow* **24** , 913-945.
- POZORSKI, J., APTE, S. V. & RAMAN, V. 2004 Filtered particle tracking for dispersed two-phase turbulent flows. *Center for Turbulence Research, Proceedings of the Summer Program 2004* , 329-340.
- QIAN, J. & LAW, C. K. 1997 Regimes of coalescence and separation in droplet collision. *J. Fluid Mech.* **331** , 59-80.
- RAJARTNAM, N. 1976 *Turbulent Jets Elsevier, Oxford, New York*
- READE, W. C. & COLLINS, L. R. 2000 A numerical study of the particle size distribution of an aerosol undergoing turbulent coagulation. *J. Fluid Mech.* **415** , 45-64.
- REITZ, R. D. & DIWAKAR, R. 1986 Effect of drop breakup on fuel spray. *SAE 860469*
- REITZ, R. D. & DIWAKAR, R. 1987 Structure of high pressure fuel sprays. *SAE 870598*
- RENOUX, A. & BOULAND, D. 1998 Les Aérosols Physique et Métrologie. *Lavoisier, Paris* , 301.
- REYNOLDS, A. M. 2000 On the formulation of Lagrangian stochastic models for heavy-particle trajectories. *J. Colloid. Int. Sci.* **232** , 260-268.
- REYNOLDS, A. M. & COHEN, J. E. 2002 Stochastic simulation of heavy-particle trajectories in turbulent flows. *Phys. Fluids* **14** , 342-351.
- RIBCZYNSKI, W. 1911 On the translating motion of a fluid sphere in a viscous medium. *Bull. Int. Acad. Pol. Sci. Lett. Cl. Sci. Math. Nat.* **A** , 40-46.
- RILEY, J. J. 1971 . *Doctoral dissertation, The Johns Hopkins University, Baltimore, Maryland*
- SAFFMAN, P. G. 1965 The lift on a small sphere in a slow shear flow. *J. Fluid Mech.* **22** , 385-400.
- SAFFMAN, P. G. & TURNER, J. S. 1956 On the collision of drops in turbulent clouds. *J. Fluid Mech.* **1** , 16-30.
- SANKARAN, V. & MENON, S. 2002 LES of spray combustion in swirling flows. *J. of Turbulence* **3** , 1-23.
- SARTOR, J. D. & ABBOTT, C. E. 1968 Charge transfer between uncharged water droplets in free fall in an electric field. *J. Geophys. Res.* **73** , 20, 6415-6423.
- SAWFORD, B. L. & GUEST, F. M. 1991 Lagrangian statistical simulation of the turbulent motion of heavy particles. *Boundary-Layer Meteorol.* **54** , 147-166.
- SCHILLER, L. & NAUMAN, A. 1935 A drag coefficient correlation. *V.D.I. Zeitung* **77** , 318-320.
- SCHLICHTING, H. 1968 *Boundary Layer Theory. Mc Graw-Hill, New York*
- SCHOTLAND, R. M. 1960 Experimental results relating to the coalescence of water drops with water surfaces. *Discussions of the Faraday Society* **30** , 72-77.
- SCHUMANN, U. 1991 Subgrid length-scales for large-eddy simulation of stratified turbulence. *Theor. Comput. Fluid Dynamics* **2** , 279-290.
- SEINFELD, J. H. 1986 *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution. John Wiley and Sons, New York.*
- SEINFELD, J. H. & PANDIS, S. N. 1998 *Atmospheric Chemistry and Physics. John Wiley and Sons, New York.*
- SHAO, Y. 1995 The fractional Ornstein-Uhlenbeck process as a representation on the entrainment of dust by wind. *Physica D* **83** , 461-477.

- SHAO, Y. 2000 Physics and Modeling of Wind Erosion. *Atmospheric and Oceanographic Sciences Library, Kluwer Academic Publishers*
- SHAO, Y. & LI, A. 1999 Numerical Modeling of Saltation in the Atmospheric Surface Layer. *Boundary-Layer Meteorol.* **91** , 199-225.
- SHAO, Y. & LU, H. 1999 A new model for dust emission by saltation bombardment. *J. Geophys. Res.* **104** , 16, 827-842.
- SHAO, Y. & RAUPACH, M. R. 1993 Effect of saltation bombardment on the entrainment of dust by wind. *J. Geophys. Res.* **98** , 12, 719-726.
- SHARATH, S. G. & ZHOU, Y. 1996 Analysis and modeling of subgrid scalar mixing using numerical data. *Phys. Fluids* **8** , 5, 1224-1236.
- SHLIEN, D. J. & CORRISIN, S. 1976 Dispersion measurements in a turbulent boundary layer. *Int. J. Heat Mass Transfer* **19** , 285-295.
- SIMOËNS, S., MICHELOT, C., AYRAULT, M., & SABELNIKOV, V. 1997 Modèle stochastique de diffusion continu en temps. *C. R. Mécanique* **324** , 667-678.
- SIMONIN, O. & SQUIRES, K. D. 2001 On turbulence modification in dense particulate two-phase flows. *Euromech. Colloquium 421 on Strongly-Coupled Dispersed Two-Phase Flows, Grenoble, France*
- SINI, J. F., ANQUETIN, S. & MESTAYER, P. G. 1996 Pollutant dispersion and thermal effects in urban street canyons *Atmos. Environment* **30** , 2659-2677.
- SKAMAROCK, W. C. & KLEMP, J. B. 1992 The stability of time-splitting numerical methods for the hydrostatic and nonhydrostatic elastic systems. *Mon. Weath. Rev.* **120** , 2109-2127.
- SMAGORINSKY, J. 1963 General circulation experiments with the primitive equations. I. The basic experiment. *Mon. Weath. Rev.* **91** , 99-164.
- SMAGORINSKY, J. 1974 Global Atmospheric Modeling and the Numerical Simulation of Climate. In *HESS, W.N. (ed), Weather and Climate Modification, Wiley, New-York.*
- SMOLUCHOWSKI, V. 1917 Versuch einer mathematischen theorie des koagulationskinetik kollider lasungen. *Z. Phys. Chem.* **92** , 129
- SNYDER, W. H. & LUMLEY, J. L. 1971 Some measurements of particles velocity autocorrelation functions in turbulent flow. *J. Fluid Mech.* **48** , 41-71.
- SOMMERFELD, M. 1995 The importance of inter-particle collisions in a horizontal gas-solid channel flow. *Gas-Particle Flow, ASME-FED.* **228** , 335-345.
- SOMMERFELD, M. 2000 Theoretical and experimental modeling of particulate flow : Overview and Fundamentals. *VKI for fluid dynamics, Lecture Series 2000-06.*
- SOMMERFELD, M. 2001 Validation of a stochastic Lagrangian modeling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. *Int. J. Multiphase Flow* **27** , 1829-1858.
- SOMMERFELD, M. 2003 Analysis of collision effects for turbulent gas-particle flow in a horizontal channel. Part I : Particle transport. *Int. J. Multiphase Flow* **29** , 675-699.
- SOMMERFELD, M. & KUSSIN, J. 2003 Analysis of collision effects for turbulent gas-particle flow in a horizontal channel. Part II : Integral properties and validation. *Int. J. Multiphase Flow* **29** , 701-718.
- SOMMERFELD, M. & ZIVKOVIC, G. 1992 Recent advances in the numerical simulation of pneumatic conveying through pipe systems. *Computational Methods in Applied Science, Hirsch Ch., Periaux, J. & Onate, E. Invited Lectures and Special Technological Sessions of the First European Computational Fluid Dynamics Conference and the First European Conference on Numerical Methods in Engineering, Bruxelles* , 201-212.

- SORENSEN, M. 1991 An analytic model of wind-blown sand transport. *Acta Mechanica, Suppl.* **1** , 67-81.
- SPALDING, D. B. 1971 Concentration fluctuations in a round turbulent free jet. *Chem. Engng. Sci.* **26** , 95-107.
- SQUIRES, K. D. & EATON, J. K. 1991 Preferential concentration of particles by turbulence *Phys. Fluids* **3** , 5, 1169-1178.
- SQUIRES, K. D. & EATON, J. K. 1994 Effect of selective modification of turbulence on two-equation models for particle-laden turbulent flows. *Trans. ASME I : J. Fluids Engng.* **116** , 778.
- STOKES, G. G. 1951 On the effect of inertial friction of fluids on the motion of pendulums. *Trans. Camb. Phil. Soc.* **9** , 8-106.
- STULL, R. B. 1988 An Introduction to Boundary Layer Meteorology. *Atmospheric Science Library, Kluwer Academic Publishers.*
- SUNDARAM, S. & COLLINS, L. R. 1997 Collision statistics in an isotropic particle-laden turbulent suspension. Part 1. Direct numerical simulations. *J. Fluid Mech.* **335** , 75-109.
- SYKES, R. I. & HENN, D. S. 1992 Large-eddy simulation of the concentration fluctuations in a dispersing plume. *Atmos. Environment* **26A** , 3127-3144.
- SYKES, R. I., HENN, D. S. & PARKER, S. F. 1992 Large-eddy simulation of a turbulent reacting plume. *Atmos. Environment* **26A** , 2565-2574.
- TANAKA, T. & TSUJI, Y. 1991 Numerical simulation of gas-solid two-phase flow in a vertical pipe : on the effect of inter-particle collision. *FED, 121 Gas-Solid Flows*
- TANIÈRE, A., OESTERLÉ, B. & MONNIER, J. C. 1997 On the behavior of solid particles in a horizontal boundary layer with turbulence end saltation effects. *Exp. Fluids* **23** , 463-471.
- TAYLOR, G. I. 1921 Diffusion by continuous movements. *Scientific Papers. Cambridge University Press* **vol.II** , 172-184.
- TCHEN, C. M. 1947 Mean value and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid. *Doctoral dissertation, Delft University, The Hague*
- THOMSON, D. J. 1987 Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *J. Fluid Mech.* **180** , 529-556.
- TSOURIS, C. & TALVARIDES, L. L. 1994 Breakage and coalescence models for drops in turbulent dispersions. *AIChE Journal* **40** , 3, 395-406.
- TSUJI, Y., MORIKAWA, Y. & SHIOMI, H. 1984 LDV measurements of an air-solid two phase flow in a vertical pipe. *J. Fluid Mech.* **139** , 417-434.
- VAN DOP, H., NIEUWSTADT, F. T. M. & HUNT, J. C. R. 1985 Random walk models for particle displacements in inhomogeneous unsteady turbulent flows. *Phys. Fluids* **28** , 6, 1639-1653.
- VAN DRIEST, E. R. 1956 On turbulent flow near a wall. *J. Aero. Sci.* **23** , 1007-1011.
- VINÇONT, J. Y. 1999 Détermination des flux turbulents de masse dans le sillage d'un obstacle : Application à l'intérieur de la canopée urbaine. *Thèse de doctorat de l'Ecole Centrale de Lyon.*
- VINÇONT, J. Y., SIMOËNS, S., AYRAULT, M., & WALLACE, J. M. 2000 Passive scalar dispersion in a turbulent boundary layer from a line source at the wall and downstream of an obstacle. *J. Fluid Mech.* **424** , 127-167.
- VINKOVIC I. 2002 Modélisation stochastique du transport de particules lourdes dans un écoulement turbulent. *Rapport de DEA, Université Paul Sabatier, Toulouse.*

- VINKOVIC I., AYRAULT, M., GUO, Y., CUI, GUIXIAN & ZHANG, Z. 2003 A stochastic model for the eolian saltation and suspension transport. *3rd Int. Symp. on Turbulent Shear Flow Phenomena, TSFP3, Sendai, 25-27 June, Japan*.
- WANG, L. P. & MAXEY, M. R. 1993 Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence *J. Fluid Mech.* **256** , 27-68.
- WANG, Q. & SQUIRES K. D. 1996 Large eddy simulation of particle-laden turbulent channel flow. *Phys. Fluids* **8** , 5, 1207-1223.
- WANG, L. P. & STOCK, D. E. 1993 Dispersion of heavy particles by turbulent motion. *J. Atmos. Sci.* **50** , 1897-1913.
- WERNER, B. T. 1990 A steady state model of wind blown sand transport. *J. Geol.* **98** , 1-17.
- WHITE, B. R. & SCHULZ, J. C. 1977 Magnus effect in saltation. *J. Fluid Mech.* **81** , 497-512.
- WILLETTS, B. B. & RICE, M. A. 1985 Inter-saltation collisions. In *Barndorff-Nielsen, O. E., Möller, J. T., Rasmussen, K. R. and Willetts, B. B., editors, Proceedings of the International Workshop on the Physics of Blown Sand, Aarhus University, Denmark.* **8** , 83-100.
- WILLETTS, B. B. & RICE, M. A. 1986 Collisions in aeolian saltation. *Acta Mechanica* **63** , 255-265.
- WILLETTS, B. B., MCEWAN, I. K. & RICE, M. A. 1991 Initiation of the motion of quartz sand grains. *Acta Mechanica, Suppl.* **1** , 123-134.
- WITHBY, K. T. 1973 On the multimodal nature of atmospheric size distribution. *3rd International Conference on Nucleation, Leningrad, URSS*
- WOODS, J. D. & MASON, B. J. 1965 The wake capture of water drops in air. *Quart. J. Royal Meteor. Soc.* **91** , 35-43.
- WYNGAARD, J.C. 1981 Atmospheric turbulence and air pollution modeling. *D. Reidel Publishing Company; Nieuwstadt, F.T.M. & Van Dop, H. (eds).* , 69-106.
- XIA, J. & LEUNG, Y. C. 2001 Pollutant dispersion in urban street canopies *Atmospheric Environment* **35** , 2033-2043.
- XIE, Z., HAYDEN, P., VOKE R. & ROBINS, A. G. 2004 Large-eddy simulation of dispersion : Comparison between elevated and ground-level sources. *J. of Turbulence* **5** , 1-16.
- XUE, M., DROEGEMEIER, K. K. & WONG, V. 2000 The advanced regional prediction system (ARPS) - a multi-scale nonhydrostatic atmospheric simulation and prediction model. Part I : Model dynamics and verification. *Meteorol. Atmos. Phys.* **75** , 161-193.
- XUE, M., DROEGEMEIER, K. K., WONG, V., SHAPIRO, A., BREWSTER, K., CARR, F., WEBER, D., LIU, Y. & WANG, D. 2001 The advanced regional prediction system (ARPS) - a multi-scale nonhydrostatic atmospheric simulation and prediction tool. Part II : Model physics and application. *Meteorol. Atmos. Phys.* **76** , 143-165.
- YAMAMOTO, Y., POTTHOFF, M., TANAKA, T., KASHIJIMA, T. & TSUJI, Y. 2001 Large-eddy simulation of turbulent gas-particle flow in a vertical channel : effects of considering inter-particle collisions. *J. Fluid Mech.* **442** , 303-334.
- ZAICHIK, L. I, SIMONIN, O. & ALIPCHENKOV, V. M. 2003 Two statistical models for predicting collision rates of inertial particles in homogeneous isotropic turbulence. *Phys. Fluids* **15** , 10, 2995-3005.
- ZHANG, X. H., VINKOVIC, I., DONG, Z. B., WANG, H. T. & AYRAULT, M. 2004 Experimental and numerical determination of solid saltating particle dispersion in a turbulent boundary layer. *Proceedings of the 4th International Conference on Fluid Mechanics, Dalian, China.* , 475-478.

- ZHOU, Y, WEXLER, A. S. & WANG, L. P. 1998 On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. II. Finite inertia case. *Phys. Fluids* **10** , 5, 1206-1216.
- ZHUANG, Y., WILSON, J. D. & LOZOWSKI, E. P. 1989 A trajectory-simulation model for heavy particle motion in turbulent flow. *Transactions of the ASME, J. Fluid Eng.* **111** , 492-494.
- ZINGG, A. W. 1953 Wind-tunnel studies of the movement of sedimentary material. *In Proceedings of the 5th Hydraulic Conference, Iowa City, Iowa* **34** , 111-135.