

# THÈSE

PRÉSENTÉE À

**L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I**

ÉCOLE DOCTORALE  
DE SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

par **Stéphane GLOCKNER**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

**DOCTEUR**

SPÉCIALITÉ : MÉCANIQUE

---

**CONTRIBUTION À LA MODÉLISATION DE LA POLLUTION  
ATMOSPHÉRIQUE DANS LES VILLES**

---

*Soutenue le 14 décembre 2000*

*Après avis de :*

MM. Y. BRUNET, Directeur de Recherche, INRA-Bordeaux	Rapporteur
G. LAURIAT, Professeur, LMSNPT, Université de Marne la Vallée	Rapporteur

*Devant la Commission d'examen formée de :*

MM. P. MOREL, Professeur, MAB, Université Bordeaux I	Président
E. VILLENAVE, Maître de Conférence, LPCM, Université Bordeaux I	Rapporteur
G. LAURIAT, Professeur, LMSNPT, Université de Marne la Vallée	Examineur
Y. BRUNET, Directeur de Recherche, INRA-Bordeaux	Examineur
J.P. CALTAGIRONE, Professeur, MASTER, Université Bordeaux I	Examineur
F. FOURNIER, Société GERTRUDE, Bordeaux	Examineur



# **Remerciements**

*Ce travail a été réalisé au sein du laboratoire de Modélisation Avancée des Systèmes Thermiques et Écoulements Réels (MASTER) de l'École Nationale Supérieure de Chimie Physique de Bordeaux (ENSCP) dans le cadre d'une convention CIFRE, contractée entre la société GERTRUDE, le laboratoire de Mathématique Appliquée de Bordeaux (MAB) et le laboratoire MASTER-ENSCP.*

*Je remercie tout d'abord Jean-Jacques Montech, directeur de la société GERTRUDE, pour avoir accepté le co-financement ce projet, Franck Fournier, responsable du service recherche et développement ainsi que Paul Morel, professeur au MAB pour avoir co-encadré ce travail.*

*Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à Jean-Paul Caltagirone, professeur et directeur du laboratoire MASTER, qui a dirigé cette thèse, pour son soutien au cours de ces trois années, la confiance qu'il m'a témoignée et l'ensemble des moyens qu'il a mis à ma disposition.*

*Eric Villenave a su me réconcilier avec la chimie, et ce n'est pas peu dire. Je le remercie vivement pour sa participation à ce travail, sa volonté et pour m'avoir fait l'honneur et le plaisir de participer à mon jury de thèse.*

*Je suis reconnaissant au professeur Guy Lauriat de l'Université de Marne-la-Vallée et à Yves Brunet, directeur de recherche à l'INRA de bordeaux, de m'avoir fait l'honneur d'être rapporteur de ce travail.*

*Le travail de thèse est souvent considéré comme un travail personnel mais c'est aussi une petite « aventure » collective. J'ai eu la chance de passer ces trois années dans un laboratoire où l'entraide est importante, où il est aisé de trouver une oreille réceptive à son travail ou aux préoccupations d'un moment. Je remercie donc tous ces membres, permanents ou de passage, d'avoir fait de ces trois années une expérience enrichissante tant sur le plan scientifique qu'humain.*

*Commençons par les « anciens » : Jean-Benoît, Jeff, Patrick, Olivier(s), Losamo, Manu, Naima, Pierre, Rémy, Franck, Stéphane et surtout Alain dont j'ai eu le plaisir et la chance de partager quelques mois le bureau. Passionnant et passionné par la découverte des pôles, il vit au moment même où j'écris ces lignes son rêve en participant à une expédition en Antarctique. Que ce soit le début d'une longue série.*

*Mon autre co-locataire du bureau S1-16 fut Hugues. Nous avons formé un bureau souvent qualifié de « paisible ». J'ai pu apprécier ces nombreuses qualités tant humaines que scientifiques. Je le remercie pour sa gentillesse, qualité des plus grande à mes yeux, la complicité que nous avons et pour tous les bons moments passés ensemble. Chi va piano va sano e lontano, n'est-ce pas Hugues ?*

*Comment ne pas remercier Jérôme - généreux et attentif - tant les échanges ont été nombreux, efficaces et profitables. Le travail en équipe à pris avec lui une dimension que je ne connaissais pas jusqu'alors. Je pense aussi à Hadjira, virevoltante, insaisissable mais surtout adorable et à Fred, d'une grande gentillesse et tout aussi adorable, à Guillaume, Fred, François et Bassel. Les derniers arrivés au laboratoire, Boris, Sandrille, Cédric, Claude, Damien et Philippe, se sont si vite intégrés que l'on croirait les connaître depuis bien plus longtemps. Je remercie également tout particulièrement Sylvie et Marie-Hélène de la société GERTRUDE.*

*Je remercie les permanents du laboratoire Eric, Natalie, David, Azis, Rémy et Jean pour leurs conseils au cours de ces trois années, les informaticiens Bernard et Sandrine qu'on a facilement tendance à houspiller au moindre bug, mais que l'on ne remercie jamais assez dans le cas contraire, et Marie-Paule pour sa relecture attentive du manuscrit.*

*Je remercie mes parents de m'avoir donné le goût des études et ne saurais conclure sans remercier et dédier ce travail à Stefania, tant sa compréhension et son soutien ont été déterminants ces dernières années mais surtout parce qu'elle illumine ma vie de mille feux.*



# SOMMAIRE

<b>NOMENCLATURE.....</b>	<b>1</b>
<b>INTRODUCTION.....</b>	<b>7</b>
<b>CHAPITRE 1 PRÉSENTATION DE L'ÉTUDE.....</b>	<b>13</b>
1.1 LA COUCHE LIMITE ATMOSPHERIQUE	13
1.2 LA COUCHE LIMITE URBAINE	15
1.3 LA CANOPEE URBAINE	17
<b>CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE .....</b>	<b>21</b>
2.1 LES EQUATIONS FONDAMENTALES	21
2.2 DES PROBLEMES TURBULENTS	23
2.2.1 Introduction.....	23
2.2.2 Décomposition de Reynolds .....	24
2.2.3 Le concept de viscosité turbulente .....	26
2.2.4 Les modèles k- $\epsilon$ et RNG .....	27
2.2.5 Le modèle $v^2$ -f.....	30
2.3 PRISE EN COMPTE DU RAYONNEMENT SOLAIRE	32
2.3.1 Flux Solaire de Courte Longueur d'Onde.....	33
2.3.2 Flux de Grande Longueur d'Onde .....	41
2.4 LES METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION	50

2.4.1 Un maillage déconnecté de la géométrie .....	50
2.4.2 Discrétisation des équations.....	51
2.4.3 Solutions informatiques pour la programmation des échanges radiatifs .....	54
2.4.4 Une interface de calcul conviviale .....	55
2.5 SIMULATIONS NUMERIQUES .....	57
2.5.1 Cas tests 2D.....	57
2.5.1.1 Marche descendante .....	57
2.5.1.2 Bloc bidimensionnel.....	63
2.5.1.3 Cylindre de section carrée .....	68
2.5.2 Cas tests 3D.....	73
2.5.2.1 Marche descendante .....	73
2.5.3 Simulations 3D.....	73
2.6 CONCLUSION .....	78
<b>CHAPITRE 3 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE MÉSO .....</b>	<b>79</b>
3.1 LES EQUATIONS FONDAMENTALES POUR LA COUCHE LIMITE ATMOSPHERIQUE .....	80
3.1.1 État de référence .....	80
3.1.2 Stabilité de l'atmosphère.....	81
3.1.3 Équations fondamentales .....	82
3.2 PROFILS POUR UNE COUCHE LIMITE DE SURFACE .....	84
3.2.1 Profil de vitesse pour une CLS neutre .....	85
3.2.2 Influence de la stabilité de l'atmosphère .....	87
3.2.3 Profils de température .....	88
3.2.4 Valeurs des variables turbulentes dans la CLS .....	90
3.2.5 Prise en compte des fortes rugosités .....	90
3.3 TRAITEMENTS NUMERIQUES .....	91
3.4 VALIDATION DES LOIS DE PAROI .....	92
3.4.1 Écoulement avec un changement de rugosité du sol .....	92
3.4.2 Écoulement avec un saut de température à la paroi .....	95
3.5 CONCLUSION .....	97
<b>CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE.....</b>	<b>99</b>
4.1 ÉMISSION DES POLLUANTS .....	100
4.1.1 Généralités .....	100

4.1.2 Méthodologie pour un modèle d'émission .....	101
4.2 DISPERSION DES POLLUANTS .....	105
4.2.1 Description des équations générales pour la chimie .....	105
4.2.2 Cinétique chimique .....	109
4.2.3 Traitement numérique des équations de transport .....	113
4.2.3.1 Résolution des systèmes différentiels raides .....	114
4.2.3.2 Choix du schéma d'advection.....	118
4.2.4 Etude du schéma TVD couplé à la chimie atmosphérique .....	123
4.2.5 Un pré-processeur de chimie intégré au solveur.....	130
4.3 UNE CINÉTIQUE CHIMIQUE DIURNE DE L'OZONE SIMPLIFIÉE .....	132
4.4 CONCLUSION .....	143
<b>CONCLUSION ET PERSPECTIVES .....</b>	<b>145</b>
<b>ANNEXE A DÉMONSTRATION DE L'ÉQUATION DE L'ÉNERGIE CINÉTIQUE TURBULENTE MOYENNE.....</b>	<b>149</b>
<b>ANNEXE B CALCUL DE L'AIRE D'UN ARC D'ELLIPSE.....</b>	<b>153</b>
<b>ANNEXE C PRÉSENTATION DES FICHIERS DE DONNÉES DE L'INTERFACE DU CODE DE CALCUL AQUILON.....</b>	<b>155</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE.....</b>	<b>163</b>





# NOMENCLATURE

## Lettres romaines

- $A$  : accélération d'un véhicule ( $m^2.s^{-2}$ )
- $c_i$  : concentration d'une espèce chimique ( $molécule.cm^{-3}$ )
- $C_p$  : capacité calorifique ( $J.kg^{-1}.K^{-1}$ )
- $C_d$  : coefficient de portance moyen ( $kg.s^{-2}$ )
- $C$  : constantes des modèles de turbulence (.)
- $d$  : hauteur de déplacement (m)
- $D$  : 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 ( $s^{-1}$ )  
: fréquence de détachement des tourbillons (Hz)
- $f_{ij}$  : facteur de forme entre deux surfaces  $S_i$  et  $S_j$  (.)
- $f_o$  : facteur d'ombre (.)
- $F$  : force de Coriolis (N)
- $Fem_p$  : facteur d'émission unitaire pour un polluant  $p$  ( $g.m^{-1}$ )
- $g$  : intensité de la force de gravité (N)
- $g$  : force de gravité (N)
- $G$  : terme de production d'énergie cinétique turbulente par gravité ( $kg.m^{-2}.s^{-2}$ )

## NOMENCLATURE

$h$	: angle horaire (rad)
$H$	: hauteur de l'obstacle (m)
$i$	: angle d'incidence du soleil par rapport à une surface (rad)
$I$	: intensité turbulente (.)
$j$	: numéro du jour dans le mois (.)
$k$	: 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) : longueur de Monin-Obukhov (m) : terme de destruction ( $molécule.cm^{-3}$ )
$L_{V,T}$	: longueur parcourue par un véhicule V durant le temps T (m)
$L_X$	: longueur d'une rue X (m)
$m$	: numéro du mois (.)
$m_i$	: masse molaire de l'espèce i (kg)
$M_i$	: masse moléculaire de l'espèce i (kg)
$ne$	: nombre de polluants (.)
$p$	: pression (Pa)
$p_r$	: pression de référence (état adiabatique et hydrostatique) (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 ( $molécule.cm^{-3}.s^{-1}$ )
$Ra$	: nombre de Rayleigh (.)
$Re$	: nombre de Reynolds (.)
$R_f$	: nombre de Richardson de flux (.)
$R_i$	: terme de production/destruction de l'espèce i ( $molécule.cm^{-3}.s^{-1}$ )
$R_i'$	: fluctuation de $R_i$ ( $molécule.cm^{-3}.s^{-1}$ )
$Sc$	: nombre de Schmidt (.)

## NOMENCLATURE

$S_t$	: nombre de Strouhal (.)
$t$	: temps (s)
	: heure locale apparente (h)
$t_j$	: date julienne (.)
$T$	: température instantanée (K)
	: temps caractéristique (s)
$T'$	: fluctuation de la température instantanée (K)
$\bar{T}$	: température moyenne (K)
$T_a$	: température sous abri (K)
$T_0$	: température de référence (K)
$T_r$	: température de référence (état adiabatique et hydrostatique) (K)
$U$	: vitesse caractéristique d'un écoulement ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$U_0$	: vitesse d'entrée ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$U_{moy}$	: vitesse moyenne ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$u_*$	: vitesse de frottement ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$\mathbf{u}$	: vecteur vitesse instantanée ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$\bar{\mathbf{u}}$	: vecteur vitesse moyenne ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$\mathbf{u}'$	: fluctuation du vecteur vitesse ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$v^2$	: fluctuation de la vitesse ( $\text{m}^2.\text{s}^{-2}$ )
$VT$	: vitesse d'un véhicule ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$w$	: vitesse angulaire de rotation de la Terre ( $\text{rad.s}^{-1}$ )
$\mathbf{x}$	: vecteur position (m)
$z_0$	: longueur de rugosité (m)
$Z$	: angle solaire zénithal (rad)

### Lettres grecques

$\alpha$	: angle entre l'axe est/ouest et l'axe longitudinal du repère considéré (rad)
$\beta$	: coefficient de dilation thermique ( $\text{K}^{-1}$ )
	: inclinaison de la surface par rapport au plan horizontal (rad)
$\delta$	: déclinaison solaire(rad)

## NOMENCLATURE

$\Lambda$	: azimut d'une surface (rad)
$\varepsilon$	: taux de dissipation de k ( $\text{m}^2.\text{s}^{-3}$ )
$\varepsilon_i$	: émissivité de la surface $S_i$ (.)
$\kappa$	: constante de von Karman (.)
$\xi$	: longueur caractéristique (m)
$\lambda$	: conductivité thermique ( $\text{W}.\text{m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ )
$\mu$	: viscosité dynamique ( $\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ )
$\mu_t$	: viscosité turbulente ( $\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ )
$\nu$	: viscosité cinématique ( $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ )
$\Omega$	: azimut solaire (rad)
$\phi$	: latitude (rad)
$\pi$	: pi (rad)
$\rho$	: masse volumique instantanée ( $\text{kg}.\text{m}^{-3}$ )
$\bar{\rho}$	: masse volumique moyenne ( $\text{kg}.\text{m}^{-3}$ )
$\rho_0$	: masse volumique de référence ( $\text{kg}.\text{m}^{-3}$ )
$\rho_r$	: masse volumique de référence ( $\text{kg}.\text{m}^{-3}$ )
	: (atmosphère adiabatique et hydrostatique) ( $\text{kg}.\text{m}^{-3}$ )
$\varphi$	: variable quelconque du problème
$\varphi$	: densité de flux radiatif ( $\text{W}.\text{m}^{-2}$ )
$\sigma$	: constante de Stefan-Boltzman ( $\text{kg}.\text{m}^4.\text{s}^{-1}.\text{K}^{-4}$ )
$\sigma_t$	: nombre de Prandtl turbulent (.)
$\Sigma$	: tenseur des contraintes ( $\text{N}.\text{kg}.\text{m}^{-2}$ )

### Espèces chimiques

CO	: monoxyde de carbone
CO <sub>2</sub>	: dioxyde de carbone
HC	: hydrocarbures
HO <sub>2</sub> ·	: radicaux hydroperoxydes
HNO <sub>3</sub>	: acide nitrique

## NOMENCLATURE

NMHC:	hydrocarbures non méthaniques
NO	: monoxyde d'azote
NO <sub>2</sub>	: dioxyde d'azote
NO <sub>x</sub>	: <i>NO+NO<sub>2</sub></i>
O <sub>2</sub>	: oxygène
O <sub>3</sub>	: ozone
OH·	: radical hydroxyle
RO <sub>2</sub> ·	: radicaux peroxydes
PAN	: peroxyacélnitrates
SO <sub>2</sub>	: dioxyde de soufre
RCHO	: aldéhydes

## Abréviations

CLA	:	couche limite atmosphérique
CLS	:	couche limite de surface
CLU	:	couche limite urbaine
DNS	:	direct numerical simulation
F <sub>D</sub>	:	flux solaire direct
F <sub>DH</sub>	:	flux solaire direct sur un plan horizontal
F <sub>da</sub>	:	flux solaire diffusé par l'atmosphère
F <sub>de</sub>	:	flux solaire diffusé par l'environnement
FSCLO	:	flux solaire global de courte longueur d'onde
FGLO	:	flux de grande longueur d'onde
FIA	:	flux incident atmosphérique
FS	:	flux sortant par rayonnement
FE	:	flux incident reçu de l'environnement

## NOMENCLATURE

### Symboles mathématiques

$\delta_{ij}$	: symbole de Krönecker
$\mathbf{I}$	: matrice identité
$\otimes$	: produit tensoriel
$\cdot$	: produit scalaire
$\frac{\partial}{\partial t}$	: dérivée partielle par rapport au temps
$\Delta$	: opérateur laplacien
$\nabla$	: opérateur gradient
$\nabla \cdot$	: opérateur divergence
$\Sigma$	: symbole de sommation
$\int$	: symbole d'intégration
$'$	: opérateur de transposition
$\cos$	: fonction cosinus
$\sin$	: fonction sinus

# INTRODUCTION

La pollution générée par la circulation 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 :

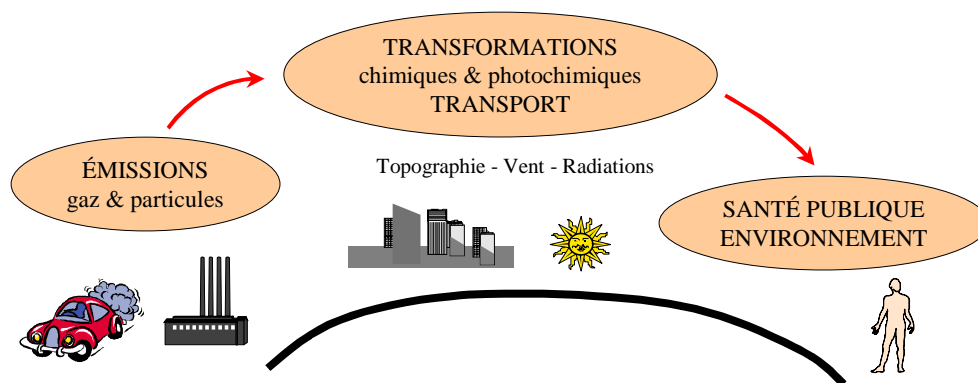


Figure 1 : le problème de la pollution atmosphérique schématisé

Une fois émis dans l'atmosphère par les 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



## INTRODUCTION

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 cancérigènes
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-

## INTRODUCTION

toxiques, comme le  $\text{SO}_2$  (dioxyde de soufre) ou les PAN (peroxyacetylnitrates), une fois dans la feuille de la plante détruisent la chlorophylle et perturbent la photosynthèse, causant ainsi une réduction de la croissance de la plante ou bien son dépérissement.

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  $\text{NO}_2$  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 se pose alors 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 automobile, développer les transports en commun, mettre en place des réseaux de capteurs de polluants, favoriser le transport 2 roues, sensibiliser la population, améliorer les technologies automobiles et les carburants. Ces mesures ont été suivies avec plus ou moins de réussite et ont conduit à une diminution des concentrations pour les principaux polluants (disparition du plomb dans l'essence, réduction des émissions de  $\text{CO}$ ...).

**Pourquoi modéliser ?** Une approche originale est celle de la modélisation, qui conduit à la réalisation d'un modèle de qualité de l'air permettant de déterminer les niveaux de pollution aux différentes échelles d'une ville . 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.

## INTRODUCTION

**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  $\text{OH}\cdot$  : 1 s
- Longueurs caractéristiques de la turbulence : du mm au km

Face à ces échelles variées, il existe différents modèles généralement classés selon des échelles fonction des caractéristiques spatiales et temporelles 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 :

## INTRODUCTION

- échelle micro :  $10^{-2}$  -  $10^3$  m
- échelle locale :  $10^2$  -  $5 \cdot 10^4$  m
- échelle méso :  $10^4$  -  $2 \cdot 10^5$  m
- échelle macro :  $10^5$  -  $10^8$  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. Le chapitre un de cette étude est consacré à une description physique de la couche limite atmosphérique, les chapitres deux et trois présenteront les modèles mathématiques utilisés et les résultats de simulations numériques, respectivement à l'échelle locale et méso. Le chapitre quatre sera consacré à la chimie atmosphérique. 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.



# CHAPITRE 1

## PRÉSENTATION DE L'ÉTUDE

### 1.1 La couche limite atmosphérique

De nombreux ouvrages traitent la couche limite atmosphérique. Nous citerons notamment ceux de Stull [Stull, 1988], de Oke [Oke, 1987] et de De Moor [De Moor, 1983]. La troposphère est scindée en deux parties : une couche limite dans sa partie basse coiffée d'une couche libre (cf. figure 1.1).

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

À mesure que l'on se rapproche de la surface, les forces de frottement de l'air sur la surface terrestre rentrent en jeu. D'un point de vue dynamique, la couche limite atmosphérique (CLA) est la zone de l'atmosphère au voisinage du sol dans laquelle se répercute directement, par « viscosité », l'adhérence au sol de l'écoulement. Elle donne alors naissance à des couches cisillées. D'un point de vue thermique, c'est la zone de l'atmosphère au voisinage de la surface terrestre dans laquelle la variation diurne du rayonnement solaire est directement perceptible. C'est dans cette zone que l'on retrouve les thermiques si chères

## CHAPITRE 1 PRÉSENTATION DE L'ÉTUDE

res aux passionnés de vol à voile, formées de grands rouleaux convectifs causés par le réchauffement de l'air au voisinage d'un sol chaud. La hauteur de la couche limite atmosphérique, qui varie en permanence dans le temps et dans l'espace, est comprise en moyenne entre 100 et 3000 mètres. La totalité de la troposphère est en fait influencée par la surface mais le temps de réponse de la CLA à des modifications des conditions à la surface est rapide, de l'ordre de l'heure [Stull, 1988]. C'est une autre et importante de ses caractéristiques. Enfin, dans la CLA, le transport des différentes quantités que nous rencontrons (température, polluants...) est principalement influencé horizontalement par le vent et verticalement par la turbulence.

La structure de la CLA pour les zones à hautes pressions est représentée sur la figure 1.1. Elle est variable selon l'heure de la journée et se compose le jour d'une couche de mélange (mixed layer) dominée par les phénomènes turbulents favorisant les mélanges des quantités étudiées, la nuit d'une couche résiduelle moins turbulente de stratification neutre et d'une couche nocturne rendue stable par le contact d'un sol froid. Elle est peu turbulente. Les forces déterminant le vent dans cette zone sont les forces de pression, de frottement, de Coriolis et d'Archimède.

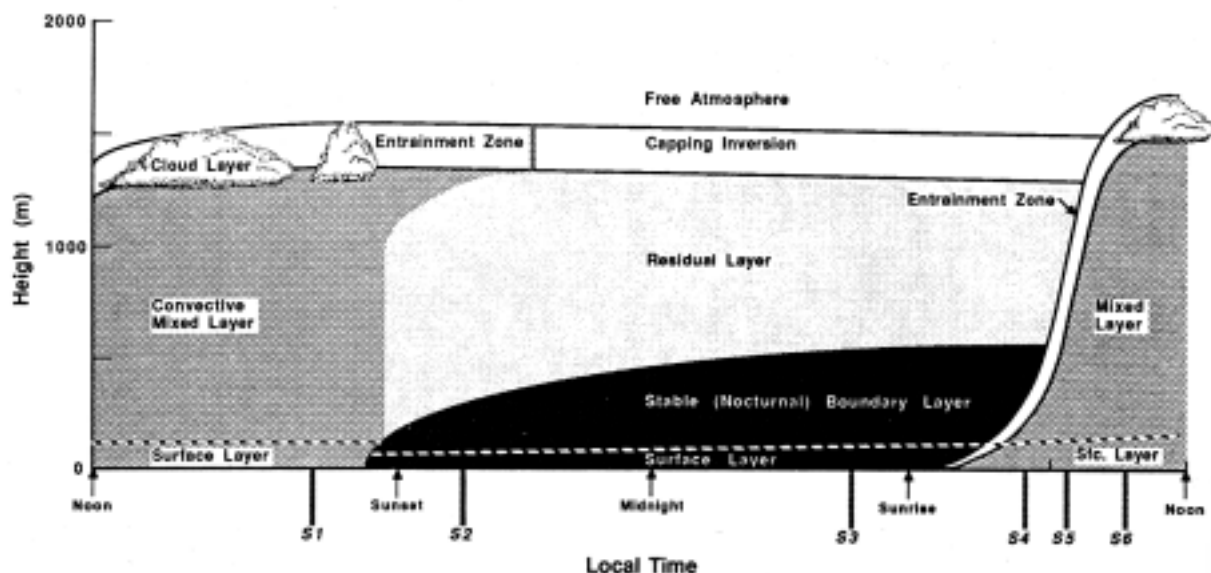


Figure 1.1 : structure de la couche limite atmosphérique [Stull, 1988]

## *1.2 La couche limite urbaine*

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

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

## **1.2 La couche limite urbaine**

La couche limite urbaine (CLU) est un cas particulier de la couche limite atmosphérique. L'allure de la CLU varie en permanence entre deux extrêmes : par vent fort, celle classique d'une couche limite sur plaque plane et par vent faible celle d'un dôme dominé par les effets thermiques (cf. figure 1.2).

Ce qui la différencie nettement de la couche limite atmosphérique est l'existence au-dessus des villes d'un îlot de chaleur, caractérisé par des températures plus élevées qu'au-dessus de la campagne environnante. Nous pouvons tous constater ce phénomène l'hiver en observant la quantité de givre sur les pare brise de voitures. Les véhicules sortant de l'agglomération en sont généralement dépourvus alors que ceux venant de la périphérie, moins denses en constructions, sont couverts d'une pellicule blanche. Des écarts de température (fonction du vent et du nombre d'habitants) allant jusqu'à 12° [Oke, 1987] ont été relevés.



## CHAPITRE 1 PRÉSENTATION DE L'ÉTUDE

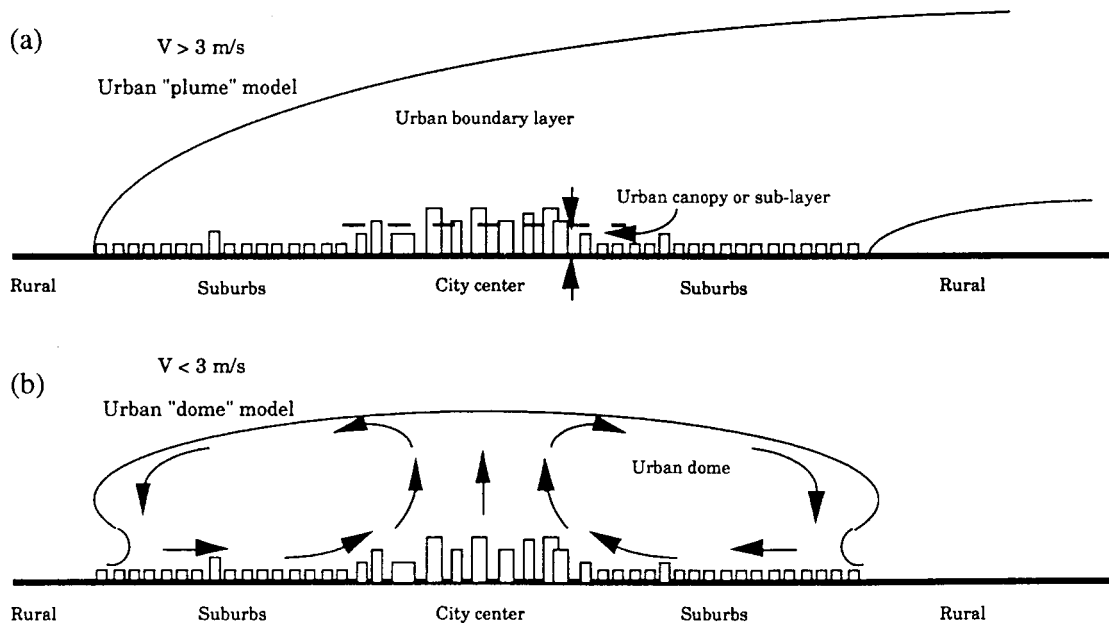


Figure 1.2 : structure de la couche limite urbaine [Mestayer, 1995].

Les causes d'un tel phénomène sont multiples :

- activité anthropique - chauffage domestique, rejets de polluants... - qui réchauffe l'atmosphère et altère le bilan radiatif ;
- diminution des vents due à la présence des constructions qui réduit l'apport d'air frais ;
- modification du bilan thermique de la surface en raison de la présence des bâtiments : on observe au niveau des villes une absorption accrue des radiations solaires provoquant une diminution de l'albédo<sup>1</sup> de surface des villes [Aida, 1982]. La figure 1.3, sur laquelle on constate que le rayonnement incident est piégé à l'intérieur du canyon (rue bordée de bâtiments), illustre ce phénomène.

---

<sup>1</sup> proportion du rayonnement incident au rayonnement réfléchi par une surface.

### 1.3 La canopée urbaine

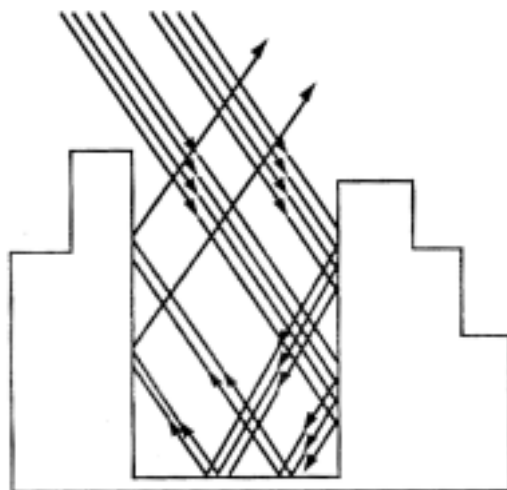


Figure 1.3 : réflexions multiples dans un canyon [Mestayer, 1995]

## 1.3 La canopée urbaine

C'est la partie basse de la couche limite urbaine à proximité directe du sol dans laquelle sont étudiés les écoulements entre les bâtiments. En raison de l'hétérogénéité de la topographie des villes, leurs structures sont particulièrement complexes, composées de couches de cisaillement, recirculations, sillages...

**Aspect dynamique.** Oke [Oke, 1998] a étudié en soufflerie 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 1.4 et 1.5). 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 1.4a). 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 1.4b). Lorsque le rapport  $W/H$  est encore plus faible (figure 1.4c), la rue se referme et une recirculation s'établit à l'identique d'une rue à l'autre. L'écoulement est alors dit rasant.

## CHAPITRE 1 PRÉSENTATION DE L'ÉTUDE

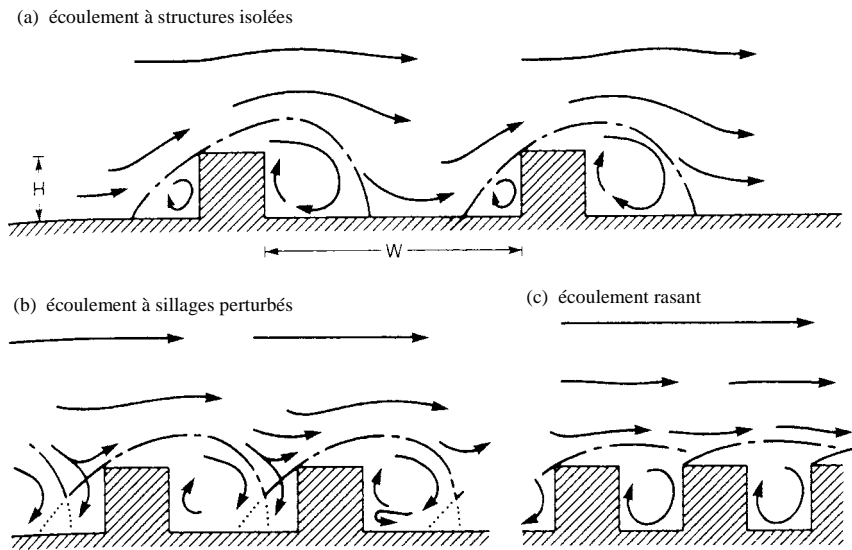


Figure 1.4 : structure des écoulements derrière des bâtiments [Oke, 1988].

Le figure 1.5 situe ces 3 types régimes en fonction de la géométrie des rues et bâtiments :

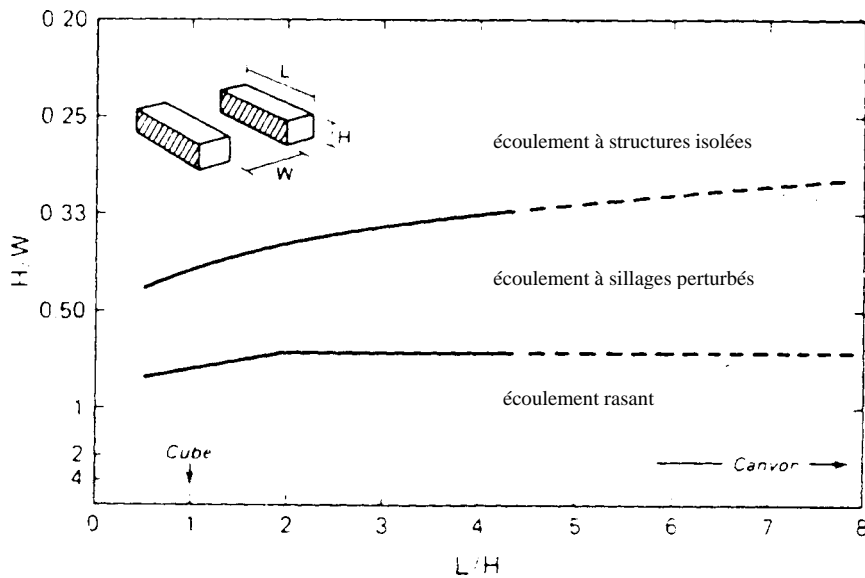


Figure 1.5: influence de la géométrie des rues sur les écoulements [Oke, 1988].

L'écoulement autour d'un bâtiment, malgré une géométrie des plus basique, est d'une grande complexité (figure 1.6). Il a été notamment étudié expérimentalement par Castro et Robins [Castro & Robins, 1977] ainsi que par Martinuzzi et Tropea [Martinuzzi & Tropea,

### 1.3 La canopée urbaine

1993]. Quand le fluide atteint le cube, un tourbillon en forme de fer à cheval s'entoure autour de lui à proximité du sol et se prolonge en aval. Le sillage est caractérisé par une turbulence accrue et des vitesses horizontales plus faibles que dans la zone non perturbée. L'écoulement revient vers le cube pour s'écraser contre la face sous le vent. On peut noter ou non la présence d'un recollement sur la partie supérieure de l'obstacle, et ceci en fonction de sa longueur et du niveau de turbulence.

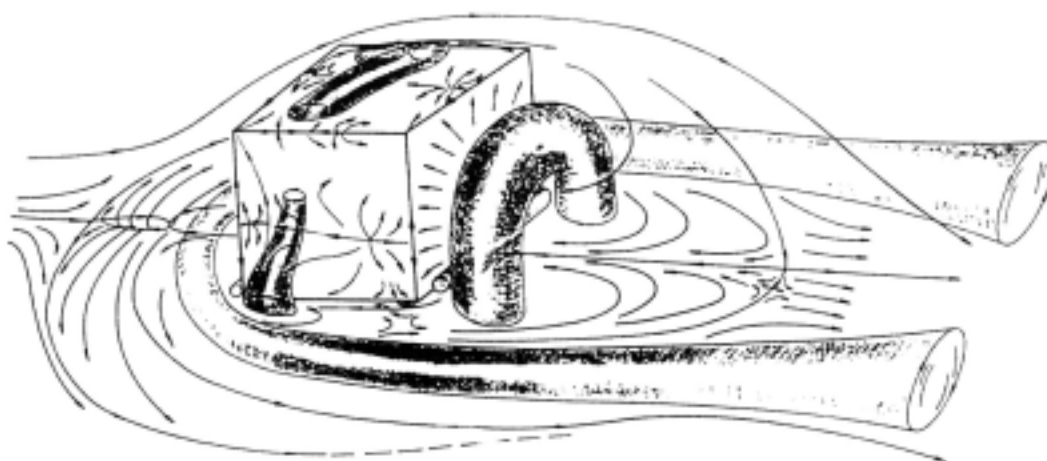


Figure 1.6 : représentation schématique de l'écoulement autour d'un obstacle cubique  
[Martinuzzi & Tropea, 1993]

**Aspect thermique.** La prise en compte du rayonnement solaire et des échanges radiatifs entre les bâtiments est de première importance, puisque la modification du bilan thermique de surface, en raison de la présence des bâtiments, est une des causes de l'existence d'un îlot de chaleur au-dessus des villes [Oke, 1987]. En effet, pour une même superficie au sol, la surface totale offerte au rayonnement solaire est plus grande à la ville qu'à la campagne. Le rayonnement solaire est réfléchi plusieurs fois dans les structures de base de la ville appelées canyons (rue bordée de bâtiments de chaque côté). La température moyenne au-dessus des villes peut alors être comme nous l'avons déjà évoqué de 5°C à 12°C supérieure à celle de la campagne environnante [Oke, 1987]. La convection naturelle s'y développe, aussi bien à l'échelle du quartier qu'à celle plus locale. C'est ce qu'a illustré Levi-Alvares [Levi-Alvares, 1991] en simulant les écoulements schématisés sur la figure 1.7 dans un canyon, d'une part en régime isotherme, et d'autre part en chauffant un des

## CHAPITRE 1 PRÉSENTATION DE L'ÉTUDE

deux bâtiments. La recirculation principale est alors scindée en deux en raison des phénomènes de convection qui naissent le long du bâtiment de droite.

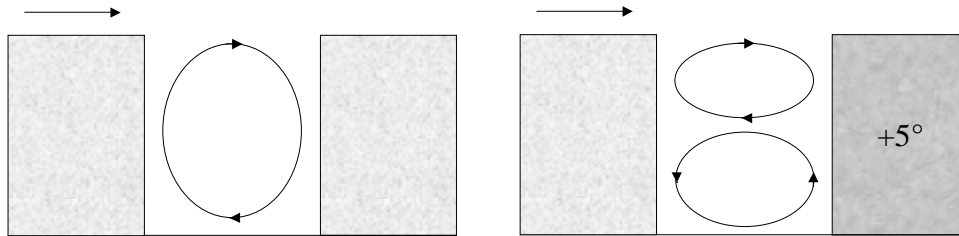


Figure 1.7 : recirculations dans un canyon avec (à droite) et sans (à gauche) différence de température entre les deux bâtiments

De nombreux paramètres entrent en ligne de compte pour modéliser ces écoulements, tels que la détermination de l'intensité du rayonnement solaire, les réflexions du rayonnement entre bâtiments ou la détermination des masques et ombres portées. Ces aspects, déterminants pour la simulation de nos problèmes, sont également pris en compte lors de l'étude de la conception des bâtiments et du confort thermique dans les habitations [Boyer, 1993 ; Pignolet-Tardent, 1996].

# CHAPITRE 2

## DYNAMIQUE ET THERMIQUE

### À L'ÉCHELLE LOCALE

Nous présentons dans cette partie la modélisation des écoulements autour de bâtiments. Nous verrons que les équations fondamentales de la mécanique des fluides que nous utilisons doivent être complétées, en raison du caractère turbulent des phénomènes, par un modèle de turbulence. Nous en étudierons trois dans la section 2.2. Suivent une présentation et un choix des méthodes d'estimation des différents flux solaires et d'échange radiatif entre les obstacles. Les outils numériques permettant la résolution des équations ainsi que la validation des méthodes sur des cas tests et le résultat de simulations numériques tridimensionnelles clôtureront ce chapitre.

#### 2.1 Les équations fondamentales

L'approche eulérienne des phénomènes est retenue et nous utilisons les équations déterministes de la mécanique des fluides : équations de conservation de la masse (2.1) , de Navier-Stokes (2.2) et de l'énergie (2.4).

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

Nous faisons l'hypothèse d'écoulement incompressible et réduisons les forces extérieures au seul champ de pesanteur (la force de Coriolis est négligeable car le nombre de Rossby est inférieur à 1). Les équations s'écrivent alors :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} \approx 0 \quad (2.1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \underbrace{\Sigma}_{\text{tenseur des contraintes}} + \underbrace{\rho \mathbf{g}}_{\text{force de pesanteur}} \quad (2.2)$$

où  $\Sigma$  est défini pour un fluide Newtonien par la relation suivante :

$$\Sigma = \underbrace{-p\mathbf{I}}_{\text{pression}} + \underbrace{\mu(\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u})}_{\text{contraintes visqueuses}} \quad (2.3)$$

$$\rho C_p \left( \underbrace{\frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{variation locale}} + \underbrace{\mathbf{u} \cdot \nabla T}_{\text{advection}} \right) = \nabla \cdot \left( \underbrace{\lambda \nabla T}_{\text{flux de conduction}} \right) - \nabla \cdot \underbrace{\phi}_{\text{flux radiatif}} \quad (2.4)$$

La masse volumique est ici variable, fonction de la température. Le système, composé des équations (2.1) à (2.4), est complété par la loi d'état suivante :

$$\rho = \rho_0 (1 - \beta (T - T_0)) \quad (2.5)$$

où  $\rho_0$  et  $T_0$  sont la masse volumique et la température de référence, et  $\beta$  le coefficient de dilatation isobare défini pour le gaz parfait par :

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \approx \frac{1}{T_0} \quad (2.6)$$

## 2.2 Des problèmes turbulents

### 2.2.1 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. Lesieur [Lesieur, 1994] la définit comme un système dynamique imprévisible, désordonné, possédant de fortes propriétés de mélange, un caractère dissipatif et faisant intervenir une très large gamme d'échelles spatiales<sup>2</sup>.

Deux nombres sans dimension caractérisent en général le régime turbulent. Tous les deux comparent, d'un point de vue général, les facteurs « déstabilisateurs » aux facteurs « stabilisateurs » [de Moor, 1983]. Lorsque le rapport de ces deux forces est supérieur à une valeur critique, le régime d'écoulement est alors turbulent. Le premier est le nombre de Reynolds qui est le rapport des forces d'inertie aux forces de viscosité. Si  $U$  et  $L$  sont une vitesse et une longueur caractéristiques de l'écoulement et  $\nu$  la viscosité cinématique du fluide, il s'écrit :

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (2.7)$$

Pour un écoulement de couche limite -  $L$  représentant une abscisse - la transition se fait aux environs de  $Re=5.10^5$ .

La turbulence peut aussi provenir de mouvements convectifs provoqués par des variations de température qui induisent par le jeu des forces d'Archimède des mouvements ascendants. La viscosité s'oppose à ces mouvements et l'on peut définir un autre nombre sans dimension

---

<sup>2</sup> échelles spatiales allant de la dimension transversale du domaine à une échelle de quelques millimètres correspondant aux effets de dissipation visqueuse.



## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

comme le rapport des forces convectives liées à un gradient de température aux forces de viscosité. C'est le nombre de Rayleigh qui s'écrit, pour l'écoulement entre deux plaques horizontales séparées d'une distance  $L$ , la plaque supérieure à la température  $T_0$ , l'autre à la température  $T_0 + \Delta T$ , par la relation suivante :

$$Ra = \frac{gL^3\Delta T}{T_0\lambda\nu} \quad (2.8)$$

Pour une valeur supérieure à 50000 l'écoulement est considéré comme turbulent.

En ce qui concerne les écoulements que nous rencontrons, il est aisé de voir qu'ils sont fortement turbulents puisque pour une couche limite de 1000 mètres de longueur et une vitesse de 15 m.s<sup>-1</sup> le nombre de Reynolds est de l'ordre de 10<sup>9</sup>. Le nombre de Rayleigh est plus difficilement applicable à la couche limite atmosphérique, mais si l'on se place par exemple entre deux bâtiments, l'un à l'ombre et l'autre au soleil, distants de 20 mètres, la différence de température minimum qui induira un écoulement turbulent d'un point de vue convectif est de l'ordre de 8.10<sup>-5</sup> °.

### 2.2.2 Décomposition de Reynolds

Dans l'absolu, le système d'équations fondamentales que nous avons présenté dans le chapitre précédent permet de modéliser la turbulence dans toutes ses échelles puisqu'elles sont nettement supra-moléculaires [Ha Min, 1993]. C'est l'approche de la simulation directe (DNS), mais un maillage dans chaque direction de l'ordre  $Re^{3/4}$  est alors nécessaire pour traiter les plus petites échelles de la turbulence. Nous atteignons ainsi, pour des nombres de Reynolds atmosphériques, les limites de l'informatique actuelle.

Cependant, malgré le caractère aléatoire de la turbulence, il est possible par une approche statistique de modéliser les écoulements turbulents. Cette approche consiste à l'aide d'un système d'équations approprié à filtrer les irrégularités de la turbulence pour n'en retenir qu'une valeur moyenne.

## 2.2 Des problèmes turbulents

Le passage des équations déterministes aux équations statistiques repose sur la décomposition de Reynolds où tout champ  $\varphi$  ( $\varphi = \mathbf{u}$ ,  $T$  ou  $p$ ) se décompose en un champ moyen<sup>3</sup>  $\bar{\varphi}$  et en un champ fluctuant  $\varphi'$  de moyenne nulle :

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \bar{\varphi}(\mathbf{x}, t) + \varphi'(\mathbf{x}, t) \quad (2.9)$$

La moyenne est à l'origine une moyenne d'ensemble (moyenne stochastique), c'est à dire qu'elle est prise sur un ensemble d'expériences effectuées dans des conditions identiques. L'hypothèse d'ergodicité [Favre, 1976] - il est équivalent de considérer une expérience répétée une infinité de fois ou une seule expérience menée à l'infini dans le temps - permet le passage à des moyennes temporelles, et par conséquent un traitement statistique des équations. Les équations ne sont alors a priori valables que pour des écoulements stationnaires mais dans la pratique elles sont largement utilisées pour les cas instationnaires.

**Un système pour les champs moyens.** Pour des écoulements à faible nombre de Mach, il est courant de considérer comme négligeables les fluctuations de la masse volumique [Schiestel, 1993], ce qui se traduit par la relation suivante :

$$\rho = \bar{\rho} \quad (2.10)$$

En remplaçant dans les équations fondamentales les expressions instantanées des champs par leur expression sous la forme de la relation (2.9), et en moyennant les équations obtenues, on obtient le système suivant :

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} \approx 0 \quad (2.11)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}} \right) + \nabla (\overline{\rho \mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'}) = \nabla \cdot \bar{\Sigma} + \rho \mathbf{g} \quad (2.12)$$

---

<sup>3</sup> L'opération moyenne vérifie les propriétés classiques de linéarité, de commutativité avec les opérations de dérivation et d'intégration, et d'idempotence  $\overline{\bar{f}} = \bar{f}$ .

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

$$\rho C_p \left( \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{T} \right) + \nabla \cdot (\rho C_p \overline{\mathbf{u}'T'}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla \bar{T}) \quad (2.13)$$

$$\rho = \rho_0 (1 - \beta (\bar{T} - T_0)) \quad (2.14)$$

De part la non-linéarité des équations Navier-Stokes et de l'énergie, des inconnues supplémentaires apparaissent. Ces corrélations doubles (termes de Reynolds  $\overline{\rho \mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'}$  et  $\rho C_p \overline{\mathbf{u}'T'}$ ) rendent le système ouvert : il comporte plus d'inconnues que d'équations. Différentes méthodes de fermeture ont été proposées. Nous ne développerons que le concept de viscosité turbulente, les autres approches figurant dans de nombreux ouvrages de mécanique des fluides et de turbulence [Favre & al., 1976 ; Launder & al., 1984].

### 2.2.3 Le concept de viscosité turbulente

En considérant que l'interaction entre le champ moyenné et le champ fluctuant se réduit à un terme de dissipation et en suivant une approche analogue à celle développée pour exprimer le terme de contraintes visqueuses dans le cas de fluide Newtonien, les contraintes de Reynolds peuvent être modélisées par la relation de Boussinesq suivante :

$$-\overline{\rho \mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'} = -\frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} + \mu_t (\nabla \bar{\mathbf{u}} + {}^t \nabla \bar{\mathbf{u}}) \quad (2.15)$$

où  $k$ , l'énergie cinétique turbulente moyenne par unité de masse, joue le rôle d'une pression turbulente due aux mouvements d'agitation. Elle est définie par :

$$k = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{u}' \cdot \mathbf{u}'} \quad (2.16)$$

La viscosité turbulente  $\mu_t$  est définie comme le produit de la masse volumique par le carré d'une vitesse et d'un temps caractéristiques de l'écoulement. Les modèles reposant sur ce concept consistent donc à expliciter des relations algébriques ou bien des équations pour ces deux nouvelles variables  $k$  et  $\mu_t$ .

## 2.2 Des problèmes turbulents

La fermeture de l'équation pour la température (2.13) est basée sur le même principe. Le flux turbulent de chaleur fluctuante s'exprime par la relation :

$$-\rho \overline{\mathbf{u}'T'} = \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{T} \quad (2.17)$$

où  $\sigma_t$  est le nombre de Prandtl turbulent.

Les équations Navier-Stokes et de l'énergie se réécrivent donc comme suit. Il reste alors à évaluer la viscosité turbulente et l'énergie cinétique turbulente.

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}} \right) = -\nabla(p + \frac{2}{3} \rho k) + \nabla \cdot ((\mu + \mu_t)(\nabla \bar{\mathbf{u}} + {}^t \nabla \bar{\mathbf{u}})) + \rho \mathbf{g} \quad (2.18)$$

$$\rho C_p \left( \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{T} \right) = \nabla \cdot ((\lambda + C_p \frac{\mu_t}{\sigma_t}) \nabla \bar{T}) \quad (2.19)$$

### 2.2.4 Les modèles k-ε et RNG

Le modèle k-ε [Launder & Spalding, 1974] est certainement le modèle le plus répandu. La viscosité turbulente est donnée par la relation :

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.20)$$

où  $\bar{\varepsilon}$ , taux de dissipation visqueuse de l'énergie cinétique turbulente, est donné par :

$$\varepsilon = \mu \overline{\nabla \mathbf{u}' : \nabla^t \mathbf{u}'} \quad (2.21)$$

Les deux équations de fermeture s'écrivent (cf. Annexe A pour la démonstration de l'équation en  $k$ ) :

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

$$\rho \left( \frac{\partial k}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) k \right) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + P + G - \rho \varepsilon \quad (2.22)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \varepsilon \right) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + C_{\varepsilon 1} (P + C_{\varepsilon 3} G) \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.23)$$

avec :

$$P = \mu_t \text{tr}(\nabla \bar{\mathbf{u}} : \nabla \bar{\mathbf{u}} + {}^t \nabla \bar{\mathbf{u}} : \nabla \bar{\mathbf{u}}) \quad (2.24)$$

$$G = - \frac{\mu_t}{\sigma_t} \beta \mathbf{g} \cdot \nabla \bar{T} \quad (2.25)$$

Les constantes, déterminées empiriquement par les auteurs du modèle, sont données dans le tableau suivant :

$C_\mu$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$	$\sigma_t$	$C_{\varepsilon 1} C_{\varepsilon 3}$
0,09	1,44	1,92	1	1,3	1	0,7

Tableau 2.1 : constantes du modèle  $k-\varepsilon$

Pour tenir compte de la prédominance des forces de viscosité près des parois, des lois complémentaires doivent être introduites pour déterminer la valeur des différentes variables du problème au premier nœud après une paroi (nœud P). Elles sont ici simplifiées puisque les lois classiques sur la vitesse et l'énergie cinétique turbulente ne sont pas introduites :  $\bar{\mathbf{u}}$  et  $k$  sont calculées jusqu'aux parois par les équations précédentes et  $\varepsilon$  déterminé au nœud P par la loi suivante [Parneix, 1995] :

## 2.2 Des problèmes turbulents

$$\varepsilon_p = C_\mu^{3/4} \frac{k_p^{3/2}}{\kappa y} \quad (2.26)$$

avec :

$\kappa$ , constante de von Karman égale à 0,42

$y$ , distance du nœud P à la paroi.

Ce modèle est très répandu de part sa simplicité, sa robustesse et sa facilité de mise en œuvre. Bien que les aspects généraux des écoulements soient bien simulés, il apparaît certaines insuffisances dues notamment à la valeur des constantes et au fait que le modèle est trop diffusif. Les modifications apportées au modèle k- $\varepsilon$  sont nombreuses, dont notamment les extensions suivantes :

- le modèles k- $\varepsilon$  deux couches [Chen & Patel, 1988] qui, à proximité des parois, utilise un modèle à une équation (pour k) et exprime  $\varepsilon$  à l'aide d'une longueur caractéristique déterminée par une formule algébrique fonction du nombre de Reynolds local ;
- le modèle k- $\varepsilon$  bas Reynolds [Jones & Launder, 1972] qui élargit son domaine de validité aux zones d'écoulement laminares ou de transition à proximité des parois. Les constantes sont rendues dépendantes du nombre de Reynolds et des termes complémentaires sont ajoutés aux deux équations pour tenir compte du caractère non-isotrope du processus de dissipation.
- le modèle k- $\varepsilon$  étendu [Chen & Kim, 1987], qui ajoute un terme à l'équation du taux de dissipation pour que le transfert d'énergie réponde plus efficacement à la déformation moyenne de l'écoulement, rend le modèle moins diffusif ;
- le modèle RNG, développé par le groupe de renormalisation [Yakhot & Smith, 1992] et que nous avons implanté dans le code. Il consiste en une estimation au cours du calcul de la constante  $C_{\varepsilon 1}$ , remplacée dans l'équation de dissipation par  $C_{\varepsilon 1}'$  donnée par l'expression 2.27. Cette expression ajoute un terme fonction du

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

taux de déformation  $\eta$  à l'équation du taux de dissipation le rendant ainsi moins diffusif.

$$c'_{\varepsilon 1} = c_{\varepsilon 1} - \frac{\eta(1-\eta_0)}{1+\beta\eta^3} \quad (2.27)$$

avec :

$$\eta = \frac{k}{\varepsilon} \sqrt{\frac{P}{\mu_t}} \quad (2.28)$$

Les constantes du modèle RNG ont pour valeur :

$C_\mu$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$	$\sigma_t$	$C_{\varepsilon 1}C_{\varepsilon 3}$	$\eta_0$	$\beta$
0,085	1,42	1,68	0,7179	0,7179	1	0,7	4,377	0,012

Tableau 2.2 : constantes du modèle RNG

### 2.2.5 Le modèle $v^2$ -f

Il a été développé par Durbin [Durbin, 1991] et représente une évolution du modèle  $k$ - $\varepsilon$ . Il a été testé sur divers écoulements comme les écoulements à décollement [Durbin, 1995] ou l'impact d'un jet sur une plaque chauffée [Behnia et al., 1996], et constitue une réelle amélioration au niveau des profils de vitesse ou des transferts thermiques.

La viscosité turbulente cinématique s'exprime comme le produit du carré d'une vitesse et d'un temps caractéristiques de l'écoulement. Dans le modèle  $k$ - $\varepsilon$ , l'énergie cinétique turbulente représente le carré de la vitesse caractéristique. Or, près des parois, cette dernière est plutôt représentée par la fluctuation de la vitesse normale aux lignes de courant  $v^2$  que par  $k$ .

## 2.2 Des problèmes turbulents

Par conséquent, le modèle  $k$ - $\varepsilon$  ne prend pas correctement en compte l'annulation de la viscosité turbulente près des parois.

Dans le modèle  $v^2$ - $f$  la viscosité turbulente dynamique est exprimée par la relation :

$$\mu_t = \rho C_\mu v^2 T \quad (2.29)$$

De cette façon, le modèle tient compte de l'anisotropie de la turbulence près des parois.  $T$  est le temps caractéristique de la turbulence défini par la relation suivante :

$$T = \max\left[\frac{k}{\varepsilon}, C_T \left(\frac{v}{\varepsilon}\right)^{1/2}\right] \quad (2.30)$$

Aux équations légèrement modifiées de  $k$  et  $\varepsilon$  est alors rajoutée une équation de transport pour  $v^2$ . Le système se résume aux équations suivantes :

$$\rho \frac{dk}{dt} = P - \rho\varepsilon + \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] \quad (2.31)$$

$$\rho \frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{C_{\varepsilon 1} P - C_{\varepsilon 2} \rho\varepsilon}{T} + \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] \quad (2.32)$$

$$\rho \frac{dv^2}{dt} = \rho k f - \frac{v^2}{k} \rho\varepsilon + \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla v^2 \right] \quad (2.33)$$

où  $P$  est le terme de production d'énergie cinétique turbulente moyenne.

La variable  $f$ , qui représente la redistribution de l'intensité turbulente -  $kf$  étant le terme de production de  $f$  -, est évaluée par l'équation elliptique suivante :



## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

$$f - L^2 \nabla^2 f = (C_{f1} - 1) \frac{2/3 - v^2/k}{T} + C_{f2} \frac{P}{k} \quad (2.34)$$

où  $L$  est la longueur caractéristique donnée par :

$$L = C_L \max \left[ \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, C_\eta \left( \frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \right] \quad (2.35)$$

Les constantes sont les suivantes :

$C_\mu$	$C_{\varepsilon1}$	$C_{\varepsilon1}^*$	$C_{\varepsilon2}$	$C_{f1}$	$C_{f2}$	$C_T$	$C_L$	$C_\eta$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$
0,19	1,55	0,04	1,9	1,4	0,3	6	0,3	70	1	1,3

Tableau 2.3 : constantes du modèle  $v^2$ - $f$

et

$$C'_{\varepsilon1} = C_{\varepsilon1} \left( 1 + C_{\varepsilon1}^* \sqrt{\frac{k}{v^2}} \right)$$

### 2.3 Prise en compte du rayonnement solaire

La principale source de convection dans les villes est le réchauffement du sol par le rayonnement solaire. Les transferts thermiques dans l'atmosphère et dans les bâtiments par conduction et convection sont traités, comme nous le verrons section 2.4.1, lors de la résolution de l'équation de l'énergie grâce à l'utilisation d'un maillage déconnecté de la géométrie étudiée. Il reste à déterminer les transferts par rayonnement qui se décomposent en un flux solaire de courte longueur d'onde et un flux d'échange de grande longueur d'onde entre les surfaces des bâtiments et des rues (figure 2.1). Ce seront des termes sources de l'équation de l'énergie.

## 2.3 Prise en compte du rayonnement solaire

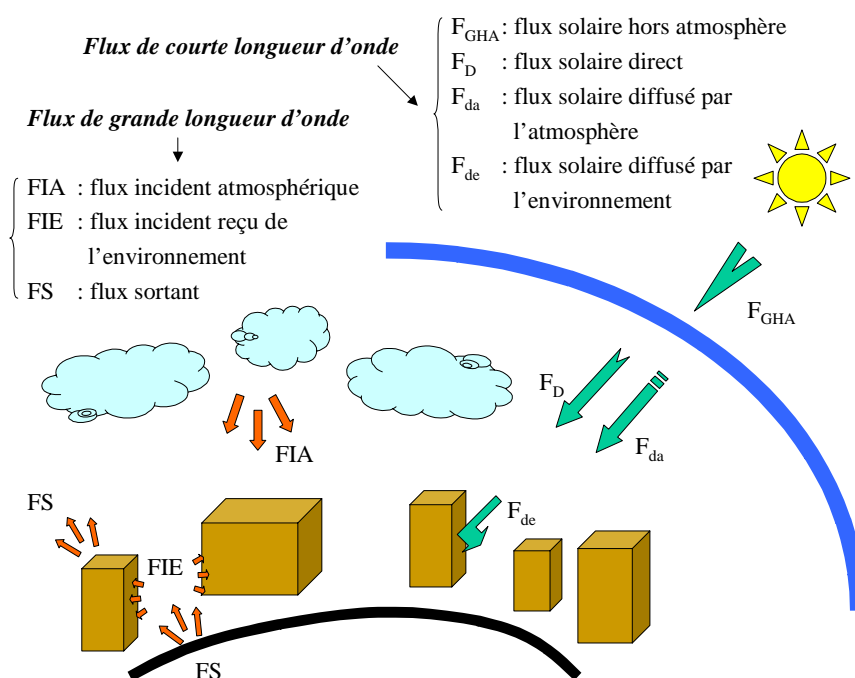


Figure 2.1 : les différents flux radiatifs

Les chapitres suivants reprennent et développent les résultats d'une publication parue en 1999 [Glockner et al., 1999].

### 2.3.1 Flux Solaire de Courte Longueur d'Onde

Le flux solaire global de courte longueur d'onde (FSCLO) reçu par une surface placée horizontalement sur le sol est fréquemment mesuré par les stations météorologiques, en général toutes les heures. Mais cette information n'est pas suffisante puisque nous sommes en présence de bâtiments, possédant des surfaces verticales, ou bien de rues épousant le relief et donc possédant une inclinaison par rapport à l'horizontale. Notre objectif est alors de déterminer le flux solaire global reçu par une surface autre qu'horizontale.

L'image d'un disque solaire au contour net représente la portion du rayonnement solaire qui atteint directement un observateur [Pielke, 1984] : c'est le flux solaire direct. À l'opposé, par temps couvert, le soleil n'est pas visible et tout le flux solaire est diffusé par l'atmosphère. Ce rayonnement est ensuite absorbé par la surface terrestre, composée du sol et des constructions, mais une partie est également réfléchiée par le sol et les bâtiments vers l'atmosphère, ou

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

aussi vers les bâtiments. Nous décomposons donc le flux solaire global en la somme d'un flux solaire direct  $F_D$  et d'un flux solaire diffusé par l'atmosphère  $F_{da}$  et par l'environnement  $F_{de}$  (flux anisotrope) :

$$F_{SCLO} = F_D + F_{da} + F_{de} \quad (2.36)$$

Les sections suivantes présentent un bilan non exhaustif des méthodes existantes, le choix que nous avons fait, ainsi que leurs adaptations aux espaces urbains.

**Flux solaire direct  $F_{DH}$  sur un plan horizontal.** Lebru [Lebru, 1983] a testé huit modèles d'estimation de flux solaire direct sur des mesures effectuées à Trappes (Yvelines) et Carpentras (Vaucluse). Ils sont basés sur une corrélation empirique donnant le flux direct solaire en fonction du coefficient de transmission de l'atmosphère  $K_t$ . Ce dernier est le rapport du flux global hors atmosphère normal aux rayons solaires ( $F_{GHA}=1370 \text{ W.m}^{-2}$  en moyenne) au flux global mesuré au sol sur un plan horizontal  $F_{GH}$ .

Pour tenir compte de la variation de la distance Terre-Soleil, le flux hors atmosphère s'exprime de façon plus précise par la formule suivante dans laquelle  $Z$  est l'angle solaire zénithal (cf. éq. 2.42),  $m$  le numéro du mois et  $j$  le numéro du jour dans le mois :

$$F_{GHA}=1370 ( 1 + 0,034 \cos ( 30 ( m - 1 ) + j ) \cos Z \quad (2.37)$$

La seule donnée d'entrée est donc le flux solaire sur un plan horizontal mesuré par les stations météorologiques à l'aide d'un pyranomètre. Lebru a retenu comme modèles les plus performants celui de Erbs et al. [Erbs et al., 1981] ainsi que celui de Orgill et Hollands [Orgill et Hollands, 1976], formules polynomiales en  $K_t$ . Ce dernier est décrit par les équations suivantes :

### 2.3 Prise en compte du rayonnement solaire

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{si } K_t \in [0; 0,35] \\ \text{si } K_t \in [0,35; 0,75] \\ \text{si } K_t > 0,8 \end{array} \right. \begin{array}{l} \frac{F_{DH}}{F_{GH}} = 1 - 0,249K_t \\ \frac{F_{DH}}{F_{GH}} = 1,557 - 1,84K_t \\ \frac{F_{DH}}{F_{GH}} = 0,177 \end{array} \quad (2.38)$$

Plus récemment, Perez [Perez, 1990a] compare sur une plus grande base de données balayant tout type de climat - désertique, continental, méditerranéen, en atmosphères urbaines polluées... - trois modèles : les modèles de Erbs et al., de Skartveit et Olseth [Skartveit et Olseth, 1987] et celui de Maxwell [Maxwell, 1987]. Pour les deux derniers, l'introduction d'un paramètre physique (la distance zénithale) améliore les résultats. Des trois modèles, celui de Maxwell, bien qu'il soit dans certaines conditions dépassé par celui de Skartveit et Olseth, est dans l'ensemble le plus performant. Ce modèle repose comme les autres sur des corrélations empiriques mais également sur une description physique du ciel.

Enfin, Perez [Perez, 1992] a modifié le modèle de Maxwell en introduisant un facteur dynamique par la prise en compte des changements de condition d'ensoleillement (et éventuellement de la température du point de rosée). Le modèle, qui a gagné en complexité, est aussi plus proche des mesures effectuées là aussi pour tout type de climat. C'est celui que nous avons retenu.

**Passage à un plan d'inclinaison quelconque.** Le passage du plan horizontal à un plan d'orientation quelconque nécessite la détermination de la position du soleil par rapport à la surface. Pour une surface dont la normale fait un angle  $i$  avec la direction des rayons solaires (figure 2.3), le flux direct incident reçu est :

$$F_D = F_{DH} \cos i \quad (2.39)$$

Cet angle peut s'exprimer à l'aide de relations de trigonométrie sphérique en fonction de la position géographique (latitude et longitude), de la position du soleil dans le ciel (azimut, angle zénithal et angle horaire) et de la position de la surface [Oke, 1987]. Ces formules font appel aux angles et temps suivants (cf. figure 2.2) :

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

- $\phi$ , la latitude du lieu ;
- $\delta$ , la déclinaison solaire : angle entre la direction des rayons solaires et le plan équatorial. Elle s'exprime en fonction de la date julienne  $t_j$  (numéro du jour compris entre 1 et 365) par la relation :

$$\delta = -23,4 \cos \left[ \frac{360(t_j + 10)}{365} \right] \quad (2.40)$$

- $Z$ , l'angle solaire zénithal : angle entre le zénith et la direction des rayons solaires ;
- $t$ , l'heure locale apparente : elle correspond à l'heure locale ramenée au méridien de Greenwich en ajoutant (ou soustrayant) 4 minutes par degré de longitude est (ouest) à laquelle on ajoute une correction algébrique en raison des variations du taux de rotation de la Terre au cours de l'année ;
- $h$ , l'angle horaire : angle dont doit tourner la terre pour que le lieu en question soit directement sous les rayons solaires de telle sorte que  $Z$  soit égal à zéro. Il est donné par la relation suivante (la Terre effectue une rotation de  $15^\circ$  en une heure) :

$$h = 15(12 - t) \quad (2.41)$$

- $\Omega$ , l'azimut solaire : angle entre la projection des rayons solaires sur le plan équatorial et la direction du nord géographique.

$$\cos Z = \sin \phi \sin \delta + \cos \phi \cos \delta \cosh \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} \cos \Omega &= \frac{\sin \delta \cos \phi - \cos \delta \sin \phi \cosh}{\sin Z} && \text{si } t < 12h \\ &= 2\pi - \frac{\sin \delta \cos \phi - \cos \delta \sin \phi \cosh}{\sin Z} && \text{si } t > 12h \end{aligned} \quad (2.43)$$

### 2.3 Prise en compte du rayonnement solaire

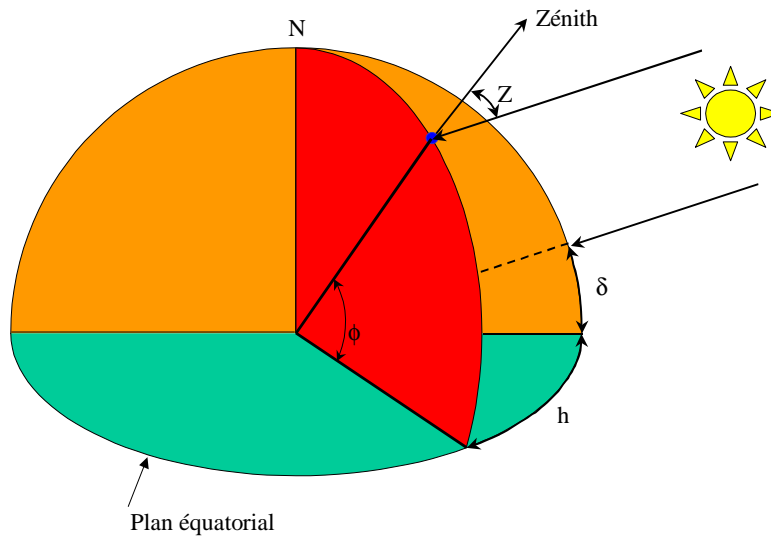


Figure 2.2 : angles dans un repère équatorial

Une fois l'angle zénithal exprimé, l'angle d'incidence  $i$  est donné par la relation suivante dans laquelle  $\beta$  est l'inclinaison de la surface par rapport au plan horizontal et  $\Lambda$  son azimuth (cf. figure 2.3) :

$$\cos i = \sin \beta \sin Z + \cos \beta \cos Z \cos(\Omega - \Lambda) \quad (2.44)$$

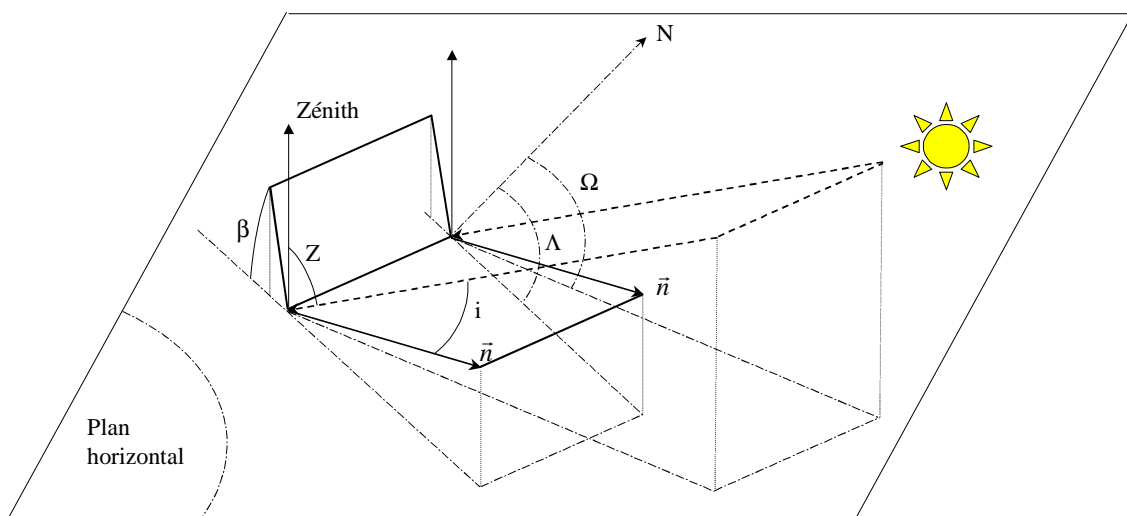


Figure 2.3 : angles relatifs à une surface inclinée

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

**Flux solaire diffusé par l'atmosphère  $F_{da}$ .** En traversant l'atmosphère, le flux solaire est réfléchi par les particules solides, liquides ou gazeuses qu'il rencontre. Une partie est réfléchie hors atmosphère, l'autre atteint la surface terrestre : c'est le flux diffusé par l'atmosphère.

Les méthodes fréquemment rencontrées se scindent en deux catégories : isotropes et anisotropes. Nous écartons les méthodes isotropes mieux adaptées à une évaluation journalière qu'horaire de ce flux. Sachant que sa détermination est de première importance dans l'estimation du flux solaire total, nous avons retenu la méthode la plus précise actuellement bien que plus coûteuse en temps de calcul. Il s'agit de la méthode de Perez [Perez, 1987], recommandée par l'IEA (International Energy Agency). Pour tenir compte des deux effets principaux d'anisotropie dans l'atmosphère (diffusion par les aérosols, diffusion de Rayleigh et rétrodiffusion près de l'horizon), à la voûte céleste à caractère isotrope sont superposés les effets de la zone circumsolaire, de l'horizon et du zénith. Cette méthode a été validée et comparée à d'autres modèles pour tout type de climat [Perez, 1990b] et a donné des résultats très satisfaisants.

**Flux solaire diffusé par l'environnement  $F_{de}$ .** Le flux diffusé par l'environnement provient de la réflexion du rayonnement solaire global (direct+diffusé par l'atmosphère) sur les surfaces constitutives de la ville (sols, toits, murs). Nous avons vu en introduction qu'il était une des causes de la formation de l'îlot de chaleur au-dessus des villes. En nous limitant à une seule réflexion isotrope (hypothèse vraisemblable pour des surfaces rugueuses pour lesquelles le coefficient de réflexion est faible), le flux solaire diffusé par l'environnement reçu par une surface  $S_i$  s'écrit :

$$F_{de} = \sum_{S_j \neq S_i} (F_{da_j} + F_{D_j}) f_{ji} (1 - \varepsilon_j) \quad (2.45)$$

où  $\varepsilon_j$  est l'émissivité de surface.

**Adaptation aux espaces urbains.** Les méthodes précédemment exposées ont été mises au point pour des surfaces dégagées de tout obstacle et nécessitent donc une adaptation au cas de surfaces issues d'une rue, d'un toit ou d'un bâtiment. La première modification ré-

### 2.3 Prise en compte du rayonnement solaire

side en fait dans la détermination d'un facteur multiplicatif du flux direct que nous appelons facteur d'ombre  $f_o$ . Si la surface est à l'ombre il prend la valeur 1, sinon la valeur 0.

Nous le déterminons pour une surface  $S_i$  donnée en fonction de la position du soleil dans le ciel (repéré par son azimut et sa hauteur zénithale) et de la position des bâtiments autour de  $S_i$ . Pour cela, nous centrons un repère horizontal sur  $S_i$  dont le troisième axe est confondu avec la verticale. Nous construisons ensuite des pyramides dont la base est formée des différentes facettes des bâtiments. Puis, une comparaison des azimuts et des hauteurs des extrémités des pyramides avec ceux du soleil permet de savoir si la direction du soleil est dans cette pyramide directionnelle. Si tel est le cas, la surface est à l'ombre. Sur la figure suivante, l'azimut de la position (1) et (3) du soleil est compris entre ceux de la pyramide. Dans le cas (1), le soleil est au-dessus du bâtiment et éclaire donc la surface, contrairement au cas (3). Dans le cas deux, aucun obstacle n'entrave les rayons lumineux.

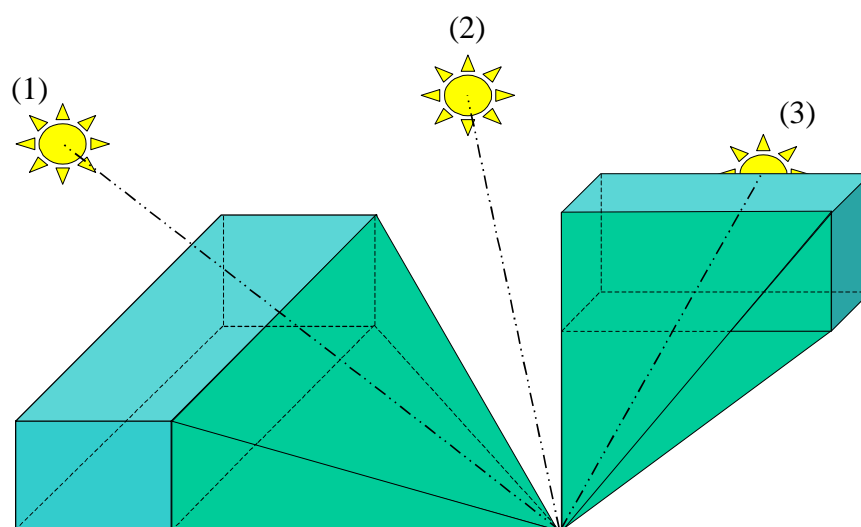


Figure 2.4 : pyramide directionnelle pour le calcul des ombres

Cette méthode a été programmée pour un nombre quelconque de bâtiments. La figure 2.5 représente les ombres projetées par des bâtiments de la place Gambetta à Bordeaux à différents moments de la journée.



## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

La seconde adaptation concerne la méthode de Perez. En effet selon l'endroit où l'on se trouve dans la ville, l'horizon ne sera pas visible (par exemple depuis une rue bordée de bâtiments), la zone circumsolaire non plus et le ciel ne le sera que partiellement. Il faut donc faire intervenir le facteur d'ombre mais aussi le facteur de forme entre le ciel et  $S_i$  dont la détermination est explicitée dans le chapitre suivant.

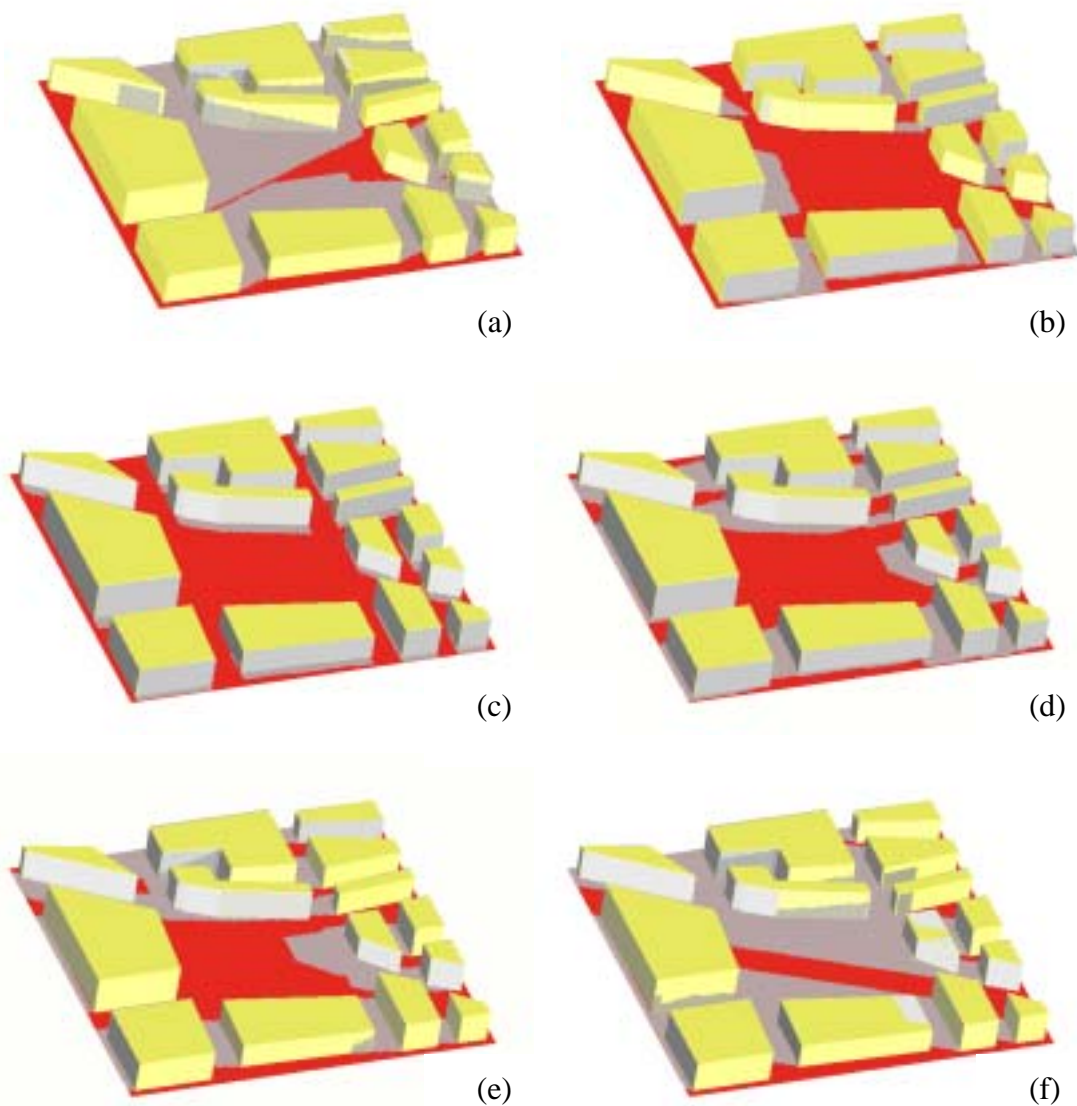


Figure 2.5 : ombres projetées par les bâtiments de la place Gambetta à Bordeaux à différentes heures de la journée : (a) lever du soleil ... (f) coucher du soleil

## 2.3 Prise en compte du rayonnement solaire

### 2.3.2 Flux de Grande Longueur d'Onde

Pour une surface  $S_i$ , le bilan radiatif de grande longueur d'onde (FGLO) se décompose en la somme d'un flux sortant et de deux flux entrants, l'un provenant de l'atmosphère et l'autre des surfaces environnantes non masquées. Si nous assimilons les surfaces rencontrées  $S_j$  à des corps gris d'émissivité  $\varepsilon_j$ , il s'écrit :

$$FGLO = \underbrace{\varepsilon_i \sigma T_i^4}_{FS} - \varepsilon_i \left( \underbrace{\varepsilon_{ciel} f_{i-ciel} \sigma T_{ciel}^4}_{FIA} + \underbrace{\sum_{j \neq i} f_{ij} \varepsilon_j \sigma T_j^4}_{FIE} \right) \quad (2.46)$$

où

- FIA est le flux incident atmosphérique.
- FS est le flux sortant
- FIE est le flux incident reçu de l'environnement constitué des surfaces  $S_j$  appartenant aux autres constructions.

Le coefficient de réflexion des surfaces étant faible, nous ne considérons pas les réflexions de ces flux entre les bâtiments et évitons ainsi d'avoir à traiter des problèmes de radiosité. Le bilan 2.46 nécessite la détermination de certaines quantités obtenues par les méthodes présentées ci-après.

**Détermination du Flux Incident Atmosphérique FIA.** Jiménez [Jiménez, 1987] a rappelé l'importance de ce flux sans lequel la température de la surface de la Terre serait inférieure de 30 à 40 °C à sa température actuelle. Devant la difficulté de déterminer une émissivité et une température du ciel, d'autres paramètres permettent de modéliser ce flux. On trouve généralement la température sous abri, la pression de vapeur saturante et la température du point de rosée. Il a comparé différents modèles empiriques et analytiques à une série de mesures effectuées à Barcelone par temps clair et pour une grande gamme de température et d'humidité. Les résultats des différents modèles sont proches des mesures et comparables entre eux pour des températures supérieures à 0°C. Ils sont par contre inadaptés

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

aux températures négatives. La multiplication des paramètres cités ci-dessus ne semble pas, pour le cas de Barcelone, produire d'amélioration particulière. Nous avons retenu le modèle de Idso et Jackson [Idso et Jackson, 1969] dans lequel le flux incident atmosphérique  $FIA_0$  par temps clair s'exprime en fonction de la température de surface mesurée sous abri par la relation :

$$FIA_0 = \sigma T_a^4 (1 - ce^{-d(273-T_a)^2}) \quad (2.47)$$

avec  $c=7,77 \cdot 10^{-4} K^{-2}$  et  $d=0,261$ .

Par temps couvert, le calcul du flux incident atmosphérique se fait par la prise en compte des différentes couches de nuages. Le modèle de Boltz [Monteith, 1973] s'écrit suivant la relation suivante :

$$FIA = \varepsilon_{ciel} f_{ciel-i} FIA_0 (1 + (\sum k_i A_i) A) \quad (2.48)$$

où  $A$  est la couverture nuageuse totale,  $A_i$  la couverture de la  $i^{ème}$  couche et  $k_i$  une constante empirique fonction de la nature de la couche.

L'émissivité du ciel peut être exprimée en fonction de la pression partielle de vapeur d'eau  $e_0$ , du coefficient de transmission de l'atmosphère  $K_t$  ainsi que de la température de l'air  $T_a$  par la relation [Aubinet, 1994] :

$$\varepsilon_{ciel} = \sigma (94 + 12,6 \ln e_0 - 13K_t + 0,341T_a)^4 \quad (2.49)$$

**Détermination des facteurs de formes.** La difficulté principale dans l'évaluation de l'équation (2.46) réside dans la détermination des facteurs de forme  $f_{ij}$ . C'est un nombre sans dimension qui représente la fraction d'énergie qui quitte une surface  $S_i$  et atteint une autre surface  $S_j$ . C'est un facteur purement géométrique qui dépend de la distance séparant les surfaces et de leur orientation relative (figure 2.6). Il est calculé par la formule suivante :

$$f_{S_i-S_j} = \frac{1}{S_i \pi} \int_{S_i} \int_{S_j} \frac{\cos \theta_i \cos \theta_j}{r^2} dS_i dS_j \quad (2.50)$$

### 2.3 Prise en compte du rayonnement solaire

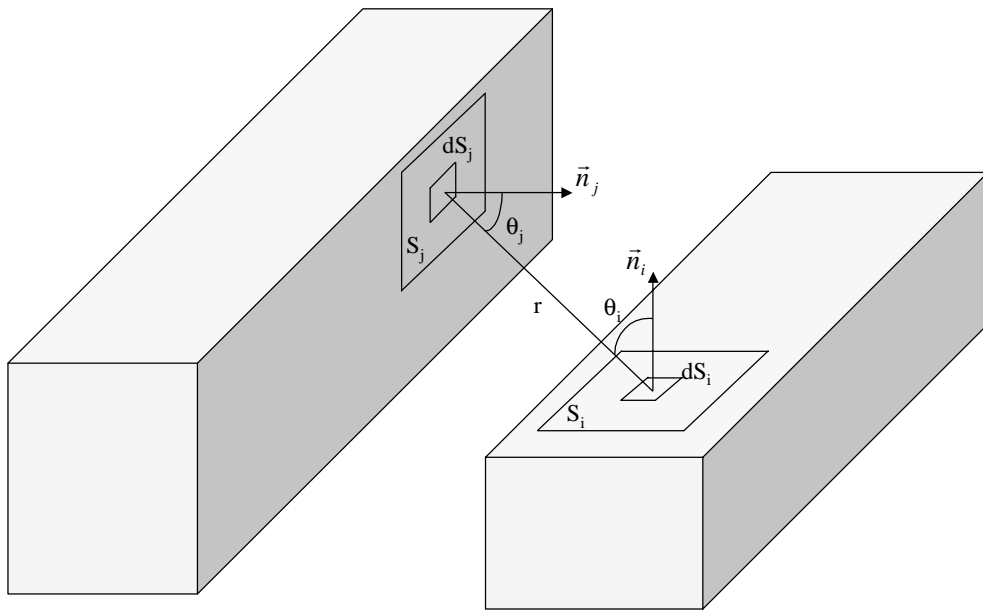


Figure 2.6 : facteur de forme en deux surfaces  $S_i$  et  $S_j$ .

Groleau et Marenne [Groleau & Marenne, 1992] ont développé une méthode simple, précise et efficace en terme de temps de calcul. C'est une méthode géométrique qui donne des résultats exacts (à l'erreur machine près) pour le calcul du facteur de forme entre une surface élémentaire  $dS_i$  et une surface  $S_j$  polygonale. Elle est basée sur l'analogie de Nusselt qui montre l'équivalence entre le facteur de forme et une surface issue d'une double projection de  $S_j$  (figure 2.7).

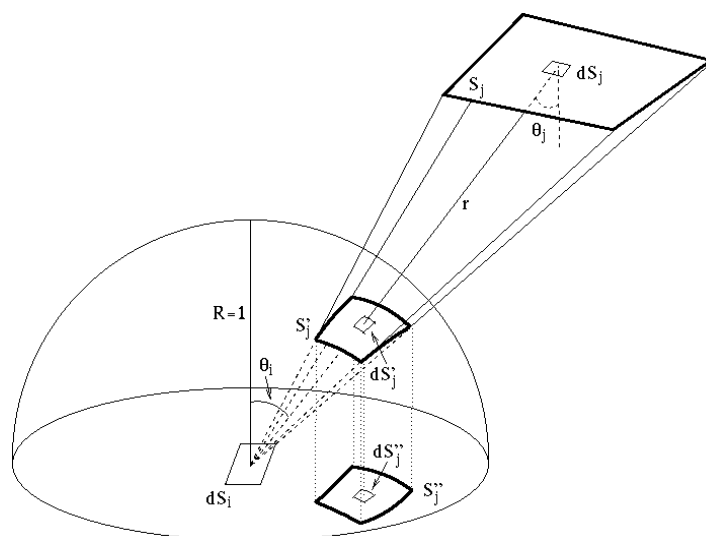


Figure 2.7 : projections dans l'analogie de Nusselt

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

Considérons la formule du calcul du facteur de forme entre une surface élémentaire  $dS_i$  et une surface finie  $S_j$  :

$$f_{dS_i-S_j} = \frac{1}{\pi} \int_{S_j} \frac{\cos\theta_i \cos\theta_j}{r^2} dS_j \quad (2.51)$$

Dans l'expression précédente,  $\frac{\cos\theta_j}{r^2} dS_j$  est la surface élémentaire  $dS_j'$ , projection de  $dS_j$  sur une sphère de rayon unité centrée en  $dS_i$ . L'équation (2.51) se réécrit donc de la façon suivante :

$$f_{dS_i-S_j} = \frac{1}{\pi} \int_{S_j'} \cos\theta_i dS_j' \quad (2.52)$$

dans laquelle  $\cos\theta_i dS_j'$  est la surface élémentaire  $dS_j''$ , projection orthogonale de  $dS_j'$  sur le plan de base de la sphère. L'équation (2.52) se réécrit donc :

$$f_{dS_i-S_j} = \frac{1}{\pi} \int_{S_j''} dS_j'' = \frac{1}{\pi} S_j'' \quad (2.53)$$

où  $S_j''$  est donc la double projection de  $S_j$ .

Calculer cette surface équivaut donc à déterminer le facteur de forme. Pour cela, on note tout d'abord que la projection sur la sphère d'un segment de droite est un arc d'un grand cercle de la sphère, qui, lui-même projeté sur le plan de base, devient un arc elliptique. La surface  $S_j''$  se compose donc d'arcs elliptiques dont il suffit d'intégrer les fonctions. Le détail du calcul de cette aire est reporté Annexe B. C'est cette méthode que nous avons programmée.

Pour le calcul de facteur de forme entre 2 surfaces  $S_i$  et  $S_j$  positionnées de façon quelconque l'une par rapport à l'autre, une discrétisation de  $S_i$  s'impose et amène à calculer par la méthode précédente autant de facteurs de formes qu'il y a d'éléments discrétisés  $\Delta S_i$ . Le facteur de forme final est donné par la relation suivante où  $N$  est le nombre d'éléments discrétisés :

### 2.3 Prise en compte du rayonnement solaire

$$f_{S_i-S_j} = \frac{1}{S_i} \sum_{i=1,N} f_{\Delta S_i-S_j} \Delta S_i \quad (2.54)$$

Notons que cette méthode possède l'avantage de ne procéder qu'à une simple discrétisation contrairement à des méthodes beaucoup plus répandues (hémi-cube, méthode de Spencer, intégration numérique...), ce qui se traduit par un gain au niveau du temps de calcul et de la précision.

Nous avons pu vérifier le bon comportement de cette méthode sur des cas pour lesquels la solution analytique est disponible [Siegel & Howell, 1984 ; Kreith, 1962] avec des précisions relatives de l'ordre de l'erreur machine pour le calcul des facteurs de forme entre surfaces élémentaires et surfaces finies.

La figure 2.9 représente l'erreur relative en fonction de la racine carrée du nombre de points de calcul, pour l'évaluation du facteur de forme entre deux carrés de côté unité, ayant une arête commune, et inclinés l'un par rapport à l'autre d'un angle de  $45^\circ$  (cf. figure 2.8a). On peut noter que très vite une bonne précision est atteinte. La seconde partie de la figure représente, pour un maillage de  $16^2$ , la précision relative en fonction de la distance qui sépare deux carrés parallèles de côté unité (cf. figure 2.8b). On remarque, qu'à maillage égal, plus la distance entre les surfaces est grande, meilleure est la précision de la méthode. Ce dernier point est intéressant et permet de limiter le temps de calcul des facteurs de forme.

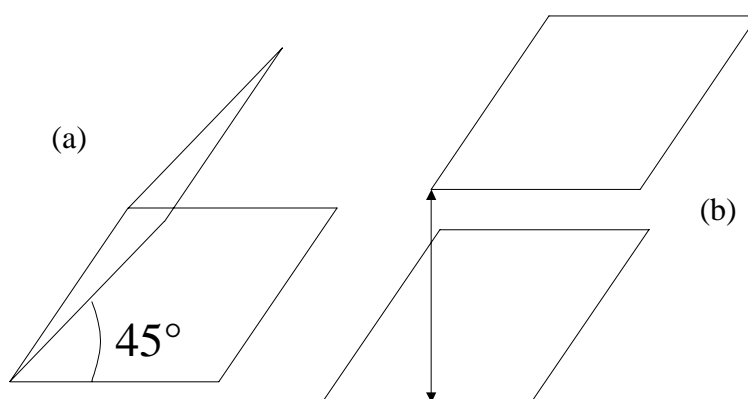


Figure 2.8 : position relative des deux carrés pour le calcul des facteurs de forme

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

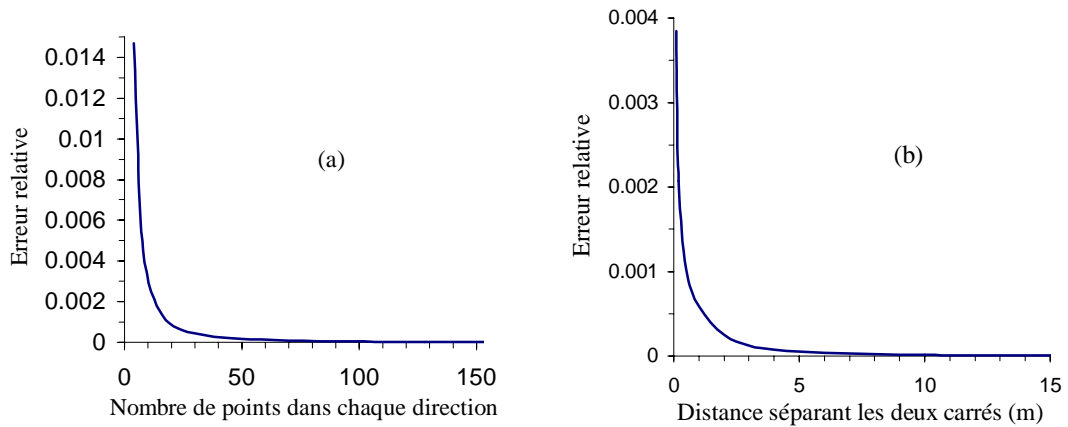


Figure 2.9 : précision relative du calcul du facteur de forme entre deux carrés en fonction du nombre de points de discrétisation dans chaque direction (a) et de la distance entre les deux carrés (b).

Les deux figures suivantes montrent les courbes du facteur de forme lorsque l'on fait varier la distance entre les deux plans de 0 à 1 pour différentes discrétisations et lorsque l'on fait varier l'angle entre  $0^\circ$  et  $180^\circ$ . On remarque le bon comportement général du code mais également dans les cas limites où les deux plans sont confondus où lorsque l'angle est de  $0^\circ$  ou de  $180^\circ$ . Le facteur de forme vaut alors 1 ou 0.

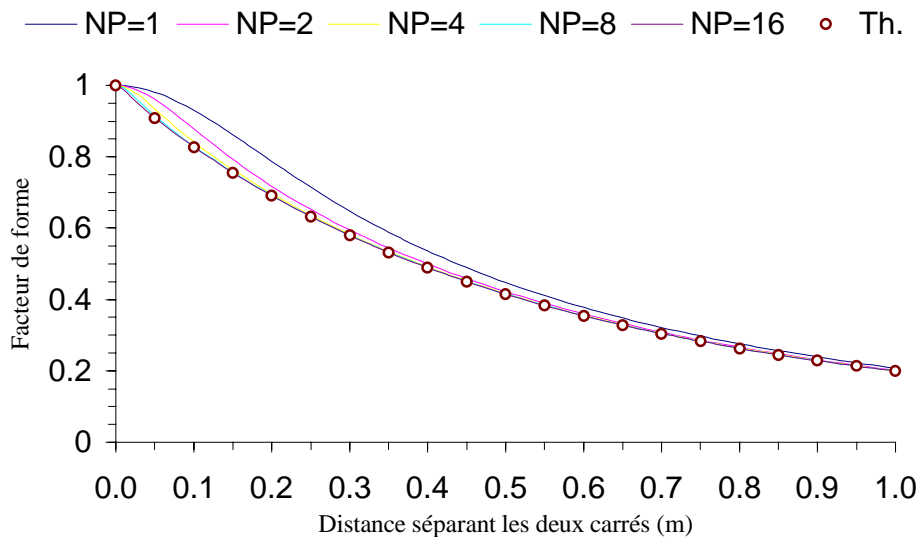


Figure 2.10 : facteur de forme en fonction de la distance entre deux carrés parallèles de côté unité et pour différents nombres de points de discrétisation dans chaque direction

### 2.3 Prise en compte du rayonnement solaire

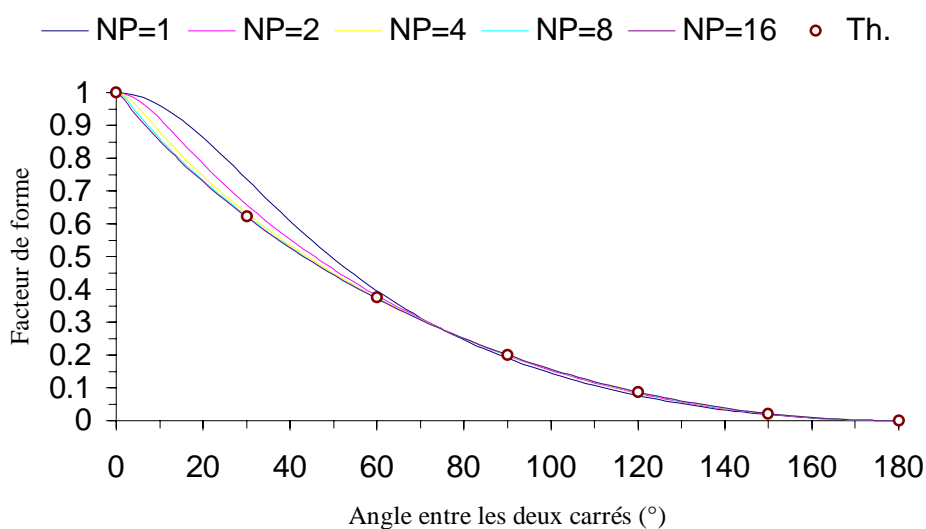


Figure 2.11 : facteur de forme en fonction de l'angle entre deux carrés de côté unité ayant un côté commun et pour différents nombres de points de discrétisation dans chaque direction

Enfin, nous avons testé une troisième configuration (cf. figure 2.12) à savoir deux rectangles possédant un côté en commun et inclinés l'un par rapport à l'autre de  $90^\circ$ . Nous faisons varier la longueur transversale du rectangle et visualisons sur la figure 2.13 les valeurs prises par le facteur de forme. On constate que le comportement aux limites est à nouveau cohérent, aussi bien lorsque  $d$  vaut 0 que lorsqu'il est grand, le facteur de forme dans ce dernier cas tendant vers une valeur asymptotique.

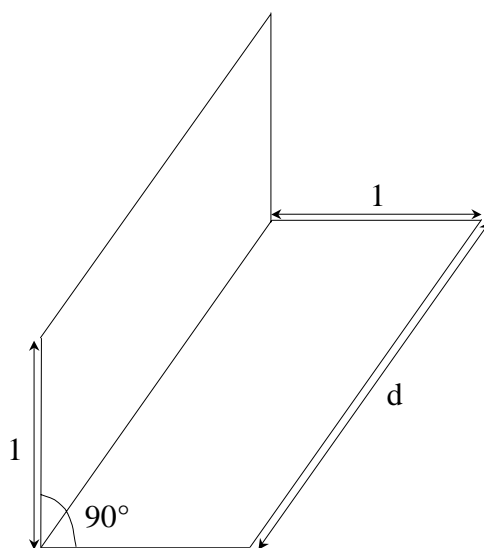


Figure 2.12 : position relative des deux rectangles pour le calcul des facteurs de forme



## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

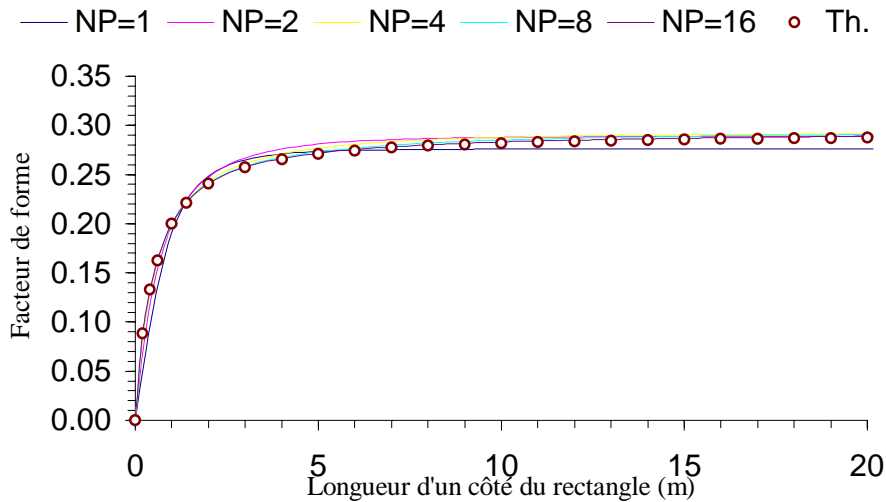


Figure 2.13 : facteur de forme entre deux rectangles ayant un côté commun, séparés d'un angle de  $90^\circ$  en fonction de la longueur d'un côté du rectangle et pour différents nombres de points de discrétisation dans chaque direction

Le caractère polygonal des surfaces est ici un impératif puisque la méthode repose sur la projection de segments de droite. Pour des surfaces courbes, une discrétisation en polygones de ces dernières est nécessaire. Néanmoins, il est à noter que pour les structures urbaines que nous rencontrons, cette restriction est en général sans effet.

Dans le cas d'un maillage cartésien il n'est pas possible de travailler directement à partir des volumes de contrôle puisque les obstacles peuvent se trouver de biais par rapport au maillage. Donc, avant d'évaluer le facteur de forme entre deux éléments du maillage, il faut projeter le volume de contrôle sur la surface réelle à savoir le mur, le toit ou la rue. C'est à partir de cette surface projetée que sera appliquée la méthode décrite ci-dessus.

**Détermination des masques.** Si l'on isole deux surfaces solides dans un quartier, elles peuvent être visibles ou invisibles l'une de l'autre, en raison de la présence de bâtiments les masquant. Donc, préalablement au calcul des facteurs de forme et afin de limiter le nombre de calculs de ces derniers, une estimation des masques doit être effectuée.

Partant des volumes de contrôle issus de la discrétisation du domaine, nous les projetons sur les surfaces physiques (mur, rue ou toit). Deux surfaces sont alors masquées si le segment joignant les deux centres des surfaces est intercepté par un bâtiment. Ceci implique que deux surfaces seront entièrement ou non visibles l'une de l'autre. Il serait bien entendu possible de

## 2.4 Les méthodes numériques de résolution

calculer les masques pour chacun des éléments discrétisés des surfaces mais cela alourdirait les calculs. D'un point de vue pratique, le calcul des masques se fait avant l'estimation des facteurs de forme, qui sont alors calculés seulement entre surfaces visibles.

Nous illustrons le calcul des masques par la figure 2.14 qui représentent les parties des bâtiments et des rues visibles depuis une surface d'évaluation  $S$ , sous deux points de vue différents.

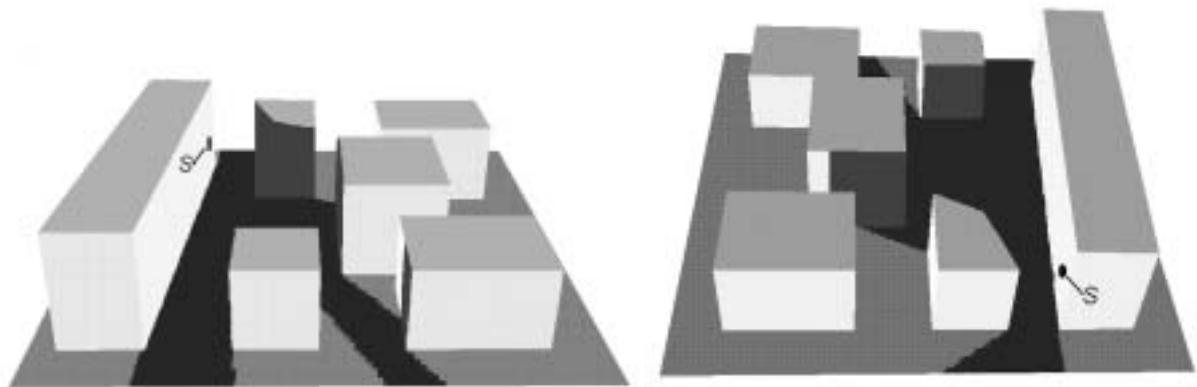


Figure 2.14 : évaluation des surfaces visibles depuis une surface  $S$  (deux points de vue différents de la même scène)

## 2.4 Les méthodes numériques de résolution

Les équations de la mécanique des fluides et de la turbulence n'ont pas de solutions analytiques connues. Les méthodes numériques que nous utilisons visent à déterminer les valeurs approchées des différentes variables du problème sur un nombre fini de points du domaine d'étude (spatial et temporel).

La méthodologie numérique utilisée est celle développée pour le code de calcul AQUILON du laboratoire MASTER ; c'est un code traitant de nombreux problèmes de mécanique des fluides et de thermique - écoulements compressibles ou incompressibles, monophasiques ou diphasiques, turbulents ou laminaires, bi ou tridimensionnels... - pour lequel le choix des méthodes numériques s'est fait sur des critères de stabilité et de solidité. Il repose sur quelques concepts originaux que nous décrivons ci-dessous.

### 2.4.1 Un maillage déconnecté de la géométrie

Une particularité du code AQUILON est l'utilisation d'un maillage déconnecté de la géométrie étudiée (figure 2.15) qui permet le traitement dans sa globalité d'un milieu hétérogène fluide/solide. En attribuant à chaque maille un coefficient de perméabilité  $K$  qui tend pour des cas limites vers l'infini pour la phase fluide et vers 0 pour la phase solide, il est possible de traiter le problème de façon globale par l'ajout d'un terme de Darcy  $\frac{\mu}{K} \bar{\mathbf{u}}$  aux équations de Navier-Stokes. On obtient alors les équations de Brinkman généralisées (équation 2.55). Lorsque le milieu est fluide ( $K \rightarrow \infty$ ), ce terme devient négligeable et lorsque le milieu est solide ( $K=0$ ), ce terme est prépondérant et impose par le passage dans le solveur une vitesse nulle.

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}} \right) = -\nabla \left( p + \frac{2}{3} \rho k \right) + \nabla \cdot \left( (\mu + \mu_t) (\nabla \bar{\mathbf{u}} + {}^t \nabla \bar{\mathbf{u}}) \right) + \rho \mathbf{g} + \frac{\mu}{K} \bar{\mathbf{u}} \quad (2.55)$$

Ce principe est étendu aux autres équations, notamment à l'équation de l'énergie pour laquelle la conductivité thermique prend des valeurs différentes selon la phase où le calcul est effectué. Il est ainsi possible de s'affranchir de la détermination d'un bilan de surface afin de déterminer la température de surface des bâtiments et des rues. La conduction dans les murs et dans les sols est simulée, en imposant par exemple une température à un mètre sous le sol (température constante, indépendante des fluctuations du rayonnement solaire [Cauteret, 1987] et une température à l'intérieur des bâtiments (typiquement 20°C). Le problème est alors traité dans sa globalité.

## 2.4 Les méthodes numériques de résolution

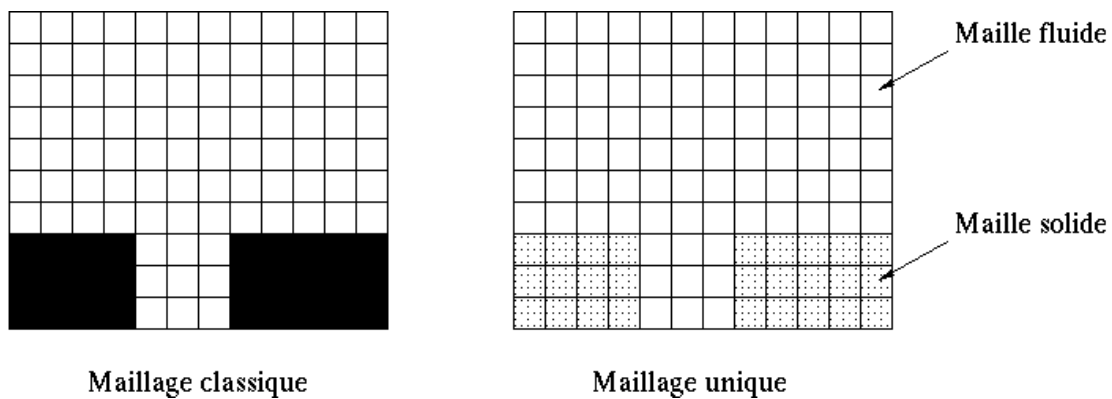


Figure 2.15 : le concept de maillage unique

### 2.4.2 Discrétisation des équations

**Schémas en temps.** Les équations sont discrétisées implicitement en temps par le schéma d'Euler d'ordre 1 pour les écoulements stationnaires et par le schéma de Gear d'ordre 2 pour les écoulements instationnaires. La discrétisation est écrite de façon générale par l'utilisation des coefficients  $g_1$ ,  $g_2$  et  $g_3$  :

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^{n+1} = \frac{g_1\phi^{n+1} + g_2\phi^n + g_3\phi^{n-1}}{\Delta t} \quad (2.56)$$

➤  $g_1=1$  et  $g_2=-1$  : schéma d'Euler

➤  $g_1=3/2$ ,  $g_2=-2$ ,  $g_3=1/2$  : schéma de Gear

**Linéarisation et découplage des équations.** La linéarisation des équations de Navier-Stokes se fait en écrivant les termes non linéaires à deux temps différents. Les équations de Navier-Stokes sont découplées de celles de la thermique et de la turbulence de la même façon. En se limitant aux équations de Navier-Stokes et de l'énergie, le système discrétisé s'écrit alors :

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

$$\rho^n \left( \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n+1} \right) = -\nabla(p^{n+1} + \frac{2}{3} \rho^n k^n) + \rho^n \mathbf{g} + \nabla \cdot ((\mu + \mu_t^n)(\nabla \mathbf{u}^{n+1} + {}^t \nabla \mathbf{u}^{n+1})) - \frac{\mu}{K} \mathbf{u}^{n+1} \quad (2.57)$$

$$\rho^n C_p \left( \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^{n+1} \cdot \nabla) T^{n+1} \right) = \nabla \cdot ((\lambda + C_p \frac{\mu_t^n}{\sigma_t}) \nabla T^{n+1}) \quad (2.58)$$

**Couplage vitesse/pression.** La méthode du lagrangien augmenté [Fortin & Glowinski, 1982] permet de découpler les champs de vitesse et de pression. C'est une méthode itérative qui consiste, à partir d'un champ de pression initial, à résoudre les équations de Navier-Stokes modifiées par l'introduction de la contrainte de divergence nulle, puis à calculer un nouveau champ de pression à l'aide d'une équation de continuité modifiée. Elle permet de s'affranchir des conditions aux limites sur la pression. Entre deux itérations en temps, on opère L itérations du lagrangien augmenté présentées ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho^n \left( \frac{\mathbf{u}^{n+l/L} - \mathbf{u}^{n+(l-1)/L}}{\Delta t} + (\mathbf{u}^{n+(l-1)/L} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n+l/L} \right) = -\nabla(p^{n+(l-1)/L} + \frac{2}{3} \rho^n k^n) + \rho^n \mathbf{g} \\ \quad + \nabla \cdot ((\mu + \mu_t^n)(\nabla \mathbf{u}^{n+l/L} + {}^t \nabla \mathbf{u}^{n+l/L})) \\ \quad + dr \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+l/L} - \frac{\mu}{K} \mathbf{u}^{n+l/L} \\ p^{n+l/L} = p^{n+(l-1)/L} - dp \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+l/L} \end{array} \right. \quad (2.59)$$

Les paramètres  $dp$  et  $dr$  sont en générale égaux et leurs valeurs sont relativement constantes d'un cas à l'autre.

**Discretisation.** Les équations sont ensuite discrétisées sur un maillage cartésien par la technique des volumes finis [Patankar, 1980]. Cette méthode consiste à intégrer les équations sur un volume de contrôle centré en chacune des mailles. Il est alors nécessaire de connaître la

## 2.4 Les méthodes numériques de résolution

valeur des variables à l'interface des volumes de contrôle. Afin de limiter les interpolations, un maillage décalé en vitesse-pression (cf. figure 2.16) est utilisé : les composantes de la vitesse ne sont pas calculées sur la grille principale mais sur deux grilles décalées dans le sens de la composante de la vitesse considérée (horizontalement pour la composante horizontale et ainsi de suite).

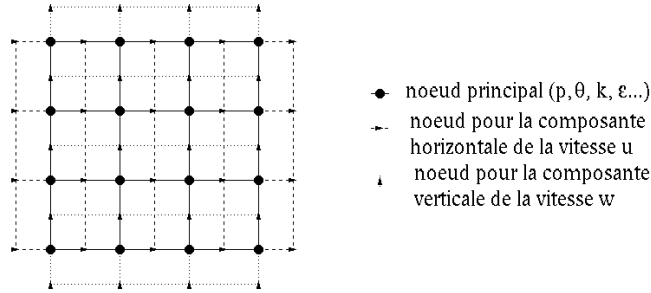


Figure 2.16 : maillage décalé en vitesse-pression

Pour les schémas numériques des termes convectifs, différentes méthodes sont disponibles : centré, upwind, hybride, quick ou TVD. Une explication de leur nature et une comparaison de ces schémas sont faites dans la section 4.2.3.2 relative à la chimie atmosphérique.

**Le traitement des conditions aux limites.** Considérons une variable  $\varphi$  de notre problème. Une condition de flux nul normal à la limite (condition de Neuman) est programmée par défaut dans le code. Les autres conditions aux limites sont contrôlées par un terme de la forme  $bi_\varphi(\varphi - \varphi_o)$  rajouté aux équations de transport (éq. 2.60 et 2.61) [Parneix, 1995].

Si l'on affecte à  $bi_\varphi$  une valeur nulle sur une limite, le terme rajouté disparaît et l'on retombe sur une condition de Neuman. Si l'on fait tendre  $bi_\varphi$  vers l'infini, le passage dans le solveur donne alors à  $\varphi$  la valeur  $\varphi_o$  (condition de Dirichlet). Enfin, pour une valeur de  $bi_\varphi$  comprise entre zéro et l'infini, une condition de Fourier est alors imposée.

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}} \right) = -\nabla(p + \frac{2}{3} \rho k) + \nabla \cdot ((\mu + \mu_t)(\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u})) + \rho \mathbf{g} + \frac{\mu}{K} \mathbf{u} + \mathbf{biv}(\mathbf{u} - \mathbf{u}_o) \quad (2.60)$$

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

$$\rho C_p \left( \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{T} \right) = \nabla \cdot \left( (\lambda + C_p \frac{\mu_t}{\sigma_t}) \nabla \bar{T} \right) + bio(\bar{T} - \bar{T}_0) \quad (2.61)$$

Les variables  $bi_\phi$  et  $\phi_o$  étant définies pour tout le domaine d'étude, ce principe permet de fixer, en tout point, une variable à une valeur donnée. Ce principe est utilisé notamment pour imposer les lois de paroi pour  $\varepsilon$  ou  $f$  dans le solide ou au premier nœud fluide.

**Résolution.** Enfin, les systèmes linéaires obtenus sont résolus par la méthode des gradients conjugués BI-CGSTAB [van der Vorst, 1992], avec un préconditionnement de type MILU ou ILU. Ce dernier permet d'accélérer la convergence des calculs et est très utile pour les écoulements complexes autour d'obstacles ou un simple préconditionnement de type Jacobi peut s'avérer insuffisant ou bien beaucoup plus long à converger.

### 2.4.3 Solutions informatiques pour la programmation des échanges radiatifs

Cette partie est en cours de validation mais nous pouvons néanmoins présenter les solutions informatiques pour lesquelles nous avons optés. Elles se démarquent de celles plus classiques de la résolution d'une équation différentielle.

La difficulté principale consiste pour chaque nœud du maillage dans le stockage des points visibles - et des facteurs de forme - vers lesquels il y a échange par rayonnement. Un stockage matriciel serait trop coûteux en mémoire puisque si  $N$  est le nombre total de nœuds, un tableau d'une taille égale à  $N^2$  serait nécessaire. Or seuls les points solide à l'interface avec le fluide peuvent échanger entre eux. Le stockage des points fluide est inutile. De plus, parmi les points solide à l'interface, la présence de masques réduit les échanges. On voit donc aisément qu'un stockage global est inadapté. Notre solution consiste à utiliser les dernières fonctionnalités du Fortran 90 à savoir les pointeurs et les listes chaînées qui permettent un stockage strict des points échangeant par rayonnement.

Une liste chaînée est une suite d'éléments de type quelconque dont chacun pointe vers l'adresse de l'élément suivant. Lors de sa création, la longueur de la liste n'est a priori pas

## 2.4 Les méthodes numériques de résolution

connue. Elle se construit de façon dynamique : la mémoire est allouée au fur et à mesure de la création de nouveaux éléments et permet ainsi d'éviter les stockages inutiles.

D'un point de vue pratique, pour le premier point solide du maillage  $Pt_1$  à l'interface avec le fluide, est créé un élément contenant ses coordonnées ainsi que le nombre de points visibles  $L_1$  (figure 2.17). Cet élément est alors suivi de  $L_1$  autres éléments contenant les coordonnées de chacun des  $L_1$  points ainsi que le facteur de forme avec le premier point. Puis, l'on passe au second point du maillage  $Pt_2$  qui possède  $L_2$  points visibles et ainsi de suite. La liste est créée une fois pour toute avant la première itération en temps et est ensuite parcourue à chaque itération en temps pour estimer les échanges radiatifs.

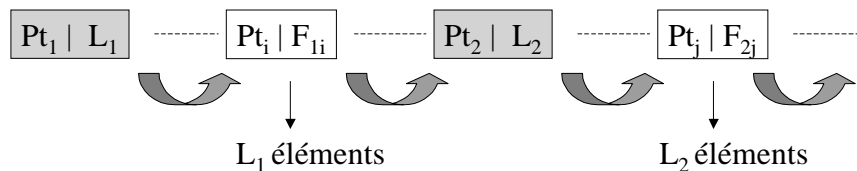


Figure 2.17 : premiers éléments d'une liste chaînée

### 2.4.4 Une interface de calcul conviviale

Nous avons, en équipe avec J. Breil [Breil, 2001], doctorant au laboratoire, industrialisé le code de calcul Aquilon en réalisant une interface de calcul d'une utilisation permettant une prise en main du code plus aisée. Le principe repose sur la lecture de fichiers de données réalisant toute la mise en données du problème, du choix du fluide, de la géométrie ou bien des méthodes de calcul en passant par le type de maillage... Les fichiers de données sont écrits à l'aide de mots clés, analysés par un module de lecture. À chacun de ces mots clés peut être associé l'affectation d'une valeur à un booléen, à une variable scalaire, vectorielle ou matricielle. Il existe trois types de fichiers de données :

**Le fichier *carac.par*.** C'est une *base de données* contenant les caractéristiques physiques de plusieurs fluides et solides. Elle peut être enrichie par l'utilisateur. On y trouve le nom du fluide ou du solide suivi de sa masse volumique, sa conductivité thermique, viscosité, capacité calorifique, coefficient de dilatation thermique... Les valeurs figurant dans ce fichier



## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

seront affectées aux tableaux de masse volumique, conductivité... en fonction du fluide choisi.

**Le fichier *defaut.don*.** Il contient des *paramètres par défaut* tels que des critères de convergence ou le choix des méthodes numériques, paramètres variant peu d'un calcul à l'autre.

**Le fichier *castest.don*.** Il est relatif au *problème physique* traité et aux méthodes choisies par l'utilisateur. Dans ce fichier figurent les différentes étapes nécessaires à la simulation d'un problème physique :

- Type de calcul (2D ou 3D)
- Choix du maillage (à pas constant, à variation exponentielle du pas...)
- Équations résolues
- Conditions aux limites
- Conditions initiales
- Impositions
- Mise en place d'obstacles
- Méthodes et paramètres numériques (choix des schémas, pas de temps, résidus...)
- Impressions
- Test d'arrêt
- Utilitaires

L'analyse des fichiers de données repose sur la reconnaissance de mots clés préétablis. Sur une même ligne, plusieurs mots clés peuvent se suivre, permettant ainsi un choix entre plusieurs possibilités. Par exemple le mot clé CALCUL peut être suivi de 2D ou de 3D. Au cours de l'exécution du programme, un basculement sera donc fait vers une sous-routine traitant

## 2.5 Simulations numériques

les problèmes 2D ou 3D. Un mot clé peut également être suivi d'une chaîne de caractères pour indiquer par exemple le nom d'un fichier, ou d'une valeur numérique correspondant à une donnée d'entrée. Des exemples de ces fichiers sont présentés en annexe C.

Une gestion stricte de la mémoire a été mise en place par l'utilisation de l'allocation dynamique de la mémoire. La partie haute du programme est donc écrite de façon complètement générale et s'adapte à tous les cas résolubles par Aquilon sans avoir à recompiler les fichiers sources. Bien entendu, si des cas particuliers nécessitent une programmation en Fortran, celle-ci reste possible.

## 2.5 Simulations numériques

La réalisation d'un code de calcul passe par la réalisation d'une série de validations sur ce qu'on appelle couramment des cas tests. Ce sont généralement des expériences de laboratoire ou in situ que nous reproduisons numériquement. Cela nous permet de vérifier la conformité de nos résultats sur des données possédant une faible marge d'erreurs (erreurs de mesures de quelques pour cent généralement). Une fois seulement cette étape complétée, il est possible de passer à des simulations numériques sur des cas plus concrets.

### 2.5.1 Cas tests 2D

#### 2.5.1.1 Marche descendante

La simulation numérique au-dessus d'une marche descendante est un cas test fréquemment rencontré lors de la validation des codes de calcul, et ce pour deux raisons principales : d'une part l'écoulement est complexe en raison de la présence de forts cisaillements et d'une recirculation, et d'autre part, de nombreux résultats expérimentaux [Kim, 1978 ; Moss & Baker, 1980 ; Dumoulin, 1986 ; Driver & Seegmiller, 1995] et numériques sont disponibles.

**Description de l'expérience.** La configuration géométrique est celle d'un canal auquel a été rajoutée en amont une marche (figure 2.18). Le fluide est soumis à un brusque élargissement où l'écoulement se sépare en deux donnant naissance à des zones de forts cisaillements. Derrière le saut de section se forme une zone de recirculation où l'écoulement se re-

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

ferme pour revenir vers la marche et former ainsi un tourbillon. Elle prend fin au point de recollement à partir duquel la couche limite se re-développe. À noter la présence au pied de la marche d'une seconde recirculation (de sens de rotation opposé à la première) qui n'est pas toujours mise en évidence à la fois par les codes de calcul et par les mesures expérimentales.

Il a été établi que pour un rapport profondeur/hauteur de marche supérieur à 10 (cas de l'étude), l'écoulement est en moyenne bidimensionnel [Dumoulin, 1986].

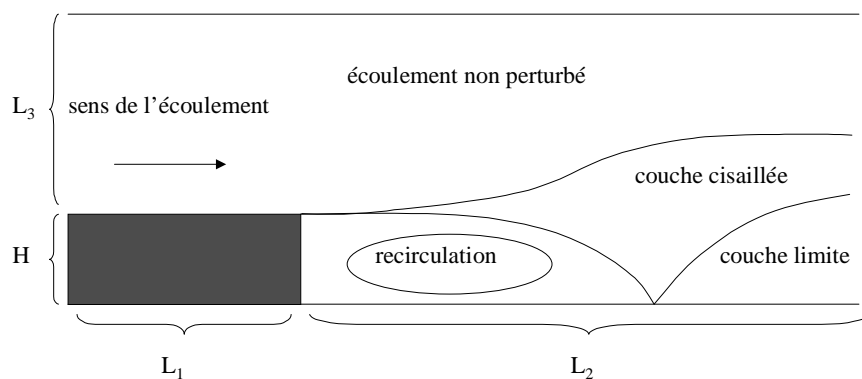


Figure 2.18 : structure d'un écoulement derrière une marche

**Caractéristiques de l'expérience.** Nous nous appuyerons, dans la présente étude, sur la simulation directe DNS bas Reynolds ( $Re_H=5100$ ) de Le [Le, Moin & Kim, 1993] dont les caractéristiques sont résumées dans les tableaux suivants. Nous disposons pour cette expérience de données de référence DNS de la NASA qui nous serviront pour établir les profils d'entrée pour la vitesse, l'énergie cinétique turbulente,  $\varepsilon$  et  $v^2$ . Les maillages que nous utilisons sont également identiques à ceux de la NASA, ce qui favorise la comparaison. Il s'agit d'un maillage à variation exponentielle du pas dans les deux directions de l'espace, avec un resserrement près de chaque paroi (paroi inférieure, parties horizontale et verticale de la marche). Nous avons utilisé un schéma upwind pour les équations de Navier-Stokes et de la turbulence.

Il faut noter tout l'intérêt de travailler avec des données DNS. En effet ces dernières nous ont été fournies sur l'ensemble du domaine, et ont permis d'avoir des conditions limites ex-

## 2.5 Simulations numériques

trêmement précises, ce qui n'est pas toujours le cas lorsqu'on travaille avec des données expérimentales.

$H$	$L_1$	$L_2$	$L_3$
1	3	40	5

Tableau 2.4: caractéristiques géométriques de l'expérience de Le.

$\rho$	$\mu$	$U_{moy}$
1	$1,96.10^{-4}$	1

Tableau 2.5: caractéristiques physiques de l'expériences de Le.

**Résultats.** Le tableau suivant montre la longueur de la recirculation principale obtenue avec les différents modèles pour trois maillages, valeurs qui sont à comparer avec la valeur DNS de 6,39. On remarque les insuffisances classiques du modèle  $k-\varepsilon$  (de l'ordre de 20%), nettement corrigées par le modèle RNG. Le modèle  $v^2-f$  encore est bien plus proche de la valeur la valeur DNS, surtout pour de faibles maillages.

	$k-\varepsilon$	RNG	$v^2-f$
32×31	4,72H	5,32H	5,56H
60×60	4,92H	5,64H	6,04H
120×120	4,99H	5,71H	6,35H

Tableau 2.6 : comparaison des longueurs de la recirculation

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

Nous comparons figure (2.19) le coefficient de frottement à la paroi inférieure. C'est un critère bien plus pertinent que le précédent puisqu'il donne des informations sur l'intensité des recirculations et sur celle de la zone de recollement en aval de celle-ci. Le modèle RNG améliore la solution mais pas aussi nettement que le  $v^2-f$ . A noter que sur ce graphe, apparaît la recirculation secondaire, dont la longueur est de  $0,47H$  pour le  $v^2-f$  et le RNG,  $0,32H$  pour le  $k-\varepsilon$ , à comparer avec la longueur DNS de  $1,46H$ .

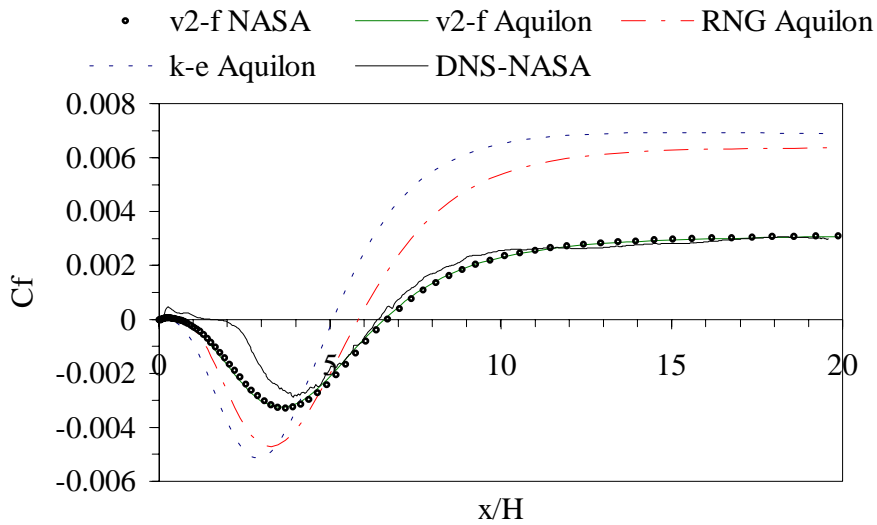


Figure 2.19 : comparaison des coefficients de frottement des différents codes

Les figures (2.20) à (2.22) montrent un très bon accord entre le code  $v^2-f$  de la NASA et celui d'Aquilon pour le profil de la composante horizontale de la vitesse, de  $k$  et de  $v^2$ .

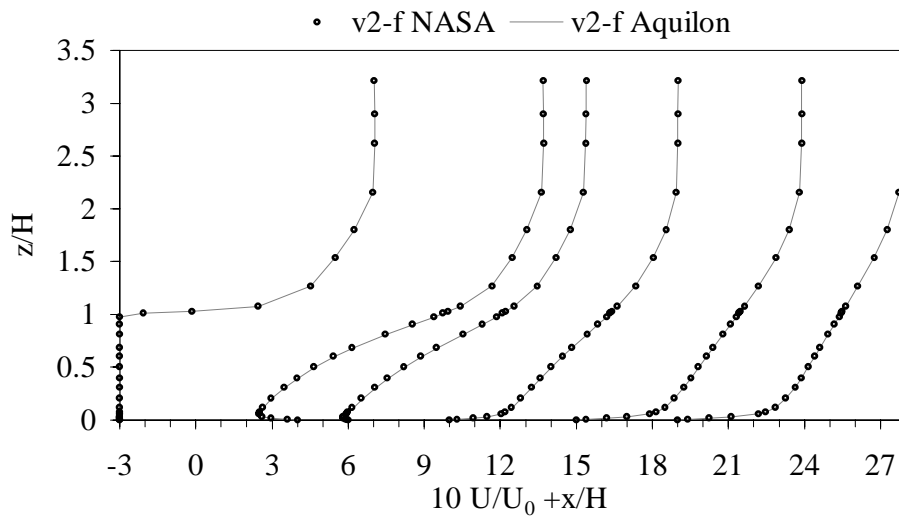


Figure 2.20 : comparaison des vitesses pour les modèles  $v^2-f$  de la NASA et d'Aquilon

## 2.5 Simulations numériques

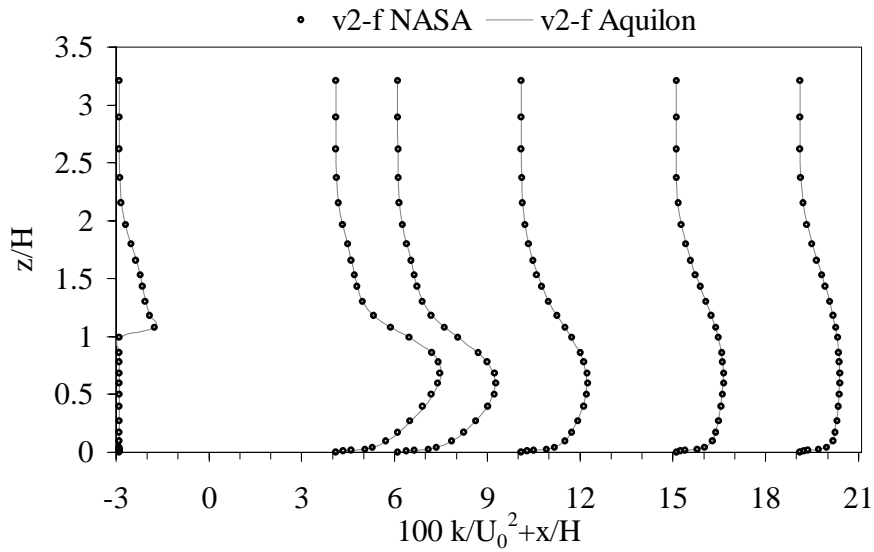


Figure 2.21 : comparaison des énergies cinétiques turbulentes pour les modèles  $v^2-f$  de la NASA et d'Aquilon

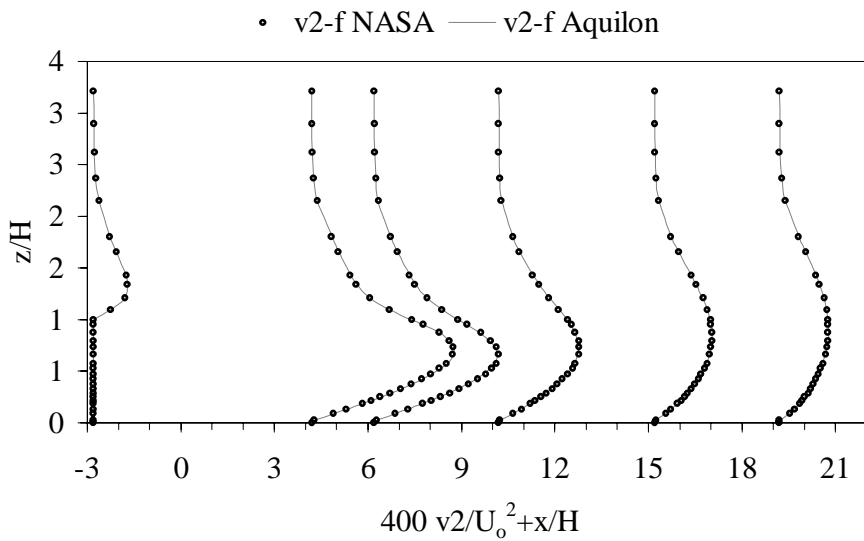


Figure 2.22 : comparaison de  $v^2$  pour les modèles  $v^2-f$  de la NASA et d'Aquilon

Les deux figures suivantes montrent une comparaison entre les modèles  $k-\varepsilon$ , RNG et  $v^2-f$  d'Aquilon, sur le maillage de  $120^2$  et les données DNS. En ce qui concerne les profils de la composante horizontale de la vitesse, la différence entre les modèles  $k-\varepsilon$  et RNG est nette, surtout dans la zone de recirculation. Les résultats qui se rapprochent le plus des profils DNS sont ceux du  $v^2-f$ . Le gain est assez notable, surtout par rapport au modèle  $k-\varepsilon$ . Pour les profils

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

de  $k$ , les modèles surestiment l'intensité de l'énergie cinétique turbulente aussi bien dans la zone tourbillonnaire que dans la zone de recollement.

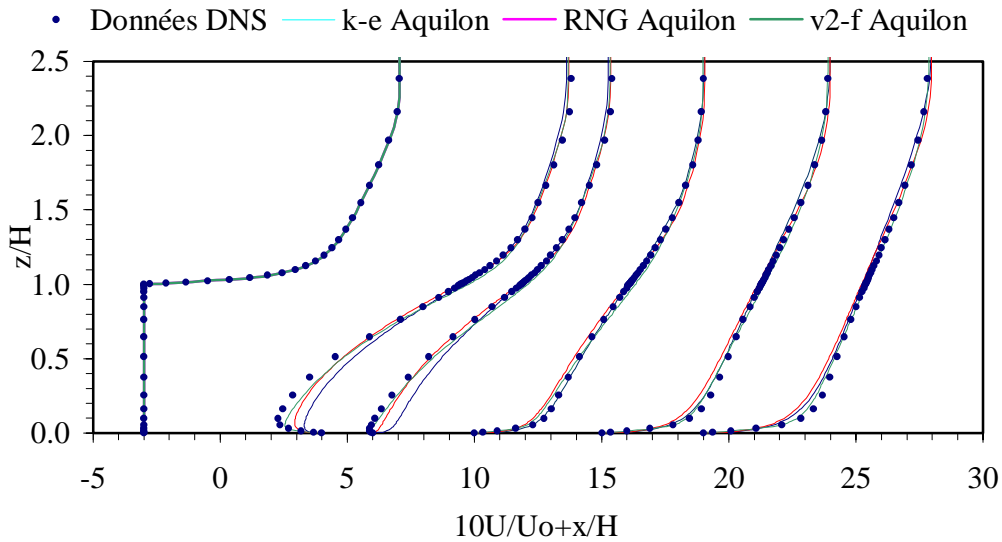


Figure 2.23 : comparaison des vitesses pour les modèles  $v^2-f$ , RNG et  $k-\epsilon$

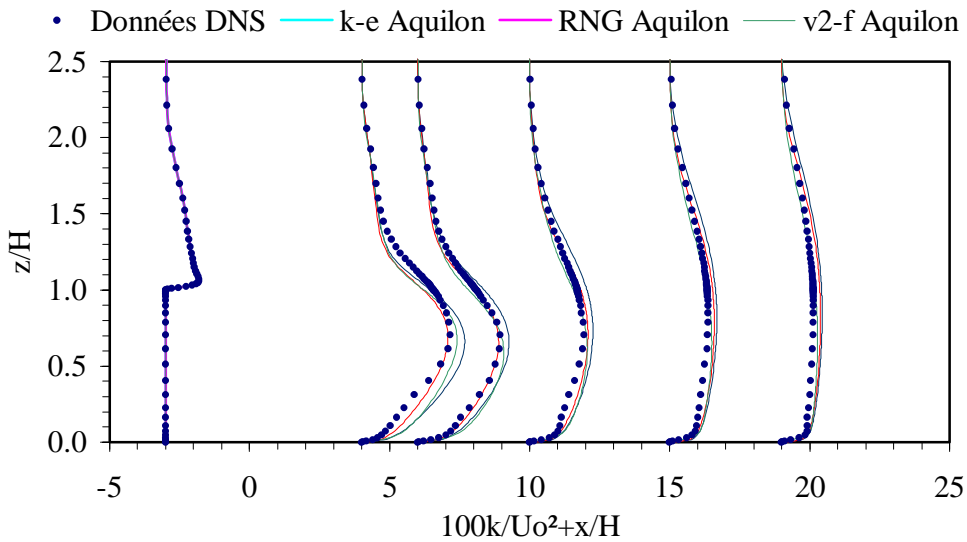


Figure 2.24 : comparaison des énergies cinétiques turbulentes pour les modèles  $v^2-f$ , RNG et  $k-\epsilon$

Enfin, nous avons positionné la marche dans les quatre positions possibles afin de vérifier le comportement symétrique du code. Les résultats ont été identiques en tout point. Nous pouvons conclure pour ce cas test que si l'apport du modèle  $v^2-f$  semble limité dans

## 2.5 Simulations numériques

l'estimation des profils de l'énergie cinétique turbulente, il est important dans l'estimation de la dynamique de l'écoulement, point le plus intéressant puisque le champ de vitesse est déterminant pour le transport des polluants.

### 2.5.1.2 Bloc bidimensionnel

**Description de l'expérience.** L'écoulement autour d'un bloc bidimensionnel possède des caractéristiques plus complexes que dans le cas précédent. Le canal dans lequel est placé le bloc est caractérisé par un rétrécissement brusque de sa section rapidement suivi d'un élargissement brusque. L'écoulement est alors caractérisé par un ensemble de circulations situées aussi bien en aval qu'en amont de l'obstacle (figure 2.25). Selon le rapport longueur/hauteur de l'obstacle, un recollement au-dessus du bloc peut être ou non observé.

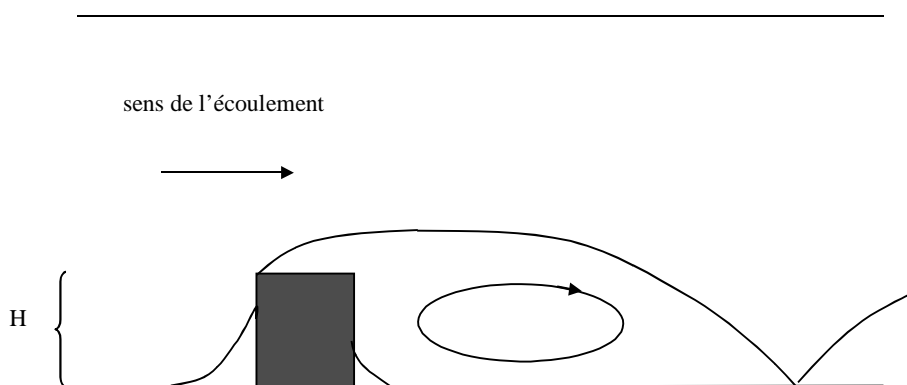


Figure 2.25 : structure d'un écoulement derrière un bloc bidimensionnel

**Caractéristiques de l'expérience.** Nous basons ce cas test sur l'expérience de Moss et Baker [Moss & Baker, 1980] dans laquelle le rapport longueur transversale/hauteur de la veine expérimentale égal à 18 permet de considérer l'écoulement comme bidimensionnel [Dargent, 1996]. L'obstacle a pour hauteur  $0,76 \text{ mm}$ , le double pour sa longueur. Il est placé dans une veine de hauteur égale à 11 fois la hauteur de l'obstacle. Le nombre de Reynolds, basé sur la vitesse d'entrée et la hauteur de l'obstacle, est de  $5.10^4$ .

Nous prenons des conditions limite d'entrée identiques à celle de Dargent :



## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

- $U_0 = 10$
- $k_0 = \frac{1}{2}(IU_0)^2$  où  $I$  est l'intensité turbulente égale à 0,2%
- $\varepsilon_0 = \frac{C_\mu^{3/4} k_0^{3/2}}{0,1H}$
- $v_0^2 = \frac{2}{3}k_0$

Le maillage choisi est un maillage  $160 \times 90$ , à variation du pas exponentielle au contact de l'obstacle. Le schéma upwind est utilisé pour toutes les équations.

**Résultats.** La figure suivante représente les lignes de courant obtenues avec le modèle  $v^2-f$ .

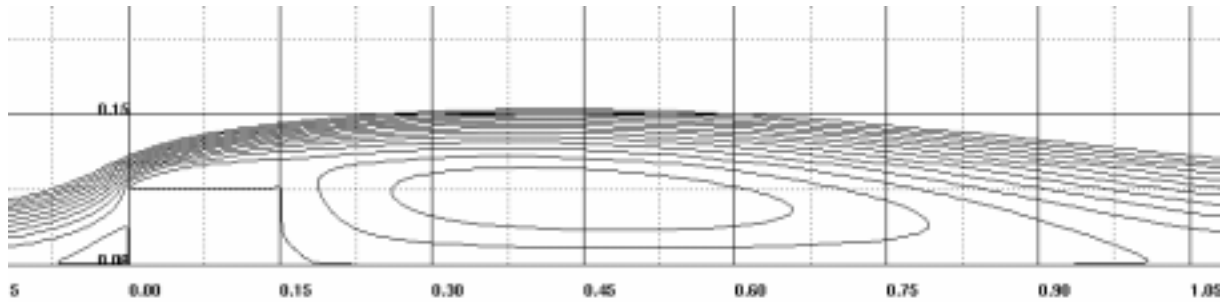


Figure 2.26 : lignes de courant autour du bloc pour le modèle  $v^2-f$

Nous comparons dans un premier temps les différentes longueurs de recirculations obtenues avec les trois modèles de turbulence  $k-\varepsilon$ , RNG et  $i$  (tableau 2.7). On remarque que comme à son habitude, le modèle  $k-\varepsilon$  les sous estime assez nettement. Ceci est dû au caractère trop diffusif du modèle. Ces résultats sont néanmoins un peu supérieurs à ceux de Dargent [Dargent, 1996] ( $7,32H$ ,  $0,44H$  et  $0,76H$ ) qui a utilisé le code Phœnix. Les deux autres modèles se comportent mieux, la différence entre les modèles RNG et  $v^2-f$  étant assez faible. Ce dernier surestime les longueurs des recirculations amont et aval.

## 2.5 Simulations numériques

	Expérience	$k-\varepsilon$	RNG	$v2-f$
Longueur de la recirculation aval	$10H$	$7,87H$	$10,5H$	$11,55H$
Hauteur de la recirculation amont	$0,65H$	$0,53H$	$0,59H$	$0,59H$
Longueur de la recirculation amont	$H$	$0,86H$	$0,92H$	$1,12H$

Tableau 2.7 : comparaison des longueurs des recirculations pour l'écoulement autour d'un bloc 2D

En amont du bloc, la différence entre les modèles est assez faible et la comparaison à l'expérience satisfaisante (figure 2.27).

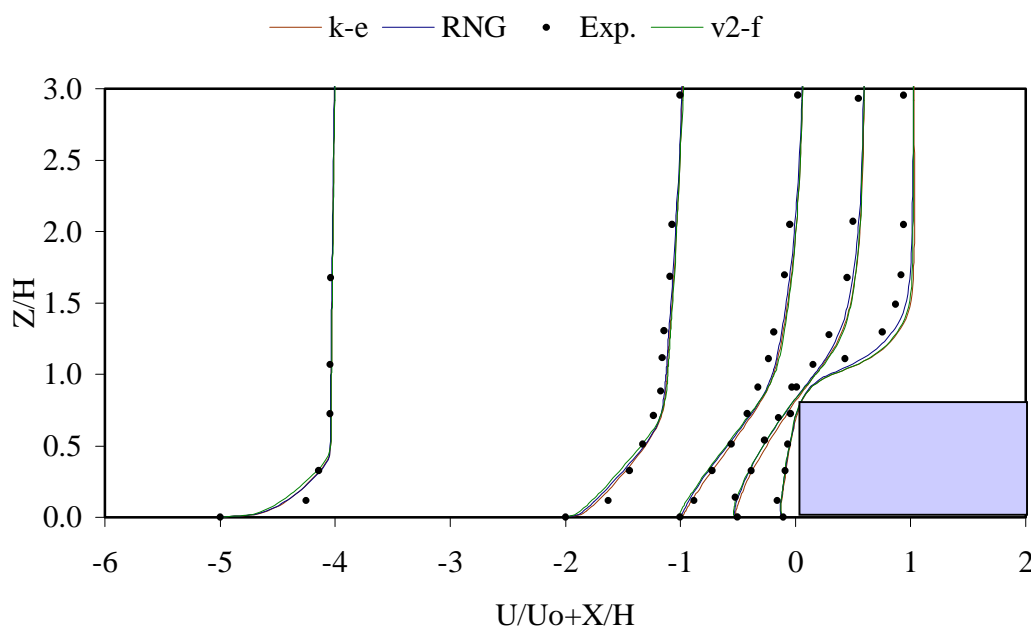


Figure 2.27 : comparaison de la vitesse en amont du bloc

Pour la zone de l'écoulement directement au-dessus du bloc (cf. figure 2.28), la pénétration de la recirculation principale au-dessus de l'obstacle est respectée. Par contre, les modèles surestiment la valeur de la composante horizontale de la vitesse. Dargent [Dargent, 1996] a également ce même type de résultat, ce qui peut s'expliquer par une surestimation de

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

l'énergie cinétique turbulente au niveau de l'arête amont du bloc, provoquant une augmentation du mélange turbulent dans les couches cisillées, et donc une augmentation du taux d'entraînement du sillage et une diminution du rayon de courbure de la couche cisillée [Melbourne, 1993].

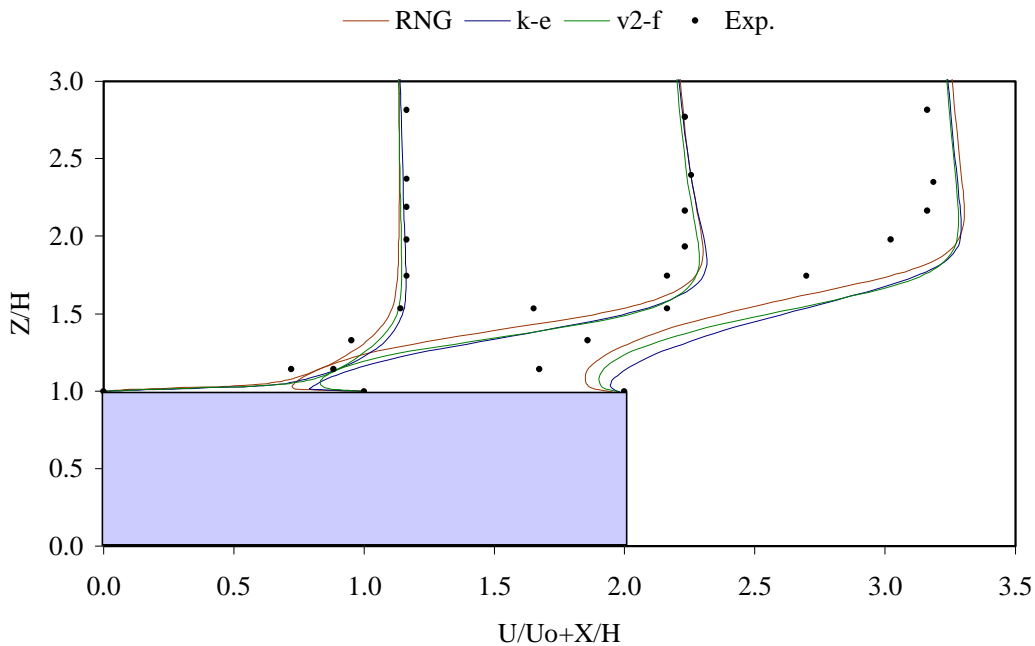


Figure 2.28 : comparaison de la vitesse au dessus du bloc

En aval du bloc (cf. figure 2.29), les profils de vitesse sont meilleurs pour les modèles RNG et  $v2-f$ ; la couche limite se re-développe correctement pour des abscisses supérieures à  $12H$ . À noter que par rapport à l'expérience, l'extension verticale de la recirculation est moins importante.

Nous n'avons pas pour ce cas test de résultats expérimentaux sur l'énergie cinétique turbulente mais seulement sur la fluctuation de la composante horizontale de la vitesse. Nous ne faisons pas de comparaison sur cette variable puisque nos modèles de turbulence sont isotropes et ne peuvent donc pas modéliser correctement cette variable.

## 2.5 Simulations numériques

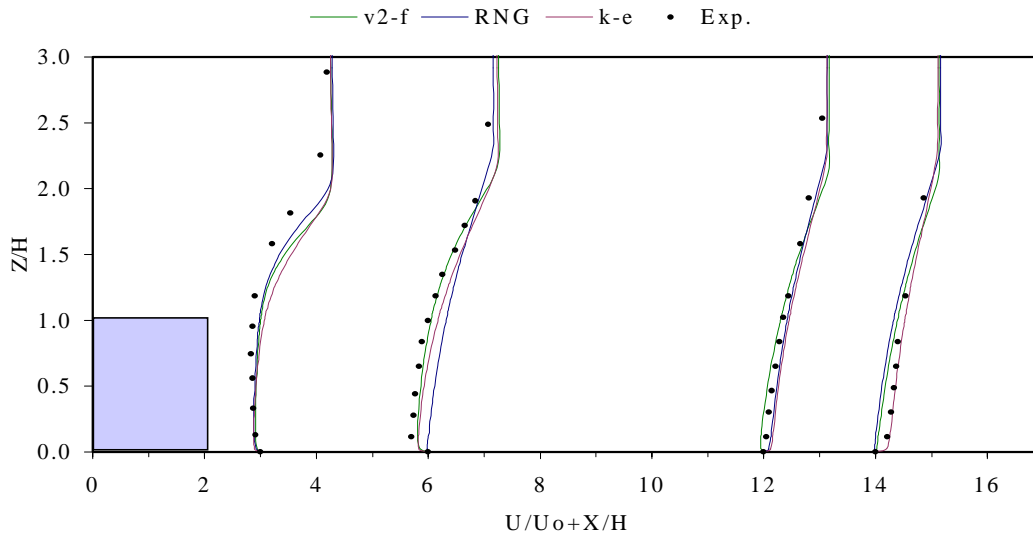


Figure 2.29 : comparaison de la vitesse en aval du bloc

Nous pouvons conclure pour ce cas test que les résultats fournis par les trois modèles sont satisfaisants avec tout de même une plus grande précision pour les modèles RNG et  $v2-f$ .

### 2.5.1.3 Cylindre de section carrée

**Description de l'expérience.** L'écoulement autour d'un cylindre de section carrée (figure 2.30) est un écoulement instationnaire qui se caractérise par le détachement périodique de tourbillons formés dans le sillage du carré (allées de Bénard-Karman).

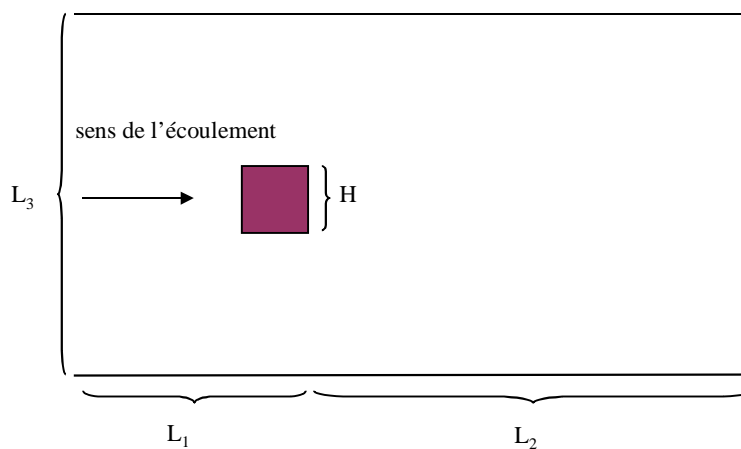


Figure 2.30 : géométrie de l'écoulement autour d'un cylindre de section carrée

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

**Caractéristiques de l'expérience.** Nous nous référons pour ce cas test à l'expérience de Lyn et Rodi [Lyn & Rodi, 1994 ; Lyn et al., 1995] et au workshop sur la simulation LES qui s'est basé sur cette expérience [Rodi et al., 1997]. Le nombre de Reynolds basé sur la longueur du côté du carré et la vitesse d'entrée est de 21400. Les caractéristiques géométriques et physiques sont résumées dans les tableaux suivants :

$H$	$L_1$	$L_2$	$L_3$
1	5,5	15	14

Tableau 2.8: caractéristiques géométriques de l'écoulement autour d'un cylindre de section carrée

$\rho$	$\mu$	$U_0$
1	$4,5454.10^{-5}$	1

Tableau 2.9: caractéristiques physiques de l'écoulement autour d'un cylindre de section carrée

La vitesse en entrée est uniforme et égale à 1 m/s ; le taux de turbulence est de 2%. Afin de déstabiliser le code, une condition initiale pour la vitesse dissymétrique est imposée. Le pas de temps a été choisi pour que soient effectuées 70 itérations par période. Enfin, tous nos calculs ont été effectués sur un maillage de  $100^2$  avec resserrement près des parois. Des conditions de symétrie sont imposées sur les parois supérieures et inférieures, libres en sortie. Le schéma upwind est utilisé pour toutes les équations.

**Résultats.** La figure suivante représente une succession de lignes de courant sur une période. Sur les trois premières, nous pouvons voir la formation et le détachement d'un tourbillon qui s'est créé au niveau du coin inférieur droit du carré et qui s'échappe par le haut. Se forme alors par dépression un autre tourbillon contrarotatif au niveau du coin supérieur droit du carré.

## 2.5 Simulations numériques

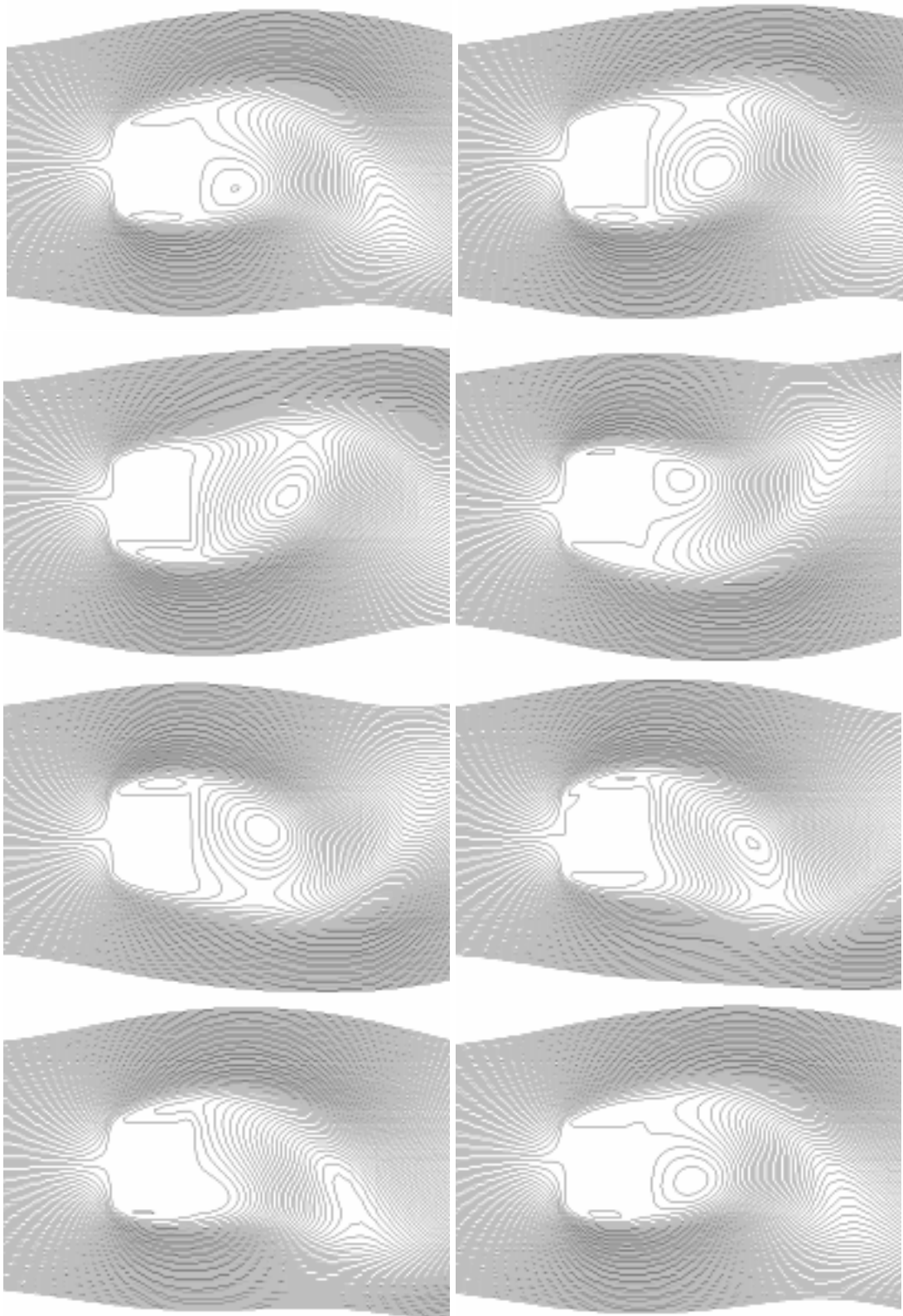


Figure 2.31 : lignes de courant autour du carré sur une période (modèle v2-f)

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

De façon plus précise, nous avons adopté trois critères de comparaison. Le premier caractérise le détachement périodique des tourbillons ; c'est le nombre adimensionnel de Strouhal défini par la relation suivante :

$$S_t = f \frac{H}{U_0} \quad (2.62)$$

où  $f$  est la fréquence de détachement des tourbillons. Pour nos calculs, nous avons estimé la fréquence par lecture de la période sur la courbe du coefficient de portance en fonction du temps (figure 2.33).

Les deux autres critères sont des paramètres moyens de l'écoulement à savoir la longueur moyenne de la recirculation  $l_r$  sur un axe horizontal divisant le carré en deux. Elle est estimée en intégrant sur cet axe et le long d'une période la composante horizontale de la vitesse. Le troisième est la valeur du coefficient moyen de portance  $C_d$ .

Pour les modèles RNG et  $v2-f$ , la fréquence est conforme au résultat expérimental (cf. tableau 2.10). Le modèle  $k-e$  amortit les fluctuations et fournit un résultat stationnaire. L'écoulement est symétrique avec la formation en aval du carré de deux recirculations.

	Exp.	Aquilon <i>k-e</i>	Aquilon RNG	Aquilon $v2-f$	Castem (RNG)	Franke & Rodi ( <i>k-e</i> )	Bosh ( <i>k-e</i> )
$S_t$	0,132	Stat.	0,135	0,137	0,120	Stat.	0,134
$l_r(m)$	0,9	-	1,33	0,75	1,23	-	2,34
$C_d(N.m^{-1})$	2,1	-	1,22	1.55	2.06	1,55	1,64

*Tableau 2.10 : comparaison des résultats sur le nombre de Strouhal, la longueur moyenne de la recirculation et le coefficient de frottement moyen*

## 2.5 Simulations numériques

En ce qui concerne la longueur de recirculation moyenne, il existe une assez grande disparité selon le code de calcul utilisé. Le modèle RNG surestime largement ce paramètre. Ces résultats sont conformes à l'analyse de Turbelin [Turbelin, 2000], qui a utilisé le code calcul CASTEM, à savoir un coefficient de traînée sous-estimé, une longueur moyenne surestimée. Il l'explique par une tendance qu'ont les modèles à viscosité turbulente à générer dans le sillage de l'obstacle des contraintes turbulentes trop importantes et à surestimer en amont la production d'énergie turbulente. Des modifications apportées à l'estimation du terme de production dans la zone de stagnation peuvent améliorer le comportement de ces modèles [Rodi, 1995]. Le modèle  $v2-f$ , par la prise en compte de l'anisotropie de la turbulence près des parois corrige assez nettement ces défauts surtout en ce qui concerne la longueur moyenne de la recirculation.

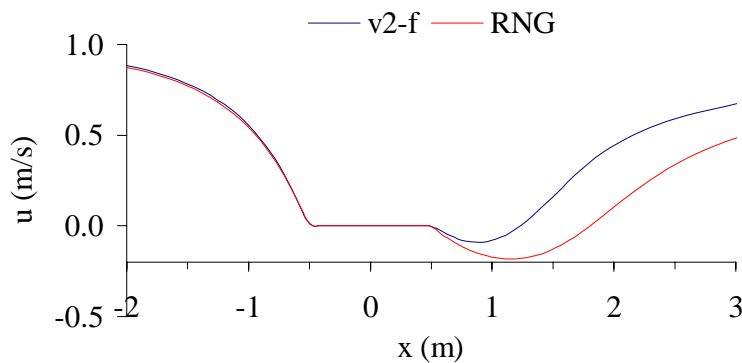


Figure 2.32 : profil de vitesse moyen sur l'axe

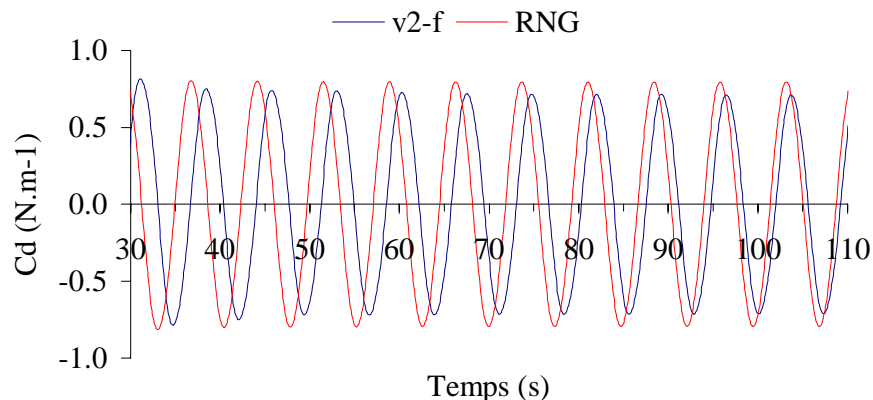


Figure 2.33 : variation du coefficient de portance en fonction du temps



## **2.5.2 Cas tests 3D**

### **2.5.2.1 Marche descendante**

La premier cas test 3D que nous avons réalisé est une extension à la troisième dimension de la marche descendante précédemment exposée. Pour une profondeur de domaine supérieure à 10 fois la hauteur de la marche, l'écoulement est assimilé à un écoulement bidimensionnel [Dumoulin, 1996]. Les résultats obtenus pour les trois modèles de turbulence sont identiques au cas 2D à  $10^{-5}$  près. Il n'est donc pas nécessaire de les faire figurer ici. La composante transversale du vecteur vitesse est nulle à l'issue de la simulation.

### **2.5.3 Simulations 3D**

Nous avons effectué une série de simulations tridimensionnelles pour des géométries plus complexes. Pour ces écoulements, nous ne disposons pas de relevés expérimentaux pour vérifier la validité des simulations. Ce sont plutôt des tests sur des géométries urbaines réelles permettant de montrer la complexité des écoulements en leur sein et de vérifier d'un point de vue global le bon comportement du code de calcul et une représentation des phénomènes fidèle à l'idée que l'on peut s'en faire.

Les figures 2.34 à 2.36 représentent l'écoulement autour de trois bâtiments dont les deux premiers forment un canyon. Le troisième est placé perpendiculairement à son axe. Nous pouvons remarquer l'effet venturi dû au brusque rétrécissement du canyon, le contournement par le fluide des obstacles ainsi que la complexité du sillage des bâtiments avec notamment l'éclatement et la redistribution latérale de l'écoulement juste derrière le troisième obstacle.

Les figures 2.37 et 2.38 représentent le champ de vitesse place Gambetta à Bordeaux. Les arbres ont été modélisés en attribuant à la perméabilité la valeur de 0,1. Ceci permet de prendre en compte le ralentissement de l'écoulement par les branches et le feuillage sans pour autant bloquer complètement l'écoulement.

## 2.5 Simulations numériques

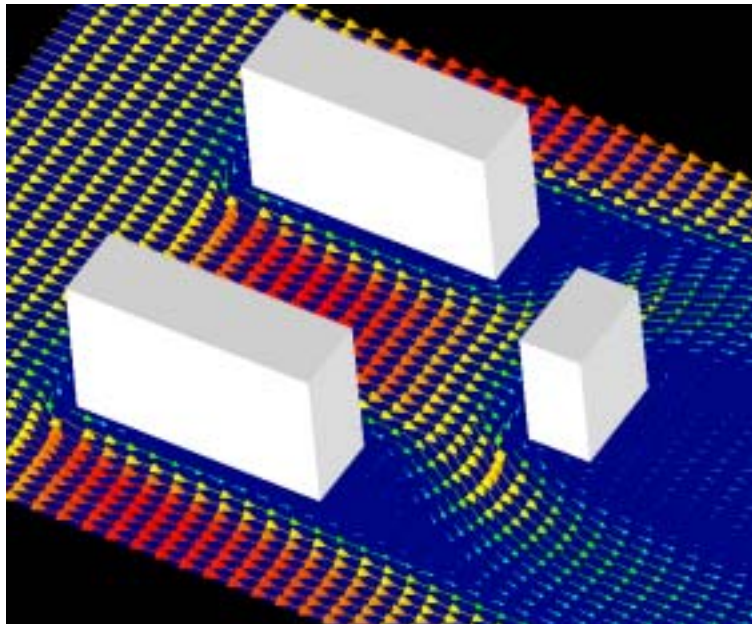


Figure 2.34 : vecteurs vitesse dans le plan horizontal situé immédiatement au-dessus du sol

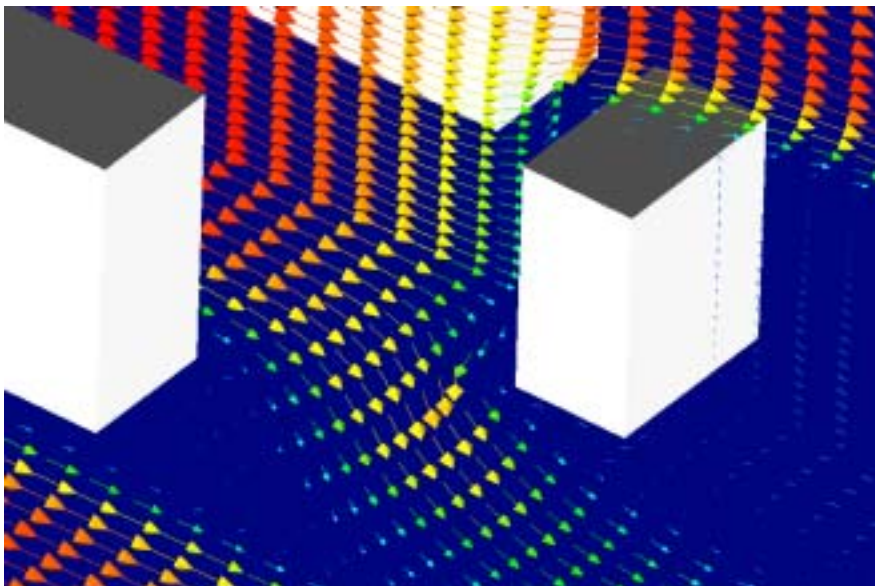


Figure 2.35 : vecteurs vitesse dans les plans horizontaux et verticaux

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

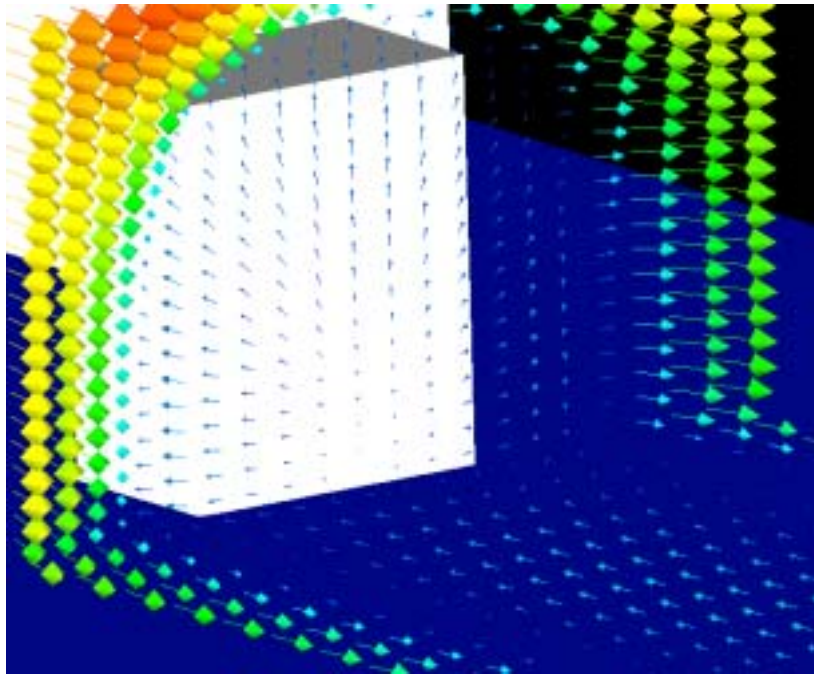


Figure 2.36 : vecteurs vitesse dans les plans horizontaux et verticaux dans le sillage du dernier bâtiment

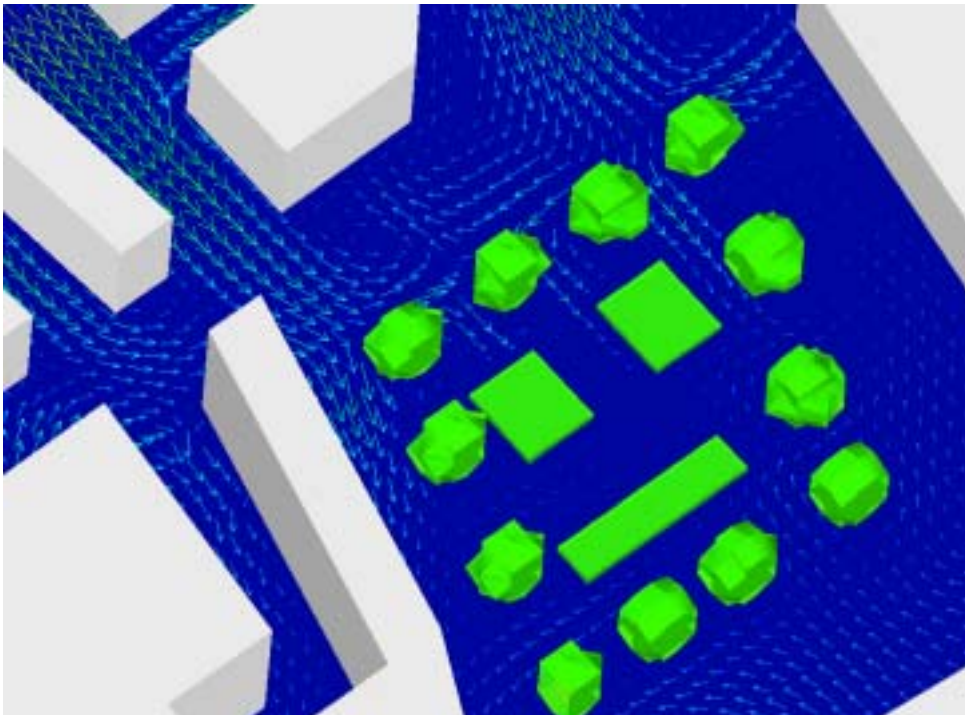


Figure 2.37 : vecteurs vitesse dans le plan horizontal situé au-dessus du sol de la place Gambetta

## 2.5 Simulations numériques

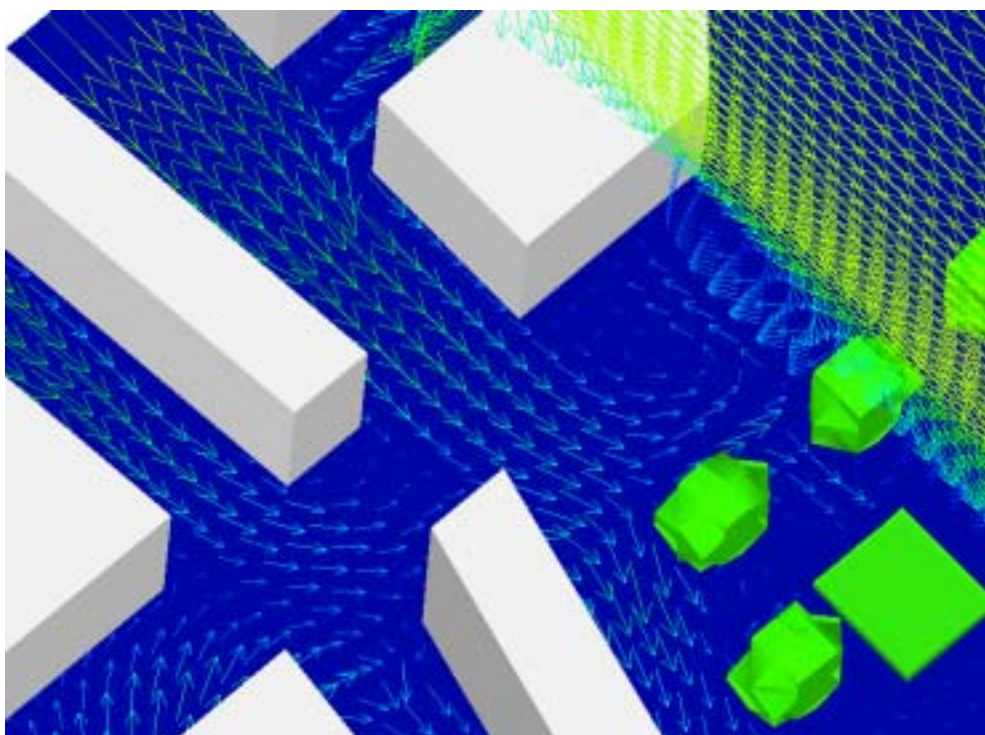


Figure 2.38 : vecteurs vitesse dans le plan horizontal situé au-dessus du sol et dans un plan vertical de la place Gambetta

Le problème que nous rencontrons pour ce type de modélisation vient de la difficulté d'estimer les conditions aux limites. En effet si l'on considère la place Gambetta à Bordeaux, elle fait partie d'un quartier et est donc entourée de bâtiments. De l'écoulement autour de ces bâtiments dépendent en partie les conditions aux limites du domaine que nous voulons étudier, surtout la valeur des champs entre les bâtiments compte tenu de la complexité des sillages. Il faudrait en fait étudier une zone plus étendue et restreindre les résultats à une partie interne assez éloignée des limites.

Les deux figures suivantes représentent le champ de vitesse barrière Saint-Genès à Bordeaux. La particularité de la géométrie tient en la présence d'un tunnel qui permet d'éviter le croisement des deux axes principaux.

## CHAPITRE 2 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE LOCALE

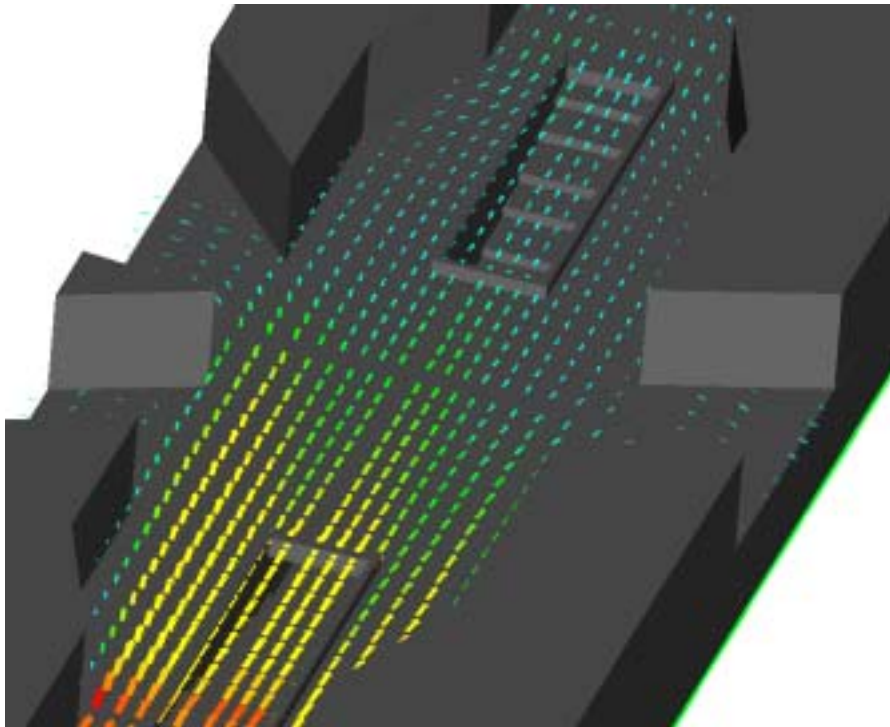


Figure 2.39 : vecteurs vitesse dans le plan horizontal situé au-dessus du sol, barrière Saint-Genès

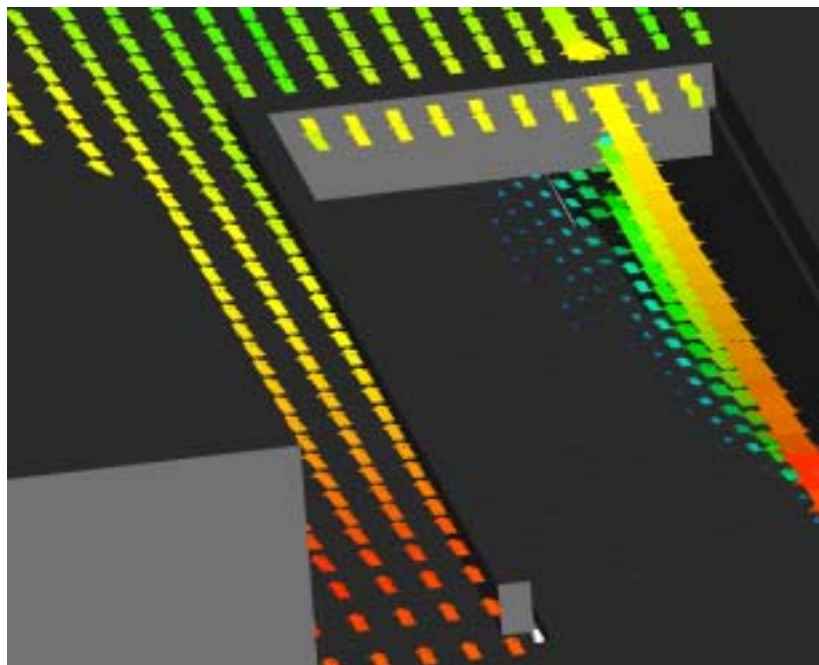


Figure 2.40 : vecteurs vitesse dans les plans horizontaux et verticaux barrière Saint-Genès

### 2.6 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre la modélisation des écoulements à une échelle locale, c'est à dire autour de bâtiments. Nous avons décrit les équations et modèles utilisés dans le code de calcul Aquilon. Notre contribution a été l'implantation des modèles de turbulence en 2D et 3D, la programmation d'une interface (en collaboration avec un doctorant du laboratoire) et une participation à une réflexion globale sur la structure du code (allocation dynamique, limitation et généralisation de certaines sous-routines...). Nous avons validé le code de calcul sur des cas tests fréquemment rencontrés dans la littérature : écoulement derrière une marche descendante, autour d'un bloc, d'un carré. Des simulations sur des géométries réelles ont également été menées : écoulement place Gambetta ou barrière Saint-Genès à Bordeaux.

En ce qui concerne la thermique des fluides, notre apport a consisté à prendre en compte les échanges thermiques par rayonnement. Certaines parties sont maintenant validées comme le calcul des ombres portées par les bâtiments au cours de la journée, le calcul des facteurs de forme ou des masques. Toutes les autres parties ont été programmées : estimation des flux solaires, prise en compte des surfaces inclinées... Pour le stockage des facteurs de forme une solution originale a été choisie par l'introduction des listes chaînées qui limite fortement la place mémoire utilisée par le code. Une validation complète avec un couplage dynamique/thermique/rayonnement reste à effectuer.



# CHAPITRE 3

## DYNAMIQUE ET THERMIQUE

### À L'ÉCHELLE MÉSO

L'étude d'écoulements autour de structures bâties est limitée, comme nous l'avons vu précédemment, à une rue, une place ou un carrefour. La modélisation d'un quartier entier, et a fortiori d'une ville, avec la prise en compte de tous les bâtiments est difficilement réalisable voire impossible dans l'état actuel de la puissance des ordinateurs. De plus, si l'on étudie une ville entière s'étendant sur plusieurs dizaines voire centaines de kilomètres carrés, une information au mètre près ne serait pas forcément exploitable aisément. Il est plutôt souhaitable de globaliser par un autre modèle les phénomènes à une plus grande échelle, tout en gardant la possibilité de faire un zoom sur une zone limitée de la ville. D'un autre côté, il faut aussi garder à l'esprit que les maillages que nous utilisons actuellement étaient hors de portée il y a dix ou quinze ans à l'époque des premières stations ou PC. Les progrès en informatique sont tels que nos espoirs peuvent aussi rapidement se concrétiser.

Le modèle global, à méso-échelle, passe par la paramétrisation du sol puisque nos problèmes viennent de l'impossibilité de mailler finement un grand nombre de constructions. Que l'on se trouve à la campagne ou à la ville, le sol présente une irrégularité de surface caractérisée par la nature, la hauteur et la densité des éléments naturels ou artificiels se trouvant sur le sol (champs, forêts, vignes, villages, villes...). Les équations du mouvement et de l'énergie ne seront alors pas résolues à proximité du sol mais la vitesse et la température



seront imposées grâce à des lois empiriques donnant leurs profils en fonction de la rugosité de surface et de la stratification thermique de l'atmosphère.

Les aspects concernant le rayonnement d'un modèle à méso-échelle ne sont pas ici abordés. Ils reprennent pour une part seulement ceux du chapitre précédent.

Nous décrivons dans une première section la théorie qui a permis d'obtenir les profils de vitesse et de température dans la couche limite de surface, puis le traitement numérique qui les prend en compte (c'est à dire les lois de paroi) et une validation sur une série de cas tests.

### 3.1 Les équations fondamentales pour la couche limite atmosphérique

#### 3.1.1 État de référence

Nous considérons que l'atmosphère s'écarte peu d'un état de référence hydrostatique, adiabatique et au repos. Il est donné par les équations suivantes, simplification des équations fondamentales [de Moor, 1983] :

$$u_r = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial p_r}{\partial z} = -\rho_r g \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial T_r}{\partial z} = \frac{-g}{C_p} \quad (3.3)$$

$$p_r = \rho_r R T_r \quad (3.4)$$

Après intégration entre une altitude  $z$  quelconque et une altitude  $h$  connue, on obtient les profils de pression, température et masse volumique suivants :

### 3.1 Les équations fondamentales pour la couche limite atmosphérique

$$T_r(z) = T_r(h) \left( 1 - \frac{g}{C_p T_r(h)} (z - h) \right) \quad (3.5)$$

$$p_r(z) = p_r(h) \left( 1 - \frac{g}{C_p T_r(h)} (z - h) \right)^{C_p/R} \quad (3.6)$$

$$\rho_r(z) = \rho_r(h) \left( 1 - \frac{g}{C_p T_r(h)} (z - h) \right)^{C_v/R} \quad (3.7)$$

#### 3.1.2 Stabilité de l'atmosphère

Il est bien connu qu'une particule d'air chaud a tendance à s'élever par le jeu des forces d'Archimède. Ce phénomène peut être amplifié ou neutralisé selon le profil de la température dans l'atmosphère. Lorsque chaque particule d'air est en équilibre avec les particules voisines, la stratification thermique de l'atmosphère est alors dite neutre : c'est l'état adiabatique et hydrostatique présenté précédemment.

En raison du réchauffement de la surface terrestre par le soleil et des conditions météorologiques locales, l'atmosphère se trouve rarement dans un état d'équilibre. Le profil de température s'éloigne alors du profil de référence, amplifiant ou atténuant les mouvements verticaux. Si le gradient vertical de température est supérieur au gradient de référence, l'atmosphère est dans un état instable, tout mouvement vertical est alors amplifié. Dans le cas contraire il est dans un état stable.

La nuit, la stratification thermique de l'atmosphère est stable car le sol est plus froid que l'air. Au fur et à mesure du réchauffement du sol par le rayonnement solaire, ce dernier communique sa chaleur aux premières couches de l'atmosphère augmentant l'intensité turbulente. Le mélange s'intensifie et la hauteur de la couche limite croît : la stratification est instable. En fin d'après midi, l'air a la même température que le sol puisque ce dernier n'est plus réchauffé, et le profil de température devient adiabatique. Le soir, le profil redevient stable en raison du flux de chaleur vers le sol causé par une atmosphère plus chaude que le sol.

## CHAPITRE 3 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE MÉSO

Un paramètre important caractérise le degré de stabilité de l'atmosphère. Il s'agit du nombre sans dimension de Richardson de flux  $R_f$  qui est le rapport du terme de production d'énergie turbulente thermique à celui dynamique :

$$R_f = \frac{\overline{g w' T}}{T_0 \overline{u' w'} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z}} \quad (3.8)$$

Si le nombre de Richardson de flux est nul, la contribution des fluctuations de température sur le terme de production est nul. L'atmosphère est neutre. Si il est positif, les conditions sont stables et inversement [Seinfeld, 1986].

Un autre paramètre de mesure de la stabilité de l'atmosphère est la longueur de Monin-Obukhov donnée par la relation suivante :

$$L = \frac{-T_0 u_*^3}{\kappa g \overline{w' T'}} \quad (3.9)$$

- $L > 0$  : atmosphère stable
- $L < 0$  : atmosphère instable
- $L = \infty$  : atmosphère neutre

### 3.1.3 Équations fondamentales

Nous décomposons les variables de notre problème en la somme d'une variable de référence constante au cours du temps (donnée par les équations 3.1 à 3.4) et d'un écart à cet état de référence, variable au cours du temps.

En écrivant de nouveau les équations fondamentales et en tenant compte de cette décomposition on obtient un système équivalent [Seinfeld, 1986] dans lequel les variables sont les écarts à l'état de référence. Seules les équations de Navier-Stokes sont modifiées puisque le terme de gravité  $\rho g$  est remplacé par  $\rho_r g$ . Nous gardons les mêmes notations que précédemment tout en gardant à l'esprit qu'elles représentent un écart à un état de référence.

### 3.1 Les équations fondamentales pour la couche limite atmosphérique

À méso échelle, la force de Coriolis  $\mathbf{F}$  n'est plus négligeable devant les forces d'inertie. Il faut donc ajouter aux équations de Navier-Stokes le terme suivant (éq. 3.13) :

$$\mathbf{F} = -2(\boldsymbol{\Omega} \wedge \bar{\mathbf{u}}) \quad (3.10)$$

où  $\boldsymbol{\Omega}$  est le vecteur de rotation de la Terre. Il est fonction de la latitude  $\Phi$ , de la vitesse angulaire de la Terre  $w$ , et l'angle  $\alpha$  entre l'axe est/ouest et l'axe longitudinal du repère considéré :

$$\boldsymbol{\Omega} = \begin{pmatrix} w \cos \phi \sin \alpha \\ w \cos \phi \cos \alpha \\ w \sin \phi \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

On a donc, pour les équations du mouvement et de l'énergie, le système suivant :

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} \approx 0 \quad (3.12)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}} \right) = -\nabla \left( p + \frac{2}{3} \rho k \right) + \nabla \cdot ((\mu + \mu_t)(\nabla \bar{\mathbf{u}} + {}^t \nabla \bar{\mathbf{u}})) + \rho_r \mathbf{g} + \mathbf{F} \quad (3.13)$$

$$\rho C_p \left( \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{T} \right) = \nabla \cdot \left( (\lambda + C_p \frac{\mu_t}{\sigma_t}) \nabla \bar{T} \right) \quad (3.14)$$

$$\rho = \rho_0 \left( 1 - \beta (\bar{T} + T_r - T_0) \right) \quad (3.15)$$

Le modèle de turbulence utilisé à cette échelle est le modèle  $k-\varepsilon$ . Il diffère légèrement du modèle présenté dans le chapitre précédent de façon à prendre en compte la stabilité de l'atmosphère : la viscosité turbulente est fonction du nombre de Richardson de flux [Delboubé, 1997] et les constantes de l'équation de  $\varepsilon$  sont celles de Viollet [Viollet, 1987]. Seule celle en facteur du terme de production  $G$  est modifiée. Les termes de production par cisaillement et thermique peuvent aussi se réécrire en fonction du nombre de Richardson de flux.

$$\rho \left( \frac{\partial k}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) k \right) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + P(1 - R_f) - \rho \varepsilon \quad (3.16)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \varepsilon \right) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + C_{\varepsilon 1} P(1 - C_{\varepsilon 3} R_f) \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.17)$$

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} (1 - R_f)^{1/4} \quad (3.18)$$

Les constantes sont données dans le tableau suivant :

$C_\mu$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$	$\sigma_t$	$C_{\varepsilon 1} C_{\varepsilon 3}$
0,09	1,44	1,92	1	1,3	1	1,44 (instable) 0 (stable)

Tableau 3.1 : constantes du modèle  $k$ - $\varepsilon$

## 3.2 Profils pour une couche limite de surface

Nous avons vu au premier chapitre que la couche limite est composée d'une couche de surface de quelques dizaines de mètres de hauteur. Dans cette partie de l'atmosphère, la théorie de la similitude de Monin-Obukhov [de Moor, 1983 ; Pielke, 1984 ; Stull, 1988 ; Seinfeld, 1986 ; Delboulbé, 1997] permet de déterminer les profils des variables de notre problème. Ils nous serviront ensuite de conditions aux limites des équations présentées ci-dessus.

### 3.2.1 Profil de vitesse pour une CLS neutre

Nous faisons l'hypothèse d'un écoulement bidimensionnel homogène horizontalement, stationnaire et ne subissant pas de gradient de pression. Les équations de Navier-Stokes, après intégration suivant la composante verticale se réduisent alors à la relation suivante :

### 3.2 Profils pour une couche limite de surface

$$\mu \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} - \rho \overline{u'w'} = \tau_0 \quad (3.19)$$

où  $\tau_0$  est le flux à l'altitude  $z=0$ .

La somme des flux de quantité de mouvement est constante : le modèle est dit à flux constant. Cette équation, en raison du flux turbulent ne permet pas la détermination du profil de vitesse dans la CLS. Des considérations d'analyse dimensionnelle vont conduire à une relation entre paramètres représentatifs de la CLS explicitant la vitesse.

On définit la vitesse de frottement par la relation suivante :

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}} \quad (3.20)$$

En utilisant la décomposition de Reynolds et en négligeant la viscosité moléculaire par rapport à la viscosité turbulente, la relation 3.19 s'écrit :

$$\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \rho u_*^2 \quad (3.21)$$

La viscosité cinématique turbulente  $\mu_t/\rho$  a les dimensions du produit d'une vitesse et d'une longueur [Pielke, 1984]. On peut écrire :

$$\frac{\mu_t}{\rho} = \kappa z u_* \quad (3.22)$$

ce qui donne pour le gradient de vitesse :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{u_*}{\kappa z} \quad (3.23)$$

Pour caractériser les irrégularités de la surface, on définit une longueur de rugosité  $z_0$  qui est considérée comme l'altitude à laquelle la vitesse s'annule.

### CHAPITRE 3 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE MÉSO

Dans une CLS neutre, pour une altitude  $z$  largement supérieure à la hauteur moyenne des irrégularités, le profil de la composante horizontale de la vitesse est alors donné, après intégration entre  $z$  et  $z_0$ , par la relation :

$$\bar{u}(z) = \frac{u^*}{\kappa} \ln \frac{z}{z_0} \quad (3.24)$$

où  $\kappa$  est la constante de Karman égale à 0,4 dans l'atmosphère<sup>4</sup>.

**Valeurs des longueurs de rugosité.** La longueur de rugosité  $z_0$  peut être estimée par le dixième de la hauteur moyenne des irrégularités. Typiquement, elle a, selon la nature de la surface, les valeurs suivantes [de Moor, 1983 ; Seinfeld, 1986 ; Stull, 1988] :

- Forêts : 1m
- Buissons et arbustes : 0,1 m
- Pelouse : 0,01 m
- Quartiers résidentiels : 0,5 m
- Centres villes : 0,5-2 m

Pour les zones urbaines et à condition d'une répartition uniforme des bâtiments, la longueur de rugosité peut être calculée en fonction de la hauteur moyenne des éléments  $h$ , la surface visible perpendiculaire au vent  $S_s$  et de la surface couverte par les éléments rugueux  $S_L$  par la formule suivante :

$$z_0 = 0,5h \frac{S_s}{S_L} \quad (3.25)$$

---

<sup>4</sup> La valeur de cette constante varie en fait d'un auteur à l'autre. Nous avons choisi la valeur donnée par Dyer [Dyer, 1974].

### 3.2 Profils pour une couche limite de surface

Pour déterminer les longueurs de rugosité de la ville, il est alors nécessaire de la subdiviser en quartiers ayant des caractéristiques homogènes.

#### 3.2.2 Influence de la stabilité de l'atmosphère

Dans l'établissement du profil de vitesse précédent, les effets de stratification de l'atmosphère n'ont pas été pris en considération. Ils jouent en fait un rôle important en maintenant ou en supprimant l'énergie turbulente.

**Profil de vitesse.** Dans des conditions de stratification stables ou instables, la vitesse diffère de celle établie par la relation 3.24. À nouveau, des considérations d'analyse dimensionnelle permettent d'obtenir les profils. Elles utilisent notamment une longueur caractéristique notée  $\zeta$  et définie par :

$$\zeta = z/L \quad (3.26)$$

Le gradient vertical de vitesse est donné alors par la relation [Pielke, 1984] :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{u_*}{\kappa z} g(\zeta) \quad (3.27)$$

dans laquelle la fonction de similitude  $g(\zeta)$  intègre les différentes stratifications de l'atmosphère. Plusieurs auteurs, parmi lesquels Businger, Dyer et Högström, ont proposé des valeurs pour la fonction  $g$  [Guilloteau, 1999]. Nous avons retenu celles de Dyer [Dyer, 1974] :

$$\begin{cases} g(\zeta) = 1 + 5\zeta & 0 < \zeta \leq 1 \quad (stable) \\ g(\zeta) = (1 - 16\zeta)^{-1/4} & -2 \leq \zeta < 0 \quad (instable) \end{cases} \quad (3.28)$$

Nous pouvons réécrire la relation 3.27 comme suit :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{u_*}{\kappa z} - \frac{1 - g(\zeta)}{\kappa z} u_* \quad (3.29)$$



## CHAPITRE 3 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE MÉSO

L'intégration entre  $z$  et  $z_0$  donne les profils de vitesse en fonction de l'altitude et de la stabilité de l'atmosphère :

$$\bar{u} = \frac{u_*}{\kappa} \left[ \ln \frac{z}{z_0} - \psi_u(\xi) \right] \quad (3.30)$$

où la fonction  $\psi_u$  représente la correction du profil logarithmique en fonction de l'altitude et de la stabilité de l'atmosphère. Elle est donnée, après un changement de variable, par la relation suivante :

$$\psi_u(\xi) = \int_{z_0/L}^{z/L} \frac{1 - g(\xi)}{\xi} d\xi \quad (3.31)$$

Après intégration en les altitudes  $z_0$  et  $z$  on obtient la forme de la fonction  $\psi_u$  :

$$\begin{cases} \psi_u(\xi) = 5 \left( \frac{z - z_0}{L} \right) & \textit{stable} \\ \psi_u(\xi) = 2 \ln \left[ \frac{1+x}{1+x_0} \right] + \ln \left[ \frac{1+x^2}{1+x_0^2} \right] + 2(\tan^{-1} x_0 - \tan^{-1} x) & \textit{instable} \end{cases} \quad (3.32)$$

où

$$x = \left( 1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{1/4} \quad \text{et} \quad x_0 = \left( 1 - 16 \frac{z_0}{L} \right)^{1/4} \quad (3.33)$$

### 3.2.3 Profils de température

Par des raisonnements de la même nature, il est possible d'arriver à une formule donnant le profil de température dans des conditions stables ou instables. Nous définissons une échelle de température par  $T_*$  :

### 3.2 Profils pour une couche limite de surface

$$T_* = \frac{-\overline{w'T'}}{u_*} \quad (3.34)$$

Par analogie avec la formule 3.27, le gradient de température est donné par [Pielke, 1984] :

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} = \frac{T_*}{\kappa z} h(\xi) \quad (3.35)$$

où la fonction  $h$  est définie par la forme suivante [Dyer, 1974] :

$$\begin{cases} h(\xi) = 1 + 5\xi & 0 < \xi \leq 1 \text{ (stable)} \\ h(\xi) = (1 - 16\xi)^{1/2} & -2 \leq \xi < 0 \text{ (instable)} \end{cases} \quad (3.36)$$

Après intégration entre  $z_0$  et  $z$ , on obtient les profils de température suivant :

$$\begin{cases} \bar{T} = T_0 + \frac{T_*}{\kappa} \left[ \ln \frac{z}{z_0} - \psi_T(\xi) \right] & \text{stable} \\ \bar{T} = T_0 + \frac{T_*}{\kappa} \left[ \ln \frac{z}{z_0} - \psi_T(\xi) \right] & \text{instable} \end{cases} \quad (3.37)$$

où :

$$\begin{cases} \psi_T(\xi) = 5 \left( \frac{z - z_0}{L} \right) & \text{stable} \\ \psi_T(\xi) = 2 \ln \left( \frac{y + 1}{y_0 + 1} \right) & \text{instable} \end{cases} \quad (3.38)$$

avec :

$$y = \left( 1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad y_0 = \left( 1 - 16 \frac{z_0}{L} \right)^{1/2} \quad (3.39)$$

### 3.2.4 Valeurs des variables turbulentes dans la CLS

Dans la couche limite de surface, les valeurs de  $k$  et de  $\varepsilon$  sont données par les relations suivantes [Delboulbé, 1997] :

$$\varepsilon = \begin{cases} \frac{u_*^3}{\kappa z} & \textit{neutre} \\ \varepsilon = u_*^2 \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} (1 - R_f) & \textit{stable ou instable} \end{cases} \quad (3.40)$$

$$k = \begin{cases} u_*^2 C_\mu^{-1/2} & \textit{neutre} \\ k = u_*^2 C_\mu^{-1/2} (1 - R_f)^{3/8} & \textit{stable ou instable} \end{cases} \quad (3.41)$$

### 3.2.5 Prise en compte des fortes rugosités

Si nous sommes en présence de fortes rugosités avec une répartition assez dense de ces éléments, l'atmosphère réagit plutôt en fonction du haut des éléments rugueux que du sol ou de leur morphologie (cf. figure 3.1). Le sol est en quelque sorte décalé vers le haut d'une distance appelée hauteur de déplacement  $d$  égale aux deux tiers de la hauteur des éléments rugueux [Oke, 1987].

Les profils logarithmiques sont conservés mais décalés vers le haut (cf. figure 3.1). Les lois précédentes donnant les profils de vitesse et de température en fonction de l'altitude et de la stabilité de l'atmosphère sont encore valables à condition de tenir compte de ce décalage c'est à dire en intégrant les relations 3.27 et 3.35 entre  $(z-d)$  et  $z_0$ . Nous ne réécrivons pas les différentes formules, il suffit systématiquement de remplacer  $z$  par  $z-d$ .

### 3.3 Traitements numériques

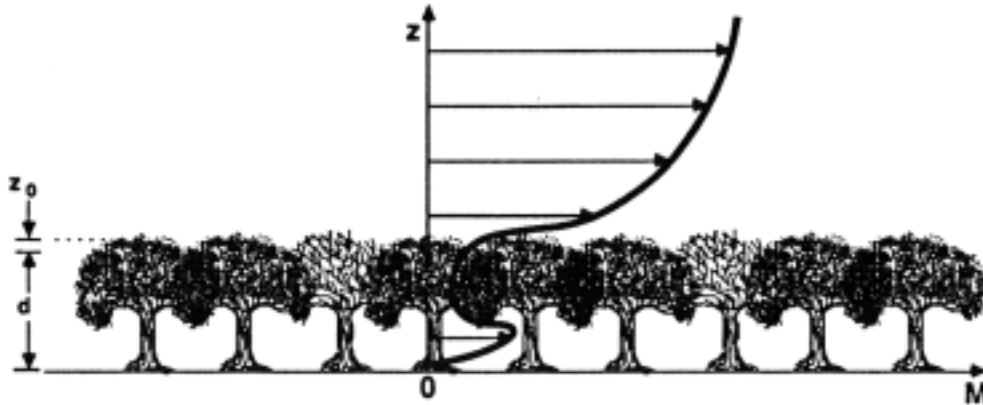


Figure 3.1 : écoulement au-dessus de la canopée d'une forêt [Stull, 1988]

### 3.3 Traitements numériques

**Conditions aux limites pour la vitesse et la température.** Pour tenir compte des caractéristiques de la surface il est nécessaire de ne plus résoudre les équations du mouvement ou de l'énergie au premier nœud fluide du domaine mais d'imposer des relations particulières appelées lois de paroi. Elles sont présentées ci-dessous et ont été implantées dans le code Aquilon et validées par H. Foudhil, doctorante au laboratoire MASTER. Couplées aux modèles de turbulence présentés dans le chapitre précédent, elles permettent d'aborder les problèmes à plus grande échelle.

Dans la couche de surface à flux constant, les équations de Navier-Stokes se réduisent à la relation suivante (cf. section 3.2) :

$$\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \rho u_*^2 \quad (3.42)$$

En écrivant  $u_*$  d'une part à l'aide de la relation donnant les profils de vitesse (équ. 3.30) et d'autre part à l'aide de celle de  $k$  (équ. 3.41), on obtient la loi suivante, valable dans la CLS :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{\kappa C_\mu^{1/4} \rho k^{1/2} (1 - R_f)^{-3/4}}{\mu_t \left( \ln \frac{z-d}{z_0} - \psi_u \right)} \bar{u} \quad (3.43)$$

## CHAPITRE 3 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE MÉSO

Cette relation est utilisée comme condition à la limite. Elle correspond à une condition de Fourier.

Lors de la discrétisation du domaine, la loi de paroi doit être imposée à une altitude  $z$  comprise entre dix et vingt fois la longueur de rugosité  $z_0$ . En dessous, elle n'est plus valide.

La condition à la limite pour la température est du même type :

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} = \frac{\kappa C_\mu^{1/4} \rho k^{1/2} (1 - R_f)^{-3/4}}{a_t \left( \ln \frac{z-d}{z_0} - \psi_T \right)} (\bar{T} - T_0) \quad (3.44)$$

ou  $a_t$  est la diffusivité turbulente exprimée par :

$$a_t = \frac{v_t}{\sigma_t} = v_t \frac{g(\xi)}{h(\xi)} \quad (3.45)$$

**Conditions aux limites pour  $k$  et  $\varepsilon$ .** Une condition de Neuman est utilisée à la paroi pour l'énergie cinétique turbulente. La dissipation  $\varepsilon$  est imposée au premier nœud fluide par la relation suivante [Foudhil, 2000] :

$$\varepsilon = C_\mu^{3/4} k^{3/2} \left( \frac{g(\xi)}{\kappa(z-d)} - \frac{1}{\kappa L} \right) \quad (3.46)$$

### 3.4 Validation des lois de paroi

#### 3.4.1 Écoulement avec un changement de rugosité du sol

Les écoulements atmosphériques sont soumis à de brusques changements des caractéristiques de la surface : passage de la campagne à la ville, des quartiers résidentiels situés à la périphérie au centre de celles-ci, passage des champs aux forêts...

### 3.4 Validation des lois de paroi

Pour tester les lois de paroi sur ce type d'écoulements, l'expérience de Bradley [Bradley, 1968] est souvent utilisée comme cas test de référence [Turbelin, 1999 ; Zhang 1991 ; Costes, 1996 ; Foudhil, 2000]. Cette expérience a montré les répercussions sur la couche limite d'un brusque changement de rugosité. L'expérience a été menée sur une piste d'aérodrome Australien dont une partie a été recouverte de pointes verticales pour augmenter sa rugosité.

**Description de l'expérience.** Un écoulement de couche limite neutre est perturbé par un saut de rugosité : une couche interne se développe de hauteur  $H(x)$  (cf. figure 3.2). Elle est composée à sa base d'une sous-couche limite en équilibre de hauteur  $h(x)$  coiffée d'une couche de transition pour laquelle les lois classiques de couche limite ne s'appliquent pas.

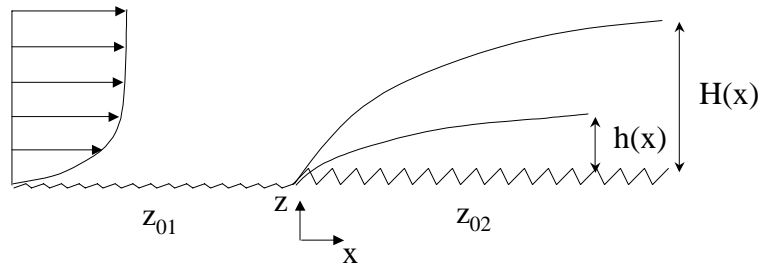


Figure 3.2 : configuration de l'expérience de Bradley

**Caractéristiques de l'expérience.** Le domaine est d'une hauteur de 2,8 m pour une longueur de 40 m (3,6 m en amont du changement de rugosité et 36,4 m en aval). La vitesse de frottement  $u_*$  vaut 0,104 m/s. Le rapport des rugosité aval/amont est de 125. La stratification de l'atmosphère est neutre.

Les conditions à l'entrée du domaine sont les suivantes :

$$\square \quad u(z) = \frac{u_*}{\kappa} \ln \frac{z}{z_{01}} \quad (3.47)$$

$$\square \quad k = C_\mu^{-1/2} u_*^2 \quad (3.48)$$

### CHAPITRE 3 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE MÉSO

$$\square \quad \varepsilon = \frac{u_*^3}{\kappa z} \quad (3.49)$$

Aux limites inférieure et supérieure, les conditions de Fourier décrites dans le chapitre précédent (éq. 3.43) sont appliquées à la vitesse. Une condition de Neuman est appliquées à  $k$  et de Dirichlet à  $\varepsilon$  (éq. 3.46). Une condition de Neuman est appliquée à toute les variables en sortie de domaine.

**Résultats.** Les deux figures suivantes montrent un bon accord entre les résultats expérimentaux et numériques sur la vitesse de cisaillement adimensionnée  $\frac{\kappa z \partial \bar{u}}{u_* \partial z}$  ainsi que sur la hauteur des couches internes. La modification de la structure de la couche limite est bien prise en compte par notre modèle.

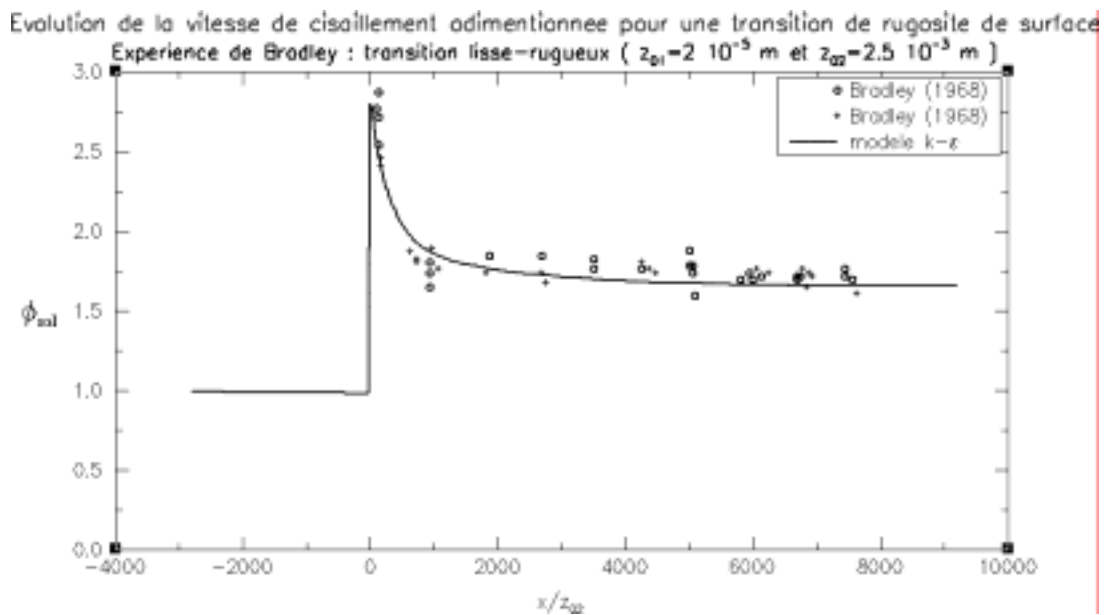


Figure 3.3 : évolution de la vitesse de cisaillement adimensionnée en fonction de la distance [Foudhil, 2000]

### 3.4 Validation des lois de paroi

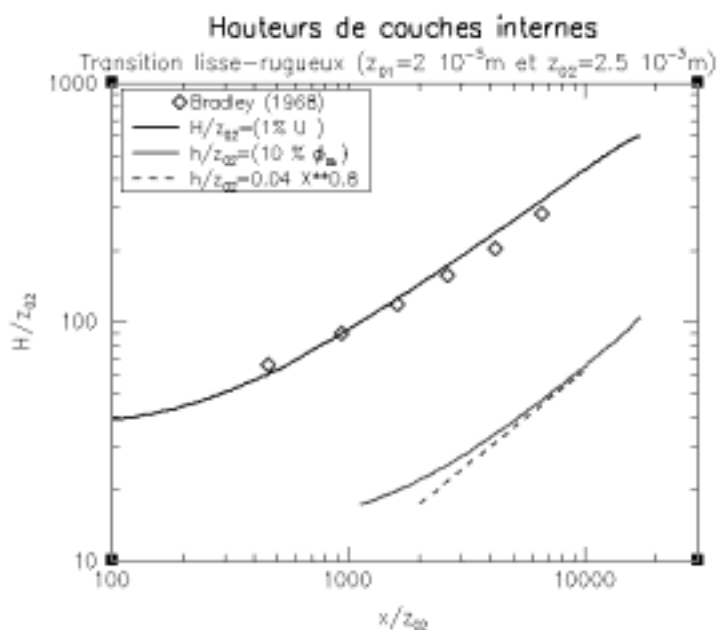


Figure 3.4 : hauteur des sous couches internes en fonction de  $x$  [Fouduhil, 2000]

#### 3.4.2 Écoulement avec un saut de température à la paroi

De même que les écoulements sont soumis à de brusques changements de la rugosité de la surface, ils subissent des sauts de contraintes thermiques provenant du sol. C'est le cas par exemple entre des surfaces à l'ombre et d'autres au soleil, des surfaces ayant des émissivités différentes, entre la campagne et la ville, cette dernière étant caractérisée par un îlot de chaleur. Le code de calcul a été testé sur ce type d'écoulement en simulant l'expérience de Charney [Charney, 1979].

**Description de l'expérience.** Il s'agit d'un écoulement de couche limite sur une plaque plane différentiellement chauffée (cf. figure 3.5). Les conséquences sur la couche limite d'un saut en température de la paroi sont étudiées.

**Caractéristiques de l'expérience.** Par rapport au fluide de température  $T_0$ , la plaque est d'abord chauffée à  $+23^\circ$  puis refroidie à  $-3^\circ$ . La plaque est d'une longueur de  $2 \text{ m}$  avec un saut de température à  $0,7 \text{ m}$ . La vitesse d'entrée est de  $10 \text{ m/s}$  et l'intensité turbulente de  $0,3\%$ .



### CHAPITRE 3 DYNAMIQUE ET THERMIQUE À L'ÉCHELLE MÉSO

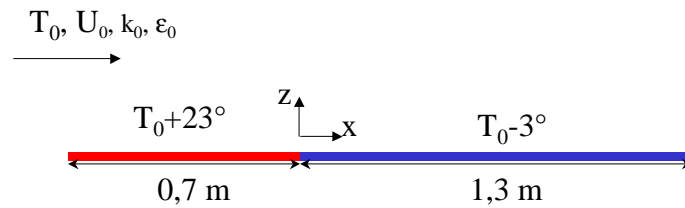


Figure 3.5 : configuration de l'expérience de Charney

**Résultats.** On constate sur la figure suivante une bonne concordance entre l'expérience et le calcul du flux de chaleur pariétal excepté à l'abscisse de 0,7 correspondant au saut de température. La prédiction des inversions est bien vérifiée bien que la hauteur de la couche limite thermique soit légèrement sous évaluée.

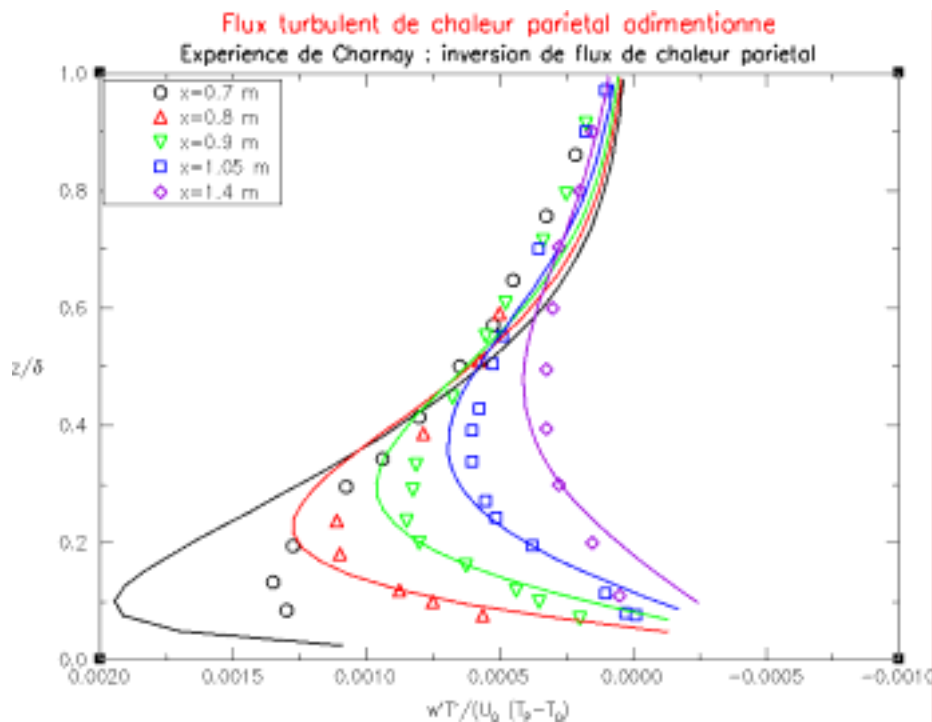


Figure 3.6 : flux de chaleur pariétal en fonction de  $z$  pour différentes abscisses [Foudhil, 2000]

## 3.5 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les premiers éléments d'un modèle à méso-échelle. Les équations fondamentales ont été présentées sous une forme plus adaptée aux écoulements atmosphériques. Il a été nécessaire de compléter le système d'équations par un ensemble de lois de paroi permettant la prise en compte des irrégularités de la surface terrestre. Elles sont déterminées à l'aide de la théorie de similitude de la couche limite de surface de Monin-Obukhov et conduisent à des conditions de Fourier sur la vitesse et la température. Couplées au modèle de turbulence  $k$ - $\varepsilon$ , elles ont été validées sur des écoulements présentant un saut de rugosité ou de température du sol.



# CHAPITRE 4

## CHIMIE ATMOSPHERIQUE

L'action du rayonnement solaire sur un mélange d'oxydes d'azote  $\text{NO}_x$ <sup>5</sup> et d'hydrocarbures produit une pollution appelée smog photochimique caractérisée par de fortes concentrations en ozone. Elle a été mise en évidence dans les années 50 à Los Angeles et ses effets produisent notamment une irritation oculaire et des voies respiratoires, des dommages aux plantes et une dégradation de la visibilité. Dans de nombreuses villes du monde, la combinaison d'un intense rayonnement solaire et d'une forte circulation automobile font de la pollution photochimique un problème sérieux.

Dans les chapitres précédents, nous avons mis en place des méthodes permettant de décrire la dynamique et la thermique des écoulements atmosphériques. Elles visent à une bonne estimation des vents et de la température dans les villes. C'est un préalable indispensable à l'étude de la dispersion des polluants car le champ de vitesse détermine le transport des polluants dans la ville. Mais les concentrations en polluants sont aussi le fruit d'autres phénomènes à savoir une émission par les industries et les véhicules à moteur, ainsi qu'une création ou une destruction des espèces par réactions chimiques.

---

<sup>5</sup>  $\text{NO}_x$  désigne l'ensemble dioxyde d'azote  $\text{NO}_2$  et monoxyde d'azote  $\text{NO}$

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

Nous aborderons le thème des émissions de polluants d'un point de vue bibliographique et méthodologique dans la section 4.1. Nous proposerons et validerons ensuite des méthodes de résolution d'un système d'équations de transport couplées par des réactions chimiques et présenterons enfin dans la section 4.3 une cinétique simplifiée de la chimie de l'ozone.

### 4.1 Émission des polluants

#### 4.1.1 Généralités

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 [EIIP, 1997] :

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

Nous nous intéressons dans le cadre de ce travail uniquement aux émissions mobiles dues au trafic automobile. Elles dépendent des paramètres suivants :

- ❑ le nombre de véhicules (volume de trafic).

## 4.1 Émission des polluants

- les vitesses et accélérations des véhicules. D'une façon générale, on observe pour les principaux polluants une loi de variation de l'émission en fonction de la vitesse représentée schématiquement par la figure suivante : jusqu'à une vitesse d'environ 60 km/h, les véhicules polluent de moins en moins. On peut noter ainsi l'importance pour les villes de se doter d'un système de gestion de trafic urbain efficace, qui vise à une meilleure fluidité de celui-ci et ainsi à une pollution moindre. Enfin, à vitesse égale, un véhicule en pleine accélération émet plus de polluants qu'un véhicule en décélération, et un véhicule en pleine charge émet moins qu'un véhicule vide.
- la longueur des trajets. Ce paramètre influence la température du moteur (un moteur froid est plus polluant).
- la composition du parc automobile (type de véhicule, caractéristique des moteurs, niveau d'entretien...).

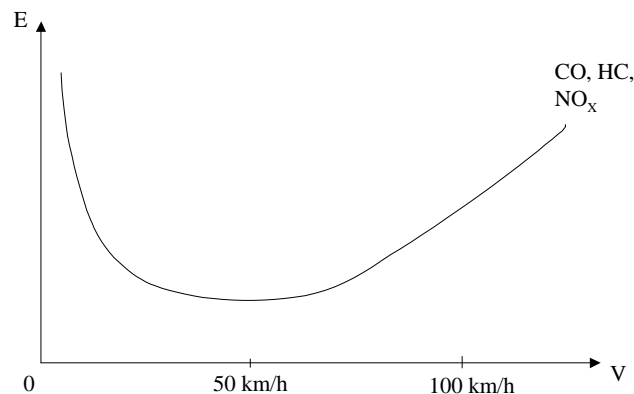


Figure 4.1 : relation vitesse / émission pour les véhicules et pour les principaux polluants

### 4.1.2 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, vitesse, accélération) et un type statique représentatifs de la composition du parc automobile considéré. Le lien entre ces deux paramètres est le

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

facteur d'émission unitaire des véhicules donnant l'émission en fonction de la vitesse et de l'accélération (ou de la vitesse seulement) pour chaque type de véhicule.

**Composition du parc automobile et facteur d'émission unitaire.** Il existe plusieurs critères de classification d'un parc automobile :

- ❑ le type de véhicule : voiture de particulier, bus, taxi, véhicule utilitaire léger ou lourd.
- ❑ la marque du véhicule : Renault, Peugeot, Fiat, Ford...
- ❑ classification en fonction du type de moteur : essence ou diesel.
- ❑ la cylindrée du moteur.
- ❑ l'âge du véhicule.

Pour ces différentes catégories, il est nécessaire de connaître les facteurs d'émission unitaire. Ils s'expriment pour un véhicule en mouvement en gramme par kilomètre parcouru ou bien pour un véhicule à l'arrêt en gramme par seconde.

Consulter des bases de données nationales ou internationales est la solution la plus immédiate et la moins coûteuse. En Europe, le programme CORINAIR a regroupé un grand nombre de centres de recherche sur l'étude des émissions dues au trafic automobile et a conduit au logiciel COPERT [Ahlvik & al., 1997] ainsi qu'à la création d'une base de données de facteurs d'émission unitaire calquée sur la réglementation européenne. Le programme COST 319 a pris la suite des études en développant une série de méthodes pour le calcul des émissions pour tout type de transport et quelque soit l'échelle considérée [Joumard, 1999]. L'équivalent américain est le programme MOBILE. L'inconvénient d'une telle approche est que la base de données en question peut ne pas être représentative de la réalité de la composition du parc automobile étudié. C'est notamment le cas dans les pays en voie de développement ou bien lorsque l'on passe d'un continent à l'autre, puisqu'une marque présente de manière importante dans un pays peut ne pas l'être ailleurs. Il se peut alors qu'il soit nécessaire d'effectuer des mesures d'émission sur un échantillon de véhicules représentatif du parc automobile étudié. Cette approche est bien entendu beaucoup plus coûteuse à tout point de vue. Mais si les

#### 4.1 Émission des polluants

moyens tant humains que financiers sont présents, elle peut être préférable puisqu'elle prend en compte les spécificités locales de la zone étudiée.

Les deux approches ont été réalisées lors d'une étude de la pollution à Mexico [Bugajny, 1995] et ont donné des résultats très différents. Le modèle utilisé, MOBILE 4a, a montré de nets désaccords avec deux séries de mesures effectuées par des méthodes différentes sur un échantillon représentatif du parc automobile de Mexico.

**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 :

$$E_{V,T} = L_{V,T} \times Fem_p(Vt, A) \quad (4.1)$$

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 microscopi-



## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

que 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 une 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  $Fem_p$  utilisé doit donc être seulement fonction de la vitesse. L'émission d'un polluant  $P$  est alors donnée par la formule :

$$E_{X,T} = L_X \times Q_{X,T} \times Fem_p(Vt) \quad (4.2)$$

**Autres approches.** Si l'on ne dispose pas de simulateur de trafic, la seule solution consiste à compter les véhicules sur la zone considérée pour différentes conditions de trafic. C'est ce qui a été réalisé à Mexico [Bugajny, 1995] où les différentes artères de la ville ont été classées en trois catégories : les voies rapides, principales et secondaires. Sur un échantillon représentatif de ces artères, des comptages ont été effectués et, en associant une vitesse moyenne sur ces trois types de voies, une cartographie des émissions a été réalisée. Enfin, il est aussi possible de mettre au point un modèle par couplage avec un système de gestion de

## 4.2 Dispersion des polluants

trafic du type de GERTRUDE<sup>6</sup> [Francerie, 1992] qui fournit, grâce à des capteurs électromagnétiques placés sous la chaussée, les taux d'occupation des voies ainsi que la vitesse moyenne des véhicules sur les principales voies d'une ville. Si le nombre de capteurs n'est pas suffisant, un complément peut être apporté par les mesures.

## 4.2 Dispersion des polluants

Comme nous l'avons évoqué en introduction, 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. La qualité de notre modèle sera fortement liée à la qualité de ces deux modèles, d'importance égale.

### 4.2.1 Description des équations générales pour la chimie

**Les équations de transport.** La modélisation de la dispersion dans l'atmosphère d'une espèce chimique  $i$  ( $1 < i < ne$ ) se fait grâce à une équation de conservation de la concentration  $c_i$  :

$$\underbrace{\frac{\partial c_i}{\partial t}}_{\text{variation locale}} + \underbrace{\mathbf{u} \cdot \nabla c_i}_{\text{advection}} = \underbrace{\nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_i)}_{\text{diffusion moléculaire}} + \underbrace{E_i}_{\text{émission}} + \underbrace{R_i}_{\text{production par réaction chimique}} - \underbrace{D_i}_{\text{dépôt}} \quad (4.3)$$

---

<sup>6</sup> Gestion Electronique de Régulation en Temps Réel pour l'Urbanisme les Déplacements et l'Environnement.

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

$D$  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<sup>7</sup> :

$$D = \frac{\nu}{Sc} \quad (4.4)$$

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

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

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

**Formulation statistique.** Comme nous sommes en présence de problèmes turbulents, nous appliquons le même traitement que pour les autres équations du problème, à savoir une décomposition de la concentration en la somme d'une moyenne et d'une fluctuation (équation 2.9). En moyennant l'équation 4.3, on obtient l'équation en concentration suivante :

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \nabla) \bar{c}_i = \nabla \cdot (D \nabla \bar{c}_i) + E_i + \bar{R}_i + R_i' - D_i \quad (4.5)$$

**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 [Kumar & Russel, 1996 ; Gao & Wesely, 1994]. On peut noter tout de même que cette hypothèse

---

<sup>7</sup> rapport des forces de viscosité aux forces de diffusion en général pris égal à 0.46.

## 4.2 Dispersion des polluants

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 :

$$-\overline{\mathbf{u}'c_i'} = \mathbf{K}\nabla\bar{c}_i \quad (4.6)$$

où  $\mathbf{K}$  est la matrice diagonale des coefficients de diffusion turbulente (diffusion anisotrope mais identique d'un polluant à l'autre). Les composantes de  $\mathbf{K}$  sont fonction de la stabilité de l'atmosphère. Seinfeld en donne les expressions pour la couche limite atmosphérique dans son ouvrage [Seinfeld, 1986].

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 le cas contraire, plutôt que d'opter pour une modélisation du second ordre, trop coûteuse en temps de calcul, il est préférable comme le propose Hamba de rendre dépendants des réactions chimiques les flux de diffusions turbulente. [Hamba, 1993]. Le modèle qu'il propose pour la couche limite planétaire, pour laquelle les dérivées par rapport aux composantes horizontales sont négligées, tient non seulement compte des réactions chimiques dans l'expression de la diffusion turbulente mais introduit également des termes croisés. Ce modèle doit être étendu au cas pleinement tridimensionnel.

Dans une première approximation nous pouvons écrire l'équation de diffusion pour une espèce  $c_i$  par :

$$\frac{\partial\bar{c}_i}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}}\nabla)\bar{c}_i = \nabla\cdot((D\mathbf{I} + \mathbf{K})\nabla\bar{c}_i) - \nabla\cdot\overline{\mathbf{u}'c_i'} + E_i + \bar{R}_i - D_i \quad (4.7)$$

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

**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 [Seinfeld, 1986] : 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 et renvoyons aux références suivantes : [Maalej, 1997 ; Hicks et al., 1987 ; Baer et al., 1992 ; Gao & Wesely, 1995 ; Jacquemin & Noilhan, 1990]

**Les unités.** Quatre unités sont fréquemment rencontrées pour exprimer la concentration d'une espèce chimique : les  $\mu\text{g.m}^{-3}$ , les  $\text{mole.l}^{-1}$  (*moles par litre*), les  $\text{molécule.cm}^{-3}$  (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 :

$$c_i(\text{ppm}) = \frac{c_i}{c} 10^6 \quad (4.8)$$

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  $\text{molécule.m}^{-3}$  ou en  $\text{mole.l}^{-1}$ . Le passage des  $\text{mole.l}^{-1}$  au  $\text{molécule.cm}^{-3}$  se fait par l'intermédiaire du nombre d'Avogadro  $N$  ( $N=6,02 \cdot 10^{23}$ ).

$$1 \text{ mole.l}^{-1} = 6.02 \cdot 10^{20} \text{ molécule.cm}^{-3} \quad (4.9)$$

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

$$c_i(\text{molécule.cm}^{-3}) = \frac{10^{-12} c_i(\mu\text{g.m}^{-3})}{M_i} \quad (4.10)$$

où  $M_i$  est la masse moléculaire de l'espèce  $i$ .

## 4.2 Dispersion des polluants

Le passage des  $\mu\text{g.m}^{-3}$  aux  $\text{mole.l}^{-1}$  se fait par la relation :

$$c_i(\text{mole.l}^{-1}) = \frac{10^{-9} c_i(\mu\text{g.m}^{-3})}{m_i} \quad (4.11)$$

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 (4.8), on obtient la relation de passage des  $\mu\text{g.m}^{-3}$  aux  $\text{ppm}$ .

$$c_i(\text{ppm}) = \frac{8,314T}{pm_i} c_i(\mu\text{g.m}^{-3}) \quad (4.12)$$

On rencontre également les notations pphm (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  $\text{ppm}$  par le nombre d'atome de carbone de l'espèce chimique, on obtient l'unité  $\text{ppmC}$ .

### 4.2.2 Cinétique chimique

Ce chapitre expose quelques principes de cinétique chimique qui sont nécessaires à la modélisation des aspects chimiques de notre étude. Il s'inspire des ouvrages de Ficini [Ficini et al., 1986] et de Destriau [Destriau et al., 1981].

**Réaction chimique élémentaire.** Considérons la réaction chimique élémentaire irréversible suivante :



## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

où  $A_1$  et  $A_2$  sont les réactifs,  $A_3$  et  $A_4$  les produits de la réaction et  $\nu_1$ ,  $\nu_2$ ,  $\nu_3$  et  $\nu_4$  les coefficients stœchiométriques<sup>8</sup>.

Dans l'équation de concentration 4.3, 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 :

$$R_i = \frac{dc_i}{dt} = s \nu_i k c_{A_1}^{\nu_1} c_{A_2}^{\nu_2} \quad (4.14)$$

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  $k$  la forme :

$$k = F e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (4.15)$$

où  $F$  est une constante appelée facteur de fréquence,  $T$  la température absolue,  $R$  la constante des gaz parfaits et  $E_a$  l'énergie d'activation.  $F$  et  $E_a$  sont les résultats d'expériences menées en laboratoire.

---

<sup>8</sup>  $\nu_1 + \nu_2 \leq 3$ , par définition d'une réaction chimique élémentaire [Finlayson-Pitts & Pitts, 1986]

## 4.2 Dispersion des polluants

**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 :

$$\sum_{i=1}^{ne} \nu_{ir} A_i = \sum_{i=1}^{ne} \nu'_{ir} A_i \quad (4.16)$$

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

$$R_{ir} = (\nu'_{ir} - \nu_{ir}) k_r \prod_{j=1}^{ne} c_j^{\nu_{jr}} \quad (4.17)$$

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

$$R_i = \sum_{r=1}^{nr} R_{ir} \quad (4.18)$$

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 :

$$R_i = \sum_{r=1}^{nr} P_{ir} - c_i \sum_{r=1}^{nr} L_{ir} \quad (4.19)$$

avec :

$$P_{ir} = \begin{cases} (\nu'_{ir} - \nu_{ir}) k_r \prod_{j=1}^{ne} c_j^{\nu_{jr}} & \text{si l'espèce } i \text{ est produite par la réaction } r \\ 0 & \text{si l'espèce } i \text{ est détruite par la réaction } r \end{cases} \quad (4.20)$$



## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

$$L_{ir} = \begin{cases} (v_{ir} - v'_{ir})k_r \prod_{j=1, j \neq i}^{ne} c_j^{v_j r} & \text{si l'espèce } i \text{ est détruite par la réaction } r \\ 0 & \text{si l'espèce } i \text{ est produite par la réaction } r \end{cases} \quad (4.21)$$

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



où  $h\nu$  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 ( $A+h\nu \rightarrow X+Y$ ), le taux de dissociation (production des espèces  $X$  et  $Y$  et destruction de  $A$ )  $R_A$  vaut :

$$R_A = -J_a c_A$$

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

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

## 4.2 Dispersion des polluants

où  $a$  et  $b$  sont des constantes déterminées expérimentalement et  $Z$  l'angle solaire zénithal (cf. section 2.3.1).

### 4.2.3 Traitement numérique des équations de transport

**Le système d'équations.** D'un point de vue numérique, nous avons réalisé un module traitant automatiquement un nombre quelconque de réactions chimiques. Il consiste à coupler autant d'équations de transport 4.3 qu'il y a d'espèces. En écriture vectorielle, si l'on pose  $\bar{\mathbf{C}}$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{D}$  les vecteurs de composantes respectives  $\bar{c}_i$ ,  $E_i$ ,  $R_i$  et  $D_i$ , on obtient le système d'équations aux dérivées partielles suivant :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \nabla \bar{\mathbf{C}} = \nabla \cdot ((D\mathbf{I} + \mathbf{K}) \nabla \bar{\mathbf{C}}) + \mathbf{E} + \mathbf{R} - \mathbf{D} \quad (4.22)$$

**Splitting des équations.** Les méthodes numériques présentées ici sont propres aux équations de transport couplées par un terme non linéaire de production chimique. Nous utilisons une technique répandue dans la modélisation des problèmes de transport de polluants associés à une cinétique chimique, à savoir une technique de splitting [Seinfeld, 1987 ; Maa-lej, 1997]. Elle consiste à découper les équations selon la contribution physique de chacun de ses termes : termes d'advection, de diffusion et production/destruction chimique. On est amené à résoudre alors successivement trois systèmes d'équations (éq. 4.23 à 4.25) auxquels sont associées des méthodes numériques bien adaptées à leur nature.

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \nabla \bar{\mathbf{C}} = 0 \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{C}}}{\partial t} = \nabla \cdot ((D\mathbf{I} + \mathbf{K}) \nabla \bar{\mathbf{C}}) \quad (4.24)$$

$$\frac{d\bar{\mathbf{C}}}{dt} = \mathbf{E} + \mathbf{R} - \mathbf{D} \quad (4.25)$$

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

Le choix de la méthode de résolution du premier système (éq. 4.23) est, comme nous le verrons, extrêmement important. Certaines méthodes non seulement transportent mal les champs de concentrations mais dénaturent celui-ci par une diffusion artificielle tendant à lisser les gradients de concentrations.

Le second système (éq. 4.24) résout la partie diffusion de l'équation. C'est l'opérateur d'un point de vue numérique le plus simple à traiter. Pour des raisons de stabilité, les schémas explicites ne sont pas conseillés car ils conduisent à des pas de temps trop petits. Ce système est donc résolu par une méthode implicite, la matrice préconditionnée et résolue par le gradient conjugué, de la même façon que les équations de Navier-Stokes ou de la turbulence.

Le troisième (éq. 4.23) est un système d'équations différentielles raides non linéaires qui est indépendant de l'espace et donc à résoudre en chaque point du maillage.

### 4.2.3.1 Résolution des systèmes différentiels raides

On considère le système différentiel suivant dont la solution au temps initial est connue :

$$\frac{d\bar{C}}{dt} = \mathbf{P} + \bar{C}\mathbf{L} \quad (4.26)$$

où  $\bar{C}$  est le vecteur concentration,  $\mathbf{P}$  la matrice de production et  $\mathbf{L}$  celle de destruction, tous trois définis dans la section 4.2.2.

La durée de vie des différentes espèces chimiques présentes dans l'atmosphère est d'une très grande variabilité [Fassi Fihri, 1996]. Comme nous l'avons évoqué dans la présentation de notre système réactionnel, on rencontre des espèces chimiques qui réagissent rapidement après avoir été créées. C'est le cas des radicaux hydroxyyles dont le temps de vie est de l'ordre de 1s. D'un autre côté, le monoxyde de carbone, par exemple, est une espèce dont la durée de vie dans l'atmosphère est de l'ordre de  $10^7$ s. Cette grande variabilité des constantes de temps des espèces chimiques rend le système différentiel raide. L'intervalle d'intégration est largement supérieur à la plus petite constante de temps ; sa résolution numérique doit alors être suffisamment solide pour intégrer ces différences. Nous ne développerons que très peu la

## 4.2 Dispersion des polluants

théorie mathématique des systèmes différentiels et renvoyons le lecteur désireux de plus d'informations aux références suivantes : [Hairer & Wanner, 1991 ; Gear, 1971].

Comme pour les équations précédentes, la solution est approchée par des techniques de discrétisation. Le choix des méthodes s'est fait suite aux travaux du Centre pour la Recherche Environnementale Globale et Régionale de l'Université de l'Iowa dont on peut trouver les publications [Sandu et al., 1996 ; Sandu et al., 1997] et codes sur Internet [Ftp, 1996], ainsi que ceux de Fassi Fihri [Fassi Fihri, 1996]. Les méthodes se scindent en trois catégories : les solveurs explicites, implicites et les solveurs hybrides (ou semi-implicites).

L'utilisation de solveurs explicites est exclue puisqu'ils impliquent des pas de temps trop petits pour ne pas devenir instables. L'avantage des solveurs implicites réside dans leur grande solidité ainsi qu'une meilleure précision. Mais il ne faut pas perdre de vue qu'une trop grande précision dans la résolution des systèmes est inutile en raison des approximations et incertitudes inhérentes au modèle dynamique - et notamment à la précision des conditions aux limites - et aux modèles d'émission. Des efforts ont été faits afin de diminuer les temps de calcul par l'utilisation des structures creuses des matrices, mais ces solveurs restent assez lourds à utiliser.

Nous avons opté pour les solveurs hybrides qui ont l'avantage d'une certaine facilité de programmation, un besoin en mémoire moindre, tout en assurant une précision des résultats convenable. Leur intérêt principal est qu'ils détectent les équations raides et les intègrent par des méthodes implicites ou asymptotiques, les autres équations étant traitées par des méthodes explicites plus rapides et moins stables. Des techniques de groupement d'espèce (lumping) améliorent leurs performances mais font aussi perdre aux solveurs leurs généralités, les rendant dépendants de la cinétique chimique étudiée [Verwer et al., 1995]. Ces techniques consistent à regrouper certaines espèces chimiques pour réduire la raideur des systèmes ou bien forcer la conservation (par exemple, NO et NO<sub>2</sub> peuvent être regroupés en une seule espèce NO<sub>x</sub>).

Dans les méthodes hybrides, un traitement différent est appliqué aux espèces selon leur durée de vie, donnée par l'inverse du taux de destruction. Une des méthodes les plus répandue est la méthode QSSA qui, pour les espèces à longue durée de vie, utilise la formule d'Euler explicite, pour les espèces à courte durée de vie le principe de l'équilibre chimique (taux de

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

production = taux de destruction), et pour les espèces intermédiaires l'intégrale analytique de l'équation 4.26 (en supposant que  $P$  et  $L$  sont constants sur le pas de temps). La méthode de Chong scinde les espèces en deux catégories – lentes et rapides – pour leur appliquer respectivement la formule d'Euler explicite et d'Euler implicite. Un nombre assez important d'autres méthodes ont été testées – Chemeq, Et, LinSSA, Twostep... – sur différentes cinétiques chimiques et différents scénarii de pollution (atmosphères polluées ou non). Le solveur le plus performant est le solveur Twostep que nous avons choisi d'implanter dans le code de calcul.

**Le solveur Twostep.** Il est basé sur une formule à différentiation rétrograde BDF (backward differentiation formula) d'ordre 2, à pas de temps variable [Verwer, 1994] :

$$C^{n+1} = Y^n + \gamma h R(t^{n+1}, C^{n+1}) \quad (4.27)$$

avec

$$h = t^{n+1} - t^n$$

$$\gamma = (c+1)/(c+2)$$

$$c = (t^n - t^{n-1}) / (t^{n+1} - t^n)$$

$$Y^n = [(c+1)^2 C^n - C^{n-1}] / (c^2 + 2c)$$

En scindant en deux le terme de production/destruction on a

$$C^{n+1} = Y^n + \gamma h [P(t^{n+1}, C^{n+1}) - L(t^{n+1}, C^{n+1}) C^{n+1}] \quad (4.28)$$

En factorisant  $C^{n+1}$  on peut transformer l'équation comme suit :

$$C^{n+1} = [I + \gamma h L(t^{n+1}, C^{n+1})]^{-1} [Y^n + \gamma h P(t^{n+1}, C^{n+1})] = F(C^{n+1}) \quad (4.29)$$

où  $I$  est la matrice identité et  $L$  est diagonale.

## 4.2 Dispersion des polluants

Cette méthode étant à deux pas d'ordre 2, lors de la première itération en temps,  $C^1$  n'est pas connu. Si l'on remplace  $Y^n$  par  $C^n$  on retrouve alors la formule d'Euler implicite :

$$C^{n+1} = C^n + hR(t^{n+1}, C^{n+1}) \quad (4.30)$$

La méthode Gauss-Seidel est maintenant utilisée pour résoudre le système  $C^{n+1} = F(C^{n+1})$ . C'est une méthode itérative qui consiste, pour la  $i$ -ème itération sur un nombre total de  $G$ , au fur et à mesure du calcul des composantes  $k$  de  $C^{n+i/G}$ , à impliciter les  $(k-1)$  composantes précédemment calculées. On peut écrire :

$$C_k^{n+i/G} = F_k(C_1^{n+i/G}, \dots, C_{k-1}^{n+i/G}, C_k^{n+(i-1)/G}, \dots, C_{ne}^{n+(i-1)/G}), \quad \text{pour } k=1, \dots, ne \quad (4.31)$$

Si l'on nomme  $C'$  le vecteur  $(C_1^{n+i/G}, \dots, C_{k-1}^{n+i/G}, C_k^{n+(i-1)/G}, \dots, C_{ne}^{n+(i-1)/G})^T$ , connu à l'itération  $i$  pour l'espèce  $k$ ,  $C_k^i$  est donné, en raison du caractère diagonal de  $L$ , par une simple division :

$$C_k^i = [Y^n + \gamma h P_k(t^{n+1}, C')] / [1 + \gamma h L_k(t^{n+1}, C')] \quad (4.32)$$

Les auteurs recommandent un nombre d'itérations de Gauss-Seidel  $G$  de 2.

Avant la première itération de Gauss-Seidel, une première estimation de  $C^{n+1}$ , qui correspond en quelque sorte à  $i=0$ , est faite. Nous la noterons  $C^{n'}$ , et elle est donnée par la relation suivante :

$$C^{n'} = C^n + (C^n - C^{n-1})/c \quad (4.33)$$

La résolution du système ne se fait pas directement sur le pas de temps de la dynamique, trop grand pour intégrer la chimie, mais sur des pas de temps internes variables en fonction d'une estimation de l'erreur locale. L'erreur (à l'ordre 2) est donnée par :

$$E^{n+1} = 2(cC^{n+(i+1)/G} - (1+c)C^{n+i/G} + C^{n+(i-1)/G}) \quad (4.34)$$

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

Si l'on se fixe une erreur  $W_k^{n+i/G}$  à ne pas dépasser qui est la somme d'une erreur absolue  $atol$  (en molécule/cm<sup>3</sup>) et d'une erreur relative  $rtol.C_k^{n+i/G} - rtol$  de l'ordre de  $10^{-10}$  - le critère de reconduite du pas de temps est le suivant :

$$\|E^{n+1}\| = \max_k(|E^{n+1}|/W_k^n) \leq 1 \quad (4.35)$$

Dans le cas contraire, un nouveau pas de temps est calculé par la relation :

$$h_{new} = \max(0,5; \min(2; 0,8\|E^{n+1}\|^{1/2}))h_{old} \quad (4.36)$$

L'utilisation d'un pas de temps variable peut conduire à de très petites valeurs [Sandu et al., 1996] qu'il faut minorer par un pas de temps de l'ordre de la seconde, temps caractéristique représentatif des réactions photochimiques dans leur globalité. Le pas de temps maximal est égal au pas de la dynamique. Enfin, le pas de temps initial est donné par :

$$h_{ini} = \min_k(ytol/F_k(C^n)) \quad (4.37)$$

### 4.2.3.2 Choix du schéma d'advection

En intégrant le terme convectif de l'équation de transport sur un volume de contrôle, il faut déterminer, à l'aide d'un schéma d'advection, la valeur de la concentration au niveau des interfaces où elle n'est pas définie. Dans la direction X par exemple (cf. figure 4.2), en intégrant l'équation sur le volume de contrôle du point P, il est nécessaire de connaître la valeur de la concentration pour les points  $o$  et  $e$ . Ces valeurs sont obtenues par interpolation puisque ce ne sont pas des points du maillage principal. La vitesse est quant à elle calculée en ces points puisque nous utilisons un maillage décalé en vitesse/pression. La nature du schéma influence fortement le résultat final. Les plus classiques sont les schémas centré, upwind, hybride, quick ou Lax-Wendroff [Hirsch, 1990] :

- Le schéma centré adopte comme concentration à l'interface du volume de contrôle une moyenne arithmétique sur les valeurs amont et aval (points  $P'$  et  $P$  pour la valeur en  $o$ ). C'est le schéma le plus intuitif.

## 4.2 Dispersion des polluants

- Avec le schéma upwind, on considère que la concentration à l'interface est influencée de manière prépondérante par la concentration amont, qui est alors adoptée comme concentration à l'interface (point  $P'$  pour la valeur en  $o$ ).
- Pour le schéma hybride, selon la valeur du nombre de Peclet de maille - qui estime localement le rapport des effets convectifs aux effets diffusifs - le schéma centré ( $Pe < 2$ ) ou le schéma upwind ( $Pe > 2$ ) est utilisé.
- Les schémas quick ou de Lax-Wendroff procèdent par une interpolation entre les deux concentrations amont et la concentration aval.

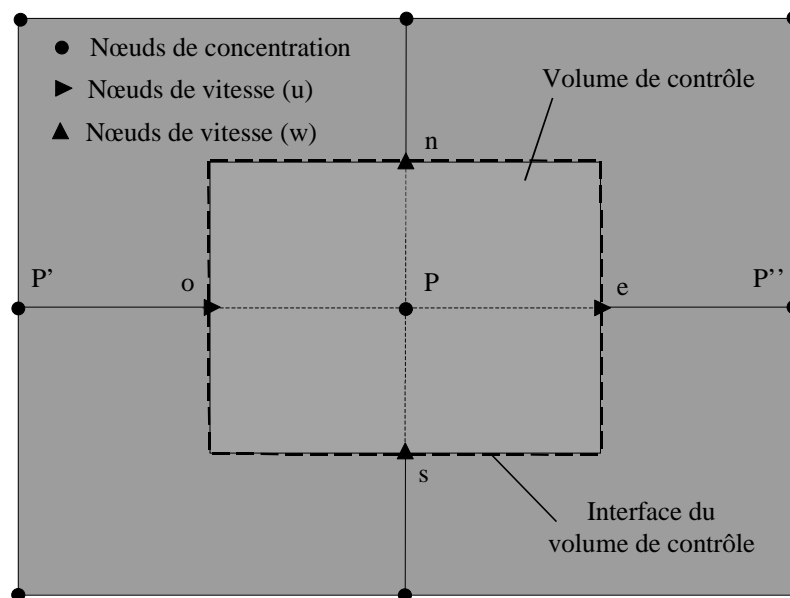


Figure 4.2 : maillage décalé en vitesse-pression

Chacun de ces schémas est une approximation et dénature l'équation de concentration. On peut montrer, par des développements de Taylor [Thebault, 1995], que cela équivaut à résoudre une équation de concentration à laquelle est ajoutée un terme de diffusion, ce qui en fait des schémas plus ou moins diffusifs selon leur ordre de développement. Le schéma upwind d'ordre un diffuse fortement à l'approche des forts gradients, alors que le schéma quick ou de Lax-Wendroff, d'ordre deux, est moins sensible à ce problème mais oscille assez fortement. Le schéma centré, d'ordre deux, est rapidement instable et inadapté à nos problèmes.



## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

Pour éviter ce dilemme entre la diffusion et l'oscillation, il existe une série de schémas appelé TVD (Total Variation Diminishing ou variation totale décroissante) [LeVeque, 1990 ; Yee, 1987 ; Hirsch, 1990] qui sont des schémas d'ordre deux sur des zones à faible gradients pour éviter la diffusion numérique, et dont les flux sont limités pour éviter les oscillations inhérentes aux schémas d'ordres élevés au niveau des forts gradients. Nous utilisons ici le schéma TVD Superbee programmé au laboratoire par S. Vincent [Vincent, 1999].

**Comparaison des schémas d'advection.** Pour mettre en exergue ces phénomènes et comparer les différents schémas, nous avons procédé à la simulation suivante : dans un domaine carré de  $1\text{ km}$  de côté (cf. figure 4.5), est initialisé un champ de concentration constant d'une valeur de  $2,5 \cdot 10^9$  sauf pour un cercle de rayon  $250\text{m}$  où la valeur est de  $1 \cdot 10^{11}$ . Le maillage à pas constant utilisé est de  $32^2$ . Nous faisons advecter ce champ pendant  $24\text{h}$  de façon à ce qu'à l'issue de la simulation le cercle ait retrouvé sa position initiale. Si le schéma d'advection avait été parfait, aucune modification du cercle et de la valeur de la concentration dans le domaine ne serait observée. La figure 4.3 illustre ces phénomènes pour les schémas centré, hybride, quick et TVD.

Nous remarquons que le schéma TVD conserve la forme initiale contrairement aux autres schémas, mais également les valeurs de concentration puisque la valeur minimale est conservée exactement et la valeur maximale à  $97\%$ . Pour un maillage de  $64^2$ , la valeur maximale est conservée à  $100\%$ .

## 4.2 Dispersion des polluants

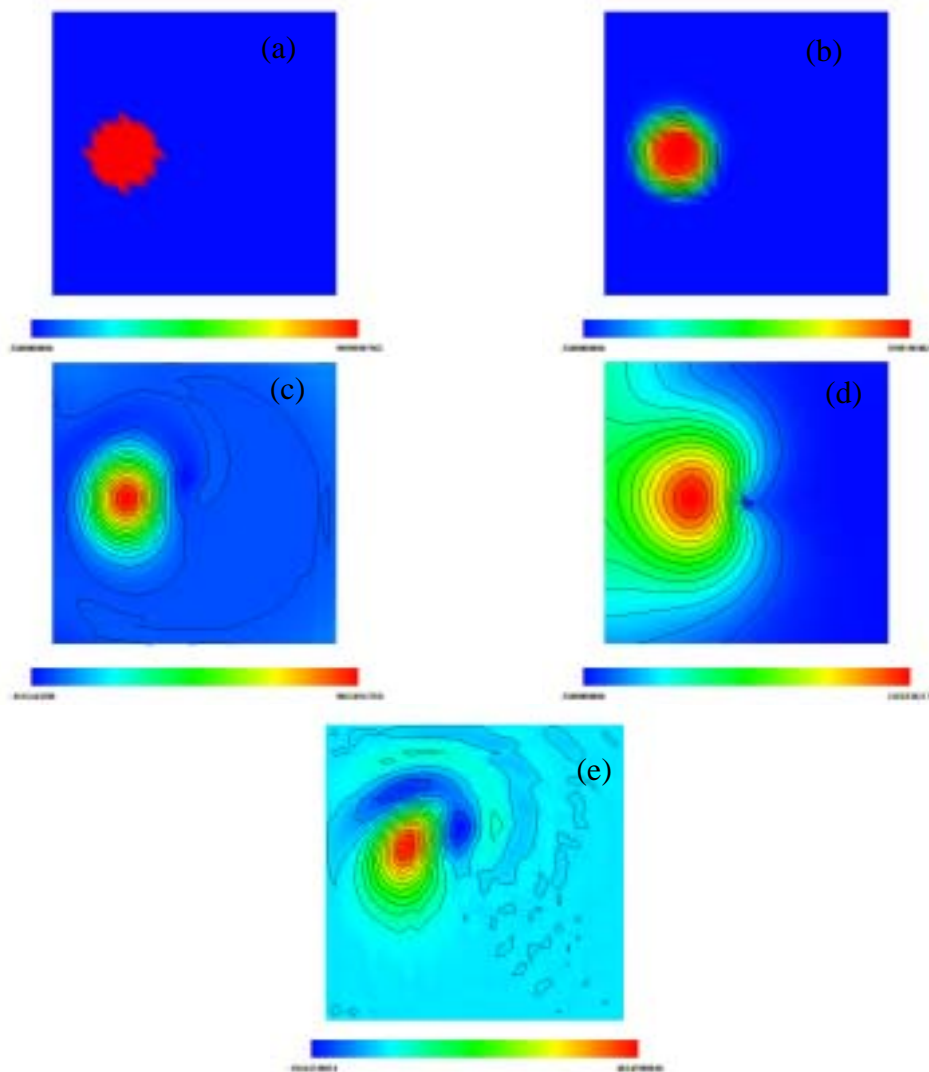


Figure 4.3 : illustration de la diffusion numérique sur l'advection d'un cercle ; (a) condition initiale, (b) schéma TVD, (c) schéma quick, (d) schéma hybride, (e) schéma centré.

Nous avons réalisé un second test, plus exigeant. Les conditions sont identiques à la simulation précédente à la différence que le cercle est remplacé par un cône de valeurs comprises entre  $2,5 \cdot 10^9$  et  $1 \cdot 10^{11}$  (au centre).

Nous pouvons observer que les résultats (cf. figure 4.4) sur la conservation de la forme initiale sont proches de ceux de la simulation précédente. Par contre, la conservation de la valeur maximale est moins bien vérifiée avec le schéma TVD que dans le cas du cercle. Elle reste néanmoins la meilleure de toutes. La position du maximum n'est pas non plus conservée. Il existe un décalage d'une maille pour les schémas TVD et quick, de deux ou trois mailles pour les autres. On peut noter néanmoins que la différence des concentrations entre les

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

positions théorique et réelle du maximum est faible (de 2% pour le schéma TVD). Le cône s'est en fait aplati du fait de la diffusion numérique sur trois mailles.

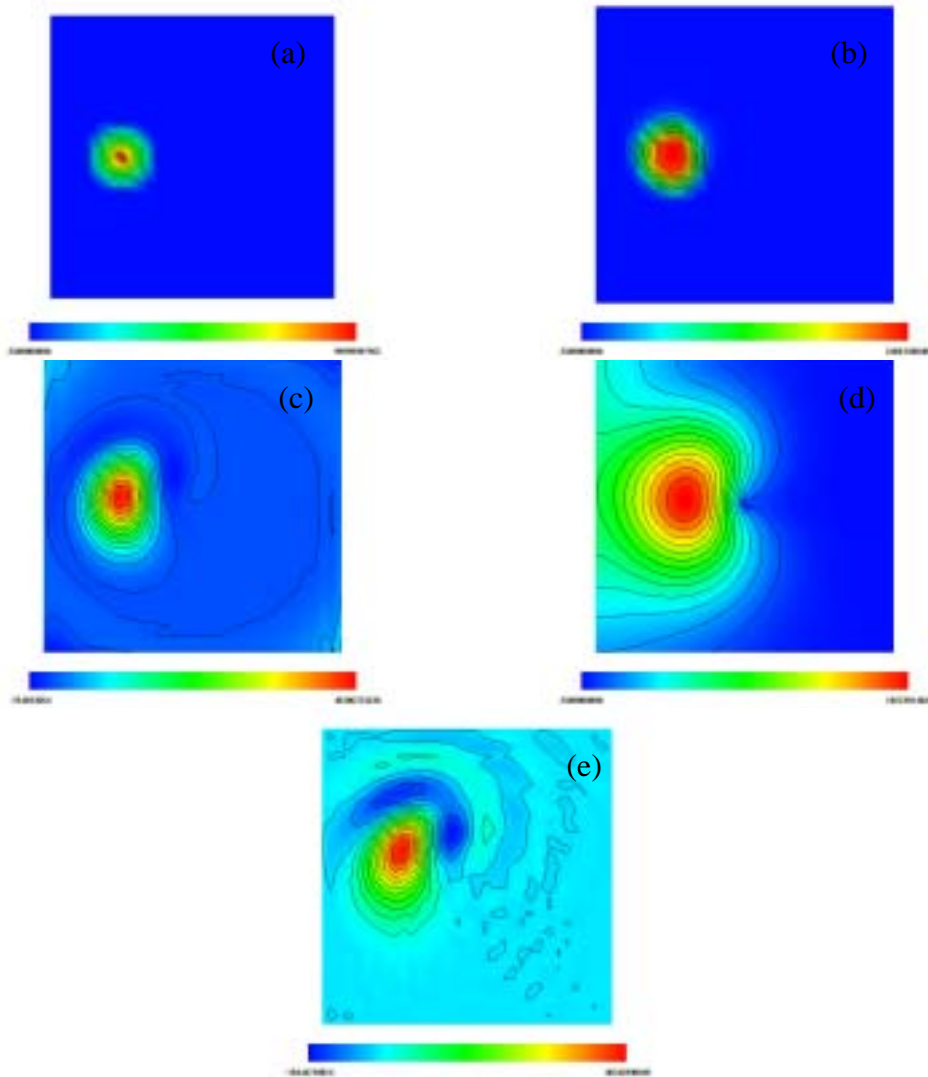


Figure 4.4 : illustration de la diffusion numérique sur l'advection d'un cône ; (a) condition initiale, (b) schéma TVD, (c) schéma quick, (d) schéma hybride, (e) schéma centré.

**Conclusion.** Nous pouvons conclure que pour l'équation d'advection, le schéma le plus adapté est le schéma TVD. Il nécessite tout de même, comme toutes les méthodes de discrétisation, un nombre de mailles suffisant pour représenter fidèlement les phénomènes.

## 4.2 Dispersion des polluants

### 4.2.4 Etude du schéma TVD couplé à la chimie atmosphérique

Le traitement numérique du terme convectif est souvent une source d'imprécision dans les modèles de qualité de l'air. Comme nous l'avons vu précédemment, une diffusion numérique qui s'ajoute à la diffusion physique est inhérente à ces modèles et dénature plus ou moins les simulations. Les équations de transport que nous traitons comportent un terme de couplage non linéaire par réaction chimique, ce qui constitue une difficulté numérique supplémentaire. En effet, une distorsion due au schéma d'advection peut être amplifiée par le jeu des réactions chimiques, amplification reprise à l'itération suivante par le schéma d'advection.

La grande variété d'espèces et de réactions chimiques que l'on trouve dans l'atmosphère implique donc de tester le schéma TVD sur un système d'équations couplées par des réactions chimiques. Pour cela, nous avons choisi de nous baser sur l'étude de Chock [Chock & Winkler, 1994] qui compare un certain nombre de schémas d'advection couplés à une cinétique chimique de onze espèces et de dix réactions (tableau 4.1). Bien que cette chimie soit relativement simple, elle reste néanmoins représentative d'une cinétique plus complexe tant sur la physique des phénomènes que sur la raideur du système. Nous utiliserons également les résultats de Hov [Hov et al., 1989] mais ces derniers sont moins bien documentés que ceux de Chock.

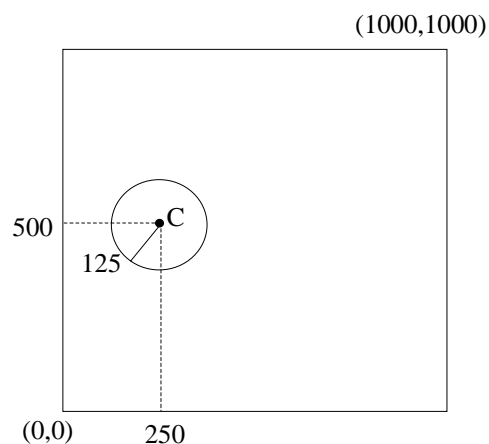


Figure 4.5 : domaine de calcul et configuration de l'initialisation

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

ESPÈCES	RÉACTIONS	VITESSE
	$HC + OH \rightarrow 4RO_2 + 2HCHO$	$k_1 = 6 \cdot 10^{-12}$
	$HCHO + hv \rightarrow 2HO_2 + CO$	$k_2 = 7,8 \cdot 10^{-5} e^{(-0,87/\cos\theta)}$
$NO_2$	$RO_2 + NO \rightarrow NO_2 + HCHO + HO_2$	$k_3 = 8 \cdot 10^{-12}$
$NO$		
$O_3$	$NO + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH$	$k_4 = 8,3 \cdot 10^{-12}$
$OH$		
$HC$	$NO_2 + hv \rightarrow NO + O_3$	$k_5 = 7 \cdot 10^{-2} e^{(-0,39/\cos\theta)}$
$HCHO$	$NO + O_3 \rightarrow NO_2 + O_2$	$k_6 = 1,6 \cdot 10^{-14}$
$O(^1D)$	$O_3 + hv \rightarrow O_2 + O(^1D)$	$k_7 = 1,9 \cdot 10^{-4} e^{(-1,9/\cos\theta)}$
$RO_2$	$O(^1D) + H_2O \rightarrow 2OH$	$k_8 = 2,3 \cdot 10^{-11}$
$HO_2$		
$CO$	$NO_2 + OH \rightarrow pertes (HNO_3)$	$k_9 = 1 \cdot 10^{-11}$
$H_2O$	$CO + OH \cdot \rightarrow HO_2 + pertes (CO_2)$	$k_{10} = 2,9 \cdot 10^{-13}$

Tableau 4.1 : cinétique chimique utilisée par Hov et Chock

**Description du cas test.** Le domaine est carré, de 1 km de côté (cf. figure 4.5). Les espèces chimiques sont plongées pendant 24 heures dans un champ rotatif tel qu'un tour soit effectué en 24 heures. Elles sont initialisées dans tout le domaine à une valeur constante. Pour quatre d'entre elles, est superposée une initialisation conique centrée en C dont la base a pour valeur celle du reste du domaine et le centre un pic dont les valeurs sont présentées dans le tableau 4.2. La concentration en H<sub>2</sub>O est constante et égale  $2 \cdot 10^{15}$  molécule.cm<sup>3</sup>. L'angle zénithal du soleil  $\theta$  est fixé à 71,5°.

## 4.2 Dispersion des polluants

ESPÈCES	DOMAINE	PIC
<i>HC</i>	$2,5.10^9$	
<i>HCHO</i>	$1,25.10^{10}$	
<i>NO</i>	$2,5.10^9$	$1.10^{11}$
<i>NO<sub>2</sub></i>	$2,5.10^9$	$5.10^{11}$
<i>OH</i>	$1.10^5$	$1.10^{11}$
<i>HO<sub>2</sub></i>	$1.10^6$	$1.10^{11}$
<i>RO<sub>2</sub></i>	$1.10^6$	
<i>O<sub>3</sub></i>	$5.10^{11}$	
<i>O(<sup>1</sup>D)</i>	$1.10^{-3}$	
<i>CO</i>	$1.10^{12}$	

Tableau 4.2 : valeurs des concentrations initiales dans le domaine et du pic de concentration (en molécule.cm<sup>-3</sup>)

Après 24 heures de simulation, le cône revient en position initiale. Il est alors possible de comparer les concentrations des différentes espèces suite à une advection et une chimie de 24 heures aux valeurs de ces espèces qui seraient restées à la position initiale et auxquelles on aurait fait subir uniquement 24 heures de chimie. Comme l'advection et la chimie sont découplées physiquement, les concentrations trouvées dans les deux cas devraient être identiques. Nous pouvons ainsi quantifier les erreurs introduites par les schémas d'advection.

**Comparaison chimie Aquilon/Chock.** Nous avons comparé dans un premier temps les solutions de notre code à celles de Chock pour la partie chimie uniquement. Cela constitue un autre cas test pour le pré-processeur intégré (cf. section 4.2.5) ainsi que pour le solveur twostep. Nos résultats, sur l'extremum de concentration situé au centre du cône et sur la valeur dans le reste du domaine, sont identiques à ceux de Chock à l'exception des valeurs de NO dans le cône et de CO dans le domaine ou des écarts respectivement de 0,35% et de 0,21% sont constatés :

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

ESPÈCES	Aquilon		Chock	
	Extremum du cône	Domaine	Extremum du cône	Domaine
HC	$4,32.10^8$	$1,36.10^8$	$4,32.10^8$	$1,36.10^8$
HCHO	$6,74.10^{11}$	$1,68.10^{10}$	$6,74.10^{11}$	$1,68.10^{10}$
NO	$9,73.10^3$	$2,47.10^5$	$9,75.10^3$	$2,47.10^5$
NO <sub>2</sub>	$2,52.10^7$	$4,66.10^7$	$2,52.10^7$	$4,66.10^7$
OH	$3,60.10^6$	$2,66.10^6$	$3,60.10^6$	$2,66.10^6$
HO <sub>2</sub>	$8,48.10^{11}$	$6,39.10^{10}$	$8,48.10^{11}$	$6,39.10^{10}$
RO <sub>2</sub>	$6,39.10^{10}$	$1,53.10^9$	$6,39.10^{10}$	$1,53.10^9$
O <sub>3</sub>	$1,15.10^{12}$	$5,75.10^{11}$	$1,15.10^{12}$	$5,75.10^{11}$
O( <sup>1</sup> D)	9,52	4,76	9,52	4,76
CO	$1,11.10^{12}$	$8,63.10^{11}$	$1,11.10^{12}$	$8,66.10^{11}$

Tableau 4.3 : comparaison des résultats d'Aquilon à ceux de Chock pour la chimie uniquement (concentrations en molécule.cm<sup>-3</sup>)

Les valeurs Aquilon du tableau précédent serviront de référence pour le calcul advection+chimie.

**Comparaison de la chimie/transport+chimie.** Une première simulation a été réalisée avec un maillage de 32<sup>2</sup> à pas constant, identique à celui de Chock.

Le premier critère de comparaison est la position de l'extremum du cône après une rotation de 360°. Tous les schémas ne conservent pas la position initiale comme par exemple le schéma de Smolarkiewicz (sur toutes les espèces) ou le SUPG (sur 2 espèces). C'est le cas également du schéma TVD pour lequel on observe pour huit espèces un décalage d'une maille. Notons tout de même que la différence est faible entre les valeurs des maxima calculées et théoriques, le pic de concentration étant en fait lissé sur trois mailles par la diffusion numérique.

Le second critère de comparaison est le rapport des concentrations au centre du cône dans les deux cas : advection+chimie et chimie seulement. Les résultats sur un maillage de 32<sup>2</sup> (cf.

## 4.2 Dispersion des polluants

tableau 4.4) ne sont pas satisfaisants notamment pour le NO et le RO<sub>2</sub> ou un facteur deux existe. Le tableau 4.5 reprend les valeurs des différents schémas testés par Chock.

Les résultats moyens du schéma TVD pour ce critère sont à relativiser. En effet, la conservation de la position et de la valeur d'un seul point du maillage est très difficile à vérifier. Nous avons réalisé une simulation sur un maillage de 64<sup>2</sup> ce qui a nettement amélioré les résultats : les rapports de concentration sont dans une gamme plus proche de un (entre 0,74 et 1,36) et l'écart type<sup>9</sup> passe de 1,71 à 0,63.

ESPECES	Chimie	Advection+chimie (32 <sup>2</sup> )	Advection+chimie (64 <sup>2</sup> )
	Extremum du cône	Extremum du cône	Extremum du cône
HC	4,32.10 <sup>8</sup>	1,17	1,05
HCHO	6,74.10 <sup>11</sup>	1,84	1,29
NO	9,73.10 <sup>3</sup>	0,48	0,74
NO <sub>2</sub>	2,52.10 <sup>7</sup>	0,85	0,94
OH	3,60.10 <sup>6</sup>	1,07	1,03
HO <sub>2</sub>	8,48.10 <sup>11</sup>	1,75	1,27
RO <sub>2</sub>	6,39.10 <sup>10</sup>	2,08	1,36
O <sub>3</sub>	1,15.10 <sup>12</sup>	1,26	1,11
O( <sup>1</sup> D)	9,52	1,26	1,11
CO	1,11.10 <sup>12</sup>	1,15	1,08
Écart-type		1,71	0,63

Tableau 4.4 : comparaison des concentrations entre chimie et transport+chimie (en molécule.cm<sup>-3</sup>)

<sup>9</sup> Nous appelons ici écart-type la racine carrée de la somme des différences au carré entre le rapport des concentrations et le rapport idéal qui est 1.



## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

ESPÈCES	FETG	Chapeau	SUPG	Smolar.	S-Lag6	ASD	TVD
HC	1,006	1,019	1,229	0,765*	0,823	1,02	1,17
HCHO	0,871	0,904	1,160	0,363*	0,474	0,928	1,84
NO	1,167	1,125	0,000*	3,074*	2,476	1,055	0,48
NO <sub>2</sub>	1,025	1,018	0,685	1,242*	1,239	0,968	0,85
OH	0,989	0,994	1,071*	0,909*	0,914	1,01	1,07
HO <sub>2</sub>	0,881	0,912	1,162	0,410*	0,506	0,935	1,75
RO <sub>2</sub>	0,831	0,864	1,085	0,304*	0,408	0,910	2,08
O <sub>3</sub>	0,946	0,962	1,125	0,727*	0,759	0,988	1,26
O( <sup>1</sup> D)	0,946	0,962	1,124	0,727*	0,759	0,988	1,26
CO	0,960	0,970	1,024	0,835*	0,862	0,976	1,15
Écart-type	0,31	0,24	1,11	2,42	1,81	0,15	1,71

Tableau 4.5 : comparaison de différents schémas d'advection (\* indique que la position de l'extremum n'est pas conservée)

D'autre part, il serait également intéressant de comparer les différents temps de calcul puisque la méthode ASD, par exemple, de nature spectrale, possède des temps assez longs. Dans son étude, Hov a comparé les temps de calcul pour quatre méthodes : on remarque dans le tableau suivant qu'il peut varier du simple au quadruple.

Schéma d'advection	Temps de calcul (s)
Différences finies	333
Smolarkiewicz	1378
Pseudospectral	1523
Chapeau	683

Tableau 4.6 : temps de calcul comparés de différents schémas d'advection

## 4.2 Dispersion des polluants

Le dernier critère de comparaison porte sur la précision globale des résultats. Pour cela, nous comparons les différents schémas sur la différence absolue normalisée (normalized absolute difference) qui représente la somme des valeurs absolues de la différence en chaque point du domaine entre la solution advection+chimie et la solution chimie seule, divisée par la somme des concentrations exactes sur un carré de 333 mètres de côté centré en (250,500). La limitation de la normalisation à une partie du domaine permet de ne pas obtenir de valeurs trop faibles. Les résultats pour le schéma TVD sont ici bien meilleurs, ce qui montre que ce schéma conserve correctement les concentrations. En calculant l'écart type de toutes les différences absolues normalisées (tableau 4.7), on a une vision plus globale du comportement des modèles.

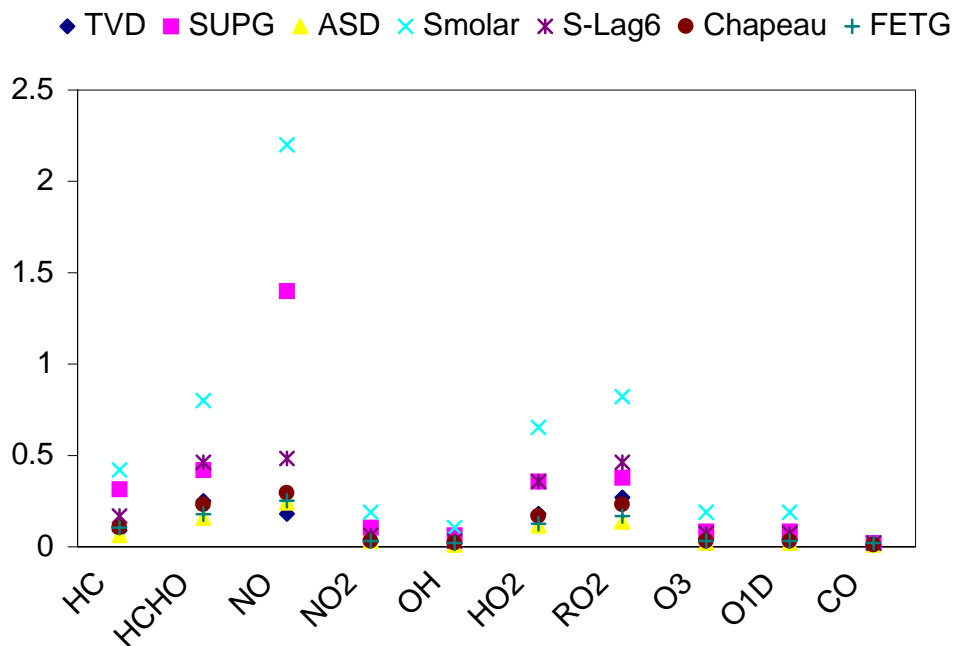


Figure 4.6 : différences absolues normalisées des concentrations pour différents schémas d'advection

Schéma	TVD	SUPG	ASD	Smolar.	S-Lag6	Chapeau	FETG
Ecart type	0,46	1,59	0,35	2,62	0,91	0,49	0,39

Tableau 4.7 : écart-type des différences absolues normalisées

### 4.2.5 Un pré-processeur de chimie intégré au solveur

Nous serons amenés dans le futur à utiliser plusieurs cinétiques chimiques, selon le type de polluant que l'on souhaite suivre en particulier, le degré de précision que l'on désire ou bien la puissance des calculateurs. Pour cela le code doit être suffisamment général pour passer de l'un à l'autre sans modifications majeures.

**Deux approches.** La première approche consiste à réaliser un programme indépendant appelé *pré-processeur*. Son rôle est, après lecture selon un format particulier de fichier de données dans lequel figure les informations sur le schéma réactionnel (type d'espèce, réactions chimiques, constantes de vitesse...), de créer des sous-routines en code Fortran propres à la cinétique à traiter (bloc de déclaration des variables, termes de production et de destruction, calcul des vitesses de réaction...). Une fois ces fichiers créés, le programme principal de résolution est recompilé puis exécuté. C'est l'approche suivie par Damian-Iordache [Damian-Iordache, 1996] de l'Université de l'Iowa (KPP preprocessor) ou bien par Suhre [Suhre, 1994] au laboratoire d'aérodynamique de Toulouse (pré-processeur M9).

La seconde approche consiste à écrire un programme principal de façon complètement *générale* grâce à l'utilisation de l'allocation dynamique de la mémoire et un indicage des tableaux par l'intermédiaire de tableaux d'entiers, dont les valeurs sont déterminées après lecture d'un fichier de données. De cette façon, aucune recompilation n'est nécessaire. Cette méthode a été adoptée par Nowak pour le logiciel LARKIN [Nowak, 1982].

**Notre approche.** Des deux méthodes, la première est la plus complexe puisqu'elle nécessite la création de procédures en code Fortran. Nous pensons que le gain de temps de calcul pour cette méthode n'est pas déterminant. C'est pour ces raisons que nous avons choisi la méthode intégrée, plus souple en terme de programmation et d'utilisation. L'analyse de la chimie à résoudre utilise le même principe de lecture de mots clés que pour la mise en données du problème. Le code de calcul est ainsi homogène quelles que soient les équations à résoudre.

Nous présentons maintenant le principe de lecture des systèmes réactionnels que nous avons mis au point. Est d'abord lu le nom des espèces chimiques auxquelles est attribué un numéro ainsi que leur temps caractéristique. La prise en compte de ce dernier élément permet

## 4.2 Dispersion des polluants

d'impliciter dans la méthode twostep les espèces chimiques selon l'ordre des temps caractéristiques croissants. Cette ordre varie ensuite au cours du calcul en fonction de l'inverse du taux de destruction de chaque espèce. Sont ensuite lues les réactions chimiques et stockés dans des tableaux les numéros des réactifs et produits de chaque réaction, ainsi que les coefficients stœchiométriques. Ces tableaux sont utilisés dans le solveur qui est écrit de manière générale. Enfin, le type de la constante de vitesse de réaction et ses coefficients sont également mémorisés (vitesse de type arrhénius, constante ou solaire fonction de la position du soleil dans le ciel).

D'un point de vue pratique, les données sont écrites dans deux fichiers différents. Dans un premier fichier se trouve le nom de différents systèmes réactionnels susceptibles d'être étudiés. Le nom figure après le mot clé CARACT\_CHIMIE. Sur les lignes suivantes figurent les différentes espèces présentes dans le système suivi de leur temps caractéristique. Exemple :

```
CARACT_CHIMIE  OZONE
```

```
ESPECE  NO      8.D1
ESPECE  NO2     1.D2
ESPECE  O       1.D-5
ESPECE  O3      3.D3
```

Dans un autre fichier (le même que celui de la mise en données de la partie dynamique du problème), figure le nom et le détail du système réactionnel<sup>10</sup>, les informations sur la vitesse de réaction, les initialisations et les émissions. Exemple :

```
CHIMIE  OUI  OZONE
```

```
REACTION  NO + hv    =  NO  + O    : SUN  1.D-5  -7.D0
REACTION  O  + (O3) =  O3          : CST  1.D5
REACTION  O3 + NO    =  (O2) + NO2  : CST  1.D-16
```

```
INITIALISE  O      DOMAINE  VAL  0.D0
```

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

INITIALISE	NO	DOMAINE	VAL	1.3D8
INITIALISE	NO2	DOMAINE	VAL	5.D11
INITIALISE	O3	DOMAINE	VAL	8.D11
SOURCE	NO2	DOMAINE	VAL	1.D6

### 4.3 Une cinétique chimique diurne de l’ozone simplifiée

**Réduction des systèmes de cinétique chimique.** Les réactions chimiques dans l’atmosphère se comptent par milliers. Il est bien entendu hors de question de prendre en compte un aussi grand nombre de réactions. L’objectif que nous nous fixons est de réduire la cinétique chimique à un nombre suffisamment faible de réactions pour être utilisée dans des simulations 3D (et à terme en temps réel) tout en restant fidèle à la réalité des phénomènes physiques. Une série d’hypothèses et d’approximations sont nécessaires pour atteindre un tel objectif.

Une des premières classifications en cinétique chimique est la différenciation entre la chimie du jour et celle de la nuit. Nous faisons tout d’abord le choix, dans le cadre de ce travail, de modéliser uniquement la chimie du jour, tout en gardant à l’esprit qu’un modèle final devra également prendre en compte la nuit pour permettre des simulations sur plusieurs journées mais surtout une modélisation fine de l’interface entre le jour et la nuit.

Une seconde classification est celle de la chimie en milieu sec ou en milieu condensé. Nous nous intéressons à celle de première nature. Ensuite, il est possible de modéliser la chimie d’un polluant en particulier (ou bien d’une famille de polluants), ce qui laisse apparaître une autre classification comme par exemple la chimie du dioxyde de soufre, de l’ozone, du méthane ou des aldéhydes. Il est possible de découpler certaines de ces catégories sans trop perdre en généralités. Par exemple, si l’on s’intéresse à l’ozone, nous ne tiendrons pas compte des concentrations en SO<sub>2</sub> dans l’atmosphère et de toute la chimie relative à cette espèce.

---

<sup>10</sup> sont notées entre parenthèses les espèces chimiques qui ne sont pas prises en compte par le système (pour lesquelles il n’y a pas d’équation de transport associée), par exemple l’oxygène O<sub>2</sub> de l’atmosphère.

### 4.3 Une cinétique chimique diurne de l'ozone simplifiée

À l'intérieur de cette dernière classification, il est encore possible de simplifier la cinétique chimique. Nous avons déjà abordé une des premières solutions dans la présentation des réactions photochimiques, à savoir le regroupement des différents stades en une réaction unique. Nous en verrons un autre exemple dans la présentation du système réactionnel de l'ozone présenté ci-après. Il est aussi possible de regrouper plusieurs espèces chimiques en une seule, réelle ou fictive, représentative de l'ensemble. Par exemple, les aldéhydes peuvent être regroupés en une espèce fictive appelée RCHO, les hydrocarbures non méthaniques en NMHC.

Une fois les regroupements d'espèces et de réactions effectués, il faut déterminer des constantes de vitesse de façon à obtenir une adéquation optimale avec des cinétiques plus complètes. Il est évident que l'on perd alors en précision.

Pour initier notre étude, nous allons développer un système réactionnel volontairement très simplifié qui contient treize réactions chimiques et photochimiques pour neuf espèces différentes. Certaines espèces chimiques sont regroupées en une seule espèce représentative (RCHO pour les aldéhydes, NMHC pour les hydrocarbures, PAN pour les peroxyacylnitrates, et les radicaux peroxyles  $RO_2$ ). On retrouve les principaux polluants  $NO_x$ ,  $O_3$ , CO, ainsi que les principales réactions de chimie organique et inorganique.

**Historique d'un pic de concentration en ozone.** Avant de décrire les phénomènes chimiques qui ont lieu lors de la production de l'ozone, il est utile d'examiner les valeurs expérimentales mesurées au cours d'un pic de pollution. La figure 4.7 représente l'évolution des principales espèces chimiques en relation avec l'ozone au cours d'une journée à Pasadena en Californie [Finlayson-Pitts & Pitts, 1986]. En début de matinée, la concentration en NO augmente et atteint un maximum à une heure qui correspond au maximum d'émission en NO due au trafic automobile (heure de pointe) ; par la suite, la concentration en  $NO_2$  augmente et atteint un maximum peu de temps après. Le niveau d'ozone, relativement faible le matin augmente de façon significative à midi alors que la concentration en NO diminue vers son minimum. La concentration maximale en ozone est atteinte après le maximum de  $NO_2$ . À la périphérie des villes, les profils peuvent être translatés en fonction du transport et des émissions, ce qui peut expliquer que l'on retrouve fréquemment des pics de concentration en ozone dans des zones quasi-rurales en milieu ou en fin d'après-midi.

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

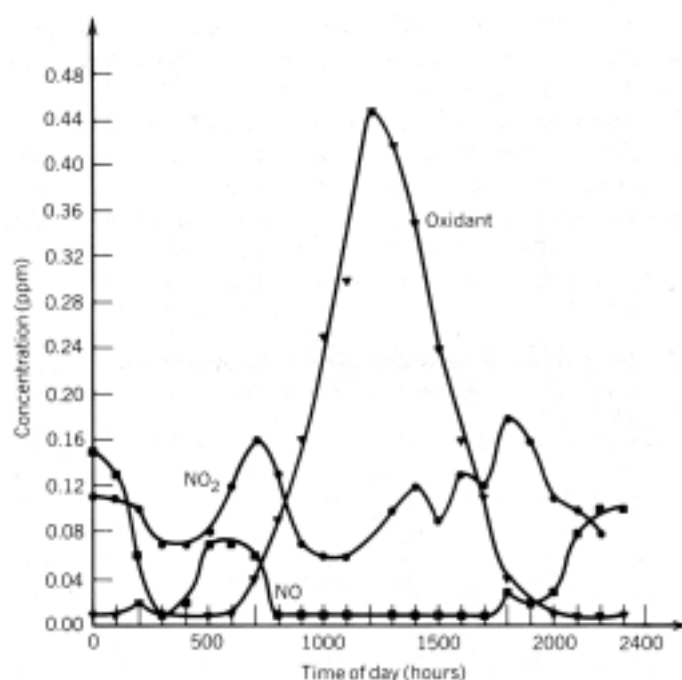


Figure 4.7 : variation diurne du NO, NO<sub>2</sub> et des oxydants à Pasadena (Californie), le 25 juillet 1973 [Finlayson-Pitts & Pitts, 1986]

**Une cinétique diurne simplifié.** Nous présentons maintenant une cinétique de l’ozone simplifiée, ce travail étant le fruit d’une collaboration avec E. Villenave du Laboratoire de Physico-Chimie Moléculaire de l’Université de Bordeaux et avec E. Larmanou, stagiaire de troisième année de l’ENSCP. L’ozone se trouve à l’état naturel dans l’atmosphère. Il est le produit de la photodissociation du NO<sub>2</sub>. Les réactions suivantes représentent le cycle naturel de l’ozone dans la troposphère non polluée. Il conduit à un état stationnaire de ce dernier.



La seconde réaction, seule source connue d’ozone dans l’atmosphère, est extrêmement rapide, c’est à dire que l’atome d’oxygène créé par la réaction (R.1) est quasi immédiatement détruit par la réaction (R.2). Le taux de production est alors égal au taux de destruction. Nous venons de décrire ce qui est couramment appelé ‘pseudo-steady state approximation’ (PSSA)

### 4.3 Une cinétique chimique diurne de l'ozone simplifiée

de l'espèce O. La concentration en O n'est pas pour autant constante mais varie en fonction de celle de NO<sub>2</sub> de plusieurs ordres de grandeur plus vite que les changements en concentration de NO<sub>2</sub>. On peut alors rassembler les deux réactions en une seule :



En raison de la réaction R.3, des concentrations élevées en NO et O<sub>3</sub> ne peuvent coexister. L'apparition du pic d'ozone après le maximum en NO est ainsi expliquée (figure 4.7).

L'ozone réagit également avec NO<sub>2</sub> (surtout en fin de journée) et subit une photodissociation dans la troposphère, ce qui se traduit par les réactions suivantes :



Le radical OH· est de toute première importance puisqu'il est très réactif et se trouve à l'origine de l'oxydation des hydrocarbures qui va jouer un rôle déterminant dans la création de l'ozone en atmosphère polluée.

Nous regroupons maintenant tous les hydrocarbures non méthaniques, à l'exception du monoxyde de carbone que nous voulons suivre individuellement, dans une espèce générique appelée NMHC<sup>11</sup>. Les réactions d'oxydations suivantes transforment les NMHC et CO en radicaux peroxyloxyles RO<sub>2</sub>· et hydroperoxyloxyles HO<sub>2</sub>· :



En atmosphère non polluée, l'ozone O<sub>3</sub> est détruit par combinaison avec l'oxyde d'azote NO (réaction R.3). En atmosphère polluée, ce processus est détourné par une transformation de NO en NO<sub>2</sub> plus rapide que celle avec O<sub>3</sub>, conduisant à une accumulation de O<sub>3</sub>. La transformation de NO en NO<sub>2</sub> est rendue possible par la réaction avec les radicaux peroxyloxyles RO<sub>2</sub>·

---

<sup>11</sup> En atmosphère polluée, le méthane a un temps de réaction bien plus grand que celui des autres hydrocarbures ; nous n'en tiendrons donc pas compte.



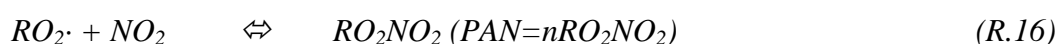
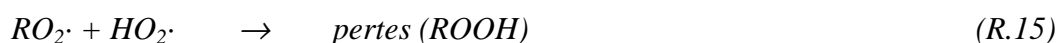
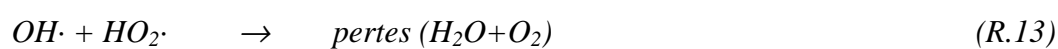
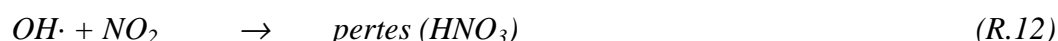
## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

et hydroperoxydes  $HO_2\cdot$ , intermédiaires de l'oxydation des hydrocarbures (réactions R.7 et R.8). Cet ensemble de réactions peut être globalisé comme suit :



Les réactions (R.7) à (R.11) forment une réaction en chaîne entretenant la formation d'ozone car les hydrocarbures et les radicaux  $OH\cdot$  consommés dans la réaction 7 sont régénérés par la réaction 10. Enfin, le décalage entre le maximum en NO et le maximum en  $NO_2$  est expliqué puisque les réactions 9,10 et 11 transforment le NO en  $NO_2$ .

Ce système est complété par cinq réactions supplémentaires créant uniquement des pertes pour notre système.



Les PAN sont importants à prendre en compte car ce sont des espèces stables, d'une durée de vie suffisamment longue pour constituer un réservoir de  $NO_2$  tout au long de la journée.

Le système final est résumé dans le tableau 4.8. Il comporte neuf espèces et treize réactions.

**Étude de sensibilité.** Nous sommes en présence d'une cinétique présentant deux types de réactions : des réactions 'réelles', présentes dans des cinétiques plus complètes et dont les constantes de vitesse sont connues dans la littérature ; des réactions 'fictives' où interviennent des espèces générales ( $NMHC$ ,  $RO_2$ ,  $HO_2$ ) pour lesquelles il faut regarder de plus près afin de déterminer une valeur moyenne, représentative de l'ensemble des espèces et des

### 4.3 Une cinétique chimique diurne de l'ozone simplifiée

conditions initiales. Ce travail se fait en comparant pour différentes conditions initiales les résultats du modèle réduit à un modèle de référence. Les valeurs des constantes de vitesse sont alors ajustées jusqu'à ce qu'une adéquation satisfaisante soit trouvée. Le modèle de référence de cette étude est celui de l'Université d'Oxford RACM (Regional Atmospheric Chemical Mechanism), utilisable sur quelques scénarii d'atmosphères polluées ou non comme une boîte noire sur internet [RACM].

ESPÈCES	RÉACTIONS
	$NO_2 + hv \rightarrow NO + O_3$
	$NO + O_3 \rightarrow NO_2$
	$NO_2 + O_3 \rightarrow NO + 2 O_2$
	$O_3 + hv \rightarrow 2 OH\cdot$
	$NMHC + OH\cdot \rightarrow RO_2$
	$CO + OH\cdot \rightarrow HO_2\cdot + pertes (CO_2)$
$NO_2$	$RO_2\cdot + NO \rightarrow NO_2 + HO_2\cdot$
$NO$	$RO_2\cdot + NO \rightarrow NO_2 + HO_2\cdot + NMHC$
$O_3$	$RO_2\cdot + NO \rightarrow NO_2 + HO_2\cdot + CO$
$OH$	$HO_2\cdot + NO \rightarrow NO_2 + OH\cdot$
$NMHC$	$OH\cdot + NO_2 \rightarrow pertes (HNO_3)$
$CO$	$OH\cdot + HO_2\cdot \rightarrow pertes (H_2O + O_2)$
$RO_2$	$2 HO_2\cdot \rightarrow pertes (H_2O_2)$
$HO_2$	$RO_2\cdot + HO_2\cdot \rightarrow pertes (ROOH)$
$PAN$	$RO_2\cdot + NO_2 \rightleftharpoons PAN$

Tableau 4.8 : cinétique simplifiée de l'ozone

Pour chacun des polluants, nous avons réalisé une étude de sensibilité à une variation de la valeur des constantes de vitesse des réactions chimiques. Ainsi, pour chaque espèce nous pouvons savoir sur quelle réaction il faut agir afin d'obtenir un effet désiré. Par exemple, la

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

modification de la constante de vitesse de la réaction  $R1$  influence plutôt le début de la courbe de concentration en  $\text{NO}_2$  (cf. figure 4.8), tandis que la constante de vitesse de la réaction  $R13$  affecte d'avantage la fin de cette courbe (cf. figure 4.9) :

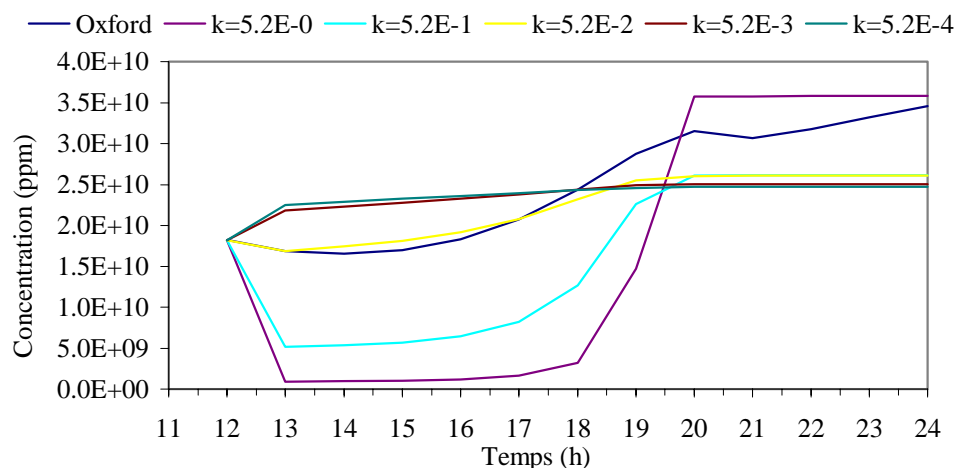


Figure 4.8 : influence de la valeur de la constante de vitesse de la réaction  $\text{NO}_2 + h\nu \rightarrow \text{NO} + \text{O}_3$  sur la concentration en  $\text{NO}_2$

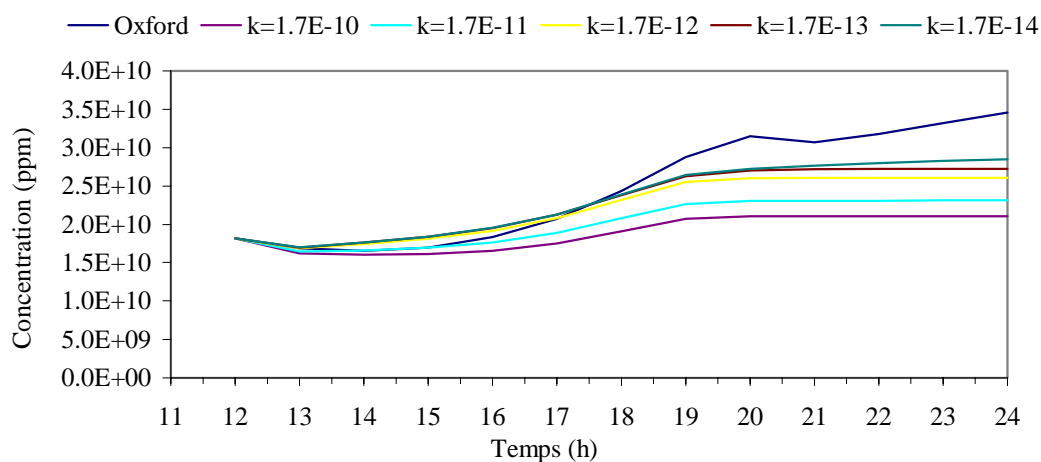


Figure 4.9 : influence de la valeur de la constante de vitesse de la réaction  $\text{RO}_2^\bullet + \text{NO}_2 \rightarrow \text{PAN}$  sur la concentration en  $\text{NO}_2$

Ces résultats permettent par la suite de savoir quelle est la constante de vitesse à changer pour obtenir une bonne adéquation avec le modèle de référence.

**Résultats initiaux.** Dans un premier temps, nous avons comparé notre modèle au modèle RACM, en attribuant aux concentrations initiales les valeurs obtenues par le modèle de

### 4.3 Une cinétique chimique diurne de l'ozone simplifiée

référence à 12h00. Dans ces conditions nous avons retenu deux modèles (cf. tableau 4.9) : le « modèle 1 » comportant des constantes de vitesse dont les ordres de grandeur sont réalistes, et le « modèle 2 », davantage en adéquation avec le modèle de référence, mais contenant des constantes de vitesse chimiquement incorrectes.

RÉACTIONS	MODELE 1	MODELE 2
$NO_2 + hv \rightarrow NO + O_3$	$5.2 \cdot 10^{-2}$	$5.2 \cdot 10^{-2}$
$O_3 + hv \rightarrow 2 OH\cdot$	$24.9 \cdot 10^{-8}$	$44.9 \cdot 10^{-8}$
$NO_2 + O_3 \rightarrow NO$	$4 \cdot 10^{-20}$	$4 \cdot 10^{-20}$
$NO + O_3 \rightarrow NO_2$	$8.1 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-9}$
$NMHC + OH\cdot \rightarrow RO_2$	$2 \cdot 10^{-15}$	$7.5 \cdot 10^{-15}$
$CO + OH\cdot \rightarrow HO_2\cdot + pertes (CO_2)$	$1.1 \cdot 10^{-14}$	$2.5 \cdot 10^{-14}$
$RO_2\cdot + NO \rightarrow NO_2 + HO_2\cdot$	$3.2 \cdot 10^{-13}$	$3.2 \cdot 10^{-13}$
$RO_2\cdot + NO \rightarrow NO_2 + HO_2\cdot + NMHC$	$5 \cdot 10^{-13}$	$5 \cdot 10^{-13}$
$RO_2\cdot + NO \rightarrow NO_2 + HO_2\cdot + CO$	$3.2 \cdot 10^{-13}$	$3.2 \cdot 10^{-13}$
$HO_2\cdot + NO \rightarrow NO_2 + OH\cdot$	$5.7 \cdot 10^{-14}$	$5.7 \cdot 10^{-14}$
$OH\cdot + NO_2 \rightarrow pertes (HNO_3)$	$1 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-10}$
$OH\cdot + HO_2\cdot \rightarrow pertes (H_2O + O_2)$	$3 \cdot 10^{-13}$	$3 \cdot 10^{-13}$
$2 HO_2\cdot \rightarrow pertes (H_2O_2)$	$1 \cdot 10^{-11}$	$1 \cdot 10^{-11}$
$RO_2\cdot + HO_2\cdot \rightarrow pertes (ROOH)$	$1.1 \cdot 10^{-13}$	$1.1 \cdot 10^{-13}$
$RO_2\cdot + NO_2 \rightleftharpoons PAN$	$2.5 \cdot 10^{-5}$	$2.3 \cdot 10^{-5}$

Tableau 4.9 : constantes de vitesse des réactions chimiques des modèles 1 et 2

La figure suivante montre une comparaison des concentrations au cours de la journée pour les polluants NO, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, CO et PAN entre ces deux modèles et le modèle RACM. Il est important de noter qu'en matière de réduction de cinétiques chimiques complexes, plus la réduction est importante, plus les profils vont s'éloigner de ceux du modèle de référence. Nous avons dans cette étude simplifié à l'extrême la chimie de la troposphère. Si l'ordre de grandeur des concentrations ainsi que leur sens de variation sont vérifiés, on pourra conclure que le système est satisfaisant.

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

Le modèle 1 fournit de bons résultats pour les polluants  $\text{NO}_2$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{CO}$  et PAN. Par contre, pour le  $\text{NO}$ , nous observons une forte augmentation au début du calcul, contrairement au modèle RACM. En fin de journée, le profil recolle à la référence. Nous sommes arrivés à atténuer ce défaut avec le modèle 2, mais ce dernier possédant des vitesses de réactions cinétiquement impossible, nous préférons conserver le premier modèle.

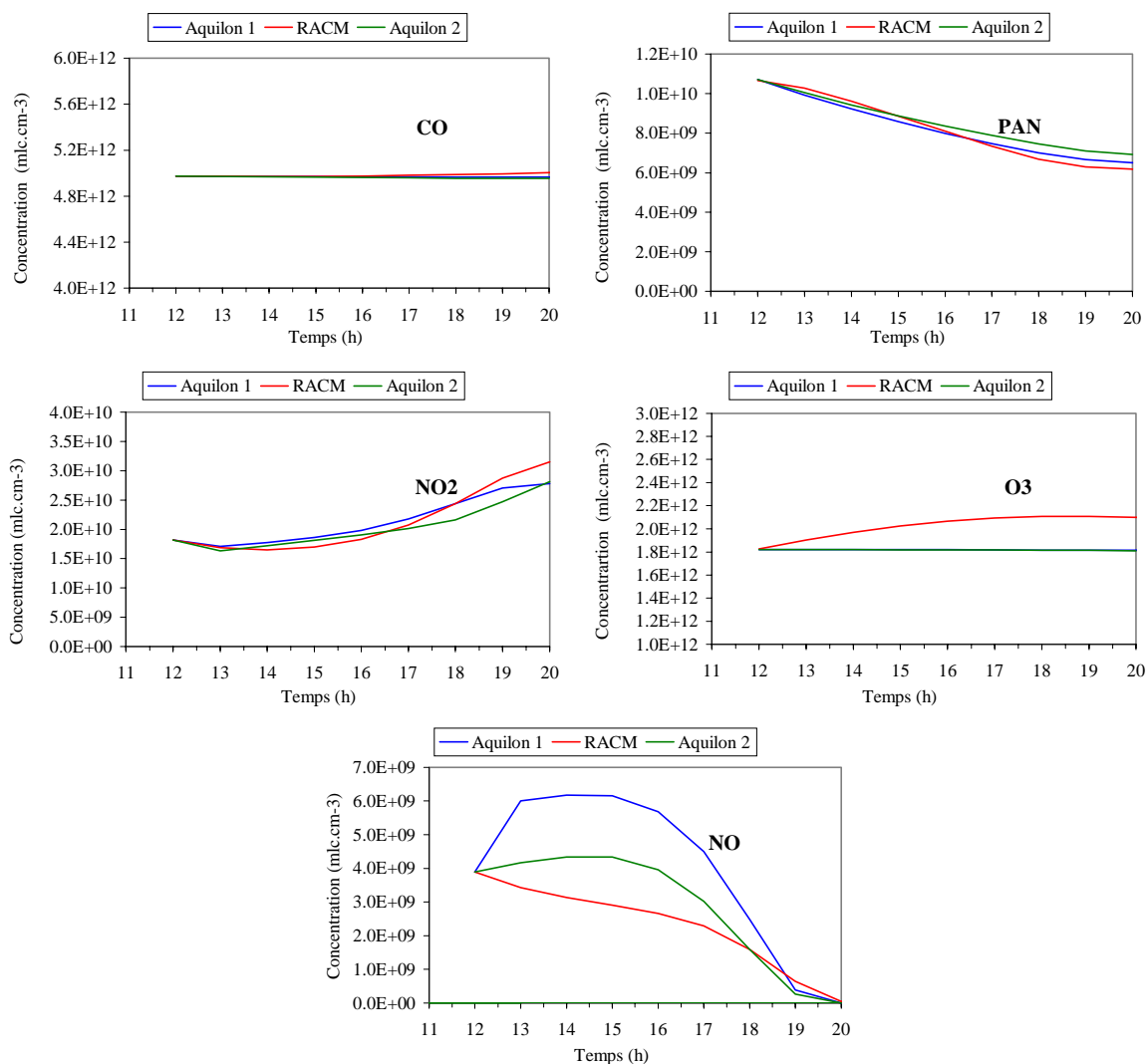


Figure 4.10 : comparaison du modèle simplifié 1 et 2 avec le modèle RACM sur les concentrations en  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{CO}$  et PAN à partir de 12h

**Variation des conditions initiales.** Il est indispensable de vérifier si notre cinétique simplifiée fonctionne pour des conditions de pollution différentes. Pour cela, nous l'avons soumis à une variation des conditions initiales ainsi qu'à un autre modèle de référence. Il

### 4.3 Une cinétique chimique diurne de l'ozone simplifiée

s'agit du Carbon Bond Mechanism CBM4 [Verwer J. ] à 32 espèces et 81 réactions chimiques et photochimiques.

La figure 4.11 compare le modèle 1 au RACM sur toute une journée, et la figure 4.12 au CBM4. L'adéquation des concentrations est ici moins bien vérifiée. Il faut toutefois relativiser ces résultats. Les résultats pour l'ozone et le CO sont bons. Ceux pour les dioxydes d'azote et les PAN sont moins satisfaisants.

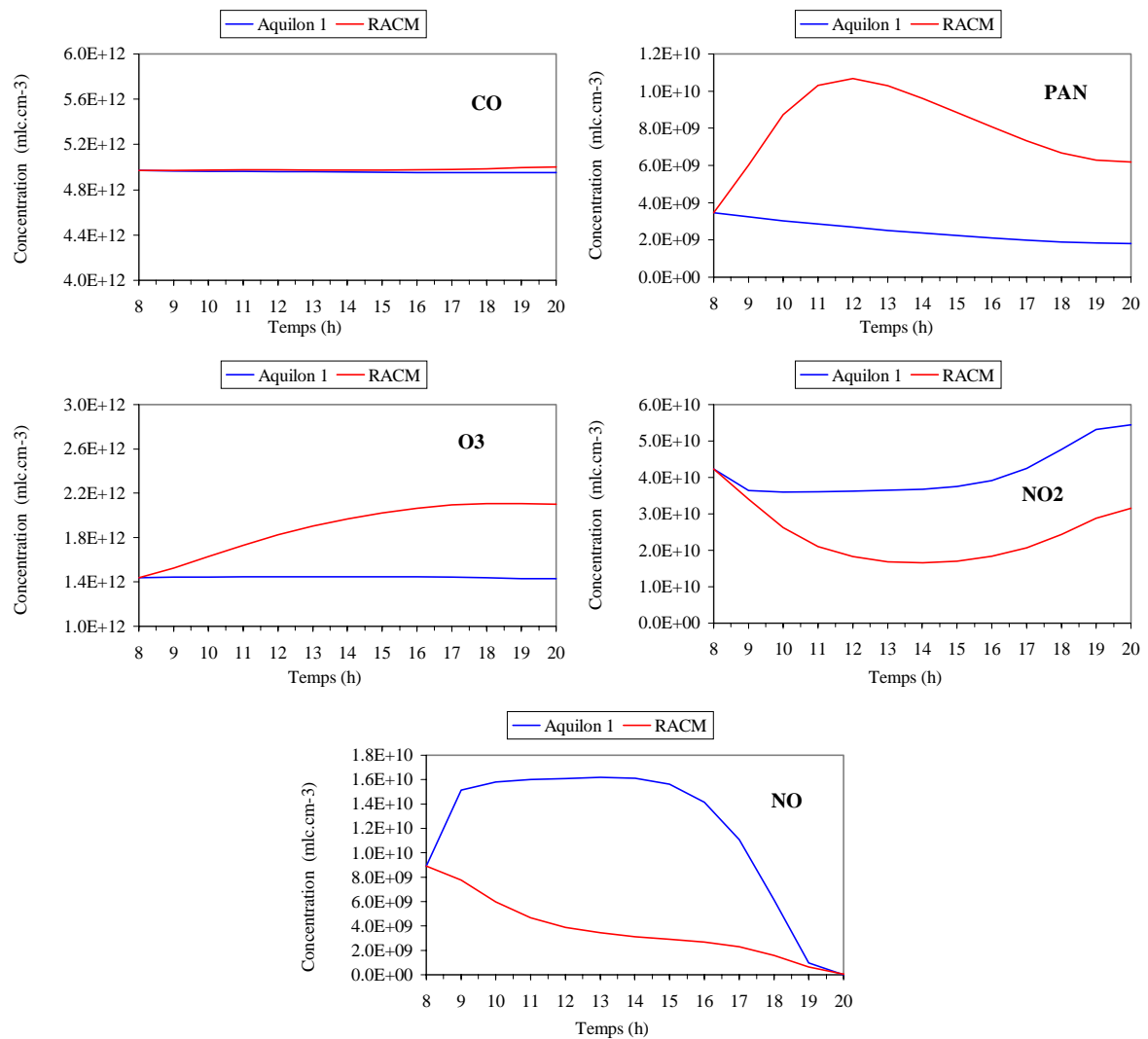


Figure 4.11 : comparaison du modèle simplifié 1 avec le modèle RACM sur les concentrations en NO, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, CO et PAN à partir de 8h

## CHAPITRE 4 CHIMIE ATMOSPHERIQUE

Nous pensons en fait qu'il est difficile, par un modèle aussi simple d'obtenir de bonnes corrélations pour ces cinq polluants. D'autres auteurs ont rencontré ces difficultés : Maalej [Maalej, 1997], avec le modèle FISHER2 à onze espèces et dix-neuf réactions peut obtenir de bons résultats pour les PAN et l'Ozone mais se trouve à un facteur dix pour le  $\text{NO}_2$  ; le modèle EUSMOG [van Loon, 1995], à quinze espèces et autant de réactions, a lui été créé pour prédire uniquement les concentrations en Ozone. C'est une cinétique de nature différente de celle que nous élaborons puisque est évaluée, dans la formation de l'ozone, la contribution de chacune des autres espèces.

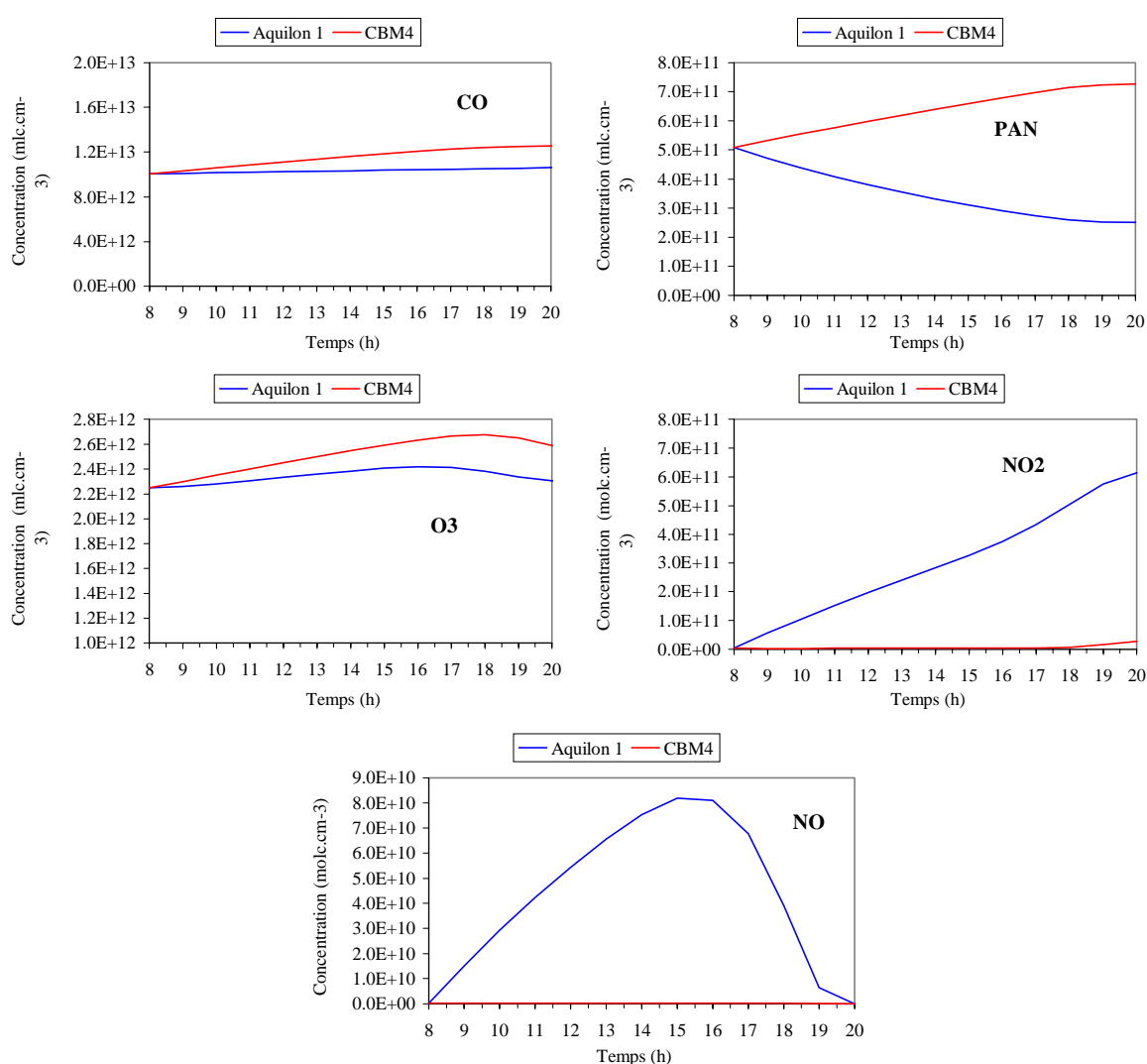


Figure 4.12 : comparaison du modèle simplifié 1 avec le modèle CBM4 sur les concentrations en NO,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{O}_3$ , CO et PAN à partir de 8h

## 4.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre l'avancement de nos travaux en ce qui concerne le module de chimie. La modélisation des émissions de polluants dans l'atmosphère par le trafic automobile a été abordée d'un point de vue méthodologique et bibliographique. La formulation mathématique ne représente pas de difficultés majeures. Le problème consiste plutôt en une bonne description des caractéristiques du parc automobile, des conditions de trafic et des facteurs d'émission unitaire pour chaque type de véhicule et dans des conditions d'utilisation différentes.

Nous nous sommes ensuite attachés à décrire les solutions numériques adaptées à la résolution de système d'équations différentielles couplées par une cinétique chimique. Un module 2D et 3D a donc été programmé traitant de façon automatique un nombre quelconque d'équations, quelle que soit la cinétique chimique considérée. Ce module comprend la lecture d'un fichier de données décrivant la cinétique et un solveur écrit de façon générale. Le solveur est basé sur une technique de *splitting* des équations. La partie advection est résolue par une méthode TVD par ailleurs développée au laboratoire. Nous avons testé cette méthode et pouvons conclure qu'elle est bien adaptée à la nature de nos problèmes. La partie diffusion est résolue implicitement et la partie chimie par une méthode semi-implicite *twostep* que nous avons programmée. Le module de dépôt n'a pas encore été implanté et fait partie des développements futurs.

Dans une dernière partie, nous avons travaillé sur la simplification des cinétiques chimiques descriptives de la formation de l'ozone dans l'atmosphère. Un modèle très simplifié a été mis au point, toujours dans le but de limiter les temps de calcul. Les résultats obtenus sont encourageants.





# CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Nous avons présenté l'état d'avancement de notre projet de modélisation de la pollution atmosphérique dans les villes. Le choix a été fait de travailler aux deux échelles du problème - mésoscopique et locale - et sur les différentes disciplines concernées : dynamique, thermique et chimie.

Nous avons participé au développement d'un code de calcul de mécanique des fluides en implantant des méthodes numériques permettant de résoudre le problème proposé : les modèles de turbulence  $k$ - $\epsilon$ , RNG et  $v^2$ - $f$ , des méthodes d'estimation des différents flux radiatifs, un module de chimie traitant un nombre quelconque d'équations de transport couplées par une cinétique chimique. Les modèles de turbulence et de chimie ont été validés et sont opérationnels en 2D et 3D. Des lois de paroi dynamiques et thermiques couplées aux modèles de turbulence permettent une modélisation à plus grande échelle. Certaines parties du modèle radiatif à l'échelle locale restent à valider. C'est le travail entrepris récemment par un post-doctorant. À méso-échelle, il est nécessaire d'apporter un complément comme par exemple par l'estimation de l'albédo de surface des villes ou l'estimation des flux anthropiques.

## CONCLUSION ET PERSPECTIVES

La modélisation des émissions de polluants par le trafic automobile a été abordée d'un point de vue méthodologique et bibliographique. Elle est directement liée à un modèle de trafic et à une description statistique du parc automobile. Nous avons également travaillé sur la cinétique chimique de l'ozone. Il serait intéressant de compléter notre modèle pour tenir compte de la chimie de la nuit. Il faut pour cela ajouter une espèce chimique ( $\text{NO}_3$ ). La cinétique peut aussi être légèrement développée afin de prédire avec une meilleure précision un plus grand nombre de polluants.

Nous avons, en amont du développement des méthodes numériques à proprement parlé, créé une interface au code de calcul. Cette étape, qui est le fruit d'un travail en équipe, a consisté à automatiser toutes les opérations de préparation d'une simulation. Elles ne se font plus par une programmation en Fortran mais directement à l'aide de fichiers de données. La prise en main du code est ainsi quasi immédiate quel que soit le problème posé : dynamique, thermique et/ou chimie. Ce travail est allé de pair avec une restructuration quasi complète du code par une généralisation de certaines sous-routines ou l'utilisation de l'allocation dynamique de la mémoire. C'est une base solide pour de futurs développements.

Dans cette étude, nous avons fait l'hypothèse d'une atmosphère sèche. Il est souhaitable, dans le futur, d'introduire l'humidité comme nouvelle variable. Le problème ne sera pas considérablement modifié, seule une équation de transport sera ajoutée au système existant. Une loi de paroi ainsi que des méthodes d'estimation des flux d'humidité de surface doivent aussi être mis en place.

Il serait intéressant de fournir un modèle unique qui puisse traiter à la fois l'échelle locale et mésoscopique. Cela passe par la généralisation des lois de paroi à tout le domaine et pour des surfaces tant horizontales que verticales ou obliques. Ce modèle serait également plus adapté à la nature des surfaces des constructions ou des rues, plutôt rugueuses que lisses. Le modèle à méso-échelle doit être ensuite validé sur une expérience in situ. Nous proposons les expériences de Wangara [André et al., 1978] et de Voves [André & Lacarrère, 1980].

## CONCLUSION ET PERSPECTIVES

D'une manière générale, lorsque l'on modélise des phénomènes de mécanique des fluides, toutes les zones du domaine n'ont pas le même intérêt. Dans certaines d'entre elles se concentrent les phénomènes dont dépendent le reste de l'écoulement. Les zones à forts gradients sont des zones à privilégier et nécessitent un maillage plus dense. Une technique de raffinement local automatique a été développée au laboratoire [Vincent & Caltagirone, 2000]. Elle fera prochainement partie du code Aquilon et permet, selon le gradient de maille, de raffiner le maillage sur un ou plusieurs autres niveaux, internes à la maille initiale. Cette technique possède un gain en mémoire de 80% et en temps de 50%.



# ANNEXE A

## DÉMONSTRATION DE L'ÉQUATION DE L'ÉNERGIE CINÉTIQUE TURBULENTE MOYENNE

En soustrayant à l'équation de Navier-Stokes sa moyenne, on obtient l'équation de Navier-Stokes fluctuante :

$$\rho \left( \frac{\partial u_i'}{\partial t} + u_j' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} + u_j' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} + u_j' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial \overline{\rho u_i' u_i'}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}'}}{\partial x_j} - \rho_0 \frac{\theta'}{\beta} g_i$$

On multiplie par  $u_i'$  et on moyenne :

$$\overline{\rho \left( u_i' \frac{\partial u_i'}{\partial t} + u_i' u_j' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \right)} + \overline{\rho u_i' u_j' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} + \overline{\rho u_i' u_j' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} = \overline{u_i' \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}'}}{\partial x_j}} \rho_0 \frac{\overline{u_i' \theta'}}{\beta} g_i$$

On peut réécrire le troisième terme :

## ANNEXE A

$$\overline{\rho u_i' u_j' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} = \overline{\rho u_j' \frac{\partial \frac{1}{2} u_i' u_i'}{\partial x_j}} = \frac{\partial \overline{\rho \frac{1}{2} u_i' u_i' u_j'}}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \overline{u_i' u_i'} \frac{\partial \overline{\rho u_j'}}{\partial x_j}$$

En soustrayant à l'équation de conservation de la masse sa moyenne, on a :

$$\frac{\partial \overline{\rho u_j'}}{\partial x_j} = 0$$

On obtient finalement :

$$\rho \frac{\partial \overline{\frac{1}{2} u_i' u_i'}}{\partial t} + \overline{\rho u_j' \frac{\partial \frac{1}{2} u_i' u_i'}{\partial x_j}} = - \frac{\partial \overline{\rho \frac{1}{2} u_i' u_i' u_j'}}{\partial x_j} - \overline{\rho u_i' u_j'} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} + u_i' \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}'}}{\partial x_j} - \rho_0 \frac{\overline{u_i' \theta'}}{\beta} g_i$$

De plus :

$$\begin{aligned} u_i' \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}'}}{\partial x_j} &= \frac{\partial u_i' \overline{\sigma_{ij}'}}{\partial x_j} - \overline{\sigma_{ij}'} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \\ &= - \frac{\partial u_j' p'}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\mu u_i' s_{ij}') - \mu s_{ij}' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \end{aligned}$$

$$\text{avec } s_{ij}' = \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j'}{\partial x_i}$$

En posant  $k = \frac{1}{2} \overline{u_i' u_i'}$  (énergie cinétique turbulente), on obtient :

$$\begin{aligned} \rho \left( \frac{\partial \overline{k}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \overline{k}}{\partial x_j} \right) &= \underbrace{- \frac{\partial \overline{\rho k u_j'}}{\partial x_j}}_{\text{diffusion turbulente}} - \underbrace{\frac{\partial \overline{u_j' p'}}{\partial x_j}}_{\text{production par le mouvement moyen}} - \underbrace{\overline{\rho u_i' u_j'} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}}_{\text{diffusion moléculaire}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\mu u_i' s_{ij}'}}_{\text{diffusion moléculaire}} \\ &\quad - \underbrace{\mu s_{ij}' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}}_{\text{dissipation}} + \underbrace{\overline{\rho \beta u_i' \theta' g_i}}_{\text{production par les forces d'Archimède}} \end{aligned}$$

Modélisation de la diffusion turbulente :

## ANNEXE A

$$-(\overline{\rho k u_j'} + \overline{u_j' p'}) = \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j}$$

Modélisation de la production par le mouvement moyen

$$-\overline{\rho u_i' u_j'} = -\frac{2}{3} \rho \bar{k} \delta_{ij} + \mu_t \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

Modélisation de la production par les forces d'Archimède :

$$-\rho_0 \overline{u_i' \theta'} = \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i}$$

Modélisation de la diffusion moléculaire Ha Min [Ha Min ,1993] :

$$\mu u_i' s_{ij}' \approx \mu \frac{\partial \frac{1}{2} u_i' u_i'}{\partial x_j}$$

Modélisation de la dissipation de  $\bar{k}$  :

$$\overline{\mu s_{ij}' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} = \frac{1}{2} \overline{\mu (s_{ji}' \frac{\partial u_j'}{\partial x_i} + s_{ij}' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j})} = \frac{1}{2} \overline{\mu s_{ij}' s_{ij}'}$$

$$\text{car } s_{ij}' = s_{ji}'$$

et d'après Ha Min [Ha Min ,1993] :

$$\frac{1}{2} \overline{\mu s_{ij}' s_{ij}'} \approx \mu \frac{\partial \overline{u_i' u_i'}}{\partial x_j \partial x_j}$$

où le premier terme étant la dissipation turbulente moyenne de  $\bar{k}$  et le second la pseudo-dissipation turbulente moyenne de  $\bar{k}$  notée  $\rho \bar{\epsilon}$ .

L'équation de l'énergie cinétique turbulente moyenne s'écrit finalement, sous forme contractée :



## ANNEXE A

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{k} \right) = \nabla \cdot \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \nabla \bar{k} \right) + \mu_t \nabla \bar{\mathbf{u}} : (\nabla \bar{\mathbf{u}} + {}^t \nabla \bar{\mathbf{u}}) - \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\mathbf{g} \cdot \nabla \bar{\theta}}{\beta} - \rho \bar{\varepsilon}$$

que l'on peut réécrire comme suit :

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{k} \right) = \nabla \cdot \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \nabla \bar{k} \right) + \mu_t \text{tr}(\nabla \bar{\mathbf{u}} : \nabla \bar{\mathbf{u}} + {}^t \nabla \bar{\mathbf{u}} : \nabla \bar{\mathbf{u}}) - \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\mathbf{g} \cdot \nabla \bar{\theta}}{\beta} - \rho \bar{\varepsilon}$$

L'équation pour la dissipation  $\varepsilon$  est plus longue à établir et délicate à modéliser. On pourra se reporter aux ouvrages de Schiestel [Schiestel, 1993] et Ha Min [Ha Min ,1993].

# ANNEXE B

## CALCUL DE L'AIRE

### D'UN ARC D'ELLIPSE

D'un point de vue pratique, nous projetons chaque segment  $[MN]$  constitutif de  $S_j$  et intégrons chaque arc elliptique  $[M''N'']$  correspondant. La somme des aires intermédiaires donne alors la valeur de  $S_j''$ . Considérons l'ellipse à laquelle appartient l'arc d'ellipse. Dans le repère formé des grands et petits axes de l'ellipse ( $Ox$ ) et ( $Oz$ ), l'équation de cette dernière est de la forme :

$$X^2 + \frac{Z^2}{\cos^2 \alpha} = 1$$

où  $\alpha$  est l'angle entre les plans  $(OMN)$  et  $(xOz)$ . On remarque alors que le petit axe de l'ellipse a pour longueur  $\cos(\alpha)$  et que le grand axe correspond au rayon du cercle de base.

Nous cherchons maintenant à exprimer cette équation dans le repère  $(xOz)$ . Par une rotation d'angle  $\gamma$ , angle entre la droite intersection des plans  $(OMN)$  et  $(xOz)$ , et la droite  $(Ox)$ , on obtient l'expression suivante :

## ANNEXE B

$$(x \cos \gamma + z \sin \gamma)^2 + \frac{(-x \sin \gamma + z \cos \gamma)^2}{\cos^2 \alpha} = 1$$

Cette équation peut aussi se mettre sous la forme :

$$z = \frac{1}{a} \left( \frac{-b}{a} x \pm \sqrt{1 - c^2 x^2} \right)$$

où  $a$ ,  $b$ ,  $c$  sont des fonctions de  $\gamma$  et  $\alpha$ . Cette équation prend le signe + si l'on considère la demi-ellipse au-dessus de l'axe des maxima, le signe – dans le cas contraire. L'axe des maxima passe par les points de coordonnées :

$$x = \pm \sqrt{\frac{1}{c^2}}$$

En déterminant l'équation de l'axe des maxima, il est ensuite possible de déterminer à quelle demi-ellipse appartiennent les points M'' et N''.

L'intégration donne :

$$z = \frac{1}{a} \left( \frac{-b}{2a} x^2 \pm \left( \frac{x}{2} \sqrt{1 - c^2 x^2} + \frac{1}{2c} \arcsin(xc) \right) \right)$$

Le cas particulier où  $\alpha = \pi/2$  est à considérer. L'arc d'ellipse se réduit simplement à un segment de droite dont l'intégration est triviale.

# ANNEXE C

## PRÉSENTATION DES FICHIERS DE DONNÉES DE L'INTERFACE DU CODE DE CALCUL AQUILON

**La base de données.** Nous présentons ci-dessous une partie de la base de données contenue dans le fichier *caract.par*. Le mot clé CARACT\_FLUIDE (ou CARACT\_SOLIDE) est suivi sur la même ligne du nom d'un fluide (ou d'un solide) et sur les lignes suivantes d'une série de mots clés relatifs à ses caractéristiques physiques. Le mot clé CARACT\_CHIMIE est suivi du nom d'un système réactionnel et suivi des mots clés désignant les différentes espèces chimiques de la cinétique et de leur temps caractéristique.

Deux types fluides sont présentés : l'air à une température de 300 K et une pression de 101325 Pa et un fluide fictif pour l'écoulement autour d'un carré correspondant à un nombre de Reynolds de 21400. Les caractéristiques du plexiglas et les espèces chimiques (ainsi que leur temps caractéristique) de la cinétique du cycle photostationnaire de l'ozone sont aussi présentées.

## ANNEXE C

### CARACT\_FLUIDE AIR

MASSE	1.1768293D0
VISCOSITE	1.85D-5
COMPRESSIBILITE	9.8692327D-6
CAPACITE_CAL	1006.D0
CONDUCTIVITE	0.0263D0
DILATATION	3.333333D-3
GAMMA	1.4D0
CONST_GP	287.D0
RAYON_PART	0.D0
CONTRAINTES_SEUIL	0.D0
RHEOFLUIDIFIANCE	0.D0
LOI_ETAT	GAZ_PARFAIT
RHEOLOGIE	NEWTON

### CARACT\_FLUIDE CARRE

MASSE	1.D0
VISCOSITE	4.54545D-5
COMPRESSIBILITE	9.8692327D-6
CAPACITE_CAL	1006.D0
CONDUCTIVITE	0.0263D0
DILATATION	3.333333D-3
GAMMA	1.4D0
CONST_GP	287.D0
CONCENTRATION	0.D0
RAYON_PART	0.D0
CONTRAINTES_SEUIL	0.D0
RHEOFLUIDIFIANCE	0.D0
LOI_ETAT	GAZ_PARFAIT
RHEOLOGIE	NEWTON

### CARACT\_SOLIDE PLEXI

MASSE	1410.D0
CAPACITE_CAL	1463.D0
CONDUCTIVITE	.26D0
PERMEABILITE	1.D-20

### CARACT\_CHIMIE OZONE

ESPECE O	1.D-5
ESPECE NO	8.D1
ESPECE NO2	1.D2
ESPECE O3	3.D3

## ANNEXE C

**Le fichier carré.don.** Nous présentons ci-dessous le fichier de données relatif au cas test de l'écoulement autour du carré :

-----  
- DEFINITION DU TYPE DE MAILLAGE  
-----

CALCUL 2D CARTESIEN

-----  
- DIMENSION DU DOMAINE PHYSIQUE ET DU MAILLAGE  
-----

DIM\_MIN -5.D0 0.D0 -7.D0  
DIM\_MAX 15.5D0 1.D0 7.D0  
MAILLAGE 160 0 120

-----  
- GRILLE EXPONENTIELLE PAR SOUS-DOMAINE  
-----

GRILLE EXPO2 NB\_DOMX 4 NB\_DOMY 0 NB\_DOMZ 4  
XDEB -5.D0 XFIN -.475D0 NB\_POINT 40 TYPE 1 TAILLE\_MAIL 5.D-2  
XDEB -.475D0 XFIN .0D0 NB\_POINT 10 TYPE 4 TAILLE\_MAIL 5.D-2  
XDEB .0D0 XFIN .475D0 NB\_POINT 10 TYPE 1 TAILLE\_MAIL 5.D-2  
XDEB .475D0 XFIN 15.D0 NB\_POINT 100 TYPE 4 TAILLE\_MAIL 5.D-2  
ZDEB -8.D0 ZFIN -.475D0 NB\_POINT 50 TYPE 1 TAILLE\_MAIL 5.D-2  
ZDEB -.475D0 ZFIN .0D0 NB\_POINT 10 TYPE 4 TAILLE\_MAIL 5.D-2  
ZDEB .0D0 ZFIN .475D0 NB\_POINT 10 TYPE 1 TAILLE\_MAIL 5.D-2  
ZDEB .475D0 ZFIN 8.D0 NB\_POINT 50 TYPE 4 TAILLE\_MAIL 5.D-2

-----  
- PARAMETRES TEMPORELS DE RESOLUTION  
-----

SCHEMA TEMPS GEA2  
ITERATION TEMPS 1000

-----  
- EQUATIONS RESOLUES  
-----

NAVIER OUI  
TURBULENT RNG OUI

-----  
- CONDITIONS AUX LIMITES  
-----

LIMITE VITESSE INF SYMETRIE  
LIMITE VITESSE SUP SYMETRIE  
LIMITE VITESSE GAUCHE ENTREE 1.D0  
LIMITE VITESSE DROITE LIBRE  
  
LIMITE ENERGIE\_TUR DROITE LIBRE  
LIMITE ENERGIE\_TUR SUP LIBRE  
LIMITE ENERGIE\_TUR INF LIBRE  
LIMITE ENERGIE\_TUR GAUCHE CONSTANTE .0006D0  
  
LIMITE EPSILON DROITE LIBRE  
LIMITE EPSILON SUP LIBRE  
LIMITE EPSILON INF LIBRE  
LIMITE EPSILON GAUCHE CONSTANTE .0000012492D0

## ANNEXE C

```
LIMITE V2          DROITE  LIBRE
LIMITE V2          SUP      LIBRE
LIMITE V2          INF      LIBRE
LIMITE V2          GAUCHE  CONSTANTE .0004D0
```

-----  
- CONDITIONS INITIALES POUR LA VITESSE  
-----

```
INITIALISE VITESSE_X RECTANGLE PT1 -5.D0 -7.D0 PT2 15.5D0 0.D0 VAL
1.1D0
INITIALISE VITESSE_X RECTANGLE PT1 -5.D0 0.D0 PT2 15.5D0 7.D0 VAL
1.D0
```

-----  
- PARAMETRES NUMERIQUES POUR NAVIER-STOKES  
-----

```
PAS_DE_TEMPS NAVIER .1D0
METHODE NAVIER LAGRANGIEN
ITERATION LAGRANGIEN 4
PARAMETRE DP 100.D0
ITERATION BICG NAVIER 30
ITERATION BICG PROJECTION 30
SCHEMA NAVIER HYBRIDE
PRESSION MOTRICE
```

-----  
- PARAMETRES NUMERIQUES POUR LE TURBULENT  
-----

```
PAS_DE_TEMPS TURBULENT .1D0
SCHEMA TURBULENT HYBRIDE
```

-----  
- CHOIX DU FLUIDE  
-----

FLUIDE CARRE

-----  
- CHOIX DES IMPRESSIONS  
-----

```
IMPRESSION AVS_BIN
IMPRESSION POINT X 2.D0 Z 0.D0 ADIM NON
IMPRESSION POINT X 3.D0 Z 0.D0 ADIM NON
IMPRESSION POINT X 4.D0 Z 0.D0 ADIM NON
IMPRESSION COUPE_Z .0D0 ADIM NON DECAL NON
IMPRIME OBSTACLE OUI
IMPRIME SOLVEUR NON
IMPRIME VITESSE 20
IMPRIME PRESSION 20
IMPRIME FCT_COUR 20
IMPRIME VISCO_TUR 20
IMPRIME ENERGIE_TUR 20
IMPRIME EPSILON 20
IMPRIME V2 20
```

-----  
- OBSTACLES  
-----

## ANNEXE C

OBSTACLE PLEXI RECTANGLE PT1 -0.475D0 -0.475D0 PT2 0.475D0 0.475D0

-----  
- ADIMENSIONNEMENT  
-----

ADIM HAUTEUR 1.D0  
ADIM VITESSE 1.D0

**Le fichier ozone.don.** Nous présentons ci-dessous le fichier de données relatif à la résolution de la cinétique du cycle de photostationnaire de l'ozone :

-----  
- DEFINITION DU TYPE DE MAILLAGE  
-----

CALCUL 2D CARTESIEN

-----  
- DIMENSION DU DOMAINE PHYSIQUE ET DU MAILLAGE  
-----

DIM\_MIN 0.D0 0.0D0 0.0D0  
DIM\_MAX 1.D0 1.0D0 1.0D0  
MAILLAGE 2 0 2

-----  
- CHOIX DE LA GRILLE  
-----

GRILLE CONSTANTE

-----  
- PARAMETRES TEMPORELS  
-----

ITERATION TEMPS 200

-----  
- EQUATIONS RESOLUES  
-----

CHIMIE OUI OZONE

INITIALISE VITESSE CONSTANTE 0.D0 ANGLE 0.D0

-----  
- TESTS D'ARRETS  
-----

TEST\_ARRET OUI FREQUENCE 1  
ARRET DUREE 417600.D0

-----  
- IMPRESSION  
-----

IMPRESSION AVS\_BIN  
IMPRESSION AQUILON  
IMPRIME SOLVEUR NON  
IMPRIME CHIMIE 1



## ANNEXE C

-----  
- SUNRISE et SUNSET  
-----

SUNRISE 4.D0  
SUNSET 20.D0  
-----

-----  
- DEBUT DU CALCUL  
-----

TEMPS\_INI 14400  
-----

-----  
- REACTIONS CHIMIQUES  
-----

REACTION NO2 + hv = NO + O : SUN 1.D-5 -7.D0  
REACTION O + (O2) = O3 : CST 1.D5  
REACTION O3 + NO = (O2) + NO2 : CST 1.D-16  
-----

-----  
- INITIALISATION DES ESPECES  
-----

INITIALISE O DOMAINE VAL 0.D0  
INITIALISE NO DOMAINE VAL 1.3D8  
INITIALISE NO2 DOMAINE VAL 5.D11  
INITIALISE O3 DOMAINE VAL 8.D11  
-----

-----  
- EMISSION DES ESPECES  
-----

SOURCE NO DOMAINE VAL 1.D6  
-----

-----  
- SOLVEUR CHIMIE  
-----

PAS\_DE\_TEMPS CHIMIE 7200.D0  
PAS\_DE\_TEMPS CHIMIE\_MAX 900.D0  
PAS\_DE\_TEMPS CHIMIE\_MIN 1.D0  
TOLERANCE\_ABS 1.D0  
TOLERANCE\_REL 1.D-3  
ITERATION BDF 2  
-----

COEFF\_DIFFUSION 1.D-5  
-----

**Le fichier defaut.don.** Nous présentons ci-dessous le fichier des données par défaut :

-----  
- PARAMETRES TEMPORELS  
-----

SCHEMA TEMPS GEA1  
-----

-----  
- EQUATIONS RESOLUES  
-----

NAVIER NON  
NAVIER\_RHO NON  
-----

## ANNEXE C

NAVIER_ENERGIE	NON
DARCY	NON
ENERGIE	NON
TURBULENT KE	NON
TURBULENT RNG	NON
TURBULENT V2F	NON
TURBULENT KL	NON
ADVECTION VOF	NON
ADVECTION TVD	NON
TRANSPORT	NON
PARTICULE	NON
SOLIDE	NON
CHIMIE	NON

-----  
 - PARAMETRES NAVIER-STOKES  
 -----

INCOMPRESSIBLE	OUI
PRESSION	TOTALE
TENSION_SUP	NON

INTERPOLATION	VISCOSITE	LINEAIRE
INTERPOLATION	MASSE	GEOMETRIQUE
INTERPOLATION	PERMEABILITE	GEOMETRIQUE
INTERPOLATION	COMPRESSIBILITE	GEOMETRIQUE

METHODE	NAVIER	PROJECT_VECT
SCHEMA	NAVIER	HYBRIDE
SOLVEUR	NAVIER	MASTER
PRECONDITIONNEMENT	NAVIER	MILU
RESIDU	NAVIER	1.D-15
ITERATION	LAGRANGIEN	2
ITERATION BICG	NAVIER	30
ITERATION BICG	PROJECTION	20
RESIDU	PROJECTION	1.D-15
DIVERGENCE	1.D-15	
PARAMETRE DP	1.D0	

-----  
 - PARAMETRES ENERGIE  
 -----

SCHEMA	ENERGIE	CENTRE
SOLVEUR	ENERGIE	MASTER
PRECONDITIONNEMENT	ENERGIE	MILU
ITERATION BICG	ENERGIE	30
RESIDU	ENERGIE	1.D-15
INTERPOLATION	CONDUCTIVITE	GEOMETRIQUE

-----  
 - PARAMETRES PARTICULE  
 -----

SCHEMA	PARTICULE	TVD
SOLVEUR	PARTICULE	MASTER
PRECONDITIONNEMENT	PARTICULE	MILU
ITERATION BICG	PARTICULE	30
RESIDU	PARTICULE	1.D-15
INTERPOLATION	PARTICULE	GEOMETRIQUE

## ANNEXE C

---

### - PARAMETRES TURBULENT

---

SCHEMA	TURBULENT	HYBRIDE
SOLVEUR	TURBULENT	MASTER
PRECONDITIONNEMENT	TURBULENT	MILU
ITERATION BICG	TURBULENT	30
RESIDU	TURBULENT	1.D-15
INTERPOLATION	TURBULENT	LINEAIRE

---

### - PARAMETRES TRANSPORT

---

SCHEMA	TRANSPORT	HYBRIDE
SOLVEUR	TRANSPORT	MASTER
PRECONDITIONNEMENT	TRANSPORT	MILU
ITERATION BICG	TRANSPORT	30
RESIDU	TRANSPORT	1.D-15
INTERPOLATION	DIFFUSION	LINEAIRE
INTERPOLATION	CARACTERISTIQUE	GEOMETRIQUE

---

### - PARAMETRES ENERGIE

---

SCHEMA	CHIMIE	CENTRE
SOLVEUR	CHIMIE	MASTER
PRECONDITIONNEMENT	CHIMIE	MILU
ITERATION BICG	CHIMIE	30
RESIDU	CHIMIE	1.D-15

---

### - PARAMETRES PHYSIQUES DE REFERENCE

---

REFERENCE	TEMPERATURE	300.D0
REFERENCE	PRESSION	101325.D0

---

### - CHOIX DU FLUIDE

---

FLUIDE AIR

---

### - GRAVITE

---

GRAVITE	9.81D0
INCLINAISON	0.D0

---

### - ADIMENSIONNEMENT

---

ADIM	HAUTEUR	1.D0
ADIM	VITESSE	1.D0
ADIM	TEMPERATURE	1.D0
ADIM	PRESSION	1.D0
ADIM	TRANSPORT	1.D0

---

# BIBLIOGRAPHIE

Acharya S., Dutta S., Myrum T.A. & Baker R.S. (1994). Turbulent flow past a surface-mounted two-dimensional rod. *ASME J. Fluid Eng.*, vol. 116, p238-246.

Ahlvik P., Eggleston S., GoriBen N., Hassel D., Hickman A.J., Joumard R., Ntziachristos L., Rijkeboer R., Samaras Z. & Zierock K.H. (1997). COPERT II Computer programme to calculate emissions from road transport, methodology and emission factor. Technical report N° 6, *European Environment Agency*.

Aida M. (1982). Urban albedo as a function of the urban structure. Part I: a model experiment. Part II: a two dimensional numerical simulation. *Boundary Layer Meteo.*, vol. 23, p405-424.

André J.C., De Moor G., Lacarrère P., Therry G. & du Vachat R. (1978). Modeling the 24-hour evolution of the mean and turbulent structures of the planetary boundary layer. *J.A.S.*, vol. 35, p1861-1883.

André J.C. & Lacarrère P. (1980). Simulation numérique détaillée de la couche limite atmosphérique. Comparaison avec la situation des 2 et 3 juillet 1977 à Voves. *La Météorologie VI*, 22, p5-49.

Aubinet M., 1994. Longwave sky radiation parametrization. *Solar Energy*, vol. 53, n°2, p147-154.

## BIBLIOGRAPHIE

Baer M. & Nester K. (1992). Parametrisation of trace gas dry deposition velocities for a regional mesoscale diffusion model. *Ann. Geophysicae*, vol. 10, p912-023.

Behnia M. et al. (1996). Simulation of jet impingement heat transfer with the  $k-\epsilon-v^2$  model. Center for Turbulence Research. *Annual Research Briefs*, Stanford University.

Boyer H. (1993). Conception thermo-aéraulique de bâtiments multizones – Proposition d'un outil à choix multiple des modèles. *Thèse de l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon*.

Bradley E.F. (1968). A micrometeorological study of velocity profiles and surface drag in the region modified by a change in surface roughness. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, vol. 94, p361-379.

Breil J., 2001. Modélisation du remplissage en propergol de moteur à propulsion solide. *Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I*.

Bugajny C. (1995). Quantification des émissions polluantes d'origine automobile et modélisation des processus de formation de l'ozone dans la ville de Mexico. *Thèse de l'Université des Sciences et de Technologie de Lille*.

Businger J.A., Wyngaard J.C., Izumi Y. & Bradley E.F. (1971). Flux-profile relationship in the atmospheric surface layer. *J. Atmos. Sci.*, vol. 28, p181-189.

Castro I.P. & Robins A.G. (1977). The flow around a surface-mounted cube in a uniform and turbulent streams. *J. Fluid Mech.*, vol. 79, p307-335.

Cautenet G. (1987). Estimation de l'onde de température de surface à partir du flux de conduction thermique dans le sol. *Atmos. Res.*, vol. 21, p7-12.

Charney G., Schon J.P., Alcaraz E. & Mathieu J. (1979). Thermal characteristics of a turbulent boundary layer with an inversion of wall heat flux. *Turbulent Shear Flow I*, Springer-Verlag, p104-118.

Chen H.C. & Patel V.C. (1988). Near-wall turbulence models for complex flows including separation. *AIAA J.*, vol. 26, p641-648.

## BIBLIOGRAPHIE

Chen Y.S. & Kim S.W. (1987). Computation of turbulence flows using an extended k- $\epsilon$  turbulence closure model. *NASA Contractor Report* n° CR-179204.

Chock D.P. & Winkler S.L. (1994). A comparaison of advection algorithms coupled with chemistry. *Atmos. Env.*, vol. 28, n° 16, p2659-2675.

Costes J.P. (1996). Simulations numériques des écoulements atmosphériques sur sols fortement hétérogènes. *Thèse de doctorat de l'Université de Nantes – Ecole Centrale de Nantes*.

Damian-Iordache V. (1996). KPP – Chemistry simulation developpment environment. *Thesis of Master of Science degree in Computer Science, University of Iowa*.

Dargent C. (1996). Contribution à la modélisation de la dispersion de polluants – Étude de sillages autour d'obstacles de forme parallélépipédique. *Thèse de l'INP de Toulouse*.

Delboulbé E. (1997). Simulation numérique des écoulements de couche limite atmosphérique autour de structures bâties. *Thèse de l'Université de la Méditerranée Aix Marseille II*.

Destriau M. et al. (1981). *Cinétique et dynamique chimiques*. Ed Technip.

Driver D.M. & Seegmiller H.L.M. (1985). Features of a reattaching turbulent shear layer in divergent channel flow. *AIAA J.*, vol. 30, n°12, p2968-2970.

Dumoulin J. et al. (1996). Caractérisation de l'écoulement sur une marche descendante : cas test n°1. *Rapport final n°1/2568.00/CERT/DERMES.*, ONERA.

Durbin P. (1991). Near-wall turbulence closure modeling without "damping function". *Theoret. Comput. Fluid Dynamics*, vol. 3, p1-13.

Durbin P. (1995). Separated flow computations with the k- $\epsilon$ - $v^2$  model. *AIAA J.*, vol. 33 (4), p659-664.

Dyer A.J. (1974). A review of flux-profile relationships. *Boundary Layer Meteorol.*, vol. 7, p363-372.

EIIP (1997). Introduction to the emission inventory improvement program. Emission inventory improvement program, volume I. Eastern Research Group, Inc.

## BIBLIOGRAPHIE

Erbs D.G., Klein S.A. & Duffie J.A. (1982). Estimation of the diffuse radiation fraction for hourly, daily and monthly average global radiation. *Solar Energy*, vol. 28, p293-302.

Favre A., Kovaszny L.S.G., Dumas R., Gaviglio J. & Coantic M. (1976). *La turbulence en mécanique des fluides*. Ed Gauthier-Villars

Fassi Fihri A. (1996). Les systèmes différentiels raides en modélisation de la chimie atmosphérique. *Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse*.

Ficini J. et al. (1986). *Structure de la matière ; Cinétique chimique*. Ed Hermann Paris, Collection Méthodes.

Finlayson-Pitts B.J. & Pitts J.N. (1986). Atmospheric chemistry : fundamentals and experimental techniques. John Wiley & Sons.

Fortin M., Glowinski R. (1982). *Méthodes de lagrangien augmenté. Applications à la résolution de problèmes aux limites*. Collection Méthodes Mathématiques de l'Informatique. Ed Dunot.

Foudhil H. (2000). Modélisation numérique de la couche limite atmosphérique en stratification thermique. Congrès Français de Thermique, SFT 2000, Lyon 15-17 mai 2000.

Franceries E. (1992). Simulation et formalisation d'un concept empirique de gestion dynamique des feux tricolores d'un réseau urbain. *Thèse en informatique de l'Université Bordeaux I*.

Ftp site at the Center for Global and Regional Environmental Research (1996). University of Iowa. ftp.cger.uiowa.edu ; cd pub/de\_benchmark ; mget \*.

Gao W. & Wesely M.L. (1994). Numerical modeling of the turbulent fluxes of chemically reactive trace gases in the atmospheric boundary layer. *Journal of Applied Meteorology*, vol. 33, p835-847.

Gao W. & Wesely M.L. (1995). Modeling gaseous dry deposition over regional scales with satellite observations – I – Model development. *Atmos. Environ.*, vol. 29, p727-737.

## BIBLIOGRAPHIE

Gear C.W. (1971). Numerical initial value problems on ordinary differential equations, *Prentice-Hall series in automatic computation*.

Gery M. W., Whitten G.Z., Killus J.P. & Dodge M.C. (1989). A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling. *Journal of Geophysical Research*, vol. 94, p12925-12956.

Glockner S., Caltagirone J.P. & Morel P. (1999). Modélisation d'écoulements dans des espaces urbains. *Int. J. Therm. Sci.*, vol. 38, p703-731.

Groleau D. & Marenne C. (1992). Évaluation géométrique des facteurs de forme dans une scène avec prise en compte des masques et de l'ensoleillement. *Journée d'étude de la SFT du 25 mars*.

Guilloteau Emmanuel (1999). Modélisation des sols urbains pour les simulations de l'atmosphère aux échelles sub-méso. *Thèse de doctorat de l'Université de Nantes, Ecole Centrale de Nantes*.

Hamba F. (1993). A modified K model for chemically reactive species in the planetary boundary layer. *Journal of Geophysical Research*, vol. 98, N° D3, p5173-5182.

Ha Min H. (1993). *Mécanique des fluides numériques. Physique et modélisation de la turbulence*. École de Printemps, Carcans Maubuisson.

Hairer E. & Wanner G. (1991). *Solving ordinary differential equations II. Stiff and differential-algebraic problems*. Springer-Verlag.

Hicks B.B., Baldocchi D.D., Meyers T.P., Hosker J.R. & Matt D.R. (1987). A preliminary multiple resistance routine for deriving dry deposition velocities from measured quantities. *Water, Air, and Soil Pollution*, vol 36, p311-330.

Hirsch C. (1990). Numerical computation of internal and external flows. *John Wiley and sons*.

Högström U. (1996). Review of some basic characteristics of the atmosphere surface layer. *Boundary Layer Meteorol.*, vol. 78, p215-246.



## BIBLIOGRAPHIE

Hov O., Zlatev Z., Berkowicz R., Eliassen A. & Prahm L. (1989). Comparaison of numerical techniques for use in air pollution models with non-linear chemical reactions. *Atmos. Env.*, vol. 23, n° 5, p967-983.

Kim J.J. (1978). Investigation of separation and reattachment of a turbulent shear layer : flow over a backward facing step. *Ph.D. Thesis, Stanford University*.

Kumar N. & Russel A. G. (1996). Development of a computationally efficient, reactive subgrid-scale plume model and the impact in the northeastern United States using increasing levels of chemical detail. *Journal of Geophysical Research*, vol. 101, N° D11, p16737-16744.

Hwang R.R., Chow Y.C. & Peng Y.F. (1999). Numerical study of turbulent flow over two-dimensional surface-mounted ribs in a channel. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, vol 31, p767-785.

Idso S.B. & Jackson R.D. (1969). Thermal radiation from the atmosphere. *J. Geophys. Res.*, vol. 74, p3397-3403.

Jacquemin B. & Noilhan J. (1990). Sensitivity study and validation of a land surface parametrization using the HAPEX-MOBILHY data set. *Boundary Layer Met.*, vol. 52, 93-134.

Jiménez J.I., Alados-Arboledas L., Castro-Diéz Y. & Ballester G. (1987). On the estimation of long-wave radiation flux from clear skies. *Theor. Appl. Climatol.*, vol. 38, p37-42.

Jones W.P. & Launder B.E. (1972). The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *Int. J. Heat Transfer*, vol. 15, p301-313.

Joumard R. (1999). Methods of estimation of atmospheric emissions from transport : european scientist network and scientific state-of-the-art. Action COST 319 final report. *INRETS*.

Kim J.J. (1978). Investigation of separation and reattachment of a turbulent shear layer : flow over a backward facing step. *Ph.D. Thesis, Stanford University*.

## BIBLIOGRAPHIE

Launder B.E., Reynolds W.C., Rodi W., Mathieu J. & Jeandel D. (1984). Turbulence models and their applications. Collection de la direction des études et recherches d'Electricité de France, vol. 1 et 2, Ed. Eyrolles.

Launder B.E. & Spalding D.B. (1974). The numerical computation of turbulent flows. *Computer Meth. in Applied Mechanics and Eng.*, vol. 3, p269-289.

Le H. , Moin P. & Kim J. (1993). Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step. *Thermosciences Div., Dept. Of mechanical Engineering, Rept. TF58*, Stanford University.

Lyn D.A. & Rodi W. (1994). The flapping shear layer formed by flow separation from the forward corner of a square cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 267, p353-376.

Lyn D.A., Einav S., Rodi W. & Park J.H. (1995). A laser-doppler velocimetry study of ensemble average characteristic of the turbulent near wake of a square cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 304, p285-319.

Khadra K. (1994). Méthodes adaptatives de raffinement local multigrille. Applications aux équations de Navier-Stokes et de l'énergie. *Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I*.

Kim J.J. (1978). Investigation of separation and reattachment of a turbulent shear layer : flow over a backward facing step. *PhD. Thesis, Stanford Univ.*

Kreith, F.K. (1967). *Transmission de la chaleur et thermodynamique*. Masson et C<sup>ie</sup> Editeurs.

Kreith F. (1962). *Radiation heat transfer for spacecraft and solar power plant design*. International text book company. Scranton, Pennsylvania.

Lebru A. (1983). Estimation des irradiances solaires horaires dans un plan quelconque à partir de la donnée de l'irradiation horaire globale (et éventuellement diffuse) horizontale. *Cahiers du CSTB*, n°239, cahier 1847, 39p.

Lesieur M. (1994). *La turbulence*. Ed Presse Universitaires de Grenoble.

## BIBLIOGRAPHIE

LeVeque R.J. (1990). Numerical methods for conservation laws. *Lecture in Mathematics*, ETH Zurich, Birkhauser.

Levi-Alvares S. (1991). Simulation numérique des écoulements urbains à l'échelle d'une rue à l'aide du modèle k- $\epsilon$ . *Thèse de l'Université de Nantes*, École Centrale de Nantes.

van Loon M. (1995). Numerical smog prediction I : the physical and chemical model. *CWI report NP-R9411*, Mathematics and Computer Science, Amsterdam.

Lyn D.A., Einav S., Rodi W., Park J.H., 1995. A laser-doppler-velocimetry study of ensemble-averaged characteristics of the turbulent near wake of a square cylinder. *J. Fluid Mech.*, vol 304, p285-319.

Lyn D.A. & Rodi W., 1994. The flapping separated shear layer formed by flow separation from the forward corner of a square cylinder. *J. Fluid Mech.*, vol. 267, p353-376.

Maalej A. (1997). Modélisation couplée dynamique-physicochimie de la pollution atmosphérique dans la région de Sfax (Tunisie). *Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse III*.

Martinuzzi R. & Tropea C. (1993). The flow around surface-mounted, prismatic obstacles placed in a fully developed channel flow. *Journal of Fluid Engineering*, march 1993, vol. 15, p85-92.

Maxwell E.L. (1987). A quasi physical model for converting hourly global horizontal to direct normal insolation. *Report SERI/TR-215-3087*, Solar Energy Research Institute, Golden, CO.

Melbourne W.H. (1993). Turbulence and the leading edge phenomenon. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 49, p45-64.

Mestayer G. & Anquetin S. (1995). Diffusion and transport of pollutants in atmospheric mesoscale fields, part VII Climatology of Cities. A. Gyr and F.S. Rys (eds) *ERCOFTAC series I*, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands. p165-189.

Monteith J.L. (1973). *Principles of Environmental Physics*. Edward Arnold, London.

## BIBLIOGRAPHIE

de Moor G. (1983). *Les théories de la turbulence dans la couche limite atmosphérique*. Ed Ministère des Transports, direction de la météorologie, 312 p.

Moss W.D. & Baker S. (1980). Re-circulation flows associated with two-dimensional steps. *Aeronautical Quarterly*, August 1980, p151-172.

Nowak U. (1982). A short user's guide to LARKIN. Technical report, Konrad-Zuse Zentrum fuer, Informationstechnik Berlin.

Oke T.R. (1988). Street design and urban canopy layer climate. *Energy and Buildings*, vol. 11, p103-113

Oke T.R. & Fuggle R.F. (1972). Comparaison of urban/rural counter and net radiation at night. *Boundary Layer Meteo.*, vol. 2, p290-308.

Oke T.R. (1987). *Boundary Layer Climates*. Methuen and Co. Ltd., London, 2<sup>nd</sup> edn..

Orgill J.F. & Hollands K.G.T. (1976). Correlation equation for hourly diffuse radiation on a horizontal surface. *Solar Energy*, vol. 19.

Orlanski I. (1975). A rational subdivision of scales for atmospheric processes. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, vol. 56, p529-530.

Parneix S. (1995). Simulation des écoulements turbulents et des transferts thermiques en vue de l'optimisation du refroidissement des pales de turbine. *Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I*.

Patankar S.V. (1980). Numerical heat transfer and fluid flow. Series in computational methods in mechanics and thermal sciences, Hemisphere Publishing Corporation.

Perez R. et al. (1987). A new simplified version of the Perez diffuse irradiance model for tilted surfaces. *Solar Energy*, vol. 39 n°3, p221-231.

Perez R., Seals R., Zelenka A. & Ineichen P. (1990a). Climatic evaluation of models that predict hourly direct irradiance from hourly global irradiance : prospects for performance improvements. *Solar Energy*, vol. 44 N°2, p99-108.

## BIBLIOGRAPHIE

Perez R. et al. (1990b). Modeling daylight availability and irradiance components from direct and global irradiance. *Solar Energy*, vol. 44 N°5, p271-289.

Perez R. et al. (1992). Dynamic global-to-direct irradiance conversion models. *ASHRAE Transactions*, New York, vol. 98, part 1, p354-369.

Pielke R.A. (1984). *Mesoscale Meteorological Modeling*. Academic Press.

Pignolet-Tardent F. (1996). Milieu thermique et conception urbaine en climat tropical humide – Modélisation thermo-aéraulique globale, *Thèse de l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon*.

RACM (Regional Atmospheric Chemical Mechanism). Site internet : <http://physchem.ox.ac.uk/sbox>.

Richard N. (1992). Modélisation des écoulements tridimensionnels turbulents dans une pale de turbine. *Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I*.

Rodi W., 1995. Simulation of flow past buildings with statistical turbulence models. *Wind Climates in Cities*, p649-668, Kluwer Academics Publishers.

Rodi W., Ferziger J.H., Breuer M., Pourquié M. (1997). Status of large eddy simulation : results of a workshop. *ASME J. Fluid Eng.*, vol. 119(2), p248-262.

Rotach M.W.J. (1991). Turbulence within and above an urban canopy. *Diss. ETH 9439, publ as SGS 45, vdf, Zurich, 245p*.

Sandu A., Verwer J.G., van Loon M., Carmichael G.R., Potra F.A., Dabdub D. & Seinfeld J.H. (1996). Benchmarking stiff ODE solvers for atmospheric chemistry problems I : implicit versus explicit. *Report on computational mathematics, NO. 85/1996*, departement of mathematics, the University of Iowa. (Site internet)

Sandu A., Verwer J.G., van Loon M., Spee E.J., Carmichael G.R., Potra F.A. & Dabdub D. (1997). Benchmarking stiff ODE solvers for atmospheric chemistry problems II : Rosenbrock solvers. *Report on computational mathematics, NO. 85/1996*, departement of mathematics, the University of Iowa. (Site internet)

## BIBLIOGRAPHIE

Schiestel R. (1993). *Modélisation et simulation des écoulements turbulents*. Traité des nouvelles technologies, série mécanique, Éd Hermès.

Seinfeld J. H. (1986). *Atmospheric chemistry and physics of air pollution*, John Wiley & Sons.

Suhre K. (1994). Modélisation couplée du transport et de la chimie du diméthyl de soufre dans la couche limite marine nuageuse. Impact climatique et étude de processus. *Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse III*.

Siegel R. & Howell J.R. (1981). *Thermal radiation heat transfer*. Mc Graw, Hill Book Company.

Skartveit A. & Olseth J.A. (1987). A model for the diffuse fraction of hourly global radiation. *Solar Energy*, vol. 38, p271-274.

Smagorinski J. (1974). *Global atmospheric modeling and the numerical simulation of climate*. In HESS, W.N. (ed.), *Weather and Climate Modification*, Wiley, New-York.

Stull R.B. (1988). *An introduction to boundary layer meteorology*. Atmospheric Sciences Library, Kluwer Academic Publishers.

Terjung W.H. & O'Rourke P.A. (1980). Simulating the causal elements of urban heat islands. *Boundary Layer Meteorology*, vol. 19, p93-118.

Thebault J.F. (1995). Modélisation des transports de constituants intervenant dans les écoulements diphasiques gaz-eau en milieu poreux – Application aux stockages de gaz naturel en nappe aquifère. *Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I*.

Turbelin G. (2000). Modélisation de la turbulence atmosphérique en vue de l'étude du chargement aérodynamique des structures soumises aux effets du vent. *Thèse de doctorat, Université d'Evry Val d'Essonne*.

Verwer J.G. (1994). Gauss-Seidel iterations for stiff ODEs from chemical kinetics. *SIAM Journal of Scientific Computing*, vol. 15, p1243-1250.

## BIBLIOGRAPHIE

Verwer J.G., Blom J.G., van Loon M. & Spee E.J. (1996). A comparison of stiff ODE solvers for atmospheric chemistry problems. *Atmospheric environment*, vol. 30, n° 1, p49-58.

Vincent S. & Caltagirone J.P. (2000). A one-cell local multigrid method for solving unsteady incompressible multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, vol. 63, p172-215.

van der Vorst H.A. (1992). A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of non symmetric linear system. *SIAM J. Sci. Statis. Comput.*, vol. 13, p631-644.

Yakhot V. & Smith L.M. (1992). The renormalization group, the  $\varepsilon$ -expansion and derivation of turbulence models. *J. Sci. Comput.*, vol. 7, p35-61.

Yee H.C. (1987). Upwind and symmetric shock-capturing schemes. *NASA*.

Zhang C.X. (1991). Simulation numérique d'écoulements turbulents autour d'obstacles, *Thèse de l'Université de Nantes, École Centrale de Nantes*.





## **Résumé :**

La pollution générée par la circulation automobile au cœur de la ville ainsi que par les activités industrielles à sa périphérie est un problème aigu des grandes cités. 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. Nous avons choisi de travailler à la fois sur les aspects dynamiques, thermiques et chimiques de la pollution et ce aux différentes échelles des phénomènes : l'échelle locale autour d'un groupe de bâtiments et la méso-échelle pour la modélisation complète d'une ville. Notre ambition n'est pas de réaliser un modèle complet mais d'avancer pas à pas sur chacun de ces aspects. Nous avons participé au développement d'un code de calcul qui pourra ensuite être complété et utilisé pour des études plus concrètes d'épisodes de pollution. Le premier chapitre est consacré à une description de la couche limite atmosphérique. Les chapitres deux et trois présentent les modèles utilisés et le résultat de simulations numériques. Nous insistons particulièrement sur les modèles de turbulence  $k-\epsilon$ , RNG et  $v^2-f$ , sur les modèles de rayonnement ainsi que les lois de paroi dynamiques et thermiques permettant la prise en compte de la rugosité de surface. Le dernier chapitre est consacré à la chimie de l'atmosphère. Nous avons également développé un solveur général traitant un nombre quelconque d'équations de transport couplées par une cinétique chimique raide ainsi qu'une cinétique simplifiée de l'ozone.

*Mots-clés :* pollution, ville, modélisation, atmosphère, bâtiment, turbulence, rayonnement, chimie, ozone, couche limite

## **Summary :**

Pollution generated by urban traffic and by industry at its periphery is a serious problem of our cities. Once emitted in the atmosphere, pollutants undergo two types of constraints: on one side they react chemically one with another and, on the other side, they are transported by the wind. We have chosen to work on the dynamical, thermal and chemical aspects of the pollution at different scales of the phenomena: local scale (around a group of buildings) and meso-scale (a whole city). Our ambition is not to realize a complete model but to advance step by step on each aspect. We have contributed to the realization of a numerical tool that will be completed and used for concrete pollution episodes. The first chapter is a description of the atmospheric boundary layer. Chapters two and three present models and results of numerical simulations. We stress on  $k-\epsilon$ , RNG and  $v^2-f$  turbulence models, radiative heat transfer models and dynamical and thermal wall laws that allow to take in consideration surface roughness. The last chapter is dedicated to atmospheric chemistry. We have moreover developed a general solver of any number of transport equations coupled by a stiff chemistry and simplified ozone kinetics.

*Key words:* pollution, city, modeling, atmosphere, building, turbulence, radiative heat transfer, chemistry, ozone, boundary layer