

Modélisation lagrangienne stochastique de la dispersion

Dans un premier temps, ce chapitre introduit de manière générale le formalisme lagrangien de la dispersion de particules incluses dans un écoulement porteur donné. Le processus de dispersion turbulente et les différents modèles stochastiques associés sont ensuite présentés. D’abord, nous présentons les modèles communément référencés sous le nom de méthodes “PDF”. Ces modèles se basent sur une approche initiée par Pope et sont couramment utilisés dans les domaines de la combustion turbulente ou des écoulements diphasiques : il s’agit précisément de l’approche adoptée dans *Code_Saturne* pour ce type d’applications. Ensuite, nous présentons une revue générale des différents modèles stochastiques de dispersion de la littérature atmosphérique. Finalement, nous décrivons la stratégie de modélisation qui sera suivie dans notre travail de thèse.

Sommaire

3.1	Modélisation lagrangienne de la dispersion turbulente . . .	38
3.1.1	Evolution de la phase continue	38
3.1.2	Evolution de la phase dispersée	39
3.1.3	Modélisation stochastique de la vitesse du fluide vu \mathbf{U}_s	42
3.2	Modèles lagrangiens de la littérature atmosphérique . . .	53
3.2.1	Cas de la turbulence homogène isotrope	54
3.2.2	Modèles stochastiques en turbulence inhomogène	55
3.3	Notre stratégie de modélisation	59

3.1 Modélisation lagrangienne de la dispersion turbulente

Pour modéliser la dispersion de particules dans un écoulement atmosphérique donné, l'approche est de considérer deux phases : la *phase continue*, correspondant dans notre cas au vent, et la *phase dispersée*, correspondant aux particules de polluant.

3.1.1 Evolution de la phase continue

La phase continue, *i.e.* le fluide porteur, est ici supposée compressible mais anélastique. Pour rappel, nous avons défini en chapitre 1 la variable $\mathbf{U}_f(\mathbf{x}, t)$ comme étant la vitesse instantanée du fluide. L'évolution spatio-temporelle de cette variable est régie par les équations de Navier-Stokes, rappelées en chapitre 1 :

$$\frac{\partial(\rho U_{f,i})}{\partial x_i} = 0, \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial(\rho U_{f,i})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_{f,i} U_{f,j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (3.1b)$$

où $P = p + \rho g x_i \delta_{iz}$.

Suivant la décomposition de Reynolds, on découpe ensuite $U_{f,i}$ et P en une partie moyennée et une partie fluctuante :

$$U_{f,i} = \langle U_{f,i} \rangle + U'_{f,i}, \quad (3.2a)$$

$$P = \langle P \rangle + P'. \quad (3.2b)$$

Les équations moyennées obtenues sont ainsi :

$$\frac{\partial(\rho \langle U_{f,i} \rangle)}{\partial x_i} = 0, \quad (3.3a)$$

$$\rho \frac{\partial \langle U_{f,i} \rangle}{\partial t} + \rho \langle U_{f,j} \rangle \frac{\partial \langle U_{f,i} \rangle}{\partial x_j} = -\frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\langle \tau_{ij} \rangle - \rho \langle U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle). \quad (3.3b)$$

Dans le cadre de nos travaux, ces équations sont résolues par *Code_Saturne* via des modèles de fermeture $k - \epsilon$ (premier ordre) ou $R_{ij} - \epsilon$ (second ordre). Nous avons donc, suite à cela, accès à la variable $\langle U_{f,i}(\mathbf{x}, t) \rangle$, *i.e.* le champ moyen de la vitesse de l'écoulement porteur, et aux corrélations du second ordre $\langle U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle$. Le champ instantané $U_{f,i}(\mathbf{x}, t)$, lui, reste inconnu.

3.1.2 Evolution de la phase dispersée

3.1.2.1 Principe fondamental de la dynamique

Soit $\mathbf{X}_p(t)$ la position d'une particule quelconque incluse dans l'écoulement porteur à un instant t . Comme mentionné dans le chapitre précédent, suivre la trajectoire de cette particule revient à la résolution de l'équation suivante :

$$d\mathbf{X}_p = \mathbf{U}_p(t)dt , \quad (3.4)$$

où $\mathbf{U}_p(t)$ représente la vitesse de la particule.

Le mouvement de chaque particule incluse dans l'écoulement porteur, décrit par $\mathbf{U}_p(t)$, est régi par le principe fondamental de la dynamique. Afin de décrire l'évolution de la phase dispersée, il s'agit donc de réaliser un bilan des forces exercées par l'écoulement porteur sur chaque particule, par hypothèse sphérique et indéformable. Comme l'explique [PIALAT \(2007\)](#) dans ses travaux de thèse, ces forces sont nombreuses et leur expression est due aux travaux de [STOKES \(1851\)](#), [BASSET \(1888\)](#), [BOUSSINESQ \(1903\)](#) et [OSEEN \(1927\)](#), qui ont entrepris de résoudre les équations de Navier-Stokes pour une sphère en chute libre dans un fluide au repos. L'équation obtenue est la suivante :

$$\rho_p \frac{\pi D_p^3}{6} \frac{d\mathbf{U}_p}{dt} = \rho_p \frac{\pi D_p^3}{6} \frac{\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_p}{\tau_p} + \frac{\pi D_p^3}{6} (\rho_p - \rho) \mathbf{g} + \mathbf{F}_{ma} + \mathbf{F}_{gp} + \mathbf{F}_h , \quad (3.5)$$

où :

- D_p et ρ_p sont respectivement le diamètre et la masse volumique de la particule ;
- \mathbf{U}_s est la vitesse du fluide vu par la particule, *i.e.* la vitesse du fluide échantillonnée le long de la trajectoire de la particule lorsque celle-ci se déplace dans l'air : $\mathbf{U}_s(t) = \mathbf{U}_f(\mathbf{X}_p(t), t)$.

Explicitons à présent plus en détail les termes de cette équation (3.5).

- $\rho_p \frac{\pi D_p^3}{6} \frac{\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_p}{\tau_p}$ représente la force de traînée : nous détaillons ce terme ainsi que τ_p un peu plus loin dans le paragraphe suivant ;
- $\frac{\pi D_p^3}{6} (\rho_p - \rho) \mathbf{g}$ représente le terme de flottabilité (poids et poussée d'Archimède) ;
- \mathbf{F}_{ma} est la force dite de *masse ajoutée* et traduit que toute accélération de la particule entraîne une accélération du fluide vu ([BEARD, 1994](#)) :

$$\mathbf{F}_{ma} = \rho \frac{\pi D_p^3}{12} \left(\frac{d\mathbf{U}_s}{dt} - \frac{d\mathbf{U}_p}{dt} \right) ; \quad (3.6)$$

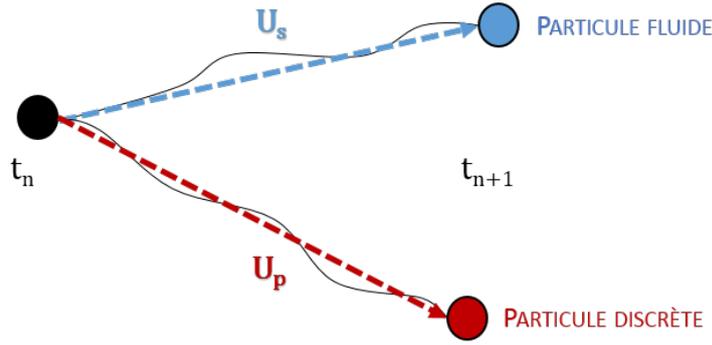


FIGURE 3.1 – Effet de séparation des trajectoires (d’après MINIER et PEIRANO (2001)).

— \mathbf{F}_{gp} est la force de gradient de pression à la surface de la particule :

$$\mathbf{F}_{gp} = \rho \frac{\pi D_p^3}{6} \frac{d\mathbf{U}_s}{dt} ; \quad (3.7)$$

— Enfin, \mathbf{F}_h est le terme dit *d’histoire* ou de Basset, tenant compte de la variation de la vitesse relative de la particule aux précédents instants :

$$\mathbf{F}_h = \frac{3}{2} D_p^2 \sqrt{\pi \rho \mu} \int_{-\infty}^t \left(\frac{d\mathbf{U}_s}{dt} - \frac{d\mathbf{U}_p}{dt} \right) \frac{d\tau}{\sqrt{t - \tau}} . \quad (3.8)$$

Dans l’équation (3.5) intervient le terme \mathbf{U}_s correspondant à la vitesse du fluide vu par la particule. Il est important de bien comprendre ce terme car il est au centre du problème de modélisation stochastique de la dispersion turbulente. En effet, la vitesse du fluide vu par la particule n’est *pas* égale à la vitesse du fluide : cela est dû à l’*effet de séparation des trajectoires*. Comme l’expliquent MINIER et PEIRANO (2001), la détermination de la vitesse du fluide vu par une particule discrète dépend de l’inertie de la particule et des effets des forces extérieures qui s’appliquent sur elle. Ces phénomènes engendrent alors une séparation de la particule fluide et de la particule discrète, au départ localisées à la même position. Ceci est illustré dans la Figure 3.1 qui représente l’évolution disjointe des positions des particules fluide et discrète entre deux pas de temps successifs t_n et t_{n+1} .

En conclusion, l’équation du principe fondamental de la dynamique (3.5) n’est pas fermée. L’unique information manquante est le terme \mathbf{U}_s , *i.e.* la vitesse du fluide échantillonnée le long de la trajectoire de la particule. Comme nous l’expliquons plus haut, en pratique, dans nos travaux, étant donné que les champs dynamiques sont calculés par *Code_Saturne* avec un modèle RANS, nous n’avons accès qu’à l’information de la vitesse fluide moyenne. Il faut *reconstituer* la vitesse instantanée \mathbf{U}_s en la *modélisant*, et c’est précisément là que les modèles stochastiques interviennent. Nous détaillerons ces différents modèles un peu plus loin dans ce chapitre.

3.1.2.2 Hypothèse de particules lourdes

Pour simplifier le problème, il peut être fait hypothèse de particules lourdes ($\rho_p \gg \rho$) et dont le diamètre est du même ordre de grandeur que l'échelle de longueur de Kolmogorov. Dans ce cas précis, les forces de masse ajoutée, de Basset ainsi que de gradient de pression peuvent être négligées (MINIER et PEIRANO, 2001) et l'équation (3.5) du mouvement de la particule se réduit à :

$$\frac{d\mathbf{U}_p}{dt} = \frac{\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_p}{\tau_p} + \mathbf{g}. \quad (3.9)$$

Dans cette équation, le terme τ_p mesure l'inertie de la particule : il s'agit de son temps de relaxation, c'est-à-dire le temps qui lui est nécessaire pour s'ajuster à la vitesse du fluide après perturbation. τ_p s'écrit de la façon suivante (MINIER et PEIRANO, 2001) :

$$\tau_p = \frac{\rho_p}{\rho} \frac{4D_p}{3C_D|\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_p|}, \quad (3.10)$$

où C_D est le coefficient de traînée et est estimé via une corrélation empirique. Parmi celles disponibles (RENOUX et BOULAUD, 1998), celle retenue dans *Code_Saturne* est la corrélation proposée par SCHILLER et NAUMANN (1935) et s'écrit :

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} [1 + 0.15Re_p^{0.687}] & \text{si } Re_p \leq 1000 \\ 0.44 & \text{si } Re_p \geq 1000 \end{cases} \quad (3.11)$$

où Re_p est le nombre de Reynolds particulaire :

$$Re_p = \frac{D_p|\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_p|}{\nu}. \quad (3.12)$$

Dans le cadre de nos études, cette hypothèse de particules lourdes est valable si nous nous intéressons au cas de particules en suspension par exemple, qui sont des particules solides.

Cependant, qu'en est-il du cas des particules de gaz, dont la masse volumique est du même ordre que celle de l'air ($\rho_p \approx \rho$) ?

Pour répondre à cette question, nous pouvons considérer en approximation que les particules de polluant que nous suivons par méthode lagrangienne sont des particules de fluide. Alors, dans ce cas, $\mathbf{U}_p = \mathbf{U}_s$. Dans la pratique, pour se ramener à ce cas limite dans *Code_Saturne*, nous avons recours à un artifice de calcul, en faisant tendre le temps de relaxation vers zéro (cela est correctement pris en compte numériquement en considérant des schémas numériques exponentiels, voir PEIRANO et al. (2006) pour les explications détaillées). En effet, dans ce cas, si nous rappelons l'équation (3.9) :

$$\frac{d\mathbf{U}_p}{dt} = \frac{\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_p}{\tau_p}. \quad (3.13)$$

Nous voyons que pour que le terme $\frac{\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_p}{\tau_p}$ dans l'équation (3.13) reste fini, il faut $\mathbf{U}_p \rightarrow \mathbf{U}_s$.

Pour conclure, en suivant cette approche, nous pouvons simuler le comportement de particules correspondant à des particules de fluide porteur. Autrement dit, il n'y a pas d'effet de séparation des trajectoires entre les particules discrètes simulées par méthode lagrangienne et les particules fluides de l'écoulement porteur.

A présent que nous avons posé les bases physiques théoriques nécessaires à la compréhension de notre problème, nous allons revenir au cas le plus général pour nous intéresser plus en détail à la modélisation stochastique du terme \mathbf{U}_s .

3.1.3 Modélisation stochastique de la vitesse du fluide vu \mathbf{U}_s

3.1.3.1 Mouvement brownien et équation de Langevin

Comme nous l'avons mentionné au chapitre 2, la turbulence atmosphérique revêt un caractère aléatoire, et sa modélisation par les méthodes lagrangiennes stochastiques est ainsi issue historiquement d'une analogie avec la théorie du mouvement brownien.

Cette théorie est originellement basée sur les études du botaniste **BROWN (1828)**, qui, en observant la suspension de grains de pollen immergés dans de l'eau, remarque que les grains y sont agités de mouvements très chaotiques et irréguliers. En réalisant de nouvelles expériences sur la suspension d'autres types de particules fines que le pollen, Brown observe que les mouvements chaotiques persistent et déduit ainsi que le phénomène n'est pas du ressort de la biologie mais de la physique.

En 1905, Einstein publie une première description mathématique du mouvement brownien basée sur la théorie cinétique de la chaleur (**EINSTEIN, 1905**). Il établit une équation de diffusion pour les particules browniennes, dans laquelle le coefficient de diffusion est lié au déplacement quadratique moyen. Smoluchowski, par des méthodes différentes, obtient des résultats similaires en 1906 (**VON SMOLUCHOWSKI, 1906**).

En 1908, Langevin propose une solution alternative à la description du mouvement brownien en considérant le problème d'un point de vue mécanique, selon lequel les trajectoires des particules browniennes sont régies par une équation exprimant le théorème fondamental de la dynamique (**LANGVIN, 1908**). Dans l'approche de Langevin, une particule immergée dans un fluide est ainsi soumise à l'effet de deux termes distincts :

- un terme déterministe, correspondant à un frottement dynamique $-a\mathbf{U}(t)$ associé à la viscosité du fluide environnant, et tendant à immobiliser la particule ;
- un terme stochastique, correspondant à une force aléatoire propre au mouvement brownien appelée *bruit blanc gaussien* et exprimée via une fonction aléatoire $\xi(t)$, qui tend à maintenir en mouvement la particule.

Soumise à ces deux forces, la vitesse de la particule suit alors l'équation de Langevin, formulée de la façon suivante en une dimension :

$$\frac{dU_i(t)}{dt} = -aU_i(t) + \xi(t) . \quad (3.14)$$

L'équation de Langevin est une équation différentielle dite *stochastique* car elle dépend de variables aléatoires – ici $\xi(t)$. Comme nous l'avons mentionné dans le paragraphe précédent, c'est une équation de ce type qui sera appliquée à la vitesse du fluide vu \mathbf{U}_s , dont les variations, représentatives de la turbulence atmosphérique, sont chaotiques et semblables à celles décrites par la théorie du mouvement brownien. Autrement dit, à chaque instant t , $\mathbf{U}_s(t)$ est une *variable aléatoire* : sa valeur est imprévisible.

3.1.3.2 Outils probabilistes

Dans ce paragraphe nous introduisons des concepts mathématiques probabilistes nécessaires à la définition des modèles stochastiques lagrangiens que nous présentons dans la suite de ce chapitre.

Processus stochastique : En reprenant la définition donnée par [RODEAN \(1996\)](#), un processus stochastique (en temps continu) est par définition un modèle mathématique d'un processus empirique régi par des lois probabilistes. Autrement dit, il représente l'*évolution* d'une variable aléatoire : dans notre cas, l'évolution temporelle de la variable aléatoire \mathbf{U}_s . Mathématiquement, ce processus stochastique est défini par la *famille* des variables aléatoires $\{\mathbf{U}_s(t)\}_{t \geq 0}$.

Densité de probabilité associée à un processus stochastique :

Comme l'explique [POPE \(2000\)](#), puisque les $\mathbf{U}_s(t)$ sont des variables aléatoires, il est impossible de prédire leurs valeurs particulières. En revanche, il est possible d'établir la probabilité qu'un événement tel que $A = \{\mathbf{U}_s(t) < 10 \text{ m/s}\}$, pour un instant t donné, se réalise par exemple. En suivant ce raisonnement, nous obtenons la probabilité que la *vitesse* $\mathbf{U}_s(t)$ se trouve dans un intervalle. Ensuite, par intégration, nous pouvons aboutir à l'estimation de la probabilité que la *position* des particules se trouve dans un volume donné – ce qui revient à obtenir notre concentration en

polluant dans le domaine. Cette information est riche, et représente naturellement bien plus que l'estimation des deux seuls premiers moments de la concentration donnée par l'approche eulérienne RANS, car elle donne, en chaque instant t , la loi de la variable aléatoire $\mathbf{U}_s(t)$, ce qui permet d'obtenir tous les moments.

Dans cette optique probabiliste, nous introduisons ici le formalisme des fonctions de densité de probabilité de variables aléatoires.

Dans le cas le plus général, la loi d'une variable aléatoire U est en fait complètement caractérisée par sa fonction de répartition $V \mapsto F(V)$. Cette fonction représente, pour chaque valeur de V , la probabilité que U soit strictement inférieure à V , *i.e.* :

$$F(V) = P\{U < V\} . \quad (3.15)$$

La fonction de densité de probabilité $V \mapsto f(V)$ de la variable aléatoire U , si elle existe, est ensuite définie comme étant la dérivée de sa fonction de répartition :

$$f(V) = \frac{dF(V)}{dV} . \quad (3.16)$$

Soulignons que la fonction de densité de probabilité f , ou de manière équivalente, la fonction de répartition F , caractérise *complètement* la variable aléatoire U .

Ainsi, si nous appliquons ces définitions à notre cas, à chaque instant t , la variable aléatoire $\mathbf{U}_s(t)$ est donc complètement caractérisée par sa fonction de répartition

$$F(\mathbf{V}, t) = P\{\mathbf{U}_s(t) < \mathbf{V}\} . \quad (3.17)$$

\mathbf{U}_s et \mathbf{V} étant des vecteurs, F est naturellement une fonction à plusieurs variables et est de ce fait appelée fonction de répartition "*jointe*". Elle est définie par :

$$F(V_x, V_y, V_z, t) = P\{U_{s,x}(t) < V_x, U_{s,y}(t) < V_y, U_{s,z}(t) < V_z\} , \quad (3.18)$$

qui représente, à chaque instant t et quels que soient V_x, V_y, V_z , la probabilité que $U_{s,x}(t)$ soit inférieur à V_x *et* que $U_{s,y}(t)$ soit inférieur à V_y *et* que $U_{s,z}(t)$ soit inférieur à V_z .

De manière analogue, la fonction densité de probabilité *jointe* f de la variable aléatoire $\mathbf{U}_s(t)$ est également une fonction de plusieurs variables et est définie par :

$$f(V_x, V_y, V_z, t) = \frac{\partial^3 F(\mathbf{V})}{\partial V_x \partial V_y \partial V_z} . \quad (3.19)$$

Pour résumer, à chaque instant t , la loi de la variable aléatoire $\mathbf{U}_s(t)$ est complètement caractérisée par sa fonction densité de probabilité jointe f . Cependant, comme l'explique POPE (2000), cette fonction ne contient aucune information sur $\mathbf{U}_s(t)$ à plusieurs instants différents, en d'autres termes sur le *processus stochastique* $\{\mathbf{U}_s(t)\}_{t \geq 0}$. On introduit alors la fonction de répartition jointe des variables aléatoires $\{\mathbf{U}_s(t_n)\}_{t_n \geq 0}$ la fonction suivante :

$$F_n(\mathbf{V}_1, t_1; \mathbf{V}_2, t_2; \dots; \mathbf{V}_n, t_n) = P\{\mathbf{U}_s(t_1) < \mathbf{V}_1, \mathbf{U}_s(t_2) < \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{U}_s(t_n) < \mathbf{V}_n\} \quad (3.20)$$

où $\{t_1, t_2, \dots, t_n\}$ sont des instants spécifiés.

On note $f_n(\mathbf{V}_1, t_1; \mathbf{V}_2, t_2; \dots; \mathbf{V}_n, t_n)$ la fonction densité de probabilité jointe correspondante.

Pour caractériser complètement la loi du processus stochastique $\{\mathbf{U}_s(t_n)\}_{t_n \geq 0}$, il est donc nécessaire de connaître cette densité de probabilité jointe, pour tous les instants, ce qui est en général très difficile. Une simplification, et de taille, est cependant possible lorsque nous considérons le processus *statistiquement stationnaire*, ce qui est le cas de nombreux écoulements turbulents (POPE, 2000). Dans ce cas, toutes les statistiques associées à la densité de probabilité jointe sont invariantes dans le temps.

Physiquement, pour un instant t donné, nous sommes à une position donnée de la particule. A cet instant et cette position, il est possible de faire une moyenne statistique (*i.e.* sur beaucoup de réalisations) de la vitesse du fluide porteur. Supposons maintenant que nous nous placions à un instant plus avancé $t + \tau$ et que nous réalisons de nouveau une moyenne de la vitesse du fluide, alors si cette moyenne statistique est égale à la précédente, et si c'est le cas quel que soit le décalage de temps τ envisagé, alors le processus est statistiquement stationnaire. Pour notre densité de probabilité f_n , cela se traduit par le fait que celle-ci sera inchangée si t_n est remplacé par $t_n + \tau$ pour les n instants considérés.

Un fluide turbulent, après une période transitoire initiale, peut atteindre un état statistiquement stationnaire pour lequel, même si les variables instantanées de l'écoulement varient, ses statistiques sont, elles, indépendantes du temps. Nous serons dans ce cas de figure, et cela constitue une simplification considérable dans le sens où il demeure alors suffisant de déterminer la densité de probabilité $f(\mathbf{V}, t)$ pour caractériser entièrement la loi du processus stochastique $\{\mathbf{U}_s(t)\}$, puisque celle-ci sera invariante une fois que le fluide aura atteint l'état statistiquement stationnaire.

Processus de Markov :

On appelle *processus markovien* un processus stochastique dont l'état futur ne dépend que de son état présent et non de ses états antérieurs. Le processus est également dit *sans mémoire*.

Bruit blanc gaussien :

Si nous reprenons l'équation de Langevin (3.14), nous pouvons détailler un peu plus le terme dit de bruit blanc gaussien $\xi(t)$.

Par définition, un bruit blanc est une réalisation d'un processus stochastique pour lequel la densité spectrale est constante. Physiquement, cela se traduit par une auto-corrélation de la fonction qui est non nulle uniquement à l'origine. Ce bruit blanc est dit *gaussien* s'il suit une loi normale.

Nous pouvons résumer quelques propriétés importantes de la fonction ξ :

- ξ est une gaussienne ;
- ξ est discontinue partout ;
- l'intégrale temporelle de ξ est continue mais non différentiable en tout instant t .

Processus de Wiener :

Par définition, un processus de Wiener $W(t)$ correspond à l'intégrale temporelle d'un bruit blanc gaussien $\xi(t)$:

$$W(t) = \int_0^t \xi(s) ds . \quad (3.21)$$

GARDINER et al. (1985) reformulent les processus de Wiener sous la forme suivante :

$$dW(t) = \xi(t) dt . \quad (3.22)$$

Il s'agit de la forme que nous adopterons dans toute la suite du chapitre. Le processus de Wiener est un processus continu, markoviens et gaussien. Un point sur lequel nous nous devons d'être attentifs est que comme ξ est discontinue partout, dW/dt n'est pas définie, *i.e.* la fonction W n'est pas différentiable. Cette notation se doit donc d'être évitée.

3.1.3.3 Introduction aux méthodes PDF

Lorsque l'on traite de processus stochastiques, il y a basiquement deux manières de voir les choses : soit nous nous intéressons à l'équation vérifiée par toutes les réalisations du processus (équation différentielle stochastique, approche particulière), soit

3.1. Modélisation lagrangienne de la dispersion turbulente

nous regardons l'équation satisfaite par la densité de probabilité du processus (équation aux dérivées partielles, approche continue).

Le processus $\{\mathbf{U}_s(t), \mathbf{U}_p(t), \mathbf{X}_p(t)\}$ est supposé markovien. Moyennant cette hypothèse, et en supposant par ailleurs des particules lourdes, les réalisations de ce processus sont alors modélisées via les équations suivantes :

$$dX_{p,i} = U_{p,i}(t)dt , \quad (3.23a)$$

$$dU_{p,i} = \frac{U_{s,i} - U_{p,i}}{\tau_p} dt + g_i dt , \quad (3.23b)$$

$$dU_{s,i}(t) = a_i(\mathbf{X}_p(t), \mathbf{U}_s(t), t)dt + b_{ij}(\mathbf{X}_p(t), \mathbf{U}_s(t), t)dW_j . \quad (3.23c)$$

où les dW_j sont des processus de Wiener de moyenne nulle et tels que :

$$\langle dW_i(t)dW_j(s) \rangle = \delta_{ij}\delta(t-s)dt ds \quad (3.24)$$

avec $\delta(t-s)$ la fonction δ de Dirac de dimension t^{-1} .

L'équation (3.23c) correspond à l'équation de Fokker-Planck :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (V_i f) = -\frac{\partial}{\partial V_i} (a_i f) + \frac{\partial^2}{\partial V_i \partial V_j} \left(\frac{1}{2} B_{ij} f \right) , \quad (3.25)$$

où $f = f(\mathbf{V}_s, \mathbf{V}_p, \mathbf{x}, t)$ est la densité de probabilité (lagrangienne) associée au processus $\{\mathbf{U}_s(t), \mathbf{U}_p(t), \mathbf{X}_p(t)\}$ et \mathbf{B} le tenseur $\mathbf{b}^t \mathbf{b}$.

Au sens faible, c'est-à-dire si l'on ne s'intéresse qu'aux statistiques, on peut parler d'équivalence entre les équations de Fokker-Planck et de Langevin (PEIRANO et al., 2006). Résoudre l'une ou l'autre de ces équations nous apportera la même information.

Résumons la situation. La résolution de l'équation de Fokker-Planck nous fournit $f(\mathbf{V}_s, \mathbf{V}_p, \mathbf{x}, t)$. Avec la donnée de cette densité de probabilité, nous avons complètement caractérisé la loi du processus $\{\mathbf{U}_s(t), \mathbf{U}_p(t), \mathbf{X}_p(t)\}$, c'est-à-dire que nous pouvons obtenir toutes les statistiques sur les particules que nous souhaitons. Cependant, dans la pratique, la résolution numérique de l'équation de Fokker-Planck est ardue (PEIRANO et al., 2006). Il est en fait plus aisé d'estimer numériquement la densité de probabilité $f(\mathbf{V}_s, \mathbf{V}_p, \mathbf{x}, t)$ au travers de la résolution des équations de Langevin. Ceci est possible puisque nous avons vu qu'au sens faible, les équations de Fokker-Planck et de Langevin sont équivalentes.

Lorsqu'elles sont résolues, les équations de Langevin ainsi que les autres équations du système (3.23) nous donnent, à chaque instant t et pour chacune des particules, les

vitesse $\mathbf{U}_s(t)$, $\mathbf{U}_p(t)$ et $\mathbf{X}_p(t)$. Or, comment, à partir de cette information, retrouver la densité de probabilité du processus $\{\mathbf{U}_s(t), \mathbf{U}_p(t), \mathbf{X}_p(t)\}$?

L'approche numérique proposée se base sur une méthode de Monte-Carlo, c'est-à-dire que nous allons simuler un grand nombre N de particules et, à chaque pas de temps, la densité de probabilité discrète $f_n(\mathbf{V}_s, \mathbf{V}_p, \mathbf{x}, t)$ pourra être obtenue via l'ensemble des processus stochastiques indépendants que nous aurons simulé : $\{\mathbf{U}_s^{(1)}(t), \mathbf{U}_p^{(1)}(t), \mathbf{X}_p^{(1)}(t)\}$, $\{\mathbf{U}_s^{(2)}(t), \mathbf{U}_p^{(2)}(t), \mathbf{X}_p^{(2)}(t)\}$, ..., $\{\mathbf{U}_s^{(N)}(t), \mathbf{U}_p^{(N)}(t), \mathbf{X}_p^{(N)}(t)\}$. $f_n(\mathbf{V}_s, \mathbf{V}_p, \mathbf{x}, t)$ sera alors exprimée par :

$$f_n(\mathbf{V}_s, \mathbf{V}_p, \mathbf{x}, t) = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^N \delta(\mathbf{V}_s - \mathbf{U}_s^{(k)}(t)) \delta(\mathbf{V}_p - \mathbf{U}_p^{(k)}(t)) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}_p^{(k)}(t)) . \quad (3.26)$$

Plus N sera grand, plus l'erreur commise entre la densité de probabilité discrète f_n et la densité de probabilité f solution de l'équation de Fokker-Planck sera faible. Comme nous sommes limités par nos capacités de calcul, il s'agira de trouver un compromis entre nombre de particules simulées et erreur commise.

Dans la pratique, nous allons résoudre les équations de Langevin pour chaque particule simulée, et ce à chaque pas de temps. Depuis le début du chapitre, nous avons simplement donné la forme générale de ces équations : il s'agit maintenant d'en expliciter les termes a_i et b_{ij} . De nombreux modèles ont été développés dans la littérature. Nous commencerons par présenter les modèles à la base de ceux qui sont implémentés dans *Code_Saturne*. Ces modèles sont issus des travaux de POPE (2000) et de MINIER et PEIRANO (2001), et sont très largement utilisés dans les domaines de la combustion turbulente et des écoulements diphasiques. A notre connaissance, ils n'ont pas été exploités dans le contexte de la dispersion atmosphérique de polluants.

3.1.3.4 Le *Simplified Langevin Model*

Ecriture du modèle :

Le *Generalized Langevin Model* (GLM), développé par POPE (1985, 2000) pour le cas de particules de fluide, s'écrit de la façon suivante :

$$dX_{p,i} = U_{p,i} dt , \quad (3.27a)$$

$$dU_{p,i} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} dt + G_{ij} (U_{p,j} - \langle U_{f,j} \rangle) dt + \sqrt{C_0 \epsilon} dW_i . \quad (3.27b)$$

Dans l'équation (3.27b), il est important de noter que les valeurs des champs fluides moyens présents dans l'équation (3.27b) sont en fait les valeurs prises à la localisation

3.1. Modélisation lagrangienne de la dispersion turbulente

de la particule, c'est-à-dire que par exemple, $\langle U_{f,i} \rangle$ correspond à $\langle U_{f,i} \rangle(t, \mathbf{X}_p(t))$. Dans le reste de ce manuscrit, cette dépendance explicite ne sera cependant pas réécrite dans les formules afin de garder des notations simples. De même, la matrice G_{ij} , qui représente le terme de retour à l'équilibre, est modélisée comme une fonction de valeurs locales des champs fluides moyens. Cette matrice peut se décomposer de manière générale comme suit :

$$G_{ij} = - \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \frac{\epsilon_f}{k} \delta_{ij} + G_{ij}^a, \quad (3.28)$$

sous la condition que $\text{Tr}(\mathbf{G}^a \mathbf{R}) = 0$ (cf. POPE (2000)).

En posant $G_{ij}^a = 0$, nous obtenons le *Simplified Langevin Model* (SLM) :

$$dU_{p,i} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} dt - \frac{U_{p,i} - \langle U_{f,i} \rangle}{T_L} dt + \sqrt{C_0 \epsilon} dW_i, \quad (3.29)$$

où T_L , qui représente l'échelle de temps intégrale lagrangienne, est donnée par :

$$T_L = \frac{1}{\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0} \frac{k}{\epsilon}. \quad (3.30)$$

Par identification avec l'expression générale d'un processus de diffusion donné en équation (3.23), on reconnaît les coefficients de dérive et de diffusion du SLM :

$$a_i = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} - \frac{U_{p,i} - \langle U_{f,i} \rangle}{T_L}, \quad (3.31)$$

$$b_{ij} = \sqrt{C_0 \epsilon} \delta_{ij}, \quad (3.32)$$

qui montre que la fermeture de la matrice de diffusion est en accord avec la théorie de Kolmogorov et l'idée que les petites échelles statistiquement isotropes (ici les échelles de temps) sont régies par la valeur locale du taux de dissipation d'énergie cinétique turbulente.

Extension du SLM aux applications diphasiques :

Comme nous avons pu le voir précédemment, dès lors que nous traitons de particules solides, leur inertie intervient et nous n'avons plus la relation $\mathbf{U}_p = \mathbf{U}_s$. Afin de pouvoir traiter ces cas de figure, MINIER et PEIRANO (2001) ont étendu le SLM de la façon suivante :

$$dU_{s,i} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} dt - \frac{U_{s,i} - \langle U_{f,i} \rangle}{T_L^*} dt + \sqrt{C_0 \epsilon} dW_i. \quad (3.33)$$

où :

$$T_L^* = \frac{T_L}{1 + \beta \frac{|\mathbf{U}_f - \mathbf{U}_p|}{\sqrt{2k/3}}}, \quad (3.34)$$

avec :

$$\beta = \frac{T_L}{T_E}. \quad (3.35)$$

Analoguement à l'échelle de temps intégrale lagrangienne T_L définie en équation (3.30), T_E représente l'échelle de temps intégrale eulérienne, et β le rapport entre ces deux échelles.

Par ailleurs, β est fixé à 0.8 mais d'autres valeurs sont possibles (MINIER et POZORSKI, 1992). Dans la littérature atmosphérique, un grand panel de valeurs est disponible. Le lecteur pourra en retrouver un résumé bibliographique en Annexe A. Dans le cadre de nos travaux de thèse, β ne nous concernera pas car nous considérerons uniquement des particules fluides, ce qui implique $|\mathbf{U}_f - \mathbf{U}_p| = 0$. Le terme en β disparaît alors de l'équation (3.34).

La raison de la présence de l'échelle "modifiée" T_L^* réside dans le fait que, dans le cas diphasique, le modèle de Langevin implémenté s'applique à *la vitesse du fluide vu par les particules* \mathbf{U}_s , et non à \mathbf{U}_p . Comme nous l'avons vu, à cause notamment des phénomènes de gravité et d'inertie des particules, il existe un effet de séparation des trajectoires entre les particules discrètes et les particules du fluide porteur. Le modèle de Langevin est ainsi plus pertinent s'il est écrit en termes de caractéristiques du fluide "vu" par les particules le long de leurs trajectoires (MINIER et POZORSKI, 1992). Remarquons que dans le cas limite des particules fluides ($\mathbf{U}_p = \mathbf{U}_f$ dans l'équation (3.34)), nous retombons bien sur $T_L^* = T_L$, et donc, ce modèle relaxe bien vers le SLM.

3.1.3.5 Modèle diphasique "complet"

MINIER et PEIRANO (2001); MINIER (2015) ont développé un modèle dit "complet", permettant une meilleure représentation des écoulements diphasiques. Ce modèle s'écrit de la façon suivante :

$$dU_{s,i} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} dt + (\langle U_{p,j} \rangle - \langle U_{f,j} \rangle) \frac{\partial \langle U_{f,i} \rangle}{\partial x_j} dt - \frac{U_{s,i} - \langle U_{f,i} \rangle}{T_{L,i}^*} dt + \sqrt{C_0^*} \epsilon dW_i. \quad (3.36)$$

Par identification, nous obtenons donc :

$$a_i = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i} + (\langle U_{p,j} \rangle - \langle U_{s,j} \rangle) \frac{\partial \langle U_{f,i} \rangle}{\partial x_j} - \frac{U_{s,i} - \langle U_{f,i} \rangle}{T_{L,i}^*}, \quad (3.37a)$$

$$b_{ij} = \sqrt{C_0^*} \epsilon \delta_{ij}. \quad (3.37b)$$

Ce modèle propose des définitions différentes pour $T_{L,i}^*$ selon les directions de l'espace (formules de Csanady, cf. **MINIER et PEIRANO (2001)**).

Par ailleurs, C_0^* est défini comme suit :

$$C_0^* = C_0 \frac{T_L}{T_{L,i}^*} \frac{\tilde{k}}{k} + \frac{2}{3} \left(\frac{T_L}{T_{L,i}^*} \frac{\tilde{k}}{k} - 1 \right), \quad (3.38)$$

où \tilde{k} est une énergie cinétique définie comme :

$$\tilde{k} = \frac{3}{2} \frac{\sum_{i=1}^3 \frac{T_L}{T_{L,i}^*} \langle U_{f,i}^2 \rangle}{\sum_{i=1}^3 \frac{T_L}{T_{L,i}^*}}. \quad (3.39)$$

Analysons l'équation (3.36). Tout d'abord, dans le cas où nous souhaiterions modéliser l'ensemble du fluide par des particules discrètes, *i.e.* dans le cas limite $\langle \mathbf{U}_p \rangle = \langle \mathbf{U}_s \rangle = \langle \mathbf{U}_f \rangle$, nous observons que le modèle (3.36) relaxe bien vers le SLM (équation (3.29)).

A présent, si nous souhaitons simuler la dispersion de particules fluides à partir d'un point source, comme cela sera le cas dans nos applications pratiques, nous modélisons en fait un *sous-ensemble* du fluide par des particules. En ce sens, nous avons effectivement $\mathbf{U}_p = \mathbf{U}_s$ (*i.e.*, inertie nulle), mais $\langle \mathbf{U}_p \rangle \neq \langle \mathbf{U}_f \rangle$. En conséquence, le terme de production $(\langle U_{p,j} \rangle - \langle U_{f,j} \rangle) \partial \langle U_{f,i} \rangle / \partial x_j dt$ dans l'équation du modèle "complet" (3.36) est non nul.

Cette formulation de modèle est dans la même ligne philosophique que le modèle LRR-IP (*Launder, Reece, Rodi - Isotropization of Production*, cf. **POPE (2000)**), excepté que le terme de production ici est lié aux vitesses moyennes des particules et non à leurs vitesses instantanées. Ce terme de production prend, en fait, beaucoup de sens physique, puisqu'il ajoute de l'anisotropie à la dispersion des particules, représentative de la réalité. Cette anisotropie est liée au gradient de vitesse non nul dans la direction verticale contrairement aux directions horizontales.

3.1.3.6 A propos des fluctuations de concentration

Nous avons vu plus haut (cf. paragraphe 3.1.3.2) que suivant les méthodes PDF exposées jusqu’ici, nous pouvons aboutir à l’estimation de la probabilité que la *position* des particules se situe dans un volume donné. En d’autres termes, avec par exemple une technique de comptage de particules dans des volumes donnés, nous pouvons obtenir la concentration en polluant dans tout le domaine. Cette technique de comptage, utilisée dans nos travaux, est exposée plus en détail au chapitre 4, section 4.2.3, de ce manuscrit (où nous mentionnons également les autres possibilités, de type “kernel”, notamment).

En ce qui concerne les variances de concentration, elles peuvent être obtenues de différentes manières. Il peut être choisi de partir sur une autre approche, comme les modèles à paires de particules, développés notamment par DURBIN (1980); THOMSON (1990); FERRERO et MORTARINI (2005). Ce type de modèles considère deux processus stochastiques, $\{\mathbf{U}_p^{(1)}, \mathbf{X}_p^{(1)}\}$ et $\{\mathbf{U}_p^{(2)}, \mathbf{X}_p^{(2)}\}$, dont l’évolution est gouvernée par des équations de Langevin à processus de Wiener indépendants. Les détails de cette approche à deux particules et une revue explicative des quelques modèles existants dans la littérature peuvent être trouvés dans MICHELOT (1996). Cependant, ces modèles sont d’une complexité conséquente et souvent peu robustes (BARNÉOUD, 2010). C’est la raison pour laquelle la plupart des modèles lagrangiens stochastiques utilisés pour la dispersion atmosphérique sont des modèles dits à une particule.

Précisément, si l’on reste dans ce contexte de modélisation à une particule et que l’on souhaite obtenir les variances de concentration, une idée, plus récente et aujourd’hui couramment utilisée dans la littérature, est d’ajouter un scalaire c de concentration au vecteur d’état des particules, qui devient alors $\{\mathbf{U}_p, \mathbf{X}_p, c\}$. Ce scalaire est gouverné par une équation différentielle ordinaire. Ces modèles sont communément appelés modèles de micro-mélange. Un exemple de modèle de micro-mélange est le modèle IEM (*Interaction by Exchange with the Mean*, cf. VILLERMAUX et DEVILLON (1972); POPE (2000)), formulé comme suit :

$$dc = -\frac{c - \langle c \rangle}{\tau_c} dt \quad (3.40)$$

où $\tau_c = \frac{2}{C_c} \frac{k}{\epsilon}$ avec C_c généralement fixée à 2.

Cette technique a été utilisée par de nombreux auteurs, entre autres SAWFORD (2004); LUHAR et SAWFORD (2005); CASSIANI et al. (2005), où l’on peut retrouver d’autres propositions pour l’expression de τ_c que celle présentée en équation (3.40).

Nous allons à présent présenter les modèles de Langevin classiquement utilisés dans la littérature atmosphérique. Une analyse et des comparaisons au SLM seront réalisées

afin de comprendre la théorie sous-jacente, ce qui nous permettra finalement de bâtir la stratégie de modélisation qui sera suivie dans notre travail de thèse.

3.2 Modèles lagrangiens de la littérature atmosphérique

Par souci de simplicité de présentation, et également parce que c’est ce qui a été le plus largement développé dans la littérature atmosphérique, nous nous attacherons à présenter les modèles lagrangiens de dispersion dans le cas où les particules suivies sont des particules de fluide. Ainsi, ici $\mathbf{U}_p = \mathbf{U}_s$ et le processus stochastique que nous étudions se réduit donc au processus $\{\mathbf{U}_p(t), \mathbf{X}_p(t)\}$.

Un premier point – et d’une grande importance – est qu’historiquement, les modèles utilisés dans la littérature atmosphérique régissent en général l’évolution des vitesses *fluctuantes* (i.e., $U_{p,i}(t) - \langle U_{f,i} \rangle(\mathbf{x} = \mathbf{X}_p(t), t)$) et non *instantanées* (i.e., $U_{p,i}(t)$) des particules, contrairement aux modèles qui ont été présentés dans la section précédente.

[POPE \(1987\)](#); [MINIER et al. \(2014\)](#); [BAHLALI et al. \(2018c\)](#) ont soulevé l’importance de la différence des modèles entre leur écriture en fonction des vitesses fluctuantes ou en fonction des vitesses instantanées, notamment au niveau de la validation du critère de mélange homogène de [THOMSON \(1987\)](#) (“*well-mixed condition problem*”). Ce critère, essentiel pour juger de la bonne qualité d’un modèle lagrangien stochastique, correspond au fait que *si des particules sont initialement uniformément réparties dans un fluide incompressible, alors elles doivent le rester*. Autrement dit, nous ne devons pas retrouver de zones d’accumulation ou de puits de particules si initialement elles étaient réparties de manière uniforme dans le domaine. Ce problème est, en fait, équivalent à la non-violation du second principe de la thermodynamique. Une analyse détaillée de ce problème, dans le cas du SLM et pour les applications atmosphériques, est fournie dans [BAHLALI et al. \(2018c\)](#), article reproduit en chapitre 5 de ce manuscrit.

L’objectif du paragraphe qui suit est de présenter une revue des modèles de Langevin développés dans la littérature atmosphérique. Pour chacun de ces modèles, nous expliciterons les coefficients de dérive \mathbf{a} et de diffusion \mathbf{b} choisis (cf. équation (3.23)). Notons que de manière générale, la matrice \mathbf{b} est définie suivant la théorie de similitude de Kolmogorov et est classiquement formulée en fonction de C_0 et ϵ , analogiquement au SLM (voir équation (3.29)). Le principal problème de fermeture réside dans l’expression du terme de dérive \mathbf{a} . Dans la littérature atmosphérique, des premières tentatives ont été de supposer une forme pour la densité de probabilité f solution de l’équation de Fokker-Planck (3.25), qui en conséquence conditionnerait la détermination de \mathbf{a} . Parallèlement à cette supposition, [THOMSON \(1987\)](#) a listé un set de critères distinguant les

“bons modèles lagrangiens stochastiques des mauvais” et a montré que tous ces critères étaient inférieurs ou équivalents au critère de mélange homogène. Cependant, le critère de mélange homogène à lui seul n’est pas suffisant pour définir un modèle unique en trois dimensions, et il a été montré par [SAWFORD et GUEST \(1988\)](#) et [BORGAS et al. \(1997\)](#) que certaines propriétés de l’écoulement, en plus de la connaissance de f , doivent être prises en compte (“*non-uniqueness within a class of models that are well-mixed within Thomson’s criteria can not be resolved unless flow properties in addition to f are respected*”, voir [WILSON et SAWFORD \(1996\)](#)). Historiquement, dans la littérature atmosphérique, les auteurs ont adopté d’autres critères de sélection et ont souvent travaillé au cas par cas (turbulence homogène ou inhomogène, hypothèse gaussienne ou non, atmosphère convective, stable ou neutre, etc.). Cette approche heuristique a parfois mené à des modèles ne respectant pas le critère de mélange homogène, ce qui a conduit divers auteurs à corriger leurs modèles en ajoutant des termes ad-hoc dans l’expression de \mathbf{a} afin de résoudre le problème (voir [LIN et GERBIG \(2013\)](#)).

Dans cette revue de la littérature atmosphérique, nous exposerons d’abord, comme cela a été fait historiquement, le cas simple de la turbulence homogène isotrope, puis présenterons différents cas de turbulence inhomogène.

3.2.1 Cas de la turbulence homogène isotrope

Dans des conditions de turbulence homogène isotrope, le terme de dérive est unique et le modèle s’écrit ([SAWFORD et GUEST, 1988](#); [WILSON et SAWFORD, 1996](#)) :

$$dU'_{p,i} = - \left(\frac{C_0 \epsilon}{2\sigma_{U_{f,i}}^2} - \frac{1}{\sigma_{U_{f,i}}} \frac{\partial \sigma_{U_{f,i}}}{\partial t} \right) U'_{p,i} dt + \sqrt{C_0 \epsilon} dW_i . \quad (3.41)$$

De par l’hypothèse d’isotropie de la turbulence, on a :

$$\sigma_{U_{f,i}}^2 = \frac{2}{3} k . \quad (3.42)$$

Donc :

$$\frac{1}{\sigma_{U_{f,i}}} \frac{\partial \sigma_{U_{f,i}}}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{k}} \frac{\partial}{\partial t} \sqrt{k} = \frac{1}{2k} \frac{\partial k}{\partial t} = -\frac{\epsilon}{2k} . \quad (3.43)$$

En réinjectant dans (3.41) :

$$dU'_{p,i} = - \left(\frac{3}{4} C_0 + \frac{1}{2} \right) \frac{\epsilon}{k} U'_{p,i}(t) dt + \sqrt{C_0 \epsilon} dW_i . \quad (3.44)$$

Enfin, en posant :

$$T_L = \frac{1}{\frac{1}{2} + \frac{3}{4}C_0} \frac{k}{\epsilon} , \quad (3.45)$$

on retrouve le SLM (3.29).

3.2.2 Modèles stochastiques en turbulence inhomogène

3.2.2.1 Turbulence inhomogène gaussienne

En turbulence inhomogène, la difficulté est qu'il n'existe pas un modèle unique en trois dimensions respectant le critère de mélange homogène de THOMSON (1987) : le terme de dérive a peut prendre plusieurs expressions tout en donnant toujours un critère de mélange homogène respecté. Dans le cadre d'une turbulence gaussienne, des solutions particulières ont été fournies par Borgas (voir SAWFORD et GUEST (1988)) et THOMSON (1987), la solution de ce dernier étant qualifiée de "solution la plus simple" et privilégiée dans RODEAN (1996) précisément pour sa simplicité : "*Which solution is closer to physical reality? We have no answer at present, but one of the basic philosophical rules in science is to favor simplicity.*"

Le modèle de THOMSON (1987) est donné par les équations suivantes (NÄSLUND et al., 1994) :

$$dU'_{p,i} = a_i dt + b_{ij} dW_i , \quad (3.46)$$

où :

$$a_i = -\frac{C_0 \epsilon}{2} \delta_{ij} \Gamma_{jk} U'_{p,k} + \frac{\Phi_i}{g_a} , \quad (3.47a)$$

$$b_{ij} = \sqrt{C_0 \epsilon} \delta_{ij} , \quad (3.47b)$$

où Γ_{jk} est le tenseur inverse du tenseur de Reynolds τ_{jk} : $\Gamma_{jk} = \tau_{jk}^{-1}$.

THOMSON (1987) propose pour $\frac{\Phi_i}{g_a}$:

$$\begin{aligned} \frac{\Phi_i}{g_a} = & \langle U_{f,l} \rangle \frac{\partial \langle U_{f,i} \rangle}{\partial x_l} + \frac{\partial \langle U_{f,i} \rangle}{\partial x_j} (U_{p,j} - \langle U_{f,j} \rangle) + \\ & \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{il}}{\partial x_l} + \frac{1}{2} \langle U_{f,m} \rangle \frac{\partial \tau_{il}}{\partial x_m} \Gamma_{lj} (U_{p,j} - \langle U_{f,j} \rangle) + \\ & \frac{1}{2} \frac{\partial \tau_{il}}{\partial x_k} \Gamma_{lj} (U_{p,j} - \langle U_{f,j} \rangle) (U_{p,k} - \langle U_{f,k} \rangle) . \end{aligned} \quad (3.48)$$

Cette expression de $\frac{\Phi_i}{g_a}$ est assez conséquente : elle contient 63 termes pour chaque axe. Pour des écoulements simples, des simplifications peuvent être faites en supposant l'homogénéité horizontale par exemple. Mais comme nous travaillons en terrain complexe (présence de bâtiments notamment), nous ne pouvons pas nous placer sous de telles hypothèses.

3.2.2.2 Turbulence inhomogène non gaussienne : cas de la CLA convective

Pour la plupart des applications, l'hypothèse de turbulence gaussienne est une approximation relativement correcte, exception faite dans le cas de la CLA convective. En effet, cette dernière est fortement sujette à l'asymétrie des courants ascendants et descendants qui régissent la turbulence verticale.

BÆRENTSEN et BERKOWICZ (1984) ont alors proposé de représenter la densité de probabilité de la CLA selon la direction verticale non pas par une simple loi normale, mais par la somme de deux distributions gaussiennes : l'une correspondant aux mouvements ascendants, l'autre aux mouvements descendants. Elle s'exprime de la façon suivante (**RODEAN, 1996**) :

$$f(V_{p,z}, z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{A_1}{\sigma_1} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{V_{p,z} - m_1}{\sigma_1} \right)^2 \right] + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{A_2}{\sigma_2} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{V_{p,z} - m_2}{\sigma_2} \right)^2 \right] \\ = A_1 f_1 + A_2 f_2, \quad (3.49)$$

où A_1 et A_2 sont les probabilités respectives d'un courant ascendant ou descendant ($A_1 + A_2 = 1$) et :

$$f_1 = \frac{1}{\sigma_1 \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{V_{p,z} - m_1}{\sigma_1} \right)^2 \right], \quad (3.50a)$$

$$f_2 = \frac{1}{\sigma_2 \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{V_{p,z} - m_2}{\sigma_2} \right)^2 \right]. \quad (3.50b)$$

Cette technique a été utilisée notamment par **DE BAAS et al. (1986)**, **SAWFORD et GUEST (1987)**, **LUHAR et BRITTER (1989)**, **WEIL (1990)**, **CASSIANI et al. (2005)**, **CASSIANI et al. (2015)**. Elle met en relief six inconnues : A_1 , m_1 , σ_1 , A_2 , m_2 , σ_2 . Le modèle de fermeture introduit par **LUHAR et BRITTER (1989)** formule qu'en principe, ces six inconnues peuvent être obtenues par les équations sur les trois premiers moments :

3.2. Modèles lagrangiens de la littérature atmosphérique

$$\langle V_{p,z}^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} V_{p,z}^n f(V_{p,z}, z, t) dV_{p,z} , \quad (3.51)$$

où $n = 0, 1, 2, 3$.

Les deux dernières équations nécessaires à la fermeture du modèle sont proposées par **BÆRENTSEN et BERKOWICZ (1984)** et **LUHAR et BRITTER (1989)** qui supposent :

$$m_1 = \sigma_1 , \quad (3.52a)$$

$$m_2 = -\sigma_2 . \quad (3.52b)$$

MICHELOT (1996) justifie ce choix en rappelant que la vitesse moyenne m_i des courants ascendants ou descendants est convertie en énergie cinétique σ_i^2 . La résolution du système entier fournit finalement :

$$\sigma_2 = ((\langle V_{p,z}^3 \rangle)^2 + 8\langle V_{p,z}^2 \rangle^3)^{1/2} - \langle V_{p,z}^3 \rangle / 4\langle V_{p,z}^2 \rangle , \quad (3.53a)$$

$$\sigma_1 = \langle V_{p,z}^2 \rangle / 2\sigma_2 , \quad (3.53b)$$

$$m_1 = \sigma_1 , \quad (3.53c)$$

$$m_2 = -\sigma_2 , \quad (3.53d)$$

$$A_1 = \sigma_2 / (\sigma_2 + \sigma_1) , \quad (3.53e)$$

$$A_2 = \sigma_1 / (\sigma_2 + \sigma_1) . \quad (3.53f)$$

Les équations de Langevin à résoudre du modèle de **LUHAR et BRITTER (1989)** sont finalement résumées par **RODEAN (1996)** :

$$dU_{p,z} = \left[\frac{-(C_0\epsilon/2)Q + \phi}{f(V_{p,z}, z, t)} \right] dt + \sqrt{C_0\epsilon} dW_z , \quad (3.54)$$

où :

$$Q = \frac{A_1(U_{p,z} - m_1)f_1}{\sigma_1^2} + \frac{A_2(U_{p,z} - m_2)f_2}{\sigma_2^2} \quad (3.55)$$

et :

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 , \quad (3.56)$$

avec ϕ_i ($i = 1, 2$) définie comme suit (**RODEAN, 1996**) :

$$\phi_i = \sigma_i^2 f_i \frac{\partial A_i}{\partial z} + \frac{A_i f_i}{2} \left(1 + \frac{U_{p,z}^2}{\sigma_i^2} \right) \frac{\partial \sigma_i^2}{\partial z} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} (A_i m_i) \operatorname{erf} \left(\frac{U_{p,z} - m_i}{\sqrt{2}\sigma_i} \right) , \quad (3.57)$$

où erf est la fonction d'erreur, définie par :

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt . \quad (3.58)$$

Ce modèle (LUHAR et BRITTER, 1989), pour les situations d'atmosphère convective, a fourni des résultats en bon accord avec les résultats expérimentaux obtenus par WILLIS et DEARDORFF (1976, 1978, 1981). Il est possible d'utiliser d'autres modèles de fermeture que celui de LUHAR et BRITTER (1989) (voir, dans la littérature, WEIL (1990); DU et al. (1994); LUHAR et al. (1996)). On peut retrouver tous ces modèles dans RODEAN (1996). A noter que d'après LUHAR et al. (1996), le défaut principal du modèle de LUHAR et BRITTER (1989) est que la densité de probabilité ne tend pas vers une gaussienne lorsque le coefficient d'asymétrie ("skewness" en anglais) $S = \langle U_{f,z}^3 \rangle / \sigma_{U_{f,z}}^3$ tend vers zéro. Le modèle introduit dans LUHAR et al. (1996) quant à lui vérifie cette propriété.

Dans l'approche que nous venons de présenter, une hypothèse est faite sur la forme de la densité de probabilité en la présentant comme la somme de deux gaussiennes. Cela a permis de donner une expression pour a_i via l'équation de Fokker-Planck. Une autre stratégie, proposée par FRANZESE et al. (1999) ne fait aucune hypothèse sur la forme de la densité de probabilité et introduit plutôt directement une forme polynomiale d'ordre 2 pour a_i :

$$a_i = \alpha(z)U_{p,z}^2 + \beta(z)U_{p,z} + \gamma(z) , \quad (3.59)$$

où $\alpha(z)$, $\beta(z)$ et $\gamma(z)$ sont obtenus en multipliant les membres de l'équation de Fokker-Planck successivement par des puissances de $U_{p,z}$, et en intégrant ensuite sur la vitesse (les détails sont fournis dans FRANZESE et al. (1999)). On obtient :

$$\alpha(z) = \frac{\frac{1}{3} \frac{\partial \langle U_{p,z}^4 \rangle}{\partial z} - \frac{\langle U_{p,z}^3 \rangle}{2 \langle U_{p,z}^2 \rangle} \left(\frac{\partial \langle U_{p,z}^3 \rangle}{\partial z} - C_0 \epsilon(z) \right) - \langle U_{p,z}^2 \rangle \frac{\partial \langle U_{p,z}^2 \rangle}{\partial z}}{\langle U_{p,z}^4 \rangle - \frac{\langle U_{p,z}^3 \rangle^2}{\langle U_{p,z}^2 \rangle - \langle U_{p,z}^2 \rangle^2}} , \quad (3.60a)$$

$$\beta(z) = \frac{1}{2 \langle U_{p,z}^2 \rangle} \left(\frac{\partial \langle U_{p,z}^3 \rangle}{\partial z} - 2 \langle U_{p,z}^3 \rangle \alpha_z - C_0 \epsilon(z) \right) , \quad (3.60b)$$

$$\gamma(z) = \frac{\partial \langle U_{p,z}^2 \rangle}{\partial z} - \langle U_{p,z}^2 \rangle \alpha(z) . \quad (3.60c)$$

FRANZESE et al. (1999) ont ensuite comparé les résultats de leur modèle aux résultats expérimentaux de WILLIS et DEARDORFF (1976, 1978, 1981) ainsi qu'au modèle

de LUHAR et al. (1996) et ont trouvé un bon accord entre toutes ces données. Il est à noter que le modèle développé par FRANZESE et al. (1999) dégénère bien vers une gaussienne lorsque les moments d'ordre 3 et 4 tendent vers leurs valeurs gaussiennes (*i.e.* 0 et 3 respectivement).

En comparaison à l'approche de LUHAR et al. (1996), le modèle de FRANZESE et al. (1999) présente deux avantages majeurs. Le premier avantage est qu'il ne suppose rien sur la forme de la densité de probabilité du processus. Le second est que le terme de dérive est polynomial quadratique en $U_{p,i}$, ce qui rend son implémentation numérique plus aisée que le terme de dérive du modèle de LUHAR et al. (1996) qui possède une forme bien plus complexe.

Un dernier commentaire concerne le modèle SLM. En conditions de turbulence homogène, celui-ci présente à première vue un terme de dérive linéaire en $U_{p,i}$. Sous cette hypothèse, il est possible de démontrer que le processus $\{U_{p,i}(t)\}$ suit une loi gaussienne (GARDINER et al., 1985).

Cependant, lorsque nous passons en turbulence inhomogène, la linéarité est perdue puisque les différentes quantités ($\langle U_f \rangle$, k , ϵ) intervenant dans ce terme de dérive deviennent dépendantes de l'espace, *i.e.* de $\mathbf{X}_p(t)$. Comme $\mathbf{X}_p(t)$ dépend lui-même de $\mathbf{U}_p(t)$ via la relation $d\mathbf{X}_p(t) = \mathbf{U}_p(t)dt$, il n'existe plus de linéarité en $\mathbf{U}_p(t)$ et la solution obtenue n'est donc pas gaussienne. D'ailleurs, MINIER et PEIRANO (2001) précisent en effet que ce n'est pas le cas et montrent l'obtention de solutions non gaussiennes en concordance avec des résultats expérimentaux (ils citent l'article "*Analysis of a PDF model in a mixing layer case*", MINIER et POZORSKI (1996)). Nous insistons sur ce point, sujet parfois à confusion, afin de clarifier le fait que dans le cas de la turbulence inhomogène, la solution n'est pas attendue gaussienne.

3.3 Notre stratégie de modélisation

Travaillant en terrain complexe, nous nous plaçons dans le cas général de la turbulence inhomogène. Si nous choisissons le **modèle de THOMSON (1987)** pour les directions horizontales x et y , nous relevons deux cas de figure pour la direction verticale :

- en **atmosphère stable ou neutre**, la turbulence peut être considérée gaussienne et nous pouvons donc utiliser le même modèle ;
- en **atmosphère convective**, la turbulence perd son caractère gaussien et il semble meilleur de choisir de ce fait : soit un modèle supposant la densité de

probabilité comme étant la somme de deux gaussiennes (BÆRENTSEN et BERKOWICZ, 1984), soit le modèle de FRANZESE et al. (1999) supposant le terme de dérive polynomial d'ordre 2.

En revanche, si nous choisissons le SLM (POPE, 2000), alors ce même modèle peut également être utilisé pour la direction verticale, puisqu'aucune hypothèse n'est faite sur la densité de probabilité de la vitesse (pas d'hypothèse gaussienne) : c'est au contraire un *résultat* du modèle. Il s'agit d'un avantage considérable. Par ailleurs, à notre connaissance, dans le domaine de la dispersion atmosphérique de polluants, ce modèle n'a pas été exploité, les auteurs ayant historiquement, de manière générale, développé le modèle de THOMSON (1987). Pourtant, le SLM présente l'avantage d'avoir une forme mathématique très simple. De plus, il assure une consistence complète avec les équations de Navier-Stokes moyennées et les équations de transport des tensions de Reynolds avec fermeture de Rotta (voir chapitre 5), ce qui en fait un modèle rigoureux d'intérêt pour notre approche hybride eulérienne RANS/lagrangienne PDF. Enfin, comme mentionné en début de chapitre, le SLM est le modèle disponible et classiquement utilisé dans *Code_Saturne* pour les applications diphasiques ou de combustion turbulente : nous pouvons donc aussi l'adapter afin de réaliser des études de dispersion atmosphérique. *Pour ces différentes raisons, dans le cadre de cette thèse, nous choisirons de développer le SLM (POPE, 2000).*

Notons que dans notre cas, nous utiliserons la formulation en vitesses instantanées du SLM car nous avons accès au champ de pression moyen du fluide via *Code_Saturne*. Dans bien d'autres modèles utilisés dans la littérature, le champ de vent est calculé par un code grande échelle hydrostatique, ou bien par un code de reconstitution de champ de vent à partir des mesures (modèles dits d'analyse objective). Dans ce cas, la formulation en vitesses fluctuantes du SLM est préconisée (cf. chapitre 5).