

Ministère de l'Enseignement
Supérieur
et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE SAAD DAHLEB-
BLIDA
FACULTÉ DES SCIENCES
Département Aéronautique



**PROJET DE FIN D'ÉTUDE
EN VUE DE L'OBTENTION DU DIPLOME D'INGÉNIEUR
D'ÉTAT EN AERONAUTIQUE**

Filière : Construction et Maintenance en Aéronautique

Spécialité : Propulsion

THÈME

**MODÉLSATION ET SIMULATION DE DISPERSION
DES POLLUANTS DANS L'ATMOSPHÈRE**

Présenté par:

BELKALOUCHE Abdelrahmane
BELKADI Hichem

Devant le jury :

S. Boukraa	Professeur	Président	Univ. Blida
T.Rezoug	Dr. Maître de conférences	Rapporteur	Univ. Blida
A. Tahi	Mr	Rapporteur	Univ. Blida
H.Ould Bessi	Mr	Examineur	Univ. BLida
R. Allouche	MA	Examineur	Univ. BLida

Année Universitaire 2006/2007

Résumé :

La pollution générée par la circulation aérienne et automobile au cœur de la ville, et par les activités industrielles à sa périphérie, est un problème aigu des grandes cités urbaines dans lesquelles nous vivons. Une fois émis dans l'atmosphère, les polluants subissent deux types de contraintes : d'une part ils réagissent chimiquement entre eux donnant naissance à de nouveaux polluants tels que l'ozone, et d'autre part ils sont transportés par les vents.

Ce travail a pour objectif de modéliser et simuler la dispersion d'un polluant éjecté dans l'atmosphère (par une cheminée et dans une rue en U). Les équations différentielles régissant ce phénomène sont été discrétisé en utilisant des méthodes numériques tels que la méthode des volumes finis comme étant une introduction aux calculs mais vu la complexité du problème nous avons utilisé un code de calcul (MATLAB pour la programmation et FEMLAB pour la simulation)[CHAPITRE VII]. Et nous avons utilisé un programme écrit en C++ pour calculer les fractions molaires des espèces pour un hydrocarbure donné pour des différentes gammes de richesse [CHAPITRE II].

Cette thèse nous facilite la recherche des nouvelles performances soit dans le domaine aéronautique, soit dans le domaine industriel.

Enfin les résultats ainsi obtenus nous donnent des informations concernant la distribution du polluant en atmosphère, aussi bien pour différentes positions et bien sur les zones à faibles concentrations et à concentration élevées.

Summary :

The pollution generated by the air traffic and automobile in the heart of the city, and by the industrial activities with its periphery, is an acute problem of the large urban cities in which we live. Once emitted in the atmosphere, the pollutants undergo two types of constraints: on the one hand they react chemically between them giving rise to new pollutants such as ozone, and on the other hand they are transported by the winds

This work aims to model and simulate the dispersion of a pollutant ejected in the atmosphere (by a chimney and in a street out of U). The differential equations governing this phenomenon are discretized by using numerical methods such as the method of finished volumes as being an introduction to calculations but considering the complexity of the problem we used a computer code (MATLAB for the programming and FEMLAB for the simulation)[CHAPTER VII]. And we used a program written in C++ to calculate the

..... Résumé

molar fractions of the species for a hydrocarbon given for various ranges of richness [CHAPTER II].

This thesis facilitates to us the research of the new performances either in the aeronautical field (improvement of the combustion chambers), or in the industrial field.

This thesis facilitates to us the research of the new performances either in the aeronautical field, or in the industrial field.

Finally the results so obtained give us information concerning the distribution of the pollutant in atmosphere, as well for various positions and well on the zones with weak high concentrations and concentration.

Remerciement

Nous remercions tout d'abord notre promoteur Mr :T.REZOUG & co-promoteur Mr :A.TAHI, pour avoir nous proposer ce thème ainsi que leur fructueux conseils et orientations et qui ont permis la réalisation de ce travail.

Nous remercions les membres de jury pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu porter à ce modeste travail, messieurs : S.Boukraa, O.Bouras, H.Ouldbessi

Nos remerciements s'adressent également à : Mr :HAMADECHE directeur de l'ONM pour avoir nous accueilli dans son établissement et Mr : M.Mokhtari pour son aide et Mr:Boukadoume responsable du centre de calcul de Samasafia.

Nous remercierons également les membres du département d'Aéronautique qui nous ont assuré l'environnement adéquat afin de réaliser notre travail.

Nos remerciements vont aussi à tout ceux et celles qui ont participé de près ou de loin à l'élaboration du présent travail. Nos sentiments de profonde gratitude vont à nos professeurs qui tout au long des cinq années d'étude nous ont transmis leur savoir sans réserve.

Enfin, nous tenons à remercier tous nos amis et collègues pour leur soutien moral tout au long de la préparation de ce mémoire.

Le binôme ABDELRAHMANE & HICHEM

Dedicaces

*Je dédie ce travail à mes chers parents :
ma mère, mon père pour leur amour,
encouragements, et sacrifices*

A mes très cher frère et soeurs,

A toute la famille BELKADI

A tout mes amis d'ORAN, Blida

Walid, Karim, Yassine, cousin : Hamidou, Sid Ahmed

Et du Bloc 02

*A mon binôme ABDELRAHMANE que
j'apprécie beaucoup ainsi qu'à toute sa
famille*

A toute la famille BOUKRAA

A mes très chers amis

KOCHAOUI, GH, OUSS, MOUH, NABIL, NAFAA, DROGBA, CHAGOU61

*A tous ceux et celles dont les noms ne sont
pas cités*

HICHEM.

Dedicaces

*Je dédie ce travail à mes chers parents :
ma mère, mon père pour leur amour,
encouragements, et sacrifices*

A mes très cher frères et soeurs,

A toute la famille BELKALOUCHE

A tout mes amis d'AIN TEMOUCHENT,

Blida

MANSOUR, HOUARI, MOURAD, Et du Bloc 02

*A mon binôme HICHEM que j'apprécie
beaucoup ainsi qu'à toute sa famille*

*A toute la famille MEDJADJI A mes très
chers amis*

NASSIM, BAROUDI, gh, OUSS, MOUH, NABIL, NAFAA, abdelkader

*A tous ceux et celles dont les noms ne sont
pas cités*

ABDELRAHMANE.

A LA MÉMOIRE DE NOTRE AMI :
HAMIDA TAYEB

	Pages
Introduction Générale	1
Chapitre I	GÉNÉRALITÉS SUR LA POLLUTION ATMOSPHÉRIQUE
I.1- Introduction.....	6
I.2- L'atmosphère terrestre	6
I.2.1-Structure de l'atmosphère.....	6
I.2.2-Nature et dynamique de la basse atmosphère.....	7
I.2.3-Composition chimique.....	9
I.3-La pollution atmosphérique.....	9
I.3.1- Les échelles spatiales de pollution	9
I.3.2- Les principaux polluants.....	11
I.4- Dispersion des polluants en atmosphère.....	13
I.4.1-Émission des polluants.....	13
I.4.2-Transport des polluants.....	14
I.5-Les différentes approches pour modéliser la pollution atmosphérique.....	14
I.5.1- L'approche Eulérienne.....	14
I.5.2- L'approche Lagrangienne.....	14
I.5.3- Le couplage : modèles sous mailles.....	15
I.5.4 - Les modèles épisodiques.....	15
I.6- Les modèles numériques existants de Chimie- Transport.....	15
Chapitre II	POLLUTIONS INDUITES PAR LES AVIONS ET LES STRUCTURES AEROPORTUAIRES
II.1-Généralités.....	16
II.2- La Norme LTO Déterminée Par L'OACI.....	17
II.3-La certification des moteurs (Cycle atterrissage - décollage).....	18
II.4-Espèces réglementées.....	19
II.5- Emissions des aéronefs.....	20
II.6- Contribution Des Activités Aéroportuaires a La pollution.....	22
II.7-La chambre de combustion.....	23
II.8-Combustion.....	25
II.8.1-Calcul de la composition du mélange brûle en équilibre sous une pression et à une température donnée.....	25
II.8.2-Expression et calcul de la richesse.....	26
II.8.3-Combustion à pression constante	28
II.8.4-Méthode de calcul	29
II.8.5- Le programme de calcul.....	30
Chapitre III	DYNAMIQUE DE LA COUCHE LIMITE ATMOSPHÉRIQUE
III.1- Introduction	31
III.2- Description de la turbulence dans la CLA.....	31
III.2.1- Turbulence dans la CLA.....	31
III.3-Les principales modélisations de la turbulence.....	32
III.3.1- La simulation numérique directe (DNS)	33
III.3.2- La simulation des grandes échelles (LES)	33
III.3.3- La simulation des équations de Navier Stokes moyennées (RANS)	34

III.4- Outils pour la modélisation	34
III.5- Equations moyennées.....	35
III.5.1- Le problème de la fermeture.....	36
III.5.2- Classification des modèles de turbulence	36
CHAPITRE IV	CHIMIE DE LA COUCHE LIMITE ATMOSPHERIQUE
	TRANSPORT DE MASSE ET CINETIQUE CHIMIQUE
IV.1- Introduction.....	38
IV.2 -Description des équations générales pour la chimie.....	38
IV.2.1- Les équations de transport Fermeture des équations Terme de dépôt les	
Unités	38
IV.3- Cinétique chimique Réaction chimique élémentaire	41
IV.3.1- Vitesse de réaction	41
IV.3.2- Equation de vitesse de Guldberg et Waage	43
IV.3.3- Recherche de l'ordre global d'une réaction	44
a -Relation vitesse – concentration.....	44
b - Relation concentration – temps.....	44
c- Détermination de la constante de vitesse.....	46
IV.3.4- Paramètres influençant la vitesse de réaction.....	46
IV.3.5- Energie d'activation.....	47
IV.3.6- Mécanisme réactionnel.....	48
IV.3.7- Théorie de collision.....	49
IV.3.8- Loi de vitesse d'une réaction complexe.....	49
IV.3.8 .1- Cas de deux étapes mono moléculaires	49
IV.3.8 .2- Cas de plusieurs étapes	50
IV.4-Photochimie.....	53
CHAPITRE V	LE MODÈLE NUMÉRIQUE
V.1-Introduction.....	54
V.2-Méthodes des différences finies.....	55
V.3- Discrétisation de l'équation générale de transport	56
V.4- Méthode des volumes finis	61
V.5-Méthode des éléments finis	66
V.6-Discrétisation numérique.....	67
V.7- Algorithme de résolution des équations discrétisées.....	69
V.7.1- Représentation du gradient de pression dans les équations de quantité de mouvement	
discrétisées	70
V.7.2-L'algorithme SIMPLE.....	72
V.7.3- Conditions aux limites pour l'équation de correction de pression.....	75

CHAPITRE VI		MODÈLES STATISTIQUES DE LA DISPERSION DES POLLUANTS	
VI. 1	Introduction		77
VI.2	Définition du modèle		77
VI.3	Relation entre les émissions des véhicules et la concentration des polluants		82
VI.4	Gaz traceur.....		84
VI .5	Site de mesures.....		84
VI.5.1	Sélection du site de mesures.....		84
VI.5.2	Caractéristiques du site des mesures.....		85
VI.5.2.1.	Dimensions de la rue		85
VI.6	Modèles Gaussiens pour la Cheminée.....		86
VI.6.1	Généralités.....		86
VI.6.2	Domaine de Validation		87
VI.6.3	Méthodes de Résolution.....		87
VI.7	Samasafia.....		89
VI.7.1	La couverture géographique		90
VI.7.2	Résultats et interprétations.....		91
VI.7.3	Conditions météorologiques.....		93
CHAPITRE VII		RESULTATS ET DISCUSSIONS	
VII.1	Contexte.....		94
VII 1.1	Essais en Grandeur Réelle.....		94
VII.1.2	Essais a Echelle Réduite.....		94
Premier CAS TEST (CHEMINÉE)			
VII.I.1	Modèle mathématique		95
VII.I.2	Conservation des espèces.....		96
VII.I.3	Conditions aux limites		96
VII.I.4	Discussions des résultats de simulation.....		97
VII.I.5	L'obstacle.....		97
VII.I.6	Le flux de l'écoulement.....		99
VII.I.7	Relation entre la position de la zone de recirculation et le rapport $\frac{v_s}{U}$		99
VII.I.8	Concentrations des espèces.....		101
VII.I .9-	Profils de vitesses.....		102
Deuxième CAS TEST (Rue en U)			
VII.II.1	Introduction.....		106
VII.II.2	Méthodologie pour un modèle d'émission		106
VII.II.3	Modélisation de la dispersion.....		108
VII.II.4	Canyon Urbain.....		108
VII.II.5	Présentation Graphique.....		110
Conclusion Générale et Perspectives.....			115

..... Liste des Figures

	Pages
Figure 1	: le problème de la pollution atmosphérique schématisé.....1
Figure I-1	: Les différentes couches atmosphériques.....7
Figure I-2 & I-3	: Représentations des mouvements d'air verticaux en fonction de l'altitude pour la basse atmosphère.....8
Figure I.4	: Ozone stratosphérique et l'ozone à basse altitude Figure.....10
Figure II.1	: la norme LTO.....17
Figure II.2	cycle atterrissage / décollage18
Figure II.3	: Emissions associées à l'activité de Roissy Charles-de-Gaulle selon les références phases du cycle LTO.....19
Figure II.4	: différents sources d'émission.....22
Figure II.5	: Schéma général des différents composants d'une chambre de combustion.....24
Figure II.6	: Evolution des principaux polluants en fonction de la charge du moteur.....25
Figure IV-1	: l'évolution temporelle des espèces A (réactif) et B (produit).....42
Figure IV-2	: Energie d'activation d'une réaction à une seule étape.....47
Figure IV-3	: Energie d'activation d'une réaction à deux étapes.....48
Figure IV.4	: angles dans un repère équatorial.....53
Figure V-1	: structure du maillage.....55
Figure V-2	: volume de contrôle entourant le point centrale P.....62
Figure V-3	: maillage décalé en vitesse- pression.....67
Figure V-4	: volume de contrôle pour la conservation de masse.....68
Figure V-5	: volume de contrôle : (a) pour la composante u, (b) pour la composante v.....68
Figure V-6	: volume de contrôle de l'espèce C_a68
Figure V.7	: Champ de pression en zig-zag....71
Figure V.8	: Volume de contrôle utilisé pour la discrétisation de l'équation de continuité.....73
Figure V.9	: L'algorithme SIMPLE.....76
Figure V.10	:Volume de contrôle sur la frontière pour l'équation de continuité.....76
Figure VI .1	: La Direction du vent au niveau du plafond est considérée dans un angle de 60°80
Figure VI .2	: La vitesse du vent développe une circulation hélicoïdale à l'intérieur de la rue urbaine.....80
FigureVI.3.	: Méthode de calcul de l'émission horaire des polluants quand la concentration de fond est connue.....83
Figure VI. 4	: Méthode de calcul de l'émission horaire des polluants quand la Concentration de fond est inconnue.....83
Figure VI. 5	: structure des écoulements derrière des bâtiments.....85
Figure VI. 6	: influence de la géométrie des rues sur les écoulements.....86

..... Liste des Figures

Figure VI.7	: Les quatre agglomérations de la région.....	86
Figure VI.8	: Profil moyen journalier des teneurs en dioxyde d'azote (NO2) pour l'ensemble du réseau durant l'année 2006.....	90
Figure VI.9	: Profil moyen journalier des teneurs en monoxyde de carbone pour l'ensemble du réseau durant l'année 2006.....	91
Figure VI.10	: Profil moyen journalier des teneurs en poussières pour l'ensemble du réseau durant l'année 2006.....	92
Figure VI.11	: Profil moyen journalier des teneurs en poussières pour l'ensemble du réseau durant l'année 2006.....	92
Figure VII-1	: Schéma représentatif du domaine d'étude.....	95
Figure VII.2	: influence de la présence de la cheminée sur l'écoulement d'air.....	97
Figure VII.3	: Influence d'un obstacle sur l'écoulement du vent [Hug, 1975].....	98
Figure VII.4	: flux de l'écoulement dans l'atmosphère (1 ^{er} cas TEST)	99
Figure VII.5	: $\frac{v_s}{U} = 1$	} Relation entre la position de la zone de recirculation et le rapport $\frac{v_s}{U}$
Figure VII.6	: $\frac{v_s}{U} = 2$	
VII.7	: $\frac{v_s}{U} = 3$	
		100-101
Figure VII.8	: Concentration de la 1 ^{ème} espèce (AIR) (1 ^{er} cas TEST)	101
Figure VII.9	: Concentration de la 2 ^{ème} espèce (polluants) (1 ^{er} cas TEST)	102
Figure VII-10	: Vitesse en fonction de y.....	102
Figure VII-11	: Vitesse en fonction de x.....	103
Figure VII.12	: énergie cinétique turbulente(k).....	104
Figure VII.12.a	: contour de l'énergie cinétique turbulente.....	104
Figure VII.12.b	: dissipation par unité de masse.....	105
Figure VII.12.c	: Contour de la dissipation par unité de masse.....	105
Figure VII.14	: relation vitesse / émission pour les véhicules et pour les principaux polluants.....	106
Figure VII.15	: Concentration de la 1 ^{ème} espèce (AIR).....	110
Figure VII.16	: Concentration de la 2 ^{ème} espèce (polluants).....	110
Figure VII.17	: DIRECTION ET INTENSITE DE LA VITESSE RESULTANTE.....	111
Figure VII.18	: Visualisation des Lignes de Courant	111
Figure VII.19	: Profil de vitesse suivant y.....	112
Figure VII.20	: Concentration de la 1 ^{ème} espèce (AIR).....	112
Figure VII.21	: Concentration de la 2 ^{ème} espèce (polluants).....	113
Figure VII.22	: DIRECTION ET INTENSITE DE LA VITESSE RESULTANTE	113
Figure VII.23	: VISUALISATION DE L'ECOULEMENT.....	114

..... Liste des Tableaux et des Annexes

Tableau 1	: actions nocives de quelques polluants sur l'organisme.....	2
Tableau I.1	: Echelles d'étude de la pollution.....	10
Tableau I.2	: les principaux polluants atmosphériques.....	13
Tableau II.1	: les réglages de poussée et les durées de chaque phase du cycle LTO.....	20
Tableau II.2	: Emissions des aéronefs.....	21
Tableau II.3	: composition du produit de combustion d'un hydrocarbure C_nH_{2n} dans les conditions d'équilibre thermodynamique pour différentes richesses Φ	27
Tableau III.1	: Turbulence dans l'atmosphère.....	32
Tableau III.2	: les modèles couramment utilisés pour la modélisation de la Turbulence.....	37
Tableau IV.1	: lois de vitesse simple.....	45
Tableau VI.2	: Détermination de la pente.....	46
Tableau V.1	: Les quantités massiques et volumiques pour différentes équations de conservation.....	58
Annexe I	: Le Contenu de CDROM.	
Annexe II	: Rappel sur les Principales Equations	
Annexe III	: Samasafia.	
Annexe IV	: Volume de Contrôle décalés (détachés).	

Lettres romaines

C_i :	concentration d'une espèce chimique (molécule.cm ⁻³)
C_p :	capacité calorifique (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)
C :	constantes des modèles de turbulence (.)
D :	coefficient de diffusion moléculaire (m ² .s ⁻¹)
D_i :	terme de dépôt de l'espèce i (molécule.cm ⁻³ .s ⁻¹)
E_i :	émission de l'espèce i (molécule.cm ⁻³)
$E_{v,T}$:	émission d'un véhicule V durant un temps T (g)
f :	redistribution de l'intensité turbulente (s ⁻¹)
f_{ij} :	facteur de forme entre deux surfaces Si et Sj (.)
F :	force de Coriolis (N)
F_{emp} :	facteur d'émission unitaire pour un polluant p (g.m ⁻¹)
g :	intensité de la force de gravité (N)
G :	terme de production d'énergie cinétique turbulente par gravité (kg.m ⁻² .s ⁻²)
H :	hauteur de l'obstacle (m)
I :	intensité turbulente (.)
k :	énergie cinétique turbulente moyenne (m ² .s ⁻²)
:	constante de vitesse des réactions chimiques (s ⁻¹ ou molécule ⁻¹ .cm ³ .s ⁻¹)
K :	coefficient de perméabilité (m ²)
:	coefficient de diffusion turbulente (m ² .s ⁻¹)
K_t :	coefficient de transmission de l'atmosphère (.)
l_r :	longueur moyenne de la recirculation (m)
L :	longueur caractéristique d'un écoulement (m)
$L_{v,T}$:	longueur parcourue par un véhicule V durant le temps T (m)
L_x :	longueur d'une rue X (m)
m_i :	masse molaire de l'espèce i (kg)
M_i :	masse moléculaire de l'espèce i (kg)
ne :	nombre de polluants (.)
p :	pression (Pa)
P :	terme de production des polluants (molécule.cm ⁻³ .s ⁻¹)
:	terme de production d'énergie cinétique turbulente par cisaillement (kg.m ⁻² .s ⁻²)
$Q_{x,T}$:	débit de véhicules sur une rue X pendant le temps T (véh.s ⁻¹)
R :	terme de production/destruction (molécule.cm ⁻³ .s ⁻¹)
Re :	nombre de Reynolds (.)
R_i :	terme de production/destruction de l'espèce i (molécule.cm ⁻³ .s ⁻¹)
Sc :	nombre de Schmidt (.)
t :	temps (s)
T :	température moyenne (K)
T_0 :	température de référence (K)
U :	vitesse caractéristique d'un écoulement (m.s ⁻¹)
V_s :	Vitesse d'éjection de la cheminée

U_{moy} :	vitesse moyenne ($m.s^{-1}$)
\bar{u} :	vecteur vitesse moyenne ($m.s^{-1}$)
u' :	fluctuation du vecteur vitesse ($m.s^{-1}$)
VT :	vitesse d'un véhicule ($m.s^{-1}$)
x :	vecteur position (m)
Z :	angle solaire zénithal (rad)
$C_t =$	concentration total du polluant dans l'air
$C_b =$	<i>concentration de base</i>
$C =$	<i>concentration provenant du trafic</i>
$\sigma_z =$	déviations standard verticale de la dispersion
$r =$	distance entre la source et le récepteur
$C_i =$	concentration directe de la source d'émission linéale
$Q_i =$	taux d'émission du i^{eme} segment.
$h =$	profondeur de la couche.
$C_w =$	Concentration du polluant cote au vent de la rue.
$C_L =$	Concentration du polluant cote au vent de la rue.

Lettres grecques

ε :	taux de dissipation de k ($m^2.s^{-3}$)
ε_i :	émissivité de la surface S_i (.)
κ :	constante de von Karman (.)
ξ :	longueur caractéristique (m)
λ :	conductivité thermique ($W.m^{-1}.K^{-1}$)
μ :	viscosité dynamique ($kg.m^{-1}.s^{-1}$)
μ_t :	viscosité turbulente ($kg.m^{-1}.s^{-1}$)
ν :	viscosité cinématique ($m^2.s^{-1}$)
Ω :	Azimut solaire (rad)
Φ :	Latitude (rad)
π :	pi (rad)
ρ :	masse volumique instantanée ($kg.m^{-3}$)
$\bar{\rho}$:	masse volumique moyenne ($kg.m^{-3}$)
φ :	densité de flux radiatif ($W.m^{-2}$)
σ :	Constante de Stefan-Boltzman ($kg.m^{-4}.S^{-1}.K^{-4}$)
σ_t :	Nombre de Prandtl turbulent (.)
Σ :	tenseur des contraintes ($N.kg.m^{-2}$)

Espèces chimiques

CO	:	monoxyde de carbone
CO ₂	:	dioxyde de carbone
HC	:	hydrocarbures
HO ₂	:	radicaux hydroperoxydes
HNO ₃	:	acide nitrique
NMHC	:	hydrocarbures non méthaniques
NO	:	monoxyde d'azote
NO ₂	:	dioxyde d'azote
NO _x	:	NO+NO ₂
O ₂	:	oxygène
O ₃	:	ozone
OH	:	radical hydroxyle
RO ₂ ·	:	radicaux peroxydes
PAN	:	peroxyacélnitrates
SO ₂	:	dioxyde de soufre
RCHO	:	aldéhydes

Abréviations

CLA	:	couche limite atmosphérique
CLS	:	couche limite de surface
CLU	:	couche limite urbaine
DNS	:	simulation numérique directe
FIA	:	flux incident atmosphérique
FE	:	flux incident reçu de l'environnement

Symboles mathématiques

δ_{ij}	:	symbole de Kronecker
I	:	matrice identité
\times	:	produit tensoriel
\cdot	:	Produit scalaire
$\frac{\partial}{\partial t}$:	Dérivée partielle par rapport au temps
Δ	:	opérateur laplacien
∇	:	opérateur gradient
$\nabla \cdot$:	Opérateur divergence
Σ	:	symbole de sommation
\int	:	symbole d'intégration
t	:	opérateur de transposition
cos	:	fonction cosinus
sin	:	fonction sinus

INTRODUCTION :

La pollution générée par la circulation aérienne et automobile au cœur de la ville, et par les activités industrielles à sa périphérie, est un problème aigu des grandes cités urbaines dans lesquelles nous vivons. Les répercussions sur le bien être de ses habitants sont nombreuses mais, bien au-delà, ce sont ses conséquences sur la santé publique qui deviennent préoccupantes. Le problème de la pollution atmosphérique peut être schématisé par le système *source- vecteur- cible* suivant :

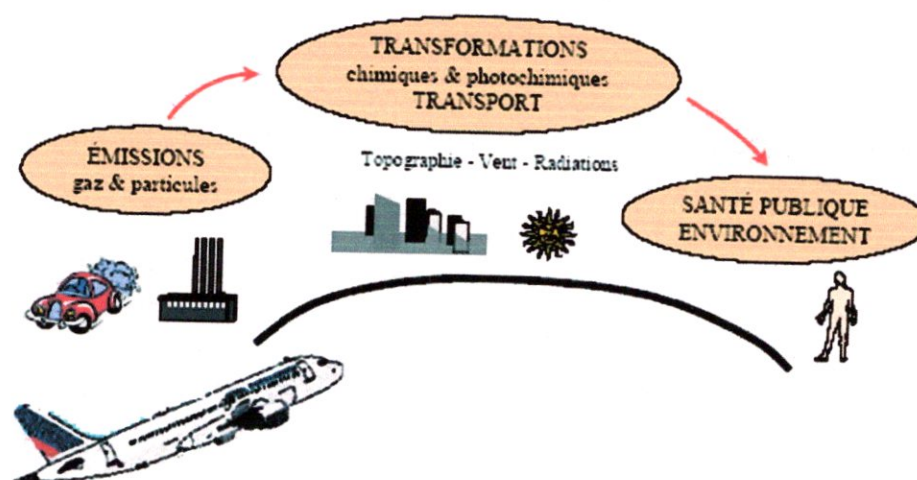


Figure 1 : le problème de la pollution atmosphérique schématisé

Une fois émis dans l'atmosphère par les avions, véhicules ou les usines, les polluants alors dits primaires - sont soumis à deux types de contraintes : d'une part ils réagissent chimiquement entre eux, ce qui modifie leurs concentrations et donne naissance à de nouvelles espèces appelées polluants secondaires ; d'autre part, ils sont transportés dans l'atmosphère par les vents locaux et dominants, ce transport pouvant amener à le dépôt du polluant sur le sol, les bâtiments, la végétation, à l'accumulation dans certaines zones ou bien au transport hors de la ville.

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

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

Ozone (O ₃)	Migraines, toux, altération des fonctions pulmonaires
Monoxyde de carbone (CO)	Anorexie, vertiges, migraines, troubles de la vision
Oxydes d'azote (NO _x)	Irritations, diminution des défenses immunitaires et altération des fonctions pulmonaires
Hydrocarbures (HC)	Irritations oculaires, toux, actions cancérogènes
Particules	Transportent les polluants dans les poumons, attaquent les muqueuses nasales

Tableau 1 : actions nocives de quelques polluants sur l'organisme

Moins graves mais montrant tout aussi bien la nocivité de la pollution sont les dégâts causés aux matériaux ou à la végétation. Il suffit de regarder la noirceur de nos villes pour s'en rendre compte. Ce sont les fortes concentrations en particules et fumées qui sont responsables de ce phénomène. Quant à l'ozone, il est particulièrement actif en détériorant les caoutchoucs. Ceci a été remarqué à Los Angeles où le taux de remplacement des pneumatiques était plus élevé que dans d'autres villes moins polluées à l'ozone [Seinfeld, 1986]. Les polluants phyto-toxiques, comme le SO₂ (dioxyde de soufre) ou les PAN (peroxyacetylnitrates), une fois dans la feuille de la plante détruisent la chlorophylle et perturbent la photosynthèse, causant ainsi une réduction de la croissance de la plante ou bien son dépérissement.

La réduction de la visibilité qui accompagne généralement les hauts niveaux de pollution est peut être le caractère le plus évident constaté par tout un chacun. Elle est provoquée par la diffusion et l'absorption de la lumière par les polluants gazeux et particulaires. Elle dépend de la position du soleil dans le ciel ce qui fait que le smog peut avoir différentes couleurs selon le moment de la journée. Le dioxyde d'azote NO₂ est le principal polluant gazeux qui absorbe le rayonnement solaire mais à des taux relativement faibles par rapport à l'absorption particulaire.

Les moyens d'action.

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

Pourquoi modéliser ?

Une approche originale est celle de la modélisation, qui conduit à la réalisation d'un modèle de qualité de l'air permettant de déterminer les niveaux de pollution aux différentes échelles d'une ville. Ces modèles viennent en complément des réseaux de capteurs dont le nombre est- en raison de leur coût- toujours limité. Un modèle de qualité de l'air peut être un outil d'aide à la décision pour les municipalités : il permet en effet de mesurer la répercussion sur les niveaux de pollution de toute modification apportée au système de voirie ou à la politique de transport en commun. La modification initialement prévue pourra, selon les résultats du modèle, être effectuée ou au contraire revue pour une amélioration.

Des simulations de scénarii types d'épisodes de pollution sont aussi réalisables, afin d'arriver à une meilleure compréhension des phénomènes physiques rencontrés ainsi qu'à la mise en place d'une politique d'urgence la plus adaptée à la situation. On peut imaginer à plus long terme un couplage direct à un système de gestion du trafic et une réaction en temps réel sur la gestion des feux (et donc la densité de trafic) en fonction des niveaux de pollution.

Problème multidisciplinaire.

La réalisation d'un modèle de qualité de l'air est à l'interface de plusieurs disciplines que sont notamment la chimie atmosphérique, la mécanique des fluides et les transferts thermiques. Le préalable à l'étude du transport des polluants est une bonne connaissance des écoulements urbains. Il s'agit d'écoulements dans les basses couches de l'atmosphère, plus précisément dans la couche limite urbaine que nous pouvons dès maintenant définir comme la partie de la couche limite atmosphérique dont les caractéristiques dynamiques et thermiques sont modifiées par la présence des constructions urbaines et de l'activité humaine qui y règne. Ce sont typiquement des problèmes de thermique et de mécanique des fluides. Comme nous le verrons, les polluants réagissent chimiquement et photochimiquement entre eux ce qui influe fortement sur les concentrations, d'où l'importance de la chimie dans les modèles de qualité de l'air.

Problème d'échelle.

Nous sommes de toute évidence face à un problème d'échelle tant les ordres de grandeurs des phénomènes physiques - dont quelques exemples sont donnés ci-après - sont variables :

- Hauteur de la couche limite urbaine : 1-3 km
- Hauteur d'inhalation des polluants : 1,70 m
- Largeur d'une rue : 20 m
- Durée de vie de l'ozone : 2 h
- Durée de vie du radical hydroxyle OH \cdot : 1 s
- Longueurs caractéristiques de la turbulence : du mm au km

Face à ces échelles variées, il existe différents modèles généralement classés selon des Echelles en fonction des caractéristiques spatiales, temporelles et des phénomènes qu'ils modélisent.

Pour les écoulements atmosphériques, plusieurs classifications existent dont celles d'Orlanski [Orlanski, 1975] et de Smagorinsky [Smagorinsky, 1974]. Nous ferons référence à ce dernier qui définit les échelles suivantes :

- échelle micro : 10⁻² - 10³ m
- échelle locale : 10² - 5.10⁴ m
- échelle méso : 10⁴ - 2.10⁵ m
- échelle macro : 10⁵ - 10⁸ m

Notre approche.

Nous avons choisi de travailler à la fois sur les aspects dynamiques, thermiques et chimiques de la pollution. Il est bien évident que notre ambition n'est pas de réaliser un modèle complet de modélisation de la pollution atmosphérique mais d'avancer pas à pas sur chacun de ces aspects en développant des méthodes adaptées aux problèmes que nous rencontrons. Elles s'intègrent à un code de calcul déjà existant qui pourra ensuite être complété et utilisé pour des études plus concrètes d'épisodes de pollution.

Nous avons également choisi de travailler sur plusieurs échelles à savoir l'échelle locale qui correspond aux écoulements à l'échelle du bâtiment, et l'échelle méso correspondant à celle de la ville.

Notre travail comporte les chapitres suivants :

- Le premier chapitre est consacré à une étude représentative ou bien généralités sur la pollution atmosphérique, les propriétés physico-chimiques, réactivités, sources et effets des polluants.

- Le deuxième chapitre montre les pollutions induites par les avions et les structures aéroportuaires et présente les normes et les réglementations déterminées par l'OACI limitant les émissions des fumées, d'hydrocarbures imbrûlés, d'oxydes d'azote et de monoxyde de carbone et nous entamons dans ce chapitre la combustion et le lien avec les émissions

- Le troisième chapitre présente la Dynamique de la couche limite atmosphérique, des notions générales sur la théorie de la cinétique chimique, qui permettra d'établir les mécanismes réactionnels de ces polluants dans l'atmosphère afin d'étudier le temps de leurs séjours dans l'atmosphère.

- Le quatrième chapitre présente la Chimie De La Couche Limite atmosphérique : Transport De Masse Et Cinétique Chimique, une méthodologie identique sera utilisée pour chacun de ces problèmes. Il faut dans un premier temps, par une approche théorique, identifier les équations qui les modélisent, puis déterminer les méthodes numériques les mieux adaptées et enfin les valider par une comparaison à l'expérience sur une série de cas tests ,les différentes méthodes utilisées pour la discrétisation des équations régissant le phénomène de la dispersion des polluants (transport + réactivité) la dynamique des polluants présentés dans l'atmosphère, et donc la formulation d'un modèle mathématique

-le cinquième chapitre présente le Modèle Numérique qui donne les résultats de simulation numérique à l'échelle locale obtenue dans ce travail.

- Dans le sixième chapitre nous présentons des modèles statistiques de la dispersion des polluants, Pour cette partie nous avons décrit :

- un modèle de dispersion développé pour une conception de rue connue.
- un modèle gaussien pour la cheminée.

-Et enfin dans le dernier chapitre nous présentons les résultats de la simulation, la comparaison, et leur interprétations dans les deux cas TEST (la cheminée et la rue en U)

Après avoir cité le contenu de notre travail, nous passons au 1^{er} chapitre qui présente des généralités sur la pollution atmosphérique.

CHAPITRE I
Généralités sur la
pollution atmosphérique

I.1- Introduction :

L'évolution du transport aérien mondial n'est pas sans graves conséquences sur l'environnement. La présence d'un aéroport induit l'apparition de nuisances, de moins en moins bien supportées par les riverains :

Après le bruit des avions, la pollution atmosphérique est la nuisance la plus ressentie par les riverains d'aéroport. Dans une enquête menée en 1992 par les Aéroports de Paris, 40 % des questionnés se déclarent gênés par la pollution atmosphérique des avions, nuisances olfactives, dégradation de la qualité de l'air... les avions polluent.

Mais il faut savoir que la part des avions dans la pollution totale, au niveau mondial, due à l'utilisation de combustibles fossiles, est très faible, en théorie car les recherches sur la pollution des avions sont rares, ou peu accessibles.

Au niveau mondial, on parle surtout de l'action des polluants rejetés lors de la combustion du kérosène : participation à l'effet de serre et production d'oxydes d'azote en grande quantité dans la haute atmosphère, ce qui, d'après certaines études récentes, pourrait agir sur la couche d'ozone.

Mais les conséquences **au niveau local** sont de loin les plus nuisibles, frappant directement les riverains de plate-forme aéroportuaire.

I.2- L'atmosphère terrestre :

I.2.1- Structure de l'atmosphère :

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

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

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

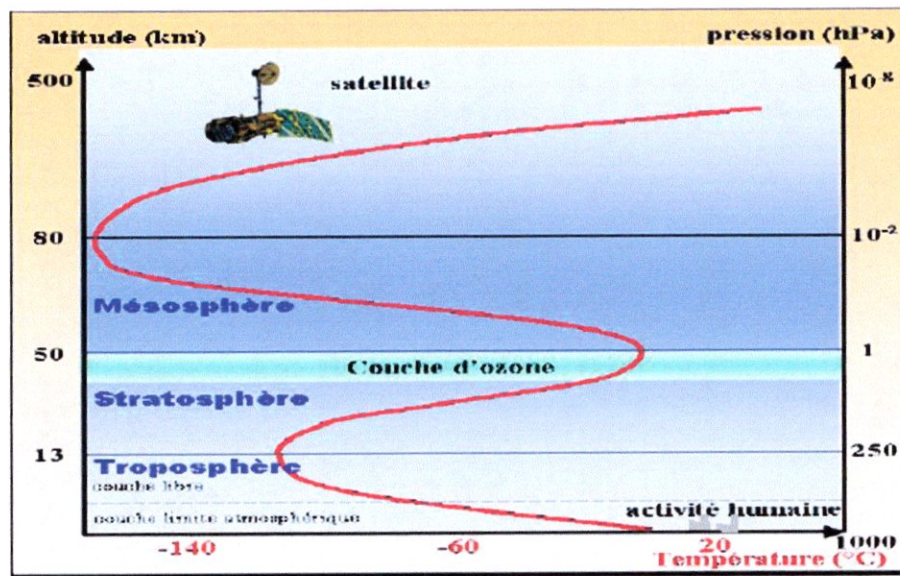


Figure I-1 : Les différentes couches atmosphériques.

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

1.2.2- Nature et dynamique de la basse atmosphère :

En revenant sur la structure de la basse atmosphère, plus particulièrement sur la troposphère, la basse stratosphère et la limite entre ces deux couches : « tropopause » on constate que ce découpage n'est pas quelque chose de figé en fonction de la latitude. La troposphère est caractérisée par son gradient vertical de température négatif et la présence d'eau en quantité importante, sous ses trois formes (vapeur, liquide et solide). On y observe des mouvements verticaux intenses : l'air plus chaud et plus léger s'élève

alors que l'air supérieur, plus froid, descend. Entre l'équateur et les pôles, l'épaisseur de la troposphère varie de 16Km à 8Km (12Km dans les régions tempérées). Quant à la stratosphère située au-dessus de la troposphère, elle possède un gradient de température positif. La présence de l'eau s'y fait beaucoup plus rare d'où (sauf exception) une absence de nuages au-dessus de l'altitude de la tropopause. La stabilité verticale y est donc très grande car l'air froid, avec une densité plus grande, est situé au-dessous de l'air chaud avec une densité moindre. C'est un domaine stratifié d'où son nom, qui ne favorise pas les échanges verticaux.

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

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

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

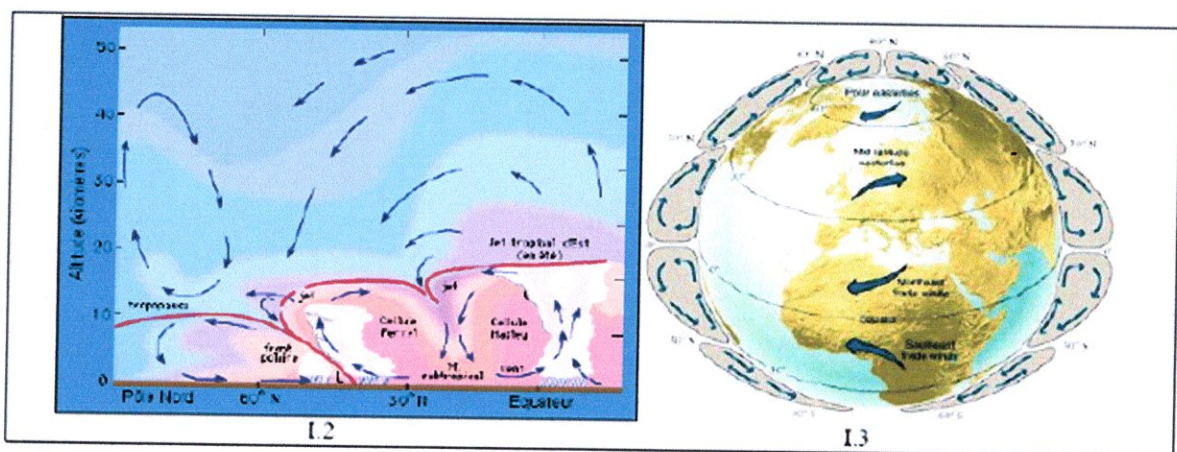


Figure I-2 & I-3 Représentations des mouvements d'air verticaux en fonction de l'altitude pour la basse atmosphère

1.2.3- Composition chimique :

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

1.3- La pollution atmosphérique :

Il y a pollution de l'air lorsque la présence d'une substance étrangère ou une variation importante dans la proportion de ses constituants est susceptible de provoquer un effet nuisible compte tenu des connaissances scientifiques du moment, ou de créer une gêne. Un polluant atmosphérique n'est pas toujours une espèce étrangère à l'atmosphère. En effet, les composés chimiques introduits dans l'air par les diverses activités humaines (transport, combustions diverses, agriculture...) sont souvent de même nature que les espèces émises par des processus naturels. Ils deviennent polluants si la modification de leur concentration montre un impact négatif sur les êtres vivants et/ou sur l'environnement.

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

1.3.1- Les échelles spatiales de pollution :

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

1.3.1.1- la pollution à l'échelle locale : la pollution de proximité :

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

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

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

I.3.1.3- La pollution planétaire :

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

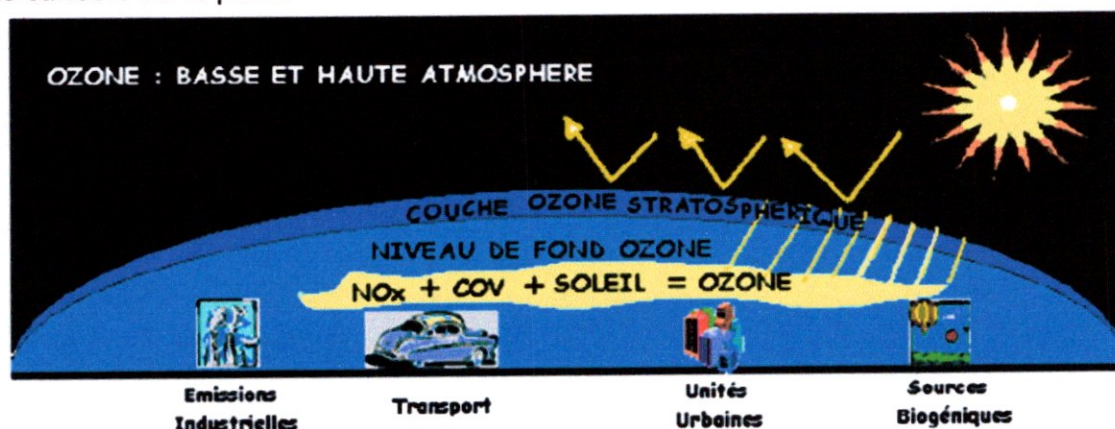


Figure I.4. Ozone stratosphérique et l'ozone à basse altitude

Tout comme l'ozone, l'effet de serre est indispensable à l'équilibre biologique terrestre. Il consiste en un réchauffement de l'atmosphère par des molécules qui ont la propriété de piéger les radiations à grande longueur d'onde émises par la surface du globe. Sans ce phénomène, la température de l'air serait inférieure de $30C^0$ à sa valeur moyenne actuelle qui est de $15C^0$. Or, aujourd'hui, l'effet de serre augmente à cause des émissions anthropiques des certains gaz dits « à effet de serre », comme N_2O , CO_2 , CH_4 , ou CO , ce qui conduit à un déséquilibre climatique.

La classification des échelles est récapitulée dans le tableau 1.

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

Tableau I-1 Echelles d'étude de la pollution

I.3.2- Les principaux polluants :

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

polluants	Origines	Pollutions générées	Effets sur la santé
<i>Dioxyde de soufre</i>	Il provient essentiellement de la combustion de combustibles fossiles contenant du soufre : fioul, charbon. Compte tenu du développement du nucléaire, de l'utilisation de combustibles moins chargés en soufre et des systèmes de dépollution des cheminées d'évacuation des fumées, des économies d'énergie, les concentrations ambiantes ont diminué de plus de 50 % depuis 15 ans.	En présence d'humidité, il forme de l'acide sulfurique qui contribue au phénomène de pluies acides et à la dégradation de la pierre et des matériaux de certaines constructions.	C'est un gaz irritant. Le mélange acido - particulaire peut, selon les concentrations des différents polluants, déclencher des effets bronchospastiques chez l'asthmatique, augmenter les symptômes respiratoires aigus chez l'adulte (toux, gêne respiratoire), altérer la fonction respiratoire chez l'enfant (baisse de la capacité respiratoire, excès de toux ou de crise d'asthme).
<i>Poussières ou particules en suspension (PS)</i>	Elles constituent un complexe de substances organiques ou minérales. Elles peuvent être d'origine naturelle (volcan) ou anthropique (combustion industrielle ou de chauffage, incinération, véhicules). On distingue les particules « fines » provenant des fumées des moteurs « diesel » ou de vapeurs industrielles recondensées et les « grosses » particules provenant des chaussées ou d'effluents industriels (combustion et procédés).	Les particules les plus fines peuvent transporter des composés toxiques dans les voies respiratoires inférieures (sulfates, métaux lourds, hydrocarbures.) Elles potentialisent ainsi les effets des polluants acides, dioxyde de soufre et acide sulfurique notamment.	Les plus grosses sont retenues par les voies aériennes supérieures. Les plus fines, à des concentrations relativement basses, peuvent, surtout chez l'enfant, irriter les voies respiratoires ou altérer la fonction respiratoire. Certaines particules ont des propriétés mutagènes et cancérogènes : c'est le cas de certains hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP). Des recherches sont actuellement développées pour évaluer l'impact des composés émis par les véhicules « diesel ».

<p>Oxydes d'azote (NOx)</p>	<p>Ils proviennent surtout des véhicules (environ 75%) et des installations de combustion (centrales énergétiques....). Le monoxyde d'azote (No) et le dioxyde d'azote (NO2) font l'objet d'une surveillance attentive dans les centres urbains. le pot catalytique permet une diminution des émissions de chaque véhicule. Néanmoins, les concentrations dans l'air ne diminuent guère compte tenu de l'âge et de l'augmentation forte du parc et du trafic automobile</p>	<p>Les NOx interviennent dans le processus de formation d'ozone dans la basse atmosphère. Ils contribuent également au phénomène des pluies acides.</p>	<p>Le NO2 pénètre dans les voies fines ramifications des voies respiratoires. Il peut, dès 200 µg/m³ (microgrammes par m³ d'air), entraîner une altération de la fonction respiratoire et une hyperactivité bronchique chez l'asthmatique et chez les enfants, augmenter la sensibilité des bronches aux</p>
<p>Composés Organiques Volatils (COV)</p>	<p>Ils sont multiples. Il s'agit d'hydrocarbures (émis par évaporation des bacs de stockage pétroliers, remplissage des réservoirs automobiles), de composés organiques (provenant des procédés industriels ou de la combustion incomplète des combustibles), de solvants (émis lors de l'application des peintures, des encres, le nettoyage des surfaces métalliques et des vêtements), de composés organiques émis par l'agriculture et par le milieu naturel.</p>	<p>Ils interviennent dans le processus de formation d'ozone dans la basse atmosphère.</p>	<p>Les effets sont très divers selon les polluants: ils vont de la simple gêne olfactive à une irritation (aldéhydes), à une diminution de la capacité respiratoire jusqu'à des risques d'effets mutagènes et cancérogènes (benzène).</p>
<p>Monoxyde de carbone (CO)</p>	<p>Il provient de la combustion incomplète des combustibles et carburants. Des taux importants de CO peuvent être rencontrés quand le moteur tourne dans un espace clos (garage) ou quand il y a une concentration de véhicules qui roulent au ralenti dans des espaces couverts (tunnel, parking), ainsi qu'en cas de mauvais fonctionnement d'un appareil de chauffage.</p>	<p>Il contribue à la formation de l'ozone.</p>	<p>Il se fixe à la place de l'oxygène sur l'hémoglobine du sang conduisant à un manque d'oxygénation du système nerveux, du cœur, des vaisseaux sanguins. A des taux importants, et à doses répétées, il peut être à l'origine d'intoxication chronique avec céphalées, vertiges, asthénie, vomissements. En cas d'exposition très élevée et prolongée, il peut être mortel ou laisser des séquelles neuropsychiques irréversibles.</p>

<p><i>Métaux lourds plomb (Pb), cadmium (Cd), vanadium (V)</i></p>	<p>Le plomb a été employé dans l'essence du fait de ses propriétés antidétonantes. Les essences sans plomb ou à teneurs réduites en plomb ont permis d'abaisser depuis quelques années les teneurs dans l'air très en deçà des seuils de nuisances. Le cadmium a des origines très diverses essentiellement industrielles. Le vanadium est un indicateur de combustible industriel et domestique.</p>		<p>Ces métaux ont la propriété de s'accumuler dans l'organisme, engendrant ainsi un risque de toxicité à long terme impliquant d'éventuelles propriétés cancérogènes. Le plomb est un toxique neurologique, rénal et du sang. Le cadmium a un effet sur l'appareil rénal, c'est aussi un irritant respiratoire. Le vanadium est essentiellement un toxique respiratoire qui peut conduire, selon les concentrations, à une simple irritation ou à des lésions pulmonaires plus graves.</p>
--	---	--	--

Tableau I-2 les principaux polluants atmosphériques

1.4- Dispersion des polluants en atmosphère :

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

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

1.4.1-Émission des polluants :

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

* **Sources ponctuelles** : Ce sont des sources identifiables qui émettent une quantité de polluants dans l'atmosphère supérieure à une valeur limite définie par les autorités locales ou les agences pour l'environnement. Ce sont typiquement les grandes usines possédant une ou plusieurs cheminées d'évacuation. La quantité de polluants émise peut être globalisée sur une année ou bien plus détaillée en fonction de l'activité de l'usine.

* **Sources surfaciques** : Ce sont des sources plus petites que les précédentes en termes d'émission individuelle mais dont le nombre est plus abondant sur une zone donnée. On y retrouve typiquement le chauffage domestique, les stations services ou bien l'utilisation des pesticides.

* **Sources mobiles** : Ce sont toutes les sources non stationnaires telles que les automobiles, camions, bus, motos, avions ou trains.

* **Sources naturelles** : Elles sont le produit de processus naturels de transformation des sols ou de la végétation. Elles proviennent aussi de la faune (ruminants, termites).

I.4.2-Transport des polluants :

Une fois émis dans l'atmosphère, un polluant dit primaire - est soumis à deux types de contraintes : il est transporté par le vent d'un point à un autre de la ville et réagit chimiquement pour donner naissance à de nouveaux composés appelés polluants secondaires. En un point donné, la concentration mesurée ou calculée sera en permanence fonction de ces phénomènes. Selon l'espèce chimique considérée ou les conditions météorologiques, une des contraintes pourra être prédominante sur l'autre. Ce sera le cas si les vents sont faibles où la chimie sera le facteur dominant, ou au contraire pour des espèces chimiques dont le temps de réactions est tellement rapide que le transport sera faible. Nous sommes donc en présence d'un phénomène ou ces deux composantes, faisant appel à des disciplines scientifiques différentes, doivent être abordées, sans négliger l'une par rapport à l'autre.

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

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

I.5.1- L'approche Eulérienne :

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

I.5.2- L'approche Lagrangienne :

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

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

I.5.3- Le couplage : modèle sous mailles :

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

I.5.4 - Les modèles épisodiques :

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

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

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

- L'échelle régionale : SMOG (Los Angeles)(Lu et Turco, 1997); CALGRID(Milan)[Silibello et al.,1998] ; Méso -NH -c (Toulouse)[Tulet et al.,2000] ; CHIMERE (Paris) [Vautard et al.,2000].

- L'échelle continentale :

- o USA : [Peters et al., 1995

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

- L'échelle globale : MOZART [Hauglustaine et al., 1998]; TM3 [Lelieveld et Dentener, 2000];

Chapitre II

POLLUTIONS INDUITES PAR LES AVIONS
ET LES STRUCTURES
AEROPORTUAIRES

II.1-Généralités :

Depuis plusieurs années, l'industrie des turbines a gaz place au cœur de sa stratégie de recherche les enjeux environnementaux tels que : la réduction des nuisances sonores, des émissions de polluants ou encore la consommation de carburant. Ces enjeux prennent une importance déterminante pour assurer le développement durable, au rythme d'une croissance annuelle continue de la production d'énergie et du transport aérien. Par ailleurs, les nouvelles réglementations internationales plus sévères, les taxes locales au niveau des nations voire des aéroports, le poids croissant des associations de riverains et des opinions publiques ne font qu'accroître ses efforts sans oublier les engagements résultant de la conférence de Kyoto en terme d'émissions de CO₂. Ces enjeux prennent aussi un caractère économique suite aux récents chocs pétroliers, la réduction de consommation du carburant devenant alors une réelle motivation.

L'amélioration des performances passe alors par une connaissance approfondie de toutes les étapes, intimement liées, qui concourent à une combustion plus efficace et plus propre. L'analyse et la modélisation des différents phénomènes comme la caractérisation du carburant, l'injection dans la chambre, l'allumage et la combustion en mélange turbulent ou encore le contrôle des instabilités de combustion constituent les grands axes de la recherche dans ce domaine. Le développement de nouveaux moteurs offre des possibilités de pratiques intéressantes, leur principale exigence étant de consommer moins de carburant tout en réduisant de façon significative les émissions polluantes. Les progrès considérables enregistrés ces dernières années sont particulièrement dus à de nombreux travaux réalisés sur d'une part, l'amélioration du mélange des gaz frais à l'admission et d'autre part, la dilution des gaz brûlés.

Concernant la préparation du mélange air/carburant, de nouvelles technologies telles les moteurs LPP (Lean Premixed Prevaporized) ou RQL ont été développées ; elles sont basées sur la stratification de la charge de carburant et le fonctionnement en régime globalement pauvre et permettent d'aller plus loin dans la réduction des NO_x. En outre, ces moteurs à grand taux de dilution favorisent la réduction de la consommation de carburant, et donc des émissions de CO₂ qui contribuent à l'effet de serre.

La dilution des gaz brûlés concerne essentiellement les turbines à gaz aéronautiques où les contraintes de tailles et de poids réduisent considérablement l'étendue de la zone de dilution. Environ 20 à 40 % du flux total d'air sont destinés à refroidir la zone de dilution des gaz brûlés et à fournir une distribution de températures acceptable pour la turbine.

En outre, la température de ces gaz brûlés est un facteur décisif dans la formation des émissions de NO_x. De fait, les motoristes sont amenés à améliorer la dilution des gaz brûlés en développant de nouvelles techniques de mélange (augmentation des performances des injecteurs, brassage de l'écoulement en aval du front de flamme...).

II.2- La Norme LTO Déterminée Par L'OACI :

La norme LTO (LTO pour *Landing - Take-Off*) détermine la pollution locale créée par le trafic aérien (figure II.1). A l'origine, cette norme avait pour but de dissiper les craintes concernant la qualité de l'air au voisinage des aéroports.

Au régime de **ralenti et au roulage au sol**, il se dégage peu d'oxyde d'azote (NO_x) mais relativement beaucoup d'oxyde de carbone (CO), et d'hydrocarbure (HC).

D'après Air France, le **roulage** représente à lui seul 37 % des émissions d'oxyde de carbone (CO), et 28 % des hydrocarbures (HC). C'est en vol de **croisière** que 75 % des émissions polluantes se produisent notamment le dioxyde de carbone (CO_2) qui n'a pas d'impact sur la qualité de l'air mais qui contribue à l'effet de serre.

Pour les NO_x (oxydes d'azote) le problème est ardu à résoudre, théoriquement, pour diminuer les émissions de CO_2 (dioxyde de carbone), il faut augmenter la température de combustion, et dans ce cas on favorise les NO_x (oxydes d'azote). Le seuil d'alerte pour les NO_x (oxydes d'azote) est fixé à $400 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (microgramme par mètre cube). Pour les nouveaux moteurs, les oxydes d'azote (NO_x) ne représentent que 5g par kilogramme de kérosène consommé.

A 10000 mètres de hauteur, où la température de l'air est à $-50/55^\circ\text{C}$, cette eau se transforme en petits cristaux de glace et forme des cirrus artificiels, qui sont de petits nuages très fins qui disparaissent rapidement, mais qui ont un fort pouvoir de réchauffement. Les cristaux de glace qu'elles contiennent laissent passer les rayons solaires mais bloquent les infrarouges réémis par le sol, d'où l'effet de réchauffement de la planète.

Le dioxyde de soufre (SO_2) est en cours de disparition puisque la teneur en soufre du kérosène est de plus en plus faible à noter que les avions subsoniques favorisent la couche d'ozone puisqu'ils produisent eux-mêmes de l'ozone à travers leurs émissions d'oxydes d'azote

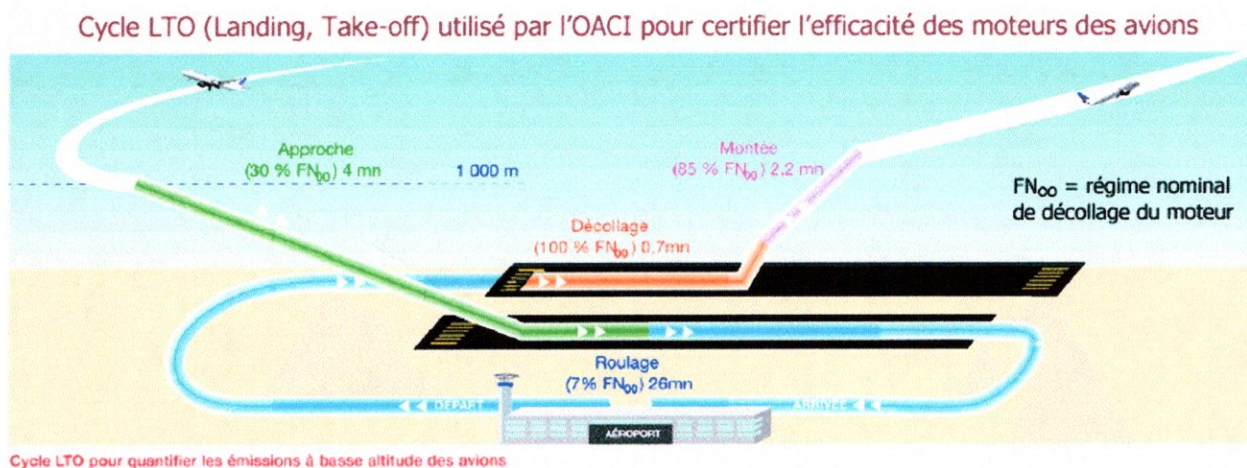
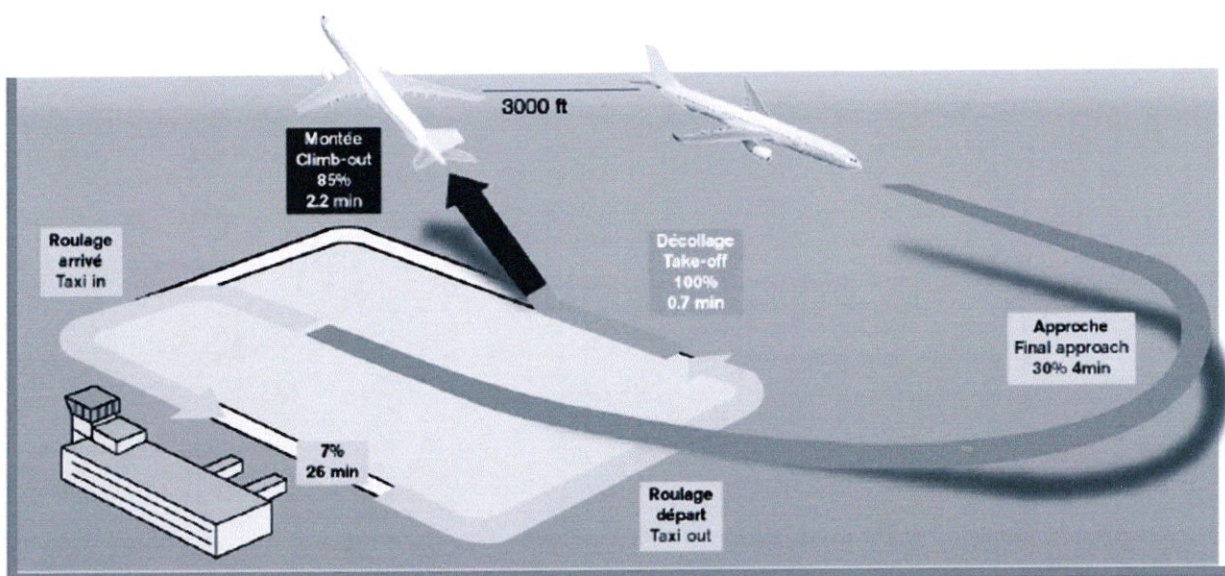


Figure II.1 la norme LTO

II.3-La certification des moteurs (Cycle atterrissage - décollage) :

La certification des moteurs est basée sur le cycle atterrissage - décollage (CAD ou LTO pour *Landing - Take-Off*) défini dans l'annexe 16 - Vol. II de l'OACI. Il décompose les opérations de l'avion sur et autour de l'aéroport en quatre phases de la façon suivante :

- 4 minutes d'approche (descente).
- 26 minutes de circulation au sol, roulage à l'arrivée et au départ (vers et depuis l'aérogare, il est plus long à Roissy avec 35 minutes).
- 42 secondes lors de la phase de décollage.
- 3 minutes de montée.



De façon théorique le cycle atterrissage / décollage inclut les opérations de l'avion du sol jusqu'à une hauteur de 3000 pieds (915m). Cette hauteur correspond à celle de la couche limite directement affectée par les phénomènes se produisant en surface à l'échelle locale tels que la pollution, les cycles thermiques diurnes, les vents locaux.

Les distances au niveau du sol peuvent être estimées à partir de pentes moyennes à l'atterrissage et au décollage et sont représentées sur la figure II.2.

Les distances au niveau du sol peuvent être estimées à partir de pentes moyennes à l'atterrissage et au décollage et sont représentées sur la figure ci-dessous.

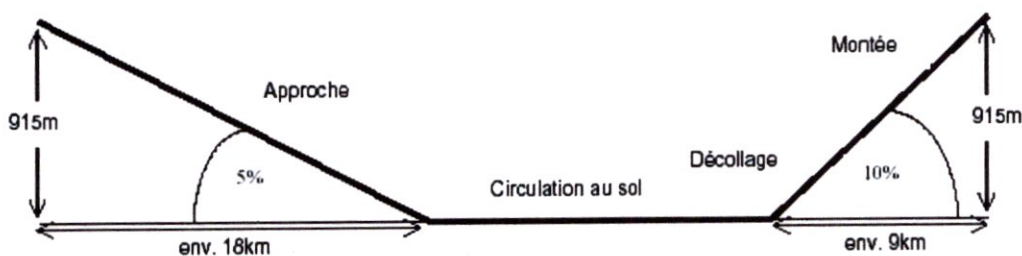


Figure II.2 cycle atterrissage / décollage

II.4-Espèces réglementées :

L'annexe 16 -Vol. II de l'OACI fixe les normes limitant les émissions de fumées, d'hydrocarbures imbrûlés, d'oxydes d'azote et de monoxyde de carbone pour les réacteurs d'une poussée nominale au décollage supérieure à 26,7kN.

- La limite des émissions de fumées est basée sur un indice de fumées et tient compte de la poussée nominale au décollage.
- Les limites des émissions des gaz sont basées sur la masse totale de polluant émis lors d'un cycle LTO divisée par la poussée nominale au décollage.
- La limite pour les oxydes d'azote tient également compte du rapport de pression entre la sortie et l'entrée du compresseur.

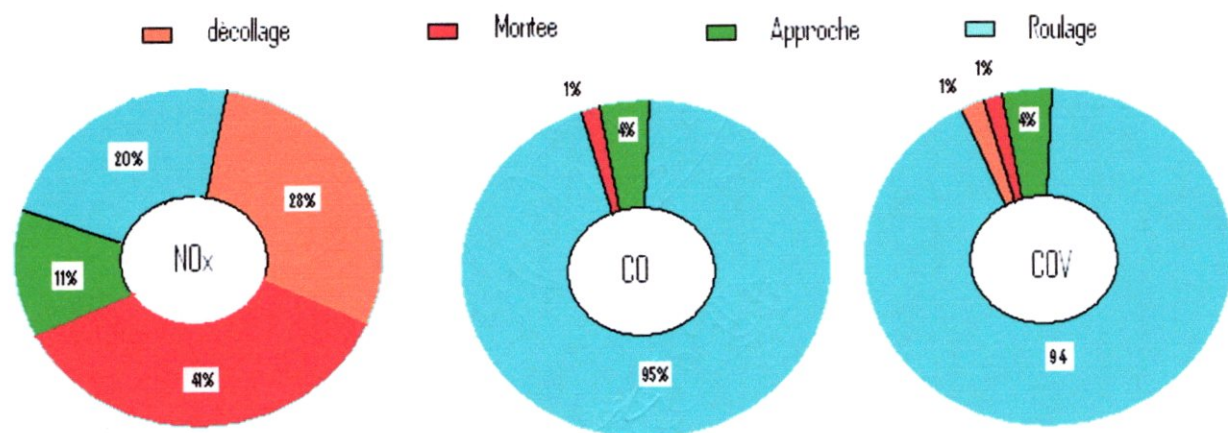


Figure II.3-Emissions associées à l'activité de Roissy Charles-de-Gaulle selon les références phases du cycle LTO

(Source : cadastre d'émission AIRPARIF / DRIRE Ile-de-France année 2000.)

La figure II.3 montre que pour chaque polluant, les émissions varient fortement lors de chacune des séquences du cycle LTO

La norme pour les NO_x a été adoptée pour la première fois en 1981, puis resserrée en 1993 lorsque l'OACI a réduit les niveaux autorisés de 20 % pour les nouveaux moteurs certifiés, avec une date limite de production du 31 décembre 1999.

En 1999, le Conseil a encore resserré la norme d'environ 16 % en moyenne pour les moteurs nouvellement certifiés, à compter du 31 décembre 2003.

Dans le cadre de la certification des moteurs des réglages de poussée et des temps au régime d'utilisation sont associés à chaque phase.

Le tableau II.1 ci dessous reporte les réglages de poussée et les durées de chaque phase du cycle LTO tel que défini dans l'annexe 16 –Vol.II de l'OACI.

OACI

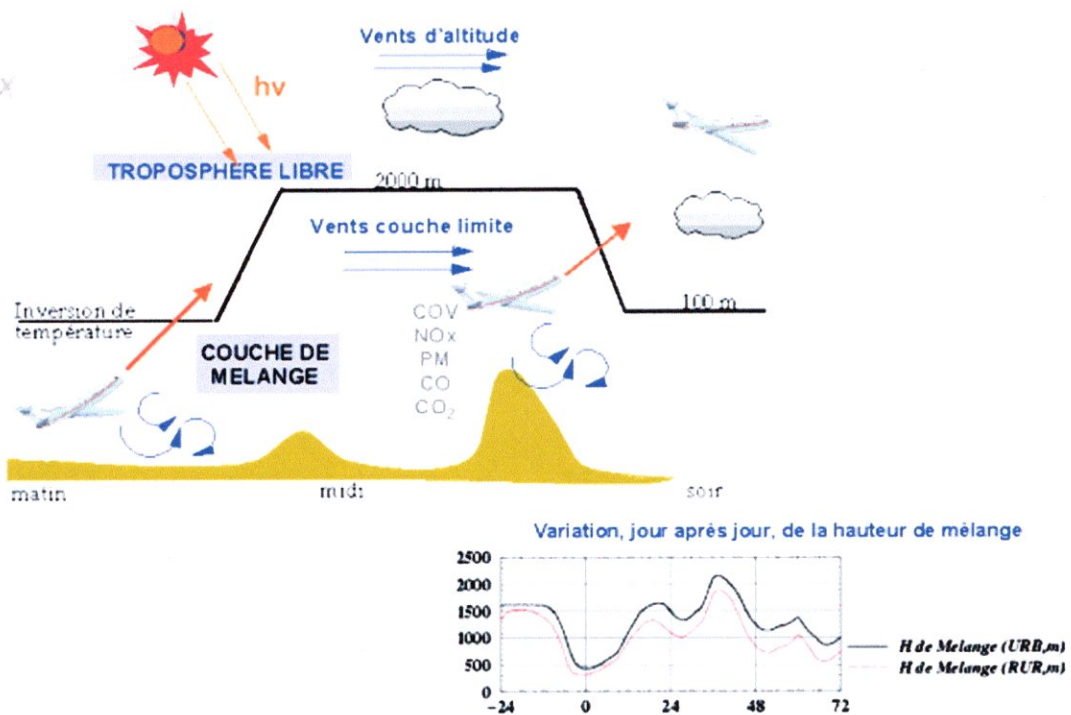
Le tableau ci-dessous reporte les réglages de poussée et les durées de chaque phase du cycle LTO tel que défini dans l'annexe 16 - Vol. II de l'OACI.

Phases	Réglages de poussée (% de la poussée maximale au décollage)	Temps au régime d'utilisation (mn)
Décollage	100	0,7
Montée	85	2,2
Approche	30	4,0
Circulation au sol et ralenti	7	26,0

Tableau II.1- les réglages de poussée et les durées de chaque phase du cycle LTO



LES ÉMISSIONS DES AVIONS



II.5. EMISSIONS DES AERONEFS

Les aéronefs émettent des oxydes d'azote ($NO_x = NO_2 + NO$), du monoxyde de carbone (CO), des hydrocarbures imbrûlés (HC), des suies, du dioxyde de soufre (SO_2), de la vapeur d'eau (H_2O) et du dioxyde de carbone (CO_2).

Espèce émise	Origine	Impact
NO_x	<ul style="list-style-type: none"> formés par oxydation de l'azote de l'air aux fortes valeurs de température et de pression en sortie de chambre de combustion du moteur (décollage et montée) 	<ul style="list-style-type: none"> impact local : participent à la formation d'ozone (et d'autres réactions chimiques), effet sur la santé impact global : participent à la formation ou à la destruction d'ozone dans les couches hautes de l'atmosphère
CO	<ul style="list-style-type: none"> résulte de la combustion incomplète du kérosène, émis lorsque le moteur tourne au ralenti (stationnement et roulage au sol) 	<ul style="list-style-type: none"> impact local : participe à la formation d'ozone (et d'autres réactions chimiques), effet sur la santé impact global (faible) : effet indirect sur le forçage radiatif
HC	<ul style="list-style-type: none"> résultent de la combustion incomplète du kérosène, émis lorsque le moteur tourne au ralenti (stationnement et roulage au sol) 	<ul style="list-style-type: none"> impact local : participent à la formation d'ozone (et d'autres réactions chimiques), effet sur la santé impact global : participent aux réactions chimiques dans la haute atmosphère, effet direct du méthane sur l'effet de serre
Suies	<ul style="list-style-type: none"> résidus solides des gaz d'échappement 	<ul style="list-style-type: none"> impact local : effet sur la santé impact global : participent aux réactions hétérogènes (destruction d'ozone) et au forçage radiatif
SO₂	<ul style="list-style-type: none"> résulte de l'oxydation du soufre contenu dans le kérosène lors de la combustion 	<ul style="list-style-type: none"> impact local : effet sur la santé, formation d'acide sulfurique impact global : acidification de l'atmosphère, formation d'aérosols à partir des sulfates
H₂O	<ul style="list-style-type: none"> produit de la combustion du kérosène 	<ul style="list-style-type: none"> impact global : formation d'aérosols, de cristaux de glace, de cirrus participant aux réactions hétérogènes et au forçage radiatif
CO₂	<ul style="list-style-type: none"> produit de la combustion du kérosène 	<ul style="list-style-type: none"> impact global : gaz à effet de serre

Tableau II.2 Emissions des aéronefs

Remarques importantes :

Il y a lieu de préciser que seuls les moteurs destinés à la propulsion des avions (réacteurs, turbopropulseurs, moteurs à piston) sont pris en compte. Les groupes auxiliaires de puissance (GAP) ou APU (auxillary power unit) ne sont pas pris en compte, bien qu'ils soient très polluants.

La norme LTO est élaborée en considérant une pente de décollage et de montée de 10% pendant 2,9 minutes. Aucun gros porteur actuel ne peut utiliser une pente de montée de 10% (6% est plus juste).

Une grosse partie de la pollution chimique des avions les plus polluants au décollage n'est comptabilisée en fait que jusqu'à environ **600 mètres** d'altitude. Les émissions polluantes s'effectuant au-dessus de 3000 pieds (915 m) (fin de montée, croisière, descente) ne sont pas considérées.

Avec cette pente de montée de 6%, qui est la pente de montée la plus réaliste, il faut une distance supérieure à 15 km après le point de décollage pour atteindre les 3000 pieds (915m) au lieu des 9 km définis par la norme LTO actuelle.

II.6- Contribution Des Activités Aéroportuaires a La pollution :

Les activités aéroportuaires regroupent trois types de sources d'émissions de pollutions.

1. Des grandes sources ponctuelles industrielles internes à l'aéroport (centrales thermiques).
2. Des sources diffuses (tracteurs / pousseurs des avions, transporteurs des bagages, groupes électrogènes, thermiques, activités de ravitaillement et de maintenance des avions).
3. Des sources liées aux mouvements des avions.

Les émissions liées à l'activité des avions sont calculées à partir de mouvements journaliers fournis par Aéroports et déclinées heure par heure. Cette source d'émissions est prépondérante : par exemple, à Roissy Charles-de-Gaulle, Air France (qui assure plus de la moitié du trafic aérien) estime que les mouvements de ses avions, lors du cycle LTO, représentent près de 68% de l'ensemble de ses émissions d'oxyde d'azote (voir figure II.4).

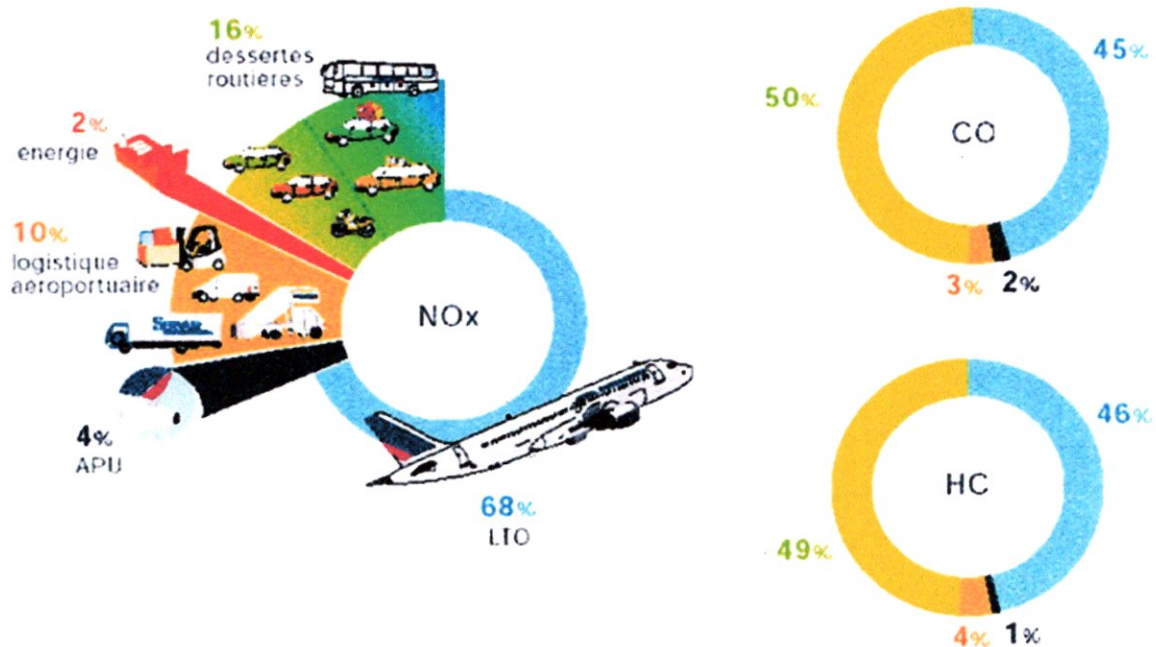


Figure II.4 différents sources d'émission

II.7-La chambre de combustion :

Le principal problème dans la réalisation du design des chambres de combustion est d'obtenir une combustion efficace pour de larges gammes de richesses, une réduction de la consommation du carburant ainsi qu'un minimum d'émissions polluantes à l'échappement. Du fait de normes environnementales de plus en plus strictes, ce dernier point constitue désormais l'un des principaux axes de recherche. Aujourd'hui, le fonctionnement des moteurs en mélange pauvre semble avoir été adopté par la plupart des constructeurs. L'amélioration du mélange constitue alors une étape incontournable dans le développement des différentes technologies. Ces nouveaux designs de chambre permettent une diminution significative des NO_x et des fumées, sans pour autant augmenter les émissions de HC imbrûlés et de CO.

Les technologies actuelles des moteurs fonctionnant en mélange pauvre :

Une première solution consiste à utiliser une chambre de combustion à géométrie variable afin de régler l'air entrant dans la zone primaire. Ainsi, à hautes pressions, de larges quantités d'air sont employées pour minimiser la formation des NO_x et des suies. En revanche, à basses pressions, l'air est en partie supprimé ; la diminution de la vitesse de l'écoulement contribue à une réduction notable du CO et des HC imbrûlés. Ce type de géométrie variable, imposant en outre des contraintes de coût et de poids. De fait, cette technologie largement employée dans le domaine des TAG (Turbines A Gaz) industrielles, ne convient pas vraiment aux applications aéronautiques.

Une autre alternative, désignée sous le nom de « combustion étage », permet l'optimisation de la combustion et la réduction significative des polluants. Deux zones séparées sont considérées dans une même chambre ; des injections de mélange air carburant sont effectuées dans chacune des deux zones. À faible puissance, la combustion se fait dans la zone principale amont à une richesse voisine de 0.8 permettant ainsi une production minimale de HC imbrûlés et de CO. Lorsque le moteur fonctionne à pleine puissance, les injections de mélange air carburant sont effectuées dans la deuxième zone. Les flux issus de la première zone agissent alors comme une source pilote de chaleur. Ces conditions de températures favorisent le bon déroulement et l'optimisation de la combustion dans la deuxième zone.

En opérant ainsi, les richesses observées dans les deux zones sont voisines de 0.6 et les émissions de NO_x et de fumées sont sensiblement réduites.

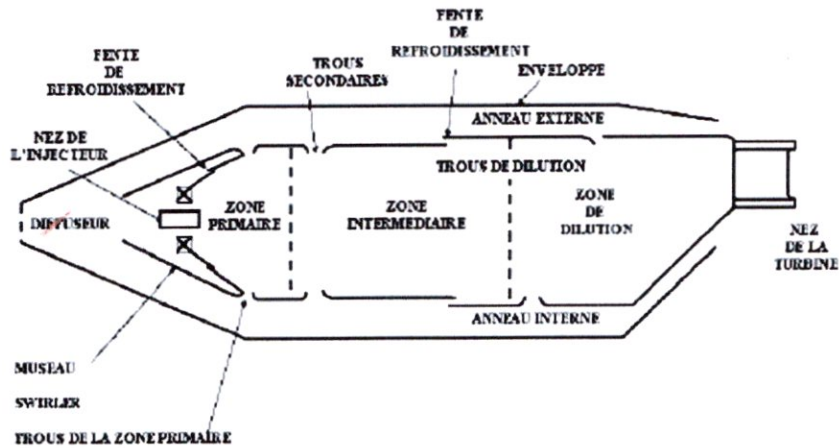


Figure II.5- Schéma général des différents composants d'une chambre de combustion.

Dans le domaine des TAG aéronautiques, le LPP (« Lean Premix Prevaporize ») apparaît la technologie la plus avancée en matière de faibles émissions de NO_x . La figure II.5 montre une représentation schématique du LPP. L'objectif de ce design est d'atteindre une évaporation complète du carburant liquide (fuel) évitant ainsi la présence de gouttes dans le processus de combustion. Ces gouttes constituent des zones locales riches où la température élevée favorise la production des NO_x et des fumées. Le mélange air gaz s'opère alors à une richesse voisine de 0.8. Toutefois, les conditions de températures et de pressions impliquées dans l'évaporation du fuel sont susceptibles de développer les mécanismes d'auto-allumage. Pour faire face à ces problèmes, une combustion étage ou une géométrie variable est utilisée mais cela implique en contrepartie des difficultés et un coût supplémentaires de réalisation.

Une dernière technologie tout aussi convaincante que le LPP est présentée dans ce paragraphe : c'est le moteur RQL qui signifie « Reach-burn/Quick-lench/Lean-burn ». Ce concept présente une zone primaire riche en fuel (« Reach-burn ») où les taux de formation des NO_x sont très bas du fait des basses températures associées à un milieu pauvre en oxygène. En aval de la zone primaire, de l'air additionnel est injecté pour achever le processus de la combustion et réduire les niveaux de température des gaz. La qualité de l'injection d'air doit conditionner un mélange rapide et uniforme avec les flux de gaz issus de la zone primaire. Cette étape de « Quick-lench » a une importance décisive dans le concept des moteurs RQL. Le fonctionnement global en mélange pauvre est désigné par le terme « Lean-burn ».

En définitive, le bon déroulement de la combustion est particulièrement sensible à la qualité du mélange dans les zones riches. Un aspect important réside dans la génération de mouvements de brassage effectués par des organes tels que des swirlers, des injections secondaires de mélange air carburant ou des jets de dilution (air).

Remarque :

Il est important de noter que les turbines a gaz opérant généralement à fortes charges, sont conçues pour fonctionner avec un rendement maximal. Cependant, le contrôle simultané des émissions est rendu difficile ; a fortes charges, les températures élevées de flamme impliquent une augmentation dramatique des NO_x et des fumées. A faibles charges, la combustion incomplète apparaît provoquant la formation de CO et de HC imbrûlés. Un diagramme représentatif des évolutions des principales émissions polluantes en fonction de la charge du moteur est montre en Figure II.6

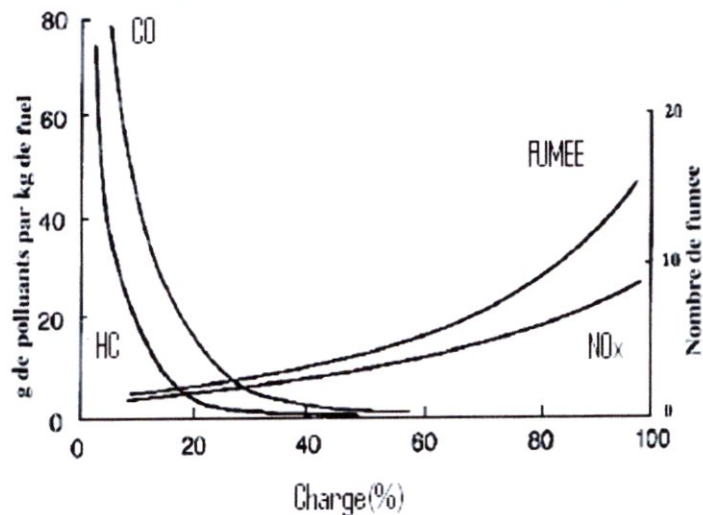


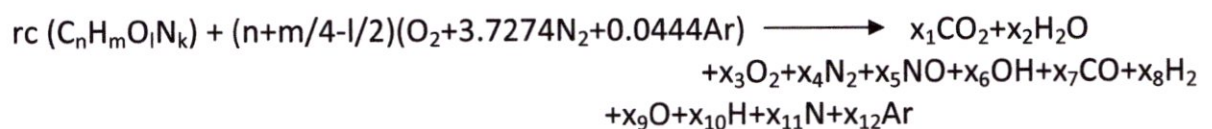
Figure II.6- Evolution des principaux polluants en fonction de la charge du moteur.

II.8-Combustion :

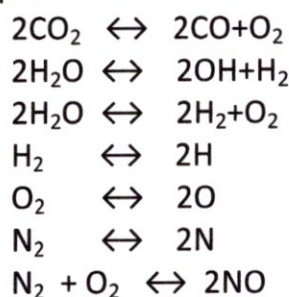
La combustion est une réaction chimique exothermique résultant de la combinaison d'un corps appelé combustible avec l'oxygène appelé comburant. Celle-ci ne peut s'amorcer qu'en présence d'une énergie dite "de démarrage", c'est la source de chaleur.

II.8.1-Calcul de la composition du mélange brûlé en équilibre sous une pression et à une température donnée :

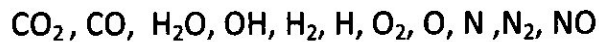
Soit la réaction du mélange combustible C_nH_mO_lN_k+Air : d'une richesse (RC) à une température Te et sous une pression P, on a l'équation suivante



Les équations de combustion sont :



Les produits de combustion après dissociation sont donc :



Le problème est donc, de déterminer la composition molaire des 11 espèces de produits de combustion, est en plus le nombre de mole totale Nt.

$$N_t = \sum_{i=1}^{11} n_i \tag{II.1}$$

On a donc 13 connues, il nous faut 13 équations qui sont :

- 7 équations d'équilibres
- 5 équations de bilan des atomes.
- Une équation de nombre de mole totale

Bilan des atomes en moles :

Carbone : $x_1 + x_7 = n \cdot r_c$ (II.2)

Oxygène : $2x_1 + x_2 + 2x_3 + x_5 + x_6 + x_7 + x_9 = 2(n+m/4-l/2) + r_c \cdot l$ (II.3)

Hydrogène : $x_2 + x_6 + 2x_8 = m \cdot r_h$ (II.4)

Azote : $x_4 + x_5 + x_{11} = (n+m/4-l/2)(3.7274) + r_c \cdot k$ (II.5)

Argon : $x_{12} = 0.0444 \cdot (n+m/4-l/2)$ (II.6)

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7 + x_8 + x_9 + x_{10} + x_{11} = N_t \tag{II.7}$$

$$x_5 = \sqrt{kp(7) \cdot x_4 \cdot x_3} \tag{II.8}$$

$$x_6 \cdot \sqrt{x_8 \cdot p} = \sqrt{kp(2) \cdot x(13) \cdot x(2)} \tag{II.9}$$

$$x_{10} \cdot \sqrt{x_8} = \sqrt{kp(4) \cdot x_8 \cdot x_{13}} \tag{II.10}$$

$$x_{11} \cdot \sqrt{p} = \sqrt{kp(6) \cdot x_{13} \cdot x_4} \tag{II.11}$$

$$x_7 \cdot \sqrt{x_3 \cdot p} = \sqrt{kp(1) \cdot x_{13} \cdot x_1} \tag{II.12}$$

$$x_8 \cdot \sqrt{x_3 \cdot p} = x_2 \cdot \sqrt{kp(3) \cdot x_{13}} \tag{II.13}$$

$$x_9 \cdot \sqrt{p} = \sqrt{kp(5) \cdot x_3 \cdot x_{13}} \tag{II.14}$$

II.8.2-Expression et calcul de la richesse :

Dans les applications industrielles de la combustion (moteurs, turbines, foyers, etc.), les conditions de combustion ne sont pas nécessairement celles correspondant à la stœchiométrie et se caractérisent soit par un excès, soit par un défaut de carburant par rapport à l'oxygène.

La composition du milieu réactionnel s'exprime alors par la **richesse** r_c , définie par la relation :

$$r_c = \frac{(m_c/m_a)_{re}}{(m_c/m_a)_{st}} \tag{II.15}$$

Avec $(m_c/m_a)_{re}$ rapport des masses respectives m_c et m_a de carburant et d'air effectivement utilisées.

La richesse s'écrit également en fonction du rapport stœchiométrique :

$$rc = (q_{mc} / q_{ma})_r$$

Avec q_{ma} débit masse d'air,
 q_{mc} débit masse de carburant.

Le tableau II.2 montre pour un carburant de formule C_nH_{2n} les fractions molaires des 13 principaux produits de combustion considérée en équilibre en 1000 k sous une pression de 1bar. En fait l'état réel des gaz d'échappement et ramenant celui correspondant à l'équilibre car plusieurs réactions chimiques conduisant vers cette état stable se produisant avec une vitesse faible et sont donc figés à partir d'un certain seuil de température. Enfin, la présence toujours constate de faible quantité de produits imbrûlés n'est pas prise en compte dans ces prévisions.

Tableau II.3 – composition des produit de combustion d'un hydrocarbure C_nH_{2n} dans les conditions d'équilibre thermodynamique pour différentes richesses Φ

Produit de combustion	Fraction molaire		
	$\Phi=0.80$	$\Phi=1.00$	$\Phi=1.2$
CO ₂	$1.06 \cdot 10^{-1}$	$1.31 \cdot 10^{-1}$	1.17
O ₂	$3.97 \cdot 10^{-2}$
H ₂ O	$1.06 \cdot 10^{-1}$	$1.31 \cdot 10^{-1}$	1.07
OH	$7.67 \cdot 10^{-8}$
H ₂	$5.74 \cdot 10^{-7}$	4.23
H
O
N ₂	$7.39 \cdot 10^{-1}$	$7.30 \cdot 10^{-1}$	6.94
N
NO	$1.48 \cdot 10^{-5}$	$1.47 \cdot 10^{-9}$
CO	$3.99 \cdot 10^{-7}$	3.20
NO ₂	$3.39 \cdot 10^{-7}$
NH ₃	4.33
CH ₄	8.67
Ar(argon)	$8.85 \cdot 10^{-3}$	$8.74 \cdot 10^{-3}$	8.00
Ne(neon)	$2.84 \cdot 10^{-5}$	$2.80 \cdot 10^{-5}$	2.66

Température 1000 K, pression 1bar.

II.8.3-Combustion à pression constante :

- 1^{er} principe de la thermodynamique (système ouvert) :

$$W_{TAB} + Q_{AB} = \Delta H_A^B \tag{II.16}$$

Avec :

$$W_T = \int_A^B V dp = 0 \text{ Car } p = \text{Cte} \tag{II.17}$$

- combustion adiabatique (pas d'échange calorifique avec l'extérieur) :

$$Q_{AB} = 0 \Rightarrow H_B = H_A \tag{II.18}$$

Soit :

T_A : température avant combustion.

T_B : température en fin de combustion.

$$\Rightarrow H_A(T_A) = H_B(T_B) \tag{II.19}$$

$$H_B = \underbrace{(\Delta H_f)_B^{298.15}}_{\text{Enthalpie de formation à } 298^\circ\text{K}} + \underbrace{\int_{T_0}^{T_B} C_p dT}_{\text{enthalpie sensible}} = (\Delta H_f)_B^{298.15} + [\Delta H_B]_{T_0}^{T_B} \tag{II.20}$$

$$H_A = (\Delta H_f)_A^{298.15} + \int_{T_0}^{T_A} C_p dT = (\Delta H_f)_A^{298.15} + [\Delta H_A]_{T_0}^{T_A} \tag{II.21}$$

H_A et H_B : sont des enthalpies standard.

$$H_B - H_A = (\Delta H_f)_B^{298.15} - (\Delta H_f)_A^{298.15} + \int_{T_0}^{T_B} (C_p dT)_B - \int_{T_0}^{T_A} (C_p dT)_A \tag{II.22}$$

Or :

$$H_A = H_B \Rightarrow (\Delta H_R)_{298.15} + [\Delta H_B]_{T_0}^{T_B} - [\Delta H_A]_{T_0}^{T_A} = 0 \tag{II.23}$$

$$(\Delta H_R)_{298.15} = H_B(T_0) - H_A(T_0) = -Q_p \tag{II.24}$$

$$\Rightarrow \underbrace{[\Delta H_B]_{T_0}^{T_B}}_{\text{enthalpie sensible}(B)} = \underbrace{Q_p}_{\text{Chaleur de réaction à } 298^\circ\text{K}} + \underbrace{[\Delta H_A]_{T_0}^{T_A}}_{\text{enthalpie sensible}(A)} \tag{II.25}$$

$$[\Delta H'_{T_B}]_{T_0}^{T_B} = \sum \frac{n_{Ai}}{n_B} \cdot [\Delta H_{Ai}]_{T_0}^{T_A} + \sum \frac{n_{Ai}}{n_B} \cdot Q_p' \tag{II.26}$$

Avec :

H' : enthalpie molaire

Q_p : chaleur dégagée à T₀ (°K) à pression constante.

Soient :

Enthalpie des produits : H_p

Enthalpie des réactifs : H_R

D'après l'équation $[\Delta H_B]_{T_0}^{T_B} = [\Delta H_A]_{T_0}^{T_A} + Q_p$

$$[\Delta H_P]_{T_0}^{T_2} = \underbrace{[\Delta H_A]_{T_0}^{T_0}}_{=0} + (Qp)_{298.25} = (Qp)_{298.15}$$

La température initiale est $T_0 = 298.15^\circ\text{K}$

$$Qp = (\Delta H_P)_{T_2} - (\Delta H_P)_{T_0} = \int_{T_0}^{T_2} \sum n_i C_{p_{pc}} dT = \int_0^{T_2} \sum n_i C_{p_{pc}} dT - \int_0^{T_0} \sum n_i C_{p_{pc}} dT \tag{II.27}$$

Avec :

$$\int_0^{T_0} \sum n_i C_{p_{pc}} dT \quad : \quad \text{Enthalpie sensible ou thermique d'échauffement.}$$

$$Qp = \int_{T_0}^{T_2} \sum n_i C_{p_{pc}} dT \quad : \quad \text{Énergie nécessaire pour chauffer les produits de combustion de } T_0 \text{ à } T_2.$$

$$\Rightarrow \underbrace{(\Delta H_P)_{T_2}}_{\substack{\text{enthalpie sensible des} \\ \text{produits de combustion} \\ \text{à } T_2 = 298.15^\circ\text{K}}} = \underbrace{(\Delta H_P)_{T_0}}_{\substack{\text{enthalpie sensible des} \\ \text{produits de combustion} \\ \text{à } T_0 = 298.15^\circ\text{K}}} + \underbrace{(Qp)_{298.15}}_{\substack{\text{enthalpie de réaction} \\ \text{à } 298.15^\circ\text{K}}} \tag{II.28}$$

$(\Delta H_P)_{T_0}$: Étant calculée, on en déduit par interpolation la température T_2 de combustion

II.8.4-Méthode de calcul :

Le calcul de la composition du mélange brûlé conduit à la résolution d'un système d'équations non linéaires très complexes. Pour cette raison, des méthodes de résolution ont été proposées :

- La méthode de NEWTON pour la résolution de système non linéaire.

L'équilibre thermodynamique :

$$H_R(T_e) = H_P(T_p)$$

Cette équation peut s'exprimer par :

$$\Delta H(T_p) = H_P(T_p) - H_R = 0$$

$$f(T) = H_P(T) - H_R = 0 \quad \text{pour } T = T_p$$

Pour $T = T_1$ et $T = T_2$ l'équation précédente s'écrit :

$$f(T_1) = H_P(T_1) - H_R$$

$$f(T_2) = H_P(T_2) - H_R$$

Si $f(T_1).f(T_2) < 0 \Rightarrow T_p \in [T_1, T_2]$.

$$\text{D'où : } T_o = \frac{T_1 + T_2}{2}$$

Si $f(T_o).f(T_2) < 0 \Rightarrow T_p \in [T_o, T_2]$.

$$\Rightarrow T_p = \frac{T_o + T_2}{2}$$

Si $f(T_1) \cdot f(T_o) < 0 \Rightarrow T_p \in [T_1, T_o]$.

$$\Rightarrow T_p = \frac{T_1 + T_o}{2}$$

On arrête le calcul jusqu'à avoir :

$$|T_p - T_o| \leq \varepsilon \text{ Avec } \varepsilon \ll 1$$

D'où : $T_c = T_p$

L'Organigramme Annexe II ;

II.8.5- Le Programme de calcul :

The screenshot shows a software window titled "Form1" with a yellow background. At the top right, there is a text label "donne la valeur de la richesse rc :" followed by a dropdown menu and a text input field containing "0.5". Below this, there are several input fields with labels: "l'enthalpie standard des produits HP :" (value: -3063.95882692842), "le nombre de mole totale NT :" (value: 202.574895365143), "la temperature d'entre d'air Ta :" (value: 300), and "la temperature d'entre de carburant Te :" (value: 300). In the center, there is a list of chemical species with corresponding input fields: CO2 (14.3999996185303), H2O (12.4499998092651), N2 (155.099996414185), O2 (20.6249995231628), CO (0), and H2 (0). To the right of this list is a dropdown menu showing "C14 4H24 9". At the bottom left, there are two more input fields: "la temperature de fin de combustion :" (value: 1541.14949051291) and "carburant restant" (value: 0). A "calcul" button is located at the bottom right of the form.

Ce programme est écrit en langage C++, il calcule les fractions molaires des produits de combustion et la température de fin de combustion pour différents combustibles pour une richesse donnée.

Chapitre III
Dynamique de la couche limite
atmosphérique

III.1- Introduction :

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

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

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

III.2.1- Turbulence dans la CLA :

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

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

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

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

III.2.1.1- Couche Limite dynamique :

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

Au dessus de cette couche limite dynamique, le champ horizontal de vent est à peu près constant et déterminé par les gradients horizontaux de pression (vent géostrophique).

Le bon indicateur de turbulence est alors le nombre de Reynolds qui apparaît comme le rapport des forces d'inertie (convection et pression), déstabilisatrices, sur les forces d'origine visqueuse (diffusion), stabilisatrices, dans l'équation d'évolution

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u = \nu \Delta u + \dots \text{ (u vitesse du vent, } \nu \text{ viscosité cinématique) :}$$

$$R_e = \frac{(u \cdot \nabla)u}{\nu \Delta u} = \frac{UL}{\nu} \tag{III.1}$$

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

III.2.1.2- Couche Limite thermique :

L'expérience classique illustrant ce phénomène est celle de Bénard, consistant à chauffer progressivement deux plaques horizontales séparées d'une longueur L aux températures T (plaque inférieure) et T+ΔT (plaque supérieure).

Si ΔT > 0 , le profil de densité de l'air entre les deux plaques est stable (l'air chaud, plus léger, est au dessus). Ce profil est instable dans le cas contraire et on a génération de mouvements convectifs du haut vers le bas.

Un bon indicateur de turbulence est alors le nombre de Rayleigh :

$$R_a = \frac{g L^3 \Delta T}{T \nu \nu_\theta} \tag{III.2}$$

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

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

Tableau (III-1) Turbulence dans l'atmosphère

III.3- Les principales modélisations de la turbulence :

Il existe trois principales méthodes de modélisation d'un écoulement turbulent : la simulation numérique directe, dans laquelle on cherche à représenter la totalité des phénomènes physiques, la simulation des grandes échelles, dans laquelle on représente

seulement les plus gros tourbillons en fonction du temps, et la simulation moyennée dans laquelle on représente seulement l'écoulement moyen.

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

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

On montre que le nombre de mailles nécessaires pour résoudre toutes les échelles est proportionnel à $Re = 10^9$. Ainsi pour un nombre de Reynolds de 10000, il faut envisager un nombre de mailles de 109 mailles... C'est ce que l'on appelle la simulation numérique directe (DNS ou Direct Numerical Simulation) : aucune modélisation de la turbulence n'est effectuée, on résout toutes les quantités physiques.

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

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

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

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

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

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

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

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

Cette approche consiste à ne simuler que l'écoulement moyen en temps. Toutes les fluctuations sont filtrées et on modélise ces fluctuations par l'action d'une viscosité turbulente.

Les deux types de moyenne possible sont les suivantes :

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

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

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

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

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

III.4- Outils pour la modélisation :

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

Moyenne d'ensemble :

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

$$\overline{f(\vec{x}, t)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^{(i)}(\vec{x}, t) \tag{III.3}$$

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

$$\begin{aligned} \overline{f + g} &= \overline{f} + \overline{g} \\ \overline{\alpha f} &= \alpha \overline{f} \quad \text{avec } \alpha = \text{const} \\ \overline{\overline{f}} &= \overline{f} \\ \overline{fg} &= \overline{f} \overline{g} \\ \overline{\frac{\partial f}{\partial x_i}} &= \frac{\partial \overline{f}}{\partial x_i} \\ \overline{\frac{\partial f}{\partial t}} &= \frac{\partial \overline{f}}{\partial t} \end{aligned} \tag{III.4}$$

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

$$f = \overline{f} + f' \tag{III.5}$$

\overline{f} : Moyenne d'ensemble
 f' : Partie fluctuante

III.5- Equations moyennées :

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

Les nouvelles équations obtenues sont dites équations moyennées. Dans la littérature anglo-saxonne on utilise l'acronyme RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes)

III.5.1- Le problème de la fermeture :

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

III.5.2- Classification des modèles de turbulence :

On distingue généralement deux grandes classes de modèles :

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

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

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

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

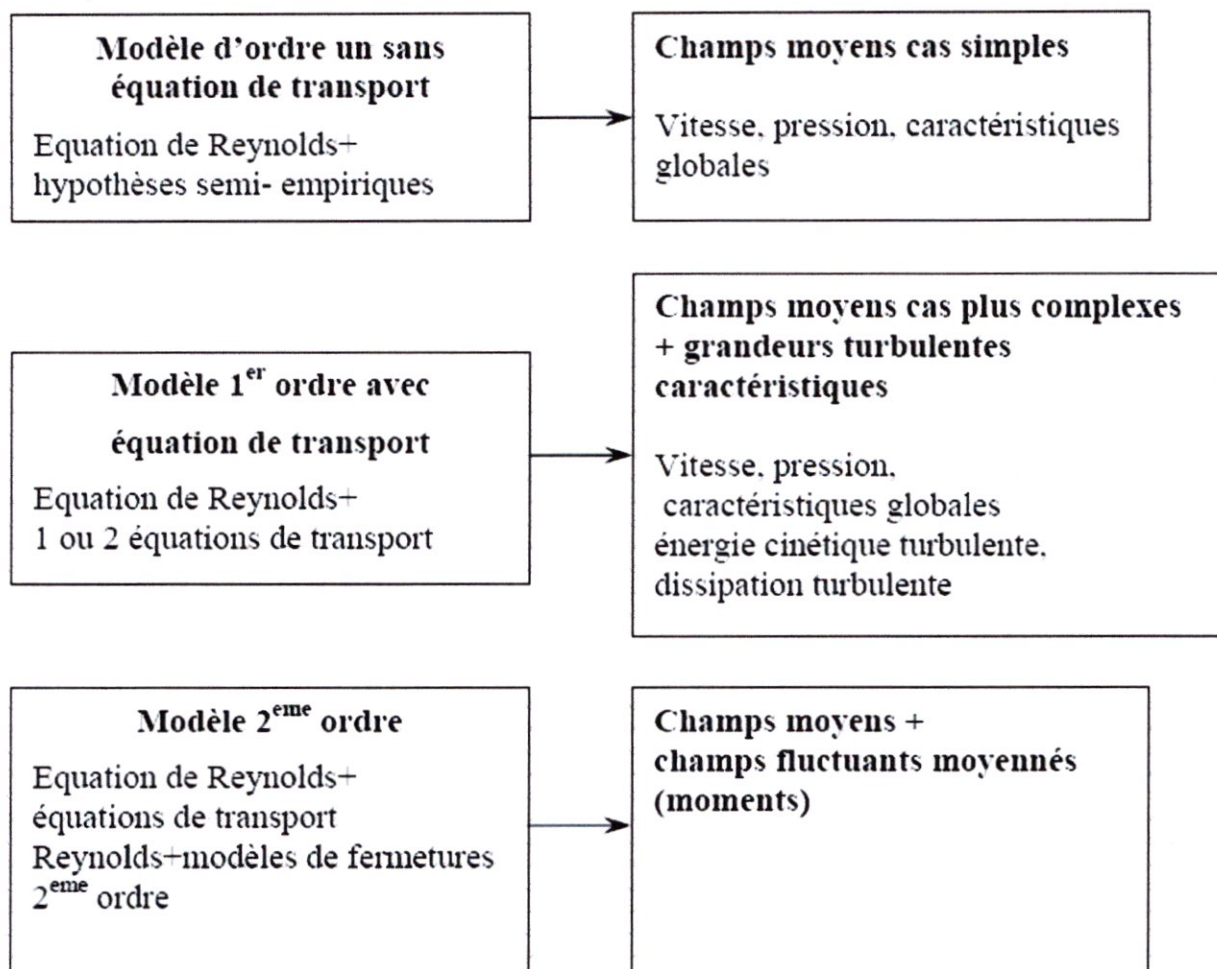


Tableau III-2 les modèles couramment utilisés pour la modélisation de la turbulence

CHAPITRE IV

Chimie De La Couche Limite Atmosphérique

Transport De Masse Et Cinétique Chimique

IV.1- Introduction:

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

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

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

IV.2.1- Les équations de transport :

La modélisation de la dispersion dans l'atmosphère d'une espèce chimique i ($1 < i < n$) se fait grâce à une équation de conservation de la concentration C_i :

$$\underbrace{\frac{\partial c_i}{\partial t}}_{\text{variation locale}} + \underbrace{\mathbf{u} \cdot \nabla c_i}_{\text{advection}} = \underbrace{\nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_i)}_{\text{diffusion moléculaire}} + \underbrace{E_i}_{\text{émission}} + \underbrace{R_i}_{\text{production par réaction chimique}} - \underbrace{D_i}_{\text{dépôt}} \tag{IV.1}$$

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

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

- Le terme d'émission E_i est donné par le modèle d'émission.
- Le terme de production/destruction par réactions chimiques et photochimiques R_i couple les n équations de transport entre elles. Des considérations de cinétique chimique développées dans les sections suivantes sont nécessaires afin de l'exprimer plus en détail.

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

⇒ **Formulation statistique :**

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

$$\frac{\partial \overline{C}_i}{\partial t} + \overline{u} \cdot \nabla \overline{C}_i = \nabla \cdot (D \nabla \overline{C}_i) + \overline{E}_i + \overline{R}_i + \overline{R}_i' - D_i \quad (\text{IV.2})$$

⇒ **Fermeture des équations :**

Le problème de fermeture apparaît à nouveau, dû au caractère non linéaire des termes d'advection et de production R_i .

- R_i' est l'effet des fluctuations des concentrations sur le terme de production. C'est un terme composé de corrélations d'ordre deux, en général négligées dans les simulations. On peut noter tout de même que cette hypothèse n'est valable que lorsque le temps caractéristique d'une réaction chimique est proche de celui de la turbulence mais peut être source d'erreurs dans le cas contraire (pour les espèces à courte durée de vie et faible concentration telle que le radical OH). En faisant l'hypothèse que le flux de diffusion turbulente est dominé par le gradient de concentration moyenne, nous pouvons modéliser le terme de corrélation double de façon classique par :

$$-\overline{u C_i} = K \nabla \overline{C}_i \quad (\text{IV.3})$$

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

Cette modélisation est valide tant que les processus réactionnels sont lents par rapport au transport turbulent et que les longueurs et temps caractéristiques du champ moyen de concentration sont grands par rapports aux échelles turbulentes correspondantes. Dans une première approximation nous pouvons écrire l'équation de diffusion pour une espèce C_i par :

$$\frac{\partial \overline{C}_i}{\partial t} + (\overline{u} \cdot \nabla) \overline{C}_i = \nabla \cdot ((DI + K) \nabla \overline{C}_i) - \nabla \cdot \overline{u C_i} + \overline{E}_i + \overline{R}_i - D_i \quad (\text{IV.4})$$

⇒ **Terme de dépôt :**

Le flux vertical d'un polluant à la surface est le produit de la concentration par un paramètre empirique appelé vitesse de dépôt. Elle dépend de l'espèce considérée, des

conditions météorologiques et de la nature de la surface. On distingue trois stades: un stade aérodynamique contrôlé par la diffusion turbulente qui amène le polluant de la couche de surface turbulente directement à proximité de la surface ; un second stade contrôlé par la diffusion laminaire du polluant dans la sous-couche limite laminaire de la surface ; et un troisième stade qui est la composante de transfert ou d'absorption par la surface.

Nous ne modélisons pas ici ce terme de d'équation de transport.

Les unités :

Quatre unités sont fréquemment rencontrées pour exprimer la concentration d'une espèce chimique : les $\mu\text{g.m}^{-3}$, les mole.l^{-1} (moles par litre), les molécule.cm^{-3} (molécules par centimètre cube) et les ppm (parties par million). Cette dernière exprime le nombre de molécules d'une espèce chimique trouvées dans un million de molécules d'air. Ce n'est pas réellement une concentration mais un nombre sans dimension. On a donc :

$$c_i(\text{ppm}) = \frac{C_i}{C} 10^6 \quad (\text{IV.5})$$

Dans laquelle C_i et C sont les concentrations moléculaires respectivement de l'espèce i et de l'air à la température T et la pression p exprimées en molécule.m^{-3} ou en mole.l^{-1} . Le passage des mole.l^{-1} au molécule.cm^{-3} se fait par l'intermédiaire du nombre d'Avogadro N ($N = 6,02 \cdot 10^{23}$).

$$1 \text{ mole.l}^{-1} = 6.02 \cdot 10^{23} \text{ molécule.cm}^{-3} \quad (\text{IV-6})$$

Le passage de la $\mu\text{g.m}^{-3}$ à la molécule.cm^{-3} se fait par la relation :

$$c_i(\text{molécule.cm}^{-3}) = \frac{10^{-12} c_i(\mu\text{g.m}^{-3})}{M_i} \quad (\text{IV.7})$$

Où M_i est la masse molaire de l'espèce i .

On a aussi $C (\text{mole.l}^{-1}) = p/RT$, avec $R = 8,314 \cdot 10^3 \text{ Pa.l.K}^{-1}.\text{mole}^{-1}$. En remplaçant dans l'équation (IV-5), on obtient la relation de passage de la $\mu\text{g.m}^{-3}$ aux ppm.

$$c_i(\text{ppm}) = \frac{8.314T}{pm_i} c_i(\mu\text{g.m}^{-3}) \quad (\text{IV.8})$$

On rencontre également les notations ppm (parties par centaines de millions), ppb (parties par milliards) et ppt (parties par milliers de milliards). Elles sont utilisées pour des espèces chimiques présentes en très faibles quantités dans l'atmosphère, par exemple le radical OH. Enfin, pour les composés organiques, en multipliant la concentration en ppm par le nombre d'atome de carbone de l'espèce chimique, on obtient l'unité ppmC.

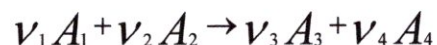
IV.3- Cinétique chimique :

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

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

Réaction chimique élémentaire.

Considérons la réaction chimique élémentaire irréversible suivante :



Où A_1 et A_2 sont les réactifs, A_3 et A_4 les produits de la réaction et ν_1 , ν_2 , ν_3 et ν_4 les coefficients stœchiométriques $\nu_1 + \nu_2 \leq 3$ par définition d'une réaction chimique élémentaire.

Dans l'équation de concentration IV.2, le terme de production/destruction R_i (i étant l'une des espèces A_1 , A_2 , A_3 , A_4) s'exprime en fonction des concentrations des réactifs et des coefficients stœchiométriques par la relation suivante :

$$R_i = \frac{dC_i}{dt} = s \nu_i k C_{A_1}^{\nu_1} C_{A_2}^{\nu_2} \quad (\text{IV.9})$$

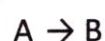
Où

- * $s = 1$ s'il y a production (produits A_3 et A_4) ;
- * $s = -1$ s'il y a destruction (réactifs A_1 et A_2) ;
- * k est la constante de vitesse de la réaction, dépendante de la température.

Pour qu'une réaction chimique se produise, il faut d'abord que les molécules de réactifs entrent en contact. Pour qu'un choc soit efficace, il faut qu'il ait lieu entre des molécules ayant atteint un certain niveau d'énergie, provenant de l'énergie cinétique de translation relative des particules et de leur énergie interne. Si tous les chocs étaient efficaces, la réaction serait instantanée. **Arrhenius** a exprimé ce facteur restrictif en donnant à la constante de vitesse k .

IV.3.1- Vitesse de réaction :

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



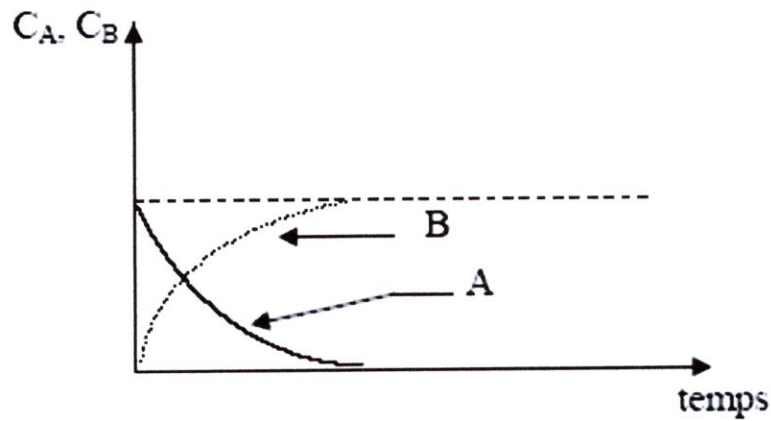


Figure IV-1 : l'évolution temporelle des espèces A (réactif) et B (produit).

$$v = \frac{1}{V} \frac{dn}{dt} = \frac{dc}{dt} \tag{IV.10}$$

v : vitesse de réaction s'exprime par conséquent en mol.L⁻¹ S⁻¹ .

V : volume de réacteur.

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

dc : représente la variation du concentration pendant le temps dt

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

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



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

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

$$v = \frac{-1}{a} \frac{dC_A}{dt} = \frac{-1}{b} \frac{dC_B}{dt} = \frac{+1}{c} \frac{dC_C}{dt} = \frac{+1}{d} \frac{dC_D}{dt} \tag{IV.11}$$

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

$$d\xi = \frac{-dn_A}{a} = \frac{-dn_B}{b} = \frac{+dn_C}{c} = \frac{+dn_D}{d} \quad (\text{IV.12})$$

Dans le cas particulier où le mélange réactionnel est gazeux ou constitué d'une seule phase liquide parfaitement agité (réaction homogène) et où le réacteur est fermé,

on peut définir la vitesse de réaction par la relation:

$$v = \frac{1}{V} \frac{d\xi}{dt} \quad (\text{IV.13})$$

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

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

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

$$v = k[A]^\alpha[B]^\beta \quad (\text{IV.14})$$

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

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

α et β sont les ordres partiels de réaction par rapport respectivement aux réactifs A et B. La somme ($\alpha + \beta$) est l'ordre global de la réaction considérée.

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

Le seul moyen de surmonter cette difficulté est de choisir des conditions expérimentales

permettant de réduire le nombre des inconnues et d'interpréter rigoureusement les résultats expérimentaux, afin d'en extraire des relations généralisables. L'expérience devient absolument indispensable pour développer l'étude cinétique.

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

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



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

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

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

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

a- Relation vitesse – concentration :

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

$$v_A = K [A]^m \quad \text{et} \quad \log v_A = m \log [A] + \log K$$

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

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

b - Relation concentration – temps :

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

Les résultats « concentration en fonction du temps » sont représentés sur un graphe et permettent de construire la courbe de la variation de concentration $[A]$ en fonction du temps. Il s'agit alors d'interpréter rigoureusement cette courbe, ce qui est relativement facile dans les cas où m prend une valeur entière.

$$m = 0$$

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

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = K \Rightarrow -d[A] = K dt \tag{IV.15}$$

L'intégration de cette équation différentielle depuis [A₀] jusque [A] avec t = 0 et t = t respectivement, donne :

$$K t = [A_0] - [A] \text{ ou } [A] = [A_0] - K t \tag{IV.16}$$

m = 1

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

Si la courbe est logarithmique, t' - t = t'' - t'. Pour plus de sûreté, on représente la transformée linéaire de la relation [A] = f (t) qui s'établit facilement.

$$-\frac{d[A]}{dt} = K[A] \Rightarrow -\frac{d[A]}{[A]} = K dt \tag{IV.17}$$

En intégrant entre t = 0 et t = t d'une part, [A₀] et [A] d'autre part, on obtient :

$$\ln \frac{[A_0]}{[A]} = kt \quad \text{Ou} \quad [A] = [A_0] \exp(-kt) \tag{IV.18}$$

Soit : ln [A] = ln [A₀] - K t La linéarité entre ln [A] et t confirme définitivement la valeur de l'ordre global m = 1.

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

Tableau IV-1 : lois de vitesse simple

c- Détermination de la constante de vitesse

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

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

m	ordonnée	abscisse	Transformée linéaire	K
0	[A]	t	$[A] = [A_0] - K t$	$\text{Mol.l}^{-1} . \text{t}^{-1}$
1	Ln [A]	t	$\text{Ln[A]} = \text{Ln[A}_0] - Kt$	t^{-1}

Tableau –VI.2 : Détermination de la pente

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

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

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

$$v_A = K[A]^\alpha \tag{IV-19}$$

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

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

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

III.3.4- Paramètres influençant la vitesse de réaction :

La vitesse d’une réaction dépend généralement de :

- Température : une élévation de température accélère les réactions.
- Concentration : une réaction est généralement d’autant plus rapide que la concentration des réactifs est élevée.
- Contact entre les réactifs : les réactifs doivent pouvoir se rencontrer, si la réaction fait intervenir plusieurs phases, la vitesse de réaction dépendra de leurs possibilités de contact.

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

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

IV.3.5- Energie d'activation :

La cinétique chimique montre que trois conditions doivent être remplies au niveau moléculaire pour qu'une réaction puisse se produire : les molécules doivent entrer en collision ; elles doivent être positionnées de telle sorte que les groupes réactifs puissent former un état de transition, ou complexe activé, de structure intermédiaire entre les réactifs et les produits ; enfin, la collision doit être suffisamment énergétique pour que cet état de transition puisse être atteint et conduire aux produits.

Lorsqu'une liaison chimique entre deux molécules se rompt — ce qui intervient nécessairement dans toute réaction chimique —, puis qu'une autre se crée, cela correspond à un choc efficace entre les entités. Au cours du choc, l'énergie cinétique des particules se transforme en énergie chimique, ce qui permet la formation d'une espèce réactive, le complexe activé. On peut représenter le diagramme énergétique d'une réaction simple — c'est-à-dire ne comportant qu'une seule étape — comme suit :

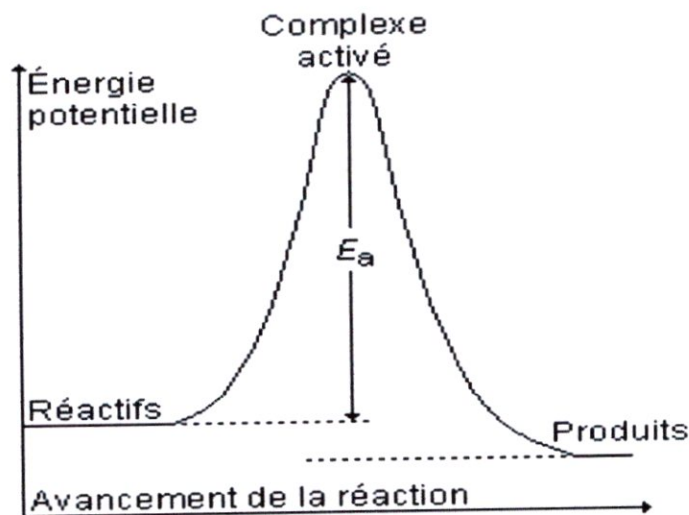


Figure IV-2 : Energie d'activation d'une réaction à une seule étape.

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

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

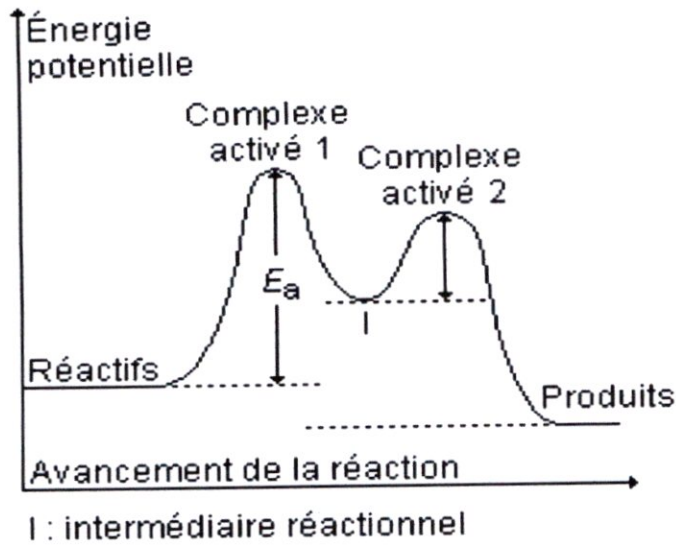


Figure IV-3 : Energie d'activation d'une réaction à deux étapes.

Loi D'Arrhenius :

Pour la plupart des réactions, on peut appliquer la loi d'Arrhenius, relation entre la température absolue, la constante de vitesse et l'énergie d'activation : $\ln(k) / dT = E_a / RT^2$, R étant la constante des gaz parfaits ($R = 8,31 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$). On utilise généralement cette loi sous la forme intégrée :

$$k = F e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Où F est une constante appelée facteur de fréquence, E_a l'énergie d'activation. F et E_a sont les résultats d'expériences menées en laboratoire.

On remarque ici que la constante de vitesse k ne dépend que de la température et qu'une augmentation de température provoque une élévation de la constante de vitesse, et donc une accélération du processus réactionnel.

IV.3.6- Mécanisme réactionnel :

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

- D'une façon générale le mécanisme réactionnel comprend trois étapes essentielles : l'étape d'initiation (amorçage) : correspond à la formation dans le milieu réactionnel d'une entité active.

- L'étape de propagation : (ramification) correspond à la formation des centres actifs à partir des chocs efficaces.
- L'étape de rupture : correspond à la désactivation d'un des centres actifs qui intervient dans la réaction déterminante du mécanisme réactionnel.

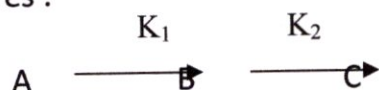
IV.3.7- Théorie de collision :

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

IV.3.8- Loi de vitesse d'une réaction complexe :

IV.3.8 .1- Cas de deux étapes mono moléculaires :

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



Les équations de vitesse s'écrivent :

$$v_1 = k_1[A]^\alpha = -\frac{d[A]}{dt} \quad (IV-20)$$

$$v_2 = k_2[B]^\beta - k_1[A]^\alpha = -\frac{d[B]}{dt} \quad (IV-21)$$

Avec:

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

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

La résolution du système d'équation différentielle du premier ordre

$$-\frac{d[A]}{dt} = k_1[A]^\alpha \quad (IV-22)$$

$$-\frac{d[B]}{dt} = k_2[B]^\beta - k_1[A]^\alpha \quad (IV-23)$$

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

$$v_2 = \frac{d[C]}{dt} \quad (IV-24)$$

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

- $K_1 > K_2$: la concentration de B augmente au début de la réaction, lorsque sa formation est plus rapide que sa consommation, elle diminue ensuite lorsque le rapport de ces deux vitesses s'inverse, en raison de épuisement progressif de A.

- $K_1 < K_2$: la concentration de B reste faible et peut être considérée comme approximativement constante. Tout se passe comme si A se transformait directement en C. Le réactif A est consommé uniquement dans la première étape qui est mono moléculaire, sa concentration diminue donc exponentiellement avec le temps, à partir de sa concentration initiale [A].

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

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

IV.3.8 .2- Cas de plusieurs étapes :

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



Tel que A est le réactif stable, et B un réactif dans un état excité. Les équations de vitesse s'écrivent sous forme d'un système d'équations différentielles du premier ordre :

$$\frac{d[A]}{dt} = -K_1 [A]^\alpha [B]^\beta \quad (IV-25)$$

$$\frac{d[B]}{dt} = -K_1 [A]^\alpha [B]^\beta + K_2 [C]^\gamma [E]^\theta - K_3 [C]^\gamma [B]^\beta \quad (IV-26)$$

$$\frac{d[C]}{dt} = +K_1 [A]^\alpha [B]^\beta - K_3 [C]^\gamma [B]^\beta - K_2 [C]^\gamma [E]^\theta \quad (IV-27)$$

$$\frac{d[D]}{dt} = +K_1 [A]^\alpha [B]^\beta + K_3 [C]^\gamma [B]^\beta \quad (IV-28)$$

$$\frac{d[E]}{dt} = -K_2 [C]^\gamma [E]^\theta \quad (IV-29)$$

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

$$[A] = Y_1 \quad \text{tel que} \quad \frac{d[A]}{dt} = Y_1' \quad (IV-30)$$

$$[B] = Y_2 \text{ tel que } \frac{d[B]}{dt} = Y_2' \quad (\text{IV-31})$$

$$[C] = Y_3 \text{ tel que } \frac{d[C]}{dt} = Y_3' \quad (\text{IV-32})$$

$$[D] = Y_4 \text{ tel que } \frac{d[D]}{dt} = Y_4' \quad (\text{IV-33})$$

$$[E] = Y_5 \text{ tel que } \frac{d[E]}{dt} = Y_5' \quad (\text{IV-34})$$

$$[F] = Y_6 \text{ tel que } \frac{d[F]}{dt} = Y_6' \quad (\text{IV-31})$$

Alors le système d'équations différentielles devient :

$$Y_1' = -K_1 Y_1 Y_2 \quad (\text{IV-32})$$

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

$$Y_3' = +K_1 Y_1 Y_2 - K_2 Y_3 Y_5 - K_3 Y_3 Y_2 \quad (\text{IV-34})$$

$$Y_4' = +K_1 Y_1 Y_2 + K_3 Y_3 Y_2 \quad (\text{IV-35})$$

$$Y_5' = -K_2 Y_3 Y_5 \quad (\text{IV-36})$$

$$Y_6' = +K_2 Y_3 Y_5 + K_3 Y_3 Y_2 \quad (\text{IV-37})$$

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

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

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

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

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

Système de réactions.

Considérons maintenant un système de nr réactions chimiques faisant intervenir ne espèces chimiques. Soit la réaction r suivante, écrite sous une forme générale :

$$\sum_{i=1}^{ne} \nu_{ir} A_i = \sum \nu'_{ir} A_i \tag{IV.38}$$

Le taux de production/destruction de l'espèce i pour la réaction r est :

$$R_{ir} = (\nu'_{ir} - \nu_{ir}) k_r \prod_{j=1}^{ne} c_j^{\nu_{jr}} \tag{IV.39}$$

Le taux total de production/destruction de l'espèce i produit des nr réactions chimiques est :

$$R_i = \sum_{r=1}^{nr} R_{ir} \tag{IV.40}$$

Il est courant de scinder R_i en la somme d'un terme de production et d'un terme de destruction.

Puisque le terme de destruction de l'espèce i contient obligatoirement la concentration en i, on peut écrire R_i , en notant P le terme de production et L celui de destruction (matrice diagonale) de la façon suivante :

$$R_i = \sum_{r=1}^{nr} P_{ir} - c_i \sum_{r=1}^{nr} L_{ir} \tag{IV.41}$$

Avec :

$$P_{ir} = \begin{cases} (\nu'_{ir} - \nu_{ir}) k_r \prod_{j=1}^{ne} c_j^{\nu_{jr}} & \text{Si l'espèce i est produite par la réaction r} \\ 0 & \text{Si l'espèce i est détruite par la réaction r} \end{cases}$$

$$L_{ir} = \begin{cases} (\nu_{ir} - \nu'_{ir}) k_r \prod_{j=1, j \neq i}^{ne} c_j^{\nu_{jr}} & \text{Si l'espèce i est produite par la réaction r} \\ 0 & \text{Si l'espèce i est détruite par la réaction r} \end{cases}$$

IV.4-Photochimie :

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



Où hv représente un photon.

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



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

$$R_A = -J_a c_A \tag{IV.42}$$

Où J_a , appelé coefficient de photodissociation, est l'équivalent des constantes de vitesse k pour les réactions par collision. La formule III.9 explicitant le terme de production/destruction reste valable dans le cas des réactions photochimiques, k étant remplacé par J_a . Il est fonction de la position du soleil dans le ciel et s'exprime par la relation suivante :

$$J_a = a e^{-b/\cos Z}$$

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

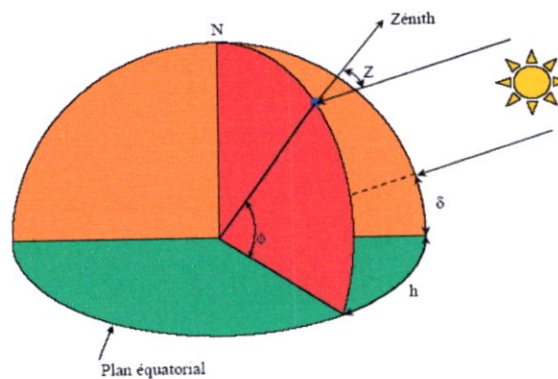


Figure IV.4 : angles dans un repère équatorial

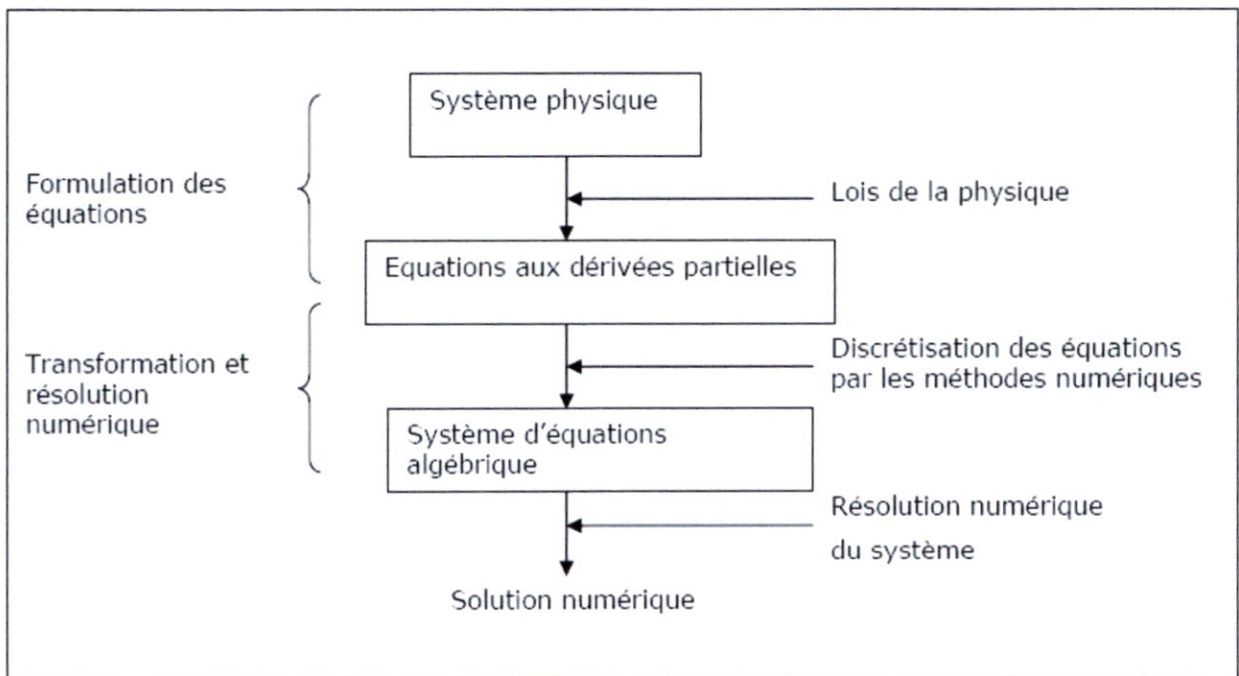


Chapitre V

Modèle Numérique

V.1- Introduction :

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



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

- méthode des différences finies.
- méthode des volumes finis.
- méthode des éléments finis.

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

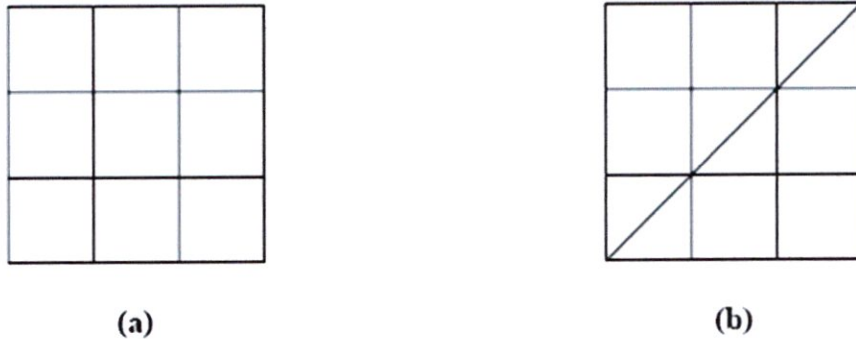


Figure V-1 : structure du maillage

V.2- Méthodes des différences finies :

L'idée de cette méthode est d'obtenir des valeurs approchées de la solution continue en un certain nombre de points. La technique de discrétisation consiste à établir des relations permettant d'évaluer approximativement les dérivées de la solution aux nœuds du maillage. Ensuite l'équation différentielle, où les dérivées ont été remplacées par leur expression approchée, doit être satisfaite à chaque nœud du domaine. Par exemple, sur une grille à deux dimensions où chaque nœud est repéré par les indices (i,j) en (x,y), le développement de la solution en série de Taylor autour du point (x₀, y₀) est donné par :

$$u(x_0 + \Delta x, y_0) = u_{i+1,j} = u_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{i,j} + \dots \tag{V.1}$$

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

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

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

La formule établie pour la dérivée première n'est pas unique. En développant en série de Taylor pour le point (x₀ - Δx, y₀) (le nœud (i-1,j)) on obtient une formule pour la dérivée première de différence arrière :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{i,j} + \dots = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + \Theta(\Delta x) \tag{V-3}$$

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

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

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

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

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

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

Avantages de la méthode

- simplicités de mise en œuvre ;
- encombrements mémoire raisonnable (matrice de type bande) et temps de calcul raisonnable.

Inconvénients de la méthode

- le principe de conservation n'est pas assuré après la discrétisation ;
- l'apparition d'instabilités numériques ;
- difficulté pour traiter les géométries plus complexes.

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

Les lois de conservation de matière, de l'énergie, et de la quantité de mouvement correspondent à trois grandes lois de la physique :

- la loi de Lavoisier.
- le premier principe de la thermodynamique.
- la " loi fondamentale de dynamique " de Newton.

Trois grandeurs conservatives, ou extensives, sont ainsi définies. D'autres peuvent l'être, comme la quantité d'électricité par exemple. Dans tous ces cas l'écriture de bilans est alors permise.

Bilan global et bilan différentiel :

La notion de bilan d'une extensive Φ (masse ou nombre de moles d'une espèce chimique, enthalpie, composante selon une direction x quelconque de la quantité de mouvement) est tout a fait intuitive ; un bilan s'écrira toujours

- entre deux instants t_1 et t_2 ,
- dans un volume de référence V ,

de la manière suivante :

$$\text{Entrée} + \text{création} = \text{sortie} + \text{accumulation}$$

C'est-à-dire:

$$\begin{aligned} & \text{Quantité de } \Phi \text{ qui rentre dans } V \text{ par une surface entre } t_1 \text{ et } t_2 \\ & \quad + \\ & \quad \text{Quantité de } \Phi \text{ produite à l'intérieur de } V \text{ entre } t_1 \text{ et } t_2 \\ & \quad = \\ & \quad \text{Quantité de } \Phi \text{ qui sort de } V \text{ par une surface entre } t_1 \text{ et } t_2 \\ & \quad + \\ & \quad \text{Quantité de } \Phi \text{ s'accumule à l'intérieur de } V \text{ entre } t_1 \text{ et } t_2 \end{aligned}$$

Les premier et troisième termes correspondent à des transports d'extensité à travers des surfaces. Les second et quatrième termes sont généralement de nature volumique.

La distinction entre bilan global et bilan différentiel est directement liée à la taille du volume dans lequel est effectuée le bilan. Si ce volume est de dimensions finies, on parlera de bilan global. Si l'une au moins des dimensions du volume est infinitésimale, on écrira un bilan différentiel. Nous verrons toutefois que la méthode des volumes finis, qui est exposée dans ce cours, fait largement appel à la notion de bilan global.

Lois phénoménologiques de la diffusion :

Les trois lois phénoménologiques de la diffusion (loi de FICK pour la diffusion chimique, loi de FOURIER pour la diffusion thermique, loi de NEWTON pour le frottement visqueux), auxquelles on peut ajouter la loi DARCY pour l'écoulement dans un milieu poreux, peuvent se mettre sous la forme :

$$\vec{\varphi} = -\lambda \vec{\Delta} V \tag{V.6}$$

Où $\vec{\varphi}$ et la densité de flux diffusif de l'extensive Φ ,
 V le potentiel dont le gradient provoque la diffusion l'extensive Φ ,
 λ la conductivité de ce transport.

Plus λ est grand, moins le milieu oppose de résistance au transport de Φ .

L'extensité spécifique Φ , et le potentiel V peuvent le plus souvent être reliés par une relation de type :

$$d\Phi = C dV$$

Qui définit $C = d\Phi/dV$, la capacité de l'extensive. On fait généralement apparaître le coefficient $\Gamma = \frac{\lambda}{C}$; la densité de flux diffusif devient alors :

$$\vec{\phi} = -\Gamma \vec{\Delta} \phi \tag{V.7}$$

Le tableau IV.1 présente l'analogie entre les trois lois phénoménologiques de la diffusion pour les transports de chaleur, de matière, et de quantité de mouvement.

Equation de conservation	Quantité massique (Φ)	Quantité volumique ($\rho\Phi$)
Masse (équation de continuité)	1	ρ (masse volumique)
Quantité de mouvement	\vec{u} (vitesse)	$\rho \vec{u}$ (q.d.m. volumique)
Énergie	h (l'enthalpie massique)	ρh
	e (l'énergie totale massique)	ρe
	T (la température)	ρT
Espèces chimiques	m_j (la fraction massique de l'espèce j)	ρm_j
	x_j (la fraction molaire de l'espèce j)	ρx_j

Tableau V.1 Les quantités massiques et volumiques pour différentes équations de conservation

Le transport convectif :

Lorsqu'en point du système que l'on étudie, la vitesse barycentrique est différente de zéro, il existe un mouvement d'ensemble du milieu qui transporte la matière et les extensités associées, est caractérisé par une densité de flux :

$$\vec{\phi} = \rho \phi \vec{V} \tag{V.8}$$

- Où ρ : la masse volumique du système,
- Φ : l'extensité spécifique (par unité de masse),
- \vec{V} : Le vecteur vitesse instantané.

L'équation générale de transport s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = -\text{div} \vec{\varphi} + S_{\phi} \quad (\text{V.9})$$

S_{ϕ} est la vitesse de création de Φ par unité de volume il correspondre a la production (ou la dispersion) de l'espèce chimique i par réaction,

La densité de flux $\vec{\varphi}$ correspond a la somme des transports convectif et diffusif, soit, en remplaçant par leurs expressions :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = -\text{div}(\rho\phi\vec{V} - \Gamma\Delta\phi) + S_{\phi} \quad (\text{V.10})$$

Après un léger remaniement, l'équation générale de transport prend sa forme définitive :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\vec{V}) = \text{div}(\Gamma\Delta\phi) + S_{\phi} \quad (\text{V.11})$$

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_v\phi)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma_{\phi}\frac{\partial\phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma_{\phi}\frac{\partial\phi}{\partial y}) + S_{\phi} \quad (\text{V.12})$$

Discrétisation du terme local (terme d'accumulation) :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = \frac{(\rho\phi)_{i,j}^{t+\Delta} - (\rho\phi)_{i,j}^t}{\Delta t} \quad (\text{V.13})$$

Discrétisation du terme convectif :

$$\frac{\partial(\rho_u\phi)}{\partial x} = \frac{(\rho_u\phi)_{i+1,j} - (\rho_u\phi)_{i-1,j}}{2\Delta_x} \quad (\text{V.14})$$

$$\frac{\partial(\rho_v\phi)}{\partial y} = \frac{(\rho_v\phi)_{i,j+1} - (\rho_v\phi)_{i,j-1}}{2\Delta_y} \quad (\text{V.15})$$

Discretisation du terme de diffusion :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = \frac{\left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1,j} - \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i-1,j}}{2\Delta_x} = \frac{\left(\Gamma_{\phi_{i+1,j}} \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta_x} \right) - \left(\Gamma_{\phi_{i-1,j}} \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta_x} \right)}{2\Delta_x} \quad (\text{V.16})$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = \frac{\left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{i,j+1} - \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{i,j-1}}{2\Delta_y} = \frac{\left(\Gamma_{\phi_{i,j+1}} \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta_y} \right) - \left(\Gamma_{\phi_{i,j-1}} \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2\Delta_y} \right)}{2\Delta_y} \quad (\text{V.17})$$

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

Schéma explicite

$$\frac{(\rho\phi)_{i,j}^{t+\Delta t} - (\rho\phi)_{i,j}^t}{\Delta t} = f(\phi_{ij}, \phi_{i,j+1}, \phi_{i,j-1}, \phi_{i+1,j}, \phi_{i-1,j}, \rho_{ij}, \Gamma_{ij}, u_{ij}, v_{ij})^t \quad (\text{V.18})$$

C'est-à-dire :

$$\frac{(\rho\phi)_{i,j}^{t+\Delta t} - (\rho\phi)_{i,j}^t}{\Delta t} = \left[- \left(\frac{\partial(\rho_u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_v\phi)}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_{\phi} \right]^t \quad (\text{V.19})$$

Schéma implicite

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

$$\frac{(\rho\phi)_{i,j}^{t+\Delta t} - (\rho\phi)_{i,j}^t}{\Delta t} = \left[- \left(\frac{\partial(\rho_u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_v\phi)}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_{\phi} \right]^{t+\Delta t} \quad (\text{V.20})$$

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

V.4- Méthode des volumes finis :

Principe :

La méthode des volumes finis est une technique de discrétisation qui convertit les équations de conservation aux dérivées partielles en équations algébriques qui peuvent être résolues numériquement. La technique des volumes de contrôle consiste dans l'intégration des équations aux dérivées partielles sur chaque volume de contrôle pour obtenir les équations discrétisées qui conservent toutes les grandeurs physiques sur un volume de contrôle (VC).

Les différentes étapes de la mise en œuvre sont :

- Le domaine de calcul est discrétisé en un nombre fini de points (les nœuds du maillage), autour desquels on définit des volumes élémentaires (appelés volumes de contrôle) contigus, non juxtaposés et sans discontinuités aux interfaces ;
- Les équations modèles, sous forme conservative, sont intégrées sur chaque volume de contrôle (VC) ;
 - Les intégrales sur un volume de contrôle en un nœud donné sont évaluées en approchant la variation de Φ par des profils ou des lois d'interpolation entre les nœuds voisins du point considéré ;
 - Écriture des équations algébriques en fonction des valeurs de Φ aux nœuds du maillage ;
 - Résolutions du système algébrique linéaire obtenu.

Avantages

- Préservation du caractère conservatif des équations sur chaque volume de contrôle (continuité des flux aux interfaces), valable pour n'importe quelle finesse du maillage ;
- Mise en œuvre relativement facile ;
- Applicable aux géométries complexes ;
- Temps de calcul et stockage mémoire raisonnable (matrice de type bande).

Inconvénient

- Moins précis que les méthodes précédentes.

La différence essentielle entre la méthode des différences finies et la méthode des volumes finis est que dans la première, on manipule des valeurs correspondant aux points de calcul tandis que dans la deuxième, on manipule des valeurs moyennes prises sur un volume de contrôle entourant les points de calcul (figure V.2).

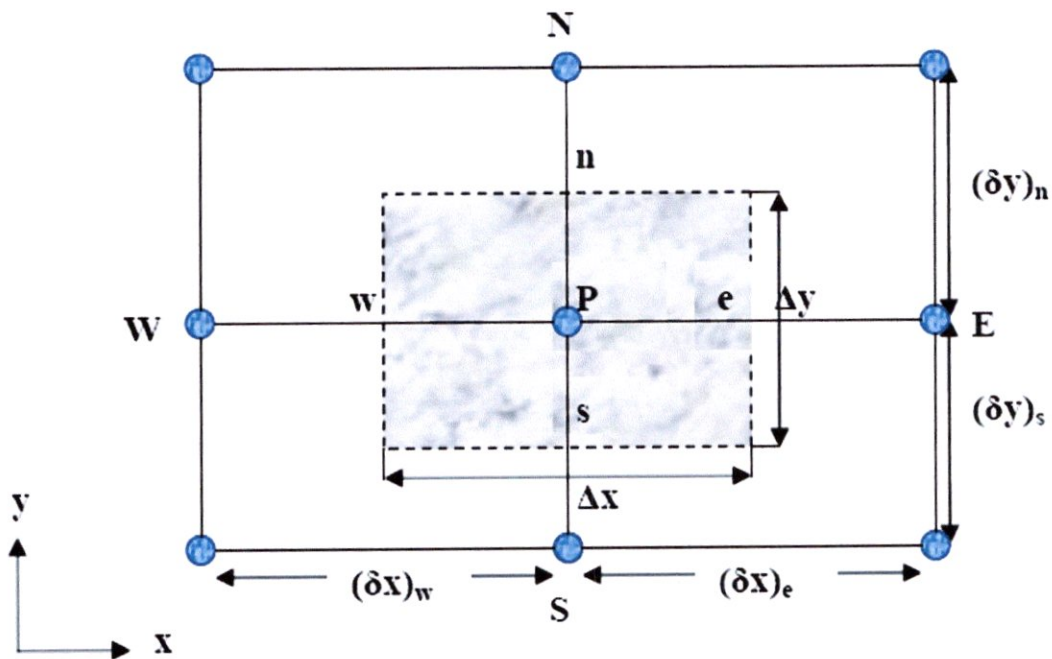
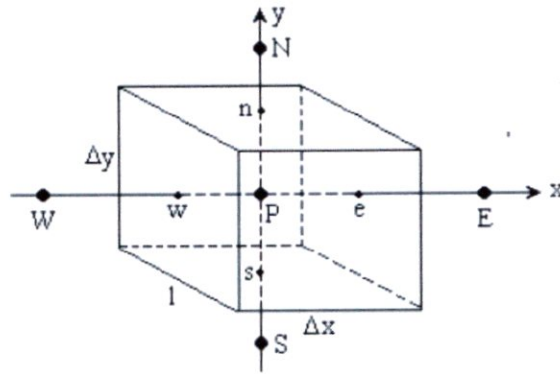


Figure V-2 : volume de contrôle entourant le point centrale P.

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

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dt \cdot dy \cdot dx}_{I} + \underbrace{\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x}(\rho_u\phi) dt \cdot dy \cdot dx}_{II} + \underbrace{\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial y}(\rho_v\phi) dt \cdot dy \cdot dx}_{III} = \\
 & \underbrace{\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dt \cdot dy \cdot dx}_{IV} + \underbrace{\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dt \cdot dy \cdot dx}_{V} + \underbrace{\int_w^e \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} S dt \cdot dy \cdot dx}_{VI}
 \end{aligned} \tag{V.21}$$

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

Le terme instationnaire (ou locale) I :

$$\int_w^e \int_z^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dt \cdot dy \cdot dx = [(\rho\phi)_p^1 - (\rho\phi)_p^0] \Delta_x \Delta_y \tag{V.22}$$

Le terme de diffusion IV :

$$\begin{aligned} \int_w^e \int_z^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dt \cdot dy \cdot dx &= \int_t^{t+\Delta t} \Delta_y \cdot \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] \cdot dt \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \Delta_y \cdot \left[\left(\frac{\Gamma_e (\phi_e - \phi_p)}{(\delta_x)_e} \right) - \left(\frac{\Gamma_w (\phi_p - \phi_w)}{(\delta_x)_w} \right) \right] \cdot dt \end{aligned} \tag{V.23}$$

Plusieurs hypothèses sont possible pour définir comment varie Φ_p , Φ_E et Φ_W en fonction du temps dans l'intervalle $[t, t + \Delta_t]$. Ils sont généralise comme suit :

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi_p \cdot dt = [f \phi_p^1 + (1-f) \phi_p^0] \cdot \Delta_t \tag{V.24}$$

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

$$\begin{aligned} \int_w^e \int_z^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dt \cdot dy \cdot dx &= f \cdot \left[\left(\frac{\Gamma_e (\phi_e^1 - \phi_p^1)}{(\delta_x)_e} \right) - \left(\frac{\Gamma_w (\phi_p^1 - \phi_w^1)}{(\delta_x)_w} \right) \right] \cdot \Delta_y \\ &+ (1-f) \left[\left(\frac{\Gamma_e (\phi_e^0 - \phi_p^0)}{(\delta_x)_e} \right) - \left(\frac{\Gamma_w (\phi_p^0 - \phi_w^0)}{(\delta_x)_w} \right) \right] \cdot \Delta_y \end{aligned} \tag{V.25}$$

On procède de la même manière pour le terme V :

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

On trouve :

$$\begin{aligned} \int_w^e \int_z^n \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dt \cdot dy \cdot dx &= f \cdot \left[\left(\frac{\Gamma_n (\phi_n^1 - \phi_p^1)}{(\delta_y)_n} \right) - \left(\frac{\Gamma_z (\phi_p^1 - \phi_z^1)}{(\delta_y)_z} \right) \right] \cdot \Delta_x \\ &+ (1-f) \left[\left(\frac{\Gamma_n (\phi_n^0 - \phi_p^0)}{(\delta_y)_n} \right) - \left(\frac{\Gamma_z (\phi_p^0 - \phi_z^0)}{(\delta_y)_z} \right) \right] \cdot \Delta_x \end{aligned} \tag{V.26}$$

Le terme source VI :

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

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

$$\int_{t_n}^t \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_u \phi) dt \cdot dy \cdot dx = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Delta y \cdot [(\rho_u \phi)_e - (\rho_u \phi)_w] \cdot dt \tag{V.27}$$

$$= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Delta y \cdot [(\rho_u)_e \phi_e - (\rho_u)_w \phi_w] \cdot dt$$

Au premier lieu, les valeurs de Φ_e et Φ_w sont exprimées en fonction de Φ_p , Φ_E et Φ_W comme suit :

$$\phi_e = \frac{1}{2}(\phi_E + \phi_p)$$

$$\phi_w = \frac{1}{2}(\phi_p + \phi_W)$$

Même chose pour Φ_s et Φ_z , c'est -à-dire :

$$\phi_n = \frac{1}{2}(\phi_N + \phi_p)$$

$$\phi_z = \frac{1}{2}(\phi_p + \phi_S)$$

Donc le terme II devient :

$$\int_{t_n}^t \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\partial}{\partial x} (\rho_u \phi) dt \cdot dy \cdot dx = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Delta y \cdot \left[\frac{1}{2}(\rho_u)_e (\phi_e + \phi_p) - \frac{1}{2}(\rho_u)_w (\phi_p + \phi_w) \right] \cdot dt$$

$$= \frac{1}{2} \cdot f \cdot [(\rho_u)_e (\phi_e^1 + \phi_p^1) - (\rho_u)_w (\phi_p^1 + \phi_w^1)] \cdot \Delta y \tag{V.28}$$

$$+ \frac{1}{2}(1-f) [(\rho_u)_e (\phi_e^0 + \phi_p^0) - (\rho_u)_w (\phi_p^0 + \phi_w^0)] \cdot \Delta y$$

De même pour le terme III :

$$\begin{aligned}
 \int_w^\epsilon \int_z^n \int_t^{\epsilon+\Delta_t} \frac{\partial}{\partial y} (\rho_v \phi) dt \cdot dy \cdot dx &= \int_t^{\epsilon+\Delta_t} \Delta_x \cdot \left[\frac{1}{2} (\rho_v)_n (\phi_N + \phi_P) - \frac{1}{2} (\rho_v)_z (\phi_P + \phi_S) \right] \cdot dt \\
 &= \frac{1}{2} \cdot f \cdot [(\rho_v)_n (\phi_N^1 + \phi_P^1) - (\rho_v)_z (\phi_P^1 + \phi_S^1)] \cdot \Delta_x \\
 &\quad + \frac{1}{2} (1-f) [(\rho_v)_n (\phi_N^0 + \phi_P^0) - (\rho_u)_z (\phi_P^0 + \phi_S^0)] \cdot \Delta_x
 \end{aligned} \tag{V.29}$$

L'intégration des différents termes nous donne :

$$\begin{aligned}
 [(\rho\phi)_P^1 - (\rho\phi)_P^0] \Delta_x \Delta_y &= f \cdot \left[\left(\frac{\Gamma_\epsilon (\phi_E^1 - \phi_P^1)}{(\delta_x)_\epsilon} \right) - \left(\frac{\Gamma_w (\phi_P^1 - \phi_W^1)}{(\delta_x)_w} \right) \right] \cdot \Delta_y \\
 + (1-f) \left[\left(\frac{\Gamma_\epsilon (\phi_E^0 - \phi_P^0)}{(\delta_x)_\epsilon} \right) - \left(\frac{\Gamma_w (\phi_P^0 - \phi_W^0)}{(\delta_x)_w} \right) \right] \cdot \Delta_y &+ f \cdot \left[\left(\frac{\Gamma_n (\phi_N^1 - \phi_P^1)}{(\delta_y)_n} \right) - \left(\frac{\Gamma_z (\phi_P^1 - \phi_S^1)}{(\delta_y)_z} \right) \right] \cdot \Delta_x \\
 + (1-f) \left[\left(\frac{\Gamma_n (\phi_N^0 - \phi_P^0)}{(\delta_y)_n} \right) - \left(\frac{\Gamma_z (\phi_P^0 - \phi_S^0)}{(\delta_y)_z} \right) \right] \cdot \Delta_x &+ \frac{1}{2} \cdot f \cdot [(\rho_u)_\epsilon (\phi_E^1 + \phi_P^1) - (\rho_u)_w (\phi_P^1 + \phi_W^1)] \cdot \Delta_y \\
 + \frac{1}{2} (1-f) [(\rho_u)_\epsilon (\phi_E^0 + \phi_P^0) - (\rho_u)_w (\phi_P^0 + \phi_W^0)] \cdot \Delta_y &+ \frac{1}{2} \cdot f \cdot [(\rho_v)_n (\phi_N^1 + \phi_P^1) - (\rho_v)_z (\phi_P^1 + \phi_S^1)] \cdot \Delta_x \\
 + \frac{1}{2} (1-f) [(\rho_v)_n (\phi_N^0 + \phi_P^0) - (\rho_u)_z (\phi_P^0 + \phi_S^0)] \cdot \Delta_x &+ \int_w^\epsilon \int_z^n \int_t^{\epsilon+\Delta_t} S_\phi dt \cdot dy \cdot dx
 \end{aligned} \tag{V.30}$$

On pose $F = \rho u$, $D = \frac{\Gamma}{\delta_x}$ et $P = \frac{F}{D} = \frac{\rho u}{\Gamma / \delta_x}$ est le nombre de Peclet qui représente le

rapport local de la convection à la diffusion, on considère le schéma implicite pour la discrétisation temporelle. Ainsi la forme réduite :

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + b \tag{V.31}$$

Où :

$$a_E = D_e A(|P_e|) + [-F_e, 0] \tag{V.32}$$

$$a_W = D_w A(|P_w|) + [-F_w, 0] \tag{V.33}$$

$$a_N = D_n A(|P_n|) + [-F_n, 0] \tag{V.34}$$

$$a_S = D_s A(|P_s|) + [-F_s, 0] \tag{V.35}$$

Où le symbole $[A, B] = \max(A, B)$,

Si l'on peut exprimer $\bar{S} = S_C + a_P S_P$ (linéarisation du terme source) alors les coefficients b et a_P , de l'équation discrétisée, sont les suivants :

$$a_P^0 = \frac{\rho_P^0 \Delta x \Delta y \cdot 1}{\Delta t} \tag{V.36}$$

$$b = \int_w^\epsilon \int_s^n \int_t^{t+\Delta t} S_\phi dt \cdot dy \cdot dx + a_P^0 \phi_P^0 \tag{V.37}$$

$$b = S_c \Delta x \Delta y \cdot 1 + a_P^0 \phi_P^0$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_P^0 - S_P \Delta x \Delta y \cdot 1 \tag{V.38}$$

$$F_W = (\rho u)_W \Delta y \cdot 1 \quad D_W = \frac{\Gamma_w \Delta y \cdot 1}{\delta x_w} \quad P_W = \frac{F_W}{D_W} ; \tag{V.39}$$

$$F_E = (\rho u)_E \Delta y \cdot 1 \quad D_E = \frac{\Gamma_e \Delta y \cdot 1}{\delta x_e} \quad P_E = \frac{F_E}{D_E} ; \tag{V.40}$$

$$F_N = (\rho v)_N \Delta x \cdot 1 \quad D_N = \frac{\Gamma_n \Delta x \cdot 1}{\delta y_n} \quad P_N = \frac{F_N}{D_N} ; \tag{V.41}$$

$$F_S = (\rho v)_S \Delta x \cdot 1 \quad D_S = \frac{\Gamma_s \Delta x \cdot 1}{\delta y_s} \quad P_S = \frac{F_S}{D_S} . \tag{V.40}$$

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

Schéma	La fonction A(P)
Différences centrées	1-0.5 P
Upwind	1
Hybride	0, (1-0.5 P)
Loi de puissance	0, (1-0.5 P) ⁵
Exponentielle	$\frac{ P }{\exp(P) - 1}$

V.5-Méthode des éléments finis :

Le principe fondamental de la méthode des éléments finis réside dans le découpage du domaine d'étude en domaines élémentaires de dimension finie. Sur chacun de ces domaines, appelés éléments finis, la fonction inconnue est approchée par un polynôme dont le degré peut varier d'une application à l'autre mais reste en général faible. Ces éléments, triangles ou quadrilatères, rectilignes ou curvilignes, doivent réaliser une partition du domaine d'étude (ils sont disjoints et leur union recouvre le domaine tout entier). Cette partition qui est généralement appelée découpage ou discrétisation du domaine doit respecter un certain nombre de règles qui permettent d'assurer un bon déroulement du calcul.

Etapas de la mise en œuvre :

- Discrétisation du domaine en un nombre fini d'éléments ;
- Choix d'un modèle d'interpolation (variation de la variable Φ sur l'élément);
- Écriture des équations modèles sous forme algébrique au niveau local (dans un élément): détermination des vecteurs et matrices caractéristiques ;
- Assemblage des vecteurs et matrices locaux en un vecteur global B et une matrice globale A ;
- Résolution du système $AX = B$.

Avantage

- Adaptée aux géométries complexes.

Inconvénients

- Formalisme mathématique plus compliqué et plus difficile à mettre en œuvre ;
- Coûteux en stockage mémoire (matrices pleines) et en temps de calcul (inversion) ;
- Caractère conservatif des équations non forcément assuré.

V.6-Discretisation numérique:

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

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

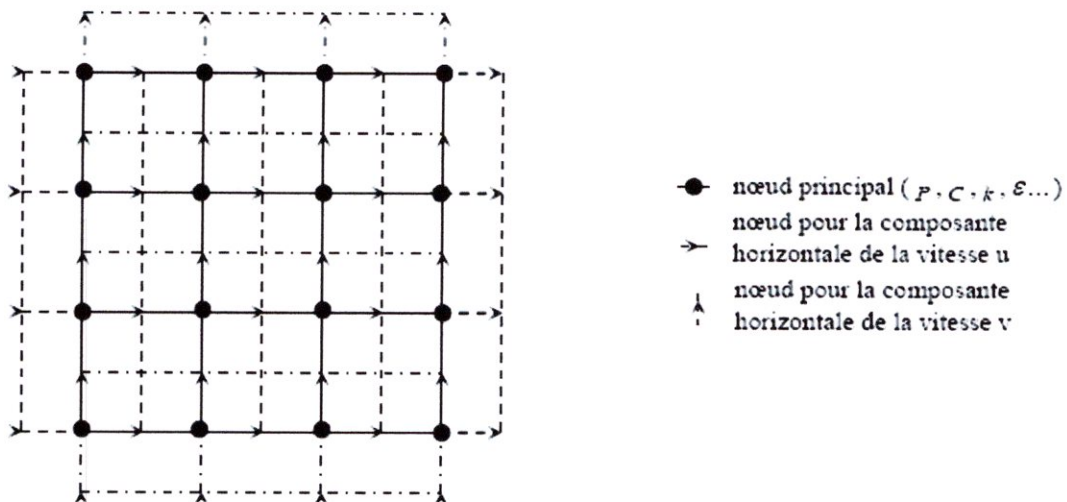


Figure V-3 : maillage décalé en vitesse- pression

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

Équation de continuité :

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

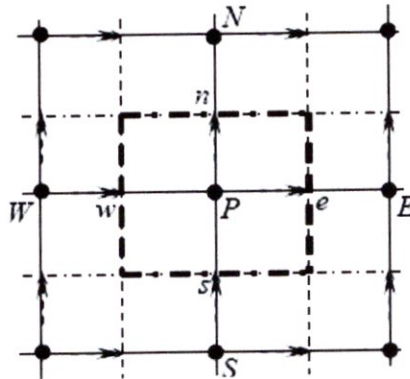


Figure V-4 : volume de contrôle pour la conservation de masse

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

$$(\rho u)_e - (\rho u)_w + (\rho v)_n - (\rho v)_s = 0 \tag{V.41}$$

Équations de quantité de mouvement:

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

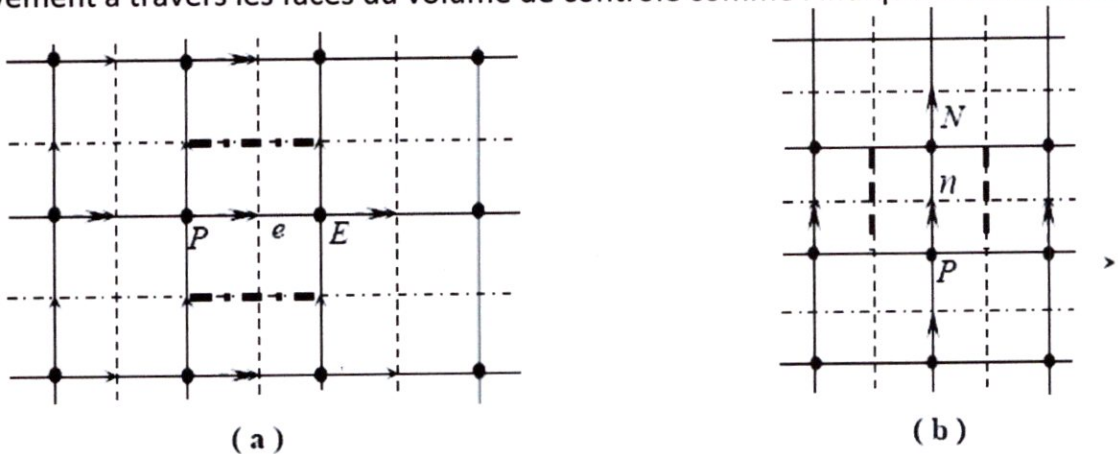


Figure V-5: volume de contrôle : (a) pour la composante u, (b) pour la composante v

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

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + b_u + (P_P - P_E) \Delta_y \tag{V.42}$$

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + b_v + (P_P - P_N) \Delta_x \tag{V.43}$$

Équations de transport des espèces:

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

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

$$a_P C_P = a_W C_W + a_E C_E + a_S C_S + a_N C_N + b_C \tag{V.44}$$

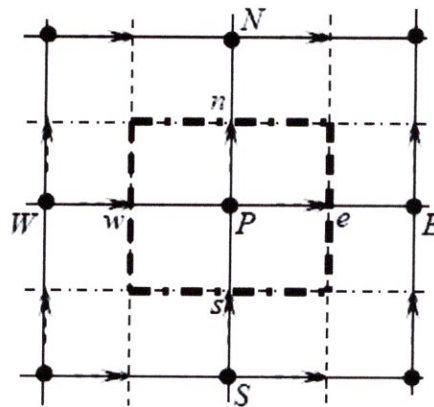


Figure V-6: volume de contrôle de l'espèce C_α

V.7- Algorithme de résolution des équations discrétisées :

La convection d'une variable scalaire Φ dépend tant de la valeur que de la direction du champ local de vitesses. Les développements du chapitre précédent ont été faits dans l'hypothèse que le champ de vitesses est connu. En général, le champ de vitesses n'est pas connu et il doit être une partie de la solution globale des variables de l'écoulement.

On considère les équations de conservation de la quantité de mouvement en 2D stationnaires. Le champ de vitesses doit satisfaire aussi l'équation de continuité.

L'équation de conservation de la quantité de mouvement dans la direction x :

$$\frac{\partial(\rho uu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vu)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}(\mu \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu \frac{\partial u}{\partial y}) - \frac{\partial P}{\partial x} + S_u \tag{V.45}$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement dans la direction y :

$$\frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vv)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}(\mu \frac{\partial v}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu \frac{\partial v}{\partial y}) - \frac{\partial P}{\partial y} + S_v \tag{V.46}$$

L'équation de continuité (de conservation de la masse) :

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \tag{V.47}$$

Les termes représentant les gradients de pression dans les directions x et y ont été écrits séparément pour faciliter les discussions qui suivent. La résolution du système (V.45-V.47) présente deux nouvelles difficultés:

- première difficulté – la non linéarité du terme convectif dans les équations de conservation de la quantité de mouvement, par exemple le premier terme dans l'équation (V.45), ρu^2 ;
- deuxième difficulté – dans le terme source, le champ de pression n'est pas connu et il n'existe pas d'équation gouvernante pour le champ de pression p.

La pression est indirectement spécifiée par l'équation de continuité. Le champ de pression correct est le champ qui, lorsqu'il est introduit dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, a un champ de vitesses associé, qui satisfait l'équation de continuité. Toutes les trois équations sont couplées parce que chaque composante de la vitesse est présente dans toutes les équations. Si le gradient de la pression est connu l'obtention des équations discrétisées. Comme le champ de pression est une partie de la solution globale du problème, le gradient de pression, normalement, n'est pas connu. Si l'écoulement est compressible l'équation de continuité peut être utilisée comme l'équation de transport pour la densité et on ajoute au système (IV.45-IV.47) l'équation de conservation de l'énergie qui est une équation de transport pour la température.

La pression peut alors être obtenue en utilisant la densité et la température à l'aide de l'équation d'état, $P = P(\rho, T)$. Pourtant, si l'écoulement est incompressible alors la densité est constante et elle n'est pas liée à la pression. Dans ce cas le couplage entre la pression et la vitesse introduit une contrainte sur la solution du champ d'écoulement : si le champ de pression correct est introduit dans les équations de conservation de la quantité de mouvement, le champ de vitesses qui en résulte vérifie l'équation de continuité. Toutes les difficultés énoncées ci-dessus seront surmontées par l'utilisation d'une procédure itérative, comme l'algorithme de Patankar et Spalding appelé l'algorithme SIMPLE (**S**emi-**I**mplicit **M**ethod for **P**ressure-**L**inked **E**quations). Dans cet algorithme le flux convectif par l'unité de masse, F , à travers les interfaces du volume de contrôle est évalué à partir d'un champ de vitesses estimé.

V.7.1- Représentation du gradient de pression dans les équations de quantité de mouvement discrétisées :

La méthode des volumes finis commence par la discrétisation du domaine d'écoulement et des équations de transport (IV.43-IV.45). Tout d'abord, il faut décider sur les points de stockage des vitesses. Il semble logique de les stocker dans les mêmes points avec les autres variables, comme la pression, la température, etc. Pourtant, si la pression et la vitesse sont définies dans le noeud du volume de contrôle ordinaire, un champ de pression fortement non uniforme peut être interprété comme un champ uniforme par l'équation

discrétisée de la quantité de mouvement. Ceci peut être illustré à l'aide de l'exemple présenté à la figure IV.7

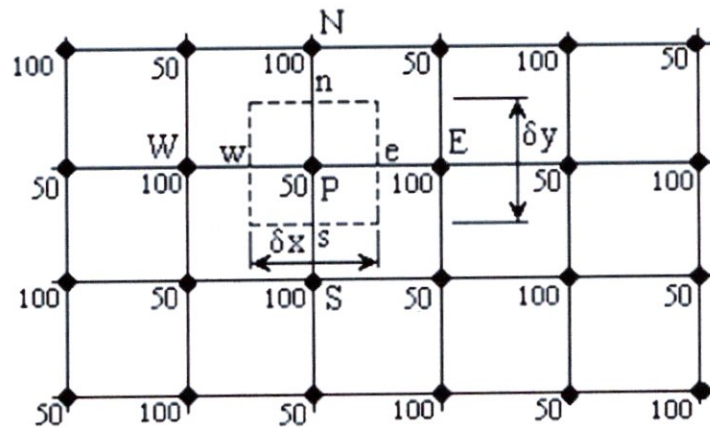


Fig. V.7 Champ de pression en zig-zag.

Si la pression aux points ' e ' et ' w ' est obtenue par interpolation linéaire, le terme du gradient de pression $\frac{\partial p}{\partial x}$ dans l'équation (V.45) est donné par la relation :

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{p_e - p_w}{\delta x} = \frac{\left(\frac{p_E - p_P}{2}\right) - \left(\frac{p_P - p_W}{2}\right)}{\delta x} = \frac{p_E - p_W}{2\delta x} \quad (V.48)$$

De même, le terme du gradient de pression $\frac{\partial p}{\partial y}$ dans l'équation (V.48) est calculé par la relation :

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{p_N - p_S}{2\delta y} \quad (V.49)$$

On constate que la pression du nœud central P n'apparaît pas dans les expressions (V.48) et (V.49). Si l'on remplace les valeurs de la pression, présentées à la figure V.7, dans les relations (V.48) et (V.49) on constate que tous les gradients aux points du maillage sont nuls même si le champ de pression a des oscillations dans toutes les deux directions. Dans ces conditions, le terme source, dans les équations de conservation de la quantité de mouvement discrétisées, a la valeur zéro comme dans un champ de pression uniforme. Ce comportement n'est pas physiquement réaliste. Il est clair que si la vitesse est définie dans les nœuds ordinaires des volumes de contrôle, l'influence de la pression n'est pas correctement représentée dans les équations discrétisées de la quantité de mouvement.

V.7.2-L'algorithme SIMPLE :

L'algorithme SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) a été créé par Patankar et Spalding (1972), et il est une procédure itérative pour calculer la pression en utilisant le maillage déplacé (Annexe V). La procédure itérative commence par l'estimation de la pression. Soit p^* le champ de pression estimé. Les équations (79) et (88) (Annexe V) sont résolues pour obtenir le champ de vitesse associé u^* et v^* :

$$a_{i,j} u_{i,j}^* = \sum a_{vs} u_{vs}^* + b_{i,j} + (P_{i-1,j}^* - P_{i,j}^*) A_{i,j} \tag{V.50}$$

$$a_{l,j} v_{l,j}^* = \sum a_{vs} v_{vs}^* + b_{l,j} + (P_{l-1,j}^* - P_{l,j}^*) A_{l,j} \tag{V.51}$$

On définit la correction de la pression p' comme la différence entre la pression correcte p et la pression estimée p^* :

$$P = P^* + P' \tag{V.52}$$

De façon similaire on définit la correction des vitesses u' et v' comme la différence entre les vitesses correctes u, v et les vitesses estimées u^* et v^* :

$$u = u^* + u' \tag{V.53}$$

$$v = v^* + v' \tag{V.54}$$

La substitution du champ de pression correct, p , dans les équations de conservation quantité de mouvement donne le champ de vitesse correct, (v, u). Les équations discrétisées (79) et (88) (Annexe V) lient le champ de vitesse correct avec le champ de pression correct.

La soustraction des équations (V.50) et (V.51) des équations (79) et (88) (Annexe V) respectivement, donne :

$$a_{i,j} (u_{i,j} - u_{i,j}^*) = \sum a_{vs} (u_{vs} - u_{vs}^*) + [(P_{l-1,j} - P_{l-1,j}^*) - (P_{l,j} - P_{l,j}^*)] A_{i,j} \tag{V.55}$$

$$a_{l,j} (v_{l,j} - v_{l,j}^*) = \sum a_{vs} (v_{vs} - v_{vs}^*) + [(P_{l,j-1} - P_{l,j-1}^*) - (P_{l,j} - P_{l,j}^*)] A_{l,j} \tag{V.56}$$

En utilisant les formules de correction (V.52-V.54) les équations (V.55) et (V.56) peuvent être réécrites ainsi :

$$a_{i,j} u_{i,j}' = \sum a_{vs} u_{vs}' + (P_{l-1,j}' - P_{l,j}') A_{i,j} \tag{V.57}$$

$$a_{l,j} v_{l,j}' = \sum a_{vs} v_{vs}' + (P_{l,j-1}' - P_{l,j}') A_{l,j} \tag{V.58}$$

À ce moment une approximation est introduite: les termes $\sum a_{vs} u_{vs}'$ et $\sum a_{vs} v_{vs}'$ sont négligés pour simplifier les équations (V.57) et (V.58). L'omission de ces termes est la principale approximation de l'algorithme SIMPLE. On obtient :

$$u_{i,j}' = d_{i,j} (P_{l-1,j}' - P_{l,j}') \tag{V.59}$$

$$v'_{I,j} = d_{I,j} (P'_{I,j-1} - P'_{I,j}) \quad (\text{V.60})$$

$$\text{où } d_{i,J} = \frac{A_{i,J}}{a_{i,J}} \quad \text{et} \quad d_{I,j} = \frac{A_{I,j}}{a_{I,j}}.$$

Les équations (V.59) et (V.60) décrivent les corrections qui doivent être appliquées aux vitesses à travers les formules (V.53) et (V.54), ce qui donne :

$$u_{i,j} = u_{i,j}^* - d_{i,j} (P'_{I-1,j} - P'_{I,j}) \quad (\text{V.61})$$

$$v_{I,j} = v_{I,j}^* + d_{I,j} (P'_{I,j-1} - P'_{I,j}) \quad (\text{V.62})$$

Des expressions similaires existent pour $u_{i+1,j}$ et $v_{I,j+1}$:

$$u_{i+1,j} = u_{i+1,j}^* - d_{i+1,j} (P'_{I,j} - P'_{I+1,j}) \quad (\text{V.63})$$

$$v_{I,j+1} = v_{I,j+1}^* + d_{I,j+1} (P'_{I,j} - P'_{I,j+1}) \quad (\text{V.64})$$

$$\text{où } d_{i+1,J} = \frac{A_{i+1,J}}{a_{i+1,J}} \quad \text{et} \quad d_{I,j+1} = \frac{A_{I,j+1}}{a_{I,j+1}}.$$

Jusqu'à maintenant on a considéré les équations de conservation de la quantité de mouvement, mais le champ de vitesse, en même temps doit satisfaire l'équation de continuité (V.47). L'équation de continuité discrétisée, obtenue par l'intégration de l'équation (V.47) sur le volume de contrôle présenté à la figure V.8, est :

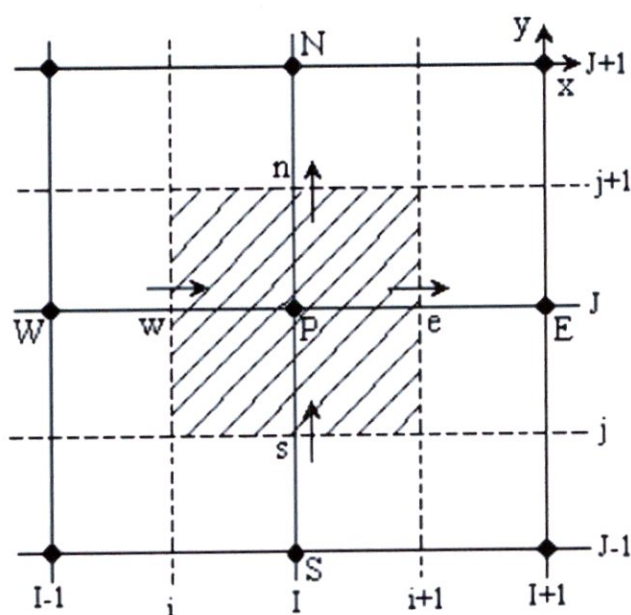


Fig. V.8 Volume de contrôle utilisé pour la discrétisation de l'équation de continuité.

$$\left[(\rho u A)_{i+1,J} - (\rho u A)_{i,J} \right] + \left[(\rho v A)_{I,j+1} - (\rho v A)_{I,j} \right] = 0. \tag{V.65}$$

La substitution des équations corrigées (V.61 – V.64) dans l'équation de continuité discrétisée (V.67) donne :

$$\left[\rho_{i+1,J} A_{i+1,J} (u_{i+1,J}^* + d_{i+1,J} (p'_{I,J} - p'_{I+1,J})) - \rho_{i,J} A_{i,J} (u_{i,J}^* + d_{i,J} (p'_{I-1,J} - p'_{I,J})) \right] + \tag{V.66}$$

$$\left[\rho_{I,j+1} A_{I,j+1} (v_{I,j+1}^* + d_{I,j+1} (p'_{I,J} - p'_{I,J-1})) - \rho_{I,j} A_{I,j} (v_{I,j}^* + d_{I,j} (p'_{I,J-1} - p'_{I,J})) \right] = 0$$

En regroupant les termes, on obtient :

$$\left[(\rho d A)_{i+1,J} + (\rho d A)_{i,J} + (\rho d A)_{I,j+1} + (\rho d A)_{I,j} \right] p'_{I,J} =$$

$$(\rho d A)_{i+1,J} p'_{I+1,J} + (\rho d A)_{i,J} p'_{I-1,J} + (\rho d A)_{I,j+1} p'_{I,J+1} + (\rho d A)_{I,j} p'_{I,J-1} +$$

$$\left[(\rho u^* A)_{i,J} + (\rho u^* A)_{i+1,J} + (\rho v^* A)_{I,j} + (\rho v^* A)_{I,j+1} \right] \tag{V.67}$$

En identifiant les coefficients de la correction de pression p' l'équation (V.67) peut être réécrite sous la forme générale suivante :

$$a_{I,J} p'_{I,J} = a_{i+1,J} p'_{i+1,J} + a_{i-1,J} p'_{i-1,J} + a_{I,j+1} p'_{I,j+1} + a_{I,j-1} p'_{I,j-1} + b'_{I,J} \tag{V.68}$$

Ou : $a_{I,J} = a_{i+1,J} + a_{i-1,J} + a_{I,j+1} + a_{I,j-1}$

$a_{i+1,J}$	$a_{i-1,J}$	$a_{I,j+1}$	$a_{I,j-1}$	$b'_{I,J}$
$(\rho d A)_{i+1,J}$	$(\rho d A)_{i,J}$	$(\rho d A)_{I,j+1}$	$(\rho d A)_{I,j}$	$(\rho u^* A)_{i,J} - (\rho u^* A)_{i+1,J} +$ $(\rho v^* A)_{I,j} - (\rho v^* A)_{I,j+1}$

L'équation (V.68) représente l'équation de continuité discrétisée comme une équation de correction de pression p' . Le terme source b' apparaît à cause du fait qu'on utilise un champ de vitesse incorrect u^* et v^* . Si $b'=0$ celui-ci implique plus de correction de pression nécessaire. Par la résolution de l'équation (V.68) on obtient la correction de pression pour tous les points du maillage et alors la pression correcte peut être calculée à l'aide de la formule (V.52) et les composantes de la vitesse avec les formules de correction (V.53) et (V.54). L'omission du terme $\sum a_{vs} u'_{vs}$ ne doit pas affecter la solution finale parce que les corrections de pression et de vitesse seront nulles à la convergence.

Il est possible que le processus itératif soit divergent. Pour remédier cet inconvénient, pendant le processus itératif on peut utiliser la sous relaxation :

$$P^{nouv} = P^* + \alpha_p P' \tag{V.69}$$

Où $0 < \alpha_p < 1$ est un facteur de sous relaxation.

Les composantes de la vitesse doivent aussi être sous relaxées en utilisant les relations :

$$u^{nouv} = \alpha_u u + (1 - \alpha_u) u^{(n-1)}$$

$$v^{nouv} = \alpha_v v + (1 - \alpha_v) v^{(n-1)}$$

Où α_u et α_v sont les facteurs de sous relaxation pour les composantes de la vitesse, u et v sont les composantes corrigées sans relaxation tandis que $u^{(n-1)}$ et $v^{(n-1)}$ représentent leurs valeurs à l'itération précédente. On peut facilement montrer que les équations de conservation de la quantité de mouvement, en tenant compte du facteur de sous relaxation, peuvent devenir :

$$\frac{a_{i,J}}{\alpha_u} u_{i,J} = \sum a_{vs} u_{vs} + (p_{I-1,J} - p_{I,J}) A_{i,J} + b_{i,J} + \left[(1 - \alpha_u) \frac{a_{i,J}}{\alpha_u} \right] u_{i,J}^{(n-1)} \quad (V.70)$$

$$\frac{a_{I,j}}{\alpha_v} v_{I,j} = \sum a_{vs} v_{vs} + (p_{I,J-1} - p_{I,J}) A_{I,j} + b_{I,j} + \left[(1 - \alpha_v) \frac{a_{I,j}}{\alpha_v} \right] v_{I,j}^{(n-1)} \quad (V.71)$$

L'équation de correction de pression est également affectée par le facteur de sous relaxation et on peut montrer que :

$$d_{i,J} = \frac{A_{i,J} \alpha_u}{a_{i,J}}, d_{i+1,J} = \frac{A_{i+1,J} \alpha_u}{a_{i+1,J}}, d_{I,j} = \frac{A_{I,j} \alpha_u}{a_{I,j}}, d_{I,j+1} = \frac{A_{I,j+1} \alpha_u}{a_{I,j+1}} \quad (V.72)$$

L'algorithme SIMPLE est une méthode pour calculer la pression et la vitesse mais quand d'autres variables sont couplées aux équations de conservation de la quantité de mouvement, par exemple la température, la résolution doit être séquentielle. La séquence des étapes dans l'algorithme SIMPLE est présentée à la figure V.9

V.7.3- Conditions aux limites pour l'équation de correction de pression :

Pour les équations de conservation de la quantité de mouvement les conditions aux limites sont traitées comme pour les équations générales de conservation de Φ . Pour l'équation en p' le traitement des conditions aux limites est spécial. Il y a deux types de conditions aux limites pour les équations en p' :

- soit la pression est donnée à la frontière: dans ce cas, on s'arrange pour que $p^* = p_{donnée}$ sur la frontière et donc $p' = 0$ sur la frontière ;
- soit la vitesse normale est donnée à la frontière: dans ce cas, on choisit un volume de contrôle comme à la figure V.10, et dans l'équation de continuité on ne remplace pas u_e par :

$$u_e = u_e^* + d_e (P'_P - P'_E)$$

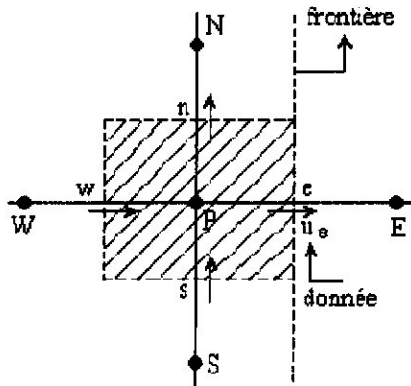


Fig. V.10 Volume de contrôle sur la frontière pour l'équation de continuité

Mais on prend la valeur donnée. Il n'y a donc plus de terme $(P'_P - P'_E)$ dans l'équation de correction de pression, donc il n'y a pas de P'_E . On peut donc poser $a_E = 0$ dans cette équation (à la frontière). Conclusion générale : aucune information sur P'_E n'est nécessaire à la frontière.

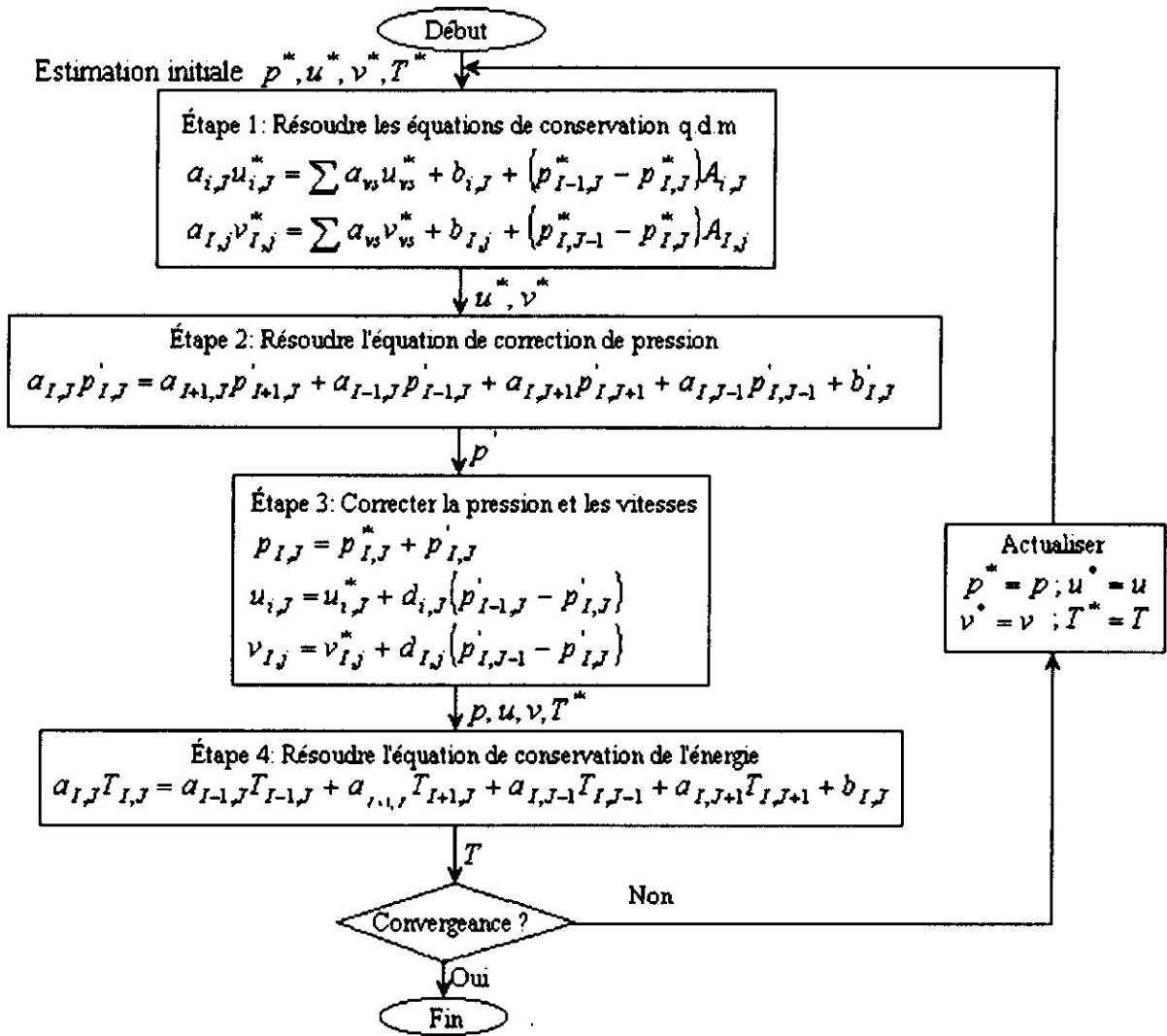


Fig. V.9 L'algorithme SIMPLE

Chapitre VI
SIMULATION DES EMISSIONS
DU TRAFIC ROUTIER

VI. 1 .Introduction:

Comme la majorité des grandes villes des pays en voie de développement, la ville d'Alger, fait face à un grand problème de pollution atmosphérique locale causé principalement par le trafic routier. Ces problèmes rendent nécessaires la mise en place des méthodes fiables pour l'estimation des quantités des polluants émis par ce type de sources ainsi que la détermination plus précises des leurs origines. Ceci permettra aux autorités de posséder les outils nécessaires pour améliorer et contrôler la qualité de l'air.

VI.2 Définition du modèle:

Pour cette étude on a travaillé avec un modèle de dispersion développé pour une conception de rue connue. Ce terme définit idéalement une rue relativement étroite avec des bâtiments adjacents de hauteur conséquente alignés continuellement le long des deux côtés de la rue, il ne permet pas une bonne dispersion des polluants qui restent enfermés dans la rue. La dispersion d'agents polluants gazeux dans la rue urbaine dépend généralement du taux avec lequel la rue échange l'air verticalement avec l'atmosphère au niveau du plafond, et latéralement par les rues avec lesquelles il est relié.

Cette dispersion dépend aussi d'autres facteurs comme: les aspects géométriques de la rue comme son orientation, la hauteur des bâtiments et la largeur de la rue, la turbulence induite par le trafic causée par la vitesse et la présence des véhicules, les variations du flux du trafic, la stabilité atmosphérique, les caractéristiques du trafic, la radiation solaire, et l'entrée de polluants des rues adjacentes.

Ce modèle pose l'émission provenant du trafic de la rue comme une contribution additionnelle à la pollution de fond qui entre au-dessus des plafonds, le calcul est réalisé en utilisant l'équation suivante :

$$C_t = C + C_b \quad (VI.1)$$

C_t = concentration total du polluant dans l'air

C_b = *concentration de base*

C = *concentration provenant du trafic*

Les concentrations sont calculées à partir de deux modèles mathématiques différents, un modèle gaussien et un modèle de boîte. Pour les sources près du récepteur, un **modèle gaussien** sera utilisé.

Ce modèle postule que les gaz émis par une source linéaire sur la surface du sol, ont une extension infinie dans la direction transversale du vent, et les concentrations qui en

résultent ont une distribution gaussienne dans la verticale qui ont une diffusion verticale non restreinte.

La déviation standard σ_z de la distribution gaussienne dépend principalement de la stabilité atmosphérique et de la vitesse des vents en bas de la source. La relation pour ce paramètre dans chacun des segments des vents en haut de la source, est en accord avec l'équation suivante :

$$\sigma_z = a_{ij} r^{b_{ij}} \tag{VI.2}$$

σ_z = déviation standard verticale de la dispersion

r = distance entre la source et le récepteur

a_{ij} et b_{ij} = constantes applicables a l' i^{eme} segment des vents en haut et la j^{eme} classe de stabilité

Quand la couche dans laquelle les agents polluants sont dispersés est restrictive, ils tendent à être uniformément distribués selon la verticale après un temps de dispersion suffisant. Sous ces conditions, le **modèle de boîte** peut être utilisé. Selon le modèle de boîte, la concentration qui provient de l'émission d'une source de secteur uniforme dans le i^{eme} segment est définie par la relation de Miller et Holzworth (1967).

$$C_i = \frac{r_{i+1} - r_i}{uh} Q_i \tag{VI.3}$$

C_i = concentration directe de la source d'émission linéal qui sort de l' i^{eme} segment des vents en haut et la j^{eme} classe de stabilité.

Q_i = taux d'émission du i^{eme} segment.

h = profondeur de la couche ou se mélangent les polluants.

u = vitesse du vent.

Quand on utilise le modèle de boîte la concentration est indépendante de la stabilité . Le point de la transition entre les formulations gaussiennes et de boîte correspond au point auquel les deux formulations linéaires donnent les mêmes concentrations. En appliquant ce critère, on pose une distance de transition r_T .

$$r_T = \left\{ \frac{0.8}{a_{ij}} \right\}^{1/b_{ij}} \tag{VI.4}$$

Le modèle qui définit la concentration qui résulte de l'émission pour tous les segments vents en haut est donné par :

$$c = \frac{1}{u} \left\{ \sum_{i=1}^{N-1} Q_i \left[\frac{0.8(r_{i+1}^{1-b_{ij}} - r_i^{1-b_{ij}})}{a_{ij}(1-b_{ij})} \right] + Q_N \left[\frac{0.8(r_{i+1}^{1-b_{Nj}} - r_i^{1-b_{Nj}})}{a_{Nj}(1-b_{Nj})} + \frac{r_{N+1} - r_T}{h} \right] + \sum_{i=N+1}^9 Q_i \left[\frac{r_{i+1} - r_i}{h} \right] \right\} \quad (VI.5)$$

La transition de la formulation gaussienne à celle de la boîte se produit à r_T dans le n^{eme} segment.

L'équation précédente peut être simplifiée si on prend en considération l'avantage du nombre de caractère fini des catégories des stabilités atmosphériques et on si introduit des catégories de profondeur de mélanges et de direction du vent. Si on exprime les émissions des différents segments comme le produit d'un facteur dépendant du temps et d'un facteur indépendant du temps, il est nécessaire d'introduire un facteur P_t , qui donne la force de la source. Pour ce rapprochement simple P_t est assumée pour être indépendant de la localisation dans la ville :

$$Q_{i,d,t} = P_t \overline{Q}_{i,d} \quad (VI.6)$$

$Q_{i,d,t}$ = émission dans le segment i^{eme} dans la direction d^{eme} pour l'heure t^{eme}

$\overline{Q}_{i,d}$ = émission moyenne dans le segment i^{eme} dans la direction d^{eme}

P_t = facteur qui représente l'intensité de l'émission pour l'heure t^{eme}

Si on introduit les catégories de profondeur et de hauteur mélangées, le modèle est simplifié :

$$C = \frac{P_t}{u} \sum_{i=1}^9 \left(\frac{X}{Q} \right)_{i,j,m} \quad (VI.7)$$

$\left(\frac{X}{Q} \right)_{i,j,m}$ = relation de la concentration reçue par le segment i^{eme} et de l'émission de même segment (a vitesse du vent unitaire).

Suite aux formulations effectuées dans les équations précédentes et aux simplifications faites pour obtenir les équations suivantes (IV.9 et IV.10), on obtient que la concentration de polluants provenant du trafic de la rue est proportionnelle à l'émission et inversement proportionnelle à la vitesse du vent au niveau du plafond, les équations du modèle sont posées pour deux segments vents en haut.

La figure suivant montre le premier cas, où la direction du vent au niveau du plafond est considérée dans un angle de 60° aux deux côtés de l'axe perpendiculaire à la rue (Figure 1).

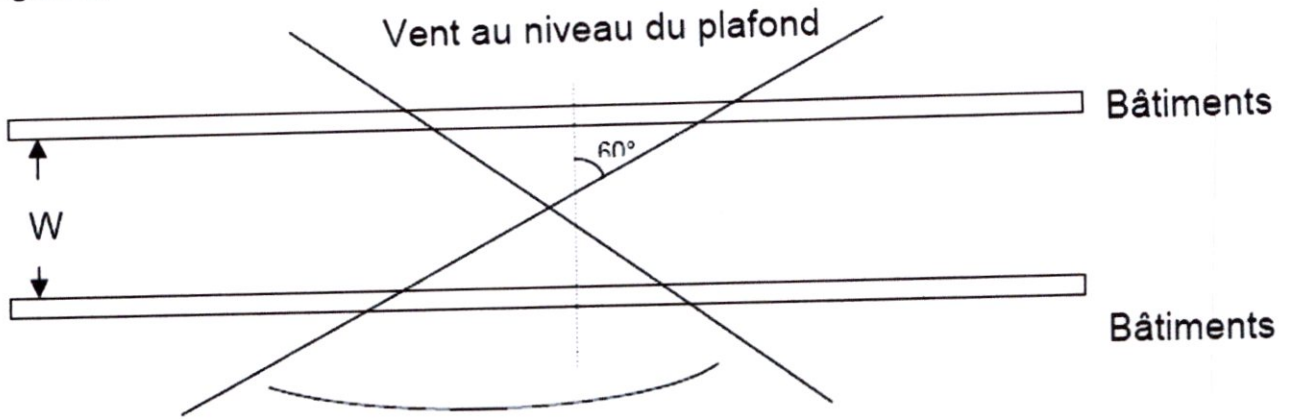


Figure VI .1. La Direction du vent au niveau du plafond est considérée dans un angle de 60°

Quand le vent souffle dans ces directions, et en fonction de sa vitesse, il développe une circulation hélicoïdale à l'intérieur de la rue urbain, connue comme vortex dans lequel les polluants émis par le trafic sont transportés vers le côté protégé du vent ou sous le vent, tandis que le côté exposé par le vent ou au vent est influencé principalement par la concentration de base c'est à dire celle qui n'est pas directement émis par le trafic de la rue (Figure VI. 2) :

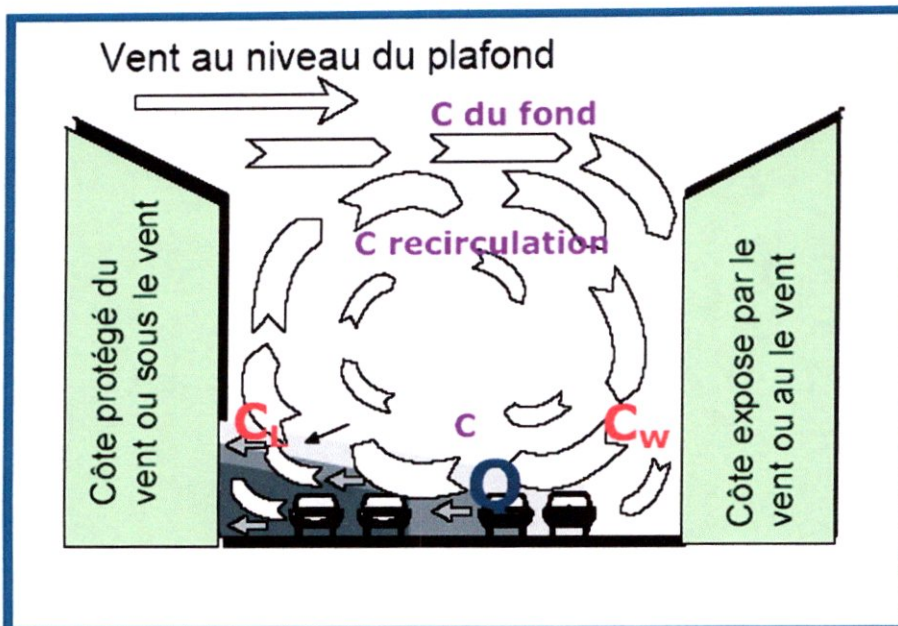


Figure VI. 2. La vitesse du vent développe une circulation hélicoïdale à l'intérieur de la rue urbaine.

Par conséquent la concentration d'un polluant varie selon la situation du récepteur, c'est pourquoi on pose les équations suivantes :

$$C_w = \frac{k Q_s}{w(u + u_s)} \frac{H - z}{H} \quad (\text{VI.8})$$

$$C_L = \frac{k Q_s}{(u + u_s)} \frac{1}{\left(h_0 + (x^2 + z^2)^{\frac{1}{2}} \right)} \quad (\text{VI.9})$$

- C_w = Concentration du polluant cote au vent de la rue.
- C_L = Concentration du polluant cote au vent de la rue.
- H = La hauteur de la rue (m).
- W = La largeur de la rue (m).
- Q_s = Le taux d'émission dans la rue (g/m/s) qui charge avec le cycle du trafic.
- u = La vitesse du vent au niveau de toit (m/s).
- u_s = Paramètre qu'inclut le mouvement mécanique d'air par le trafic (m/s).
- h_0 = Valeur pour le mélange initial des polluants (m).
- Z = La distance verticale depuis la voie ^{xieme} du trafic au point récepteur (m).
- X = La distance horizontale du récepteur a la ligne la plus proche du trafic (m).
- K = Une constante empirique non dimensionnelle .

L'équation CW (VI.8) est la contribution à la concentration primaire en polluant sur le côté au vent de la rue et de l'équation CL (VI.9) est la contribution à la concentration primaire en polluant sur le côté sous le vent de la rue.

Quand la direction de vent est telle que ni le côté sous le vent ni le côté au vent n'est approprié, un composant intermédiaire de concentration qui s'applique des deux côtés de la rue est trouvé en faisant la moyenne des résultats des deux équations.

$$C = \frac{C_w - C_L}{2} \quad (\text{VI.10})$$

C'est à dire est quand la direction du vent sera telle que ni la condition du côté au vent ni côté sous le vent est appropriée, on calcule alors une concentration moyenne des deux résultats des deux équations.

VI.3 Relation entre les émissions des véhicules et la concentration des polluants :

Les modèles atmosphériques de dispersion de la pollution sont utilisés généralement pour le calcul de la qualité de l'air et sont basés sur des relations théoriques connues entre les émissions, la météorologie et les concentrations des polluants dans l'air. D'autre part, combiner les calculs des modèles avec des mesures ambiantes de la pollution permet l'évaluation de l'émission.

En considérant la non réactivité ou la lente réactivité des gaz d'échappement de voiture lors de la dispersion dans les rues, les transformations chimiques peuvent être négligées.

La relation entre les émissions et la concentration des polluants peut être établie au moyen d'un modèle de dispersion qui décrit les processus physiques prédominants.

En tenant compte du fait que le temps que prennent les polluants pour réagir est beaucoup plus grand que le temps requis pour que ceux-ci se dispersent à l'intérieur de la rue urbain, les concentrations des polluants dans la rue, sont mises directement en rapport avec les phénomènes impliqués dans la dispersion des polluants et avec la quantité émise de ces polluants (émissions) selon l'équation générale suivante :

$$C = F_{(\text{météorologie})}Q + C_{(\text{base})} \quad (\text{VI.11})$$

C = concentration observée d'un polluant particulier dans un point récepteur (point de mesures au niveau de la rue) (g/m^3).

Q = émission des polluants processus de trafic dans la rue ($\text{g}/\text{m}/\text{s}$).

$F_{(\text{météorologie})}$ = fonction qui décrit des processus de la dispersion.

$C_{(\text{base})}$ = est la contribution aux concentrations de la pollution dans la rue du reste des sources qui le trafic dans la rue ou concentration du fond (g/m^3).

La fonction $F(\text{météorologie})$ de la dispersion est donnée par un modèle de la pollution de la rue, dans notre cas, le modèle décrit la dispersion dans un ravin de la rue basée des paramètres, principalement vitesse du vent et la direction météorologiques sur les couvertures du toit qui a démontré une description satisfaisante de la dispersion de l'agent polluant de l'air dans des rues urbaines . Pour mener à bien le calcul des émissions on a reporté deux manières :

1. quand on connaît la concentration de base
2. quand on ne connaît pas la concentration de base.

Si on dispose de concentrations mesurées au niveau de rue et les concentrations de base, on peut appliquer les relations décrites par le modèle de dispersion, les émissions provenant du trafic peuvent ainsi se dégager, de l'équation précédente :

$$Q = \frac{C - C_{base}}{F_{(météorologie)}}$$

Sous cette condition, l'émission moyenne (Q), correspond à la pente de la droite issue de la relation (C- Cbase)/F(météorologie) comme représenté dans la figure suivante (Figure VI.3):

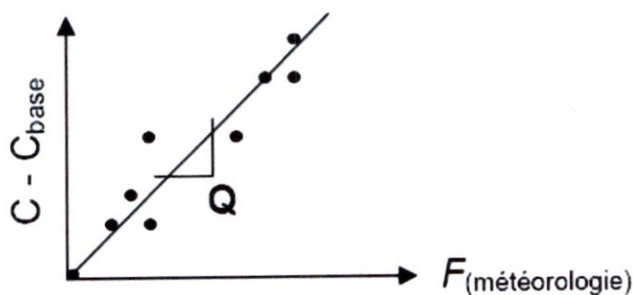


Figure VI.3. Méthode de calcul de l'émission horaire des polluants quand la concentration de fond est connue.

Quand on ne connaît pas la concentration de base, l'émission moyenne correspond à la pente de la droite issue de la relation C/F(météorologique) et la concentration de base correspond à son ordonnée à l'origine comme représenté dans la figure suivante (Figure VI. 4) :

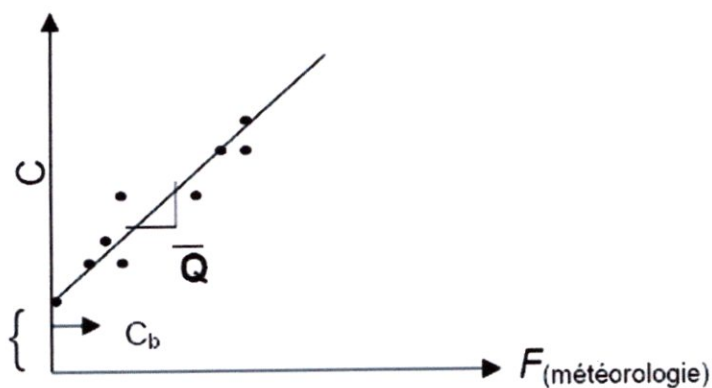


Figure 4. Méthode de calcul de l'émission horaire des polluants quand la concentration de fond est inconnue.

IV.4 Gaz traceur:

L'utilisation d'un gaz traceur a toute son importance, car grâce à son utilisation on peut calculer la valeur de k en utilisant les équations présentes dans le point VI.2 (équations (VI.8) et (VI.9)). En isolant k à partir des deux équations précédentes, on obtient les équations (VI.12) et (VI.13) qui est présente comme une constante empirique non dimensionnelle.

Cette constante tient compte des différentes conditions météorologiques comme la direction du vent, de sa vitesse, des variables du trafic, de la géométrie de la rue et de la dispersion.

Un point très important qui ne doit pas être oublié est que cette constante est propre pour chaque ville et que pour chaque canopée urbaine, on doit recalculer cette valeur pour qu'elle s'adapte aux conditions particulières de chaque canopée urbaine. C'est la raison d'utilisation d'un traceur.

$$k = \frac{C_{\pi} (u + u_z) H_w}{Q_s (H - z)} \tag{VI.12}$$

$$k = \frac{C_z (u + u_z) \left[h_0 + \left(r^2 + z^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right]}{Q_s} \tag{VI.13}$$

Grâce au calcul du constant k . On arrive à connaître la valeur correcte de cette constante pour notre expérience spécifique, il est possible à partir de la concentration des différents polluants de déduire le taux d'émission de ces derniers.

Donc, l'utilisation d'un traceur permet de connaître la valeur de F (météorologique) et si on connaît les valeurs de Q_s et de C de ce traceur on peut alors calculer les émissions de polluants.

VI .5.Site de mesures:

VI.5.1 Sélection du site de mesures:

Pour la sélection du site des mesures on a mis en valeur tous les facteurs importants, comme les différentes caractéristiques des sites de mesures qui ont déjà été utilisés lors d'études du même type. Après consultation de la littérature, les points suivants ont été pris en considération :

1. La configuration de la canopée urbaine.
2. Les dimensions de la rue.
3. Le trafic véhiculaire.

VI.5.2 Caractéristiques du site des mesures

Les principales caractéristiques que doit remplir le site de mesures sont les quatre points qui sont énumérés ci-dessous.

Configuration de la canopée urbaine :

La rue sélectionnée doit longer des bâtiments de hauteurs similaires des deux côtés de la rue, afin que les limites physiques établies par ce type de configuration permette d'établir un volume de contrôle, dans lequel il est possible de modéliser l'effet des variables qui affectent le niveau de pollution à l'intérieur de la rue. Ce point est indispensable pour établir les relations directes de la pollution générée par les émissions du trafic.

VI.5.2.1. Dimensions de la rue:

L'étudié en soufflerie de l'écoulement dans une rue bordée de deux immeubles et a montré l'existence de trois régimes fonction de la dimension des bâtiments et de la distance les séparant (figure VI. 5 et VI. 6). Si les bâtiments sont bien espacés les uns des autres, l'écoulement s'apparente à une succession de structures identiques autour de bâtiments isolés (figure VI .6a). Lorsque l'écart diminue, les sillages sont perturbés. L'écoulement en aval d'un bâtiment est renforcé par une déflexion au niveau de la face amont du bâtiment suivant (figure VI .5b). Lorsque le rapport W/H est encore plus faible (figure VI.5c), la rue se referme et une recirculation s'établit à l'identique d'une rue à l'autre. L'écoulement est alors dit rasant.

W = largeur de la rue.
 H = la hauteur des bâtiments.

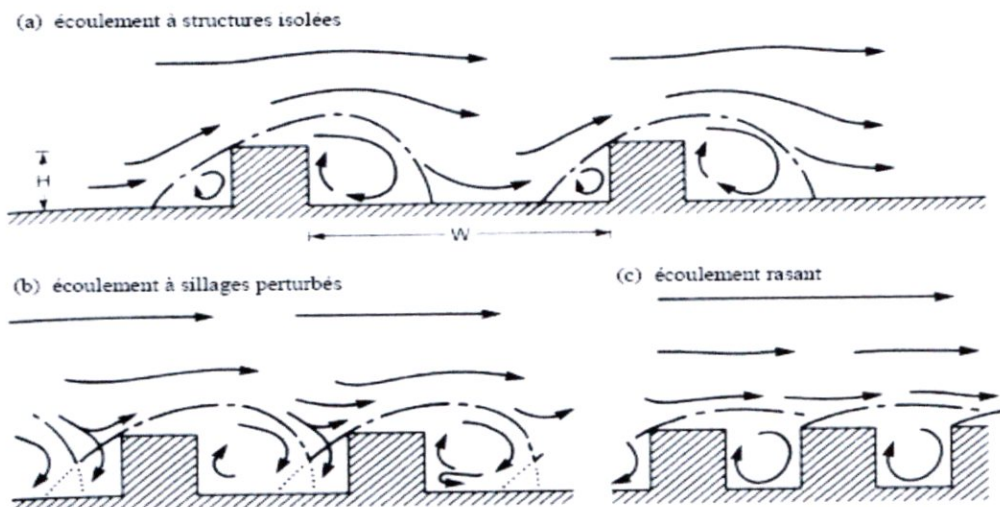


Figure VI. 5 : structure des écoulements derrière des bâtiments

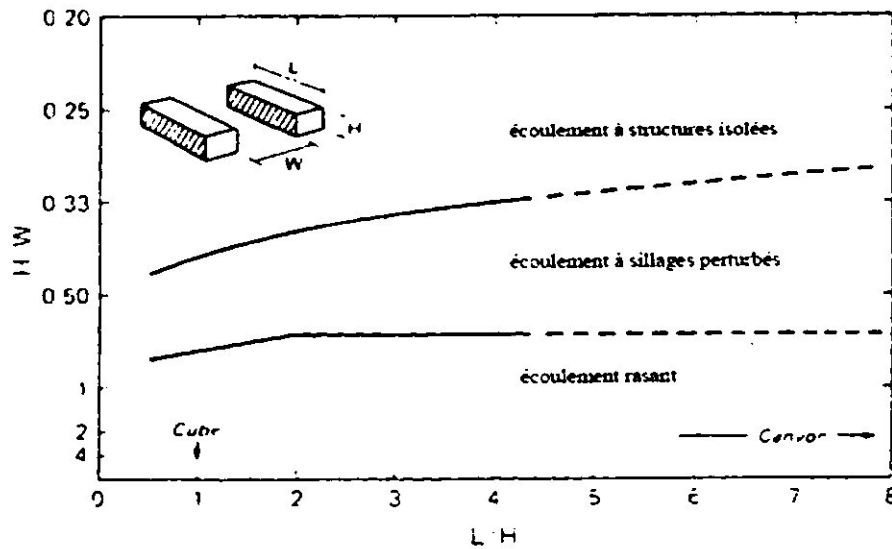


Figure VI. 6: influence de la géométrie des rues sur les écoulements

VI.6 MODELES GAUSSIENS POUR LA CHEMINÉE

VI.6.1 GENERALITES

Un gaz passif va se disperser du fait de la seule action du fluide porteur, l'air. Le transport et la diffusion du gaz vont alors dépendre du vent et de la turbulence atmosphérique d'origine mécanique ou thermique.

En considérant la diffusion moléculaire négligeable (si la diffusion moléculaire de 10^3 à 10^4 inférieure à la diffusion turbulente). La diffusion turbulente homogène et isotrope et un champ de vent uniforme dans l'espace, la concentration de produit est supposée suivre une distribution gaussienne le long des plans perpendiculaires à la direction du rejet (voir la Figure VI.7)

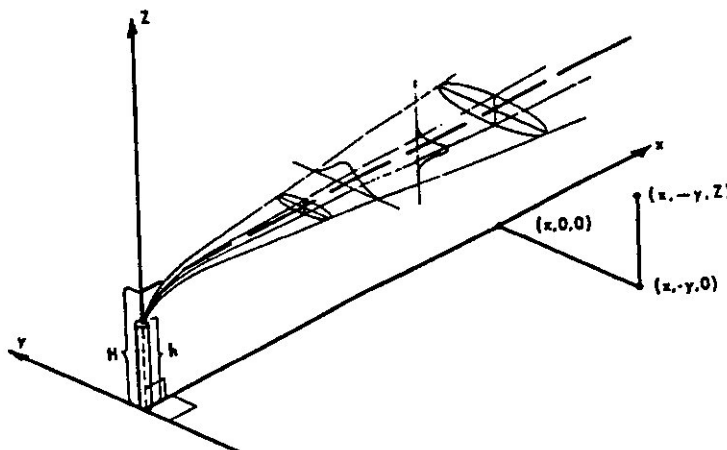


Figure VI.7 : Répartition gaussienne de la concentration dans un panache de gaz passif [Turner, 1970]

VI.6.2 DOMAINE DE VALIDITE :

Le modèle gaussien s'applique aux rejets de gaz passifs, le produit rejeté doit donc avoir :

- une densité à peu près égale à celle de l'air (ou bien il est très dilué),
- une température identique à celle de l'air,

De plus, les modèles gaussiens s'appuient sur un champ de concentration tridimensionnel généré par une source ponctuelle.

La diffusion moléculaire est négligée devant la diffusion turbulente, la vitesse du vent doit donc être d'au moins 1 à 2 m/s. Dans la plupart des cas, le champ de vent est uniforme avec un profil vertical constant. Des outils plus élaborés peuvent considérer la variation de la vitesse du vent, de la température de l'air et de la densité de l'atmosphère avec l'altitude.

Une couche d'inversion de température peut parfois aussi être prise en compte. La turbulence atmosphérique est prise en compte par l'intermédiaire de classes de stabilité.

Le terrain doit être homogène et plat puisque la présence de reliefs, d'obstacles (murs, bâtiments...) introduirait des perturbations de l'écoulement de l'air importantes. Aussi, de façon pratique, les résultats sont valables au-delà d'au moins 100 m depuis le point de rejet.

Par ailleurs, au-delà de distances de dispersion de l'ordre de la dizaine de kilomètres, les résultats ne sont plus valables car d'autres phénomènes de turbulence et de diffusion doivent être considérés.

VI.6.3 METHODES DE RESOLUTION :

- **Rejet instantané :**

Dans le cas du rejet ponctuel et instantané d'une masse de gaz M, la concentration C du gaz dans l'atmosphère en un point (x, y, z) est de la forme :

$$C(x, y, z, t) = \frac{M}{2\pi^{\frac{3}{2}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{(x-x_0-ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \alpha \exp\left(-\frac{(z+z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right)\right] \quad \text{(VI.14)}$$

- C : concentration [kg/m³].
- M : masse de produit libéré [kg].

$\left. \begin{matrix} X_0 \\ Y_0 \\ Z_0 \end{matrix} \right\}$: coordonnées de la source de produit [m].

$\left. \begin{matrix} X_0 \\ Y_0 \\ Z_0 \end{matrix} \right\}$: coordonnées du point où l'on calcule la concentration [m].

- u : vitesse moyenne du vent [m/s].
- t : temps depuis de gaz.

$\left. \begin{matrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{matrix} \right\}$: écarts-types de la distribution de la quantité M de gaz par rapport à sa localisation à l'instant t [m]

α : Coefficient de réflexion au sol.

• **Rejet continu : Modèle « à bouffées»**

Pour modéliser un rejet continu, il est possible de considérer l'émission d'une succession de rejets instantanés qui évolueront de façon gaussienne.

Le rejet de débit en fonction du temps Q(t) peut se décomposer en n rejets instantanés de masse M_i tels que :

$$M_i = Q \left(\frac{t_{i-1} + t_i}{2} \right) (t_i - t_{i-1}) \tag{VI.15}$$

Le i^{ème} rejet instantané, indicé i, est émis à l'instant t_i et a une masse M_i. La concentration C

du gaz dans l'atmosphère en un point (x, y, z) est alors de la forme :

$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^{i=n} \frac{M_i}{2\pi^{\frac{3}{2}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left(-\frac{[x - X_0 - u(t - t_i)]^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y - Y_0)^2}{2\sigma_y^2} \right) \left[\exp \left(-\frac{(z - Z_0)^2}{2\sigma_z^2} \right) + \alpha \exp \left(-\frac{(z + Z_0)^2}{2\sigma_z^2} \right) \right] \tag{VI.16}$$

- M_i : Masse du i^{ème} rejet instantané [kg].
- u : vitesse moyenne du vent [m/s].
- n : nombre de rejets instantanés considérés.
- t_i : instant de fin d'émission du i^{ème} rejet [s].

- t_{i-1} : instant de fin d'émission du $(i-1)^{ème}$ rejet et début d'émission du $i^{ème}$ rejet [s].

$\left. \begin{matrix} \sigma_{xi} \\ \sigma_{yi} \\ \sigma_{zi} \end{matrix} \right\}$: écarts-types de la distribution gaussienne du $i^{ème}$ rejet instantané de masse M_i par rapport à sa localisation à l'instant t [m].

• **Rejet continu : Modèle « panache »**

Si le rejet est continu (voir le chapitre 2.1.4 Mode d'émission) et si la vitesse de vent est suffisamment importante pour que le phénomène de diffusion dans la direction du vent soit négligeable devant le phénomène de convection, la concentration C du gaz dans l'atmosphère en un point (x, y, z) peut s'écrire :

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \alpha \exp\left(-\frac{(z+z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (VI.17)$$

VI.7 Samasafia :

Samasafia d'Alger est la structure responsable de surveillance de la qualité de l'air sur Alger. Samasafia d'Alger appartient à l'observatoire national de l'environnement et du développement durable, Grâce à 5 ans d'existence SAMASAFIA dispose d'une réelle expérience et d'un savoir-faire incontesté.

Les missions de SAMASAFIA d'Alger se définissent dans 5 directions :

- Surveiller la qualité de l'air sur l'ensemble de la région.
- Analyser et expliquer les phénomènes de pollution atmosphérique.
- Informer la population et les décideurs.
- Alerter en cas de pic de pollution atmosphérique.
- Communiquer sur la qualité de l'air d'Alger.

Le rôle réglementaire de SAMASAFIA d'Alger consiste à :

fournir des indications sur l'ensemble des polluants réglementés (dioxyde de soufre, oxydes d'azote, monoxyde de carbone, ozone, poussières, benzo(a)pyrène, benzène, arsenic, nickel, cadmium, plomb) sur les agglomérations où les valeurs guides risquent d'être dépassées. Rendre accessible des données à toute personne (mise en ligne sur internet, indice de qualité de l'air quotidien et alerte en cas de pic de pollution). Mais au travers de ses missions, outre l'aspect réglementaire, SAMASAFIA d'Alger répond

également à toute demande de mesure de qualité de l'air dans une logique de politique régionale de surveillance de la pollution atmosphérique.

VI.7.1 La couverture géographique:

Les quatre agglomérations de la région (Ben Aknoun, Bab El Oued, El Hamma et place du 1^{er} Mai sont équipés de stations de mesures automatiques en continu (24h/24, 7j/7). Le réseau comprend 4 sites pour une vingtaine d'analyseurs.

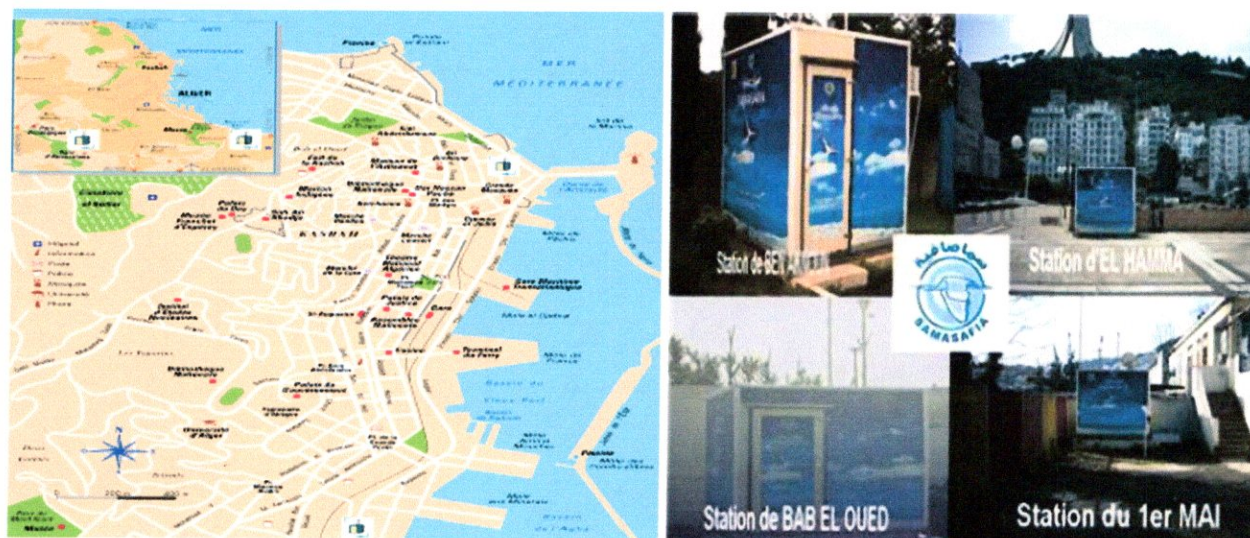


Figure VI.8 Les quatre agglomérations de la région

Agglomération de Ben Aknoun :

La surveillance de la qualité de l'air est assurée sur l'agglomération de Ben Aknoun par une station située au niveau de la direction général des forêts. L'objectif de cette station est le suivi du niveau de la population à des maxima de pollution photochimique (ozone et oxydes 'azote) à la périphérie du centre urbain de l'agglomération. Les polluants surveillés sont les oxydes d'azote, l'ozone, le monoxyde de carbone, les poussières en suspension fines et le benzène. **Agglomération de Bab El Oued**

La surveillance de la qualité de l'air est assurée sur l'agglomération de Bab El oued d'une station située au niveau du CHU. Elle a pour but de suivre le niveau d'exposition moyen de la population aux phénomènes de pollution atmosphériques dits « de fond » des centres urbains. Ainsi cette station permet le suivi de la pollution gazeuse et particulaire. Les polluants surveillés sont les oxydes d'azote, les poussières en suspension, le monoxyde de carbone, les hydrocarbures méthaniques.

Place du 1er Mai

La surveillance de la qualité de l'air est assurée sur l'agglomération par une station située au niveau du CHU Mustapha Pacha. Elle a pour but de suivre le niveau d'exposition moyen de la population aux phénomènes de pollution atmosphériques dits « de fond » des centres urbains. Ainsi cette station surveillé le dioxyde de soufre, les oxydes d'azote, les poussières en suspension, le benzène, le monoxyde de carbone et les hydrocarbures méthaniques.

Place d'El Hamma

La surveillance de la qualité de l'air est assurée sur l'agglomération par une station située au niveau de l'esplanade de la Bibliothèque Nationale Mustapha Pacha. Elle a pour but de suivre le niveau d'exposition moyen de la population aux phénomènes de pollution atmosphériques dits « de fond » des centres urbains. Les polluants surveillés sont les oxydes d'azote, les poussières en suspension, le monoxyde de carbone, les hydrocarbures méthaniques.

VI.7.2 Résultats et interprétations :

L'indice de qualité de l'air :

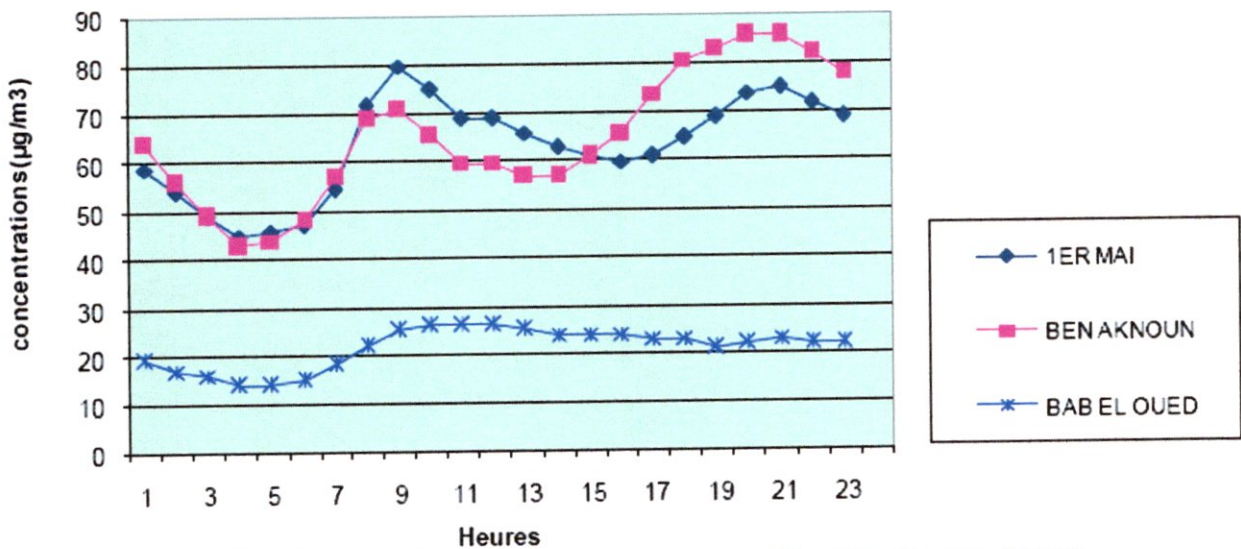


Fig VI.9 : Profil moyen journalier des teneurs en dioxyde d'azote (NO2) pour l'ensemble du réseau durant l'année 2006

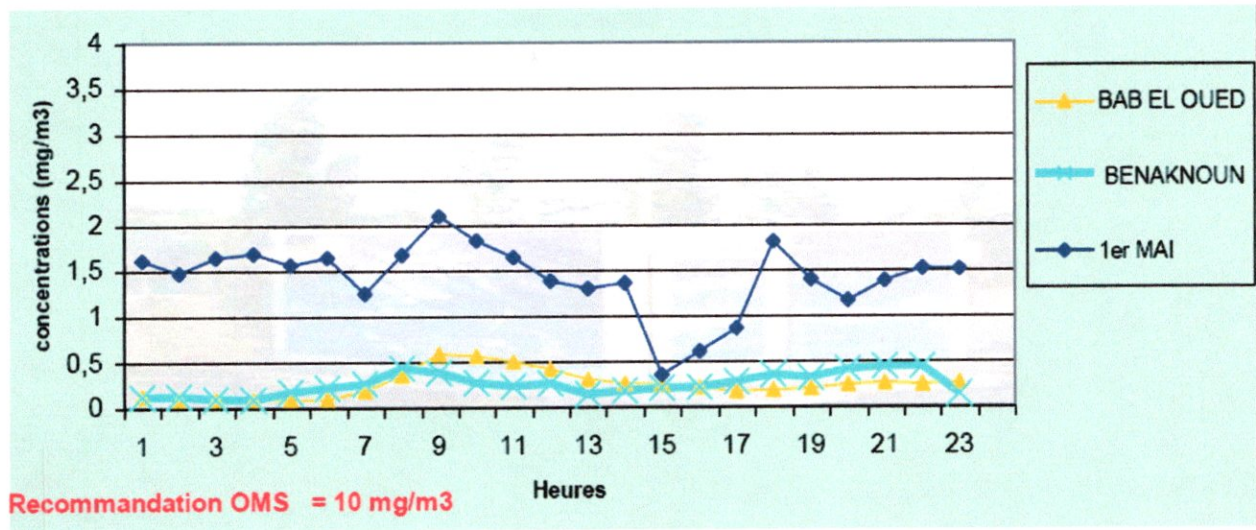


Fig VI.10 Profil moyen journalier des teneurs en monoxyde de carbone pour l'ensemble du réseau durant l'année 2006

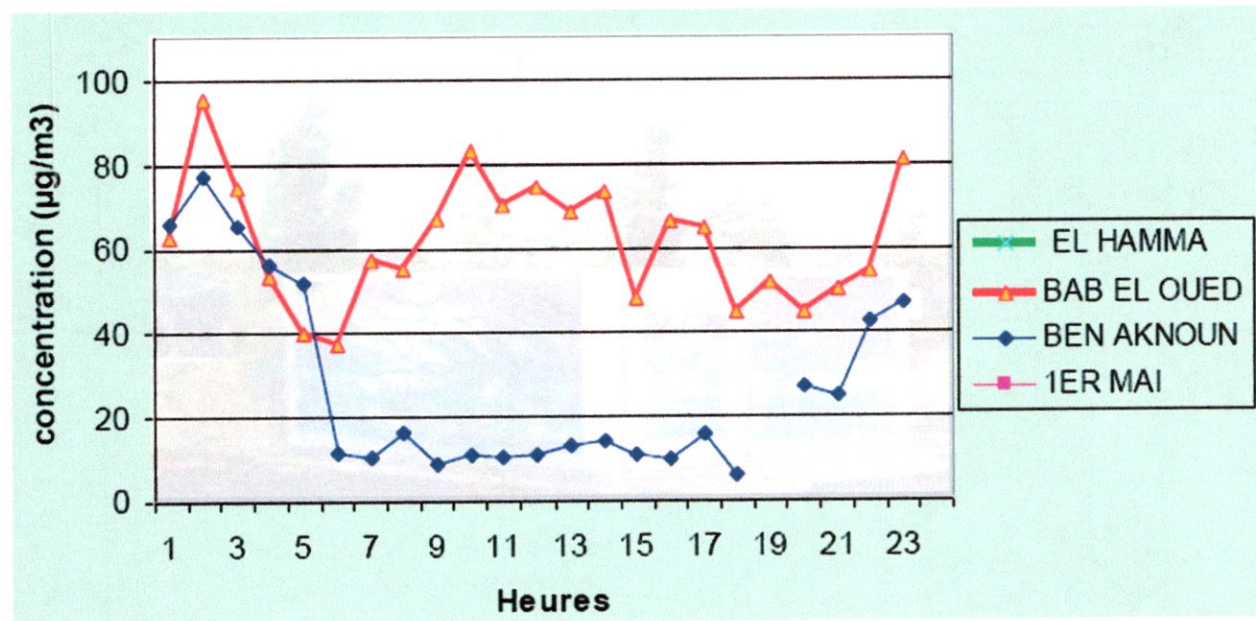
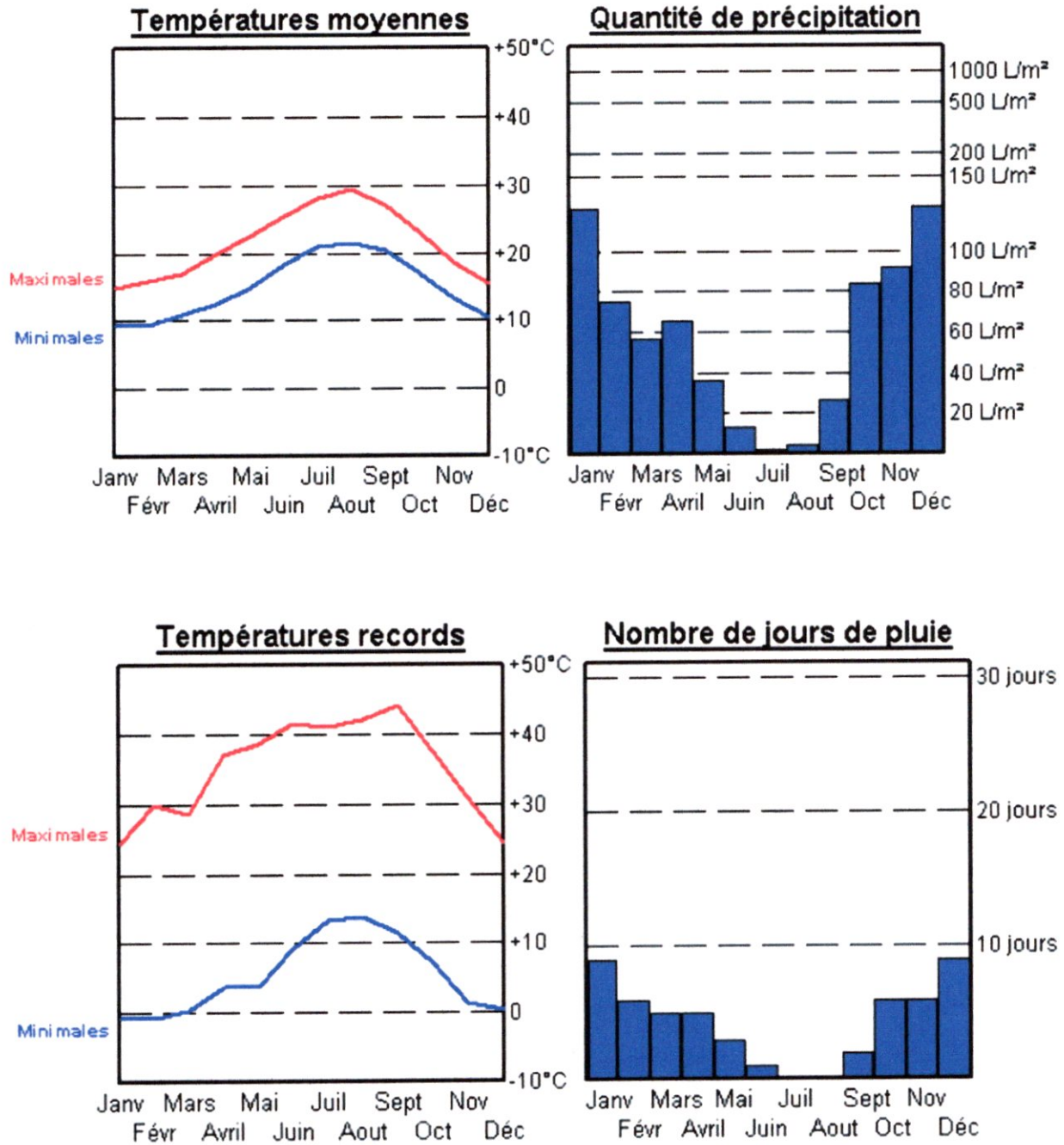



Fig VI.11 Profil moyen journalier des teneurs en poussières pour l'ensemble du réseau durant l'année 2006.

VI.7.3 Conditions météorologiques:



- Finalement, après avoir donné site à nos modèles statistiques, nous passons à la partie des résultats et leurs interprétations.



CHAPITRE VII RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

VII.1 CONTEXTE :

La dispersion atmosphérique d'un produit peut être étudiée selon différentes approches avec [Mouilleau, 1991b] :

- la réalisation d'essais en grandeur réelle.
- la simulation sur maquette (hydraulique ou aéroulique).
- l'utilisation de codes de calcul mathématiques.

L'emploi de modèles numériques pour l'évaluation de la dispersion atmosphérique d'un produit présente de nombreux avantages par rapport à des expérimentations : la rapidité de l'étude et la possibilité d'envisager un grand nombre de cas.

Toutefois, les essais à grande échelle ou sur maquette permettent aussi de connaître les phénomènes à modéliser et par conséquent de participer au développement des outils de calcul.

VII 1.1 ESSAIS EN GRANDEUR REELLE :

Les essais en grandeur réelle peuvent être réalisés pour estimer la dispersion sur un site donné ou approfondir les connaissances sur certains mécanismes de dispersion.

D'une manière générale, ces essais sont relativement coûteux du fait de l'importance des moyens dont il faut disposer (systèmes d'acquisition de données, systèmes de rejet, quantités de gaz à rejeter, main d'œuvre, site disponible pour la réalisation de ces essais).

A ces contraintes, il convient d'ajouter l'impossibilité de maîtriser les situations météorologiques.

Des campagnes à caractère plus fondamental ont été faites pour l'essentiel en Grande Bretagne (Porton Down, Thorney Island, Maplin Sands...) et aux Etats Unis (China Lake, Desert Tortoise...). A titre d'illustration, la campagne de Thorney Island représente 29 rejets réalisés pendant un an et demi. Cette campagne a permis de collecter plus de 8 500 000 mesures par essai recueillies par environ 200 capteurs de concentrations, de vitesse, de température, de pression [CCPS, 1996 ; Lees].

Pour un certain nombre de ces sites de production, EDF a réalisé des campagnes de traçage à l'hexafluorure de soufre (SF₆) pour évaluer l'influence des conditions météorologiques et du relief sur la dispersion des gaz passifs.

Enfin, l'INERIS a mené entre 1996 et 1997, des essais expérimentaux destinés à mieux appréhender la phénoménologie de la dispersion de l'ammoniac [Bouet, 1999].

VII.1.2 ESSAIS A ECHELLE REDUITE :

Les essais à échelle réduite se font généralement sur une maquette placée dans une soufflerie ou une veine hydraulique. L'échelle de travail est en général de l'ordre du 1/50e. Pour représenter un phénomène identique à ce que l'on observait dans la réalité, il faut s'assurer de la conservation de grandeurs adimensionnelles de façon à garder le même système d'équations pour les essais en grandeur réelle et ceux à échelle réduite.

Premier CAS TEST (CHEMINÉE):

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

- les oxydes d'azote possèdent une très grande réactivité dans l'atmosphère, et participent donc activement au phénomène des pluies acides et au phénomène du smog.
- Ils sont nocifs, et représentent un sérieux problème pour la santé humaine.
- Sur un autre plan l'industrie algérienne est directement concernée par le rejet de ces polluants dans l'atmosphère. A titre d'exemple l'industrie chimique (tel que ASMIDAL-Beni-Mered entreprise nationale qui a pour vocation la fabrication d'engrais) rejette dans l'atmosphère les oxydes d'azote, les oxydes de soufres et autres.

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

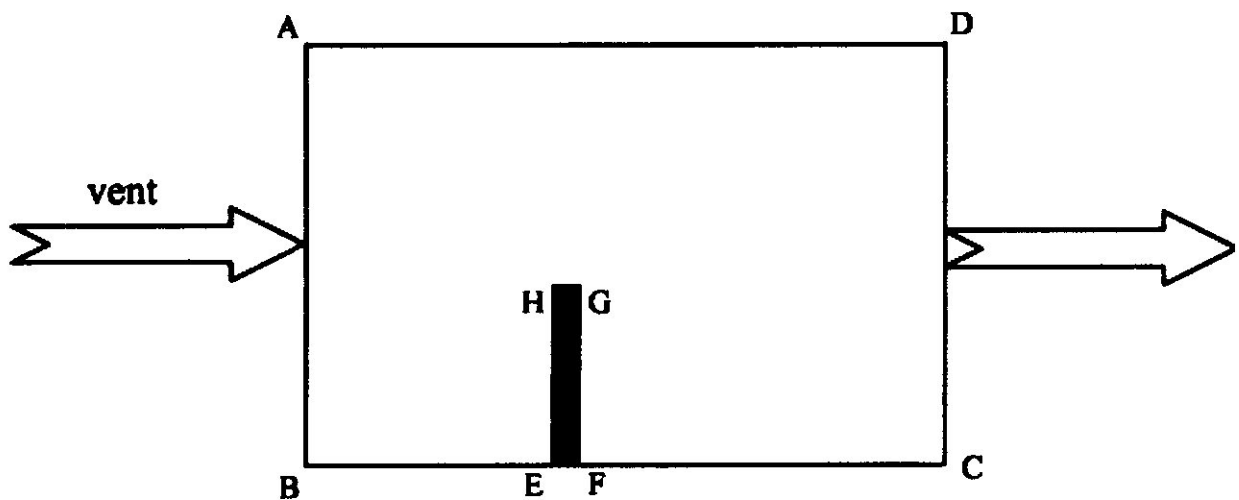


Figure VII-1 : Schéma représentatif du domaine d'étude.

VII.1.1 Modèle mathématique :

On considère une cheminée de hauteur h et de diamètre d qui émet un mélange de dioxyde d'azote et d'air avec une vitesse d'éjection V_0 , à une température T_0 et une fraction massique du polluant Y_0 (dans notre cas NO_2). Ce panache est soumis à un vent de vitesse U_a et la température ambiante est T_a .

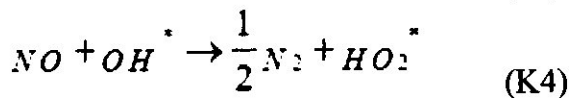
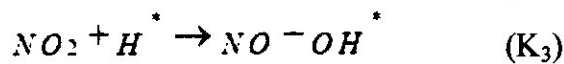
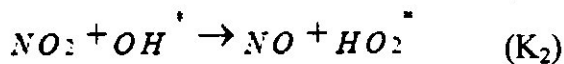
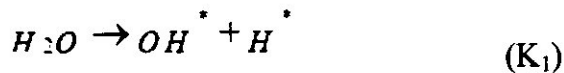
Les hypothèses simplificatrices suivantes forment la base de l'étude :

L'écoulement est considéré bidimensionnel, incompressible, obéissant à l'approximation de Boussinesq, turbulent et instationnaire.

- les gaz en présence sont réactifs.
- la vitesse du vent est considérée constante.
- on ne tient pas compte des gradients de température existant dans l'atmosphère.
- le site étudié est un domaine rectangulaire.

VII.1.2 Conservation des espèces :

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



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

VII-4 Conditions aux limites :

Les conditions aux limites utilisées dans ce modèle sont:

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

VII.1.4 Discussions des résultats de simulation :

L'étude de la dispersion des polluants est très complexe et nécessite, la compréhension du comportement de l'écoulement en présence de la cinétique chimique. En effet, ces deux phénomènes vont interagir et influencer sur sa dispersion. Dans cette thèse on a travaillé avec un programme écrit en MATLAB qui permet de résoudre le problème de la dispersion des polluants dans l'atmosphère, en se basant sur les équations différentielles régissant ce phénomène.

VII.1.5 L'OBSTACLE :

La perturbation du champ de vent par la présence d'obstacles isolés (constructions, haies...); va dépendre :

- de la géométrie et des dimensions de l'obstacle.
- de son état de surface.
- des caractéristiques du vent incident.
- de l'environnement proche.

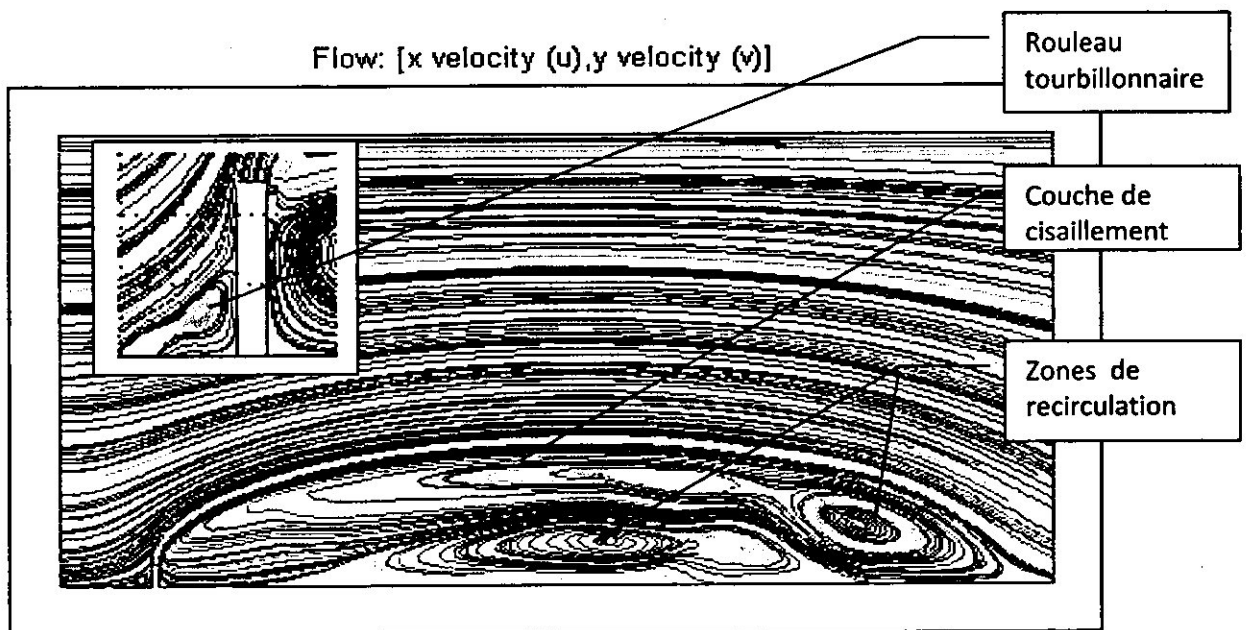


Figure VII.2 influence de la présence de la cheminée sur l'écoulement d'air

La complexité des écoulements autour des obstacles isolés peut être illustrée par l'écoulement autour d'une cheminée de forme cylindrique (Figure VII.2) [Turbelin G, 2000]

- au niveau des parois de l'obstacle, se forment des couches limites qui se séparent et se rattachent, créant des zones de recirculation.
- au niveau de la rencontre de l'écoulement décollé et du sillage, se forme une couche fortement cisailée.

- au niveau de la face au vent, se forme un écoulement descendant qui, à la rencontre du sol, forme un rouleau tourbillonnaire. Ce rouleau se déplace en aval en contournant latéralement l'obstacle, formant des tourbillons dit en "fer à cheval".

Relativement à la dispersion d'un produit, on peut observer :

1) **en amont de l'obstacle :**

- l'accroissement de la concentration.
- l'augmentation du temps d'exposition.
- la présence de zones de recirculation.

2) **en aval de l'obstacle :**

- la décroissance de la concentration.
- l'augmentation du temps d'exposition.
- la diminution de la largeur du nuage.
- l'homogénéité verticale de la concentration.
- La vitesse du vent et la densité du gaz rejeté jouent des rôles particulièrement importants.

Ainsi, plus le vent est fort et le gaz léger, moins la présence de l'obstacle se fait sentir. Les mécanismes de dispersion peuvent être considérés comme dégagés de l'influence de tout obstacle au sol à des distances supérieures à 10 fois la dimension caractéristique de cet obstacle dans la direction du vent, ou à 2,5 fois perpendiculairement à cette direction à la fois dans le plan horizontal et dans le plan vertical (voir la **Figure VII.3**) [Hug, 1975].

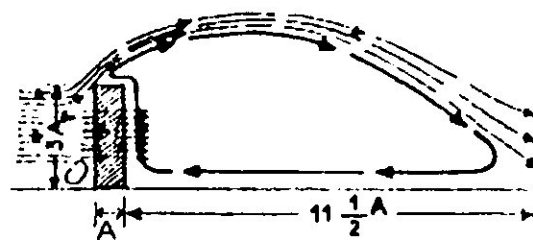


Figure VII.3 : Influence d'un obstacle sur l'écoulement du vent [Hug, 1975]

En termes de conséquences, si le gaz rejeté avait été toxique, en amont de l'obstacle, les concentrations sont plus importantes et le temps d'exposition plus grand, la situation se serait bien évidemment aggravée. En aval de l'obstacle, la concentration est moins importante mais il faut souligner que l'augmentation du temps d'exposition ne permet pas de conclure à des effets de dose plus faibles dans tous les cas.

Par ailleurs, si le nuage déborde sur les côtés de l'obstacle, il faut parfois redouter la formation de filets de nuage à forte toxicité (la concentration en amont étant plus importante) de chaque côté de la zone du sillage de l'obstacle.

VII.1.6 Le flux de l'écoulement :

Sur la figure (VII.4) on présente le flux de l'écoulement global qui se compose de l'air 1^{ère} espèce et les polluants 2^{ème} espèce. L'examen de cette figure montre que l'état du fluide est toujours caractérisé par un tourbillon qui se forme derrière la cheminée qui présente un obstacle devant l'écoulement. La présence de ce tourbillon joue un rôle néfaste sur l'évacuation des polluants éjectés par la cheminée. En effet, une bonne partie des particules des polluants ce trouvent piégés dans le tourbillon, ce qui conduit ainsi à une accumulation de particules près de la cheminée.

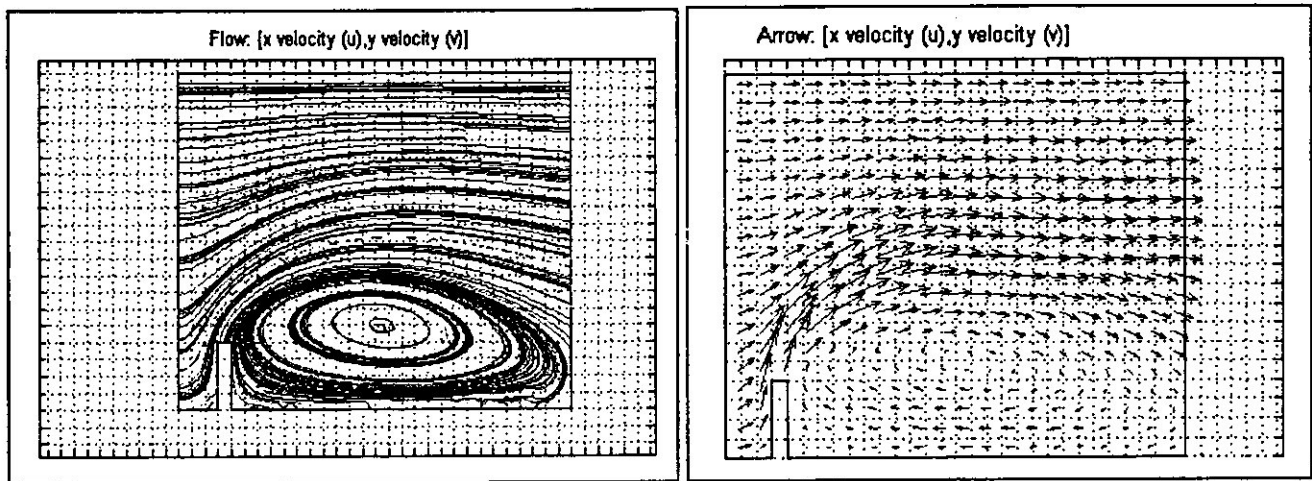
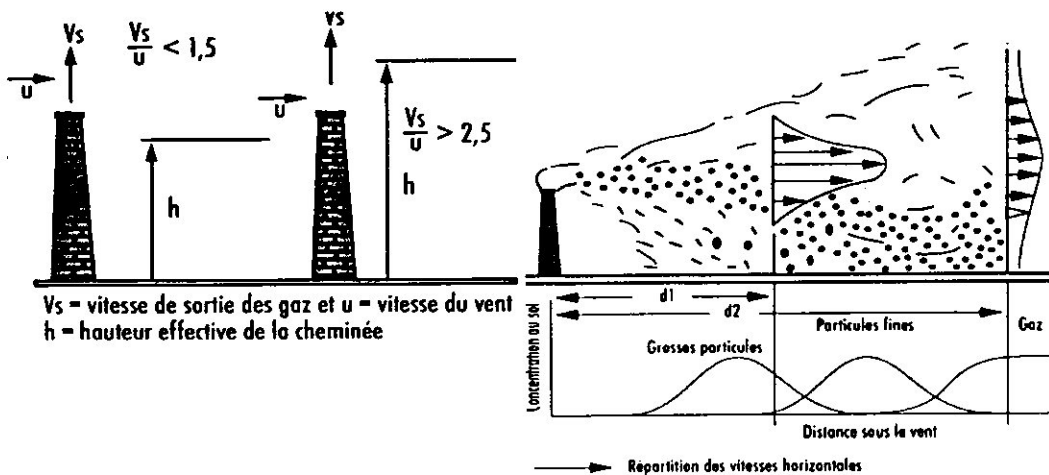
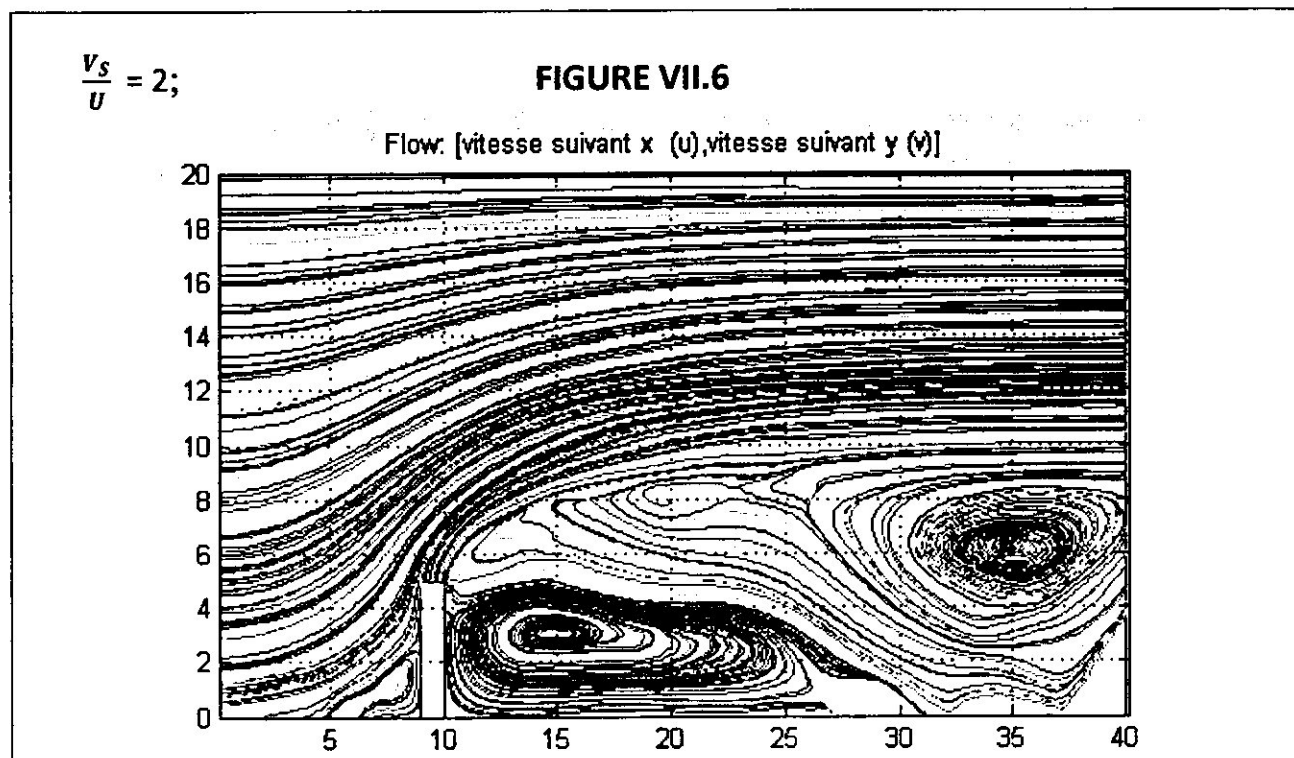
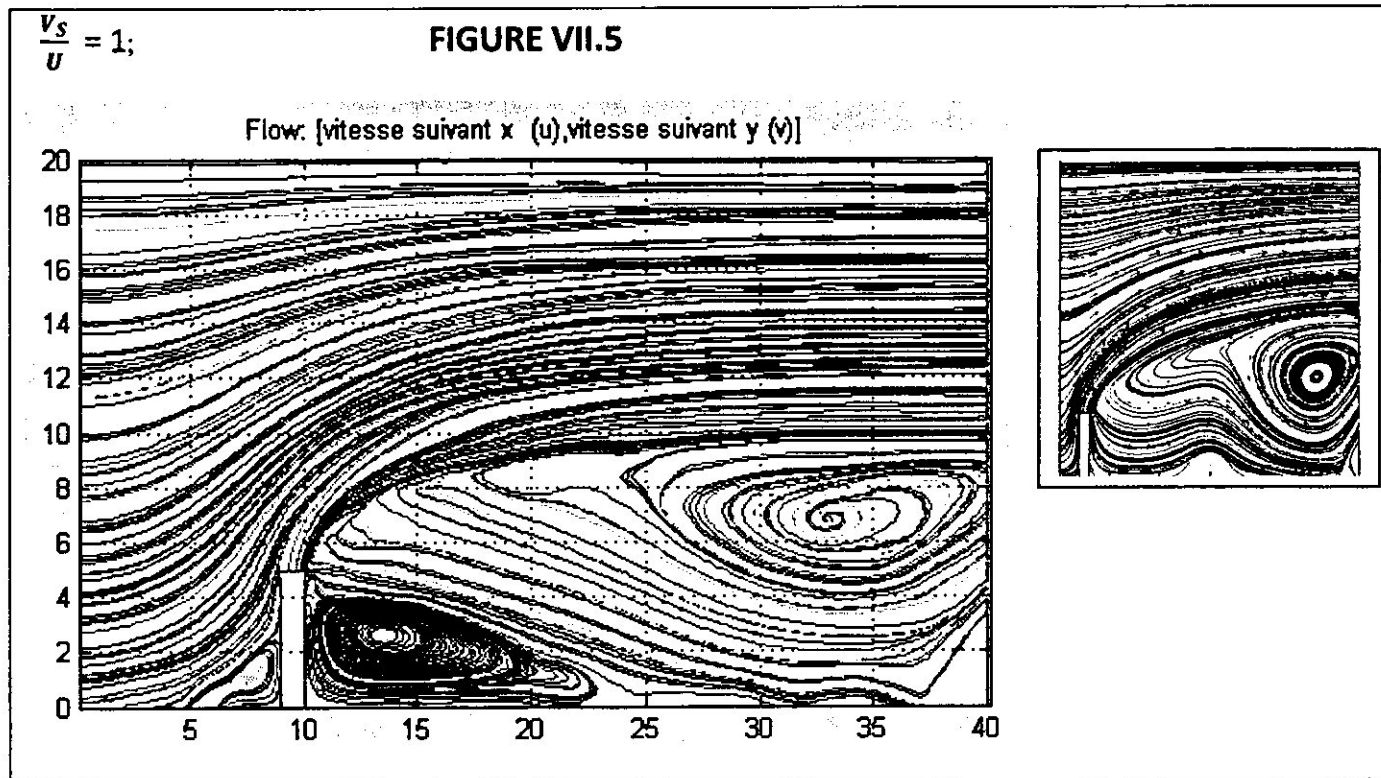


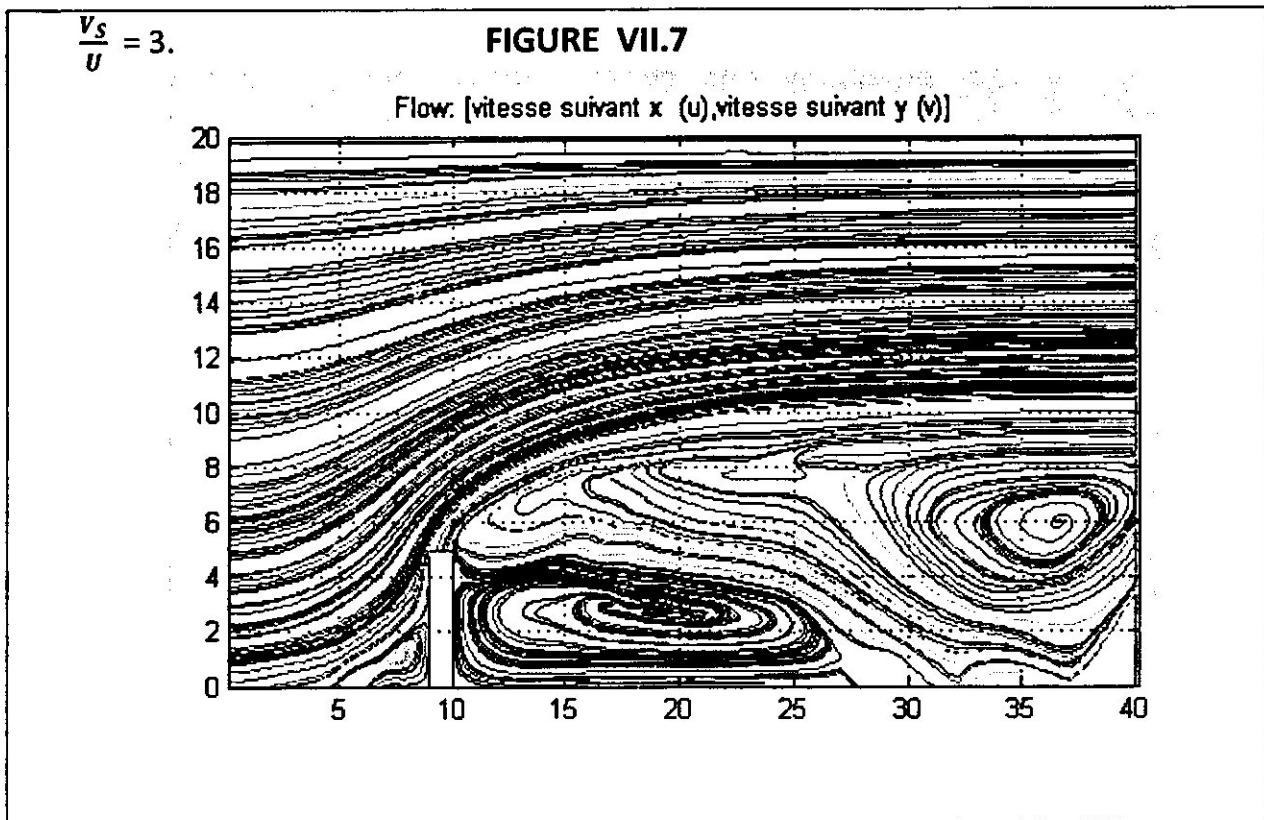
Figure VII-4 : Le flux de l'écoulement.

VII.1.7 Relation entre la position de la zone de recirculation et le rapport $\frac{V_s}{U}$:



D'après le rapport $\frac{v_s}{U}$ différents cas peuvent se présenter :





VII.1.8 Concentrations des espèces :

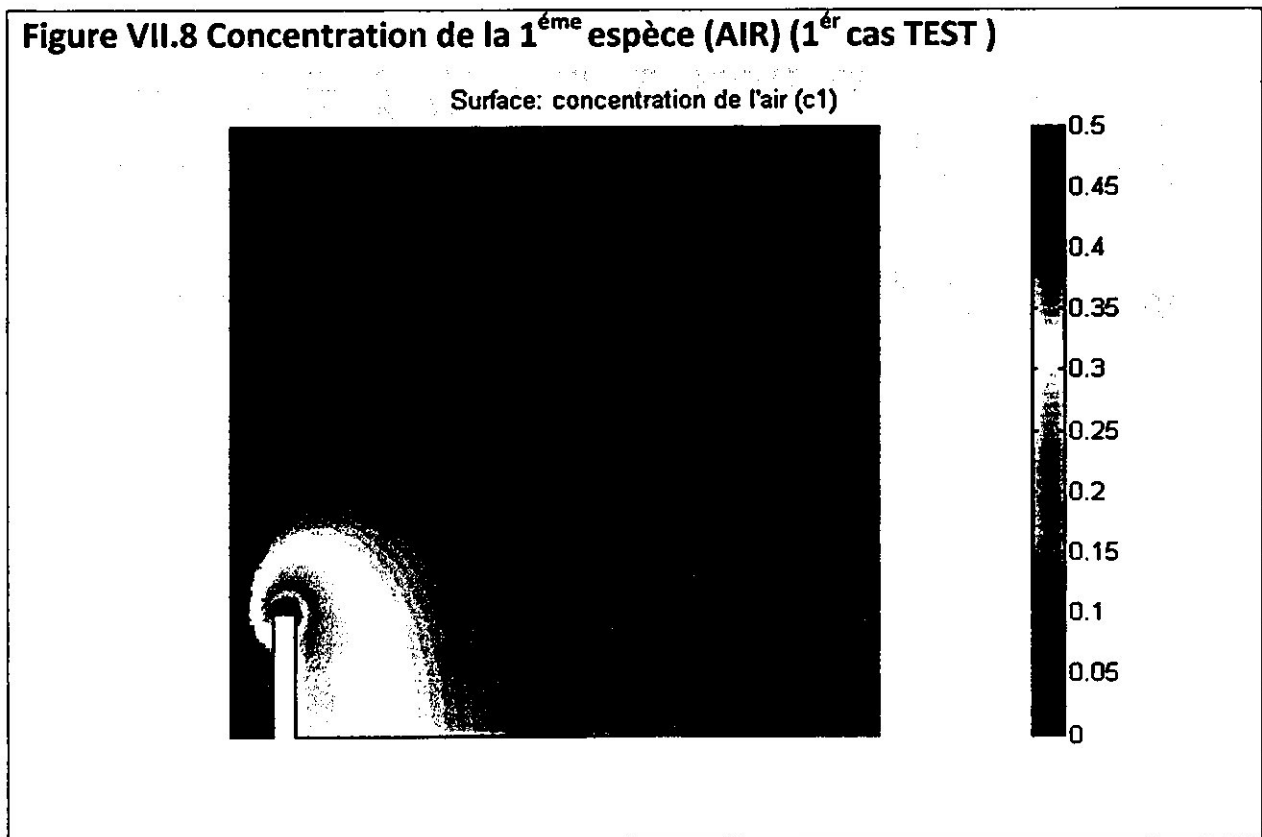
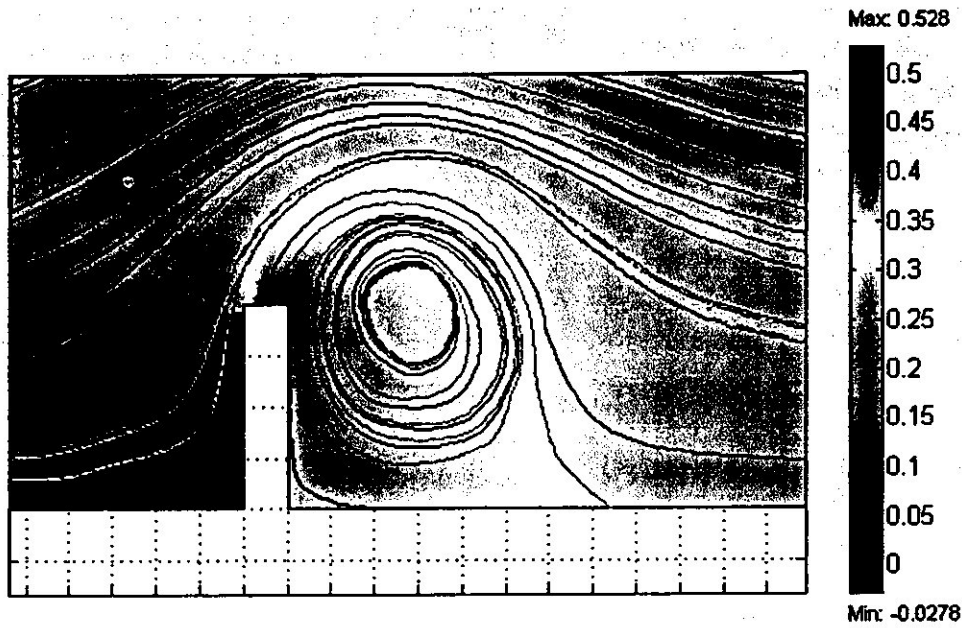


Figure VII.9 Concentration de la 2^{ème} espèce (polluants)



Les figures (VII.8, VII.9) représentent la distribution spatiale des différentes espèces du mécanisme (air, polluants). On remarque que la distribution spatiale de polluant est hétérogène et qu'il y a une accumulation de ce polluant dans la zone de recirculation caractérisée par des structures tourbillonnaires contrarotatives.

VII.I .9- Profils de vitesses :

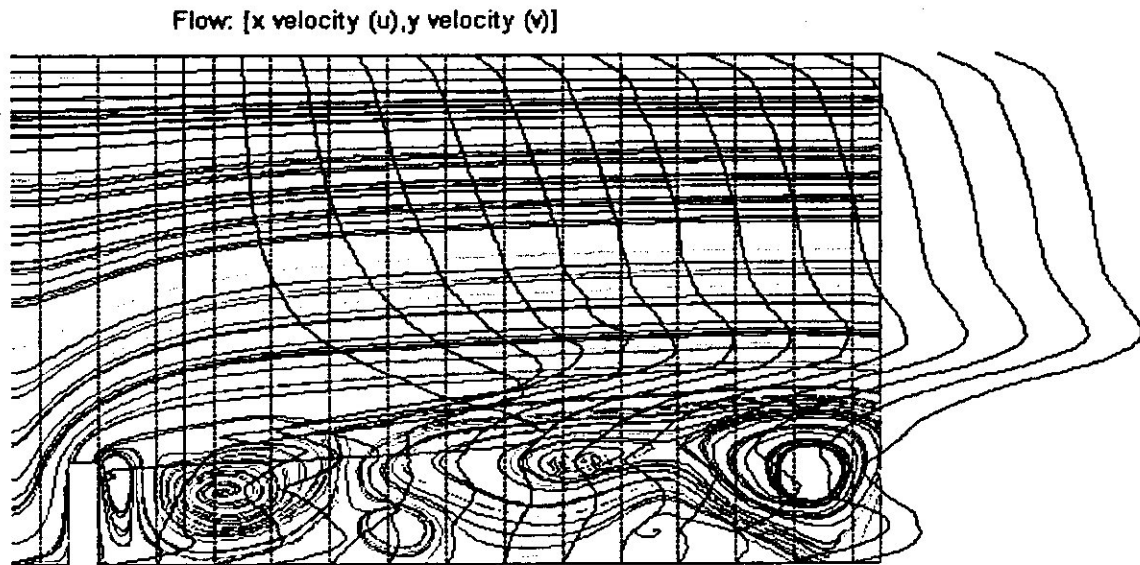


Figure VII-10 : Vitesse en fonction de y

Cette figure représente le profil longitudinal de la vitesse en fonction de y en différentes positions de x . Juste après la position de la cheminée le profil de vitesse présente une augmentation.

Par contre si en déplaçant vers l'amont les profils indiquent une région de vitesse négative, ça signifie qu'il y a une séparation de la couche limite, car il y a une dépression dans cette zone (c'est-à-dire une zone de recirculation), puis elle disparaît au fur et à mesure en s'éloignant de cette zone.

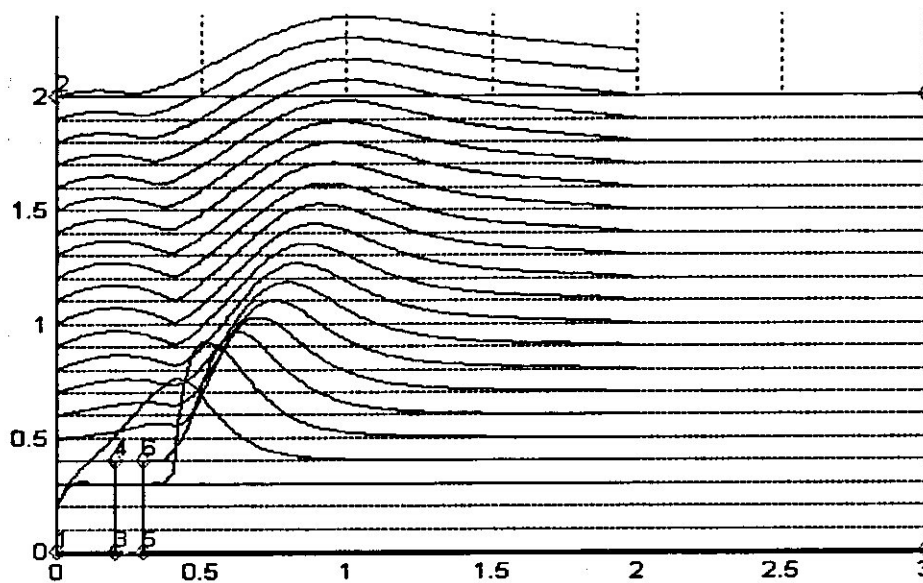


Figure VII-11 : Vitesse en fonction de x

Cette figure présente les profils de vitesse longitudinale en fonction de x en différentes positions. On remarque qu'il y a des piques de vitesses inférieures et supérieures. Le premier correspond au niveau de la cheminée qui présente un obstacle pour l'écoulement donc on a une diminution de la vitesse juste derrière l'obstacle où il y a une zone de recirculation, puis elle augmente au fur et à mesure en déplaçant vers l'aval où elle atteint la vitesse de l'air (régime établie).

Le deuxième pique correspond à un niveau de cheminée où la vitesse représente la résultante des deux vitesses (de l'air et de jet). Si on monte encore, la vitesse devient égale environ la vitesse de l'air.

L'énergie cinétique turbulente :

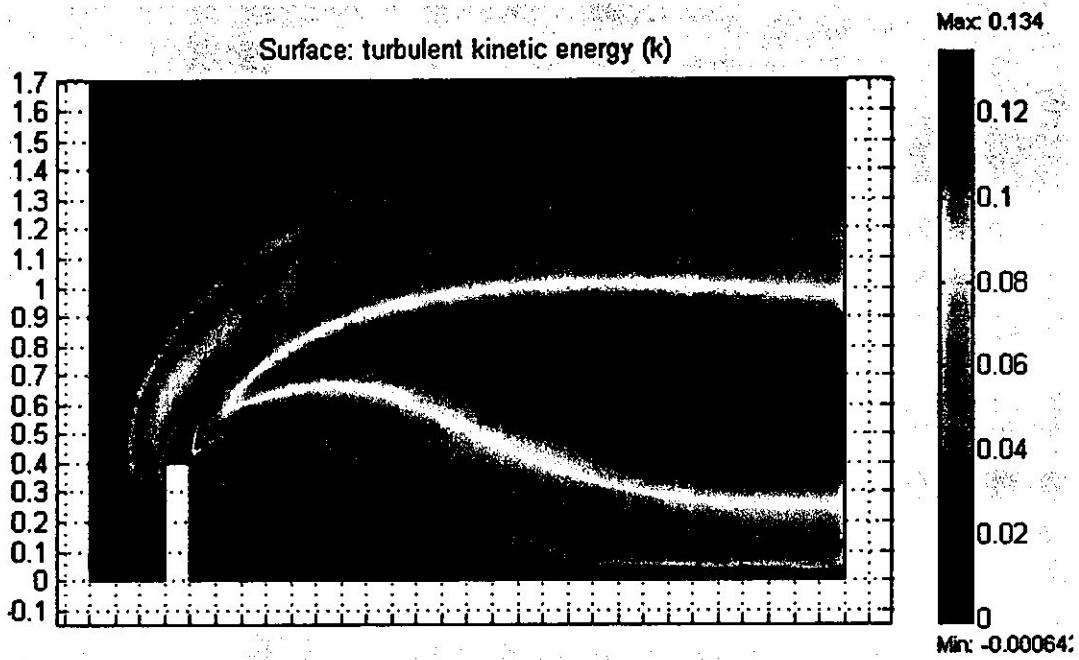


Figure VII-12 : l'énergie cinétique turbulente (k)

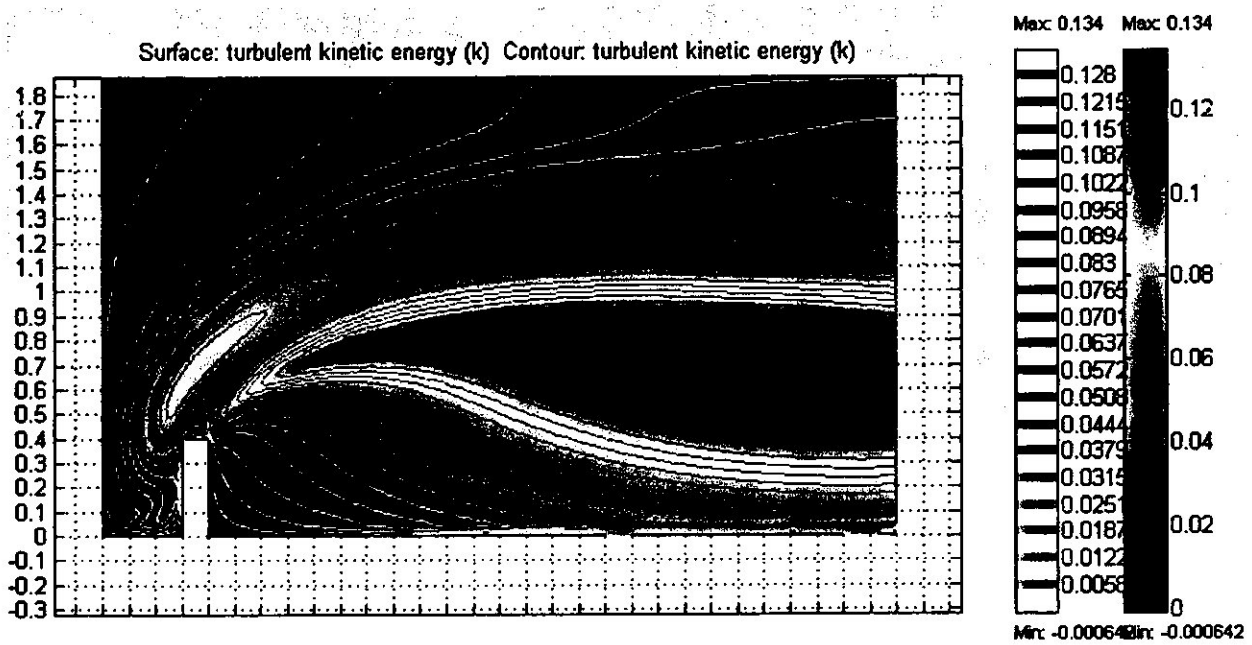


Figure VII.12.a: contour de l'énergie cinétique turbulente,

La dissipation par unité de masse :

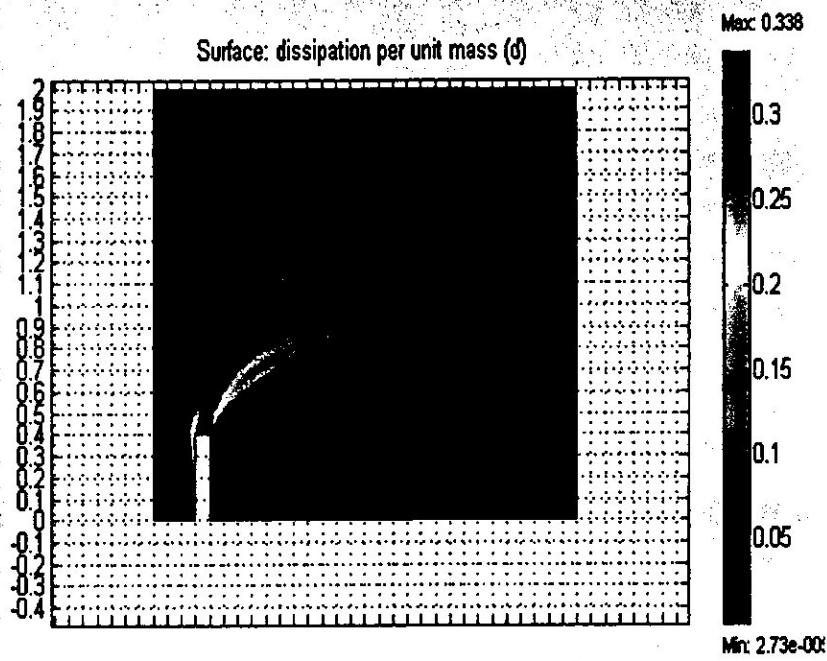


Figure VII-12.b: dissipation par unité de masse

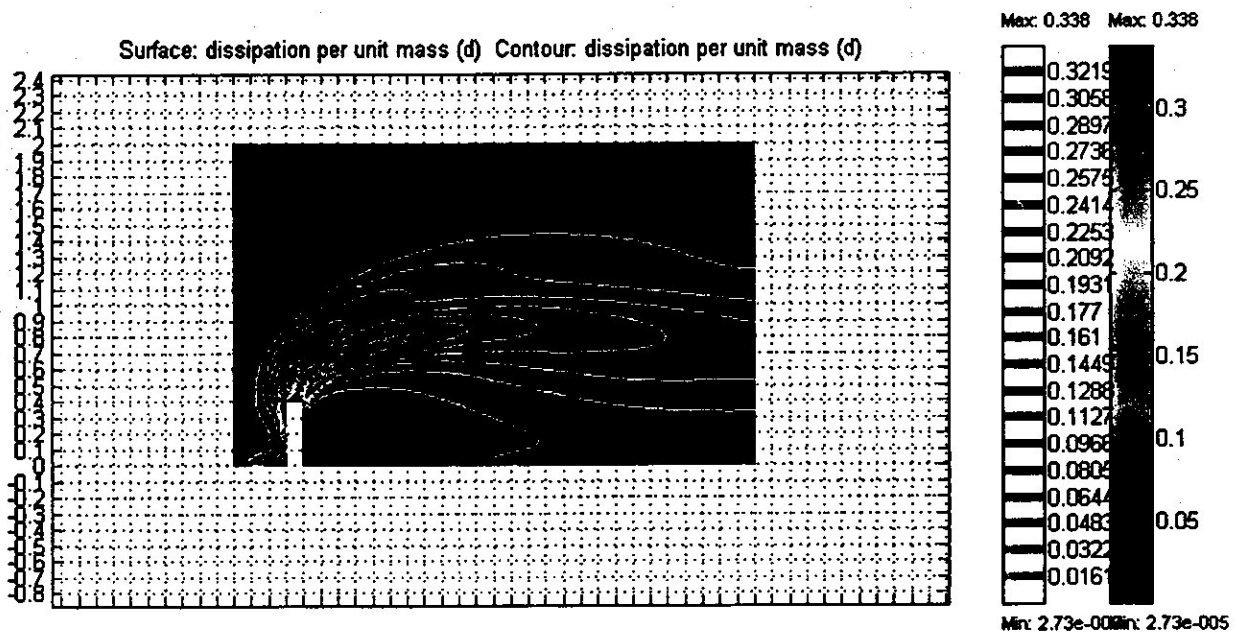


Figure VII.12.c Contour de la dissipation par unité de masse

Les deux figures (VII.12.a VII.12.c) illustrent les contours de l'énergie cinétique turbulente (k) et de sa dissipation (ϵ), les secteurs foncés représentent des régions où k et ϵ ont des valeurs plus élevées. On remarque que k est transporté en aval le long du domaine. Au contraire, une valeur maximum de ϵ est vue juste à la sortie du polluant. Cependant, elle disparaît lentement au fur et à mesure que l'écoulement progresse en aval.

Deuxième CAS TEST (Rue en U):

VII.II.1.Introduction :

A notre connaissance rare sont les modèles mathématiques de dispersion dans une rue ,qui donnent des teneurs dans l'ensemble de la rue ,a la suite d'une campagne de mesures (cf Joumard et coll) nous avons analyser et décrit dans ses lignes principales le champ de vitesse de l'ensemble de l'écoulement (air + polluants) nous citons par la suite une synthèse de connaissances ainsi acquises qui permette de connaitre le champ de vitesse en détail puis le champ de concentration de chaque espèce .

Nous nous intéressons dans ce cas TEST uniquement aux émissions mobiles dues au trafic automobile. Elles dépendent des paramètres suivants :

- le nombre de véhicules (volume de trafic) c.a.d le débit des véhicules puis par la suite la vitesse d'éjection des polluants.
- la vitesse du vent
- la disposition des immeubles dans la rue (leurs hauteurs)

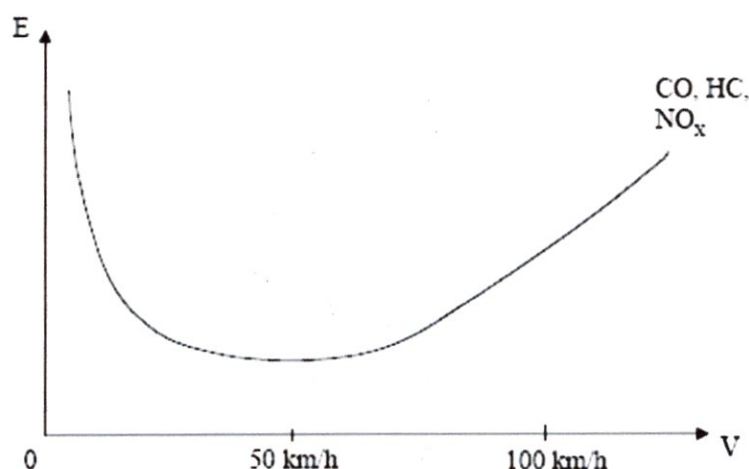


Figure VII.14 : relation vitesse / émission pour les véhicules et pour les principaux polluants

VII.II.1.2 Méthodologie pour un modèle d'émission :

Des paramètres précédemment exposés caractéristiques de l'émission de polluants par le trafic automobile, il découle qu'un modèle d'émission doit intégrer principalement deux types de données : un type dynamique qui donnera une image pour une échelle spatio-temporelle de l'état de la circulation (débit des véhicules) et un type statique qui décrit la disposition de la rue.

- Détermination des émissions totales :

Dans un premier temps, le choix de l'échelle spatiale s'impose. En terme de modélisation du trafic, on parle d'échelle microscopique lorsqu'on travaille à l'échelle du carrefour – c'est la même dénomination que pour l'étude des problèmes dynamiques – et de macro échelle lorsqu'on travaille à l'échelle d'une agglomération (elle correspond à la méso-échelle que nous avons définie précédemment).

- Approche microscopique :

Un modèle microscopique considère chaque véhicule en tant qu'entité individuelle ; il prend généralement en compte les caractéristiques techniques des véhicules, la position, la vitesse et l'accélération de chaque véhicule, la façon dont sont réglés les feux de signalisation, etc., de manière à pouvoir étudier finement une portion réduite du réseau de transport. Ces modèles se basent sur les comportements désagrégés des conducteurs (évaluation des obstacles, prise de risque, réflexes, etc.). Ils fournissent donc en sortie la position, la vitesse et l'accélération de chaque véhicule, données utilisables par un micro modèle d'émission. Pour chaque type de véhicule V, l'émission $E_{V,T}$ au cours du temps T pour un polluant donné P est donnée par la formule :

$$E_{V,T} = L_{V,T} \times Fem_P (Vt,A)$$

où Fem_P est le facteur d'émission unitaire moyen pour le polluant P fonction de la vitesse Vt et de l'accélération A du véhicule, et $L_{V,T}$ la longueur parcourue par le véhicule.

Cette information peut être utilisée de plusieurs manières. Il peut dans un premier temps être intéressant sur une zone donnée de comparer différents scénarii de gestion du trafic et d'évaluer leurs conséquences sur les émissions, sans faire de calcul de dispersion, plus lourd et complexe à mettre en place. Il faut à ce moment intégrer les sorties du modèle microscopique de trafic dans le temps et dans l'espace. Le pas de temps des modèles de trafic microscopique étant de l'ordre de la seconde, il faudra intégrer la formule précédente sur une durée plus longue, de l'ordre de l'heure ou de la fraction d'heure, ainsi que sur les véhicules se trouvant pendant la durée considérée sur une rue ou un carrefour.

Un tel modèle d'émission peut être partie intégrante du modèle de trafic ou être un programme séparé, analysant des fichiers de données issus des simulations de trafic. Si l'on souhaite étudier également la dispersion de la pollution, les sorties du modèle d'émission serviront de termes sources aux équations de transport.

Approche macroscopique :

Pour le niveau macroscopique, toutes les caractéristiques techniques des véhicules sont en général agrégées et contenues dans la description du système de transport, afin

de pouvoir examiner globalement les flux de circulation pour des réseaux de grande taille. Les carrefours et les feux de signalisation ne sont pas modélisés explicitement et dans certaines approches, il est fait une agrégation ou une fusion des véhicules ayant le même comportement : ils sont alors regroupés par paquets ou pelotons ou même représentés par une variable continue. Le modèle ainsi agrégé considère le trafic comme un flux et utilise la théorie de la dynamique des fluides pour obtenir des solutions. Le pas de temps est typiquement de l'ordre de l'heure. Sur un rue X de longueur L_X et pour une durée T, le modèle fournit alors le débit de véhicules $Q_{X,T}$. Ce type de modèle ne donnant pas l'accélération moyenne des véhicules, le facteur d'émission unitaire moyen F_{emP} utilisé doit donc être seulement fonction de la vitesse. L'émission d'un polluant P est alors donnée par la formule :

$$E_{X,T} = L_X \times Q_{X,T} \times F_{emP}(Vt)$$

VII.II.3 Modélisation de la dispersion :

Une fois connu le champ de vitesse, il est sans doute possible de résoudre numériquement les équations de transport pour obtenir les teneurs.

VII.II.4 Canyon Urbain

- Définition

Pour cette étude on a travaillé avec un modèle de dispersion développé pour une conception de rue connue comme *street canyon*. Ce terme définit idéalement une rue relativement étroite avec des bâtiments adjacents de hauteur conséquente alignés continuellement le long des deux côtés de la rue (Nicholson,1975) c'est une rue bordée des deux cotés et d'une manière continue d'immeuble de quelques étages ,hauteur des immeubles et largeur des rues étant proches ; ,les deux murs d'habitation sont périodiquement coupés par des voies transversales secondaires ., il ne permet pas une bonne dispersion des polluants qui restent enfermés dans la rue. La dispersion d'agents polluants gazeux dans un canyon urbain dépend généralement du taux avec lequel la rue échange l'air verticalement avec l'atmosphère au niveau du plafond, et latéralement par les rues avec lesquelles il est relié (Riain et l'al., 1998).

Cette dispersion dépend aussi d'autres facteurs comme: les aspects géométriques de la rue comme son orientation, la hauteur des bâtiments et la largeur de la rue (Hoydysh et Dabberdt, 1988), la turbulence induite par le trafic causée par la vitesse et la présence des véhicules, les variations du flux du trafic, la stabilité atmosphérique, les caractéristiques du trafic, la radiation solaire, et l'entrée de polluants des rues adjacentes (Chan et Kwok, 2000 ; Zoumakis, 1995).

- Avantages:

La configuration du canyon facilite la modélisation dans la mesure où les bâtiments diminuent les interactions de l'atmosphère qui est confinée dans ce canyon avec ses alentours. Dans l'ensemble, le modèle boîte et le modèle Street canyon ont largement été utilisés grâce à ses simples dérivations. Pour le cas du Street canyon, les variables considérées sont suffisantes pour induire d'importants phénomènes qui influencent dans le comportement des polluants dans les canyons urbains (Stein et Toselli, 1996 ; Berkowicz, 1997 ; Berkowicz et al., 1997 ; Vardoulakis et al., 2002 ; Vardoulakis et al., 2003).

Il y a une grande quantité de modèles de dispersion développés spécialement pour être utilisés pour les canyons urbains. Ils peuvent être utiles pour la mesure de la qualité de l'air et la gestion du trafic, pour les plans d'aménagements urbains, l'interprétation et la supervision des données, la prévision de la pollution, les études d'exposition de la population, etc. Bien qu'il n'y ait pas de distinctions nettes entre les diverses catégories de modèles, ceux-ci ont pu être classés dans des groupes selon leurs principes physiques ou mathématiques (réduire - changement d'échelle, caisse, gaussien, modelling Computational fluid dynamics (CFD)) et leur niveau de complexité (recherche, semi empirique, numérique).

- RESULTATS :

Nous présentons ci-dessous un certain nombre de résultats graphiques qui permettent d'illustrer les possibilités de notre programme.

On peut ainsi voir l'influence de la vitesse du vent, l'influence d'une diminution du trafic, d'une répartition du trafic sur un plus grand nombre de voies, enfin l'influence des dimensions de la rue.

-Les figures (VII.15, VII.16 & VII.20, VII.21) ci-dessus illustrent les concentrations de chaque espèce dans la rue en U dans les deux cas ($H1 < H2$ & $H1 > H2$) . Les concentrations des deux espèces (air et polluants) évoluent inversement de l'un par rapport à l'autre c.a.d la concentration de l'air diminue au fur et à mesure en descendant vers le bas contrairement aux polluants qui se sont concentrés dans cette zone ce la résulte de la recirculation (formation des tourbillons) de la 2^{ème} espèce ce qui implique que les polluants restent enfermés dans cette zone.

-les figures (VII.17, VII.18, VII.22, VII.23) illustrent les champs et les profils de vitesse pour les deux cas ($H1 < H2$ & $H1 > H2$), l'étude du vent à l'intérieur de la rue montre clairement l'existence d'un vortex, il apparait de plus que quelque soient la hauteur du toit et la direction du vent sur le toit, le vent dans la rue est surtout longitudinal et semble que près des façades les deux composantes du vent sur le toit se soient transformées en une composante longitudinale prépondérante et une composante transversale très faible.

VII.II.5 PRESENTATION GRAPHIQUE : (Les unités présentées ci dessous sont en système SI)

1^{er} cas $H1 < H2$

Figure VII.15 Concentration de la 1^{ème} espèce (AIR)

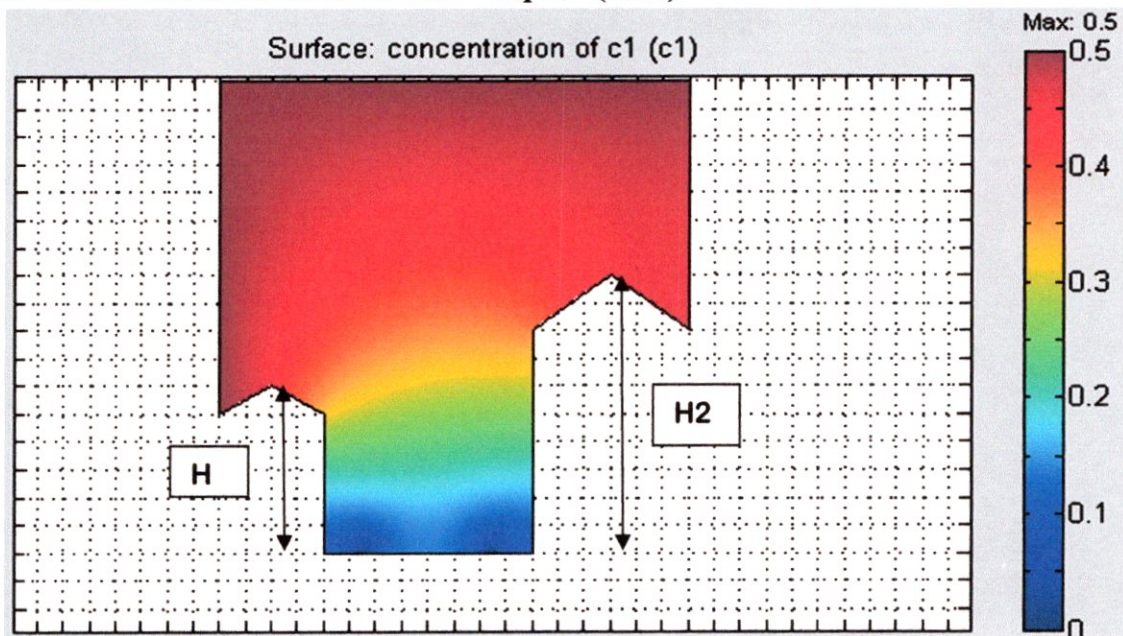


Figure VII.16 Concentration de la 2^{ème} espèce (polluants)

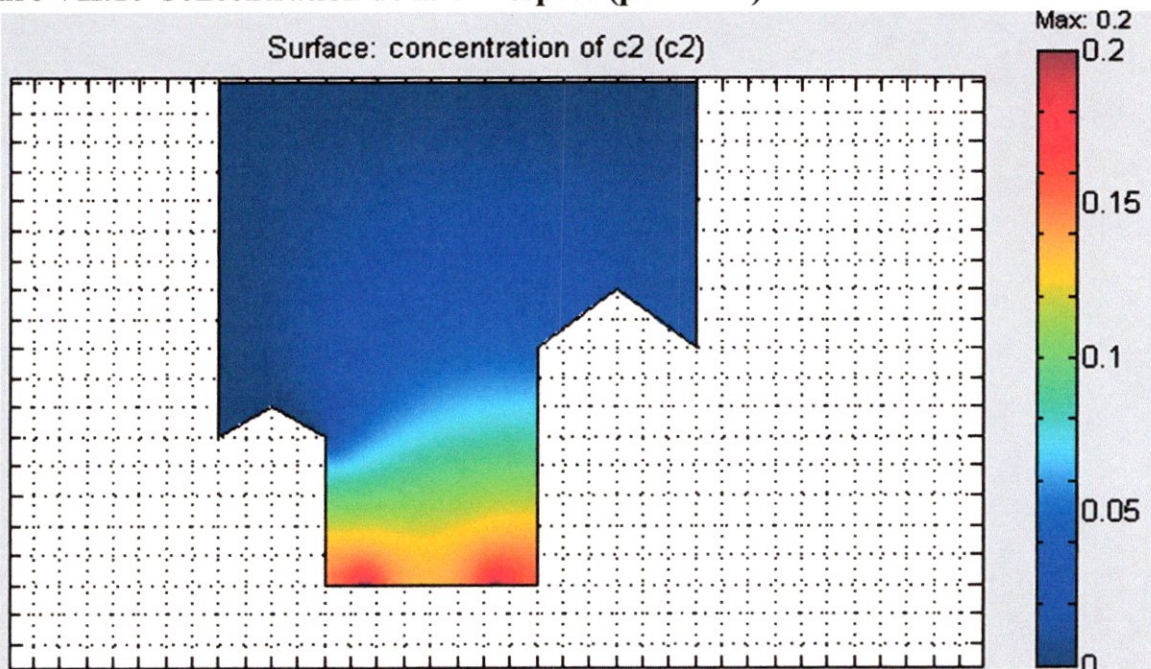


Figure VII.17 DIRECTION ET INENSITE DE LA VITESSE RESULTANTE

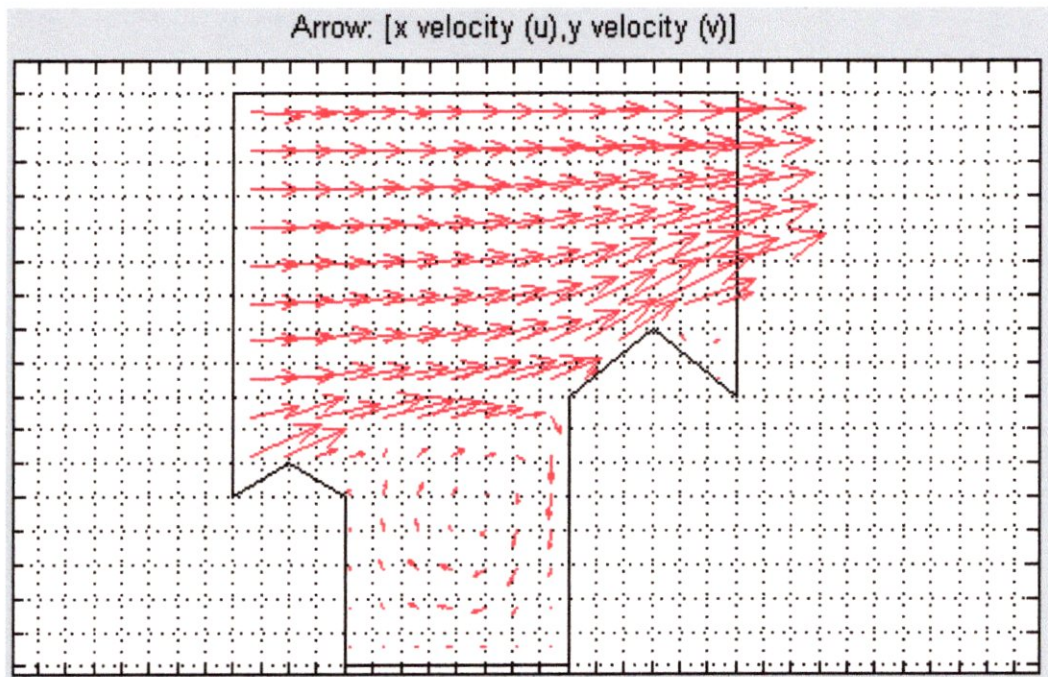


Figure VII.18 VISUALISATION DES LIGNES DE COURANT

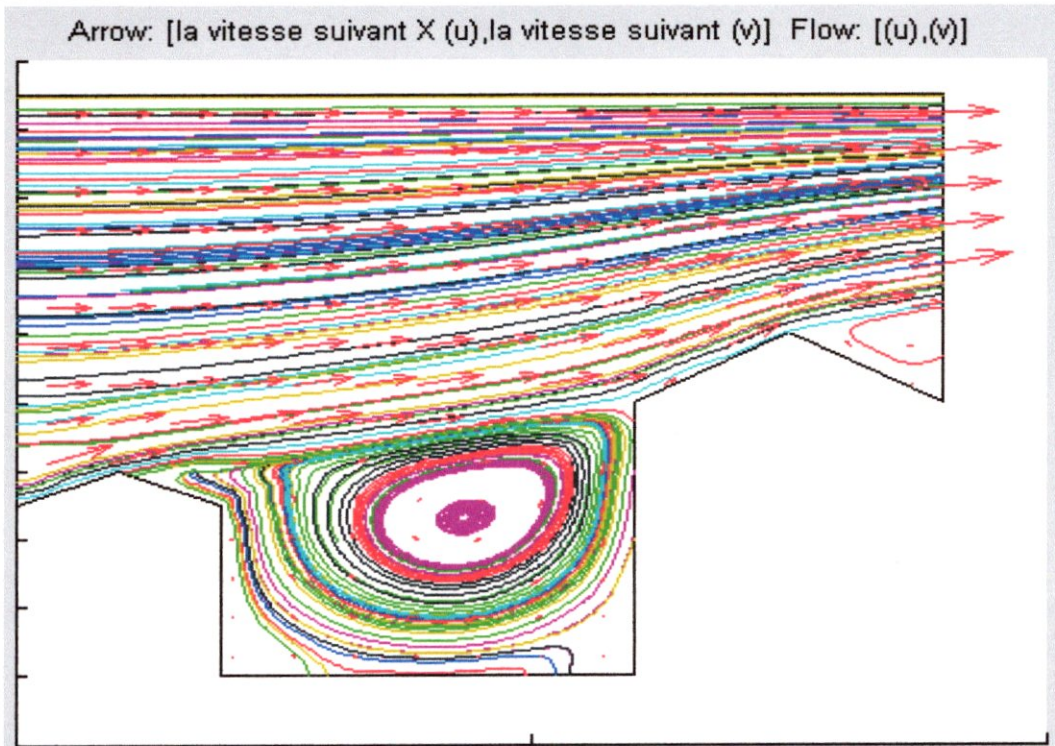
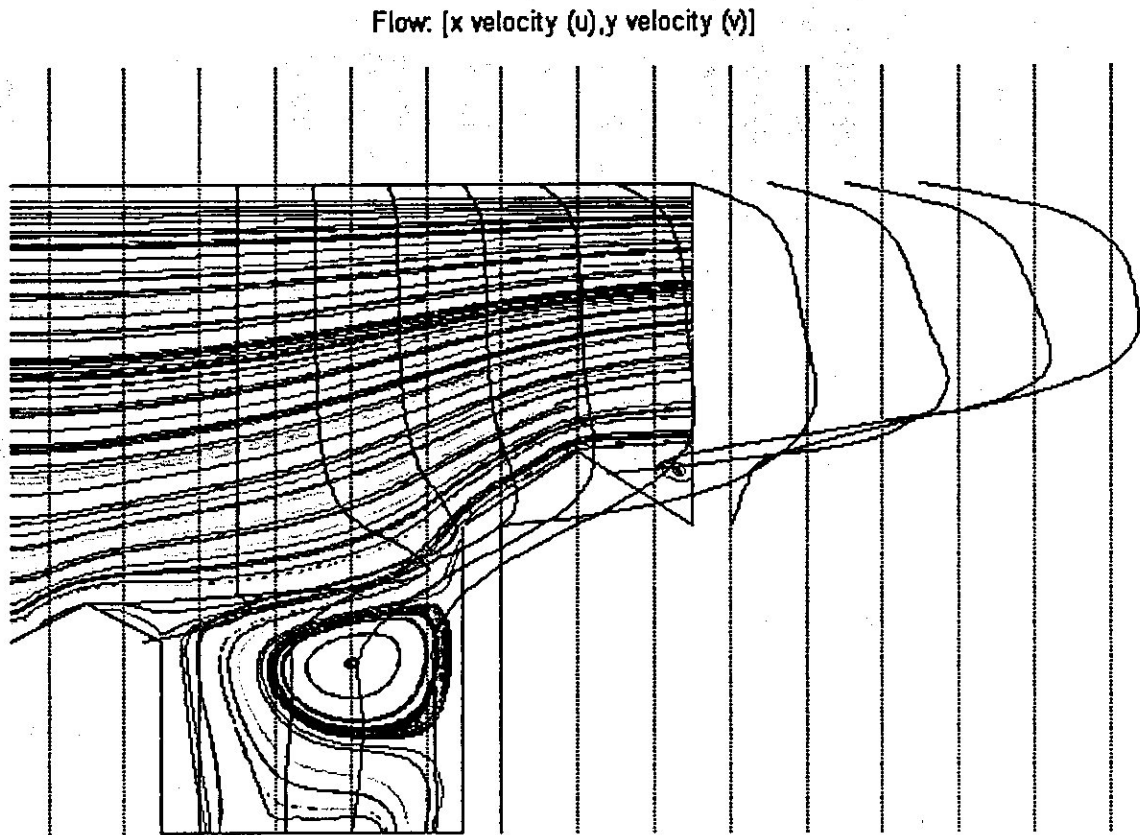


Figure VII.19 Profil de vitesse suivant y



2^{ème} cas $H1 > H2$

Figure VII.20 Concentration de la 1^{ème} espèce (AIR)

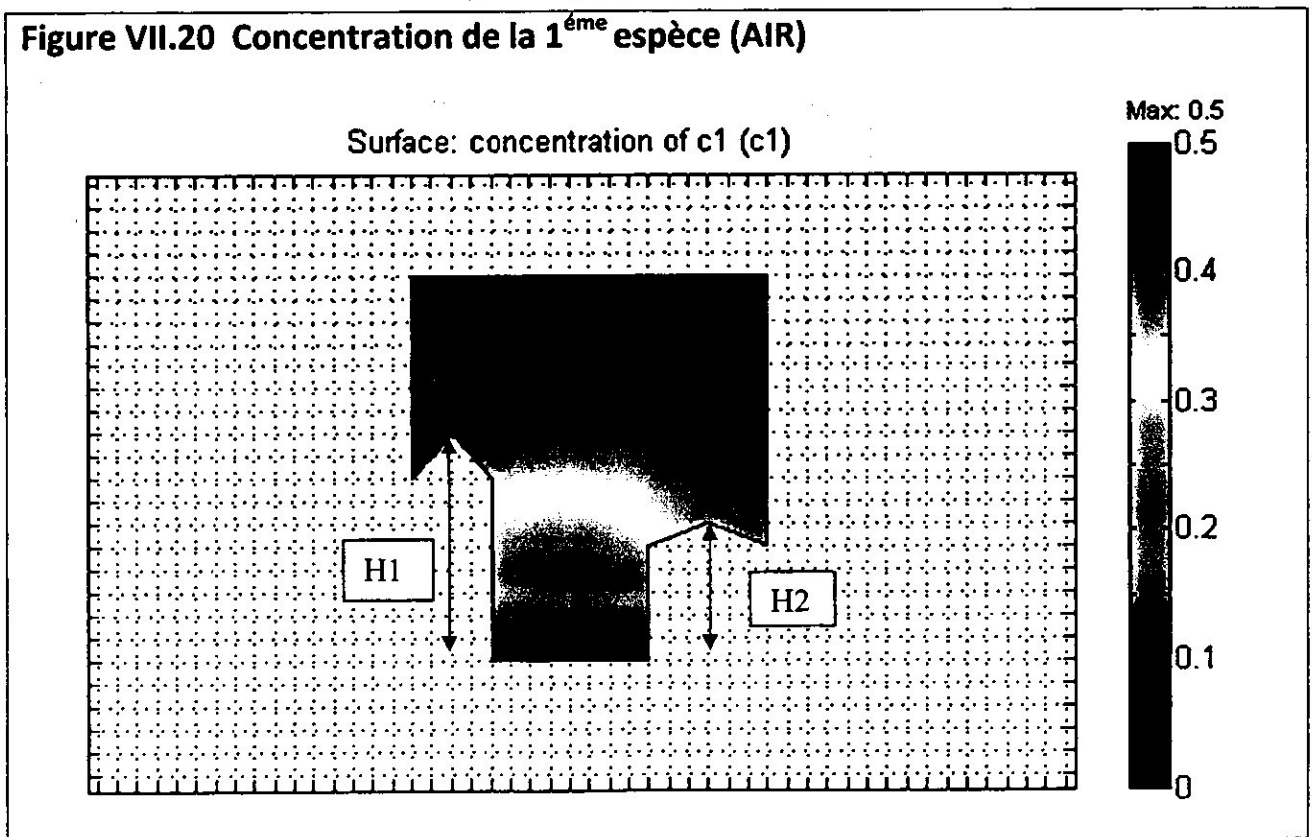


Figure VII.21 Concentration de la 2^{ème} espèce (polluants)

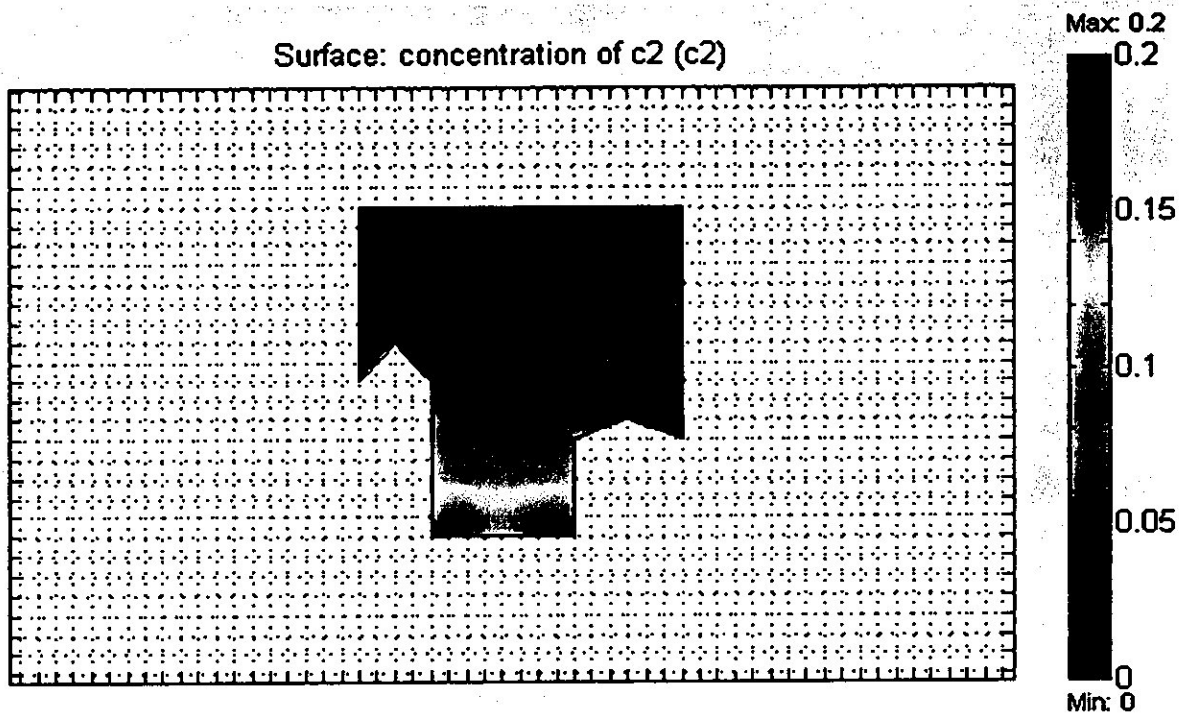


Figure VII.22 DIRECTION ET INTENSITE DE LA VITESSE RESULTANTE

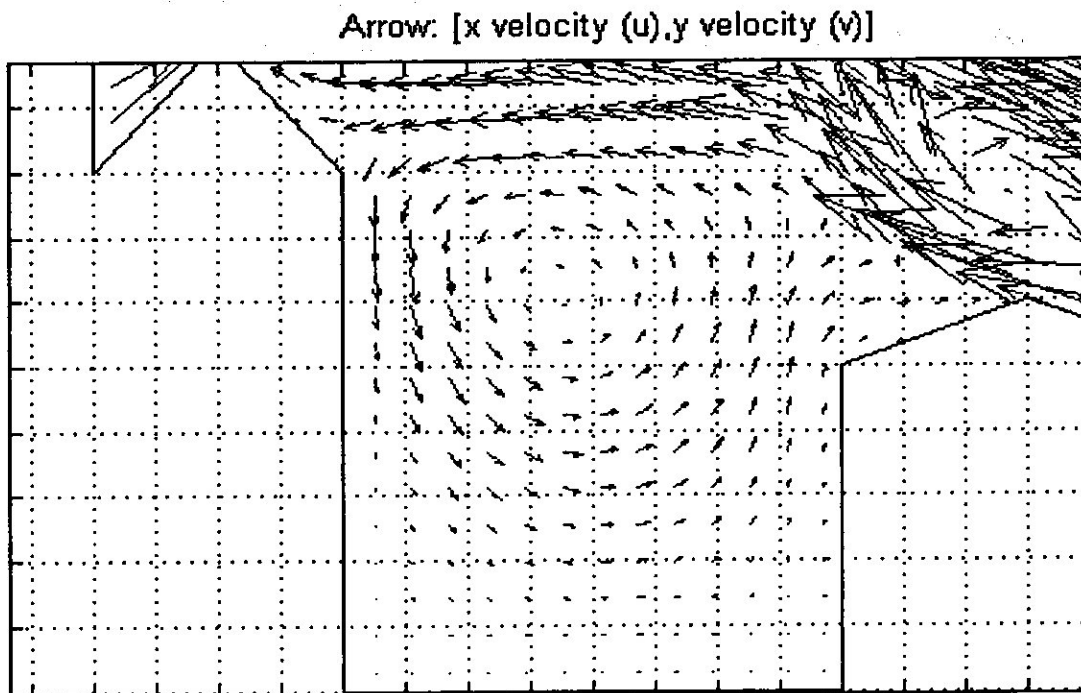
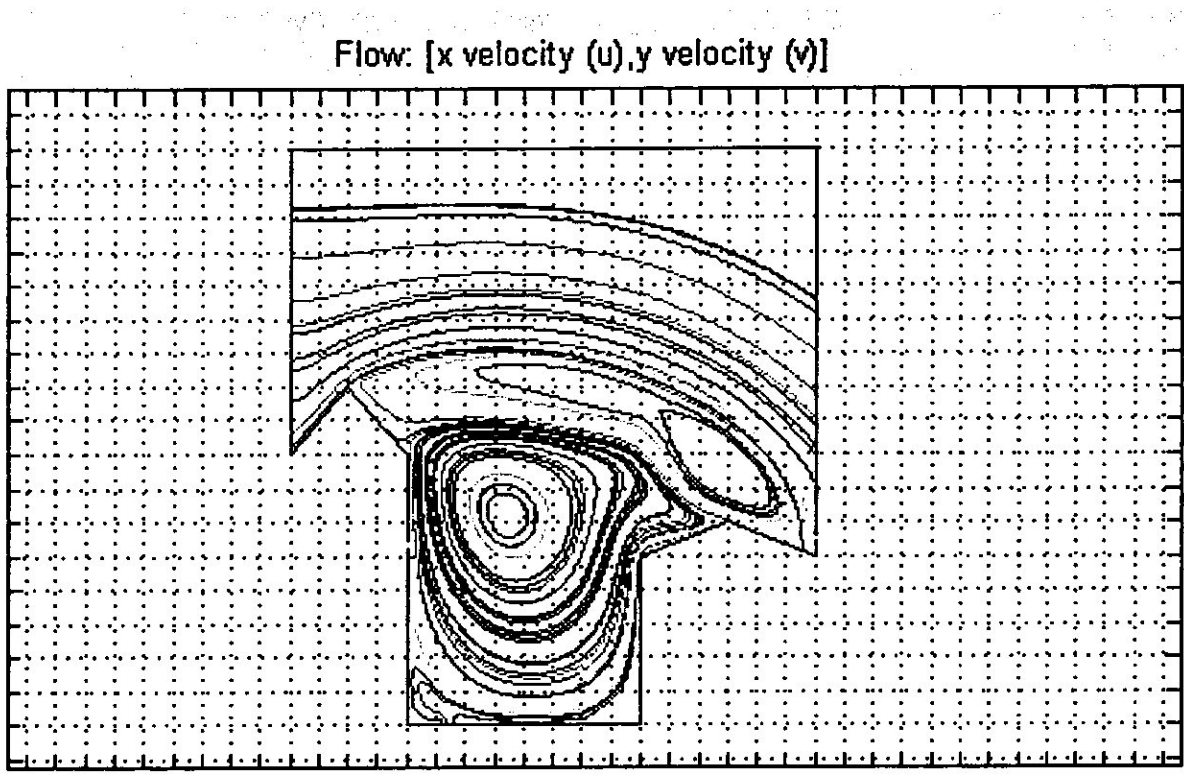



Figure VII.23 VISUALISATION DE L'ÉCOULEMENT





CONCLUSION
GÉNÉRALE
ET PERSPECTIVES

Conclusion Générale et Perspectives :

Ce travail de thèse répond à une problématique cruciale pour la dispersion des polluants : Élaborer un outil numérique capable de prédire la dynamique de la diffusion et la dispersion des différentes espèces gazeux et nous avons présenté l'état d'avancement de notre projet de modélisation de la pollution atmosphérique. Nous avons implanté des méthodes numériques qui permettent de résoudre le problème proposé : un modèle de chimie traitant un nombre quelconque d'équations de transport couplées par une cinétique chimique.

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

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

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

Enfin la réduction des émissions entrainera une amélioration de la qualité de l'air dans la région ce qui évitera les nuisances observées jusqu'à présent.

Et Nous avons présenté dans cette thèse une modélisation des émissions des polluants dans l'atmosphère par une cheminée et dans une rue en U. La formulation mathématique ne représente pas des difficultés majeures. Le problème consiste plutôt en une bonne description des caractéristiques de chaque cas TEST (les conditions aux limites).

POUR LE 1^{er} ces TEST :

Les mesures effectuées révèlent que l'unité de sublimation de soufre de Béni-Mered est à l'origine d'une importante pollution locale par le dioxyde de soufre. Parallèlement cette unité est une source d'une autre forme de pollution particulaire, l'émission de fines particules de soufre qui sont entraînées lors de l'opération de dégazage vers l'atmosphère extérieure par la cheminée.

Les fréquentes plaintes de la population avoisinante témoignent largement la nuisance provoquée par les émissions de cette unité surtout par période de stagnation atmosphérique en absence d'une étude épidémiologique dans la région, il serait très difficile d'appréhender la part de contamination des habitants de la région, il serait très difficile d'estimer le nombre de personnes affectées par la présence du soufre et du dioxyde de soufre dans cette région.

Aussi et à la lumière des résultats obtenus, il est indispensable de veiller au stricte respect des mesures de sécurité (port de masque à gaz, réduire au minimum la durée d'exposition des ouvriers), comme il est urgent d'équiper l'atelier des fours d'un dispositif adéquat de ventilation et d'aspiration des gaz en vue de leur éventuelle traitement de dépollution.

Pour le 2^{ème} cas TEST

Le modèle Canyon de dispersion de polluants dans une rue en U est descriptif il est formé de deux parties indépendantes.

- la première partie calcule le champ de vitesse du vent par la résolution des équations de Navier Stokes.
- dans la deuxième partie, une fois connu le champ de vitesse, il est sans doute possible de résoudre numériquement les équations de transport pour obtenir les teneurs.

Le modèle de "la rue en U" est sans doute plus adapté à des comparaisons de situations :

- conséquence due à une variation du trafic, à une augmentation ou à une diminution du nombre de voies : notons au passage que le modèle ne calcule pas les émissions du trafic qui sont des données d'entrée.
- Variation des vitesses du vent.
- Variation des dimensions de la rue.

Bilan :

Ce travail de thèse apporte des éléments supplémentaires pour la compréhension des phénomènes mis en jeu dans une diffusion des polluants et leurs interactions. La simulation aux grandes échelles améliore la compréhension des phénomènes qui permettent d'appréhender les modèles à mettre en œuvre pour mieux capturer la physique.

Perspectives :

Et enfin nous souhaitons d'étudier ce modèle de dispersion en 3D avec des paramètres réels et de mettre notre étude dans la pratique afin de comparer les résultats de simulation, mais vu les moyens de calcul disponibles nous étions obligés de limiter notre domaine d'étude.

Cette thèse nous facilite la recherche des nouvelles performances soit dans le domaine aéronautique (amélioration des chambres de combustion) à titre d'exemple (SAC → DAC, combustion en mélange pauvre avec une chambre de combustion variable) ou bien dans le domaine industriel pour une production dans les meilleures conditions environnementales.

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

- le tenseur de Reynolds est symétrique :

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

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

→ Problème de fermeture des équations (modèle de turbulence)

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

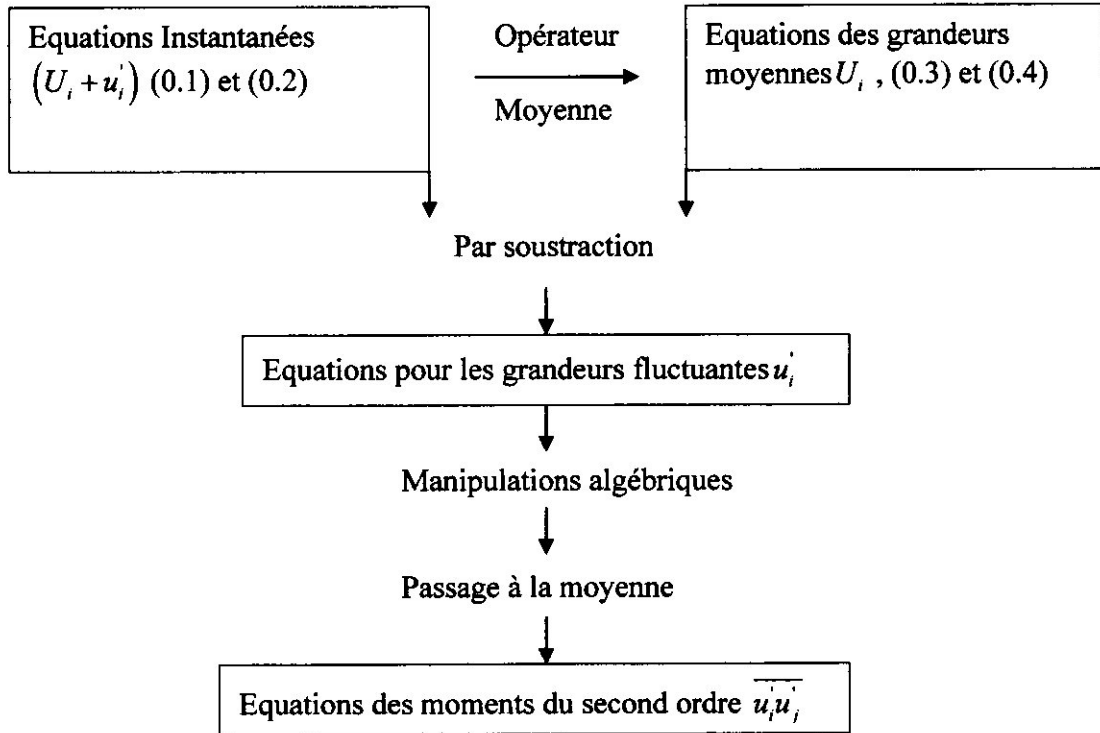
→ Forte influence des tensions de Reynolds sur le champ moyen.

Equations des grandeurs fluctuantes :

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

Equation de transport des tensions de Reynolds :

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



Détails des calculs :

On part de l'équation (0.2)

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

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

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

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

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

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

$$\frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial t} + U_k \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_k} + \overline{u_k u_j} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \overline{u_k u_i} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} + \frac{\partial \overline{u_i u_j u_k}}{\partial x_k} - \overline{u_j} \frac{\partial \overline{u_i u_k}}{\partial x_k} - \overline{u_i} \frac{\partial \overline{u_j u_k}}{\partial x_k} = -\frac{1}{\rho} \left(\overline{u_j} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \overline{u_i} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} \right) + \nu \left(\overline{u_j} \frac{\partial^2 \overline{u_i}}{\partial x_k \partial x_k} + \overline{u_i} \frac{\partial^2 \overline{u_j}}{\partial x_k \partial x_k} \right)$$

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

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

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

$$\frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial t} + U_k \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_k} = P_{ij}^u + T_{ij}^u + \Pi_{ij}^u + D_{ij}^u - \varepsilon_{ij}^u \quad (0.10)$$

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

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

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

Remarques :

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

-corrélations triples : $\overline{u'_i u'_j u'_k}$

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

-corrélation gradient de vitesse : $\overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}}$

Le problème de fermeture est alors repoussé et reste entier.

Equation de l'énergie cinétique fluctuante :

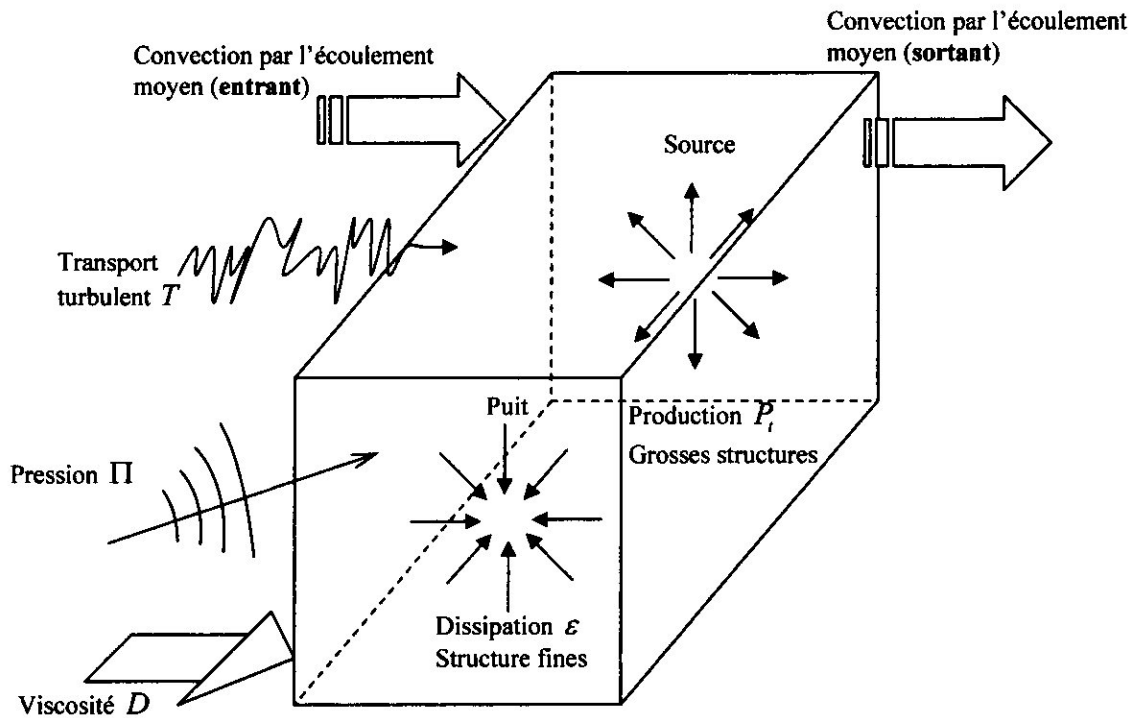
En imposant $i = j$ dans l'équation des tensions de Reynolds (0.10), on obtient l'équation pour

l'énergie cinétique fluctuante, $k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i}$.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_k \frac{\partial k}{\partial x_k} = \overbrace{-\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial U_i}{\partial x_k}}^{P_t} - \overbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j u'_k}}{\partial x_k}}^T - \overbrace{\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{u'_k p'}}{\partial x_k}}^{\Pi} + \overbrace{v \frac{\partial^2 k}{\partial x_k \partial x_k}}^D - \overbrace{v \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k}}^{\varepsilon} \quad (0.11)$$

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

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



Les problèmes de fermeture des équations :

Bilan des équations et des inconnues :

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

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

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

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

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

Critères de choix et classification :

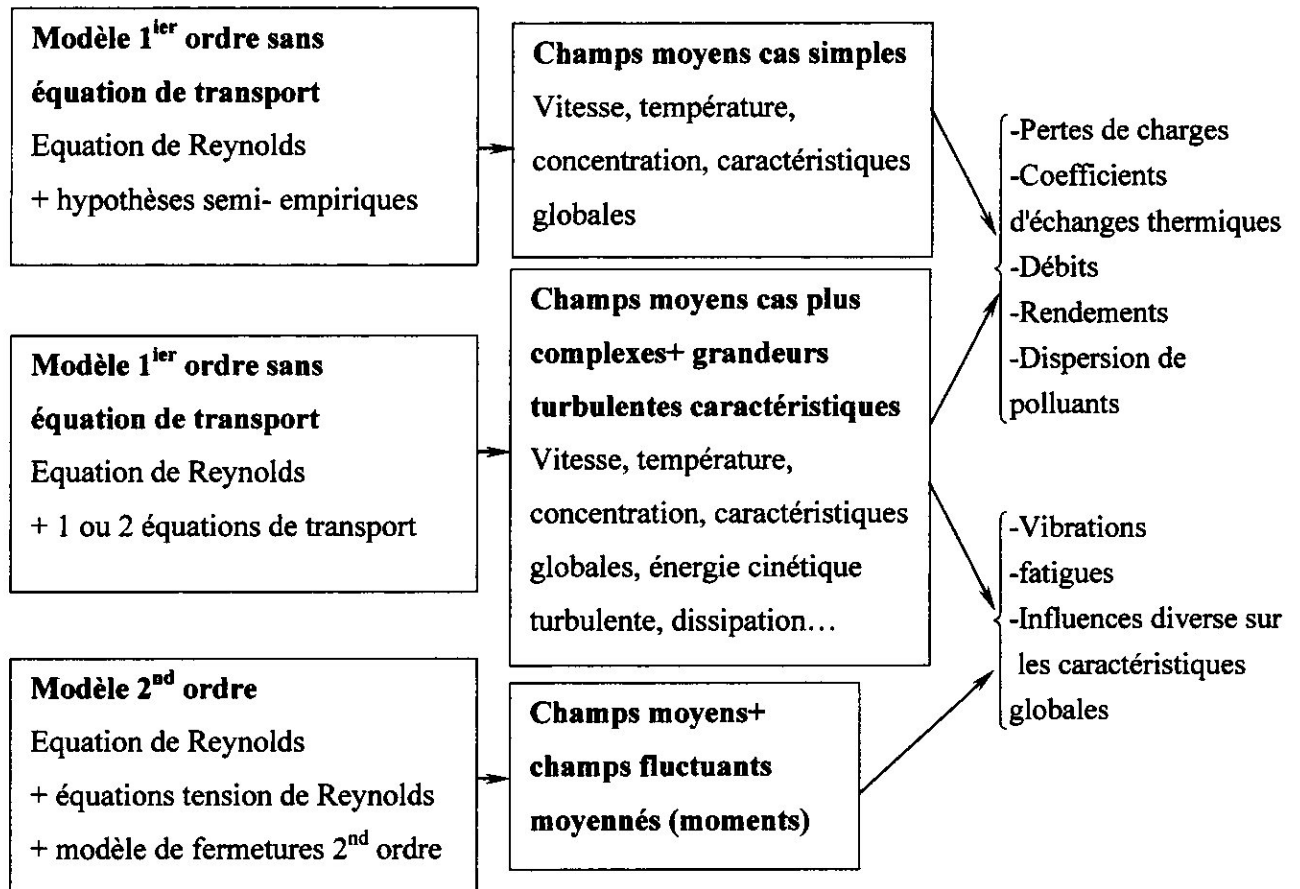
On distingue deux grandes catégories de modélisation :

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

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

-0 équation (longueur de mélange)	} Modèle du 1 ^{er} ordre
-1 équation (k, énergie cinétique turbulente)	
-2 équations ($k - \varepsilon, k - w, \dots$)	
-7 équations ($R_y - \varepsilon, \dots$)	} Modèle du 2 ^{ème} ordre

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



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

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

Concept de viscosité turbulente : l'hypothèse de Boussinesq :

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

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

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

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

Avec :

μ_t : Viscosité turbulente

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

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

Remarques sur l'hypothèse de Boussinesq

Cette hypothèse est très facile à mettre en défaut :

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

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

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

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

On a alors dans ce cas :

$k = \frac{1}{2} (\overline{u'u'} + \overline{v'v'} + \overline{w'w'}) = 0$, l'énergie cinétique turbulente serait nulle (absurde). Pour éviter

ce résultat, on retranche couramment la trace du tenseur :

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

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

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

De façon générale, on observe ;

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

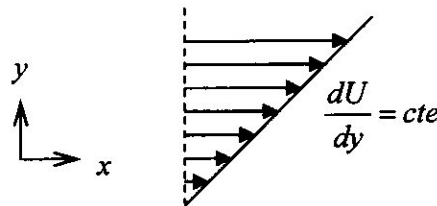
D'autres formulations semi-empiriques existent, elles sont basées pour la plupart sur des résultats expérimentaux. Leurs applications restent donc très spécifiques.

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

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

Idées directives pour la construction de μ_t :

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



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

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

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

Par définition :

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

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

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

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

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

On obtient une expression de la viscosité turbulente :

$$\mu_t = \rho c \frac{k^2}{\varepsilon} \quad \text{ou encore} \quad \nu_t = c \frac{k^2}{\varepsilon}$$

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

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

L'équation pour k

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

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \overbrace{-\overline{u_i u_j}}^{\text{à modéliser}} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \overbrace{\frac{1}{2} \overline{\partial u_i u_i u_j}}^{\text{à modéliser}} - \overbrace{\frac{1}{\rho} \overline{\partial u_j p}}^{\text{à modéliser}} + \nu \frac{\partial^2 k}{\partial x_j \partial x_j} - \varepsilon$$

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

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

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

Le deuxième terme peut être reformulé

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

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

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

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

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

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

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

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

L'équation pour ε

L'équation exacte de ε s'écrit

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + U_k \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} &= \overbrace{-2\nu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u'_k}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} \right)}^{\text{à modéliser}} - \overbrace{2\nu u'_k \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_k}}^{\text{à modéliser}} \\
 &\quad - \underbrace{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_k}{\partial x_j}}_{\text{à modéliser}} - \underbrace{\frac{\partial u'_k \varepsilon'}{\partial x_k}}_{\text{à modéliser}} - \underbrace{2 \frac{\nu}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p'}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)}_{\text{à modéliser}} \\
 &\quad + \nu \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x_k \partial x_k} - \underbrace{2\nu^2 \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_k} \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_k}}_{\text{à modéliser}}
 \end{aligned}$$

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

$$\varepsilon' = \nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}$$

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

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

Remarques :

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

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

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

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

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

Les 6 équations disponibles sont :

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

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

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

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

Le problème est fermé

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

calculs issus du modèle \Leftrightarrow expériences

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

Les valeurs les plus courantes sont :

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

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

Le Model $k - \varepsilon$ Standard

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

Dans la dérivation du modèle $k - \varepsilon$ standard, on l'a supposé que l'écoulement est entièrement turbulent, et les effets de la viscosité moléculaire sont négligeables.

Equations de Transport pour le Model $k - \varepsilon$ Standard

L'énergie cinétique turbulente k , et son taux de dissipation ε , sont obtenus à partir des équations de transport suivantes :

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

Et

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

Dans ces équations, G_k représente la génération de l'énergie cinétique turbulente due aux gradients de vitesses moyennes, G_b est la génération de l'énergie cinétique turbulente due à la flottabilité, Y_M représente la contribution de la dilatation de fluctuation dans la turbulence compressible au taux global de dissipation. S_k et S_ε sont les termes source définies pour l'utilisateur.

Modélisation de la viscosité Turbulent

La viscosité turbulente μ_t , est calculée par la combinaison de k et ε comme suit :

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

Où C_μ est une constante.

Les constantes du modèles $C_{1\varepsilon} = 1.44$, $C_{2\varepsilon} = 1.92$, $C_\mu = 0.09$, $\sigma_k = 1.0$ et $\sigma_\varepsilon = 1.3$.

Ces valeurs par défaut ont été déterminées à partir des expériences avec de l'eau, l'air et pour des écoulements turbulents fondamentaux cisailés comprenant des écoulements homogènes

et la turbulence isotrope. Elles se sont avérées pour fonctionner assez bien pour un éventail de mur délimité et des écoulements de cisaillement libre.

Modélisation des termes de production turbulente pour le modèle $k-\varepsilon$:

Le terme G_k , représentant la production de l'énergie cinétique turbulente, ce terme peut être définie comme :

$$G_k = -\overline{\rho u_i u_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$$

Pour évaluer G_k en quelque sorte conformé à l'hypothèse de Boussinesq,

$$G_k = \mu_t S^2$$

Où S est le module du tenseur moyen de taux de contrainte de déformation, défini comme

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$$

L'effet de la flottabilité sur la turbulence dans le modèle $k-\varepsilon$ standard:

Quand un champ de gravité différent de zéro et un gradient de température sont présent simultanément, le modèle $k-\varepsilon$ expliquent la génération G_b d'en raison de la flottabilité, et la contribution correspondante à la production de ε . La génération de la turbulence due à la flottabilité est donnée :

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

Où Pr_t est le nombre de Prandtl turbulent et g_i est la composante de la gravité dans la direction i , β Le coefficient de dilatation thermique, est défini comme

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p$$

Pour les gaz idéaux, l'expression de G_b réduit à:

$$G_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho Pr_t} \frac{\partial \rho}{\partial x_i}$$

Il peut voir des équations de transport pour k que l'énergie cinétique turbulente tend à être augmentée ($G_b > 0$) dans la stratification instable. Pour la stratification stable, la flottabilité tend à supprimer la turbulence ($G_b < 0$).

Les effets de la flottabilité sur la génération de k sont toujours inclus quand tu as un champ de pesanteur différent de zéro et un gradient de température différent de zéro. Tandis que les effets de flottabilité sur la génération de k sont comprise relativement bonne, l'effet ε est allumé moins clair Le degré qui affecte l'effet de la flottabilité sur ε est la constante $C_{3\varepsilon}$.

Effets de la compressibilité sur la turbulence dans le modèle k - ε standard :

Pour des écoulements à grand nombre de Mach, la compressibilité affecte la turbulence par le prétendu "dissipation de la dilatation", qui est normalement négligé dans le modèle des écoulements incompressibles. Négliger la dissipation de la dilatation et ne prévoit pas la diminution observée dans le taux de propagation avec l'augmentation du nombre de mach pour le mélange compressible et d'autres couches de cisaillement libres. Pour expliquer ces effets en modèle $k - \varepsilon$, le terme de dissipation de la dilatation Y_M , est inclus dans l'équation de K . Ce terme est modélisé selon une proposition par Sarkar :

$$Y_M = 2\rho\varepsilon M_t^2$$

Où M_t est le nombre de mach turbulent, défini comme:

$$M_t = \sqrt{\frac{k}{a^2}}$$

Où $a = \sqrt{\gamma RT}$ est la vitesse du bruit.

Cette modification de compressibilité a toujours effet quand la forme compressible de la loi des gaz parfait.

Il existe d'autres modèles développé se basant sur le modèle $k - \varepsilon$, on site :

- * Le modèle $k - \varepsilon$ RNG (Renormalisation Groupe).
- * Le modèle $k - \varepsilon$ réalisable.

Introduction :

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

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

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

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

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

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

Rappel des équations instantanées

Equations principales:

- incompressibilité (continuité):

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

- Navier-stokes

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

Les équations de mouvement moyen :

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

Incompressibilité du champ moyen :

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

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

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

Navier-Stokes moyennée

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

Remarques :

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

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

On définit le tenseur de Reynolds :

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

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

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

SAMASAFIA



II.2.1 Présentation de l'indice de qualité de l'air

La définition d'un indice de qualité de l'air résulte de la volonté de rendre l'information accessible au plus grand nombre sans entrer dans des considérations scientifiques parfois complexes. Cet indice est une appréciation qualitative de la qualité de l'air qui a peu de valeur scientifique. En effet, il synthétise en un seul paramètre les résultats pour des polluants dont les effets sur la santé peuvent être très différents et définit la qualité de l'air par rapport au polluant pour lequel la situation est la pire. On compare donc des choses très différentes et il ne faut en aucun cas commencer à établir des statistiques sur ces indices. Les indices ne remplacent en aucun cas les rapports et les interprétations doivent toujours s'effectuer à partir des données.

Il existe plusieurs façons de définir ces indices. Dans ce document, nous utiliserons les indices tels qu'ils sont publiés quotidiennement pour Alger sur le site Internet de SAMASAFIA (<http://www.SAMASAFIA.dz>).

Ces indices sont basés sur les teneurs en ozone, dioxyde d'azote, dioxyde de soufre et les particules PM10. Ils ne tiennent donc pas compte des composés en métaux lourds ou organiques dont les effets résultent plutôt (mais pas toujours) d'une exposition à long terme. Les indices portent donc sur les principaux polluants irritants. Pour chacun des polluants, on définit une échelle de concentrations pour calculer un sous-indice. Les échelles de concentrations sont basées à la fois sur les valeurs limites imposées par les directives internationales et sur l'historique des données (Tableau 1). L'indice de qualité est alors déterminé comme étant le sous-indice le plus élevé, donc la qualité la plus médiocre. Si l'un des sous-indices manque, l'indice global n'est pas calculé et il faut au minimum 50 % de données valides pour calculer un sous-indice. Dans ce rapport, nous n'utiliserons que les sous-indices pour justement éviter de mélanger des notions différentes. Dans la première partie du rapport (analyse par polluant), nous nous référerons au Tableau 1 pour établir une répartition des jours selon les catégories définies pour les sous-indices,

station par station, la définition d'un indice unique pour toute la Région étant une notion trop réductrice qui ne traduit pas les différences locales.

Polluant		(µg/m ³)									
SO ₂	Moy. 24 h	0 -> 15	-> 30	-> 45	-> 60	-> 80	-> 100	-> 125	-> 165	-> 250	>250
NO ₂	Max. 1 h	0 -> 25	-> 45	-> 60	-> 80	-> 110	-> 150	-> 200	-> 270	-> 400	>400
O ₃	Max 8 h	0 -> 30	-> 45	-> 60	-> 80	-> 100	-> 120	-> 150	-> 200	-> 270	>270
PM10	Moy. 24 h	0 -> 10	-> 20	-> 30	-> 40	-> 50	-> 70	-> 100	-> 150	-> 200	>200
Indice		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Appréciation		Excellent	Très bon	Bon	Assez bon	Moyen	Médiocre	Très médiocre	Mauvais	Très mauvais	Exécrable

Tableau 1 : Définition des indices de pollution

Fig 7. La Zone fréquemment touchée par la pollution par l'ozone durant l'année 2006



Mécanisme des pics

Lorsque plusieurs jours de pics d'ozone se succèdent, les niveaux de pollution ont tendance à augmenter de jour en jour. En effet, ces pics ont lieu lorsque les brises de mer sont bien établies. Ces brises soufflent de la mer vers la terre dans la journée, et de la terre vers la mer la nuit. Cette « balance des brises » déplace une même masse d'air selon un mouvement pendulaire tandis que cette masse d'air se recharge en polluants à chaque passage au-dessus des zones émettrices de pollution :

Jour 1, journée : les masses d'air sont déplacées depuis les principaux pôles émetteurs de pollution vers l'arrière. Les polluants de ces masses d'air se transforment en polluants photochimiques (dont l'ozone) sous l'effet du soleil.

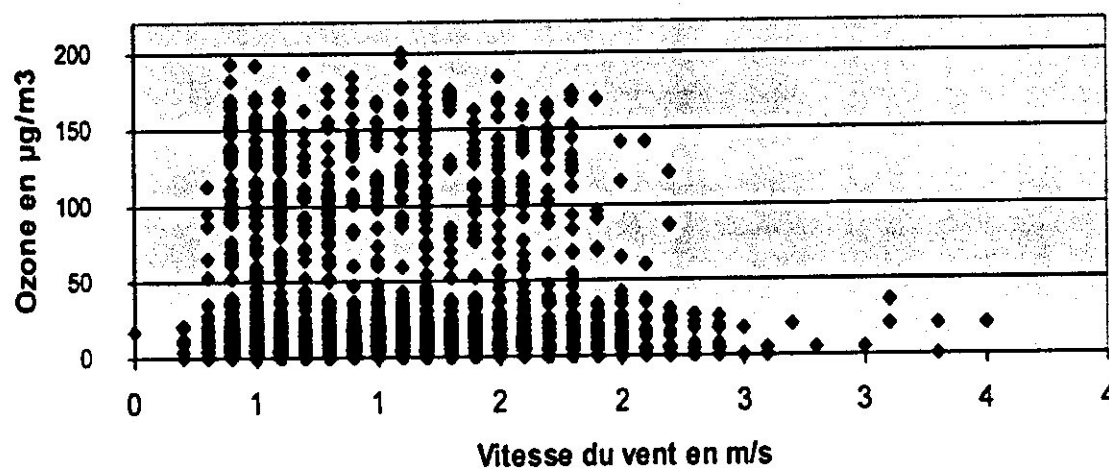
Jour 1, nuit : les brises de terre repoussent les masses d'air déjà polluées vers la côte qui se rechargent en polluants en passant à nouveau sur les pôles émetteurs de pollution. La masse d'air résultante stagne toute la nuit au-dessus de la côte et de la mer. La nuit, les polluants photochimiques se dégradent et se transforment en d'autres polluants oxydants.

Jour 2, journée : Cette même masse d'air, alimentée par deux jours de pollution et plus polluée qu'au début, part à nouveau vers les terres. La pollution photochimique est intense, avec des niveaux d'ozone plus élevés.

IV.3. Vitesse du vent

La vitesse du vent joue un rôle important sur les conditions de dispersion. Au niveau des fortes concentrations, on remarque une augmentation jusqu'à des vitesses de vent atteignant 4 à 6 m/s, puis la tendance s'inverse et les concentrations semblent diminuer à mesure que la vitesse du vent augmente. La diminution est facile à comprendre par une plus grande turbulence, donc une meilleure dilution du polluant. L'augmentation des concentrations avec la vitesse du vent peut s'expliquer par un apport de polluant, provenant de couches plus élevées de l'atmosphère, durant une période de forte turbulence. Cette hypothèse permet également d'expliquer la raison de l'absence de concentrations faibles pour des vitesses de vent élevées.

Figure : Variation des concentrations en ozone en fonction de la vitesse de vent durant l'été 2006 au niveau de BEN AKNOUN



La vitesse du vent n'est qu'un des paramètres influençant les concentrations en ozone et ne constitue pas en soi une condition suffisante : il peut y avoir des fortes vitesses de vent sans pour autant enregistrer des fortes concentrations en ozone.

On remarque la diminution de la proportion de valeurs élevées en ozone avec la vitesse du vent, grâce à une meilleure dilution.

Rose des vents et Rose des pollutions :

Mode de construction d'une rose des vents

Une rose des vents est construite à partir des données météorologiques. Ces données comprennent les vitesses et provenances des vents pour chaque heure. Une fois éliminée les données pour lesquelles les vitesses de vents sont trop faibles, les données sont classées afin de déterminer la fréquence d'occurrence pour chaque direction (de 0 à 350°). Ces tableaux et roses des vents servent à caractériser globalement les périodes de mesures.

Tableau. Représentation des vitesses de vent en fonction de la direction

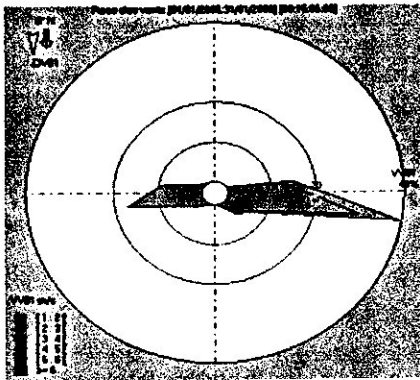
Vitesse \ Secteur géographique	[0 : 2[[2 : 3[[3 : 4[[4 : 5[[5 : 6[> 6	Cumul
[350 : 10[
[10 : 30[2,1						2,1
[30 : 50[8,3						8,3
[50 : 70[2,1						2,1
[70 : 90[
[90 : 110[
[110 : 130[1,0						1,0
[130 : 150[2,1						2,1
[150 : 170[1,0						1,0
[170 : 190[4,2						4,2
[190 : 210[4,2						4,2
[210 : 230[
[230 : 250[1,0	2,1	2,1				5,2
[250 : 270[3,1	17,7	22,9	5,2			49,0
[270 : 290[4,2	3,1					7,3
[290 : 310[2,1						2,1
[310 : 330[5,2						5,2
[330 : 350[6,2						6,2
Cumul	46,9	22,9	25,0	5,2			100%

La classification des données est programmable selon :

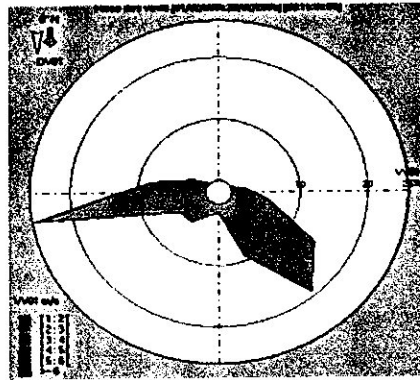
- Les intervalles de vitesse de vent ;
- Les intervalles de concentrations ;
- Les seuils minima ;
- Les nombres d'occurrences, les moyennes, les pourcentages

La rose des vents mensuels enregistrés durant l'année 2006 au niveau de station du 1^{er} MAI

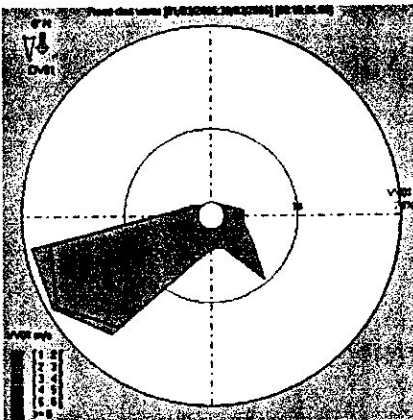
Le mois de janvier



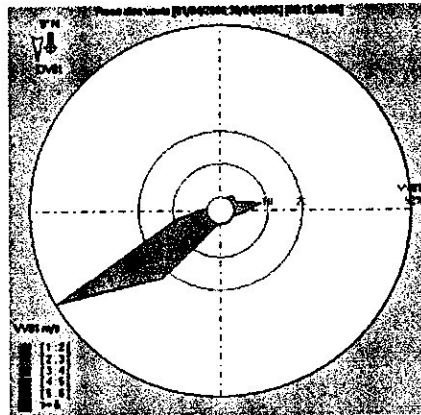
le mois de février



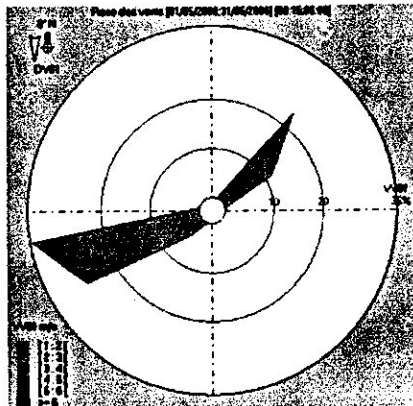
Le mois de Mars



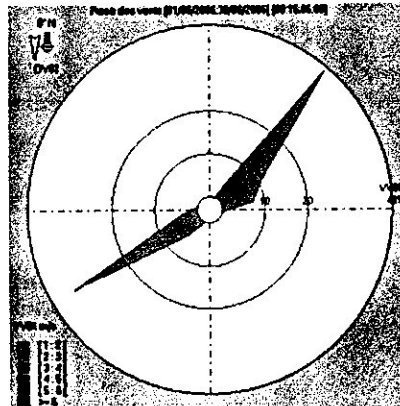
le mois d'avril



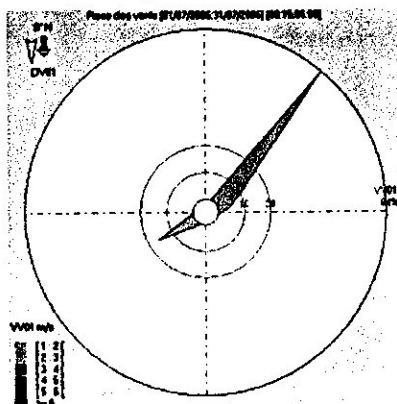
Le moi de mai



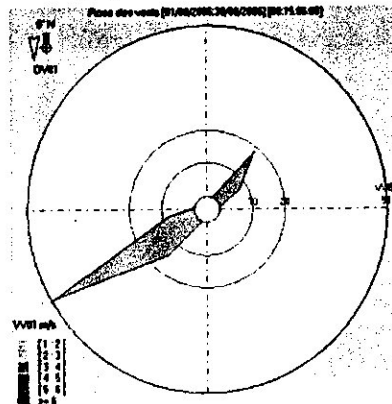
le mois de juin



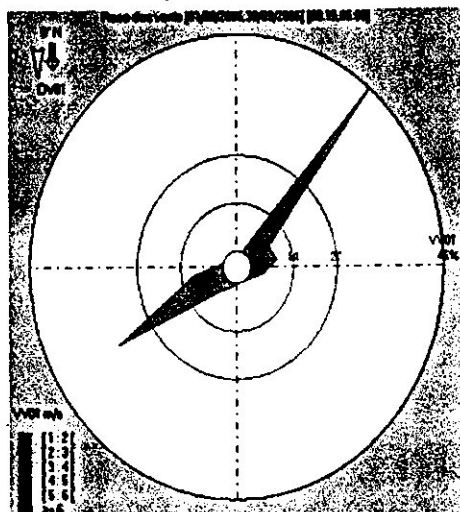
Le mois de juillet



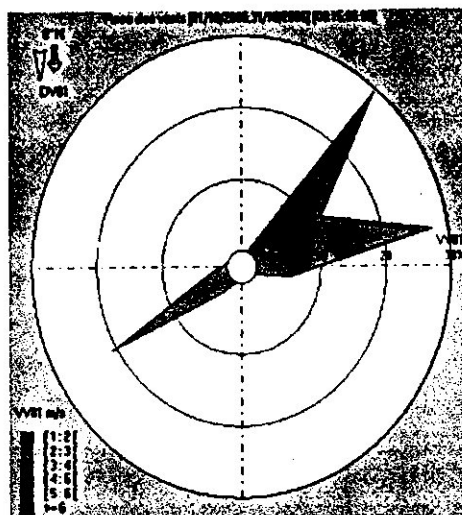
le mois d'août



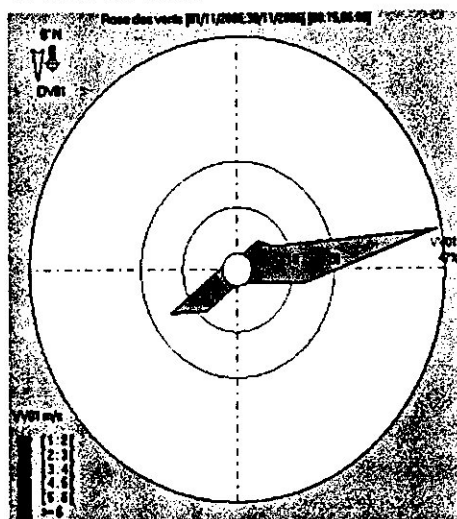
le mois de septembre



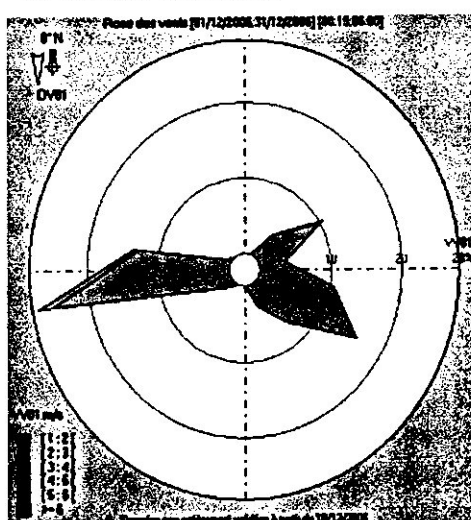
le moi d'octobre



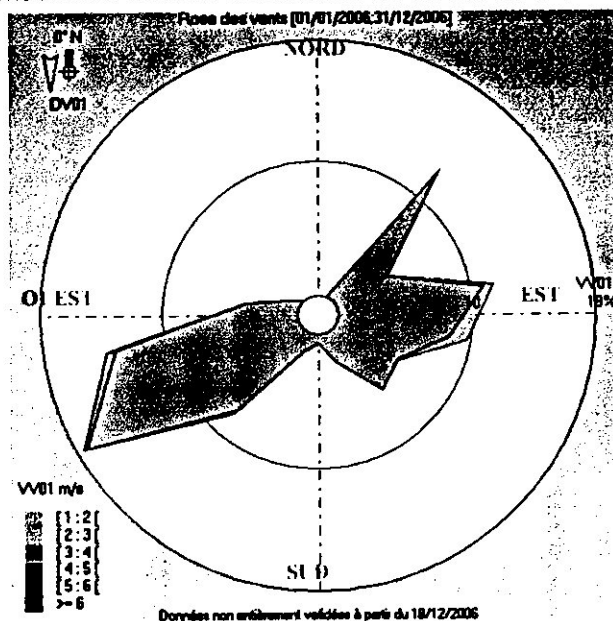
le mois de novembre



le mois de décembre



La rose de vent annuel durant l'année 2006 au niveau du la station du 1^{er} MAI



Volumes de contrôle décalés (déplacés) :

La méthode des volumes finis n'impose pas de calculer les différentes variables (u , v , w , T , p , etc.) sur la même grille (volume de contrôle). L'idée est de calculer les variables scalaires, comme la pression, la densité, la température, etc., dans les noeuds ordinaires des volumes de contrôle, mais de calculer les composantes de la vitesse, sur des volumes de contrôle décalés, centrés autour des interfaces des volumes de contrôle initiaux. Un exemple d'un tel arrangement est présenté à la figure 6.3.

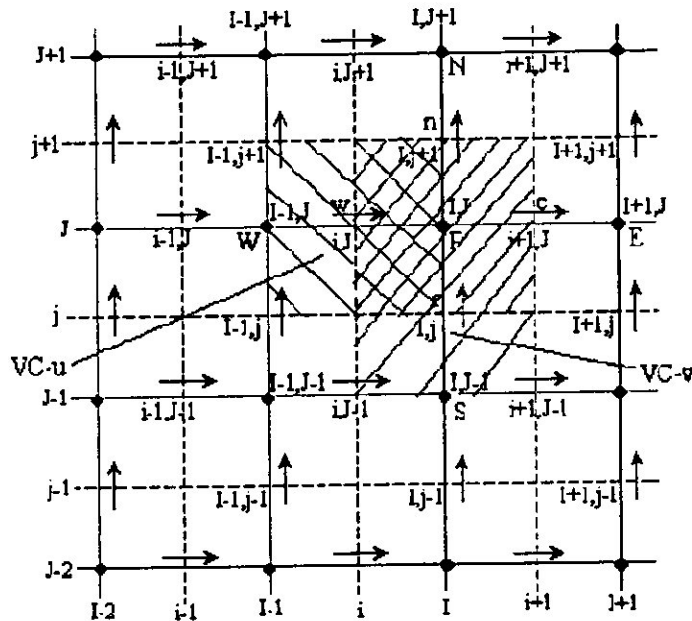


Fig. 6.3 Volumes de contrôle décalée: VC-u pour la composante u de la vitesse ; VC-v pour la composante v de la vitesse.

Les variables scalaires, y compris la pression, sont stockées aux noeuds marqués avec (\bullet). Les composantes de la vitesse sont définies comme scalaires, entre les noeuds (aux interfaces), et sont indiquées par flèches. Les flèches horizontales (\rightarrow) indiquent les points où est stockée la composante u de la vitesse, tandis que les flèches verticales (\uparrow) indiquent les points où est stockée la composante v de la vitesse. À la figure 6.3 on a introduit un système supplémentaire de notation basé sur la numérotation des lignes du maillage et des interfaces des volumes de contrôle. Ce système de notation sera utilisé plus loin dans ce chapitre. Pour l'instant on continue d'utiliser la notation originale des noeuds, P, W, E, N, S . La composante u de la vitesse est stockée aux interfaces ' e ' et ' w ' et la composante v de la vitesse est stockée aux interfaces ' n ' et ' s '.

Dans le maillage décalé, les noeuds pour la pression sont les mêmes avec les interfaces des volumes de contrôle pour la composante u de la vitesse. Le gradient de la pression est donné par l'expression :

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{p_p - p_n}{\delta x_u} \quad (6.9)$$

où δx_u est la largeur du volume de contrôle de u (VC- u). De même, le gradient $(\partial p / \partial y)$ pour le volume de contrôle de v (VC- v) est donné par la relation :

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{p_p - p_s}{\delta y_v} \quad (6.10)$$

où δy_v est la largeur du VC- v . Si l'on calcule les gradients de pression à l'aide des relations (6.9) et (6.10) en utilisant un champ de pression de type dentelé on constate qu'ils ne sont plus nuls. Une autre conséquence importante du maillage décalé est que celui-ci génère les composantes de la vitesse même aux points où elles sont nécessaires pour le calcul du flux convectif ($F = \rho u$) peut être calculé sans interpolation aux interfaces e , w , n et s .

$$a_{i,j} u_{i,j} = \sum a_{vs} u_{vs} + b_{i,j} + (p_{I-1,J} - p_{I,J}) d_{i,j} \quad (19)$$

Dans le nouveau système de numérotation les points voisins W , E , S et N impliqués dans la somme $\sum a_{vs} u_{vs}$, présentés à la figure 6.6, sont les noeuds $(i-1, J)$, $(i+1, J)$, $(i, J-1)$ et $(i, J+1)$. Les coefficients de l'équation (19) contiennent une combinaison du flux convectif F et de la conductance de diffusion D aux interfaces des volumes de contrôle pour la composante u de la vitesse. Les valeurs de F et D pour chaque interface w , e , s et n du volume de contrôle sont données par les relations suivantes :

$$a_{i,j} v_{i,j} = \sum a_{vs} v_{vs} + b_{i,j} + (p_{I,J-1} - p_{I,J}) d_{i,j} \quad (18)$$

Les variables impliquées dans la somme $\sum a_{vs} v_{vs}$ sont présentées à la figure 6.7

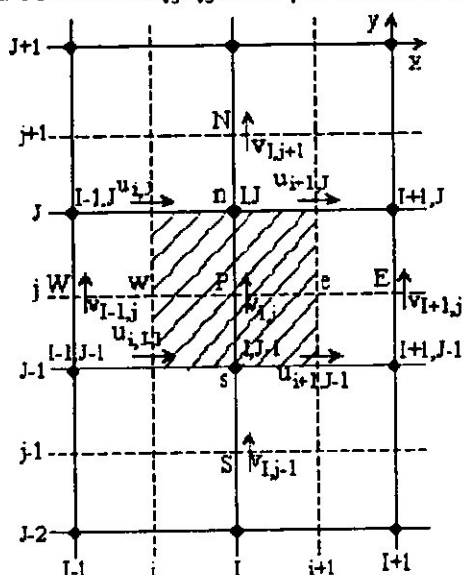



Fig. 6.7 Volume de contrôle pour la composante v .



RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[1] Stephane Glockner « **Contribution à la modélisation de la pollution Atmosphérique dans les villes** » Doctorat L'Université Bordeaux I Ecole doctorale De sciences physiques et de l'ingénieur. Spécialité : mécanique. 2000

[2] **Dispersion atmosphérique Mécanismes et outils de calcul** INERIS
DIRECTION DES RISQUES ACCIDENTELS Décembre 2002
DISPERSION ATMOSPHERIQUE INERIS-DRA-2002-25427



[3] **EMISSIONS CERTIFICATION DES MOTEURS**
Erika Herms - STNA



[4] **SERVICE TECHNIQUE DE LA NAVIGATION AERIENNE**
DIRECTION GENERALE DE L'AVIATION CIVILE
« **GUIDE DE CALCUL DES EMISSIONS DUES AUX AERONEFS** »
Rapport n°656 Erika HERMS Juin 2003



[5] **Évaluation de l'impact sanitaire de la pollution atmosphérique urbaine** réalisée par : Franck Golliot, Cellule interrégionale d'épidémiologie Languedoc-Roussillon



[6] THESE DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE Stéphane PASCAUD : « **Vers la simulation aux grandes échelles des écoulements turbulents diphasiques réactifs** » : application aux foyers aéronautiques Référence du CERFACS : TH/CFD/06/44

[7] T H E S E Docteur en Sciences de l'Université Paris 7 – Denis Diderot Ecole doctorale «Sciences de l'Environnement d'Ile de France » Spécialité "Méthodes Physiques en Télédétection" présentée par Anthony UNG « **CARTOGRAPHIE DE LA POLLUTION ATMOSPHERIQUE EN MILIEU URBAIN A L'AIDE DE DONNEES MULTISOURCES** »



[8] **Partie 2. Analyse des impacts sur l'environnement Evaluation des externalités physiques et monétaires**
Contrat/contract MD/11/012



[9] Robert JOUMARD et Jacques LAMBERT
Evolution des émissions de polluants par les transports en France de 1970 à 2010



[10] TECHNIQUE DE L'INGENIEUR BM 2 520

Les carburants et la combustion par Jean-Claude GUIBET

Docteur ès sciences de l'université de Louvain

Ancien coordonnateur Carburants à l'Institut français du pétrole

Ancien professeur à l'École nationale supérieure du pétrole et des moteurs

[11] TECHNIQUE DE L'INGENIEUR B 2 712 Pollution atmosphérique

Réglementations des véhicules automobiles par Paul DEGOBERT

Ingénieur de l'École Nationale Supérieure du Pétrole et des Moteurs

et de l'École Nationale Supérieure de Chimie de Lille

Ancien Ingénieur à l'Institut Français du Pétrole

[12] TECHNIQUE DE L'INGENIEUR B 2 710

Pollution atmosphérique Réduction des émissions dues au moteur

par Paul DEGOBERT

Ingénieur de l'École Nationale Supérieure du Pétrole et des Moteurs et de

l'École Nationale Supérieure de Chimie de Lille

Ancien Ingénieur à l'Institut Français du Pétrole

[13] **Les effets environnementaux du transport de marchandises
dans le Val-de-Marne**

Etat des connaissances, pré-diagnostic et orientations possibles

[14] **Inventaire des émissions atmosphériques**

sur la plate-forme aéroportuaire de Strasbourg-Entzheim

(hors aéronefs)

ASPA 03011602-I-D Janvier 2003

[15] J. P. Bertoglio.

Simulation numérique d'écoulements turbulents. Mécanique des

fluides numériques, Carcans-Maubuisson, 9-15 Mai 1993.

[16] **MODÉLISATION ET SIMULATION NUMÉRIQUE DE L'ÉCOULEMENT ET
DU TRANSFERT DE CHALEUR TURBULENTS**

Laboratoire d'énergie, UAE, Faculté des sciences B.P. 2121,93000

Tétouan, MAROC

Equipe : Energétique-Mécanique des fluides et Matéri

[17] **Relations de fermeture pour le système des équations d'Euler
multi-espèces. Construction et étude de schémas de relaxation en multi-
espèces et en multi-constituants.**

Stéphane DELLACHERIE, Nicolas RENCYR

(*) Université Paris -Sud, CNRS UMR 8628, Bât. 425, 91405 Orsay Cedex



[18] Modélisation Physique et Simulations Numériques

Avec le logiciel FEMLAB

Sophie Bresson ENSPS 3A



[19] Matlab & Simulink (Niveau Avancé)



VISUEL

[20] Société de Service d'Ingénierie et Centre de Formation Multidisciplinaire
315 Square des Champs Elysées – Evry 91026

**FORMATION
PROFESSIONNELLE**

[21] Introduction à MATLAB et Simulink

Professeur **Hoang Le-Huy**

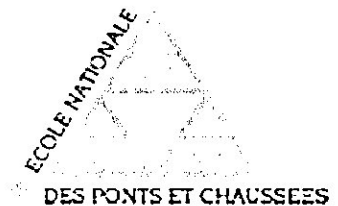
Département de génie électrique et de génie informatique

Université Laval Québec, CANADA

[22] Simulation numérique et assimilation de données

Variationnelle pour la dispersion atmosphérique de polluants

Denis Quelo



[23] [Tulet, 2000] Tulet, P. (2000). Modélisation physico-chimique de la pollution régionale : impacts des divers processus de transport des polluants gazeux en situations complexes et tests de validations. Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier (Toulouse III).

[24] Développer des technologies respectueuses de l'environnement...

• Séminaire PEER

11 et 12 octobre 2006 - Montpellier



**[25] DEVELOPPEMENT D'UN SYSTEME DE LIBERATION
D'UN GAZ TRACEUR QUI SIMULE LES EMISSIONS
DU TRAFIC ROUTIER**

Helin Jazmin MOLINA BETANCOURT

LAUSANNE – FEVRIER 2006

Laboratoire de Pollution Atmosphérique et des Sols (LPAS)



ÉCOLE POLYTECHNIQUE
FÉDÉRALE DE LAUSANNE