

Etude numérique de la dispersion avec *Code_Saturne* pour des configurations simples

Dans ce chapitre, nous présentons d'abord brièvement *Code_Saturne*, le code de calcul CFD utilisé tout au long de notre travail de thèse. Nous exposons ensuite la mise en données de nos calculs de dispersion dans *Code_Saturne*, avec les deux approches eulérienne et lagrangienne. Nous verrons au travers d'exemples les singularités et points sensibles que peuvent présenter chacune des approches en termes de modélisation numérique. Entre autres, nous verrons comment, à partir d'approches différentes, modéliser le même rejet. Enfin, nous présentons un cas de vérification de notre modèle par comparaison à une solution analytique : le cas du rejet ponctuel continu en vent uniforme et turbulence homogène.

Sommaire

4.1	Présentation générale de <i>Code_Saturne</i>	62
4.1.1	Module atmosphérique	62
4.1.2	Module lagrangien	63
4.2	Mise en données numérique	63
4.2.1	Généralités	63
4.2.2	Modélisation eulérienne RANS	65
4.2.3	Modélisation lagrangienne	73
4.3	Cas du rejet ponctuel continu en vent uniforme, turbulence homogène	80
4.3.1	Un peu de théorie...	80
4.3.2	Mise en données du calcul	83
4.3.3	Résultats	83

4.1 Présentation générale de *Code_Saturne*

Code_Saturne (<http://code-saturne.org/>) est un code CFD open-source, développé au sein d'EDF R&D depuis 1997. Il résout les équations générales de la mécanique des fluides (*i.e.* équations de continuité, quantité de mouvement, énergie et turbulence,...) par le moyen de méthodes numériques et de modèles de turbulence. Ces équations sont résolues sur tous types de maillage, y compris maillages complexes non structurés. Plus de détails sur les méthodes numériques implémentées dans le code sont fournis dans [ARCHAMBEAU et al. \(2004\)](#).

En outre, *Code_Saturne* comprend des modules spéciaux pour des physiques particulières comme par exemple la combustion, la magnéto-hydrodynamique, les écoulements compressibles, etc. En particulier, deux modules se détachent dans le cadre de notre travail de thèse : le module atmosphérique et le module lagrangien, l'un des objectifs étant leur couplage pour nos applications.

4.1.1 Module atmosphérique

Le module atmosphérique de *Code_Saturne* a été co-développé par le CEREAs et EDF R&D. Dans ce module sont implémentées les lois phénoménologiques régissant la dynamique des écoulements atmosphériques, la microphysique des nuages ainsi que la dispersion turbulente de polluants. L'équation de conservation de l'énergie est résolue sur la variable température potentielle incluse dans le module, et les conditions limites sont imposées suivant les profils analytiques fournis par la théorie de similitude de Monin-Obukhov, ou bien suivant des profils fournis par un modèle à plus grande échelle.

Divers travaux de modélisation de dispersion atmosphérique par approche eulérienne ont déjà été réalisés avec *Code_Saturne*, voir par exemple la thèse de [WEI \(2016\)](#) où l'objectif était de valider le modèle CFD eulérien pour la dispersion en champ proche et en conditions stables sur site fortement hétérogène (programme expérimental sur le site du SIRTAs, situé en banlieue sud de Paris). Ces travaux seront notamment pour nous une base de validation pour l'implémentation de notre modèle. Nous pouvons également citer d'autres travaux sur la dispersion par approche eulérienne via



Code_Saturne : par exemple, [DEMAEL et CARISSIMO \(2008\)](#) ont comparé le modèle *Code_Saturne* à deux modèles gaussiens sur une expérience de la campagne Prairie Grass, [MILLIEZ et CARISSIMO \(2007, 2008\)](#) ont étudié la dispersion en conditions neutre et stable sur la campagne MUST, [CHAHINE et al. \(2015\)](#) ont étudié la formation et la dispersion d'un panache issu d'une tour de refroidissement. Plus récemment, [GAO et al. \(2018\)](#) ont réalisé une simulation RANS instationnaire haute résolution du vent, des effets thermiques et de la dispersion de polluants dans un quartier de Toulouse.

4.1.2 Module lagrangien

Le module lagrangien permet de simuler les écoulement polydispersés en calculant des trajectoires de particules incluses dans l'écoulement porteur. L'histoire individuelle et instantanée de chaque particule est suivie, et des statistiques sur les grandeurs moyennes instantanées d'intérêt liées aux particules sont ensuite réalisées (par exemple, dans notre cas, la concentration en polluant). Le suivi de particules dans le module lagrangien de *Code_Saturne* repose sur les *méthodes PDF* (*Probability Density Function*), développées dans [POPE \(2000\)](#), et exposées en chapitre 3 de ce manuscrit.

4.2 Mise en données numérique

4.2.1 Généralités

Dans le cadre le plus général, le principe d'un calcul lagrangien de dispersion dans *Code_Saturne* est le suivant. A chaque pas de temps t^n , les solveurs eulérien et lagrangien interagissent. Premièrement le solveur eulérien résout sur un maillage les équations de Navier-Stokes. Les champs obtenus ($\langle P \rangle$, ρ , et, si l'on utilise un modèle RANS $R_{ij} - \epsilon$, $\langle U_{f,i} \rangle$, $\langle U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle$ et ϵ) sont ensuite envoyés au solveur lagrangien, qui résout les équations différentielles stochastiques entre les pas de temps t^n et t^{n+1} . A son tour, le module lagrangien calcule les termes sources représentant les échanges de quantité de mouvement et d'énergie entre les particules et le fluide et les renvoie au solveur eulérien pour le calcul du pas de temps suivant. La Figure 4.1 résume le principe.

A noter que pour nos travaux, l'influence des particules sur le champ fluide est négligeable : les termes sources sont donc égaux à zéro. En outre, nous serons toujours sous une hypothèse de stationnarité dans le cadre de notre travail, ce qui, dans la pratique, implique la mise en place de deux calculs. Le premier calcul sert à calculer les champs dynamiques, c'est-à-dire uniquement l'écoulement du vent. Une fois le régime stationnaire atteint, ce calcul est arrêté. Le second calcul sert à calculer la dispersion des polluants, au sein de cet écoulement de vent pré-calculé. Ainsi, le second calcul

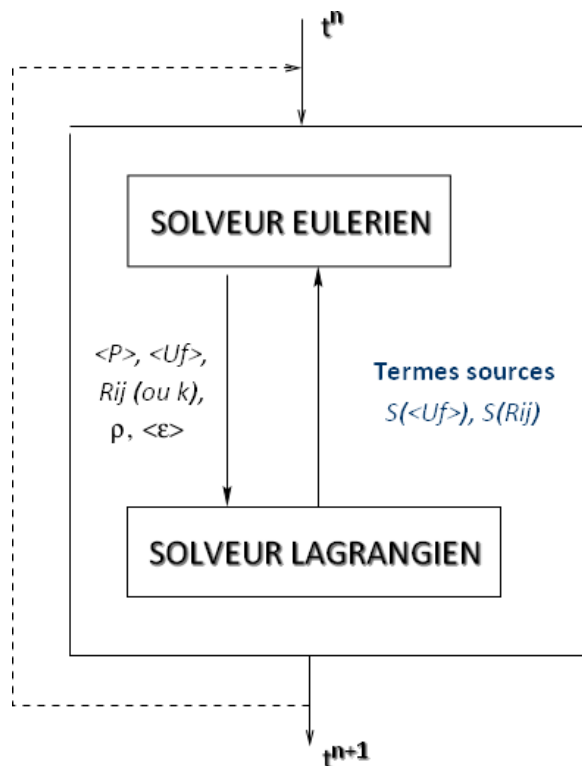


FIGURE 4.1 – Interaction des solveurs eulérien et lagrangien (d’après [MINIER et PEIRANO \(2001\)](#)).

se fait sur la base du redémarrage du premier calcul, à champs de vitesse, pression et température figés.

En ce qui concerne le traitement des conditions aux limites, dans *Code_Saturne*, ces dernières sont définies de manière indépendante pour le cas de la phase continue et de la phase dispersée. Après découpage des frontières du domaine fluide en différentes zones, on associe un type de conditions aux limites à chaque zone. Pour la phase continue, il y en a six :

- entrée ;
- entrée “convective” ;
- sortie ;
- symétrie ;
- paroi lisse ;
- paroi rugueuse.

Pour terminer cette présentation générale, précisons que les schémas numériques implémentés dans *Code_Saturne* pour l’intégration des équations différentielles stochastiques ont été développés dans le cadre de la collaboration avec l’équipe OMEGA de l’INRIA Sophia-Antipolis. Ils sont détaillés dans [MINIER et al. \(2001\)](#).

4.2.2 Modélisation eulérienne RANS

Les modèles eulériens, comme expliqué en chapitre 1, se basent sur la résolution de l'équation d'advection-diffusion d'un scalaire via la discrétisation de cette équation en temps et en espace sur un maillage. Rappelons cette équation, pour le scalaire concentration c :

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \langle U_{f,j} \rangle \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} - \langle U'_{f,j} c' \rangle \right) + \langle S \rangle + \langle R \rangle . \quad (4.1)$$

Elle fait intervenir le terme $\langle U'_{f,j} c' \rangle$, inconnu. Ainsi, le problème qui se pose est : quel modèle de fermeture adopter pour $\langle U'_{f,j} c' \rangle$?

4.2.2.1 Choix du modèle de fermeture pour $\langle U'_{f,j} c' \rangle$

On distingue deux types de modèles : les modèles algébriques, qui fournissent directement une expression locale pour $\langle U'_{f,j} c' \rangle$ ainsi que le modèle de transport complet de $\langle U'_{f,j} c' \rangle$. Au sein des modèles algébriques, trois modèles standards : SGDH, GGDH et AFM.

Simple Gradient Diffusion Hypothesis (SGDH) :

Il s'agit d'un modèle à gradient simple, utilisant une hypothèse de diffusivité turbulente. Il s'écrit de la façon suivante :

$$\langle U'_{f,j} c' \rangle = -D_t \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} , \quad (4.2)$$

avec $D_t = \nu_t / Sc_t$, où Sc_t est le nombre de Schmidt turbulent, généralement compris entre 0.7 et 1 pour l'air.

Notons que si c'est un modèle à viscosité turbulente qui a été utilisé pour la résolution des champs dynamiques, alors, nécessairement, c'est un modèle SGDH qui sera utilisé pour la fermeture de $\langle U'_{f,j} c' \rangle$. Nous rappelons l'expression de la viscosité turbulente :

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} , \quad (4.3)$$

où $C_\mu = 0.09$.

Generalized Gradient Diffusion Hypothesis (GGDH) :

Le modèle GGDH consiste en l'utilisation d'un modèle de type **DALY et HARLOW (1970)** appliqué aux flux scalaires turbulents. Il s'écrit :

$$\langle U'_{f,j} c' \rangle = -C_\theta \frac{k}{\epsilon} \left(\langle U'_{f,j} U'_{f,k} \rangle \frac{\partial \langle c' \rangle}{\partial x_k} \right), \quad (4.4)$$

où $C_\theta = 0.3$.

Ce modèle est plus coûteux que le SGDH, car il nécessite le calcul des tensions de Reynolds $\langle U'_{f,j} U'_{f,k} \rangle$.

Algebraic Diffusion Model (AFM) :

Les détails de l'obtention de ce modèle sont fournis dans [DEHOUX \(2012\)](#). Il s'écrit de la façon suivante :

$$\langle U'_{f,j} c' \rangle = -C_\theta \tau \left[\langle U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle \frac{\partial \langle c' \rangle}{\partial x_i} + \xi \langle U'_{f,i} c' \rangle \frac{\partial \langle U_{f,j} \rangle}{\partial x_i} \right]. \quad (4.5)$$

Les différentes constantes de ce modèle sont également détaillées dans [DEHOUX \(2012\)](#).

Modèle de transport complet des flux scalaires turbulents (ou *Differential Flux Model – DFM*) :

C'est l'option la plus coûteuse, mais la plus à même de se comparer aux méthodes lagrangiennes de type Langevin, qui traitent l'advection sans approximation. L'équation du transport des flux scalaires turbulents s'écrit ([DEHOUX, 2012](#)) :

$$\begin{aligned} \frac{d \langle U'_{f,j} c' \rangle}{dt} = & - \langle U'_{f,i} c' \rangle \frac{\partial \langle U_{f,j} \rangle}{\partial x_i} - \langle \frac{p'}{\rho} \frac{\partial \langle c' \rangle}{\partial x_j} \rangle - (D + \nu) \langle \frac{\partial c'}{\partial x_i} \frac{\partial u_j'}{\partial x_i} \rangle \\ & + \frac{\partial}{\partial x_i} (- \langle c' U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \langle \frac{\partial c'}{\partial x_i} u_j' \rangle + \nu \langle c' \frac{\partial U'_{f,j}}{\partial x_i} \rangle \right) + \frac{\langle c' p' \rangle}{\rho} \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

A présent que nous avons présenté les différents modèles de fermeture possibles pour les flux scalaires turbulents, nous pouvons nous intéresser plus précisément à la modélisation des rejets de polluant via l'approche eulérienne. Dans *Code_Saturne*, il est possible d'injecter du polluant de deux façons : soit par condition limite (sur une face de bord du domaine), soit en terme source dans une cellule. Nous allons à présent nous attacher à présenter ces deux approches et leur mise en oeuvre dans *Code_Saturne*.

4.2.2.2 Injection en condition limite

Une première remarque est que cette approche suppose que les faces de rejet soient explicitement représentées dans la modélisation géométrique du domaine.

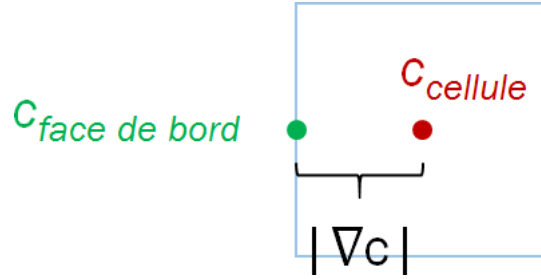


FIGURE 4.2 – Flux diffusif entre face de bord et centre cellule. $|\nabla c|$ représente le gradient de concentration entre la face de bord et le centre de la cellule.

Pour injecter du polluant en condition limite, dans la pratique, on impose une fraction massique c_{ent} . Par conséquent, on impose un débit de polluant “convectif” $Q_{convectif} = \rho u_{ent} S_{ent} c_{ent}$ (où : u_{ent} : vitesse d’entrée en face de bord et S_{ent} : surface de la face de bord considérée). Or, en réalité, le flux total calculé par le code est :

$$Q_{total} = Q_{convectif} + Q_{diffusif} , \quad (4.7)$$

où le flux diffusif $Q_{diffusif} = (\mu + \mu_t) S |\nabla c|$ dépend du gradient de fraction massique $|\nabla c|$ du polluant entre les faces de bord (c imposée) et les centres des cellules voisines (c calculée par le code). Ce flux n’est connu qu’en fin de calcul. On se retrouve donc à injecter un débit total que l’on ne contrôle pas, puisqu’on ne contrôle pas le flux diffusif. La Figure 4.2 illustre le phénomène. Notons que lorsque le flux convectif est fort (vitesse importante par exemple), le flux diffusif est souvent négligé.

Ce problème est résolu si, dans *Code_Saturne*, nous choisissons comme type de condition limite d’entrée un type “entrée convective” et non une entrée simple. En effet, le type entrée convective annule les termes de flux diffusifs et ne conserve que les flux convectifs. Ainsi, nous pouvons contrôler le débit total de polluant que nous injectons. Nous avons donc choisi de travailler avec la condition d’entrée convective.

4.2.2.3 Injection en terme source

Dans le cas de l’injection de polluant en terme source, nous imposons un débit de polluant (convectif) $\rho u S c$. Nous souhaitons comparer ce type d’injection à l’injection en condition limite du paragraphe précédent. Nous nous plaçons donc dans la cellule adjacente à la face de bord considérée. Dans cette cellule sera donc imposé le débit $Q = \rho u_{ent} S_{ent} c_{ent} = Q_{convectif}$. En choisissant l’entrée “convective” pour la condition limite, les approches injection en terme source ou en condition limite sont ainsi équivalentes.

Nous avons souhaité vérifier ce point par des simulations numériques, que nous exposons au paragraphe suivant.

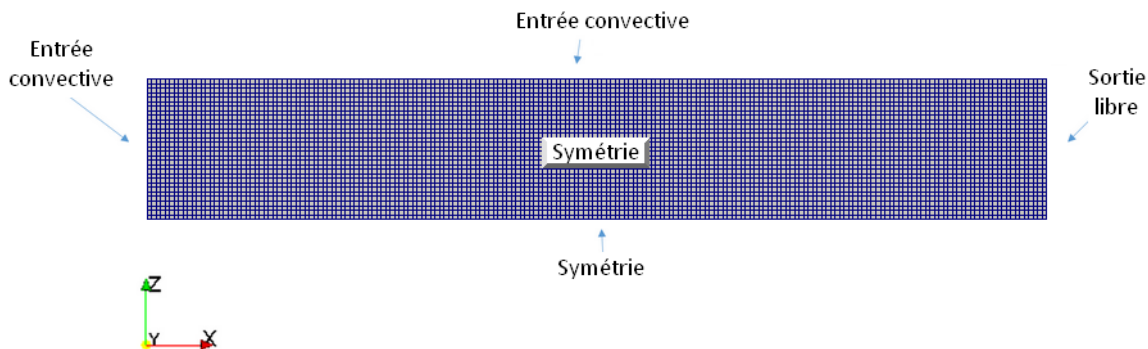


FIGURE 4.3 – Maillage 2D considéré pour l’analyse de l’injection de polluant en condition limite ou terme source.

4.2.2.4 Equivalence entre injection en condition limite et terme source

Le maillage considéré (voir Figure 4.3) est un maillage 2D hexaédrique, de hauteur 31×10 m, de longueur 200×10 m et d’épaisseur 1×10 m. Ce maillage est ainsi uniforme et comporte 6 200 cellules, avec un volume de cellule de 10^3 m³.

En ce qui concerne les conditions aux limites, elles sont schématisées sur la Figure 4.3. Nous avons une entrée convective et une sortie libre respectivement sur les faces de normale \mathbf{e}_x à gauche et à droite du domaine. Au sol, sur les faces latérales, nous avons une condition de symétrie. Enfin, au sommet du domaine, nous avons également imposé une entrée convective, en imposant aux faces de bord du sommet les mêmes valeurs de vent et de turbulence que celles imposées à l’entrée du domaine au niveau de la cellule la plus haute.

Nous nous sommes placés dans le cas simple d’un vent à vitesse uniforme et turbulence homogène. Pour ce faire, nous avons effectué un premier calcul sur un seul pas de temps afin de forcer nos champs dynamiques à leurs valeurs d’initialisation, que nous avons choisies uniformes. Selon l’approche décrite un peu plus haut, nous avons ensuite gelé ces champs dynamiques, afin d’effectuer un calcul de dispersion à champ figé, sur nos valeurs de vent et de turbulence choisies. Pour ce calcul, nous avons utilisé le modèle RANS $R_{ij} - \epsilon$, avec un modèle SGDh pour les flux scalaires turbulents. Pour plus de détails, les caractéristiques des conditions d’entrée figurent sur la Table 4.1.

Pour vérifier l’équivalence entre l’injection en condition limite et en terme source, nous avons réalisé deux calculs de dispersion : l’un correspondant à une injection uniforme de polluant sur toute la surface d’entrée, l’autre correspondant à une injection localisée au niveau seulement d’une face de bord/cellule d’injection. Concernant la méthodologie, nous avons créé deux scalaires : l’un représentant la fraction massique de polluant que l’on injecterait en face de bord (nommée c_{CL} , “CL” pour condition limite), et l’autre représentant celle que l’on injecterait en terme source (nommée c_{TS} ,

Champ	Valeur ou expression
$\langle U_{f,x} \rangle$	10 m/s
$\langle U_{f,y} \rangle$	0 m/s
$\langle U_{f,z} \rangle$	0 m/s
k	$3.33 \text{ m}^2/\text{s}^2$
ϵ	$0.24 \text{ m}^2/\text{s}^3$
$\langle U_{f,x}^{\prime 2} \rangle$	$(2/3)k$
$\langle U_{f,y}^{\prime 2} \rangle$	$(2/3)k$
$\langle U_{f,z}^{\prime 2} \rangle$	$(2/3)k$
$\langle U'_{f,x} U'_{f,y} \rangle$	$0 \text{ m}^2/\text{s}^2$
$\langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle$	$0 \text{ m}^2/\text{s}^2$
$\langle U'_{f,y} U'_{f,z} \rangle$	$0 \text{ m}^2/\text{s}^2$

TABLE 4.1 – Champs dynamiques d’entrée pour l’analyse de l’injection de polluant en condition limite ou terme source.

“TS” pour terme source). Le but est de comparer le transport et la diffusion de ces deux scalaires et de vérifier que quelle que soit la méthode employée, injection en condition limite ou en terme source, nous obtenons les mêmes résultats.

Injection uniforme de polluant :

Le premier calcul de dispersion que nous avons réalisé est celui d’une injection de polluant uniforme sur toute la surface d’entrée. Nous avons imposé en face d’entrée une fraction massique de $c_{CL,ent} = 1$. En terme source, dans la cellule adjacente à la face d’entrée envisagée, nous avons donc imposé un débit $Q = \rho u_{ent} S_{ent} c_{CL,ent}$ avec $c_{CL,ent} = 1$, en accord avec la modélisation condition limite. Nous avons lancé la simulation avec un pas de temps de $\Delta t = 0.1$ s. Une fois la convergence du calcul atteinte, nous avons post-traité les résultats et nous pouvons retrouver en Figure 4.4 les champs de fraction massique c_{CL} et c_{TS} obtenus.

Nous y observons bien une répartition uniforme du champ de fraction massique dans le domaine fluide. Aucune différence n’est observée entre l’injection en condition limite et l’injection en terme source, ce qui nous permet de valider le bon fonctionnement du type “entrée convective”, qui annule effectivement bien les flux diffusifs.

Injection localisée de polluant :

Pour ce cas, nous injectons de manière localisée du polluant, c’est-à-dire au niveau d’une ou plusieurs cellules d’entrée et non plus au niveau de toute la surface d’entrée. Dans notre cas, nous injectons du polluant au niveau d’une seule cellule : la cellule localisée au milieu de la face d’entrée (voir Figure 4.5).

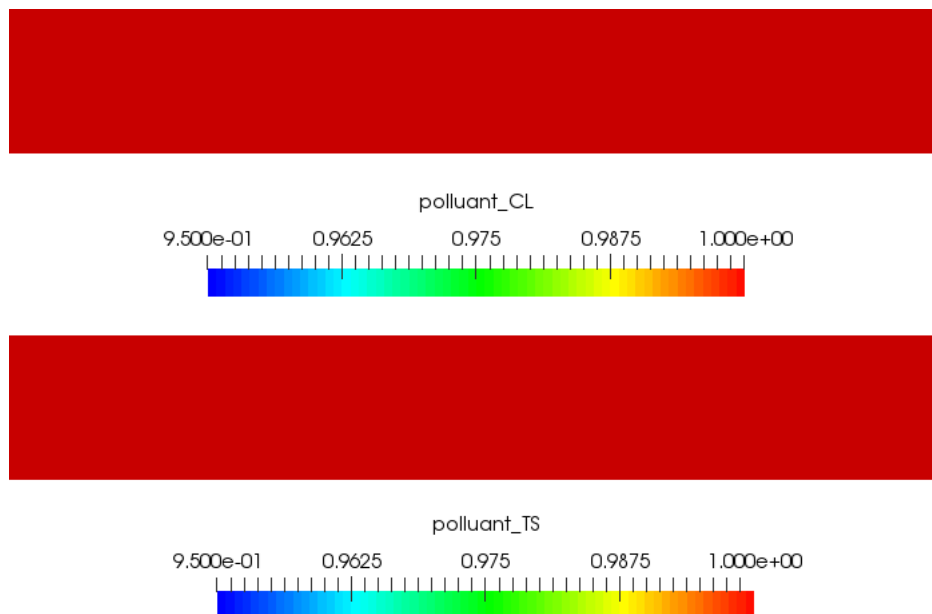


FIGURE 4.4 – Champs de fraction massique c_{CL} et c_{TS} (kg/kg) pour le cas de l’injection uniforme en champs de vitesse et turbulence homogènes.

Les champs dynamiques sont les mêmes que pour la simulation de l’injection uniforme de polluant. En ce qui concerne la dispersion, en condition limite nous injectons encore une fois $c_{CL,ent} = 1$. De même, en terme source, nous injectons un débit $Q = \rho u_{ent} S_{ent} c_{CL,ent}$ avec $c_{CL,ent} = 1$. A noter qu’ici le débit imposé sera bien entendu 1/31 fois inférieur à celui de la simulation d’injection uniforme, puisque nous imposons au niveau d’une seule cellule et non plus au niveau de 31 cellules. Nous retrouvons en Figure 4.6 les champs de concentration obtenus.

A première vue, peu de différence. La dispersion du polluant dans le domaine semble être identique quelle que soit la méthode utilisée. Cependant, si nous réalisons à présent un zoom près de la zone d’injection (voir Figure 4.7), nous pouvons faire deux observations. La première est que si nous extrayons la valeur de la fraction massique au niveau de la cellule d’injection, nous ne retrouvons pas la valeur de 1 pourtant imposée, que ce soit dans le cas condition limite ou terme source. Cela est dû au fait que nous utilisons un modèle SGDH, basé sur une proportionnalité entre fluctuations de concentration et gradients de concentration moyenne. Par conséquent, la diffusion transversale au travers des cellules verticalement inférieure et supérieure à la cellule d’injection peut être importante. Ce phénomène devrait s’atténuer si, au lieu d’injecter sur une seule cellule, nous raffinons le maillage en divisant verticalement cette cellule en trois nouvelles cellules par exemple, dans lesquelles nous injecterions la même masse de polluant que précédemment. La cellule centrale (parmi les trois nouvelles) devrait avoir une valeur plus proche de 1, car le gradient de fraction massique serait en effet plus faible entre elle et ses cellules adjacentes inférieure et supérieure.

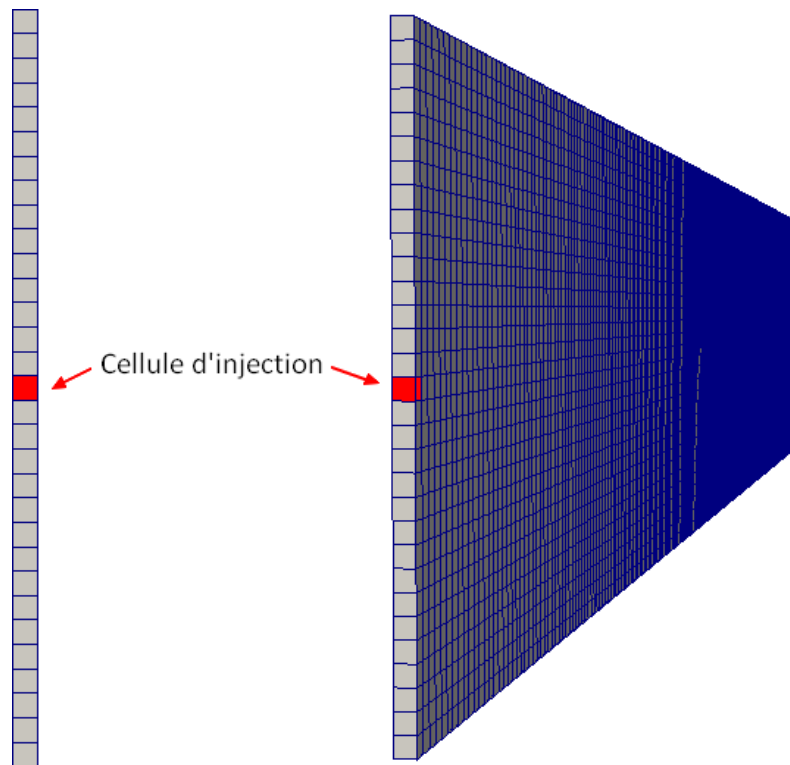


FIGURE 4.5 – Localisation de la cellule d'injection dans le domaine pour le cas de l'injection localisée de polluant.

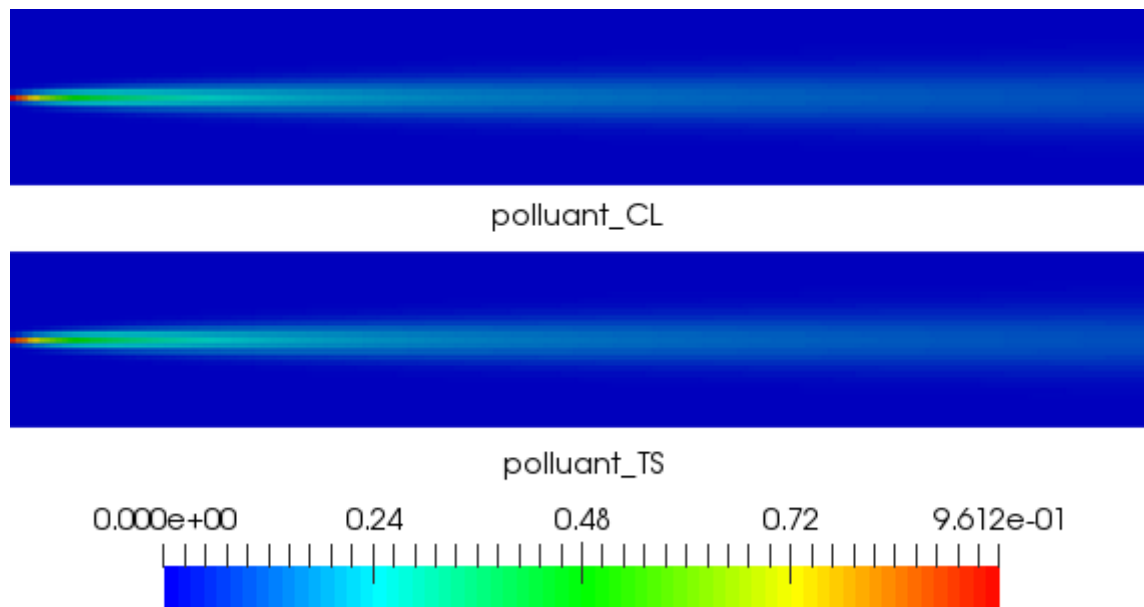


FIGURE 4.6 – Champs de fraction massique c_{CL} et c_{TS} (kg/kg) pour le cas de l'injection localisée en champs de vitesse et turbulence homogènes.

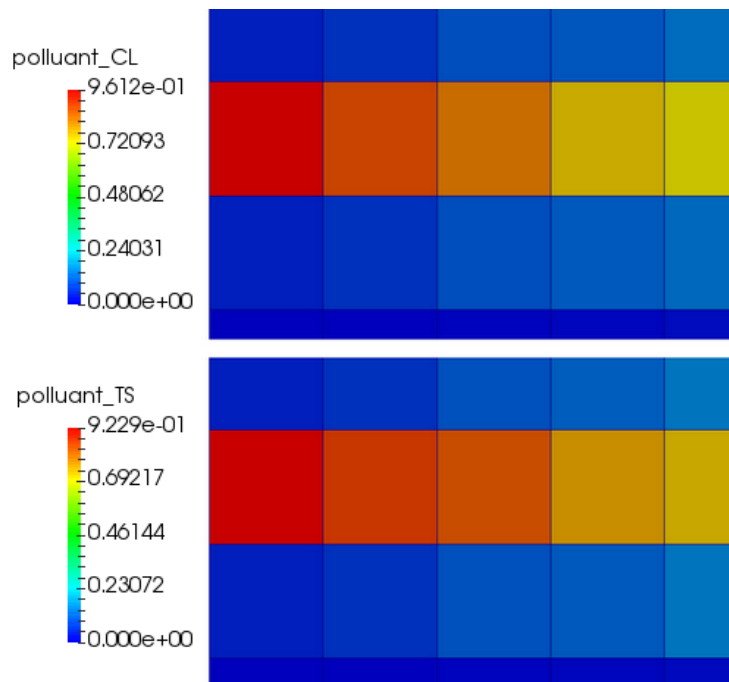


FIGURE 4.7 – Champs de fraction massique c_{CL} et c_{TS} (kg/kg) pour le cas de l’injection localisée de polluant en champs de vitesse et turbulence homogènes – zoom près de la zone de rejet.

La seconde observation est que nous n’obtenons pas tout à fait les mêmes résultats entre c_{CL} et c_{TS} . Par exemple, au niveau de la cellule d’injection, nous avons $c_{CL} = 0.9612$ et $c_{TS} = 0.9229$, soit une différence entre les deux d’environ 4 % : il semble que la diffusion soit plus importante pour le scalaire c_{TS} injecté en terme source. Cependant, nous avons pu conclure que ces écarts observés sont des écarts uniquement dus à l’échelle de la discrétisation du domaine. En effet, nous avons raffiné le maillage en divisant la taille des cellules par 3 dans la direction verticale (\mathbf{e}_z) et longitudinale (\mathbf{e}_x), divisant donc le volume des cellules adjacentes aux faces d’entrée par 9. Nous avons ensuite réalisé l’injection au niveau des 3 cellules centrales (voir Figure 4.8). Les résultats obtenus, que nous retrouvons en Figure 4.9, montrent des champs de c_{CL} et c_{TS} beaucoup plus proches qu’avec le premier maillage plus grossier. Dans ce cas, au niveau de la cellule centrale d’injection, nous constatons que $c_{CL} = 0.9844$ et $c_{TS} = 0.9770$, soit une différence entre les deux d’environ 0.8 %, bien inférieure à l’erreur de 4 % obtenue avec le maillage plus grossier. Les deux approches condition limite et terme source sont donc bien équivalentes, à l’erreur de discrétisation près.

Enfin, si nous reprenons notre premier maillage et que nous traçons le profil de concentration maximale (c’est-à-dire sur l’axe central du panache) en fonction de la distance à la source (voir Figure 4.10a), nous observons que l’erreur entre les approches condition limite et terme source devient négligeable au bout de quelques mètres seule-

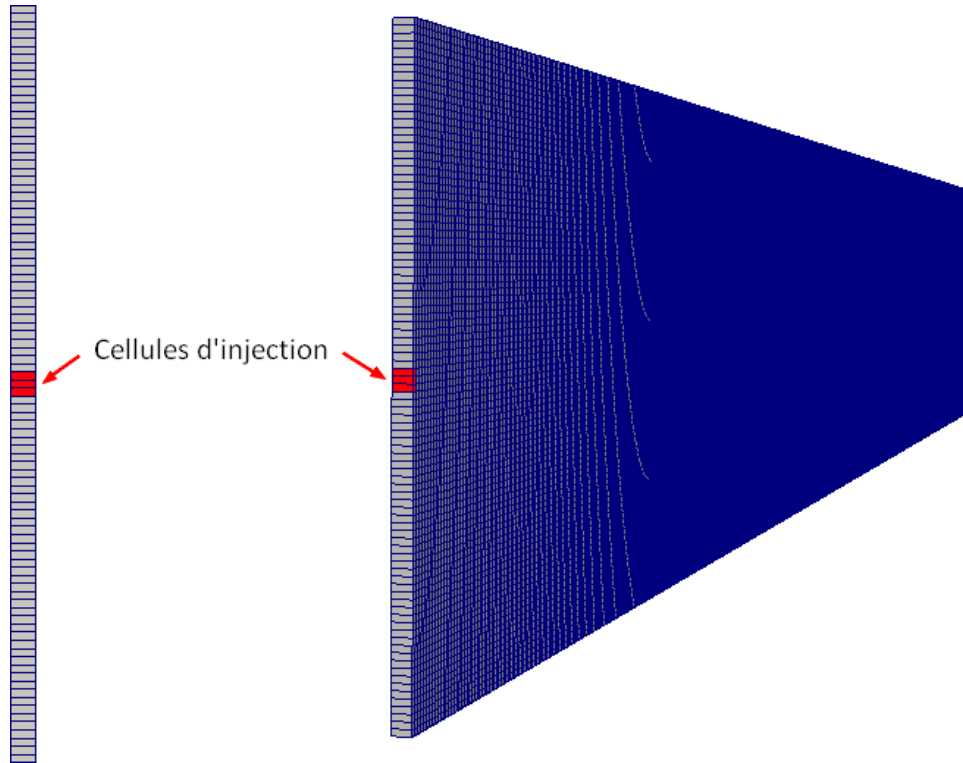


FIGURE 4.8 – Localisation des cellules d'injection dans le domaine avec le maillage raffiné, pour le cas de l'injection localisée en champs de vitesse et turbulence homogène.

ment : les deux méthodes se rejoignent. Cela est plus visible sur la Figure 4.10b, où nous avons réalisé un zoom sur les premiers mètres : en termes de nombre de mailles, nous observons une convergence des deux méthodes pour ce cas au bout d'environ deux cellules.

4.2.3 Modélisation lagrangienne

4.2.3.1 Principe général

Dans le module lagrangien de *Code_Saturne*, le principe initial est de sélectionner une série de faces de bord que l'on associe à une zone particulière. Toutes les faces de bord doivent appartenir à une zone. Pour la zone d'entrée, on crée ensuite une classe de particules, dont on définit les propriétés suivantes :

- le diamètre D_p ;
- la densité ρ_p ;
- le nombre de particules que l'on souhaite injecter au niveau de la zone considérée N ;
- la fréquence d'injection de ces particules f_p ;
- la vitesse de ces particules $U_{p,i}$;

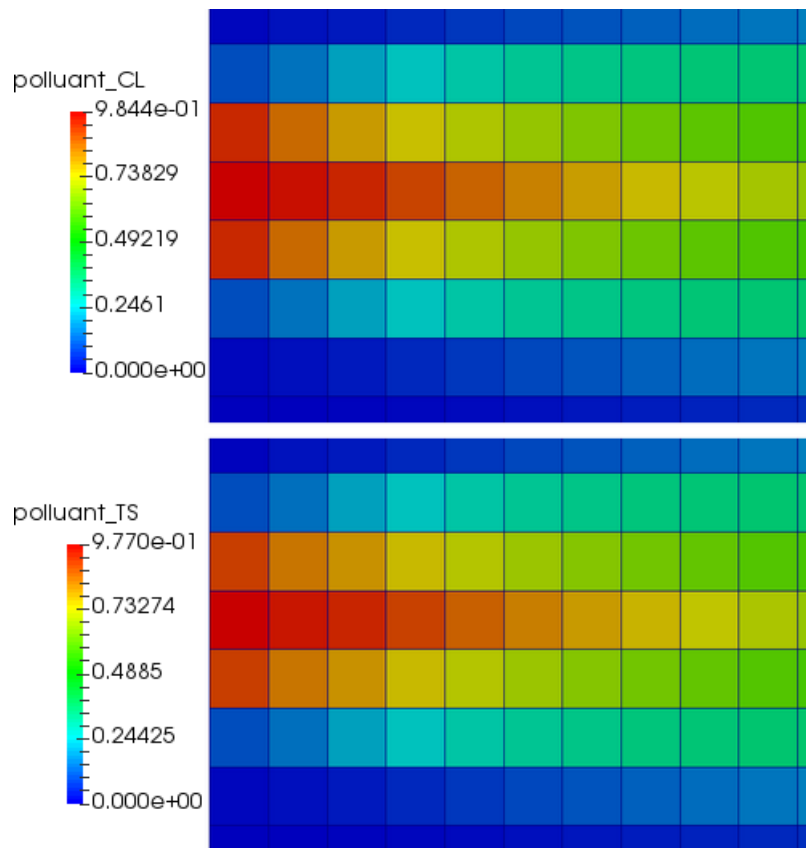
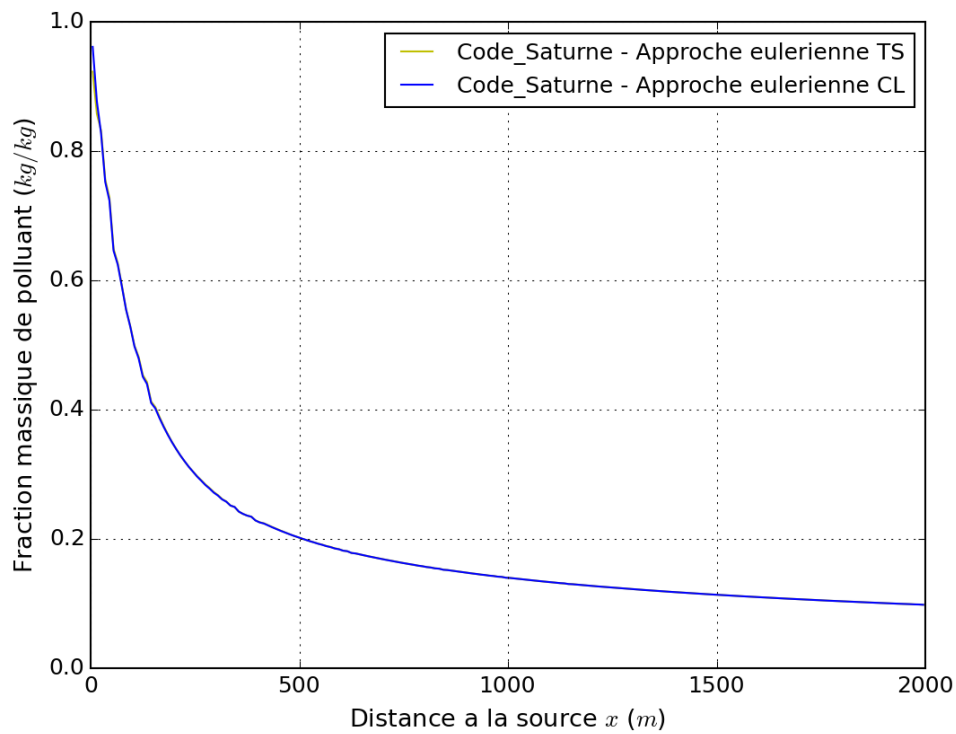
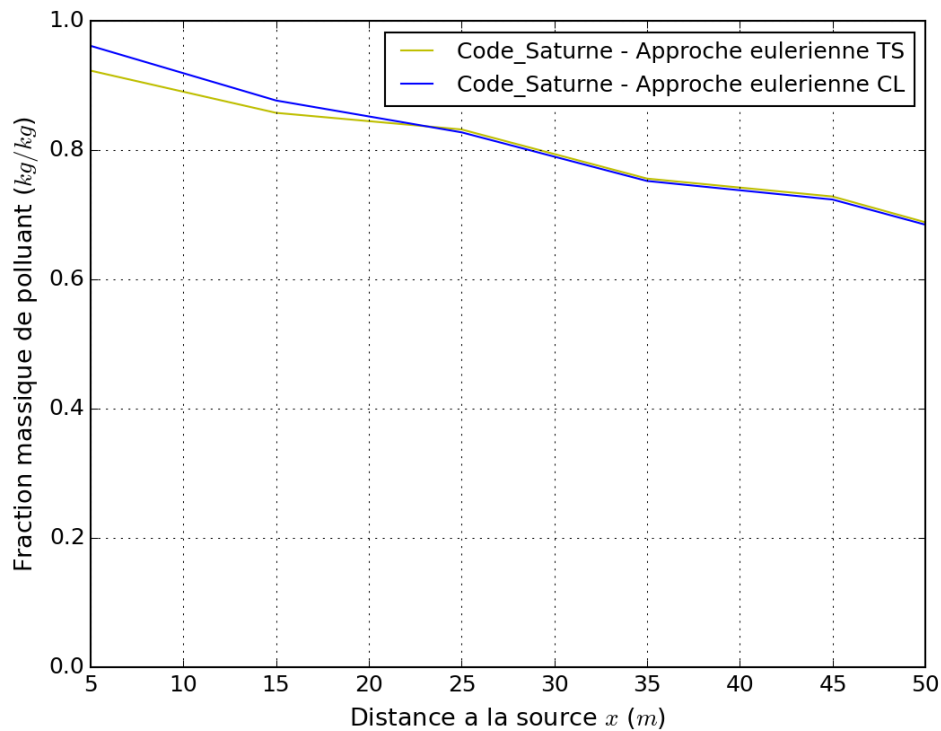


FIGURE 4.9 – Champs de fraction massique c_{CL} et c_{TS} (kg/kg) pour le cas de l’injection localisée en champs de vitesse et turbulence homogène, avec le maillage raffiné – zoom près de la zone de rejet.



(a) Vue globale



(b) Zoom près de la zone de rejet

FIGURE 4.10 – Profil de concentration maximale en fonction de la distance à la source pour le cas de l’injection localisée en champs de vitesse et turbulence homogène : comparaison des méthodes condition limite et terme source.

— le poids statistique associé à chaque particule W_p .

Dans notre cas, puisque l'on souhaite simuler des particules fluides, on emploie la méthode exposée en chapitre 2 qui consiste à se ramener au cas limite de particules fluides en imposant un temps de relaxation τ_p ($\tau_p = 4\rho_p D_p / (3\rho C_D |\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_p|)$) extrêmement faible, dans l'une des routines sources du code.

A ce stade, avec le renseignement de l'ensemble de ces données, nous avons automatiquement imposé le débit massique de particules (en kg/s) suivant :

$$Q = N\rho_p \frac{4}{3}\pi \left(\frac{D_p}{2}\right)^3 f_p W_p . \quad (4.8)$$

Une question se dégage alors : est-ce le débit physique que nous souhaitons imposer ? C'est ici qu'intervient la donnée du poids statistique W_p associé à chaque particule. Par exemple, si nous souhaitons imposer un débit important et que nous n'avons pas injecté assez de particules pour cela, ces dernières devront avoir un poids statistique conséquent, tel qu'il permette d'imposer le débit physique souhaité.

Pour imposer ce poids statistique, il y a plusieurs possibilités. Soit nous le choisissons nous-mêmes, et le débit de particules est alors définitivement figé. Cela est peu commode, puisque nous devrions alors calculer ce poids via la formule $W_p = Q / (N\rho_p \frac{4}{3}\pi (\frac{D_p}{2})^3 f_p)$ de sorte à ce que nous imposions effectivement le débit physique Q souhaité. Pour pallier cela, une autre option existe, qui est d'imposer directement un débit massique de particules Q_p . Le code se charge ensuite de calculer le poids statistique correspondant selon la méthode suivante : entre deux pas de temps successifs t^n et t^{n+1} , pour la zone d'entrée considérée, si de nouvelles particules sont entrées, le code stocke le nombre de ces nouvelles particules et calcule leur masse globale : $dm_p = N\rho_p \frac{4}{3}\pi (\frac{D_p}{2})^3$. S'ensuit la formule du poids :

$$W_p = \frac{Q_p}{\delta m_p / dt} , \quad (4.9)$$

où $\delta m_p / dt = (m^{n+1} - m^n) / (t^{n+1} - t^n)$.

En ce qui concerne le calcul des concentrations, il est fait en plusieurs étapes. Premièrement, pour chaque cellule du domaine, le code compte le nombre de particules. En multipliant par le poids associé à chaque particule et par leur volume, nous obtenons le volume de particules par cellule. En divisant ensuite par le volume de la cellule, nous obtenons la fraction volumique c_{vol} . Enfin, la conversion en fraction massique se fait en multipliant la fraction volumique par le rapport ρ_p / ρ . En résumé, pour une cellule que nous nommerons i :

$$c_i = \frac{\rho_p N_i v_p W_p}{\rho v_{cell,i}}, \quad (4.10)$$

où N_i est le nombre de particules dans la cellule i , $v_{cell,i}$ le volume de cette cellule, v_p le volume d'une particule et W_p son poids statistique.

Cette méthode de “comptage” de particules dans des volumes donnés pour déterminer les concentrations a été utilisée par de nombreux auteurs, pour sa simplicité d'un point de vue technique (voir [VENDEL \(2011\)](#); [CASTELLI et al. \(2017\)](#); [TINARELLI et al. \(2013\)](#); [BORGAS et SAWFORD \(1994\)](#); [LUHAR et RAO \(1994\)](#); [HURLEY et PHYSICK \(1991\)](#), etc.). Il est important de noter que calculer les concentrations de cette manière peut demander la simulation d'un grand nombre de particules. Une autre manière de procéder, limitant le nombre de particules, peut être d'utiliser des méthodes dites “kernel” ([GINGOLD et MONAGHAN, 1982](#); [LORIMER, 1986](#); [DE HAAN, 1999](#)), qui consistent en étaler la masse associée à chacune des particules, suivant une fonction de densité ([VENDEL, 2011](#)). Cependant, ces méthodes ne sont pas adaptées à des terrains complexes ou en présence d'obstacles ([TINARELLI et al., 2013](#)); c'est pourquoi nous n'avons pas suivi cette voie.

Par ailleurs, il est bon de noter que la fraction massique ici définie est une variable représentant le rapport entre masse de polluant et masse d'air, et non entre masse de polluant et masse de mélange comme cela est le cas en eulérien (pour rappel, “mélange = polluant + air”). Lorsque la concentration en polluant est très petite devant celle de l'air, comme ce sera le cas pour nous dans nos études réelles de dispersion atmosphérique, ces variables peuvent être considérées identiques.

Un dernier point concerne la méthode d'injection en lagrangien présentée ci-dessus. Initialement, cette méthode d'injection reposait sur un système de zones surfaciques. Lorsque nous injectons un débit de particules sur une certaine zone, un tirage aléatoire était réalisé afin de répartir les particules sur la zone, et ces dernières se dispersaient seulement après ce tirage surfacique. Nous souhaitions plutôt pouvoir relâcher des particules volumiquement au niveau d'une ou plusieurs cellules d'injection, et non plus de manière surfacique. Cela permettait en effet de pouvoir injecter des particules volumiquement à l'intérieur du domaine fluide, chose impossible lorsque l'on se basait sur le système de zones associées aux faces de bord. Nous avons donc, dans le cadre de cette thèse, participé au développement d'une nouvelle fonctionnalité dans *Code_Saturne* qui permet de réaliser ce type d'injection volumique. Cette fonctionnalité se base également sur un système de zones (cette fois volumiques) à sélectionner et auxquelles nous affectons les mêmes propriétés d'injection que celles décrites précédemment pour le cas de l'injection surfacique.

4.2.3.2 Conditions aux limites

Dans le module lagrangien, les conditions aux limites associées à la phase dispersée sont les suivantes :

- entrée ;
- sortie ;
- symétrie (flux de particules nul) ;
- rebond élastique ;
- déposition définitive (avec ou sans sortie de la particule de la mémoire) ;
- déposition avec réentraînement possible ;
- encrassement des grains de charbon.

Intéressons-nous plus précisément au cas du rebond des particules lorsqu’elles touchent une paroi, typiquement le sol dans nos applications atmosphériques. Une première idée, et il s’agit de celle qui est initialement implémentée dans *Code_Saturne*, consiste à appliquer un rebond dit “spéculaire” ou “élastique” : chaque particule qui traverse la paroi frontière et quitte le domaine de simulation est réfléchiée avec la même vitesse longitudinale que la particule entrante, de la façon suivante :

$$U_{p,x}^{in} = U_{p,x}^{out} , \quad (4.11a)$$

$$U_{p,y}^{in} = U_{p,y}^{out} , \quad (4.11b)$$

$$U_{p,z}^{in} = -U_{p,z}^{out} , \quad (4.11c)$$

où l’indice “in” représente la valeur de la vitesse entrante de la particule, et “out” la valeur sortante (voir Figure 4.11).

Cependant, cela revient à écrire une condition aux limites de flux nul pour la composante de vitesse longitudinale, ce qui est inconsistant avec l’échange de quantité de mouvement avec la paroi. Suivant le même esprit que celui utilisé pour dériver des lois de paroi dans les codes CFD, où une condition aux limites est appliquée dans la région logarithmique près du mur plutôt que sur le mur lui-même (cf. POPE (2000)), nous proposons une autre représentation de la condition aux limites en paroi suivante (en supposant que z est la direction normale à la paroi) :

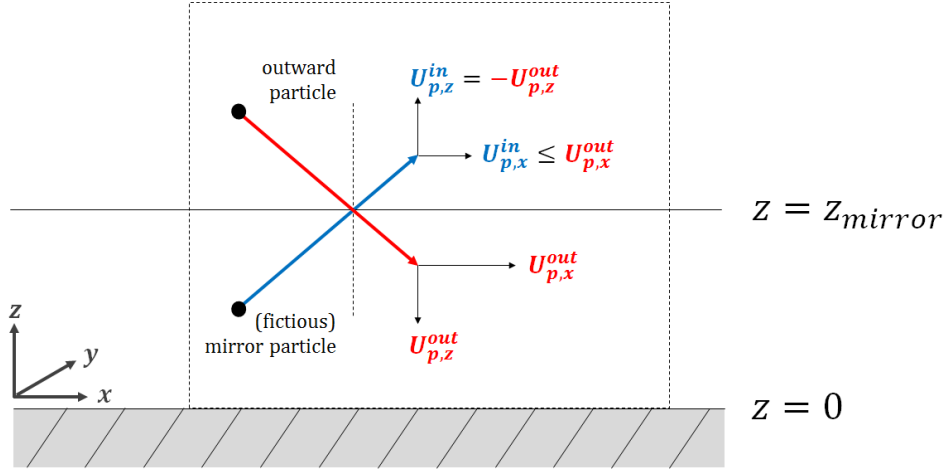


FIGURE 4.11 – Représentation de l’interaction particule/paroi montrant comment les particules arrivant à $z = z_{mirror}$, choisi dans la couche logarithmique, sont réfléchies dans le domaine, de manière à respecter un flux de masse nul dans la direction normale à la paroi, ainsi que l’échange de quantité de mouvement dû au frottement dans la direction longitudinale. \mathbf{U}_p^{in} (orienté vers le haut) et \mathbf{U}_p^{out} (orienté vers le bas) représentent respectivement les vitesses entrante et sortante (d’après [BAHLALI et al. \(2018c\)](#)).

$$U_{p,x}^{in} = U_{p,x}^{out} - 2 \frac{\langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle}{\langle U'^2_{f,z} \rangle} U_{p,z}^{out} , \quad (4.12a)$$

$$U_{p,y}^{in} = U_{p,y}^{out} - 2 \frac{\langle U'_{f,y} U'_{f,z} \rangle}{\langle U'^2_{f,z} \rangle} U_{p,z}^{out} , \quad (4.12b)$$

$$U_{p,z}^{in} = -U_{p,z}^{out} , \quad (4.12c)$$

Le raisonnement ainsi que la justification de ces expressions pour les modèles stochastiques à particules sont détaillés dans [DREBEN et POPE \(1997\)](#); [MINIER et POZORSKI \(1999\)](#).

Cette condition aux limites a été implémentée dans *Code_Saturne* pour des cas simples, c’est-à-dire lorsque la direction normale à la paroi est alignée avec l’un des axes du repère de référence du code. Par manque de temps, nous n’avons pas pu généraliser l’implémentation de cette condition aux limites quelle que soit la direction de la normale à la paroi. Dans l’article [BAHLALI et al. \(2018c\)](#), reproduit en chapitre 4 de ce manuscrit, nous montrons l’influence de cette nouvelle condition aux limites dans un cas de vérification, respectivement au calcul des moments d’ordre 2. Dans un cas d’application industrielle (SIRTA, cf. chapitre 6), l’application de cette condition aux limites n’a pas été influente sur les résultats de concentration issus des particules. Nous nous sommes donc, en approximation, placés dans les conditions d’un rebond spéculaire dans nos cas applicatifs de rejets ponctuels à échelle industrielle.

4.3 Validation du modèle dans le cas d'un rejet ponctuel continu en vent uniforme et turbulence homogène

Dans cette section, l'objectif est de valider le SLM dans le cas d'un rejet ponctuel continu, en conditions de vent uniforme et turbulence homogène. Cette étude est particulièrement intéressante car dans ces conditions, nous disposons d'une solution analytique. C'est donc l'occasion de confronter le SLM à cette solution, ainsi que d'observer les différences avec le modèle eulérien. Notons que le modèle eulérien auquel nous nous comparerons dans les figures qui vont suivre est celui injectant du polluant en terme source, avec un modèle de turbulence SGDH.

4.3.1 Un peu de théorie...

Il est intéressant d'observer ce que fourniraient théoriquement nos modèles eulérien et lagrangien avant de les simuler numériquement.

4.3.1.1 Solution analytique et "écart-type du panache"

La dispersion d'un rejet ponctuel et continu de polluant de débit Q dans un écoulement uniforme de vitesse U à diffusivité constante est décrite par une fonction analytique. La solution pour la concentration maximale en fonction de la distance à la source x est la suivante (PERKINS et al., 2005) :

$$c_{max}(x) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}U\sigma_y(x)} , \quad (4.13)$$

où σ_y est l'écart-type de la distribution gaussienne de la concentration dans le panache.

Cet écart-type peut s'exprimer de diverses façons, selon le modèle utilisé. En ce qui concerne les modèles eulériens RANS $k-\epsilon$, nous l'avons vu en chapitre 3, la fermeture de l'équation d'advection-diffusion moyennée se fait via le tenseur de diffusivité turbulente K_{ij} :

$$\langle U'_{f,j}c' \rangle = -K_{ij}\nabla\langle c \rangle , \quad (4.14)$$

où $K_{ij} = 0$ si $i \neq j$.

Et dans ce cas, on montre que l'écart-type s'exprime de la façon suivante :

$$\sigma_y(x) = \sqrt{2K_x \frac{x}{U}} . \quad (4.15)$$

4.3. Cas du rejet ponctuel continu en vent uniforme, turbulence homogène

Comme nous sommes dans le cas d'un écoulement uniforme, il est possible également d'exprimer cet écart-type en fonction du temps t grâce à la relation $U = x/t$:

$$\sigma_y(t) = \sqrt{2K_x t} . \quad (4.16)$$

Dans le cadre le plus général, le cas académique de la dispersion depuis une source ponctuelle a été largement traité dans la littérature, avec pour base les travaux de **TAYLOR (1921)** sur la théorie statistique de la diffusion turbulente. Il est démontré que l'écart-type $\sigma_y(x)$, en turbulence stationnaire et isotrope, peut en fait s'exprimer selon la relation suivante (voir **ARYA (1999)** et **POPE (2000)** pour plus de détails) :

$$\sigma_y^2(t) = 2\sigma_{U_{f,x}}^2 \int_0^t (t-s) R_{L,x}(s) ds , \quad (4.17)$$

où $R_{L,x}(s)$ est la fonction d'autocorrélation lagrangienne selon x , définie comme suit :

$$R_{L,x}(s) = \frac{\langle U_{p,x}(t) U_{p,x}(t+s) \rangle}{\langle U_{p,x}^2(t) \rangle} . \quad (4.18)$$

Nous la nommerons simplement $R_L(s)$ pour plus de facilité de lecture. A cette autocorrélation est associée l'échelle de temps intégrale lagrangienne suivante :

$$T_L = \int_0^\infty R_L(s) ds . \quad (4.19)$$

De la relation (4.17) nous pouvons déduire deux comportements asymptotiques pour les temps courts et longs. Pour les temps courts ($t \ll T_L$), l'autocorrélation $R_L(s)$ peut être approximée par $R_L(0) = 1$ et alors :

$$\sigma_y(t) \approx \sigma_{U_{f,x}} t . \quad (4.20)$$

Pour les temps longs ($t \gg T_L$), l'intégrale peut être approximée par :

$$\int_0^t (t-s) R_L(s) ds \approx t \int_0^\infty R_L(s) ds = t T_L , \quad (4.21)$$

d'où :

$$\sigma_y(t) \approx \sqrt{2\sigma_{U_{f,x}}^2 T_L t} . \quad (4.22)$$

On retrouve là l'évolution "eulérienne" (RANS premier ordre) de l'écart-type en racine carrée du temps, que nous explicitons en équation (4.16), avec $K_x = \sigma_{U_{f,x}}^2 T_L$.

Ainsi, pour résumer, nous avons des particules fluides qui se dispersent depuis une

certaine source ponctuelle avec un écart-type qui dépend de la fonction d'autocorrélation $R_L(s)$. Pour les temps longs, l'écart-type évolue en racine carrée du temps, ce qui correspond à une diffusion avec un tenseur de diffusivité turbulente constant (approche eulérienne RANS premier ordre) de forme “ $K_x = \sigma_{U_{f,x}}^2 T_L$ ”. Pour les temps courts, en revanche, l'écart-type évolue proportionnellement au temps, ce qui correspondrait à une diffusion avec un tenseur de diffusivité variable en fonction du temps de forme “ $K_x = \frac{1}{2} \sigma_{U_{f,x}}^2 t$ ”.

Si nous exposons ici cette théorie de la diffusion, cela est pour montrer mathématiquement que des particules de polluant, lorsqu'elles se dispersent à partir d'une source ponctuelle (ce qui sera le cas de nos études où nous pouvons assimiler, par exemple, la sortie d'une cheminée à un point, en comparaison à la taille du domaine), vont avoir un comportement de diffusion différent selon que nous soyons proche ou loin de la source. Nous avons d'ailleurs déjà évoqué ce point de manière qualitative en chapitre 1. En particulier, il en ressort que pour des études de dispersion en champ proche (temps courts par rapport à T_L), il sera important de disposer d'un modèle capable de bien capturer la diffusion en temps courts. En d'autres termes, il sera nécessaire que le modèle distingue les deux régimes de diffusion précédemment évoqués, c'est-à-dire cette variabilité de la forme des écarts-types entre temps courts et temps longs. Nous venons de voir qu'un modèle eulérien RANS du premier ordre ne fait pas cette distinction, car il implique un écart-type toujours identique de type $\sigma_y(x) = \sqrt{2K_x t}$, avec K_x indépendant du temps. Dans le paragraphe qui suit, nous allons voir en quoi le SLM permet de faire la distinction entre les deux régimes de diffusion.

4.3.1.2 Ecart-type impliqué par le SLM

Du SLM (voir [POPE \(2000\)](#), annexe J, pour le détail de la démonstration), il est possible de tirer la fonction d'autocorrélation $R_L(s)$, qui a la forme d'une exponentielle :

$$R_L(s) = \exp(-|s|/T_L) . \quad (4.23)$$

En injectant cette formule dans l'équation sur l'écart-type (4.17) et en intégrant, nous obtenons ([POPE, 2000](#)) :

$$\sigma_y^2(t) = 2\sigma_{U_{f,x}}^2 T_L [t - T_L(1 - e^{-t/T_L})] . \quad (4.24)$$

Cette formulation nous permet bien de retrouver les deux bons comportements asymptotiques à temps courts et longs. A présent que nous avons exposé la théorie sous-jacente à ce cas académique de dispersion, nous présentons notre simulation *Code_Saturne*. Nous avons, au sein du même calcul, utilisé les modèles eulérien et la-

4.3. Cas du rejet ponctuel continu en vent uniforme, turbulence homogène

Variable	Valeur ou expression
$N/\Delta t$	500 particules
$\langle U_{p,i} \rangle$	$\langle U_{f,i} \rangle$
Q_p	$Q_{eulerien} = \rho u_{ent} S_{ent} c_{ent}, c_{ent} = 1$

TABLE 4.2 – Champs lagrangiens d’injection, pour le cas d’un rejet ponctuel continu en vent uniforme et turbulence homogène.



FIGURE 4.12 – Répartition des particules dans le domaine, pour le cas d’un rejet ponctuel continu en vent uniforme et turbulence homogène.

grangien, dans le but de pouvoir les comparer non seulement à la solution analytique, mais également entre eux. L’objectif est de valider la théorie précédemment exposée.

4.3.2 Mise en données du calcul

Le cas traité est un cas à champs de vitesse et de turbulence homogènes : il s’agit du cas que nous avons déjà étudié dans le paragraphe 4.2.2.4. Le principe ici est d’injecter du polluant de manière localisée (dans notre cas, au niveau de la cellule centrale selon la verticale). L’injection eulérienne est réalisée en terme source et est détaillée dans le paragraphe 4.2.2.4. L’injection lagrangienne est réalisée dans la même cellule que l’injection eulérienne, et les données lagrangiennes d’injection sont établies dans la Table 4.2.

4.3.3 Résultats

En Figure 4.12, nous pouvons observer la répartition des particules dans le domaine fluide. Le champ de fraction massique est quant à lui illustré en Figure 4.13.

En Figure 4.14, de manière analogue au cas de l’injection uniforme, nous avons tracé trois profils verticaux de fraction massique relativement en entrée de domaine ($x = 5$ m), en milieu de domaine ($x = 1000$ m) et en sortie de domaine ($x = 1995$ m). Nous pouvons y observer la diffusion du polluant, plus marquée en lagrangien qu’en eulérien près de la source : partant d’une valeur quasiment identique à 5 m, la diminution est en effet plus brutale à 1000 m avec l’approche lagrangienne.

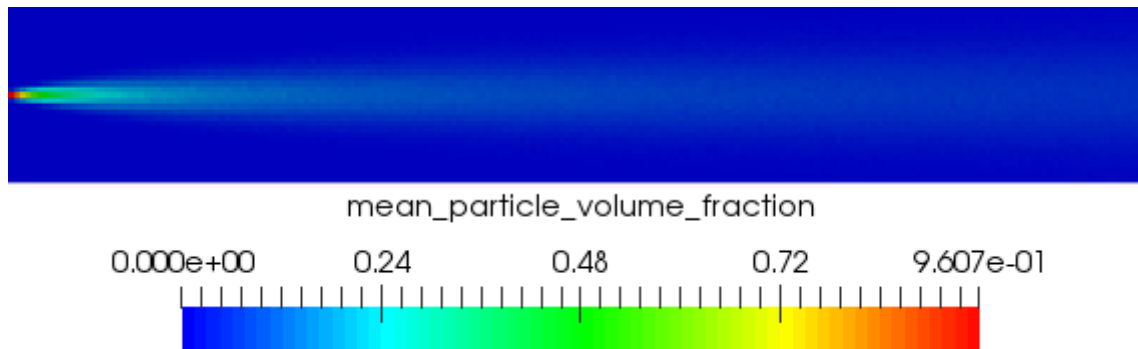


FIGURE 4.13 – Champ de fraction massique lagrangienne c_{lagr} (kg/kg), pour le cas d'un rejet ponctuel continu en vent uniforme et turbulence homogène.

4.3.3.1 Comparaison des modèles eulérien et lagrangien à la solution analytique

Nous allons donc comparer le SLM à cette solution analytique ainsi qu'aux résultats obtenus en eulérien. En Figure 4.15 nous avons tracé le profil de fraction massique maximale en fonction de la distance à la source. Nous en rappelons ci-dessous l'expression :

$$c_{max}(x) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}U\sigma_y(x)}, \quad (4.25)$$

où σ_y est l'écart-type du panache. Il est ici exprimé selon la formule suivante, largement utilisée dans les codes de dispersion atmosphérique (VENDEL, 2011) :

$$\sigma_y = \sigma_{U_{f,x}} \times \frac{x}{U \sqrt{1 + \frac{x}{2UT_L}}}. \quad (4.26)$$

Cette formulation permet bien la distinction champ proche (x petit)/champ lointain (x grand) que nous évoquons plus haut. Ici, $T_L \approx 7$ s et $U = 10$ m/s donc les distances équivalentes correspondant au champ proche sont les distances en deçà de $UT_L \approx 70$ m.

Nous constatons (voir Figure 4.15) que le modèle eulérien est bien plus éloigné de la solution analytique que le modèle lagrangien. Cela s'explique par le fait que, précisément, il ne tient pas compte de la différence de comportement de la diffusion turbulente entre champ proche et champ lointain. En champ proche, nous avons une diffusion rapide, tandis que loin de la source, la diffusion est plus lente. Ceci est bien entendu pris en compte dans la solution analytique via la formulation de l'écart-type explicitée un peu plus haut en équation (4.26), mais également par le modèle lagrangien SLM (voir formulation (4.24) dans la démonstration du paragraphe 4.3.1.2). Nous pouvons le voir sur les courbes : en observant le graphique près de la source par exemple, nous

4.3. Cas du rejet ponctuel continu en vent uniforme, turbulence homogène

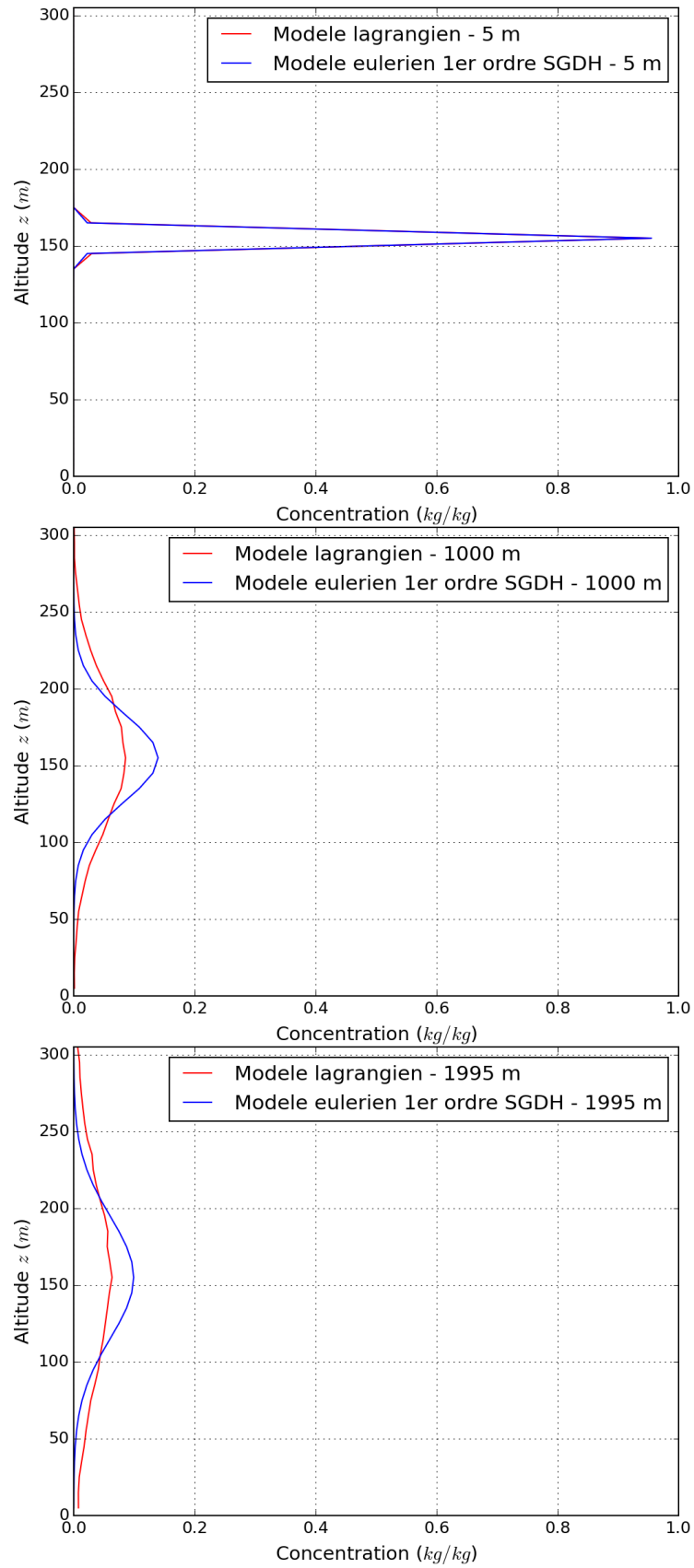


FIGURE 4.14 – Profils verticaux de fraction massique pour 3 différentes distances à la source, pour le cas d'un rejet ponctuel continu en vent uniforme et turbulence homogène.

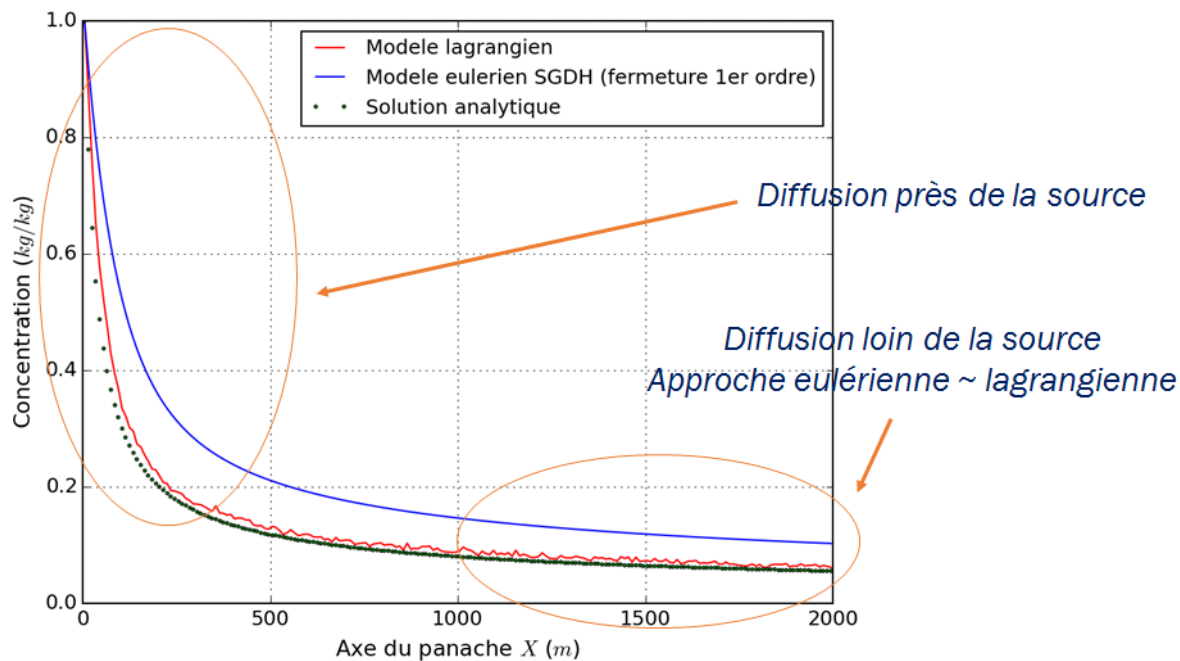


FIGURE 4.15 – Profil de concentration maximale, pour le cas d’un rejet ponctuel continu en vent uniforme et turbulence homogène.

avons une baisse brutale et importante de la concentration pour le modèle lagrangien et la solution analytique, qui traduit une diffusion rapide. Le modèle eulérien, lui, diffuse beaucoup plus lentement (pente moins raide). Loin de la source en revanche, on observe un quasi-parallélisme des pentes entre les trois courbes, ce qui traduit une diffusion identique quelle que soit l’approche : on retrouve là la proportionnalité de l’écart-type à \sqrt{x} , à la fois pour le modèle eulérien et le modèle lagrangien.

Pour observer cette différence de comportement de manière plus claire, il est intéressant de tracer l’écart-type σ_y en fonction de la distance à la source x (voir Figure 4.16). Nous voyons sur ce graphique qu’effectivement, les écarts-types lagrangiens sont en meilleur accord avec la solution analytique et, en particulier, suivent bien les bonnes pentes, contrairement aux écarts-types calculés par un modèle eulérien du premier ordre.

Pour conclure, nous avons pu vérifier le bon fonctionnement du modèle lagrangien SLM sur ce cas académique, où nous disposons d’une solution analytique. Nous observons qu’il fournit des résultats plus cohérents physiquement que le modèle eulérien du premier ordre, et tient bien compte de la différence de comportement champ proche/champ lointain. Il est à rappeler cependant que ces résultats sont dus au fait que les modèles eulérien et lagrangiens utilisés ici ne sont pas au même ordre de fermeture turbulente. Le modèle eulérien utilisé pour le calcul des flux scalaires turbulents est un modèle SGDH, du premier ordre, qui utilise une fermeture locale à gradient simple.

4.3. Cas du rejet ponctuel continu en vent uniforme, turbulence homogène

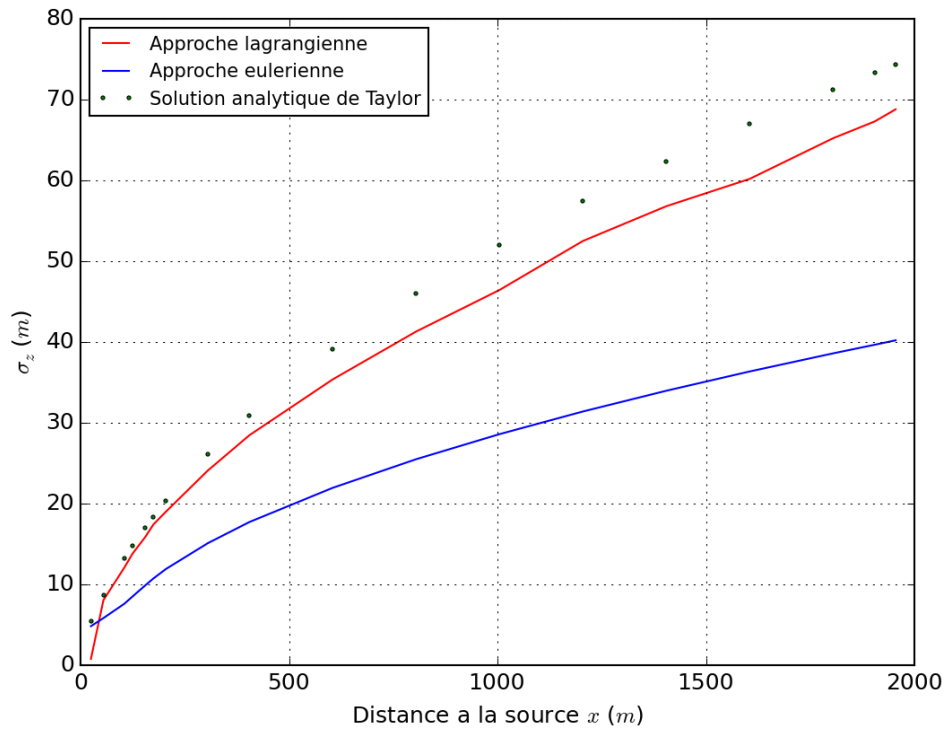


FIGURE 4.16 – Ecart-type en fonction de la distance à la source

Le modèle lagrangien SLM, lui, est par nature un modèle du second ordre. Un modèle eulérien DFM (voir 4.2.2.1), transportant complètement les flux scalaires turbulents, devrait fournir des résultats semblables à la solution analytique et au modèle lagrangien. Cependant, ce modèle n'est pas encore au point et n'a pour le moment jamais été utilisé dans les études de dispersion atmosphérique d'EDF. Il ne sera pas non plus utilisé dans le cadre de cette thèse.