




UNIVERSITÉ PARIS-EST

École doctorale n°531 : Science, Ingénierie et Environnement

Thèse de doctorat

Spécialité : **Sciences et Techniques de l'Environnement**

soutenue par

Meïssam Bahlali

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'Université Paris-Est

Adaptation de la modélisation hybride eulérienne/lagrangienne stochastique de *Code_Saturne* à la dispersion atmosphérique de polluants à l'échelle micro-météorologique et comparaison à la méthode eulérienne

---

soutenue le 19 octobre 2018
devant le jury composé de :

Mme Mireille Bossy	INRIA Sophia Antipolis	**Rapporteur**
M. Philippe Drobinski	Ecole Polytechnique	**Rapporteur, Président du jury**
M. Jacques Moussafir	ARIA Technologies	**Examinateur**
M. Bertrand Carissimo	CEREA	**Directeur de thèse**
M. Eric Dupont	EDF R&D	**Co-encadrant**
M. Jean-Marc Lacome	INERIS	**Invité**

À mes parents,
et à mes deux petits frères,

Remerciements

Je remercie chaleureusement Mireille Bossy et Philippe Drobinski de m'avoir fait l'honneur d'être rapporteurs de ma thèse. Je suis très reconnaissante pour les suggestions et conseils précieux, ainsi que les discussions très intéressantes qui m'auraient presque donné envie de commencer une deuxième thèse sur le sujet !

Je tiens à remercier Jacques Moussafir et Jean-Marc Lacome d'avoir accepté d'être membres du jury de ma thèse. Je remercie Jacques pour avoir aussi été un membre de mon comité de suivi, et Jean-Marc que j'ai rencontré lors d'échanges scientifiques durant ma thèse. Merci beaucoup pour les échanges qui ont toujours été très fructueux.

Je remercie Bertrand Carissimo d'avoir dirigé mes travaux de thèse et de m'avoir ainsi donné l'opportunité de mener à bien un projet qui me tenait à cœur. Je le remercie pour la confiance qu'il m'a accordée ainsi que pour son suivi régulier et ses conseils.

Je tiens à remercier Eric Dupont, mon encadrant industriel à EDF R&D, pour avoir encadré mes travaux avec attention et grande gentillesse. Merci beaucoup pour la bienveillance, les discussions fructueuses et les conseils avisés tout au long de ma thèse.

Je souhaite remercier Jean-Pierre Minier, qui malgré l'aspect non officiel, a encadré une bonne partie de mes travaux de recherche. Cela a été un grand plaisir de travailler sur ces sujets, et je suis très reconnaissante pour tout ce que j'ai pu apprendre. Son expertise scientifique et l'aide qu'il m'a apportée ont été pour moi cruciales.

Merci à l'équipe de direction du CEREA, du département MFEE et du groupe Environnement Atmosphérique d'EDF, Christian Seigneur, Pietro Bernardara, Laurent Martin et Marie Berthelot, de m'avoir accueillie dans leurs équipes et de m'avoir permis de réaliser mon doctorat dans les meilleures conditions. Je remercie Evelyne Landrieux, chef du projet dans lequel ma thèse s'est inscrite, pour sa gentillesse et son enthousiasme à m'impliquer dans la compréhension des enjeux industriels de mes travaux.

Je remercie Christophe Henry de m'avoir accompagnée sur certains sujets de ma thèse. Je suis très reconnaissante pour le temps qu'il a passé à travailler avec moi, toujours avec patience et gentillesse. Merci pour les bonnes idées, la pédagogie, et le déblocage de certaines situations compliquées !

J'aimerais aussi remercier Pasquale Franzese, Lionel Soulhac, Martin Ferrand et

Denis Wendum qui ont été membres de mon comité de suivi de thèse. Leur compétence scientifique et le temps passé à m'apporter aide et conseils avisés ont été précieux.

Mes remerciements vont également à toutes les personnes qui m'ont aidée d'une manière ou d'une autre tout au long de ma thèse. Merci à l'équipe de développement *Code_Saturne*, en particulier Yvan, Martin, Erwan, Jérôme B., Jean-François, Nicolas, qui n'ont pas hésité à m'apporter leur aide à de nombreuses reprises. Merci également à Mathieu qui s'est aussi bien amusé avec les particules durant sa thèse il y a quelques années et qui m'est venu en aide bien plus d'une fois. Je remercie aussi Denis et Raphaël côté groupe atmosphérique pour leur aide sur plusieurs sujets techniques.

Merci à l'ensemble du département MFEE et du CEREA pour leur accueil et les bons moments partagés. Une pensée particulière pour Arièle qui a été une formidable rencontre humaine, Eric J. pour les balades à la foire de Chatou, Clément B. pour les petites blagues au détour d'un café, Ali qui a partagé mon bureau pendant un an et demi. Un grand merci à Chantal V., Agnès D., Véronique D., Anne P. et Chantal B.

J'adresse une grande dédicace à toute l'équipe des doctorants du département MFEE. Merci pour la bonne ambiance et les belles rencontres, dont je ne garderai que de joyeux souvenirs. J'ai une pensée particulière pour Solène, et pour la team du premier étage qui se reconnaîtra : Riccardo, Clément, Gaëtan et William. Merci beaucoup d'avoir égayé mes derniers mois de thèse, période loin d'être la plus facile dans ce long fleuve pas tranquille du tout qu'est le doctorat. :)

Je souhaite remercier Javier Jiménez Fernández, professeur à l'Université Polytechnique de Madrid et encadrant de mon travail en 2014, qui est l'une de ces rencontres humaines d'une vie. Sa passion pour la recherche, communicative, a été un élément déclencheur dans ma volonté de démarrer une thèse. Gracias por todo, Javier. Espero que nos veamos otra vez muy pronto por Madrid.

Enfin, j'aimerais adresser de profonds remerciements à mes amis. A ceux qui m'accompagnent depuis la plus tendre enfance voire la naissance, Ambrine, Mehdi, Nicolas, Salomé, Sandra. A ces amitiés inestimables, Hong Anh et Diletta. Merci d'avoir toujours été là, et de m'avoir épaulée au travers des diverses crises qu'occasionne parfois une thèse ! Une pensée à mes amis du collège, de la prépa, de Madrid, à la team choup' de Grenoble. Une petite dédicace au Mel, Mich & Martin (Paris 11^e) et aux bibliothèques de Jussieu pour m'avoir chaleureusement accueillie lors de (parfois très) longues journées de travail.

Pour terminer, je remercie profondément mes parents, ainsi que mes deux petits frères. Au-delà de la thèse, et de l'ensemble de mes études pour lesquelles je leur suis infiniment reconnaissante, je les remercie pour leur soutien indéfectible, et pour leur présence à mes côtés lors de toutes les épreuves de ces 25 années passées. C'est à eux que cette thèse est dédiée aujourd'hui.

Résumé

Résumé en français

Cette thèse s'inscrit dans un projet de modélisation numérique de la dispersion atmosphérique de polluants à travers le code de mécanique des fluides numérique *Code_Saturne*. L'objectif est de pouvoir simuler la dispersion atmosphérique de polluants en environnement complexe, c'est-à-dire autour de centrales, sites industriels ou en milieu urbain. Dans ce contexte, nous nous concentrons sur la modélisation de la dispersion des polluants à micro-échelle, c'est-à-dire pour des distances de l'ordre de quelques mètres à quelques kilomètres et correspondant à des échelles de temps de l'ordre de quelques dizaines de secondes à quelques dizaines de minutes : on parle de modélisation en champ proche.

L'approche suivie dans ces travaux de recherche suit une formulation hybride eulérienne/lagrangienne, où les champs dynamiques moyens relatifs au fluide porteur (pression, vitesse, température, turbulence) sont calculés via une approche eulérienne et sont ensuite fournis au solveur lagrangien. Ce type de formulation est couramment utilisé dans la littérature atmosphérique pour son efficacité numérique. Le modèle lagrangien stochastique considéré dans nos travaux est le *Simplified Langevin Model* (SLM), développé par Pope (1985, 2000). Ce modèle appartient aux méthodes communément appelées méthodes PDF (Probability Density Function), et, à notre connaissance, n'a pas été exploité auparavant dans le contexte de la dispersion atmosphérique.

Premièrement, nous montrons que le SLM respecte le critère dit de mélange homogène (Thomson, 1987). Ce critère, essentiel pour juger de la bonne qualité d'un modèle lagrangien stochastique, correspond au fait que si des particules sont initialement uniformément réparties dans un fluide incompressible, alors elles doivent le rester. Nous vérifions le bon respect du critère de mélange homogène pour trois cas de turbulence inhomogène représentatifs d'une large gamme d'applications pratiques : une couche de mélange, un canal plan infini, ainsi qu'un cas de type atmosphérique mettant en jeu un obstacle au sein d'une couche limite neutre. Nous montrons que le bon respect du critère de mélange homogène réside simplement en la bonne introduction du terme de

gradient de pression en tant que terme de dérive moyen dans le modèle de Langevin (Pope, 1987; Minier et al., 2014; Bahlali et al., 2018c). Nous discutons parallèlement de l'importance de la consistance entre champs eulériens et lagrangiens dans le cadre de telles formulations hybrides eulériennes/lagrangiennes.

Ensuite, nous validons le modèle dans le cas d'un rejet de polluant ponctuel et continu, en conditions de vent uniforme et turbulence homogène. Dans ces conditions, nous disposons en effet d'une solution analytique nous permettant une vérification précise. Nous observons que dans ce cas, le modèle lagrangien discrimine bien les deux différents régimes de diffusion de champ proche et champ lointain, ce qui n'est pas le cas d'un modèle eulérien à viscosité turbulente (Bahlali et al., 2018b).

Enfin, nous travaillons sur la validation du modèle sur plusieurs campagnes expérimentales en atmosphère réelle, en tenant compte de la stratification thermique de l'atmosphère et de la présence de bâtiments. Le premier programme expérimental considéré dans nos travaux concerne le site du SIRTA (Site Instrumental de Recherche par Télédétection Atmosphérique), dans la banlieue sud de Paris, et met en jeu une stratification stable de la couche limite atmosphérique. La seconde campagne étudiée est l'expérience MUST (Mock Urban Setting Test). Réalisée aux Etats-Unis, dans le désert de l'Utah, cette expérience a pour but de représenter une ville idéalisée, au travers d'un ensemble de lignées de conteneurs. Deux rejets ont été simulés et analysés, respectivement en conditions d'atmosphère neutre et stable (Bahlali et al., 2018a).

Résumé en anglais

This Ph.D. thesis is part of a project that aims at modeling pollutant atmospheric dispersion with the Computational Fluid Dynamics code *Code_Saturne*. The objective is to simulate atmospheric dispersion of pollutants in a complex environment, that is to say around power plants, industrial sites or in urban areas. In this context, the focus is on modeling the dispersion at micro-scale, that is for distances of the order of a few meters to a few kilometers and corresponding to time scales of the order of a few tens of seconds to a few tens of minutes : this is also called the near field area.

The approach followed in this thesis follows a hybrid Eulerian/Lagrangian formulation, where the mean dynamical fields relative to the carrier fluid (pressure, velocity, temperature, turbulence) are calculated through an Eulerian approach and are then provided to the Lagrangian solver. This type of formulation is commonly used in the atmospheric literature for its numerical efficiency. The Lagrangian stochastic model considered in our work is the *Simplified Langevin Model* (SLM), developed by Pope (1985, 2000). This model belongs to the methods commonly referred to as PDF (Probability Density Function) methods, and, to our knowledge, has not been used before in the context of atmospheric dispersion.

First, we show that the SLM meets the so-called well-mixed criterion (Thomson, 1987). This criterion, essential for any Lagrangian stochastic model to be regarded as acceptable, corresponds to the fact that if particles are initially uniformly distributed in an incompressible fluid, then they must remain so. We check the good respect of the well-mixed criterion for three cases of inhomogeneous turbulence representative of a wide range of practical applications : a mixing layer, an infinite plane channel, and an atmospheric-like case involving an obstacle within a neutral boundary layer. We show that the good respect of the well-mixed criterion lies simply in the good introduction of the pressure gradient term as the mean drift term in the Langevin model (Pope, 1987; Minier et al., 2014; Bahlali et al., 2018c). Also, we discuss the importance of consistency between Eulerian and Lagrangian fields in the framework of such Eulerian/Lagrangian hybrid formulations.

Then, we validate the model in the case of continuous point source pollutant dispersion, under uniform wind and homogeneous turbulence. In these conditions, there is an analytical solution allowing a precise verification. We observe that in this case, the Lagrangian model discriminates well the two different near- and far-field diffusion regimes, which is not the case for an Eulerian model based on the eddy-viscosity hypothesis (Bahlali et al., 2018b).

Finally, we work on the validation of the model on several experimental campaigns in real atmosphere, taking into account atmospheric thermal stratification and

the presence of buildings. The first experimental program considered in our work has been conducted on the 'SIRTA' site (*Site Instrumental de Recherche par Télédétection Atmosphérique*), in the southern suburb of Paris, and involves a stably stratified surface layer. The second campaign studied is the MUST (Mock Urban Setting Test) experiment. Conducted in the United States, in Utah's desert, this experiment aims at representing an idealized city, through several ranges of containers. Two cases are simulated and analyzed, respectively corresponding to neutral and stable atmospheric stratifications (Bahlali et al., 2018a).

Table des matières

Résumé iii

Table des matières vii

Liste des symboles ix

Introduction 1

1 Structure et dynamique de l'atmosphère 4
- 1.1 Introduction à la pollution atmosphérique . . . 5
- 1.2 Structure de l'atmosphère . . . 8
- 1.3 Couche limite atmosphérique . . . 10
- 1.4 Dynamique de l'atmosphère . . . 11

2 Modélisation de la dispersion atmosphérique : généralités 24
- 2.1 Mécanismes de la dispersion atmosphérique . . . 25
- 2.2 Techniques de modélisation de la dispersion turbulente . . . 27

3 Modélisation lagrangienne stochastique de la dispersion 37
- 3.1 Modélisation lagrangienne de la dispersion turbulente . . . 38
- 3.2 Modèles lagrangiens de la littérature atmosphérique . . . 53
- 3.3 Notre stratégie de modélisation . . . 59

4 Etude numérique de la dispersion avec *Code_Saturne* 61
- 4.1 Présentation générale de *Code_Saturne* . . . 62
- 4.2 Mise en données numérique . . . 63
- 4.3 Cas du rejet ponctuel continu en vent uniforme, turbulence homogène . . . 80

5 Article soumis à *Atmospheric Environment* 88
- 5.1 Article . . . 88
- 5.2 Complément . . . 134

6 Validation en conditions réelles : le SIRTA **139**
6.1 Présentation du programme expérimental 140
6.2 Modélisation numérique 143
6.3 Conclusions et perspectives 159

7 Article soumis à *International Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* **161**
7.1 Article 161
7.2 Complément 191

Conclusions et perspectives **194**

A Relation entre échelles eulérienne et lagrangienne **200**

B Article accepté dans *International Journal of Environment and Pollution* **205**

Bibliographie **234**

Liste des symboles

Lettres latines

c	Concentration	kg/kg
C_0	Constante universelle (modèle lagrangien)	-
C_D	Coefficient de traînée	-
C_p	Chaleur massique à pression constante	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
$C_\mu, C_{\epsilon 1}, C_{\epsilon 2}$	Constantes du modèle $k-\epsilon$	-
D	Coefficient de diffusion moléculaire	$m.^2.s^{-1}$
D_p	Diamètre de la particule	m
dd	Direction du vent horizontale	deg
$\mathbf{F}$	Forces extérieures	N
F	Fonction de répartition	-
f	Fonction de densité de probabilité	-
ff	Norme de la vitesse du vent horizontale	$m.s^{-1}$
f_p	Fréquence d'injection de la particule	s^{-1}
G_{ij}	Matrice du GLM	$m.s^{-2}$
$\mathbf{g}$	Accélération de la pesanteur	$m.s^{-2}$
I	Intensité turbulente	-
k	Energie cinétique turbulente	$m.^2.s^{-2}$

K_x	Coefficient de diffusion turbulente de la variable x	$\mathrm{m.^2.s^{-1}}$
L_{MO}	Longueur de Monin-Obukhov	m
m_p	Masse de la particule	kg
N	Nombre de particules	-
P	Pression	Pa
Pr_t	Nombre de Prandtl turbulent	-
q	Humidité spécifique	-
Q_0	Flux de chaleur au sol	$\mathrm{W.m^{-2}}$
R	Constante spécifique de l'air sec (= 287.05)	$\mathrm{J.kg^{-1}.kg^{-1}}$
R^*	Constante absolue des gaz parfaits (= 8.314)	$\mathrm{J.K^{-1}.mol^{-1}}$
Re	Nombre de Reynolds	-
Re_p	Nombre de Reynolds particulaire	-
Sc_t	Nombre de Schmidt turbulent	-
t	Temps	s
T_E	Echelle de temps intégrale eulérienne	s
T_L	Echelle de temps intégrale lagrangienne	s
u_*	Vitesse de friction à la paroi	$\mathrm{m.s^{-1}}$
$\mathbf{U}_f$	Vitesse du fluide porteur	$\mathrm{m.s^{-1}}$
$\mathbf{U}_p$	Vitesse de la particule	$\mathrm{m.s^{-1}}$
$\mathbf{U}_s$	Vitesse du fluide vu par la particule	$\mathrm{m.s^{-1}}$
W	Processus de Wiener	-
W_p	Poids statistique associé à la particule	-
$\mathbf{X}_p$	Position de la particule	m
x, y, z	Coordonnées cartésiennes	m
z_0	Rugosité aérodynamique	m
z_T	Rugosité thermique	K

Lettres grecques

β	Ratio entre échelles de temps eulérienne et lagrangienne	-
Γ	Gradient de température adiabatique (= -9.8)	$K.km^{-1}$
δ_{ij}	Symbole de Kronecker	-
ϵ	Dissipation de l'énergie cinétique turbulente	$m^2.s^{-3}$
θ	Température potentielle	K
θ_*	Température potentielle de frottement	K
κ	Constante de Von Karman (= 0.4)	-
μ	Viscosité dynamique	$kg.m.^{-1}.s^{-1}$
μ_t	Viscosité dynamique turbulente	$kg.m.^{-1}.s^{-1}$
ν	Viscosité cinématique	$m.^2.s^{-1}$
ν_t	Viscosité cinématique turbulente	$m.^2.s^{-1}$
ρ	Masse volumique	$kg.m^{-3}$
τ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses	Pa
τ_p	Temps de relaxation de la particule	s
Φ_h, ϕ_h	Fonctions de Businger (thermiques)	-
Φ_m, ϕ_m	Fonctions de Businger (dynamiques)	-
ξ	Paramètre de stabilité ($\xi = z/L_{MO}$)	-
σ_k, σ_ϵ	Constantes du modèle $k - \epsilon$	-
σ_x	Ecart-type de la variable x	-
λ	Conductivité thermique	$W.m^{-1}.K^{-1}$

Acronymes

AFM	Algebraic Flux Model
CEREA	Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique
CFD	Computational Fluid Dynamics
CLA	Couche Limite Atmosphérique
CLS	Couche Limite de Surface
COV	Composé Organique Volatile
CPU	Central Processing Unit
DFM	Differential Flux Model
DNS	Direct Numerical Simulation
EDF	Electricité De France
GGDH	Generalized Gradient Diffusion Hypothesis
GLM	Generalized Langevin Model
IEM	Interaction by Exchange with the Mean
LES	Large Eddy Simulation
MUST	Mock Urban Setting Test
PID	Photoionization Detector
PDF	Probability Density Function
POI	Période d'Observation Intensive
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
SIRTA	Site Instrumental de Recherche en Télédétection Atmosphérique
SLM	Simplified Langevin Model
SGDH	Simple Gradient Diffusion Hypothesis
SPH	Smoothed Particle Hydrodynamics

Introduction

Dans le cadre le plus général, nous nous référons à la pollution de l'air comme étant une condition atmosphérique dans laquelle certaines substances, issues de processus naturels ou artificiels, se trouvent à des concentrations suffisamment élevées pour pouvoir nuire à la santé des hommes et des animaux, impacter nocivement la végétation, détériorer des matériaux, affecter le climat ou réduire la visibilité (Arya, 1999). Ces effets nocifs peuvent être issus aussi bien d'une longue que d'une courte exposition auxdites substances.

Si la pollution de l'air a toujours été fortement liée à l'activité humaine, ce n'est cependant qu'à partir du XX^{ème} siècle, de par notamment la manifestation de plus en plus fréquente d'accidents violents à forte mortalité, qu'un intérêt particulier a commencé à être apporté à ses impacts environnementaux ainsi qu'à ses enjeux humains.

C'est alors dans cette perspective qu'au cours des trente dernières années, avec l'importance donnée aux normes de qualité de l'air par les pouvoirs publics, les industriels ont fait appel au secteur de la recherche afin de définir des moyens de mesure appropriés (réseaux de surveillance) et de réaliser des études de prévention via l'analyse de scénarii accidentels (Vendel, 2011).

En parallèle, et grâce au développement notable des ressources informatiques, la recherche s'est peu à peu tournée vers la modélisation numérique, qui est aujourd'hui devenue un outil essentiel pour l'évaluation de la dispersion des polluants atmosphériques. De nombreux aspects y sont recoupés : prévision environnementale des épisodes de pollution, études d'impact et de risques environnementaux, études climatiques, etc. (Sportisse, 2006).

Comme toute entreprise, EDF doit appréhender le risque industriel et l'impact de ses rejets réguliers. C'est pourquoi elle met en oeuvre différents moyens afin de pouvoir résoudre les problèmes posés par le comportement de l'atmosphère en regard de l'installation et du fonctionnement des unités de production électrique. Ces moyens consistent en des outils basés d'une part sur l'expérimentation : observations, mesures sur le terrain, moyens d'essais,... En effet, au-delà des prévisions et mesures fournies par Météo France depuis son réseau de stations et des informations recueillies sur les

stations météorologiques équipant les centrales nucléaires, EDF déploie des campagnes expérimentales autour de sites afin de compléter et d'affiner ses informations, mais également d'étudier des phénomènes météorologiques particuliers, ou encore de valider ce qui constitue son autre outil principal : la modélisation numérique. Divers modèles numériques sont développés et utilisés pour simuler l'écoulement de l'air et la dispersion des effluents, et les échelles d'application peuvent aller du site jusqu'à la région.

En particulier, aux abords d'une centrale, il est important que le comportement de l'atmosphère soit parfaitement connu, afin de pouvoir être préparé à toute éventualité et d'être capable de prévoir le comportement d'un nuage de polluant en cas de rejet normal ou accidentel. Quelle trajectoire va-t-il suivre ? Comment va-t-il se diluer ? Quelle est l'influence des conditions météorologiques sur sa dispersion ? La réponse à ces questions prend en compte plusieurs paramètres : entre autres, la nature du rejet (gaz ou particules fines), ses caractéristiques (rejet continu ou accidentel), la topographie des lieux, les échelles de temps et d'espace,...

Précisément, cette thèse, réalisée au Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique (CEREA), laboratoire commun EDF R&D-Ecole des Ponts ParisTech, s'inscrit dans un projet de modélisation numérique de la dispersion atmosphérique de polluants à travers le code de mécanique des fluides numérique *Code_Saturne*. L'objectif est de simuler la dispersion atmosphérique de polluants en environnement complexe et à échelle locale, c'est-à-dire autour de centrales, sites industriels ou en milieu urbain. Dans ce contexte, lorsque nous parlons d'échelle locale, ou encore de micro-échelle, cela fait référence à des distances de l'ordre de quelques mètres à quelques kilomètres et correspondant à des échelles de temps de l'ordre de quelques dizaines de secondes à quelques dizaines de minutes : on parle aussi dans le langage courant de modélisation en champ proche.

Les différences entre les nombreux modèles numériques existants à ce jour dans la littérature sont diverses et seront détaillées dans ce manuscrit. Cette thèse a pour premier objectif l'adaptation et l'utilisation d'une approche lagrangienne, qui consiste à reproduire le transport advectif et diffusif des polluants dans l'atmosphère en suivant de manière explicite un grand nombre de particules, représentatives du nuage de polluant. Les résultats obtenus par l'approche lagrangienne viennent compléter les résultats issus de l'approche dite eulérienne, utilisée jusqu'à présent dans les études de dispersion atmosphérique d'EDF R&D, le tout au sein des mêmes simulations *Code_Saturne*. Dans cette perspective, le second objectif de la thèse est ainsi la comparaison rigoureuse et pratique des deux approches, en particulier relativement à la modélisation de la turbulence atmosphérique.

Ce manuscrit est organisé comme suit. En **Chapitre 1**, nous présentons une brève

introduction à la pollution atmosphérique, puis nous nous attachons à décrire la structure et la dynamique de l'atmosphère ainsi que les phénomènes météorologiques associés. Le **Chapitre 2** a pour objectif de donner un exposé général sur les différentes techniques de modélisation de la dispersion atmosphérique de polluants de la littérature. En **Chapitre 3**, nous complétons cet exposé par une présentation et une analyse comparatives de l'existant dans la modélisation lagrangienne stochastique de la dispersion. Après une revue des différents modèles lagrangiens existants dans la littérature, nous concluons ce chapitre en définissant la stratégie de modélisation que nous avons adoptée pour ce travail de thèse. Ensuite, le **Chapitre 4** présente le code CFD (*Computational Fluid Dynamics*) *Code_Saturne* utilisé dans nos travaux, la mise en données générale de nos simulations et les points sensibles que peuvent présenter chacune des deux approches eulérienne et lagrangienne en termes de modélisation numérique. A cet effet, différentes configurations simples sont traitées. Un cas de vérification consistant en un rejet ponctuel et continu en turbulence homogène est finalement étudié et les résultats sont comparés à la solution analytique existante. Le **Chapitre 5** est la reproduction d'un article, soumis à *Atmospheric Environment*, qui reprend théoriquement et numériquement des critères de vérification du bon fonctionnement du modèle lagrangien utilisé dans nos travaux. En particulier, le critère dit de mélange homogène est étudié en détail. Les **Chapitres 6** et **7** présentent des cas de validation du modèle lagrangien en conditions réelles. Le **Chapitre 6** traite une campagne expérimentale menée sur le site du SIRTA (Site Instrumental de Recherche par Télédétection Atmosphérique), en atmosphère stable. Le **Chapitre 7**, quant à lui, reproduit un article soumis à *International Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. Il traite deux cas issus du programme expérimental MUST (*Mock Urban Setting Test*), correspondant à deux stratifications de l'atmosphère différentes : neutre et stable. Enfin, nous exposons les conclusions et perspectives de ce travail de thèse.

Chapitre 1

Structure et dynamique de l'atmosphère

Dans ce chapitre, nous introduisons d'abord quelques généralités sur la pollution atmosphérique. Nous exposons ensuite les éléments physiques relatifs à la structure et à la dynamique de l'atmosphère. Dans ce contexte, nous situons notre travail de thèse et en posons les premières bases théoriques.

Sommaire

1.1 Introduction à la pollution atmosphérique 5
1.1.1 Composition de l'air 5
1.1.2 Classification des polluants atmosphériques 5
1.2 Structure de l'atmosphère 8
1.3 Couche limite atmosphérique 10
1.4 Dynamique de l'atmosphère 11
1.4.1 Lois de conservation de la dynamique 11
1.4.2 Variables d'état et relations thermodynamiques 16
1.4.3 Stabilité de l'atmosphère 19
1.4.4 Théorie de similitude de Monin-Obukhov 20

1.1 Introduction à la pollution atmosphérique

Dans cette section, nous définissons brièvement les différents éléments contribuant à la pollution atmosphérique, telle que nous l'avons définie au début du chapitre d'introduction. Nous proposons, suivant les travaux de Molina Jiménez (2014), deux types de classification de ces polluants ainsi que leurs sources d'émission.

1.1.1 Composition de l'air

L'air est un mélange de gaz ayant évolué durant des milliers de millions d'années. Ses composants actuels naturels principaux sont l'azote (78 %) et l'oxygène (21 %), complétés par l'argon (0.9 %), le dioxyde de carbone (0.03 %) et quelques traces d'autres différents gaz tels que le néon, l'hélium, etc. Dans une partie de l'air situé en basse atmosphère, s'ajoutent certains composants comme le dioxyde de soufre, le monoxyde de carbone, le méthane, le plomb, etc.

La Table 1.1 présente de manière plus détaillée la composition de l'atmosphère.

1.1.2 Classification des polluants atmosphériques

Très souvent, les polluants dits *naturels* apparaissent en plus grande quantité que ceux produits par les activités humaines. Cependant, ce sont ces derniers qui présentent la menace la plus significative à long terme pour la biosphère. De plus, ils se concentrent souvent dans de petites surfaces proches des aires urbaines où se trouvent les plus fortes densités de population.

Une première classification de ces substances est une classification portant sur leur nature physico-chimique.

Gaz "normal"	Concentration moy. (%)	Polluant	Concentration moy. (%)
N_2	78.0840	CO_2	3.55×10^{-2}
O_2	20.9460	CH_4	1.7×10^{-4}
Ar	0.9340	N_2O	3×10^{-5}
Ne	1.82×10^{-3}	CO	$0.5 - 2 \times 10^{-5}$
Kr	1.1×10^{-4}	SO_2	$10^{-9} - 10^{-8}$
Xe	9×10^{-6}	NH_3	$10^{-8} - 10^{-6}$
He	5.2×10^{-4}	NO_x	$10^{-10} - 10^{-6}$
H_2	5.8×10^{-5}	HNO_3	$10^{-9} - 10^{-7}$
H_2O	Variable	O_3	$10^{-6} - 10^{-5}$

Table 1.1 – Concentrations moyennes des gaz atmosphériques (Arya, 1999).

1.1.2.1 Classification des polluants atmosphériques selon leur nature physico-chimique

De par la grande diversité des types de substances polluantes, Molina Jiménez (2014) précise qu'il est difficile d'en réaliser une classification précise et adaptée. Néanmoins, une classification fréquemment utilisée est la suivante :

— Oxydes de carbone ;
— Oxydes de soufre ;
— Oxydes d'azote ;
— Particules et aérosols ;
— Oxydants ;
— Composants organiques volatiles (COV) ;
— Substances radioactives ;
— Autres polluants.

1.1.2.2 Classification des polluants atmosphériques selon leur origine

Une autre approximation du problème, très utile, se base plutôt sur la manière dont se forment les polluants, et distingue les polluants dits *primaires* des polluants dits *secondaires* (Molina Jiménez, 2014).

Les polluants primaires :

On entend par polluants primaires les substances qui sont rejetées directement dans l'atmosphère. Les polluants primaires proviennent de sources très diverses et leur nature physico-chimique est très variée, mais ils peuvent être regroupés en fonction de leur trait le plus caractéristique comme par exemple leur phase (cas des particules et des métaux) ou en fonction d'un élément chimique commun (cas des polluants gazeux).

Parmi les polluants atmosphériques primaires les plus fréquents, on trouve :

— **Le dioxyde de soufre (SO_2)** : son origine est liée à la présence de soufre dans la quasi-totalité des combustibles fossiles (en particulier le charbon). Ses principales sources d'émission sont les centrales thermiques, les installations de chauffage industriel et certains procédés de fabrication ;
— **Les oxydes d'azote (NO_x)** : ils sont constitués à 90-95 % par le monoxyde d'azote (NO) et le dioxyde d'azote (NO_2). Ils sont majoritairement émis par le secteur des transports, c'est pourquoi ils peuvent représenter un bon indicateur du trafic automobile. Le reste provient des sources fixes de combustions telles que les centrales thermiques, les installations de chauffage industriel et les incinérateurs.

Avec le SO_2, les NO_x sont à l'origine des dépôts acides et contribuent à la pollution photochimique ;

— **Le monoxyde de carbone (CO)** : gaz inodore et incolore, il est formé par la combustion incomplète du carbone. Son origine est liée aux moteurs des véhicules et aux processus industriels de combustion ;

— **Les composés organiques volatiles (COV)** : les COV regroupent de nombreux polluants parmi lesquels se trouvent les hydrocarbures et les composés carbonylés. En environnement urbain, les COV proviennent fondamentalement des gaz d'échappement des véhicules, de l'évaporation des carburants et des combustibles liquides, ainsi que de certaines activités industrielles et certaines sources biogéniques ;

— **Les métaux lourds** : ils sont nombreux, les éléments les plus importants étant le plomb (Pb), le cadmium (Cd), le mercure (Hg), l'arsenic (As), le nickel (Ni), le fer (Fe), l'aluminium (Al), le zinc (Zn) et le magnésium (Mg). Ils proviennent majoritairement des installations industrielles, des incinérateurs et du trafic automobile.

Présents en moindre quantité, nous pouvons également citer les particules en suspension (poussières), l'acide chlorydrique rejeté lors des traitements des déchets industriels, etc.

Les polluants secondaires :

La pollution photochimique est générée dans la troposphère sous l'effet du rayonnement solaire, et implique des réactions chimiques avec d'autres polluants primaires tels que les oxydes d'azote (NO_x), le monoxyde de carbone (CO) et les composés organiques volatiles (COV). Il en résulte la formation de composants photooxydants "secondaires", les plus courants étant l'ozone (O_3) et le nitrate de peroxyacétyle (NPA). Les niveaux de pollution photochimique sont plus notables pendant l'été lorsque l'activité solaire augmente le rendement des réactions chimiques. Nous détaillons ci-dessous les caractéristiques de l'ozone et du NPA :

— **L'ozone (O_3)** : il s'agit du principal polluant photochimique. C'est un gaz incolore mais présentant une odeur caractéristique. Il est formé par trois atomes d'oxygène, ce qui fait de lui un puissant oxydant. Plusieurs mécanismes contribuent à sa production, le plus courant consistant en la formation de la molécule par réaction d'une molécule d'O_2 avec un atome d'oxygène déjà libéré auparavant au cours d'une réaction chimique ou photochimique.

L'ozone est présent naturellement dans l'atmosphère, dans les hautes couches de la stratosphère, mais également dans l'air que nous respirons tous les jours. Il

existe en effet des échanges permanents entre les couches supérieures et inférieures de l'atmosphère ; cependant la quantité d'ozone transportée depuis la stratosphère vers la troposphère reste minime.

Près du sol, il existe également des sources naturelles d'O_3, qui correspondent environ à 20 % des niveaux moyens d'ozone observés. Les 80 % restants ont pour origine des réactions chimiques, favorisées par l'énergie solaire comme indiqué plus haut, entre les différents polluants émis par l'activité humaine. Parmi ceux-ci, nous pouvons citer les premiers responsables : les polluants présents dans les gaz d'échappement des véhicules motorisés (NO_x, CO, COV). Il faut enfin noter que les processus chimiques de la formation d'ozone sont très complexes, et selon les proportions de polluants "précurseurs" présents, des réactions de destruction ou de production se produisent ;

— **Le nitrate de peroxyacétyle (NPA)** : la molécule d'ozone est par ailleurs dangereuse car en autres elle transforme les hydrocarbures présents dans l'air (provenant de la combustion incomplète du carbone dans les moteurs à explosion) en composants chimiques, qui, s'associant au dioxyde d'azote, forment un nouveau type de polluant atmosphérique : les dits nitrates de peroxyacétyle.

1.2 Structure de l'atmosphère

Nous venons d'introduire, en section 1.1, le concept d'atmosphère en décrivant brièvement les différents gaz qui la composent. Qualitativement, il s'agit en fait d'une mince couche de gaz qui englobe notre planète et dont l'épaisseur représente environ 1 % du rayon de la Terre. S'il est difficile d'en donner une limite supérieure, il est d'usage d'estimer qu'environ 90 % de sa masse totale se situe sous les 15 km d'altitude, dans la troposphère.

Un aspect important de l'atmosphère est son caractère dynamique. Il s'agit d'un système extrêmement complexe dans lequel ont lieu simultanément de nombreux processus physiques et chimiques, ce qui fait d'elle un système en changement permanent. L'interaction entre cette multitude de phénomènes a des répercussions sur les êtres vivants et leurs écosystèmes, mais également sur l'être humain et ses activités, d'où la nécessité de l'étudier en profondeur pour développer notamment les outils de prédiction météorologiques et climatologiques discutés dans le chapitre d'introduction.

Ces phénomènes atmosphériques se produisent à différentes échelles temporelles et spatiales : de l'échelle moléculaire, caractérisée par les réactions chimiques et la diffusion moléculaire, jusqu'aux processus de transport à échelle globale, en passant par la micro-échelle, où se déroulent les processus de diffusion turbulente, ou encore la méso-échelle,

domaine usuel de la problématique des grandes zones urbaines et industrielles. C'est principalement ces deux dernières échelles qui vont nous intéresser.

Du fait de l'orientation verticale du champ de pesanteur, l'atmosphère est stratifiée en plusieurs couches horizontales, en fonction des variations de température avec l'altitude. Selon cette stratification, quatre couches se distinguent :

— **la troposphère** : la température y est décroissante. La troposphère représente les altitudes inférieures à 8 km au-dessus des pôles, 18 km au-dessus de l'équateur. C'est dans cette couche que se produisent les phénomènes météorologiques les plus importants ;

— **la stratosphère** : la température y est croissante. La stratosphère occupe l'espace compris entre la tropopause et 50 km d'altitude. L'augmentation de température observée est due aux réactions exothermiques au cours desquelles l'oxygène moléculaire (O_2) et l'ozone (O_3) réagissent en absorbant les rayonnements ultraviolets, nocifs pour les êtres vivants ;

— **la mésosphère** : la température y est décroissante. La mésosphère est la couche comprise entre 50 et 80 km d'altitude. Elle est composée de formes ionisées de l'oxygène (O) et de faibles concentrations d'ozone ;

— **la thermosphère** : la température y est croissante. Elle s'étend des 80 aux 350-800 km d'altitude. Dans ses couches inférieures, elle est constituée d'azote (N_2) et d'oxygène moléculaire (O_2). En revanche on observe une prédominance de l'oxygène atomique (O), aux environs des 200 km d'altitude.

La Figure 1.1 trace la distribution verticale de température en fonction de l'altitude.

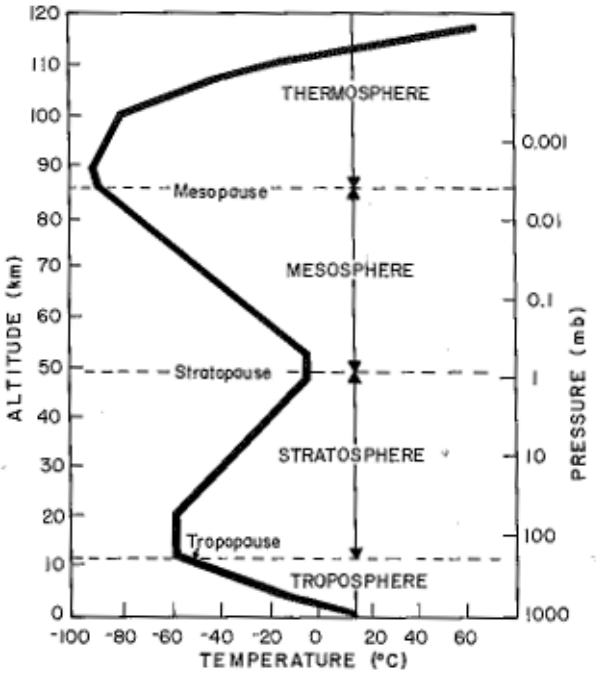


FIGURE 1.1 – Profil vertical de température dans l'atmosphère et couches atmosphériques associées (ARYA, 1999).

1.3 Couche limite atmosphérique

La couche au centre de notre travail est la troposphère, où se déroulent en effet la majorité des phénomènes de pollution de l'air. Plus particulièrement, nous nous intéressons à la couche la plus basse de la troposphère, appelée couche limite atmosphérique (CLA).

La théorie des couches limites a été introduite par Prandtl en 1904 et a d'abord été appliquée dans le domaine de l'aérodynamique.

Soit un fluide en contact avec une surface matérielle. En mécanique des fluides, on appelle *couche limite* la région fluide dans laquelle existent des échanges de quantité de mouvement, de chaleur ou de masse entre cette surface et ce fluide. Par analogie avec ce concept, on donne le nom de *couche limite atmosphérique* (CLA) à la couche directement soumise, aussi bien mécaniquement que thermiquement, à la surface terrestre.

Généralement, il est d'usage de diviser la CLA en trois sous-couches caractéristiques (voir Figure 1.2) :

— **la couche de transition d'Ekman**, dans la partie supérieure, à l'intérieur de laquelle les effets du frottement sur le sol, le gradient de pression et les effets de Coriolis dus à la rotation de la Terre s'équilibrent ;

— **la couche limite de surface (CLS)**, dans la partie la plus proche du sol, située entre les éléments rugueux du sol et une altitude d'environ 10 % de la hauteur

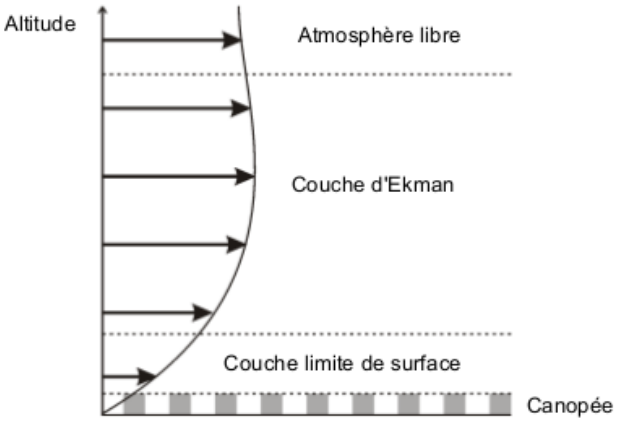


FIGURE 1.2 – Structure de la couche limite atmosphérique (PERKINS et al., 2005).

de la CLA. Dans cette zone la force de Coriolis peut être négligée devant l'effet du frottement ;

— **la canopée**, où l'effet individuel des obstacles et des rugosités (bâtiments, arbres) est prépondérant.

1.4 Dynamique de l'atmosphère

Dans ce paragraphe, nous introduisons les concepts fondamentaux de la dynamique de la couche limite atmosphérique, tenant en compte sa nature turbulente. Nous présentons d'abord les lois de conservation de la dynamique ainsi que les variables d'état de notre problème. Nous introduisons ensuite la théorie de similitude, utile pour obtenir les profils de vitesse et de température au sein de la CLS.

1.4.1 Lois de conservation de la dynamique

1.4.1.1 Equations instantanées

Les flux qui caractérisent l'écoulement dans la couche limite atmosphérique sont décrits par les équations fondamentales de la dynamique des fluides, encore appelées équations de Navier-Stokes. Ces équations constituent une approche eulérienne de l'écoulement, c'est-à-dire qu'elles se basent sur un système fixe auquel tout le mouvement du fluide se réfère : selon la vision eulérienne, on obtient ainsi, pour une variable f donnée, la description de son évolution spatiale en tout point du domaine fluide $\mathbf{x}$ et pour tout instant t.

Les lois de conservation mises en jeu dans les équations de Navier-Stokes sont introduites ci-dessous.

Conservation de la masse :

Le bilan de masse du fluide sur un élément de volume, encore appelé *équation de continuité*, s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho U_{f,i})}{\partial x_i} = 0 \ , \tag{1.1}$$

où $\mathbf{U}_f$ est la vitesse instantanée du fluide et ρ sa masse volumique.

L'air est un fluide compressible. Cependant, dans la couche limite atmosphérique, l'hypothèse anélastique est usuellement introduite : cette dernière permet de conserver le caractère compressible de l'air tout en filtrant les ondes acoustiques (annulation du terme instationnaire). L'équation de conservation de la masse devient alors :

$$\frac{\partial (\rho U_{f,i})}{\partial x_i} = 0 \ . \tag{1.2}$$

Conservation de la quantité de mouvement :

Dans la CLS, les effets de la force de Coriolis peuvent être négligés. L'équation de la conservation de quantité de mouvement est alors fournie par :

$$\frac{\partial (\rho U_{f,i})}{\partial t} + \frac{\partial (\rho U_{f,i} U_{f,j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho g \delta_{iz} \ . \tag{1.3}$$

Au premier membre, les premier et second termes correspondent respectivement au terme d'inertie et au terme d'advection. Au second membre, nous avons dans le sens de la lecture : le terme correspondant au gradient de pression, le terme de viscosité moléculaire et enfin le terme de gravité. τ_{ij} représente le tenseur des contraintes visqueuses, qui, pour un fluide newtonien (ce qui est le cas de l'air) est décrit classiquement à l'aide du tenseur des taux de déformations

$$S_{ij} = (\partial U_{f,i}/\partial x_j + \partial U_{f,j}/\partial x_i)/2 \tag{1.4}$$

et de la viscosité moléculaire μ :

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij} \ . \tag{1.5}$$

Conservation de l'énergie :

La conservation de l'énergie écrite en température a la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_p T) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho C_p U_{f,j} T) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j}\right) + \frac{dp}{dt} + \phi_T \ , \tag{1.6}$$

où λ est la conductivité thermique moléculaire et ϕ_T un terme source, pouvant être positif ou négatif.

1.4.1.2 Introduction de la turbulence et des opérateurs de moyenne

Comme nous avons pu le voir dans la section précédente, la couche limite atmosphérique est fortement turbulente. Or, l'observation d'un signal expérimental dans un écoulement turbulent fait apparaître des fluctuations qui rendent la description instantanée difficile. La répétition de cette expérience un assez grand nombre de fois permet, d'un point de vue statistique, en moyennant les signaux obtenus, de retrouver le signal moyen lisse. C'est dans cette perspective que Reynolds a introduit un opérateur de moyenne permettant de décomposer les grandeurs calculées en une partie moyennée et une partie représentative des fluctuations.

Propriétés des moyennes :

Nous utilisons pour moyenne un opérateur $\langle \cdot \rangle$ vérifiant les propriétés suivantes :

$$\begin{cases} \text{linéarité :} & \langle \alpha f + \beta g \rangle = \alpha \langle f \rangle + \beta \langle g \rangle \text{ avec } \alpha \text{ et } \beta \text{ constantes ;} \\ \text{commutativité :} & \langle \dfrac{\partial f}{\partial t} \rangle = \dfrac{\partial \langle f \rangle}{\partial t} \text{ et } \langle \dfrac{\partial f}{\partial x_j} \rangle = \dfrac{\partial \langle f \rangle}{\partial x_j} \text{ ;} \\ \text{idempotence :} & \langle \langle f \rangle \rangle = \langle f \rangle \text{ .} \end{cases} \tag{1.7}$$

De ces propriétés, on déduit que pour la fluctuation $f' = f - \langle f \rangle$ on a : $\langle f' \rangle = 0$.

Cependant, notons que : $\langle fg \rangle \neq \langle f \rangle \langle g \rangle$.

Décomposition de Reynolds et décomposition de Favre :

Comme expliqué dans le paragraphe précédent, la décomposition de Reynolds en moyennes et fluctuations se fait sur la base d'une moyenne statistique. En l'appliquant aux variables de masse volumique et de pression, nous obtenons :

$$\rho = \langle \rho \rangle + \rho' \ , \tag{1.8a}$$

$$p = \langle p \rangle + p' \ . \tag{1.8b}$$

En revanche, comme nous nous sommes placés dans le cadre général d'une masse volumique variable, moyenner les équations (1.1) et (1.3) fait apparaître, en plus de la grandeur $\langle \rho \rangle$, les grandeurs $\langle \rho U_{f,i} \rangle$, $\langle \rho U_{f,i} U_{f,j} \rangle$ et $\langle \rho U_{f,j} T \rangle$. Si nous appliquons la décomposition de Reynolds aux variables vitesse et température, il sera alors difficile

de faire apparaître les nouvelles variables $\langle \rho U_{f,i} \rangle$ et $\langle \rho T \rangle$. Il est donc intéressant de plutôt appliquer la décomposition de Reynolds aux variables $\rho U_{f,i}$ et ρT :

$$\rho U_{f,i} = \langle \rho U_{f,i} \rangle + (\rho U_{f,i})' \ , \tag{1.9a}$$

$$\rho T = \langle \rho T \rangle + (\rho T)' \ . \tag{1.9b}$$

Ceci nous amène ainsi à définir la décomposition de Favre en valeurs moyennes ($\widetilde{U_{f,i}}$ et $\widetilde{T}$) et fluctuations associées ($U''_{f,i}$ et T'') :

$$U_{f,i} = \widetilde{U_{f,i}} + U''_{f,i} \ , \tag{1.10a}$$

$$T = \widetilde{T} + T'' \ . \tag{1.10b}$$

avec :

$$\widetilde{U_{f,i}} = \frac{\langle \rho U_{f,i} \rangle}{\langle \rho \rangle} \ , \tag{1.11a}$$

$$\widetilde{T} = \frac{\langle \rho T \rangle}{\langle \rho \rangle} \ . \tag{1.11b}$$

1.4.1.3 Equations moyennées

En appliquant judicieusement la décomposition de Reynolds et la décomposition de Favre aux différentes variables, les équations moyennées s'écrivent :

Conservation de la masse (anélastique) :

$$\frac{\partial(\langle \rho \rangle \widetilde{U_{f,i}})}{\partial x_i} = 0 \ . \tag{1.12}$$

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial(\langle \rho \rangle \widetilde{U_{f,i}})}{\partial t} + \frac{\partial(\langle \rho \rangle \widetilde{U_{f,i}} \widetilde{U_{f,j}})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\langle \tau_{ij} \rangle - \langle \rho \rangle \langle U''_{f,i} U''_{f,j} \rangle \right) - \langle \rho \rangle g \delta_{iz} \ . \tag{1.13}$$

En introduisant la décomposition de Favre dans les équations de la quantité de mouvement, nous avons ainsi fait apparaître un nouveau terme de corrélations doubles entre fluctuations de vitesse $-\langle \rho \rangle \langle U''_{f,i} U''_{f,j} \rangle$, appelé plus communément tensions de Reynolds. Il provient de la non-linéarité du terme d'advection.

1.4.1.4 Application à la couche limite de surface

Dans ce paragraphe, il s'agit de mettre en application les lois de conservation de la dynamique précédemment introduites à la couche limite de surface. Cela permettra notamment d'établir une formule du vent moyen au sein de cette zone. La démonstration qui suit est valable dans le cas d'une atmosphère neutre. Nous généraliserons ce cas à une atmosphère stratifiée dans le paragraphe 1.4.4.2.

Nous introduisons ici un repère fixe lié à la direction du vent, défini par $\mathbf{e_x}$ (direction du vent moyen) et $\mathbf{e_z}$ (verticale ascendante). L'écoulement turbulent considéré est un écoulement atmosphérique homogène et stationnaire par rapport aux grandeurs moyennes. Nous faisons dans ce paragraphe également l'hypothèse d'un fluide compressible mais anélastique, permettant de s'affranchir de l'utilisation de la décomposition de Favre. Dans ces conditions, on a alors : $\langle U_{f,y} \rangle = 0$ et $\langle U_{f,z} \rangle = 0$.

Par ailleurs, l'hypothèse d'homogénéité horizontale permet de négliger les variations horizontales des différentes grandeurs devant les variations verticales. Ainsi, des trois composantes du tenseur de Reynolds $\langle U'^2_{f,x} \rangle$, $\langle U'_{f,x} U'_{f,y} \rangle$ et $\langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle$, seul le flux $\langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle$ est à prendre en compte. Sous ces hypothèses, l'équation (1.3) projetée sur $\mathbf{e_x}$ devient :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \langle U_{f,x} \rangle}{\partial z} - \rho \langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle \right) = 0 \ . \tag{1.14}$$

A hauts nombres de Reynolds, le terme $\mu \frac{\partial \langle U_{f,x} \rangle}{\partial z}$ est négligeable, la viscosité turbulente étant largement prépondérante par rapport à la viscosité moléculaire. Ainsi, on a :

$$- \langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle = u_*^2 \ , \tag{1.15}$$

où u_* est une constante, homogène à une vitesse et directement liée au flux turbulent de quantité de mouvement au niveau du sol $\langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle_0$: $u_* = \sqrt{-\langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle_0}$ (contrainte à la paroi).

En première approximation, $\langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle$ peut être exprimé comme une grandeur proportionnelle au gradient vertical de la vitesse moyenne :

$$\langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle = -K_m \frac{\partial \langle U_{f,x} \rangle}{\partial z} \ , \tag{1.16}$$

avec K_m le coefficient de diffusivité pour la quantité de mouvement turbulente. La théorie de longueur de mélange de Prandtl permet d'exprimer K_m en fonction de la longueur de mélange l_p, où l_p est selon la théorie de Prandtl la distance sur laquelle

les particules de fluide conservent leur quantité de mouvement. K_m s'écrit alors sous la forme :

$$K_m = l_p^2 \left| \frac{\partial \langle U_{f,x} \rangle}{\partial z} \right| \ . \tag{1.17}$$

Nous obtenons, après combinaison des équations (1.15), (1.16) et (1.17), la relation suivante :

$$\frac{\partial \langle U_{f,x} \rangle}{\partial z} = \frac{u_*}{l_p} \ . \tag{1.18}$$

l_p est usuellement connue sous la forme $l_p = \kappa z$ où κ est la constante de Von Karman. D'après les études expérimentales de couches limites (Foken, 2006; Högström, 1988, 1996), celle-ci est comprise entre 0.35 et 0.42, et on retient généralement la valeur de 0.4. Nous obtenons alors :

$$\frac{\partial \langle U_{f,x} \rangle}{\partial z} = \frac{u_*}{\kappa z} \ . \tag{1.19}$$

L'intégration de (1.19) entre z_0 (hauteur à laquelle la vitesse moyenne est supposée nulle) et une altitude z conduit à la loi logarithmique suivante, obtenue pour la première fois par Prandtl (1932) :

$$\langle U_{f,x}(z) \rangle = \frac{u_*}{\kappa} \ln \left(\frac{z}{z_0} \right) \ , \tag{1.20}$$

où z_0 est appelée rugosité dynamique.

Dans ce paragraphe, nous avons donc introduit, à titre d'application, le profil de vent dans la couche limite surfacique, dans le cadre d'un écoulement stationnaire et homogène horizontalement. Il est bon de noter l'importance de connaître les profils de vent (mais également de température) au sein de la CLA lorsque nous réalisons des études de modélisation de dispersion atmosphérique, comme c'est le cas dans ces travaux de recherche via l'outil CFD *Code_Saturne*. Ceux-ci sont en effet indispensables à la définition des conditions aux limites du domaine fluide étudié. Dans ce sens, de nombreuses recherches ont été menées afin d'obtenir une description pertinente et cohérente de la CLA.

1.4.2 Variables d'état et relations thermodynamiques

Les variables thermodynamiques d'intérêt dans l'atmosphère sont principalement au nombre de cinq :

— **la pression atmosphérique** ;

— **la température de l'air** ;

— **la densité de l'air** : dans l'atmosphère, comme c'est le cas dans un certain nombre de fluides, celle-ci varie avec la pression et la température. Dans le cas d'un air dit *humide*, mélange d'air sec et de vapeur d'eau, la densité varie en plus selon l'*humidité spécifique*, définie ci-dessous ;

— **l'humidité atmosphérique** : l'humidité spécifique (q) est la portion de masse de vapeur d'eau contenue dans l'air. Lorsqu'une parcelle d'air est saturée en vapeur d'eau, son humidité spécifique à saturation est notée q_s. L'humidité spécifique à saturation dépend principalement de la température (les deux grandeurs variant dans le même sens) et, en moindre cause, de la pression atmosphérique.

A noter que dans le cadre de nos travaux de thèse, nous nous restreindrons à l'air sec. Toutes ces variables d'état sont reliées les unes aux autres à travers l'équation d'état des gaz parfaits, l'équation d'équilibre hydrostatique, le premier principe de la thermodynamique ainsi que d'autres relations thermodynamiques. Nous introduisons dans les paragraphes ci-dessous ces différentes équations.

1.4.2.1 Equation d'état

Généralement, les formules physiques de la littérature font intervenir la densité de l'air ρ plutôt que la concentration molaire n/V. L'équation d'état des gaz parfaits se met alors sous la forme :

$$p = \frac{R^*}{M}\rho T = R\rho T \ , \tag{1.21}$$

où :

— p est la pression de l'air ;

— ρ la masse volumique ;

— R^* la constante absolue des gaz parfaits (8.314 $\mathrm{J.K^{-1}.mol^{-1}}$) ;

— R la constante spécifique (pour l'air sec, elle vaut 287.04 $\mathrm{J.K^{-1}.kg^{-1}}$) ;

— M la masse molaire moyenne de l'air.

1.4.2.2 Equation d'équilibre hydrostatique

La pression à toute altitude z est due au poids de la colonne d'air située au-dessus de cette altitude. La projection verticale de l'équation de conservation de quantité de mouvement (1.3) permet alors de définir l'équilibre hydrostatique de l'atmosphère :

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \ . \tag{1.22}$$

1.4.2.3 Premier principe de la thermodynamique

Le premier principe de la thermodynamique stipule que lors de toute transformation, il y a conservation de l'énergie. Lorsqu'il est appliquée à une parcelle d'air, il établit qu'un incrément de l'énergie interne dU de cette parcelle ne peut survenir que par un apport externe de chaleur dH et de travail dW. Cela se traduit mathématiquement par la formule suivante :

$$dU = dH + dW \ . \tag{1.23}$$

Cette équation peut se mettre sous différentes formes. Nous retiendrons celle impliquant les incréments en pression et en température :

$$dH = C_p dT - \frac{dp}{\rho} \ , \tag{1.24}$$

où C_p est la capacité calorifique à pression constante : pour l'air sec, elle vaut environ 1005 $\mathrm{J.K^{-1}.kg^{-1}}$.

1.4.2.4 Processus adiabatiques

Les parcelles d'air qui se déplacent vers le haut ou vers le bas en réponse à des mouvements atmosphériques verticaux peuvent être considérées en bonne approximation comme n'échangeant pas de chaleur avec l'air environnant. Elles suivent donc des processus adiabatiques. Ainsi, en reprenant l'équation (1.24), nous pouvons déduire $dH = 0$, soit :

$$C_p dT - \frac{dp}{\rho} = 0 \ . \tag{1.25}$$

En combinant (1.25) avec l'équation de l'équilibre hydrostatique (1.22), nous obtenons finalement l'expression du gradient thermique adiabatique :

$$\left(\frac{dT}{dz}\right)_{ad} = -\frac{g}{C_p} = \Gamma \ . \tag{1.26}$$

Le gradient de température adiabatique vaut approximativement -9.8 $\mathrm{K.km^{-1}}$.

En combinant à présent l'équation d'état des gaz parfaits (1.21) avec l'équation du premier principe de la thermodynamique (1.24), nous obtenons une nouvelle équation liant les changements relatifs en température et en pression :

$$\frac{dT}{T} = \frac{R}{C_p}\frac{dp}{p} \ . \tag{1.27}$$

Par intégration entre un état de référence (T_0, p_0) et un état quelconque (T, p),

nous obtenons l'équation suivante :

$$T = T_0 \left(\frac{p}{p_0} \right)^k \ , \tag{1.28}$$

où $k = R/C_p \simeq 0.286$.

1.4.2.5 Température potentielle

La température potentielle est définie comme étant la température qu'aurait une parcelle d'air si elle était ramenée adiabatiquement au niveau de pression de référence p_0 à partir d'un état thermodynamique (T,p). En utilisant l'équation (1.28) on introduit ainsi la formule de la température potentielle :

$$\theta = T \left(\frac{p_0}{p} \right)^{R/C_p} \ . \tag{1.29}$$

Il est intéressant ici d'introduire l'équation de conservation de l'énergie écrite sur la température potentielle, dont nous nous servirons pour calculer les profils de température potentielle dans la CLS un peu plus loin dans le chapitre (Demael, 2007) :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + U_{f,j} \frac{\partial \theta}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho C_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right) + \phi_\theta \ , \tag{1.30}$$

où λ est la conductivité thermique moléculaire et ϕ_θ un terme source, pouvant être positif ou négatif.

La température potentielle est un paramètre important car elle va permettre de caractériser très simplement la stabilité de l'atmosphère.

1.4.3 Stabilité de l'atmosphère

On distingue trois états de la CLA : stable, neutre et instable. Le critère de stabilité peut être simplement défini en fonction du signe de $\frac{\partial \theta}{\partial z}$:

- si la température potentielle ne varie pas avec l'altitude (l'atmosphère est parfaitement adiabatique), on dit que l'atmosphère est **neutre** : $\frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{z}} = \mathbf{0}$;
- si la température potentielle augmente avec l'altitude, l'atmosphère est **stable** : $\frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{z}} > \mathbf{0}$;
- si la température potentielle diminue avec l'altitude, l'atmosphère est **instable** : $\frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{z}} < \mathbf{0}$.

Lien entre stabilité de l'atmosphère et échanges verticaux :

Qualitativement, la stratification de l'atmosphère a un lien direct avec les échanges verticaux qui s'y produisent, et donc implicitement avec la turbulence verticale.

En effet, si nous considérons une parcelle d'air déplacée, alors sa pression et sa température évoluent selon la loi adiabatique ce qui implique que sa température potentielle ne varie pas. En revanche, selon la condition de stabilité de l'atmosphère envisagée, nous aurons un profil différent de la température potentielle en fonction de l'altitude, et c'est précisément ce phénomène qui est à la source des échanges verticaux atmosphériques. Nous l'illustrons qualitativement ci-dessous en considérant une parcelle d'air qui s'élèverait dans l'atmosphère (les mêmes résultats seraient obtenus en considérant une parcelle d'air qui descendrait).

— **Cas d'une atmosphère neutre :** lorsque la parcelle d'air s'élève, comme $\frac{\partial \theta}{\partial z} = 0$, sa température potentielle reste la même que celle de l'air environnant et **il n'y a pas** de mouvement vertical puisque le système est à l'équilibre ;

— **Cas d'une atmosphère stable :** lorsque la parcelle d'air s'élève, comme $\frac{\partial \theta}{\partial z} > 0$, sa température potentielle devient plus faible que celle de l'air environnant. Elle devient ainsi plus lourde que ce dernier, et pour se remettre à l'équilibre elle doit donc redescendre. On en déduit qu'une atmosphère stable **inhibe** les échanges verticaux ;

— **Cas d'une atmosphère instable :** lorsque la parcelle d'air s'élève, comme $\frac{\partial \theta}{\partial z} < 0$, sa température potentielle devient plus importante que celle de l'air environnant. Elle devient ainsi plus légère que ce dernier, et continue donc de s'élever encore. Nous en déduisons qu'une atmosphère instable **favorise** les échanges verticaux.

Ce phénomène d'effet de la stabilité atmosphérique sur le déplacement d'une parcelle d'air est illustré dans la Figure 1.3.

1.4.4 Théorie de similitude de Monin-Obukhov

Nous reprenons ici l'équation de conservation de quantité de mouvement appliquée à la CLS que nous avons vue dans le paragraphe 1.4.1.4 :

$$-\langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle = u_*^2 \ . \tag{1.31}$$

De manière analogue, nous pouvons modéliser les flux turbulents de chaleur de la façon suivante :

$$-\langle \rho \rangle C_p \langle U'_{f,z} \theta' \rangle = Q_0 \ , \tag{1.32}$$

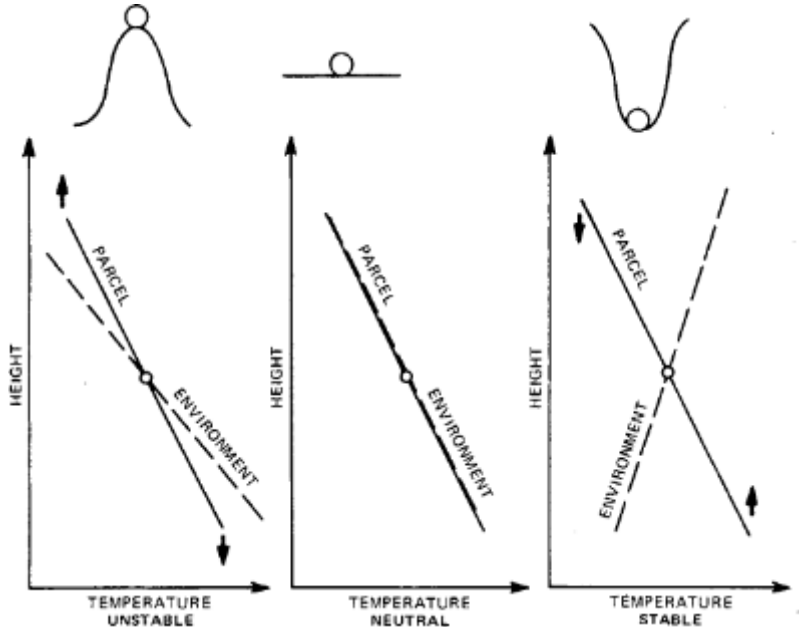


FIGURE 1.3 – Profils de température de l'air environnant (– – –) dans les trois cas de stabilité de l'atmosphère et déplacement adiabatique de la parcelle d'air (———) (HANNA et al., 1982).

où Q_0 est le flux de chaleur au sol, exprimé en W.m^{-2}.

La présence d'un flux de chaleur en surface va modifier la stabilité de la CLS ainsi que ses caractéristiques. En menant une analyse dimensionnelle et à l'aide du théorème "Π" de Vaschy-Buckingham, il est possible de démontrer que les trois paramètres adimensionnels suivants peuvent représenter l'ensemble des variables physiques caractérisant un écoulement donné dans la CLS (STULL, 1988) :

$$\Pi_1 = \frac{z u_*^2}{\nu} \,, \tag{1.33a}$$

$$\Pi_2 = \frac{z}{u_*} \frac{\partial \langle U_{f,x} \rangle}{\partial z} \,, \tag{1.33b}$$

$$\Pi_3 = \frac{z}{L_{MO}} \,, \tag{1.33c}$$

où L_{MO} est la longueur de Monin-Obukhov (MONIN et OBUKHOV, 1954), définie comme suit :

$$L_{MO} = -\frac{\rho C_p \theta u_*^3}{\kappa g Q_0} \,. \tag{1.34}$$

1.4.4.1 Caractérisation physique de la longueur de Monin-Obukhov

Qualitativement, la longueur de Monin-Obukhov permet d'évaluer l'importance relative des phénomènes de cisaillement et de flottabilité. En effet, au sein d'une atmo-

sphère stratifiée, les mouvements turbulents dans la CLS sont dus à l'association de turbulence produite mécaniquement (cisaillement) et thermiquement. Nous pouvons, en fonction de la longueur de Monin-Obukhov, distinguer deux zones :

— une couche située au voisinage du sol ($z < |L_{MO}|$) où la production mécanique de turbulence est plus forte que la production par effets thermiques ;

— une couche située au-dessus de la hauteur L_{MO} ($z > |L_{MO}|$) où la production (ou destruction) thermique de turbulence est plus forte que la production mécanique.

L_{MO} est un paramètre important car il permet de caractériser la stabilité thermique atmosphérique, par le biais d'un nouveau critère local :

— si le flux de chaleur à la surface $Q_0 = 0$ alors $\xi = z/L_{MO} = 0$, *i.e.*, $L_{MO} \to \infty$ et **l'atmosphère est neutre** ;

— si le flux de chaleur à la surface $Q_0 < 0$ alors $\xi = z/L_{MO} > 0$, *i.e.*, $L_{MO} > 0$ et **l'atmosphère est stable** ;

— si le flux de chaleur à la surface $Q_0 > 0$ alors $\xi = z/L_{MO} < 0$, *i.e.*, $L_{MO} < 0$ et **l'atmosphère est instable**.

1.4.4.2 Profils de vitesse et température potentielle moyennes dans la CLS

Nous avons, dans le paragraphe 1.4.1.4, établi le profil de vitesse en CLS dans le cas d'une atmosphère neutre. A présent que nous avons défini les conditions de stabilité de l'atmosphère, nous pouvons généraliser au cas d'une atmosphère stratifiée, à l'aide de la théorie de similitude de Monin-Obukhov (Monin et Obukhov, 1954), qui stipule que les gradients verticaux de quantité de mouvement et de température potentielle ne dépendent que de la variable $\xi = z/L_{MO}$. Mathématiquement, en introduisant les fonctions de similitude mécanique ϕ_m et thermique ϕ_t, cela se traduit de la façon suivante :

$$\frac{\kappa z}{u_*}\frac{\partial \langle U_{f,x} \rangle}{\partial z} = \phi_m(\xi) \ , \tag{1.35}$$

$$\frac{\kappa z}{\theta_*}\frac{\partial \langle \theta \rangle}{\partial z} = \phi_h(\xi) \ , \tag{1.36}$$

où $\theta_* = -\dfrac{Q_0}{\rho C_p u_*}$ est appelée température de frottement, par analogie avec u_*.

L'intégration de (1.35) et (1.36) permet d'obtenir les profils de vitesse et température potentielle moyennes en CLS pour n'importe quelle condition de stabilité atmosphérique, comme explicité ci-dessous.

Profil de vitesse moyenne :

$$\langle U_{f,x} \rangle(z) = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \Phi_m(\xi) \right] \ , \tag{1.37}$$

où $\Phi_m(s) = \int_{z_0/L_{MO}}^{z/L_{MO}} \frac{1}{s}[1 - \phi_m(s)]\,\mathrm{d}s$.

Profil de température potentielle moyenne :

$$\langle \theta \rangle - \theta_0 = \frac{\theta_*}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{z}{z_{0T}}\right) - \Phi_h(\xi) \right] \ , \tag{1.38}$$

où $\Phi_h(s) = \int_{z_{0T}/L_{MO}}^{z/L_{MO}} \frac{1}{s}[1 - \phi_h(s)]\,\mathrm{d}s$.

Notons également que θ_0 est la température potentielle au sol et z_{0T} la rugosité thermique, par analogie avec la rugosité dynamique z_0.

Détermination des fonctions de similitude :

Les fonctions ϕ_m et ϕ_h présentes dans les expressions des profils de vitesse et température potentielle peuvent être déterminées à partir d'expériences. Parmi les nombreuses qui ont été menées, nous pouvons citer Businger et al. (1971), Dyer (1974) ou Louis (1979). Nous présentons ci-dessous la relation de Businger et al. (1971), qui est la plus couramment utilisée :

$$\begin{cases} \phi_m(\xi) = \sqrt{\phi_h(\xi)} = (1 - 16\xi)^{-1/4} & \text{si } \xi < 0 \text{ (cas instable)} \\ \phi_m(\xi) = \phi_h(\xi) = 1 & \text{si } \xi = 0 \text{ (cas neutre)} \\ \phi_m(\xi) = \phi_h(\xi) = 1 + 5\xi & \text{si } \xi > 0 \text{ (cas stable)} \end{cases} \tag{1.39}$$

Citons par ailleurs l'article de Musson-Genon et al. (2007), qui présente plusieurs méthodes pour le calcul des flux turbulents et des profils verticaux de vent, température et humidité à partir de mesures à deux niveaux de la CLA.

Chapitre 2

Modélisation de la dispersion atmosphérique : généralités

Dans ce chapitre, nous nous proposons de poser les bases de la modélisation de la dispersion atmosphérique. Après avoir introduit les concepts théoriques et les phénomènes physiques relatifs à la dispersion turbulente, nous nous attachons à présenter les différentes techniques de modélisation existantes.

Sommaire

2.1 Mécanismes de la dispersion atmosphérique 25
2.1.1 Dispersion turbulente : concepts généraux 25
2.1.2 Influence de l'environnement sur la dispersion 26
2.2 Techniques de modélisation de la dispersion turbulente . 27
2.2.1 Equation d'advection-diffusion d'un scalaire 28
2.2.2 Classification générale des modèles de dispersion 28
2.2.3 Modèles eulériens 30
2.2.4 Modèles lagrangiens 34
2.2.5 Modèles gaussiens 35

2.1 Mécanismes de la dispersion atmosphérique

2.1.1 Dispersion turbulente : concepts généraux

Un nuage de polluants rejeté dans l'atmosphère est soumis aux différents mécanismes qui régissent les écoulements de l'atmosphère. Les processus principaux sont : advection, diffusion, dépôt au sol, lessivage, et réactions chimiques éventuelles. Par définition, la *dispersion turbulente* est caractérisée par l'association des phénomènes d'*advection* et de *diffusion*.

L'*advection* est le transport du nuage par le vent moyen. Ce processus déplace le nuage, et peut même changer sa forme si l'écoulement du vent n'est pas uniforme, mais ne change pas la concentration en polluant.

La *diffusion* peut être de deux types : moléculaire ou turbulente.

— La **diffusion moléculaire** se réfère au mouvement des molécules du nuage de polluants dans l'air, et est due aux différences de concentration observées dans l'espace (gradients de concentration). Elle a néanmoins peu d'influence dans l'étude de la pollution atmosphérique.

— La **diffusion turbulente**, quant à elle, prédomine et est due à l'existence de tourbillons dans la CLA, qui brassent tridimensionnellement le nuage de polluants. Elle a deux origines : mécanique (cisaillement du vent) et thermique (gradient vertical de température).

L'effet conjugué des phénomènes d'advection et de diffusion turbulente génère alors la dispersion du nuage de polluants. Il est important de noter que la dispersion turbulente dépend fortement des caractéristiques turbulentes de l'écoulement. Il existe en effet une gamme très large de tourbillons dans la CLA et tous participent à leur manière au transport et à la diffusion du nuage. Globalement : les gros tourbillons par rapport au nuage le déplacent et contribuent ainsi à l'advection, ceux comparables à la taille du nuage le morcellent et contribuent ainsi à la diffusion turbulente, et enfin les tourbillons petits par rapport au nuage ne sont pas efficaces pour le morceler (Perkins et al., 2005). L'efficacité de la dispersion turbulente étant due aux tailles relatives de ces tourbillons par rapport au nuage, comme celui-ci se déforme et se déplace au cours du temps, nous comprenons qu'elle variera également au fur et à mesure de l'étalement du nuage. En particulier, elle sera différente que nous soyons en champ proche ou loin de la source d'émission. Il en ressort que la modélisation de la dispersion turbulente est une tâche complexe et basée principalement sur la difficulté à modéliser correctement les structures tourbillonnaires. Nous nous attacherons dans le paragraphe 2.2 à réaliser une revue des principaux modèles et techniques existants.

Au cours de ce travail de thèse, nous nous intéressons à la modélisation de la dispersion atmosphérique à l'échelle locale (milieu urbain ou autour de sites industriels), c'est-à-dire pour des distances de l'ordre de quelques mètres à quelques kilomètres et correspondant à des échelles temporelles de l'ordre de quelques dizaines de secondes à quelques dizaines de minutes : on parle de modélisation en champ proche.

2.1.2 Influence de l'environnement sur la dispersion

L'environnement, par le biais de la nature des sols, du relief ou encore des bâtiments, influence fortement la dispersion des polluants et constitue donc une perturbation importante à prendre en compte lors de la modélisation de la dispersion. Pour cela, notons que deux voies sont possibles : la prise en compte implicite de la géométrie de la perturbation au sein-même de la paramétrisation mathématique du modèle, ou alors la résolution explicite tridimensionnelle des champs dynamiques permettant de décrire la géométrie de cette perturbation.

Nous présentons ici succintement l'influence des différents types de perturbations dues à l'environnement.

2.1.2.1 Influence de la nature des sols

La nature des sols intervient au niveau du paramètre de rugosité dynamique z_0, introduit en chapitre 1. Exprimé en mètres, il caractérise l'influence globale de la couche limite de surface sur le profil de vent moyen. En effet, plus la rugosité est importante, plus le frottement au sol est important, et plus le profil de vitesse est cisaillé.

Les propriétés thermiques (flux de chaleur) des sols sont également des facteurs influençant la dispersion.

2.1.2.2 Influence du relief

Les reliefs accidentés (vallées, falaises, collines, etc.) modifient les écoulements atmosphériques et induisent donc une modification de leurs caractéristiques physiques, en particulier la turbulence, par rapport au cas d'un sol plat.

Il est précisé dans Perkins et al. (2005) que le comportement de l'écoulement sur un relief dépend de la stabilité thermique de l'atmosphère. Dans le cas d'une atmosphère neutre, le panache suit les variations du relief. Dans le cas d'une atmosphère stable, le panache reste approximativement dans le même plan horizontal et contourne le relief.

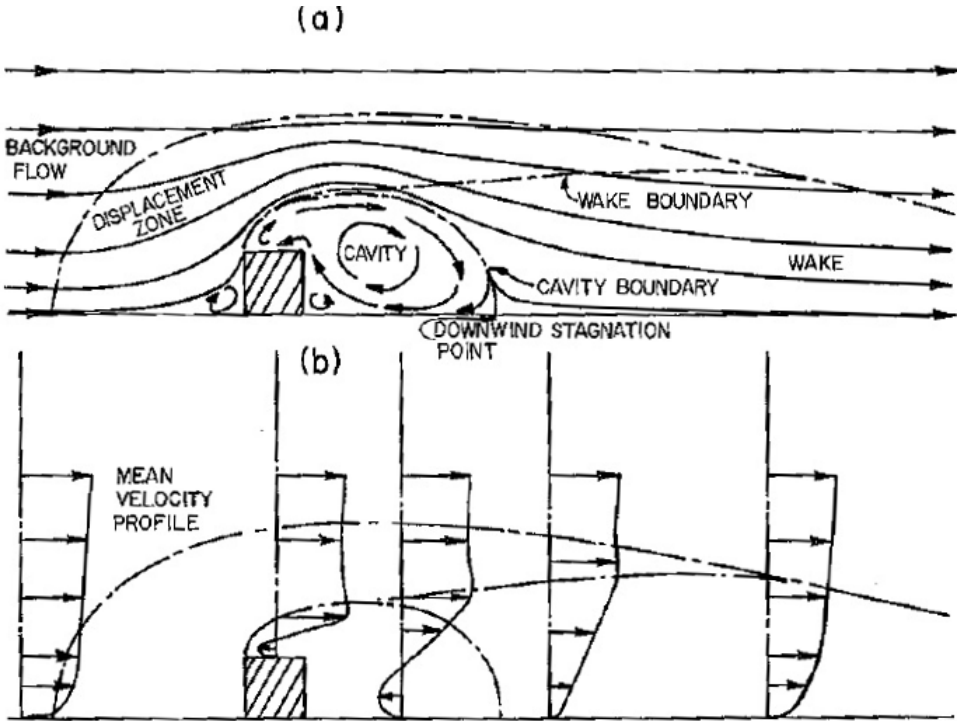


FIGURE 2.1 – Ecoulement autour d'un obstacle 2D. (a) Lignes de courant du vent moyen ; (b) profils de vitesse moyenne à différents points de l'écoulement.

2.1.2.3 Influence des obstacles et bâtiments

A plus petite échelle, les obstacles et les bâtiments perturbent de manière importante le champ de vitesse à la fois à l'aval et à l'amont de l'obstacle. Ceci est illustré dans la Figure 2.1 (cf. ARYA (1999)).

En amont, l'écoulement contourne l'obstacle et forme une zone de recirculation. Des études ont montré qu'on y observe un accroissement des concentrations. A l'aval, il y a à l'inverse une diminution des concentrations ainsi qu'une augmentation de la largeur du panache. Une diminution globale de la vitesse est observée en sillage lointain, due à la traînée de l'obstacle, ainsi qu'une modification de la turbulence de l'écoulement.

2.2 Techniques de modélisation de la dispersion turbulente

Avant de présenter les trois grandes familles de modèles de la dispersion atmosphérique, il est d'abord nécessaire d'introduire l'équation dite d'*advection-diffusion d'un scalaire*, qui régit le transport d'une espèce chimique au sein d'un écoulement donné.

2.2.1 Equation d'advection-diffusion d'un scalaire

Nous l'avons vu, la dispersion atmosphérique d'un nuage de polluants est directement affectée par la turbulence de l'écoulement. Les équations de Navier-Stokes moyennées par le biais de la décomposition de Reynolds présentées en chapitre 1 permettent de rendre compte statistiquement de cela et de déterminer le champ de vitesse d'un écoulement atmosphérique.

A présent, si au sein de cet écoulement atmosphérique, que nous supposerons incompressible, nous considérons une espèce chimique de concentration c (sous-entendu, fraction massique en kg/kg), le principe de conservation d'un scalaire appliqué à la quantité c s'exprime sous la forme :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U_{f,j}\frac{\partial c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(D\frac{\partial c}{\partial x_j}\right) + S + R \ , \tag{2.1}$$

où :

— D ($\mathrm{m}^2.s^{-1}$) est le coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce ;

— S est le terme source, pouvant être positif ou négatif ;

— R est le terme de production ou destruction de l'espèce par réaction chimique.

Il s'agit d'une équation de transport, appelée **équation d'advection-diffusion d'un scalaire**. Le mouvement du fluide porteur étant turbulent, nous introduisons la décomposition de Reynolds à toutes les variables y compris la concentration et nous obtenons ainsi l'équation de transport de la concentration moyenne :

$$\frac{\partial \langle c\rangle}{\partial t} + \langle U_{f,j}\rangle\frac{\partial \langle c\rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(D\frac{\partial \langle c\rangle}{\partial x_j} - \langle U'_{f,j}c'\rangle\right) + \langle S\rangle + \langle R\rangle \ . \tag{2.2}$$

2.2.2 Classification générale des modèles de dispersion

Un modèle de dispersion atmosphérique est un outil de simulation permettant de simuler les phénomènes atmosphériques intervenant dans le processus de dispersion turbulente des polluants. Les différences entre les nombreux modèles existants à ce jour se situent principalement au niveau du nombre de processus atmosphériques considérés, de leur degré de complexité, de leur champ d'application ainsi que, tout particulièrement, des méthodes utilisées pour résoudre les équations qui les régissent. Les modèles mathématiques de dispersion peuvent déjà se diviser en deux grandes catégories :

— **les modèles statistiques**, qui se basent sur des équations statistiques ou empiriques pour calculer les grandeurs physiques liées à la dispersion atmosphérique (vent, turbulence, etc.) ;

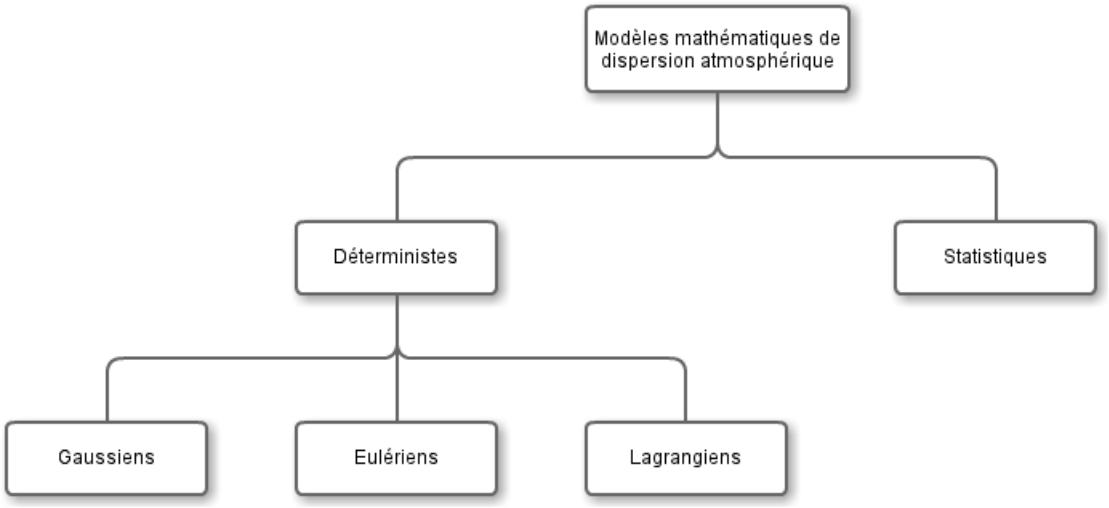


FIGURE 2.2 – Classification des modèles mathématiques de dispersion atmosphérique.

— **les modèles déterministes**, qui, basés sur une description physique des processus atmosphériques, établissent des relations mathématiques de cause à effet.

Pour illustrer de manière plus concrète, nous pouvons citer comme modèle statistique par exemple un pronostic de la concentration d'un polluant comme une fonction statistique des mesures actuelles disponibles et de ses tendances historiques. Par ailleurs, un modèle déterministe est un modèle de diffusion dans lequel les concentrations de polluants se calculent typiquement en utilisant les informations sur la source d'émission (par exemple, les taux d'émission) et son environnement (par exemple, les paramètres météorologiques et la topographie du site étudié).

Parmi les modèles déterministes se classent trois principaux types de modèles :

— **les modèles gaussiens**, basés sur la résolution analytique de l'équation d'advection-diffusion couplée à des paramétrisations semi-empiriques des principaux phénomènes physiques ;

— **les modèles eulériens**, qui reposent sur la résolution de l'équation d'advection-diffusion discrétisée en temps et en espace sur un maillage ;

— **les modèles lagrangiens**, basés sur le calcul de trajectoires de particules.

Pour résumer, la Figure 2.2 illustre la classification générale des modèles mathématiques de dispersion atmosphérique.

Nous présentons plus en détail ces trois types de modèles dans les paragraphes suivants. Notons d'ores et déjà que les modèles eulériens et lagrangiens sont le plus généralement basés sur un champ dynamique calculé par approche eulérienne. En particulier, les modèles lagrangiens, au centre de notre travail de thèse, calculent ainsi les

trajectoires des particules au sein d'un champ dynamique fourni par une approche eulérienne, et sont à ce titre souvent qualifiés de *modèles hybrides eulériens/lagrangiens*. Nous reviendrons sur ce point dans le chapitre suivant.

Avant de présenter les trois différents modèles, il convient de préciser qualitativement un point. Au centre du phénomène de dispersion se trouve le phénomène de diffusion turbulente. Or, l'efficacité de la diffusion turbulente n'est pas la même que nous soyons proche ou loin de la source. En effet, si nous considérons un nuage de polluant, les différentes structures tourbillonnaires ont des effets différents sur ce nuage au cours du temps, *i.e.*, au fur et à mesure que le nuage grossit. Près de la source, il existe des tourbillons de taille comparable à celle du nuage qui contribuent à sa diffusion et des tourbillons plus gros qui provoquent son déplacement (voir paragraphe 2.1.1). On a là une diffusion turbulente *rapide*. En revanche, loin de la source, le nuage a alors suffisamment grossi pour devenir plus gros que les plus gros tourbillons et la diffusion turbulente est alors *plus lente*. Cela se traduit aussi par une intermittence du signal.

Nous verrons dans les prochains paragraphes comment cette différence de comportement entre champ proche et champ lointain peut être prise en compte dans un modèle de dispersion.

2.2.3 Modèles eulériens

Les modèles dits eulériens reposent sur la résolution de l'équation d'advection-diffusion d'un scalaire correspondant à la concentration en polluant. Cette équation est discrétisée en temps et en espace sur un maillage, et implique la connaissance des champs de vitesse et de turbulence. Par conséquent, la première étape est la résolution du système d'équations de Navier-Stokes, ce qui met en relief l'importance cruciale d'une modélisation correcte de la turbulence de l'écoulement.

Dans cette perspective, trois approches sont possibles :

— **la simulation numérique directe** (*DNS – Direct Numerical Simulation*), qui résout la forme instantanée des équations de Navier-Stokes en considérant toutes les échelles de la turbulence ;

— **la simulation numérique des grandes échelles** (*LES – Large Eddy Simulation*), qui résout explicitement les grandes structures de la turbulence et modélise par paramétrisation statistique l'effet des plus petites ;

— **la modélisation statistique des équations de Navier-Stokes** (*RANS – Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations*), qui ne résout aucune structure tourbillonnaire et nous renseigne uniquement sur les valeurs moyennes au sens statistique des champs dynamiques.

C_μ	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	σ_k	σ_ϵ
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

TABLE 2.1 – Valeurs des constantes du modèle standard $k-\epsilon$ (LAUNDER et SPALDING, 1974).

2.2.3.1 La modélisation RANS

L'approche RANS est la plus couramment utilisée dans l'industrie. Comme nous l'avons vu, elle ramène le problème à la résolution conjointe des équations moyennées de continuité, de conservation de la quantité de mouvement, et d'advection-diffusion d'un scalaire. Or, nous avons vu dans le paragraphe que la résolution de ces équations soulevait le problème de leur fermeture, *i.e.*, comment évaluer les flux turbulents inconnus $\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle$ et $\langle U'_{f,j}c'\rangle$. De nombreux modèles de fermeture existent à différents ordres. Les plus utilisés sont ceux du premier et du second ordre. Il est important de noter que, malgré l'inconsistance que cela peut potentiellement impliquer, il est possible d'adopter une certaine fermeture turbulente pour $\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle$ et une autre, à un ordre inférieur ou égal, pour $\langle U'_{f,j}c'\rangle$.

Les modèles du premier ordre consistent à directement exprimer les flux turbulents en fonction du gradient des grandeurs moyennes. Cette fermeture fait intervenir un tenseur (de viscosité turbulente pour les composantes du vent, de diffusivité turbulente pour les scalaires température et concentration). Ce tenseur est à son tour exprimé de différentes manières selon le modèle de turbulence envisagé. Nous pouvons citer à titre d'exemple le modèle classique $k-\epsilon$, qui introduit l'énergie cinétique turbulente k et la dissipation ϵ dans l'expression du tenseur turbulent par l'intermédiaire de ν_t, quantités déterminées par la résolution des équations de transport qui leur sont associées :

$$\rho\frac{\partial k}{\partial t}+\rho\langle U_{f,j}\rangle\frac{\partial k}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_j}\right)+P+G-\rho\epsilon+S_k\ , \tag{2.3a}$$

$$\rho\frac{\partial \epsilon}{\partial t}+\rho\langle U_{f,j}\rangle\frac{\partial \epsilon}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}\frac{\partial \epsilon}{\partial x_j}\right)+C_{\epsilon 1}\frac{\epsilon}{k}(P+C_{\epsilon 3}G)-C_{\epsilon 2}\rho\frac{\epsilon^2}{k}+S_\epsilon\ , \tag{2.3b}$$

où S_k et S_ϵ sont des termes sources, P est le terme de production d'énergie cinétique turbulente par cisaillement et G est le terme de production ou destruction d'énergie cinétique turbulente par flottabilité.

Les constantes introduites dans les équations (2.3) sont déterminées à partir d'expériences (LAUNDER et SPALDING, 1974) et sont exposées dans la Table 2.1. La valeur de $C_{\epsilon 3}$ est, quant à elle, tirée des travaux de VIOLLET (1988) : $C_{\epsilon 3}=0$ pour une atmosphère stable ($G<0$), $C_{\epsilon 3}=1$ pour une atmosphère instable ($G>0$).

Par ailleurs, il existe dans la littérature d'autres paramétrisations possibles, en dehors de celle de Launder et Spalding (1974), pour les constantes de la Table 2.1, notamment dans le cadre de travaux atmosphériques. Nous référons le lecteur en particulier aux travaux de Detering et Etling (1985) et Duynkerke (1988). Dans le cadre de nos travaux de thèse, nous utiliserons la paramétrisation dite "standard" de Launder et Spalding (1974).

Le modèle $k-\epsilon$ est le modèle le plus largement utilisé dans les études industrielles car il s'agit d'un modèle relativement simple, robuste, et disponible dans presque tous les codes. Dans ce cas, les flux scalaires turbulents sont exprimés en introduisant, par analogie avec la loi de diffusion moléculaire de Fick, le tenseur de diffusivité turbulente K_{ij}, relié au flux $\langle U'_{f,j}c'\rangle$ de la manière suivante :

$$\langle U'_{f,j}c'\rangle = -K_{ij}\frac{\partial\langle c\rangle}{\partial x_j} \ . \tag{2.4}$$

Généralement, K_{ij} est supposé diagonal, et dans le cas du modèle $k-\epsilon$, il est exprimé en fonction des grandeurs turbulentes de l'écoulement au point considéré de la façon suivante :

$$K_{ii} = \frac{\nu_t}{Sc_t} \ , \tag{2.5}$$

où $\nu_t = C_\mu k^2/\epsilon$ est la viscosité turbulente et Sc_t le nombre de Schmidt turbulent, usuellement compris entre 0.7 et 1 pour l'air.

Les modèles du second ordre, quant à eux, déterminent les flux turbulents directement par la résolution de leurs propres équations de transport. Ces modèles font alors intervenir de nouvelles inconnues : les corrélations triples entre les fluctuations turbulentes, qu'il s'agit alors de modéliser. Un exemple de modèle du second ordre est le modèle dit $R_{ij}-\epsilon$, qui résout les équations de transport pour les tensions de Reynolds et la dissipation turbulente.

Le choix du modèle de turbulence se fait en fonction du niveau de détail requis, de la physique du problème ou des objectifs applicatifs des études menées. Pour donner un exemple concret, dans le cas de l'atmosphère, le modèle $R_{ij}-\epsilon$ est en théorie plus approprié que le modèle $k-\epsilon$, ce dernier ne rendant pas compte mathématiquement des phénomènes d'anisotropie de la turbulence atmosphérique.

2.2.3.2 La modélisation LES

Le principal problème de la modélisation RANS dans l'étude de la dispersion atmosphérique est qu'étant donné que toutes les échelles tourbillonnaires sont modélisées

de manière statistique, elle ne rend compte que globalement du rôle et de l'effet des différentes tailles de tourbillons sur le nuage dans l'écoulement.

La modélisation LES permet en partie de lever ce problème car elle résout explicitement les équations de Navier-Stokes pour les grosses structures (*i.e.*, celles de taille supérieure à la taille de maille utilisée) donc leur effet sur la dispersion est explicitement pris en compte. Les structures de taille inférieure à la taille de maille utilisée sont quant à elles modélisées par un modèle dit de sous-maille, donc il s'agit de garder à l'esprit que l'approche LES ne fournit pas exactement toute l'information.

Toutefois, l'argument principal en faveur de cette approche est avancé notamment par Townsend (1980) et Tennekes et Lumley (1972), selon qui les écoulements turbulents diffèrent les uns des autres principalement par leurs grandes structures tourbillonnaires : les petites échelles sont elles statistiquement similaires quel que soit l'écoulement et la paramétrisation sous-maille a ainsi des propriétés universelles et indépendantes des différences dues aux grandes échelles des écoulements.

2.2.3.3 La simulation DNS

Pour une résolution complète de toutes les structures tourbillonnaires, il faudrait idéalement se tourner vers la DNS mais son coût est très élevé si bien que celle-ci n'est pas encore envisageable aux échelles atmosphériques (nombre de Reynolds Re très grand) avec les moyens de calcul dont nous disposons actuellement.

Ainsi, pour conclure, l'avantage principal des modèles eulériens repose sur le fait qu'ils permettent de tenir compte de toutes les variations du champ de vitesse en environnement complexe. Cependant, ils impliquent en conséquence un temps de calcul relativement important. De plus, ils ne sont généralement pas adaptés au voisinage des sources, du moins pour le cas des modèles RANS à viscosité turbulente. En effet, dans ces modèles, le tenseur de diffusivité turbulente est supposé dépendre uniquement des caractéristiques locales de l'écoulement et ne prend donc pas en compte la distance à la source et la taille du panache. Or, nous avons pu voir que celui-ci est en fait très variable du fait de la contribution différente à la dispersion du nuage des différentes échelles de structures tourbillonnaires. Afin de capturer la différence de comportement entre champ proche et champ lointain, il est préférable de se tourner vers les modèles lagrangiens de type Langevin, qui présentent l'avantage de remplir cette mission. A ce stade, il est important de noter que cette distinction pourrait également être capturée par un modèle eulérien du second ordre sur les fluctuations de concentration (voir détails dans le cas de dispersion d'un rejet ponctuel en vitesse et turbulence homogènes dans Bahlali et al. (2018b) – article également joint en Annexe B de ce manuscrit).

Cependant, ce type de modèle adapté à l'atmosphère est à l'heure actuelle en cours de développement, et n'a donc pas été étudié dans le cadre de cette thèse. Plus de détails sur les relations entre modèles lagrangien et eulérien à différents ordres sont fournis dans le chapitre 3.

2.2.4 Modèles lagrangiens

Les modèles lagrangiens consistent à reproduire le transport convectif des polluants dans l'atmosphère en suivant de manière explicite un grand nombre de particules fluides, dont l'évolution des vitesses est généralement gouvernée par une équation différentielle stochastique de type Langevin. La principale force des modèles lagrangiens réside dans le fait qu'ils traitent la convection sans approximation. Par ailleurs, ils permettent également de s'affranchir des éventuels problèmes de diffusion numérique pouvant être rencontrés avec les modèles eulériens. Enfin, comme nous l'avions précédemment mentionné, un modèle lagrangien de type Langevin est capable de capturer la distinction entre les deux régimes de diffusion correspondant au champ proche et au champ lointain.

Pour être plus rigoureux, l'approche suivie dans ces travaux de recherche suit une formulation hybride eulérienne/lagrangienne, où les champs dynamiques moyens relatifs au fluide porteur (pression, vitesse, température, turbulence) sont calculés via une approche eulérienne et sont ensuite fournis au solveur lagrangien. Ce type de formulation est couramment utilisé dans la littérature atmosphérique pour son efficacité numérique. Notons que dans le cas de notre travail de thèse, nous obtenons les champs dynamiques au moyen du code de calcul CFD *Code_Saturne* utilisé avec un modèle RANS, qui résout donc les équations eulériennes de Navier-Stokes de l'écoulement du vent moyen.

Suivre la trajectoire d'une particule est équivalent à connaître sa position à tout instant, connaissant sa position à un temps initial donné. En se plaçant dans un repère que nous noterons $R = (\mathbf{e_x}, \mathbf{e_y}, \mathbf{e_z})$, la description de la position de cette particule revient à la résolution du système suivant :

$$dX_{p,x} = U_{p,x}(t)dt \ , \tag{2.6a}$$

$$dX_{p,y} = U_{p,y}(t)dt \ , \tag{2.6b}$$

$$dX_{p,z} = U_{p,z}(t)dt \ , \tag{2.6c}$$

où $X_{p,x}$, $X_{p,y}$, $X_{p,z}$ sont les coordonnées de la particule dans le repère R et $U_{p,x}$, $U_{p,y}$, $U_{p,z}$ les composantes de la vitesse des particules dans ce même repère.

Pour résumer et fixer les idées, l'objectif est de calculer le champ de vitesse lié aux particules $U_{p,i}(t)$ afin de pouvoir remonter aux positions des particules via la résolution du système d'équations (2.6). Avec la donnée de ces positions à tous les instants, nous serons à même d'obtenir la concentration en polluant, en comptant simplement le nombre de particules dans chaque cellule du domaine puis en convertissant cette donnée en fraction massique ou volumique (plus de détails dans le chapitre 3). Naturellement, la question qui se pose est donc : comment calculer le champ de vitesse particulaire ?

Nous sommes à même de répondre à ce problème en réalisant un bilan des forces sur chaque particule et en appliquant à chacune le principe fondamental de la dynamique. Cependant – nous en donnerons plus de détails dans le chapitre suivant – ces nouvelles équations font intervenir le champ de vitesse de vent *instantané* eulérien, ce qui suppose de le connaître entièrement. Or, comme nous l'avons mentionné plus haut, notre approche hybride eulérienne/lagrangienne résout les champs dynamiques à l'aide d'un modèle de turbulence RANS du code CFD *Code_Saturne*, ce qui ne nous fournit que la *valeur moyenne* des champs de vitesse et de turbulence liés au vent. Afin de pouvoir résoudre les nouvelles équations apportées par le principe fondamental de la dynamique, nous devons donc reconstituer l'effet de la turbulence. C'est précisément là qu'interviennent les modèles lagrangiens stochastiques.

Les méthodes lagrangiennes sont en effet le plus souvent associées à des modèles stochastiques de dispersion régissant l'évolution des champs de vitesse associés aux particules. Cette idée a initialement été proposée par Taylor (1921), qui, du fait du caractère aléatoire de la turbulence, choisit de représenter le mouvement des particules au moyen d'une équation différentielle stochastique, dite *équation de Langevin*, que nous introduirons au prochain chapitre. Il est alors important de comprendre que tout le problème qui se pose au niveau de la modélisation de la dispersion est ainsi de disposer d'un modèle stochastique consistant physiquement, notamment avec le champ de vitesse du vent. Dans cette perspective, nous nous attacherons dans le chapitre suivant à détailler les principaux modèles lagrangiens stochastiques de la littérature.

2.2.5 Modèles gaussiens

Les modèles gaussiens se basent sur des solutions analytiques de l'équation d'advection-diffusion (2.1), couplée à des paramétrisations semi-empiriques des principaux phénomènes physiques.

Nous choisissons ici de présenter le cas simple d'un rejet ponctuel et instantané d'une quantité Q de polluant au centre d'un repère fixe $(\mathbf{e_x}, \mathbf{e_y}, \mathbf{e_z})$. Un certain nombre d'autres hypothèses simplificatrices sont formulées :

— l'espèce rejetée est inerte et passive ;

— il n'y a pas de mouvement moyen ;

— la turbulence est considérée stationnaire ;

— le terme de diffusion moléculaire est négligeable par rapport au terme de diffusion turbulente.

Sous ces hypothèses, Roberts (1923) introduit la solution suivante :

$$\langle c \rangle(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \exp\left(-\frac{1}{2t}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right)\right) , \tag{2.7}$$

où les σ_i sont les écarts-types de cette distribution de concentration.

Celle-ci a une forme gaussienne et donne ainsi son nom au modèle. L'approche gaussienne consiste en fait à paramétrer les écarts-types ci-dessus à partir de campagnes de mesures. Parmi les paramétrisations les plus utilisées, nous pouvons citer celles de Doury (1976) et Pasquill (1961). Par ailleurs, cette solution élémentaire peut être intégrée sur le temps ou l'espace afin d'obtenir les solutions analytiques de nombreux problèmes : bouffée, panache, rejet ponctuel, linéique, etc.

Cependant, outre le fait d'être basés sur des paramétrisations empiriques, les modèles gaussiens présentent d'autres limitations : en particulier, excepté les modèles dits de nouvelle génération, ils ne prennent pas en compte la topographie, la rugosité des sols ou encore la présence de bâtiments et d'obstacles – ou alors parfois, mais de manière très simplifiée.

Chapitre 3

Modélisation lagrangienne stochastique de la dispersion

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

Sommaire

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

3.1 Modélisation lagrangienne de la dispersion turbulente

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

3.1.1 Evolution de la phase continue

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

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

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

où $P = p + \rho g x_i \delta_{iz}$.

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

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

$$P = \langle P \rangle + P' \ . \tag{3.2b}$$

Les équations moyennées obtenues sont ainsi :

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

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

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

3.1.2 Evolution de la phase dispersée

3.1.2.1 Principe fondamental de la dynamique

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

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

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

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

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

où :

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

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

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

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

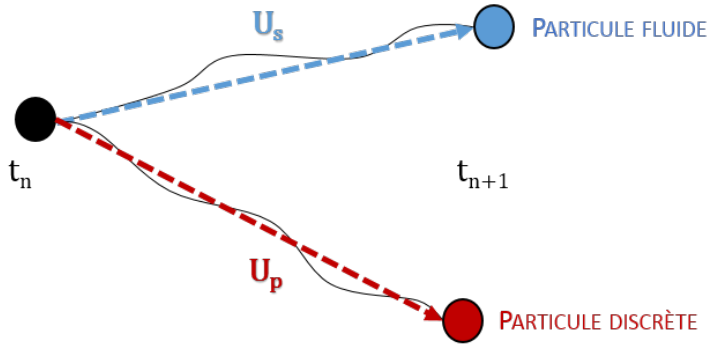


FIGURE 3.1 – Effet de séparation des trajectoires (d'après MINIER et PEIRANO (2001)).

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

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

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

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

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

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

3.1.2.2 Hypothèse de particules lourdes

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

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

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

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

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

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

où Re_p est le nombre de Reynolds particulaire :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.1.3.1 Mouvement brownien et équation de Langevin

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

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

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

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

— un terme déterministe, correspondant à un frottement dynamique $-a\mathbf{U}(t)$ associé à la viscosité du fluide environnant, et tendant à immobiliser la particule ;

— un terme stochastique, correspondant à une force aléatoire propre au mouvement brownien appelée *bruit blanc gaussien* et exprimée via une fonction aléatoire $\xi(t)$, qui tend à maintenir en mouvement la particule.

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

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

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

3.1.3.2 Outils probabilistes

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

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

Densité de probabilité associée à un processus stochastique :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Processus de Markov :

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

Bruit blanc gaussien :

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

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

Nous pouvons résumer quelques propriétés importantes de la fonction ξ :

— ξ est une gaussienne ;

— ξ est discontinue partout ;

— l'intégrale temporelle de ξ est continue mais non différentiable en tout instant t.

Processus de Wiener :

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

$$W(t) = \int_0^t \xi(s)\mathrm{d}s \ . \tag{3.21}$$

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

$$dW(t) = \xi(t)dt \ . \tag{3.22}$$

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

3.1.3.3 Introduction aux méthodes PDF

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

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

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

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

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

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

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

$$\langle dW_i(t)dW_j(s)\rangle = \delta_{ij}\delta(t-s)dtds \tag{3.24}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.1.3.4 Le *Simplified Langevin Model*

Ecriture du modèle :

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

$$dX_{p,i} = U_{p,i}\, dt \ , \tag{3.27a}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

$$T_L = \frac{1}{\dfrac{1}{2} + \dfrac{3}{4}C_0}\frac{k}{\epsilon}\ . \tag{3.30}$$

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

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

$$b_{ij} = \sqrt{C_0\epsilon}\,\delta_{ij}\ , \tag{3.32}$$

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

Extension du SLM aux applications diphasiques :

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

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

où :

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

avec :

$$\beta = \frac{T_L}{T_E} \ . \tag{3.35}$$

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

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

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

3.1.3.5 Modèle diphasique "complet"

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

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

Par identification, nous obtenons donc :

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

$$b_{ij} = \sqrt{C^*_0\epsilon}\delta_{ij} \ . \tag{3.37b}$$

Ce modèle propose des définitions différentes pour $T^*_{L,i}$ selon les directions de l'espace (formules de Csanady, cf. Minier et Peirano (2001)).

Par ailleurs, C^*_0 est défini comme suit :

$$C^*_0 = C_0\frac{T_L}{T^*_{L,i}}\frac{\widetilde{k}}{k} + \frac{2}{3}(\frac{T_L}{T^*_{L,i}}\frac{\widetilde{k}}{k} - 1) \ , \tag{3.38}$$

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

$$\widetilde{k} = \frac{3}{2}\frac{\sum_{i=1}^{3}\frac{T_L}{T^*_{L,i}}\langle U'^2_{f,i}\rangle}{\sum_{i=1}^{3}\frac{T_L}{T^*_{L,i}}} \ . \tag{3.39}$$

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

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

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

3.1.3.6 A propos des fluctuations de concentration

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

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

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

$$dc = -\frac{c - \langle c \rangle}{\tau_c} dt \tag{3.40}$$

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

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

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

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

3.2 Modèles lagrangiens de la littérature atmosphérique

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

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

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

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

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

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

3.2.1 Cas de la turbulence homogène isotrope

Dans des conditions de turbulence homogène isotrope, le terme de dérive est unique et le modèle s'écrit (Sawford et Guest, 1988; Wilson et Sawford, 1996) :

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

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

$$\sigma^2_{U_{f,i}} = \frac{2}{3}k \ . \tag{3.42}$$

Donc :

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

En réinjectant dans (3.41) :

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

Enfin, en posant :

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

on retrouve le SLM (3.29).

3.2.2 Modèles stochastiques en turbulence inhomogène

3.2.2.1 Turbulence inhomogène gaussienne

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

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

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

où :

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

$$b_{ij} = \sqrt{C_0 \epsilon} \delta_{ij} , \tag{3.47b}$$

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

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

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

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

3.2.2.2 Turbulence inhomogène non gaussienne : cas de la CLA convective

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

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

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

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

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

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

Cette technique a été utilisée notamment par De Baas et al. (1986), Sawford et Guest (1987), Luhar et Britter (1989), Weil (1990), Cassiani et al. (2005), Cassiani et al. (2015). Elle met en relief six inconnues : A_1, m_1, σ_1, A_2, m_2, σ_2. Le modèle de fermeture introduit par Luhar et Britter (1989) formule qu'en principe, ces six inconnues peuvent être obtenues par les équations sur les trois premiers moments :

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

où $n = 0.1, 2, 3$.

Les deux dernières équations nécessaires à la fermeture du modèle sont proposées par Bærentsen et Berkowicz (1984) et Luhar et Britter (1989) qui supposent :

$$m_1 = \sigma_1 \ , \tag{3.52a}$$
$$m_2 = -\sigma_2 \ . \tag{3.52b}$$

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

$$\sigma_2 = \left((\langle V_{p,z}^3 \rangle^2 + 8 \langle V_{p,z}^2 \rangle^3)^{1/2} - \langle V_{p,z}^3 \rangle \right) / 4 \langle V_{p,z}^2 \rangle \ , \tag{3.53a}$$
$$\sigma_1 = \langle V_{p,z}^2 \rangle / 2\sigma_2 \ , \tag{3.53b}$$
$$m_1 = \sigma_1 \ , \tag{3.53c}$$
$$m_2 = -\sigma_2 \ , \tag{3.53d}$$
$$A_1 = \sigma_2 / (\sigma_2 + \sigma_1) \ , \tag{3.53e}$$
$$A_2 = \sigma_1 / (\sigma_2 + \sigma_1) \ . \tag{3.53f}$$

Les équations de Langevin à résoudre du modèle de Luhar et Britter (1989) sont finalement résumées par Rodean (1996) :

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

où :

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

et :

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 \ , \tag{3.56}$$

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

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

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

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} \mathrm{d}t \ . \tag{3.58}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.3 Notre stratégie de modélisation

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

— en **atmosphère stable ou neutre**, la turbulence peut être considérée gaussienne et nous pouvons donc utiliser le même modèle ;

— en **atmosphère convective**, la turbulence perd son caractère gaussien et il semble meilleur de choisir de ce fait : soit un modèle supposant la densité de

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

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

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

Chapitre 4

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

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

Sommaire

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

4.1 Présentation générale de *Code_Saturne*

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

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

4.1.1 Module atmosphérique

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

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



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

4.1.2 Module lagrangien

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

4.2 Mise en données numérique

4.2.1 Généralités

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

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

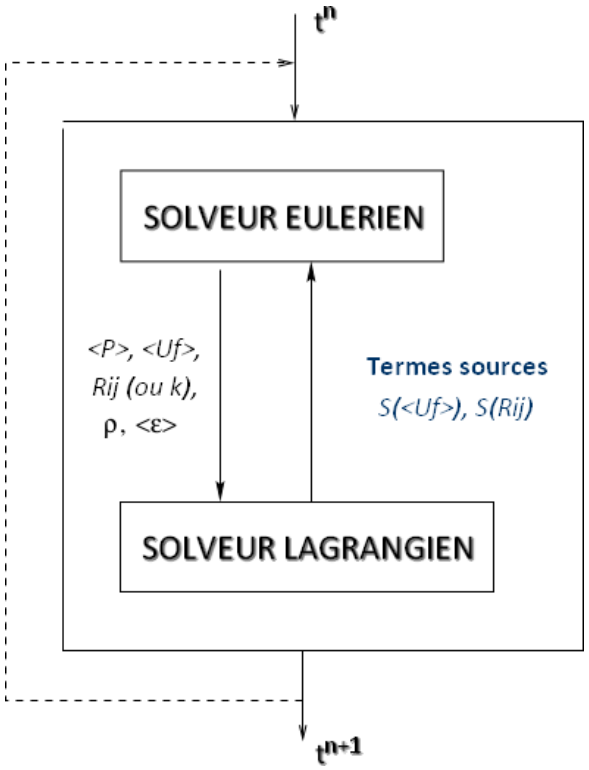


FIGURE 4.1 – Interaction des solveurs eulérien et lagrangien (d'après MINIER et PEIRANO (2001)).

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

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

- entrée ;
- entrée "convective" ;
- sortie ;
- symétrie ;
- paroi lisse ;
- paroi rugueuse.

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

4.2.2 Modélisation eulérienne RANS

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

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

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

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

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

***Simple Gradient Diffusion Hypothesis* (SGDH) :**

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

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

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

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

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \ , \tag{4.3}$$

où $C_\mu = 0.09$.

***Generalized Gradient Diffusion Hypothesis* (GGDH) :**

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

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

où $C_\theta = 0.3$.

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

***Algebraic Diffusion Model* (AFM) :**

Les détails de l'obtention de ce modèle sont fournis dans Dehoux (2012). Il s'écrit de la façon suivante :

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

Les différentes constantes de ce modèle sont également détaillées dans Dehoux (2012).

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

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

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

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

4.2.2.2 Injection en condition limite

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

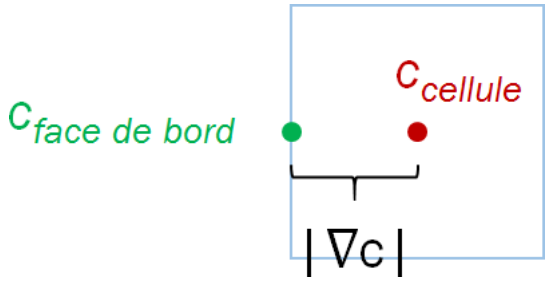


FIGURE 4.2 – Flux diffusif entre face de bord et centre cellule. $|\nabla c|$ représente le gradient de concentration entre la face de bord et le centre de la cellule.

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

$$Q_{total} = Q_{convectif} + Q_{diffusif} \ , \tag{4.7}$$

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

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

4.2.2.3 Injection en terme source

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

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

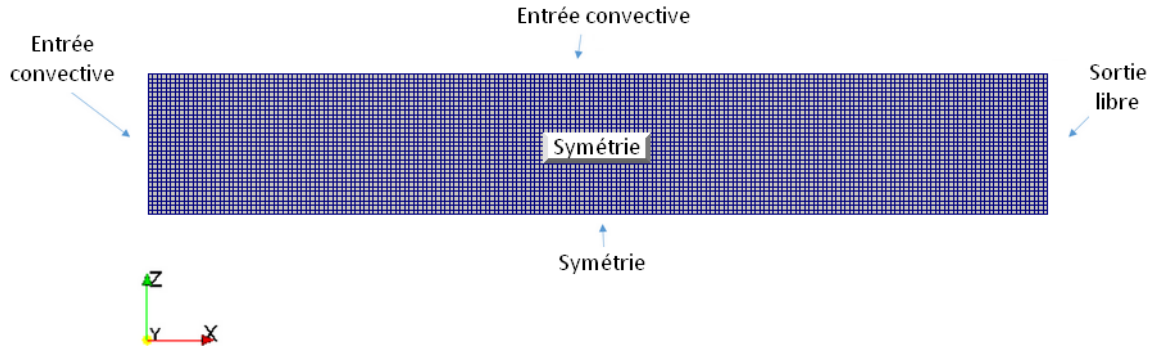


FIGURE 4.3 – Maillage 2D considéré pour l'analyse de l'injection de polluant en condition limite ou terme source.

4.2.2.4 Equivalence entre injection en condition limite et terme source

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

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

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

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

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

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

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

Injection uniforme de polluant :

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

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

Injection localisée de polluant :

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

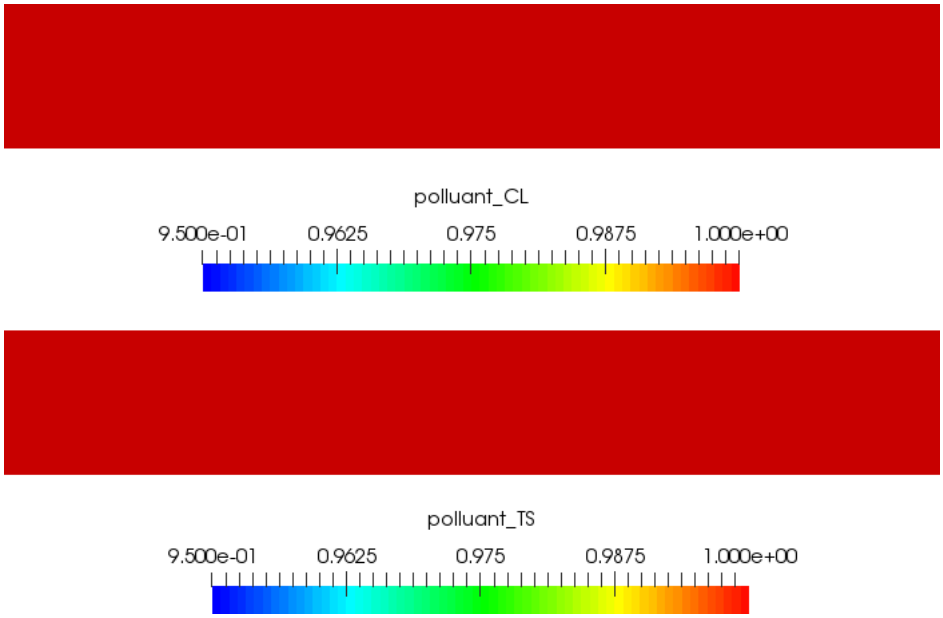


FIGURE 4.4 – Champs de fraction massique c_{CL} et c_{TS} (kg/kg) pour le cas de l'injection uniforme en champs de vitesse et turbulence homogènes.

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

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

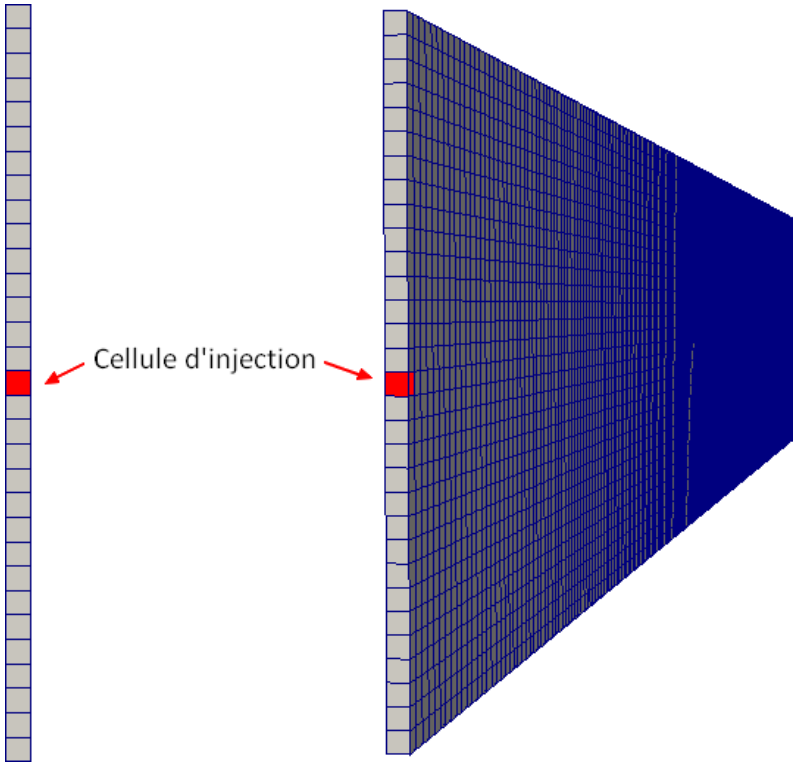


FIGURE 4.5 – Localisation de la cellule d'injection dans le domaine pour le cas de l'injection localisée de polluant.

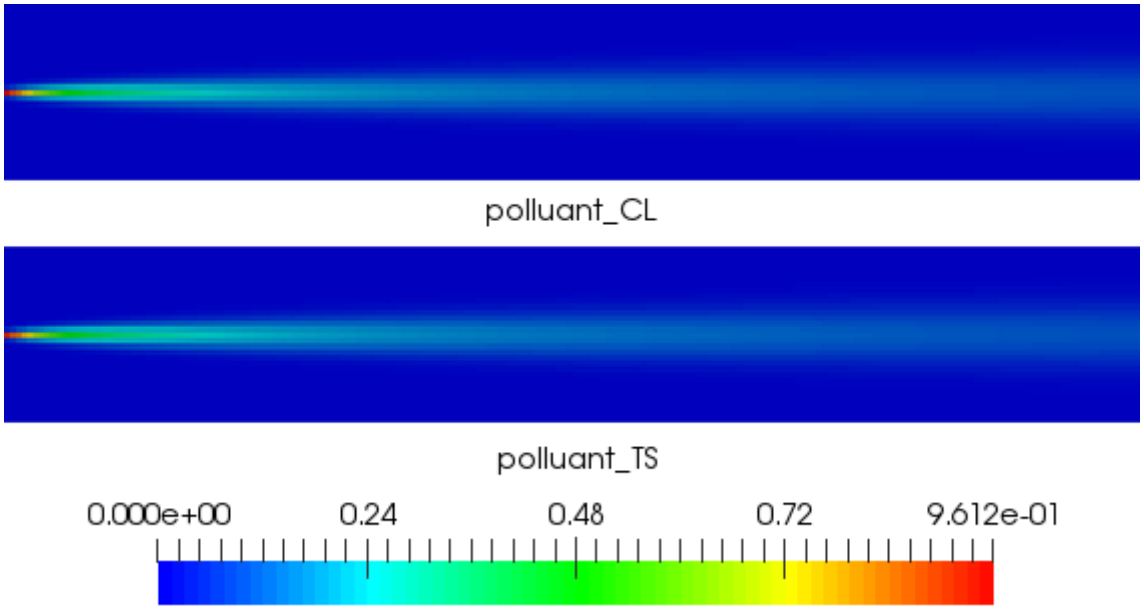


FIGURE 4.6 – Champs de fraction massique c_{CL} et c_{TS} (kg/kg) pour le cas de l'injection localisée en champs de vitesse et turbulence homogènes.

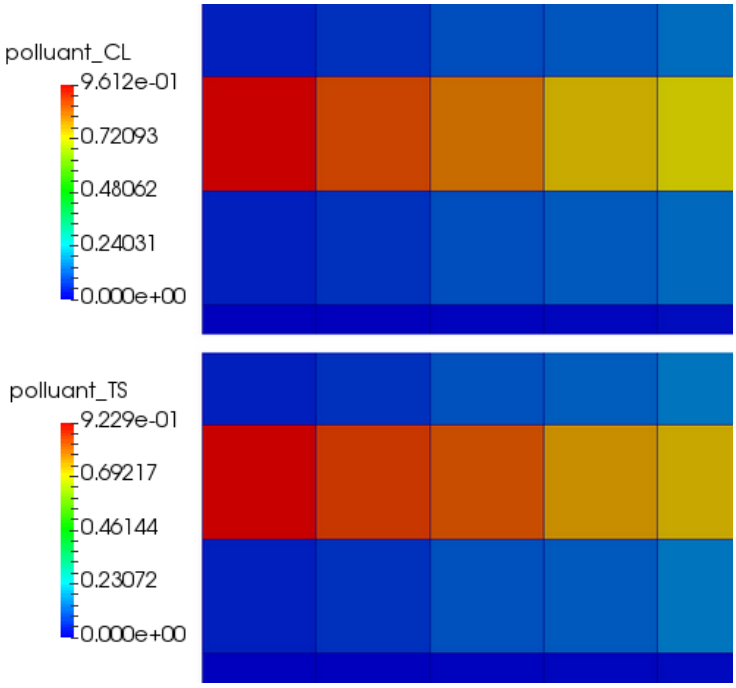


FIGURE 4.7 – Champs de fraction massique c_{CL} et c_{TS} (kg/kg) pour le cas de l'injection localisée de polluant en champs de vitesse et turbulence homogènes – zoom près de la zone de rejet.

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

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

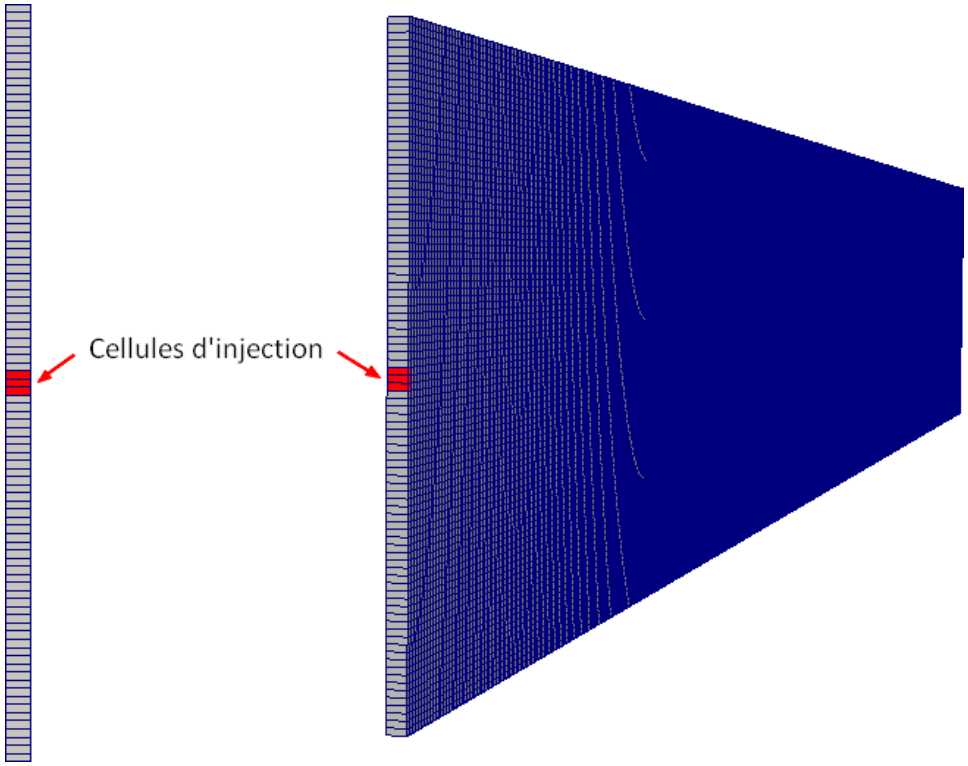


FIGURE 4.8 – Localisation des cellules d'injection dans le domaine avec le maillage raffiné, pour le cas de l'injection localisée en champs de vitesse et turbulence homogène.

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

4.2.3 Modélisation lagrangienne

4.2.3.1 Principe général

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

— le diamètre D_p ;

— la densité ρ_p ;

— le nombre de particules que l'on souhaite injecter au niveau de la zone considérée N ;

— la fréquence d'injection de ces particules f_p ;

— la vitesse de ces particules $U_{p,i}$;

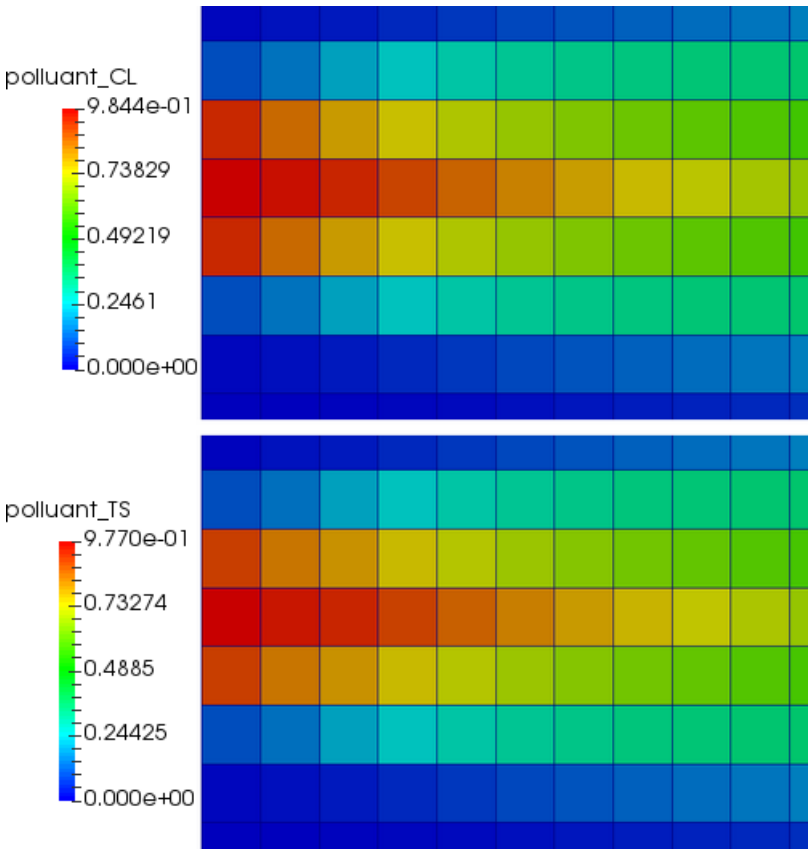
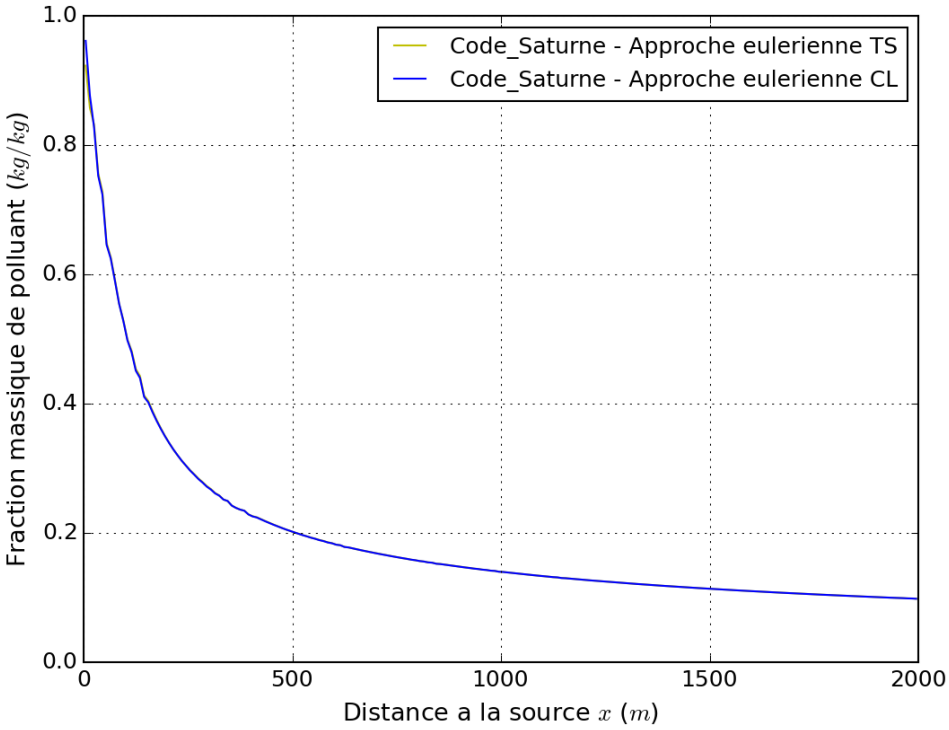
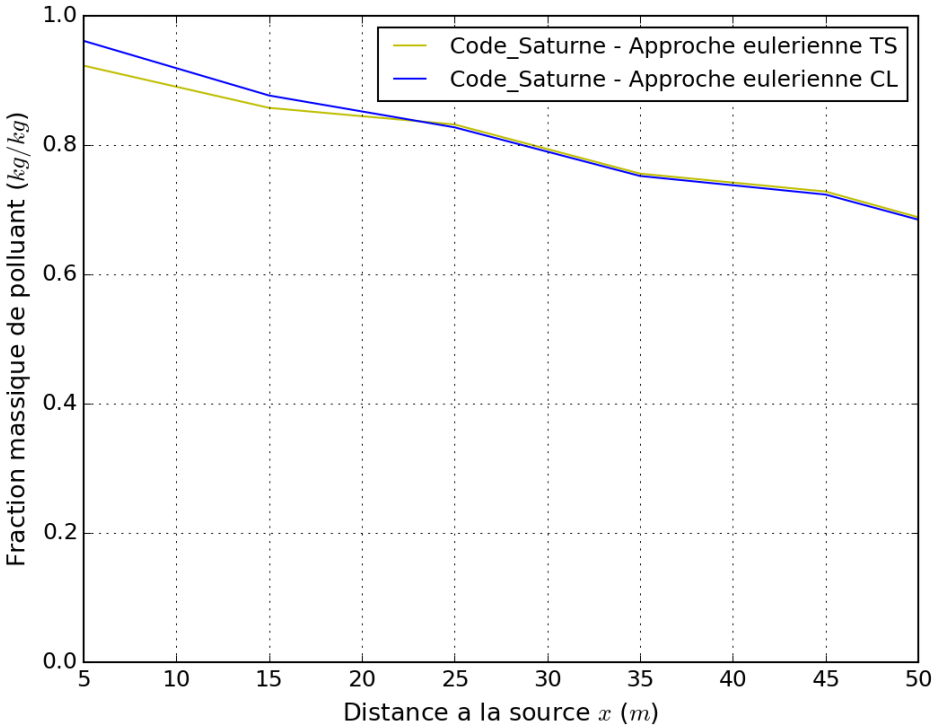


FIGURE 4.9 – Champs de fraction massique c_{CL} et c_{TS} (kg/kg) pour le cas de l'injection localisée en champs de vitesse et turbulence homogène, avec le maillage raffiné – zoom près de la zone de rejet.



(a) Vue globale



(b) Zoom près de la zone de rejet

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

— le poids statistique associé à chaque particule W_p.

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

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

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

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

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

$$W_p = \frac{Q_p}{\delta m_p/dt} \ , \tag{4.9}$$

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

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

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

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

Cette méthode de "comptage" de particules dans des volumes donnés pour déterminer les concentrations a été utilisée par de nombreux auteurs, pour sa simplicité d'un point de vue technique (voir Vendel (2011); Castelli et al. (2017); Tinarelli et al. (2013); Borgas et Sawford (1994); Luhar et Rao (1994); Hurley et Physick (1991), etc.). Il est important de noter que calculer les concentrations de cette manière peut demander la simulation d'un grand nombre de particules. Une autre manière de procéder, limitant le nombre de particules, peut être d'utiliser des méthodes dites "kernel" (Gingold et Monaghan, 1982; Lorimer, 1986; De Haan, 1999), qui consistent en étaler la masse associée à chacune des particules, suivant une fonction de densité (Vendel, 2011). Cependant, ces méthodes ne sont pas adaptées à des terrains complexes ou en présence d'obstacles (Tinarelli et al., 2013) ; c'est pourquoi nous n'avons pas suivi cette voie.

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

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

4.2.3.2 Conditions aux limites

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

— entrée ;

— sortie ;

— symétrie (flux de particules nul) ;

— rebond élastique ;

— déposition définitive (avec ou sans sortie de la particule de la mémoire) ;

— déposition avec réentraînement possible ;

— encrassement des grains de charbon.

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

$$U_{p,x}^{in} = U_{p,x}^{out} \ , \tag{4.11a}$$
$$U_{p,y}^{in} = U_{p,y}^{out} \ , \tag{4.11b}$$
$$U_{p,z}^{in} = -U_{p,z}^{out} \ , \tag{4.11c}$$

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

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

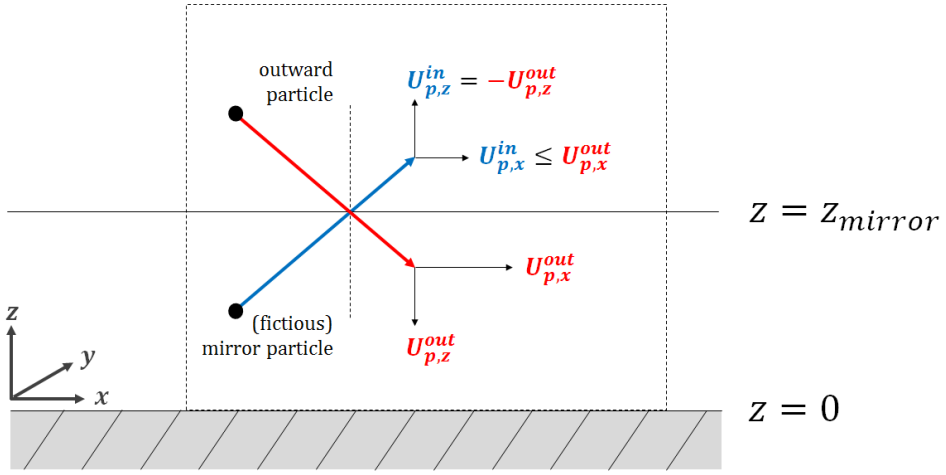


FIGURE 4.11 – Représentation de l'interaction particule/paroi montrant comment les particules arrivant à $z = z_{mirror}$, choisi dans la couche logarithmique, sont réfléchies dans le domaine, de manière à respecter un flux de masse nul dans la direction normale à la paroi, ainsi que l'échange de quantité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

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

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

$$U^{in}_{p,z} = -U^{out}_{p,z} \ , \tag{4.12c}$$

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

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

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

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

4.3.1 Un peu de théorie...

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

4.3.1.1 Solution analytique et "écart-type du panache"

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

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

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

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

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

où $K_{ij} = 0$ si $i \neq j$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$T_L = \int_0^\infty R_L(s) \mathrm{d}s \ . \tag{4.19}$$

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

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

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

$$\int_0^t (t-s) R_L(s)\, \mathrm{d}s \approx t \int_0^\infty R_L(s)\, \mathrm{d}s = t T_L \ , \tag{4.21}$$

d'où :

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

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

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

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

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

4.3.1.2 Ecart-type impliqué par le SLM

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

$$R_L(s) = exp(-|s|/T_L) \ . \tag{4.23}$$

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

$$\sigma^2_y(t) = 2\sigma^2_{U_{f,x}} T_L[t - T_L(1 - e^{-t/T_L})] \ . \tag{4.24}$$

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

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

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



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

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

4.3.2 Mise en données du calcul

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

4.3.3 Résultats

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

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

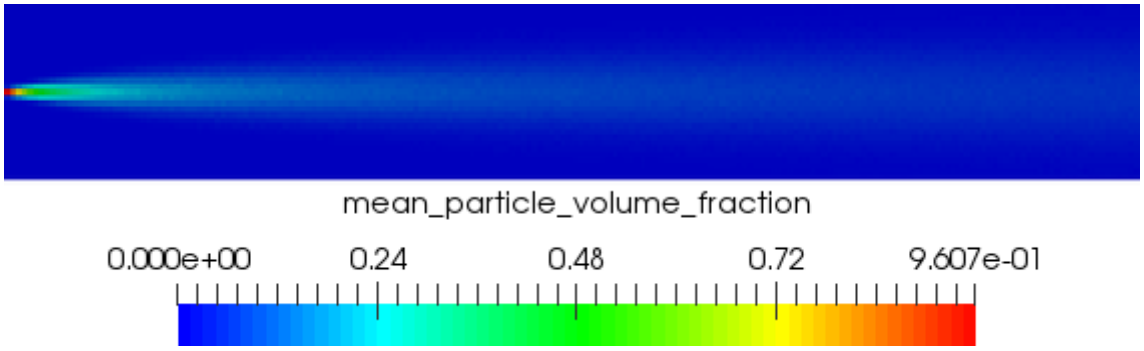


FIGURE 4.13 – Champ de fraction massique lagrangienne c_{lagr} (kg/kg), pour le cas d'un rejet ponctuel continu en vent uniforme et turbulence homogène.

4.3.3.1 Comparaison des modèles eulérien et lagrangien à la solution analytique

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

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

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

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

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

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

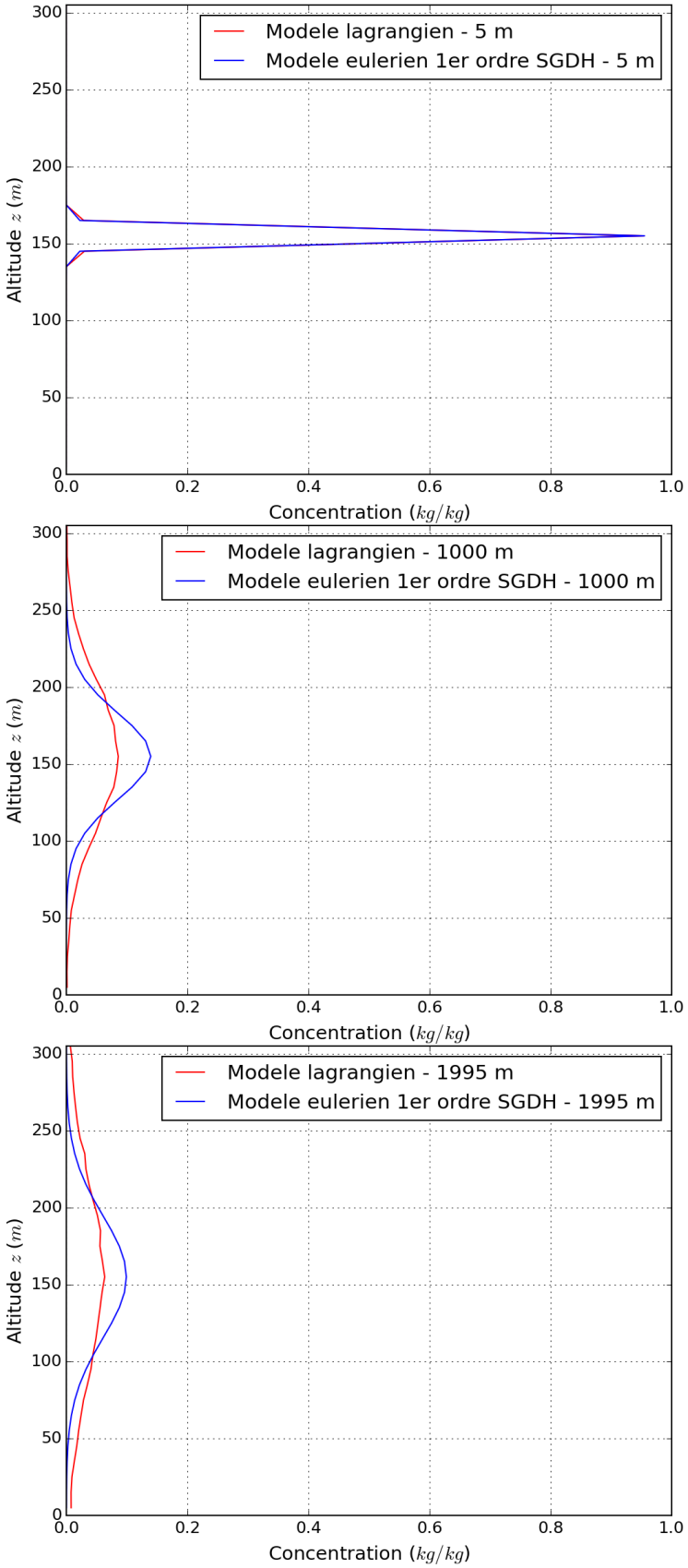


FIGURE 4.14 – Profils verticaux de fraction massique pour 3 différentes distances à la source, pour le cas d'un rejet ponctuel continu en vent uniforme et turbulence homogène.

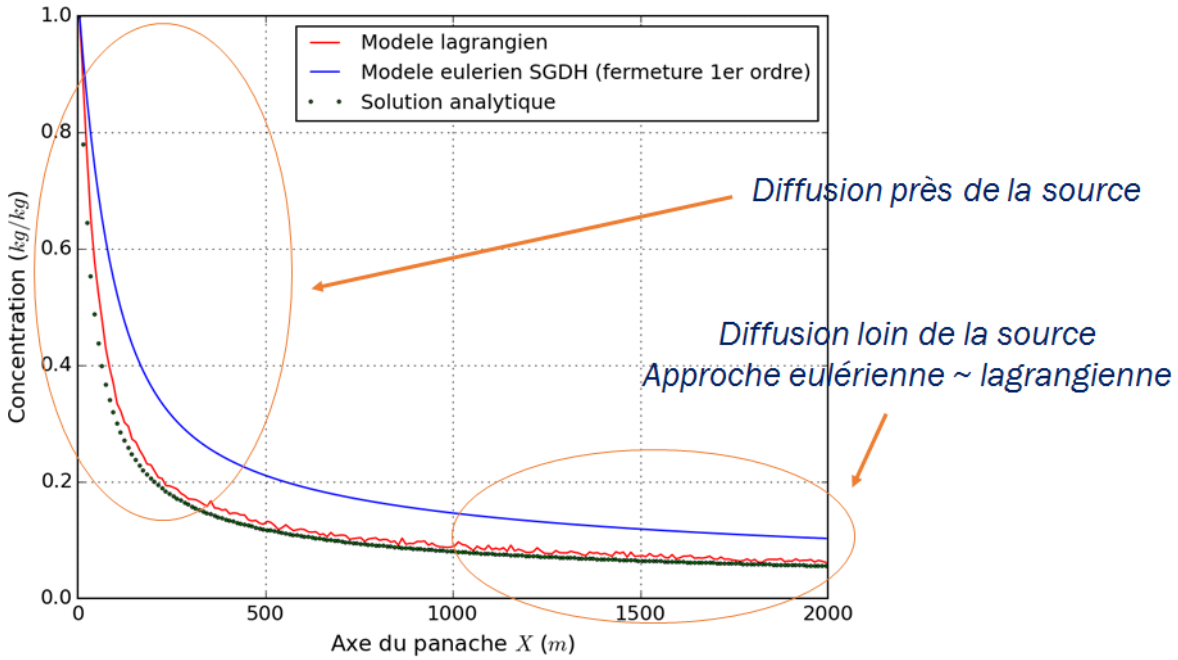


FIGURE 4.15 – Profil de concentration maximale, pour le cas d'un rejet ponctuel continu en vent uniforme et turbulence homogène.

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

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

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

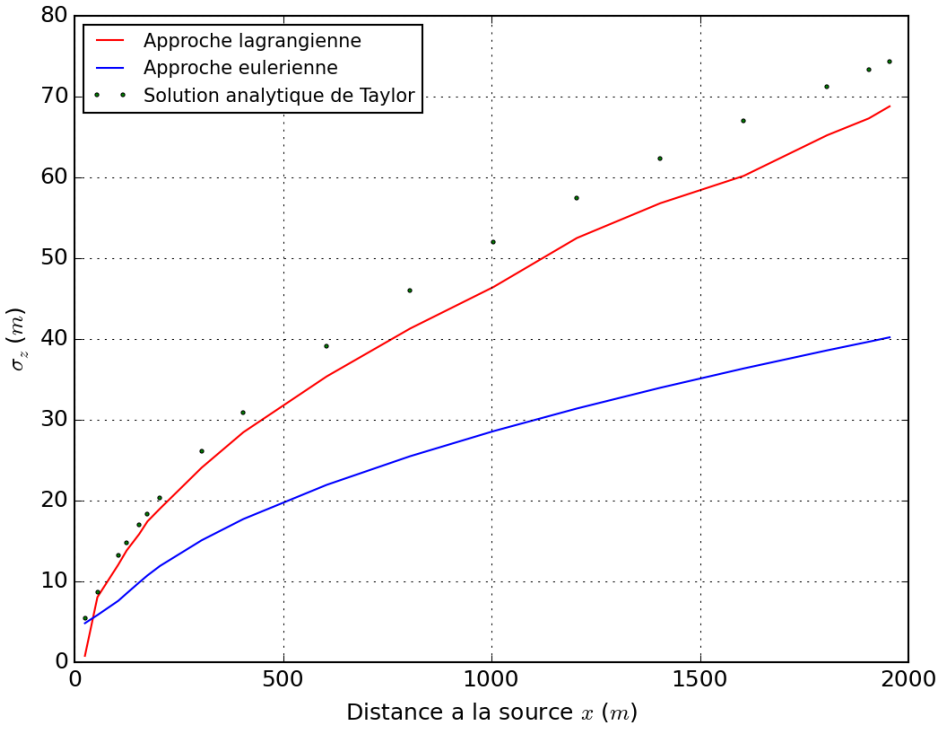


FIGURE 4.16 – Ecart-type en fonction de la distance à la source

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

Chapitre 5

Article : Sur le critère de mélange homogène et les problèmes de consistance dans les modèles hybrides eulériens/lagrangiens stochastiques de dispersion

Cet article a été soumis à *Atmospheric Environment*. Il développe tout d'abord la théorie de la modélisation de la dispersion lagrangienne stochastique. Il traite ensuite le problème du critère de mélange homogène, démontrant que le bon respect de celui-ci réside en la bonne introduction du terme de gradient de pression en tant que terme de dérive moyen de l'équation de Langevin. Sur ce sujet, des considérations d'ordre numérique sont abordées afin d'expliquer comment correctement implémenter le terme de gradient de pression dans la pratique et les difficultés numériques que cela peut engendrer. Ensuite, les questions de consistance entre champs eulérien et lagrangien sont développées. L'ensemble de ces points théoriques est supporté par des vérifications numériques couvrant un large panel d'applications pratiques.

Sommaire

5.1 Article **88**

5.2 Complément **134**

5.1 Article

On the well-mixed condition and consistency issues in hybrid Eulerian/Lagrangian stochastic models of dispersion

Meïssam L. Bahlali[a], Christophe Henry[b], Bertrand Carissimo[a], Jean-Pierre Minier[c]

[a] *CEREA, Joint laboratory Ecole des Ponts ParisTech/EDF R&D, 6 quai Watier, 78401 Chatou Cedex, France*

[b] *Laboratoire Lagrange, Université de la Côte d'Azur, OCA, CNRS, 06304 Nice Cedex 4, France*

[c] *EDF R&D, MFEE, 6 quai Watier, 78401 Chatou Cedex, France*

Abstract

The purpose of the present article is to clarify issues related to the expression of Lagrangian stochastic models used for atmospheric dispersion applications. Two aspects are addressed: the respect of the well-mixed criterion and the correspondence between Eulerian and Lagrangian turbulence models when they are combined in practical simulations. Through theoretical and numerical considerations, it is first demonstrated that the fulfillment of the well-mixed criterion depends only on the proper incorporation of the mean pressure-gradient term as the mean drift term of the Langevin equation. In the second part of this work, consistency issues between duplicate fields within Eulerian/Lagrangian hybrid formulations are brought out. Such hybrid methods, where mean flow quantities calculated with an Eulerian approach are provided to a Lagrangian one, are commonly used in atmospheric dispersion simulations for their numerical efficiency. Nevertheless, it is shown that serious inconsistencies can result from coupling Eulerian and Lagrangian models that do not correspond to the same level of description of the fluid turbulence, thereby limiting the range of validity of some currently-used hybrid formulations.

Keywords: Turbulence, Stochastic modeling, Eulerian/Lagrangian methods, Well-mixed criterion, Consistency issues, Dispersion models

1. Introduction

Lagrangian stochastic models for atmospheric dispersion purposes have been studied extensively since the 1980s. These models reproduce advective transport in the atmosphere by explicitly tracking a large number of representative fluid particles where, usually, the evolution of particle velocities is driven by a stochastic differential equation of a Langevin type. First well-known references in Lagrangian stochastic modeling are, for example, Wilson et al. (1981); Van Dop et al. (1985); De Baas et al. (1986); Sawford (1985), or the classic paper Thomson (1987). In most of these works, the so-called 'well-mixed condition'

Email address: meissambahlali@gmail.com (Meïssam L. Bahlali)

issue was brought out as a challenging issue. First introduced by Sawford (1986), this issue corresponds to the thermodynamic constraint stating that an initially uniform distribution of particles (each representing an equal amount of mass) in an incompressible flow must remain uniform. The well-mixed criterion is a necessary criterion for any Lagrangian stochastic model to be regarded as acceptable since its violation means that density is no longer constant (therefore at variance with the incompressibility constraint). For that reason, various authors have tried to provide conditions to ensure that it is respected. Yet, how it has to be introduced or accounted for in specific Lagrangian stochastic models still needs further clarification.

Since the works mentioned above, significant improvements in Lagrangian stochastic modeling have been achieved in other fields where similar models are currently applied, in particular in turbulent combustion modeling (Pope, 1985, 1991), in single-phase flow turbulence modeling (Pope, 1994b) as well as in dispersed turbulent two-phase flows applications (Minier and Peirano, 2001; Minier, 2015). For instance, Pope (1987) showed that a necessary and sufficient condition for the well-mixed criterion to be fulfilled is that the calculated mean velocity field satisfies the continuity equation and that this condition is, in turn, equivalent to incorporating properly the mean pressure-gradient term in the Langevin model. However, in the recent atmospheric literature relative to Lagrangian dispersion modeling (see, *e.g.*, Franzese (2003); Stohl et al. (2005); Alessandrini and Ferrero (2009); Tinarelli et al. (2013)), the formulations introduced by Pope and referred to as 'PDF (Probability Density Function) methods' are not widely used. Cassiani et al. (2005a,b, 2007) referred to Pope's PDF framework for micro-mixing modeling but followed Thomson (1987)'s approach to close the fluctuating pressure gradient and viscous terms.

In this context, this paper aims at bridging the developments made in Lagrangian stochastic models in reactive and two-phase flows with atmospheric dispersion applications. It has a two-fold objective: (a) to clarify remaining confusions about the well-mixed condition; (b) to provide a better understanding of consistency issues between fields obtained from Eulerian and Lagrangian simulations when hybrid Eulerian/Lagrangian numerical formulations are used. More specifically, two points are brought out and supported by numerical applications:

(i) The respect of the well-mixed criterion depends only on the proper introduction of the mean pressure-gradient term as the mean drift component of the Langevin model, regardless of further details.

(ii) In so-called Eulerian/Lagrangian hybrid numerical formulations, such as the one considered in the present simulations, the mean fields corresponding to the first and second moments of the velocity field are duplicate fields and need to be regarded as such. In other words, identity between predictions of the Eulerian and Lagrangian solvers must be verified for a model and its numerical implementation to be acceptable.

This paper is organized as follows. In section 2, Lagrangian stochastic models for atmospheric dispersion are introduced and the formulation of the well-mixed condition, as

well as consistencies between duplicate turbulence models and wall-boundary conditions, are discussed. Numerical assessment of the respect of the well-mixed criterion through the simple introduction of the mean pressure gradient is detailed in section 3, through three simulations of non-homogeneous turbulent flows that cover a wide range of practical situations. The consistency issue between Eulerian and Lagrangian turbulence models is addressed in section 5 before reaching conclusions.

2. Theoretical background on particle stochastic methods

2.1. Introduction to the well-mixed condition problem

In particle-based methods, a fluid flow is represented by tracking a large number of (fluid) particles. These particles can be seen as small 'frozen' amount of mass being transported with the flow or as points (to which a given mass is assigned) moving through a domain. Depending on the issue being addressed, different variables can be attached to particles, such as temperature, scalar values (either passive or reactive), compositions, etc., but the flow dynamics is always captured by explicitly tracking particle positions and velocities. For turbulent flows, when only reduced information, such as one-point statistics (*e.g.*, mean fluid velocities, kinetic energy, etc.), are needed, particle dynamics is often modeled by replacing the exact dynamics by a stochastic model. Then, the application of Kolmogorov theory to Lagrangian statistics for high Reynolds-number flows suggests to use a stochastic diffusion process for the evolution of fluid-particle velocities. The rationale and details leading to such formulations have been addressed at length elsewhere and readers are referred to existing comprehensive reviews for more details on this subject (Monin and Yaglom, 1971; Pope, 1985, 1994a, 2000; Minier and Peirano, 2001; Minier, 2016).

The basis of Lagrangian stochastic models for atmospheric studies consists therefore in describing fluid particle locations $\mathbf{X}_p(t)$ and velocities $\mathbf{U}_p(t)$ using the general formulation:

$$dX_{p,i} = U_{p,i}\,dt\ , \tag{1a}$$

$$dU_{p,i} = a_i(\mathbf{X}_p(t), \mathbf{U}_p(t), t)\,dt + b_{ij}(\mathbf{X}_p(t), \mathbf{U}_p(t), t)\,dW_j\ , \tag{1b}$$

where dW_j are independent Wiener processes. Briefly speaking, a Wiener process is a Gaussian process with independent increments of zero mean and with a variance equal to dt (more details can be found in Gardiner (1985); Öttinger (1996)). Eqs. (1) represent the stochastic differential equations (SDEs) for the trajectories of the stochastic process $(\mathbf{X}_p(t), \mathbf{U}_p(t))$.

In the weak sense, this is equivalent to considering particles as samples of a PDF whose evolution is determined by a partial differential equation (PDE), namely the Fokker-Planck equation which writes:

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

where $f = f(t; \mathbf{x}, \mathbf{V})$ is the (Lagrangian) PDF associated to the process $(\mathbf{X}_p(t), \mathbf{U}_p(t))$ and $\mathbf{B}$ the $\mathbf{b^t b}$ tensor. Therefore, adopting a Lagrangian point of view, with Eqs. (1), is helpful to develop a physics-based model as well as to provide a Monte Carlo solution of the Fokker-Planck equation (this is an example of the probabilistic interpretation of PDEs).

The coefficients $\mathbf{a}$ and $\mathbf{b}$, respectively known as the drift vector and the diffusion matrix, are to be determined. The matrix $\mathbf{b}$ is defined following Kolmogorov's similarity theory and the main closure issue is therefore the expression of the drift, *i.e.*, of the vector $\mathbf{a}$. First attempts were to assume a form for the PDF f solution of Eq. (2) that would provide conditions for the determination of $\mathbf{a}$. Along with that assumption, Thomson (1987) reviewed a set of criteria distinguishing 'good Lagrangian stochastic models from bad' and showed that these criteria were all lower or equivalent to the well-mixed criterion. However, the well-mixed criterion alone is not sufficient to define a unique model in three dimensions, and it was shown by Sawford and Guest (1988) and Borgas et al. (1997) that certain flow properties, besides the knowledge of f, need to be accounted for ('non-uniqueness within a class of models that are well-mixed within Thomson's criteria can not be resolved unless flow properties in addition to f are respected', see Wilson and Sawford (1996)). Historically, in the atmospheric literature, authors adopted other selection criteria and worked on a case-by-case basis (homogeneous or inhomogeneous turbulence, Gaussian or non-Gaussian turbulence hypothesis, convective, stable or neutral atmosphere, etc.). As a result, this confusion surrounding expressions of $\mathbf{a}$ has sometimes led to non well-mixed models that made various authors adopt a back-and-forth philosophy and add *ad-hoc* new drift terms to make up for the problem (see Lin and Gerbig (2013)).

Pope (1987)'s paper offered a whole new point of view, by setting the starting point on the mean Navier-Stokes and continuity equations. He showed that the fulfillment of the well-mixed criterion is independent from any model, as long as the mean pressure-gradient term, that is to say the non-modeled part of the Navier-Stokes momentum equation, is properly incorporated in the Langevin model. In other words, the well-mixed criterion is essentially the manifestation that the mean fluid velocity field derived from a Lagrangian model should be a zero-divergence field and satisfy the mean continuity and Navier-Stokes equations. Compared to other attempts, another valuable insight was to clarify the differences between Lagrangian and Eulerian PDFs, as well as their correspondence, and to show that Eulerian PDFs result from Lagrangian ones and are, therefore, outcomes of the modeling approach rather than inputs (see, in particular, a comprehensive account given in Pope (2000), chapter 12, while some definitions are recalled in Appendix B).

In the following subsections, the main points of this PDF approach are recalled and brought out by considering a very simple stochastic model that nevertheless contains the key notions for our general discussion.

2.2. The simplified Langevin model

The Generalized Langevin Model (GLM), developed by Pope (1985, 2000), writes:

$$dX_{p,i} = U_{p,i}\, dt \tag{3a}$$

$$dU_{p,i} = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial \langle P_f \rangle}{\partial x_i} dt + G_{ij}(U_{p,j} - \langle U_{f,j} \rangle)\, dt + \sqrt{C_0 \epsilon_f}\, dW_i \ . \tag{3b}$$

In Eq. (3b), ρ_f is the fluid density and C_0 a constant given by Kolmogorov's theory, while $\langle U_{f,i} \rangle$, $\langle P_f \rangle$, k_f and ϵ_f are the mean velocity, pressure, turbulent kinetic energy and turbulent kinetic energy dissipation rate fields, respectively. The values of the fluid mean fields entering Eq. (3b) are to be understood as being the values taken at the particle location which means that, for example, $\langle U_{f,i} \rangle$ stands for $\langle U_{f,i} \rangle (t, \mathbf{X}_p(t))$. However, in the rest of the paper this explicit dependence is left out for the sake of keeping simple notations. The same is true for the matrix G_{ij} which expresses the return-to-equilibrium term and is modeled as a function of local values of fluid mean fields. A general expression consists in decomposing this matrix as follows

$$G_{ij} = -\left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0\right) \frac{\epsilon_f}{k_f}\, \delta_{ij} + G^a_{ij} \ , \tag{4}$$

under the condition that Tr $(\mathbf{G}^a \mathbf{R}) = 0$, with $R_{ij} = \langle U'_{f,i}\, U'_{f,j} \rangle$ the Reynolds-stress tensor (with $U'_{f,i} = U_{f,i} - \langle U_{f,i} \rangle$ being the fluctuating component of the fluid velocity) to be consistent with the kinetic energy budget (cf. Pope (2000)).

Taking $G^a_{ij} = 0$ leads to the Simplified Langevin model (SLM), written here as:

$$dU_{p,i} = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial \langle P_f \rangle}{\partial x_i}\, dt - \frac{U_{p,i} - \langle U_{f,i} \rangle}{T_L} dt + \sqrt{C_0 \epsilon_f}\, dW_i \ , \tag{5}$$

where T_L, which represents the Lagrangian integral timescale, is given by

$$T_L = \frac{1}{\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0} \frac{k_f}{\epsilon_f} \ . \tag{6}$$

With respect to the general expression of a diffusion stochastic process in Eq. (1), the drift and diffusion coefficients for the SLM are easily identified:

$$a_i = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial \langle P_f \rangle}{\partial x_i} - \frac{U_{p,i} - \langle U_{f,i} \rangle}{T_L} \ , \tag{7}$$

$$b_{ij} = \sqrt{C_0 \epsilon_f}\, \delta_{ij} \ , \tag{8}$$

which shows that the closure of the diffusion matrix is in line with Kolmogorov theory and the idea of statistically isotropic small-scales (here time scales) governed by the local value of the kinetic energy rate of dissipation.

Model written in terms of:	Formulation
Instantaneous velocity	$dU_{p,i} = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial\langle P_f\rangle}{\partial x_i}\,dt\; -\frac{U'_{p,i}}{T_L}\,dt + \sqrt{C_0\epsilon_f}\,dW_i$
Fluctuating velocity	$dU'_{p,i} = \left(\frac{\partial\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle}{\partial x_j} - U'_{p,j}\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j}\right)dt\; -\frac{U'_{p,i}}{T_L}\,dt + \sqrt{C_0\epsilon_f}\,dW_i$

Table 1: Two possible formulations of the SLM.

It is important to realize that, in the formulations given above, the GLM is expressed in terms of the instantaneous fluid particle velocity $U_{p,i}$. However, most of the models used in the atmospheric literature are written in terms of the fluctuating velocity $U'_{p,i}$, defined as $U'_{p,i} = U_{p,i} - \langle U_{f,i}\rangle$. As such, there is no intrinsic difference between writing a Lagrangian stochastic model in terms of instantaneous or fluctuating velocities since this amounts to a simple change of variables to go from one formulation to the other. These equivalent formulations of a Lagrangian stochastic model have already been discussed in the literature, for instance in Minier and Peirano (2001), section 7.5.2. They were recently analyzed, among other possible alternative formulations, in Minier et al. (2014) using a general expression of Lagrangian stochastic models to emphasize that the issue of the well-mixed condition (also referred to as the 'spurious-drift effect') is not related to the specific form of a model for the fluctuating part of the drift vector as well as for the diffusion matrix but, simply, to the proper account of the mean pressure-gradient term.

The derivation of the formulation of a Lagrangian stochastic model in terms of fluctuating particle velocities is recalled in Appendix A and readers are also referred to the above-mentioned works for detailed analysis. However, for the sake of clarity and to illustrate this general framework, we have chosen to present key results with the simplest class of Lagrangian stochastic models, represented here by the SLM.

The two types of formulation for the SLM are summarized in Table 1. The common part to both formulations, displayed in blue, includes the specific details of the chosen stochastic model (in the present case, the basic form of a Langevin model). What is relevant for our discussion is expressed by the terms, displayed in black, on the rhs (right-hand side) of both equations. In the formulation written with instantaneous velocities, the mean pressure gradient appears directly in the model, as it should for the mean particle acceleration conditioned at a given location to be consistent with the mean Navier-Stokes equation (leaving out the mean viscous term for high Reynolds-number flows). This is not the case in the formulation written in terms of fluctuating velocities, where it is expressed through the term between brackets $(\partial\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle/\partial x_j - U'_{p,j}\partial\langle U_{f,i}\rangle/\partial x_j)dt$ which also includes convective transport in non-homogeneous flows. This can be further brought out by considering mean

particle accelerations (or, rather, conditional mean velocity increments) conditioned on a given location, which are

$$\langle dU_{p,i} \,|\, \mathbf{X}_p(t) = \mathbf{x} \rangle = -\frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \langle P_f \rangle}{\partial x_i} \, dt \ , \tag{9}$$

$$\langle dU'_{p,i} \,|\, \mathbf{X}_p(t) = \mathbf{x} \rangle = \frac{\partial \langle U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle}{\partial x_j} \, dt \ . \tag{10}$$

Note that these equations are obtained by writing that $\langle \mathbf{U}'_p \rangle = 0$, which is actually another form of the well-mixed condition and a translation of the fact that there is no spurious-drift effect. These expressions demonstrate that forgetting to include the derivative term of the Reynolds-stress tensor (cf. the rhs of Eq. (10)) is equivalent to forgetting the mean-pressure-gradient term in the resulting mean Navier-Stokes equation. In numerical applications, this is reflected by particles being driven away from high energy-content regions and accumulating in low energy-content ones or, in other terms, by spurious drifts.

The second term appearing on the rhs of the formulation in terms of fluctuating velocities, $-U'_{p,j} \, \partial \langle U_{f,i} \rangle / \partial x_j$, does not contribute directly to mean drift effect and, therefore, does not play a role for the well-mixed condition. It is however essential to retrieve the correct production terms in the corresponding transport equations for the Reynolds-stress tensor, *i.e.*, the so-called $R_{ij} - \epsilon$ equations. Along with the well-mixed condition, this point is discussed at length in Minier et al. (2014).

Although both expressions are equivalent, it appears from the requirements to retain all the terms appearing on the rhs of the form written in terms of fluctuating components that this formulation has very little practical interest. Indeed, the model written for instantaneous velocities is more tractable since it requires only three gradients (for $\langle P_f \rangle$) compared to the 18 needed in the fluctuating-velocity formulation (9 for $\partial \langle U_{f,i} \rangle / \partial x_j$ and 9 for $\partial \langle U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle / \partial x_j$). This explains that, apart for theoretical developments and the analysis of consistency issues between turbulence models (to be discussed in section 2.3), it is both safer and easier to implement models in terms of instantaneous velocities (see discussions in Minier et al. (2014)).

2.3. On turbulence model consistency issues in hybrid Eulerian/Lagrangian methods

If the proper introduction of the mean pressure gradient on the rhs of Eq. (3) is enough to ensure that the mean Navier-Stokes equation derived from the PDF model is correctly retrieved, the specific details of a Langevin model (*i.e.*, the last two terms on the rhs of Eq. (3b)) come into play when considering the second-order velocity moments or, in other words, the transport equations for the Reynolds-stress components. The connection between Lagrangian stochastic models was first developed in Pope (1994b) and has been addressed in details in several works, cf. Pope (2000); Minier and Peirano (2001); Minier et al. (2014). For the sake of completeness, the main steps and results are recalled in Appendix B and are simply referred to in this section.

The derivation of the Reynolds-stress equations from a Langevin model, such as the GLM in Eqs. (3), reveals that for each formulation of a Langevin model there is a corresponding second-order, or $R_{ij} - \epsilon$, turbulence model. This connection is of importance, first to indicate that Lagrangian stochastic are true second-order turbulence model when they are used as stand-alone approaches and, second, to point out a consistency issue when they are used in hybrid Eulerian/Lagrangian numerical formulations.

In hybrid Eulerian/Lagrangian calculations, a classical CFD (Computational Fluid Dynamics) code is first run to obtain fields made up by mean fluid variables, *e.g.*, $\langle U_{f,i} \rangle(t, \mathbf{x})$, $\langle U'_{f,i}\, U'_{f,j} \rangle(t, \mathbf{x})$, $\epsilon_f(t, \mathbf{x})$, etc. The name Eulerian refers to the field-based approach usually followed in CFD codes, where fields are obtained as solutions of PDEs through traditional numerical techniques on a mesh discretization. These fields are then provided to the particle-based, or Lagrangian, formulation where they are used in the SDEs to simulate particle dynamics. For example, the value of the mean fluid velocity at particle location that enters the return-to-equilibrium term in the GLM, cf. the second term on the rhs of Eq. (3b), is obtained by interpolating the mean fluid velocity field provided by the Eulerian simulation and is used to advance instantaneous particle velocities.

Compared to stand-alone approaches, one interest of this hybrid formulation is to handle mean fields that are free of statistical noise. This raises, however, a consistency issue since some fluid variables are simulated both by the Eulerian and Lagrangian solvers. For example, the fluid mean velocity field is obtained from the mean Navier-Stokes equation solved in the Eulerian solver with a turbulence model and also from the Lagrangian one by Monte Carlo estimations derived from the set of instantaneous particle velocities. Note that, depending on the details of the hybrid method, the same is true for the second-order moment R_{ij}, or its trace the fluid turbulent kinetic energy k_f. This means that there is, for some moments, a double prediction and these fields are therefore called 'duplicate fields'. However, since they correspond to the same physical variable, it is essential to ensure that both predictions yield the same result. This is referred to as the consistency issue.

As mentioned above, Lagrangian stochastic models correspond to second-order turbulence models. Consequently, if a GLM is retained as the particle stochastic model, a consistency formulation consists in using a second-order model with the same model for the pressure-rate-of-strain closure in the Eulerian solver. This is recalled in Appendix B for the GLM. In particular, if a SLM is chosen to describe particle velocity evolution in the Lagrangian solver, then this implies that a Rotta second-order turbulence model should be used in the Eulerian one (with the Rotta constant deriving from the value taken from the C_0 constant, cf. Appendix B).

In practical simulations, the consistency issue needs to be assessed, especially when inconsistent formulations are retained. This is the case when, for instance, a $k-\epsilon$ model is used as the turbulence model in the Eulerian solver while a GLM is used in the Lagrangian one. Indeed, there is an intrinsic difference between eddy-viscosity closures and particle-based methods where particle velocity is explicitly tracked (see a comprehensive discussion in sections 10.3 and 10.4 of Minier (2016)) and the impact of such inconsistent hybrid

formulations has to be carefully evaluated. To the authors' knowledge, few studies have addressed this issue (see Chibbaro and Minier (2011); Minier (2015)), which still needs to be emphasized and whose importance has to be monitored. This is done in section 5.

2.4. Wall-boundary conditions treatment

Another issue is the formulation of wall-boundary conditions in particle stochastic approaches, which is a subject that has received little attention. For instance, a first idea consists in applying specular rebound: every particle that crosses a wall boundary and exits the computational domain is reflected back with the same longitudinal velocity as the incoming one. Yet, this amounts to writing a zero-flux boundary condition for the longitudinal velocity component, which fails to account for the momentum exchange with the wall. Following the same spirit of the one used to derive so-called wall-function boundary conditions in CFD codes, where a boundary condition is applied in the logarithmic region near the wall rather than at the wall itself (cf. Pope (2000)), a better representation of wall-boundary conditions to capture the constant-stress boundary layer is (assuming that z is the wall-normal direction):

$$U_{p,x}^{in} = U_{p,x}^{out} - 2\frac{\langle U'_{f,x}U'_{f,z}\rangle}{\langle U'^2_{f,z}\rangle}U_{p,z}^{out} \ , \tag{11a}$$

$$U_{p,y}^{in} = U_{p,x}^{out} - 2\frac{\langle U'_{f,y}U'_{f,z}\rangle}{\langle U'^2_{f,z}\rangle}U_{p,z}^{out} \ , \tag{11b}$$

$$U_{p,z}^{in} = -U_{p,z}^{out} \ , \tag{11c}$$

where the subscript 'in' stands for the particle's incoming velocity value and 'out' the outgoing one (see Fig. 1). The rationale behind these expressions for particle-based stochastic models are detailed in Dreeben and Pope (1997); Minier and Pozorski (1999).

Such formulations are needed to reproduce the correct behavior of the mean longitudinal fluid velocity in wall boundary layers. In hybrid Eulerian/Lagrangian approaches, they represent also an additional consistency issue since wall-boundary conditions are actually formulated twice, in the Eulerian and in the Lagrangian solvers. In section 5, we will see that consistent wall-boundary conditions are important for the correct computation of particle second-order moments near walls.

3. Numerical assessment of the well-mixed criterion

In this section, we illustrate the points addressed in section 2 with numerical applications. To this end, three cases are studied:

- a mixing layer (free shear-flow);
- an infinite channel flow (simple wall-bounded flow);
- a flow around an obstacle in a neutral boundary layer (complex wall-bounded flow).

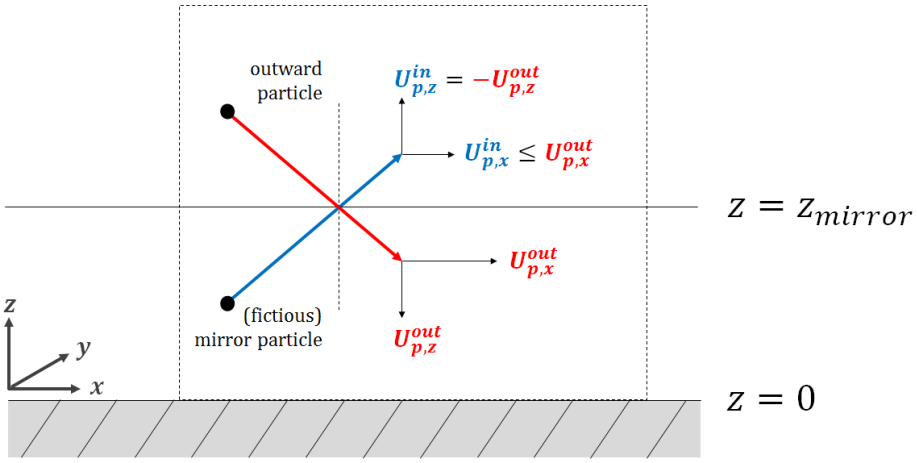


Figure 1: Sketch of the wall/particle interaction showing how particles arriving at $z = z_{mirror}$, which is chosen in the logarithmic layer, are reflected back in the domain so as to respect a zero-mass flux in the wall-normal direction as well as the momentum exchange due to friction in the longitudinal one. $\mathbf{U}_p^{in}$ (oriented upward) and $\mathbf{U}_p^{out}$ (oriented downward) stand for the inward and outward velocities, respectively.

These three cases allow to test theoretical and numerical formulations in situations where different effects come into play. The mixing layer case is a non-homogeneous turbulent flow, with a laminar/turbulent transition at the edges of the mixing layer but without flow reversal or wall effects. On the other hand, the infinite channel flow is a simple one-dimensional but non-homogeneous flow, essentially driven by the wall-boundary conditions. Finally, the case of the flow around an obstacle located on a wall in a neutral atmospheric boundary layer gathers all difficulties: it is a non-homogeneous turbulent flow, involving wall effects and complex flow recirculation patterns that make it a stringest test case to assess the respect of the well-mixed criterion and consistency requirements.

In order to concentrate on the issues raised in section 2 and avoid additional ones related to the implementation of elaborate turbulence models, it was chosen to retain the simplest possible consistent formulation. For this reason, a second-order Rotta model was selected in the Eulerian simulations while the SLM was used for the Lagrangian ones.

The calculations were performed using the open-source CFD code *Code_Saturne* (cf. `http://code-saturne.org/`), developed at EDF R&D. Details on the numerical methods implemented in the code can be found in Archambeau et al. (2004) for the Eulerian solver and in Peirano et al. (2006) for the Lagrangian one. It can be noted that the Lagrangian module is a general one developed for discrete, or non-zero inertia, particles but that fluid particles (or tracer-particle limit) are simply simulated by putting the particle relaxation timescale to zero (this is correctly handled numerically by considering exponential numerical schemes, as detailed in Peirano et al. (2006)).

Since present cases correspond to steady-state flows, hybrid Eulerian/Lagrangian simulations are performed sequentially:

- first, the Eulerian solver is run and, at convergence, calculations are stopped and

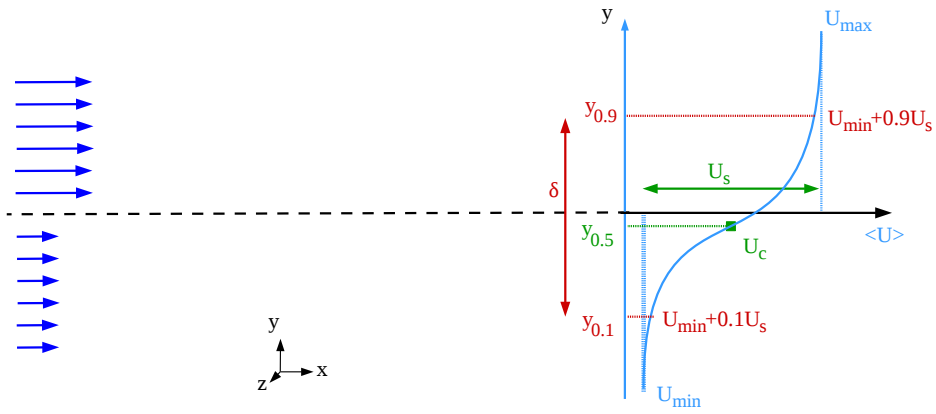


Figure 2: Sketch of a plane 2D mixing layer showing the characteristic convective velocity U_c, velocity difference U_s, width of the flow $\delta(x)$ and key lateral positions.

the mean velocity, pressure and turbulence fields are frozen. These simulations are obtained with the second-order Rotta turbulence model (with $C_R = 4.15$);

- second, particles are introduced and tracked within the pre-calculated flow fields. The SLM is retained to model fluid particle velocity evolutions (with $C_0 = 2.1$).

3.1. The mixing layer case

3.1.1. Case description and fluid phase simulation

Mixing layers correspond to turbulent flows formed between two uniform, nearly parallel streams of different velocities U_{max} and U_{min}. Fig. 2 displays the typical sketch of a mixing layer created by the interaction between two streams with different velocities. In the present case, the dominant direction of flow is x, the cross-stream coordinate is y and statistics are independent of the spanwise coordinate, z. The mean velocity can thus be written $\langle \mathbf{U}_f(x,y,z) \rangle = \langle \mathbf{U}_f(x,y) \rangle$. Numerous studies have shown that the flow is self-similar and depends on some characteristic parameters (more details can be found in Pope (2000); Champagne et al. (1976)):

- the characteristic convection velocity

$$U_c = \frac{1}{2}\left(U_{max} + U_{min}\right) \ , \tag{12}$$

- the characteristic velocity difference

$$U_s = \left(U_{max} - U_{min}\right) \ , \tag{13}$$

- the characteristic width of the flow

$$\delta(x) = y_{0.9}(x) - y_{0.1}(x) \ , \tag{14}$$

  defined here as the extent of the region where the fluid velocity ranges from $U_{min} + 0.1U_s$ to $U_{min} + 0.9U_s$ (see Figure 2).

- the characteristic reference lateral position

$$\overline{y}(x) = \frac{1}{2}\left(y_{0.9}(x) + y_{0.1}(x)\right) \ . \tag{15}$$

These characteristic values allow to define a scaled velocity

$$f(\xi) = \frac{\langle U \rangle - U_c}{U_s} \ , \tag{16}$$

which depends only on the scaled cross-stream location (self-similar flow)

$$\xi = \frac{y - \overline{y}(x)}{\delta(x)} \ . \tag{17}$$

Similarly, the Reynolds stresses have been shown to be self-similar when scaled by U_s^2. Experimental data have also shown that the spreading parameter S defined as

$$S = \frac{U_c}{U_s}\frac{d\delta}{dx} \tag{18}$$

is independent of the velocity ratio and thus constant. Reported values are in the range $S = 0.06$ to $S = 0.11$.

The test case considered consists in a flow within a rectangular domain, whose dimensions are $10\ m \times 0.8\ m \times 0.004\ m$, with two different inlet velocities. The grid comprises 10 000 rectangular uniform cells and boundary conditions are as follows.

Inlet boundary. The flow is divided in two regions each with a uniform velocity profile: $U = 2.0\ m.s^{-1}$ for $y < 0.4\ m$ and $U = 3.0\ m.s^{-1}$ for $y > 0.4\ m$. Thus, $U_{min} = 2\ m.s^{-1}$ and $U_s = 1\ m.s^{-1}$.

Upper and lower boundaries. Symmetry (zero-flux) condition.

First, we assess numerical results obtained for the fluid phase simulation with respect to existing experimental data (more details on experimental results for such free shear-flows can be found in Pope (2000); Champagne et al. (1976)). The mean velocity field inside the domain is displayed in Fig. 3 where it can be seen that the mixing of the two initial laminar streams having different inlet velocities leads to the growth of a turbulent region along the longitudinal direction with a continuous range of mean fluid velocities.

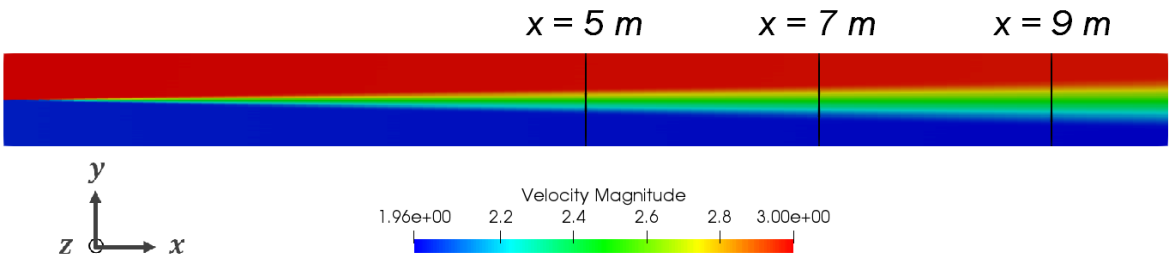


Figure 3: Snapshot of the longitudinal mean fluid velocity obtained from the Eulerian simulation showing the formation and growth of a turbulent mixing layer (the three vertical lines are used to extract data to assess self-similarity and analyze results).

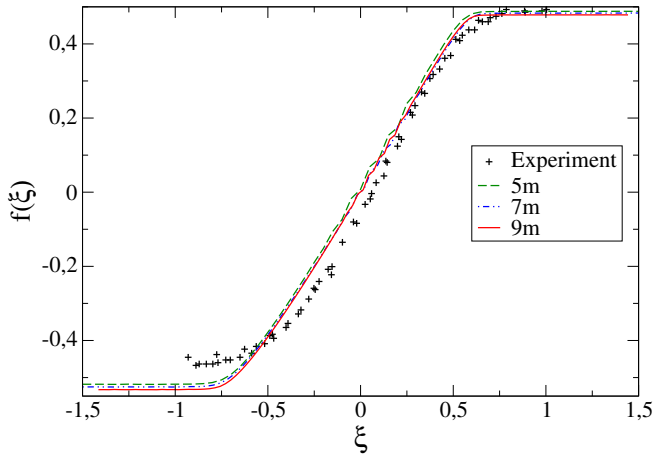


Figure 4: Profile of the scaled mean longitudinal velocity across the mixing layer: comparison between experimental data (symbols) and numerical results sampled at various distances from the inlet (lines).

To further characterize the predicted mean fluid flow, profiles are taken along three vertical lines located at three different positions downstream of the splitter plate (they correspond to the three vertical lines drawn at $x = 5\,m$, $x = 7\,m$ and $x = 9\,m$ in Fig. 3). The scaled longitudinal mean velocity profile is displayed in Fig. 4. It can be seen that numerical results are in good agreement with experimental data and that self-similarity is also well captured by the numerical simulations.

This is further confirmed by considering the scaled Reynolds stresses, which are plotted in Fig. 5. It is seen that self-similarity is also achieved and that results are in line with experimental values, even though some discrepancies can be observed. For example, R_{33} reproduces the experimental profile but underestimates the maximum value (a 40% error is made). At this stage, it is worth recalling that a simple $R_{ij} - \epsilon$ model (*i.e.*, the Rotta model) was used whereas it is known that more developed second-order models, accounting explicitly for mean velocity gradients such as the ones occurring in mixing layers, yield much-improved predictions (see detailed discussions in Pope (2000)). However, it should also be recalled that the present objective is to assess the respect of the well-mixed condition

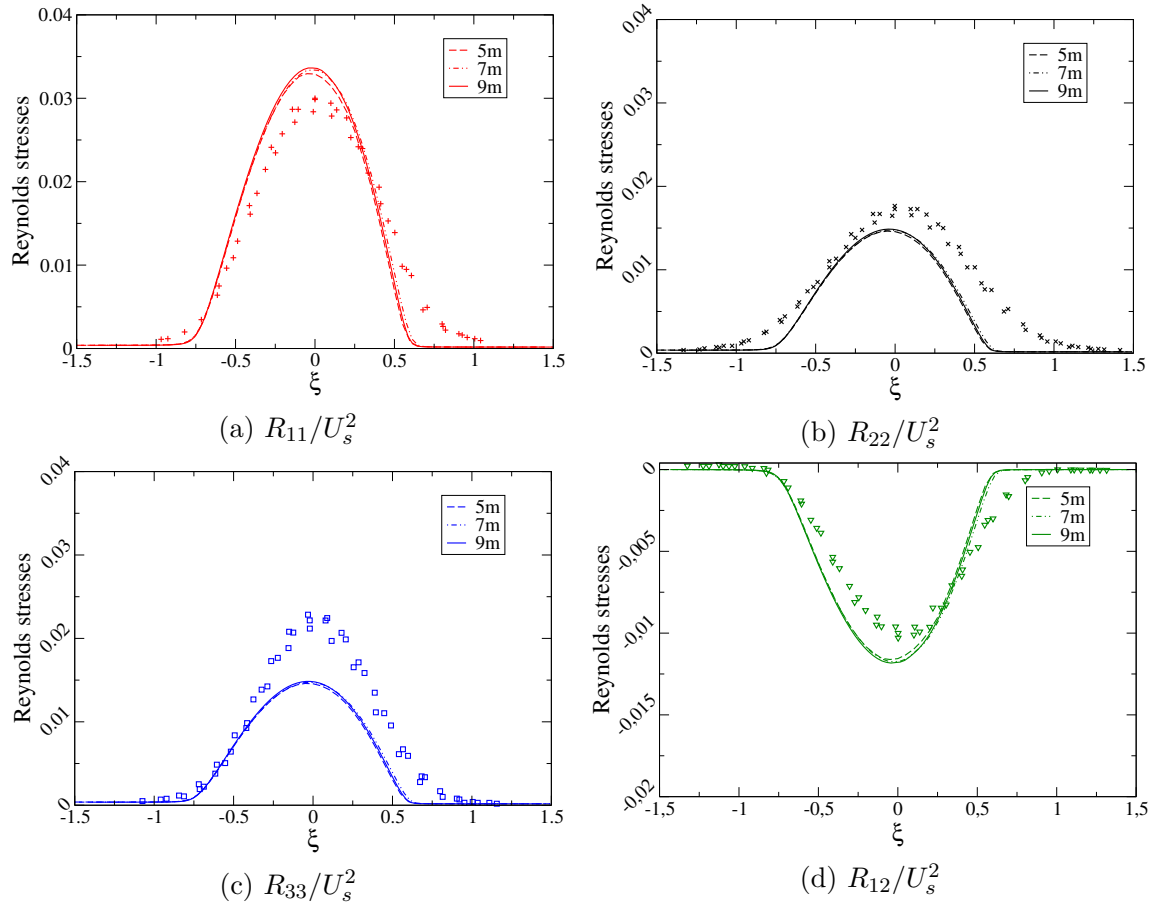


Figure 5: Profiles of the scaled Reynolds stresses across the mixing layer: comparison between experimental data (symbols) and numerical results sampled at various distances from the inlet (lines).

and of consistency requirements. In that sense, this paper is not about the ability of given $R_{ij} - \epsilon$ turbulence models to reproduce perfectly experimental values (they are given here merely as a reference) but is about assessing whether fluid particle concentration remains uniform and whether moments of the velocity field predicted by the Eulerian and Lagrangian simulations are consistent. Particle concentration results obtained from the particle phase simulation are now discussed while consistency is addressed in section 5.

3.1.2. Results for particle concentration

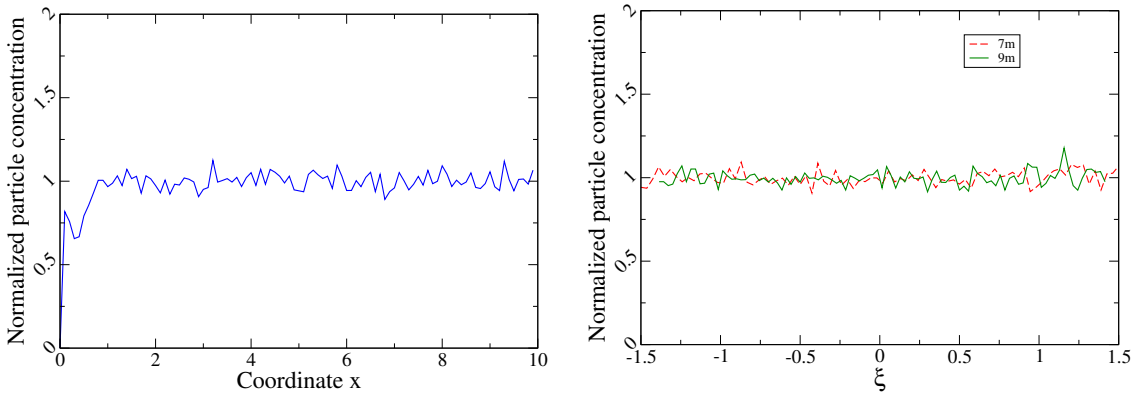
In the mixing layer case, simulations were run with a domain initially void of fluid particles which are then injected until a steady-state regime is reached, where a statistically-constant number of particles are present within the computational domain (*i.e.*, when, on average, the same number of particles are leaving the domain through the exit plane as the ones injected through the inlet section). In the numerical simulations, each fluid particle represents an equal amount of fluid mass and, consequently, the number of particles being injected through the two inlet sub-sections corresponding to the two different streams must

be so that the inlet mass flow rates are respected. Then, given the velocities imposed at the inlet for the two streams (2 $m.s^{-1}$ for $y < 0.4\ m$ and 3 $m.s^{-1}$ for $y > 0.4\ m$), it was chosen to inject 80 particles during each time step through the low-speed stream inlet (for $y < 0.4\ m$), which means that 120 particles were injected through the high-speed stream one (for $y > 0.4\ m$). When a steady-state was reached, the domain contained a number of particles of the order of $N = 80\,000$, *i.e.*, about 8 particles per cell. Therefore, in the steady-state regime, Monte Carlo estimates were also averaged over time (over 2 000 time steps), using an ergodic assumption, in order to reduce statistical noise to low levels. This means that, on average, 16 000 particles per cell were used to obtain statistics.

Since the objective of the simulation is to assess whether the well-mixed criterion is respected, we consider the normalized particle concentration and check that it remains constant in the simulation domain (particles should not accumulate in specific regions or be depleted from others). The actual particle number density obtained in the computations depends on the chosen numerical parameters, that is essentially the number of fluid particles injected during each time step and the mesh size (each cell having the same volume), but is not of significance provided it is high enough for statistics to be statistically relevant. What is relevant is the normalized particle number, or particle concentration, obtained by dividing the actual number of particles in any cell by the mean one.

Numerical results for this normalized particle concentration are shown in Fig. 6. In Fig. 6a, the horizontal concentration profile taken at mid height ($y = 0.4\ m$), that is at the same height as the splitter plate, is plotted. A depletion zone can be seen near the inlet (roughly between the inlet and $x = 1\,m$, whose value depends on the choice of initial velocities and mesh sizes) that corresponds to the distance needed for the particles to correctly mix in the domain. Indeed, in the first simulations, the initial particle distribution across the inlet section was clumpy with, in each inlet cell, sub-groups of particles being injected at the center of each inlet elementary surface rather than being also uniformly distributed across elementary inlet surfaces. This was later corrected in the code but it was nevertheless decided to present, for the mixing layer case, the results obtained with this clumpy injection since it provides an additional test to check whether a properly-formulated Lagrangian stochastic model can mix particles and drive the distribution of particle positions from a clumpy one (a sum of Dirac-functions) to a continuous and uniformly-distributed one.

From the profile in Fig. 6a, it is seen that particles are indeed correctly driven to a well-mixed state and that, once achieved, a uniform concentration is maintained in the rest of the domain. This is further confirmed by plotting the vertical profiles at the sections $x = 7$ and $9\ m$, see Fig. 6b, which reveal that a uniform particle concentration is obtained throughout the domain. In other words, the well-mixed criterion is satisfied in the mixing layer case, which is representative of non-homogenous turbulent free shear-flows.



(a) Horizontal profile ($y = 0.4\ m$)

(b) Vertical profiles

Figure 6: Profiles of the particle normalized concentration in the plane mixing layer: (a) sampled longitudinally along the middle of the layer; (b) sampled vertically at various distances from the inlet.

3.2. The infinite channel flow

3.2.1. Case description and fluid phase simulation

The second test case corresponds to an infinite half-channel flow, which is represented as a vertical column of 20 cells of dimensions $0.05\ m \times 0.05\ m \times 0.05\ m$. Since this is basically a one-dimensional flow where statistics depend only on the wall-normal coordinate, the flow is simply generated by applying a periodicity condition between the upstream and downstream faces (see Fig. 7) and by imposing in the longitudinal direction a momentum source term that corresponds to the mean pressure gradient (or pressure loss) $d\langle P_f \rangle / dx = -\rho_f u_*^2 / H$, where $\rho_f = 1.18\ kg.m^{-3}$ is the density of air, $H = 1\ m$ the half-height of the channel, and $u_* = 0.05\ m.s^{-1}$ the chosen value of the friction velocity at the wall.

Once a steady state is obtained, the profiles of the mean longitudinal velocity and of the non-zero velocity second-order moments are expressed in terms of the relevant wall units, *i.e.*, $u_*\,(m/s)$ and $\nu/u_*\,(m)$ where $\nu = 1.55 \times 10^{-5}\ m^2.s^{-1}$ is the air kinematic viscosity. The resulting profiles of the scaled mean velocity U/u_* and the scaled Reynolds stresses R_{ij}/u_*^2 are given in Fig. 8, as a function of the normalized wall-normal distance $z^+ = zu_*/\nu$. These results are fairly classical for a Rotta turbulence model in a turbulent boundary layer with a wall-function approach, which means that only the so-called logarithmic layer is simulated and that the boundary condition is met to bridge over the viscous-layer to avoid a computationally-demanding down-to-the-wall numerical integration with a velocity no-slip condition at the wall (see Minier and Pozorski (1999); Pope (2000)). As for the mixing-layer case, the objective is not to obtain the best possible numerical results for fluid profiles but rather to use representative results to check whether particle concentration profiles are correctly captured. It is worth noting that wall-boundary conditions play a key role in the infinite channel flow and, therefore, this case is a test for a non-homogeneous situation (in the wall-normal direction) but also for the application of relevant particle boundary conditions as discussed in section 2.4.

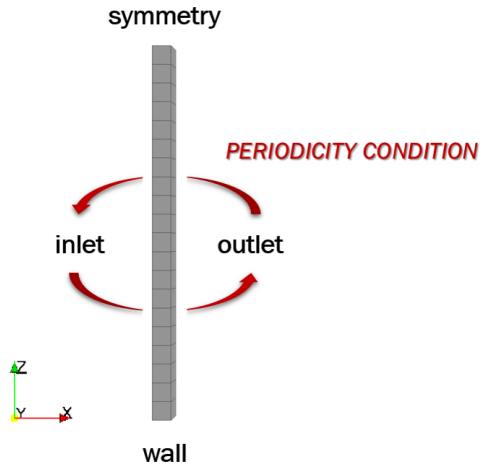
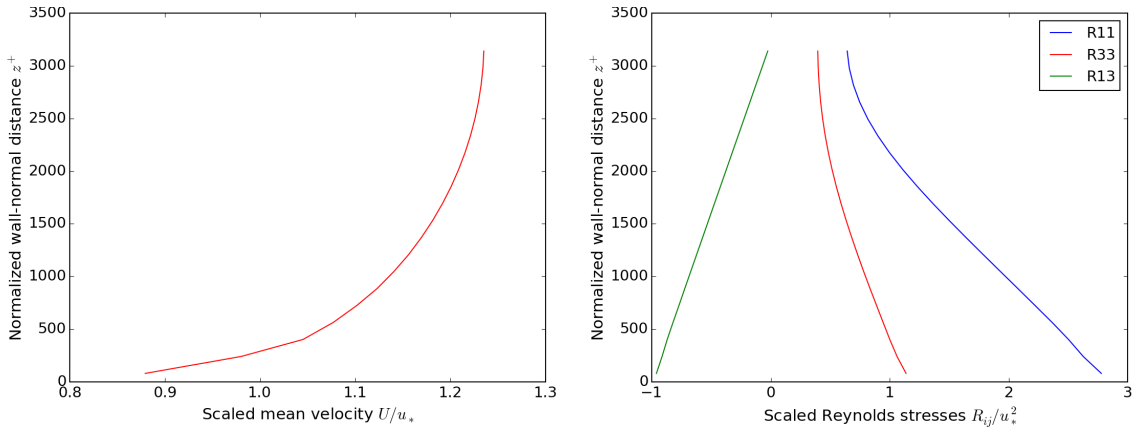


Figure 7: Sketch of the computational domain for the infinite plane channel simulation.



(a) Scaled mean fluid velocity

(b) Scaled Reynolds stresses

Figure 8: Vertical profiles of the scaled mean velocity (a) and Reynolds stresses (b) as a function of the normalized wall-normal distance $z^+ = zu_*/\nu$ for the infinite plane channel case.

3.2.2. Results for particle concentration

Then, $N = 200\,000$ particles uniformly distributed over the domain are injected and are tracked during a time lapse long enough for one particle to be transported by turbulent diffusion several times over the length of the half-channel flow so that results truly reflect the governing stochastic model rather than the memory of the initial conditions. The purpose is to check that a steady state is reached, where particle concentration remains uniform across the whole channel. As in the mixing layer case, the actual mean concentration, which depends on numerical parameters (the number of particles and the height of each cell), is of no direct significance and we only consider normalized concentrations. In this case, there is neither inlet nor outlet of particles and the average number of particles in a cell is around 10 000, that is high-enough for statistics to be obtained directly through Monte Carlo estimations without using any time-averaging. Incidentally, this allows to test another way to derive statistics and to assess whether they remain stationary in time.

Fig. 9 shows a scatter plot of particle positions in the domain at the end of the calculation, along with the corresponding concentration vertical profile derived from it. It can be seen that the concentration is constant over the whole height of the channel, indicating that a truly uniform particle distribution is obtained. For a more quantitative analysis, the vertical profiles of the normalized concentration $c/\langle c\rangle$ derived at different time steps in the calculation are displayed in Fig. 10a to check that uniformity across the channel is maintained in time.

It can be seen that the normalized concentration profiles oscillate with some noise around 1 and it is interesting to analyze the nature of these fluctuations. For that purpose, we consider the global spatial error defined as:

$$\frac{\sigma_c}{\langle c\rangle} = \frac{1}{\langle c\rangle}\sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{N_{cells}}(c(\mathbf{x}_j) - \langle c\rangle)^2}{N_{cells}}} \tag{19}$$

where $N_{cells} = 20$ is the number of cells and $\mathbf{x}_j$ denotes the position of the center of the computational cells. Particle concentration is uniform in the domain if and only if the global spatial error $\sigma_c/\langle c\rangle$ equals zero. In the present case, it is found to be 0.626% at the end of the calculation. However, we are dealing with Monte Carlo estimates and statistical error needs to be accounted for. This error writes (see the derivation in Appendix C):

$$\left(\frac{\sigma_c}{\langle c\rangle}\right)_{Monte\ Carlo} = \sqrt{\frac{N_{cells}}{N}} \tag{20}$$

where N is the number of particles in the domain. With present values, this Monte Carlo error is therefore equal to 1%. Finally, the local error in each cell (defined as: $(c - \langle c\rangle)/\langle c\rangle$) is found to remain within -1.48% and 0.074%, which confirms that a uniform particle distribution is achieved across the height of the channel.

On the other hand, when the mean pressure-gradient term is removed from the Langevin model, particles tend to accumulate at the top of the domain, as revealed by the normalized

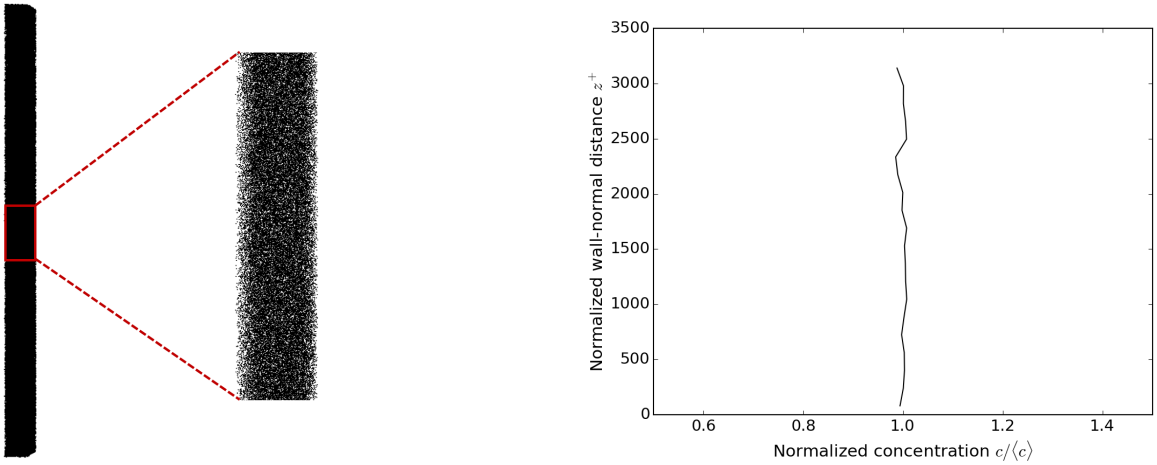
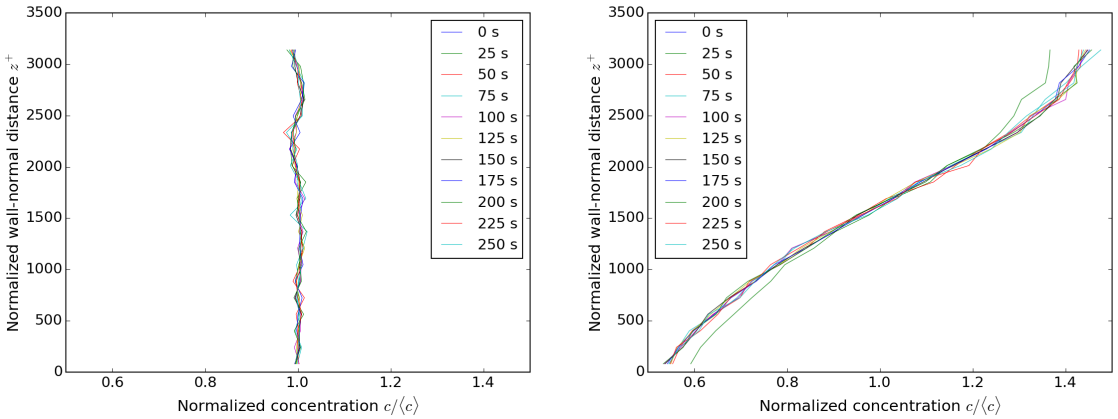


Figure 9: Particle repartition at the end of the calculation (left side) and the corresponding profile of the particle concentration (right side), showing the respect of the well-mixed criterion.



(a) With the mean pressure-gradient term (b) Without the mean pressure-gradient term

Figure 10: Vertical profiles of the normalized particle concentration at different time steps: (a) with the mean pressure-gradient term; (b) without it.

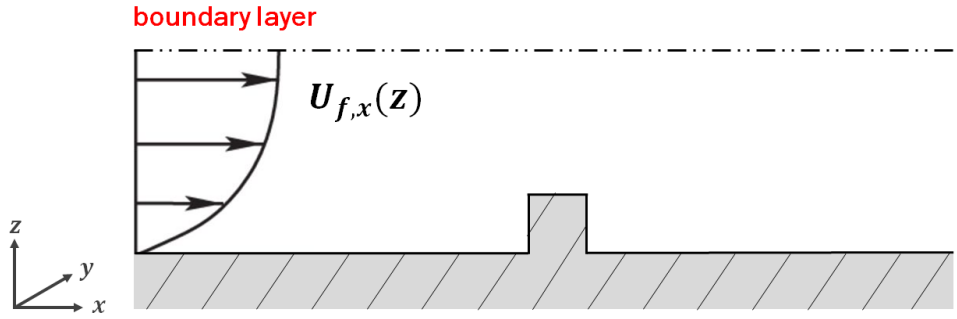


Figure 11: Sketch of a 2D flow around an obstacle within a boundary layer, where $U_{f,x}(z)$ is the imposed inlet velocity.

concentration profiles shown in Fig. 10b. In the case of the infinite channel flow, it is easy to understand why, in the absence of the mean pressure-gradient term, particle are driven towards low-energy zones. Indeed, the classical expression of the mean-momentum balance equation in the wall-normal direction gives that

$$\frac{1}{\rho_f}\frac{d\langle P_f\rangle}{dz} + \frac{dR_{33}}{dz} = 0 \ , \tag{21}$$

showing that removing the pressure-gradient term is equivalent to a spurious particle driving force along the direction of dR_{33}/dz. In that case, significant errors, reaching values up to 30.8%, are introduced, indicating that the general formulation without the mean pressure gradient is deeply flawed.

3.3. Obstacle within a neutral boundary layer

3.3.1. Case description and fluid phase simulation

The third test case studied in this work corresponds to a flow around a square obstacle placed on the bottom wall inside a neutral boundary layer. The spanwise dimension of the square obstacle is large enough to be regarded as infinite with respect to other characteristic lengths and the mean flow is therefore a 2D flow in the plane made up by the longitudinal and wall-normal directions. The geometry is sketched in Fig. 11 and the whole domain has the size of a $5\ m \times 0.1\ m \times 1\ m$ box. This test case is thus representative of situations usually addressed in atmospheric dispersion studies.

For that reason, inlet conditions are chosen so as to reproduce flow features typical of a rough boundary layer, as detailed in Table 2. Strictly speaking, these inlet conditions do not play a significant role as the flow develops itself downstream of the injection and reproduces the characteristics features of a channel flow before reaching the obstacle, where complex flow patterns are created. They are nevertheless applied to simulate typical boundary conditions. Note that with present dimensions, mean longitudinal velocities range from a near-zero value close to the wall to about $10\,m.s^{-1}$ at the upper boundary plane.

Field	Value or expression
$\langle U_{f,x} \rangle$	$\frac{u_*}{\kappa} \log\left(\frac{z+z_0}{z_0}\right)$
$\langle U_{f,y} \rangle$	$0\ m.s^{-1}$
$\langle U_{f,z} \rangle$	$0\ m.s^{-1}$
u_*	$0.5\ m.s^{-1}$
k	$u_*^2/\sqrt{C_\mu}$, $C_\mu = 0.09$
ϵ_f	$(u_*)^3/(\kappa(z+z_0))$ $\kappa = 0.42$, $z_0 = 0.0025\ m$
$\langle U'^2_{f,x} \rangle$	$(2/3)k$
$\langle U'^2_{f,y} \rangle$	$(2/3)k$
$\langle U'^2_{f,z} \rangle$	$(2/3)k$
$\langle U'_{f,x} U'_{f,y} \rangle$	$0\ m^2.s^{-2}$
$\langle U'_{f,x} U'_{f,z} \rangle$	$-u_*^2$
$\langle U'_{f,y} U'_{f,z} \rangle$	$0\ m^2.s^{-2}$

Table 2: Inlet dynamical fields for the case of the obstacle within a boundary layer.

A simple mesh made up by 798 400 cubic cells is used and the Eulerian simulation is run until a statistically steady-state is reached at convergence. The complex flow structure created by the obstacle is first revealed by showing isovalues of the velocity magnitude and kinetic energy (obtained as half the trace of the Reynolds stress tensor), as done in Fig. 12. It is seen that a strongly non-homogeneous flow is induced by the impact of the incoming stream on the obstacle, with high levels of kinetic energy in the high-shear region appearing downstream of the obstacle and separating the main longitudinal stream from the recirculation zone behind the obstacle. With present dimensions and flow velocities, a complex flow pattern is observed, as brought out by plotting the mean velocity field in Fig. 13. This figure indicates that a large recirculation zone is formed downstream of the obstacle but a zoom of the region just above the obstacle (see the lower part in Fig. 13) indicates that another recirculation is created between the top wall of the obstacle and the main stream flowing above. This represents indeed a very complex flow structure, involving wall effects, recirculating and high-shear regions.

Furthermore, isovalues of the Lagrangian timescale T_L, shown at the bottom of Fig. 12 reveal that widely different values, covering three orders of magnitude, are observed. This represents a challenging situation for the simulation of particle dynamics and, consequently, a severe test to assess the respect of the well-mixed criterion.

3.3.2. Particle phase simulation

In order to test different initialization procedures, particle simulations were not run starting from a initially void-of-particle domain as for the mixing layer case but by initial-

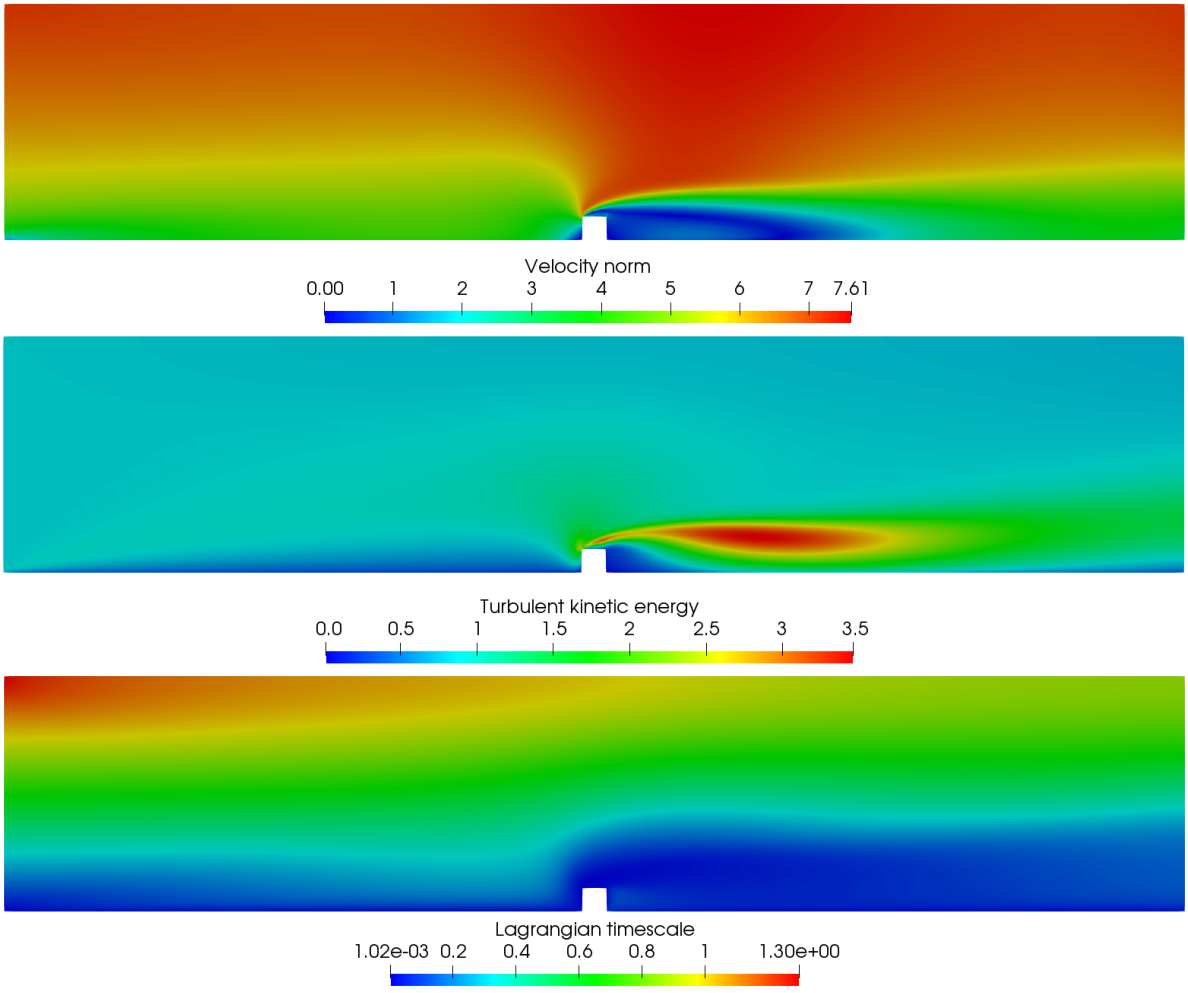


Figure 12: Isovalues of mean fluid fields for the case of the obstacle within a boundary layer. From top to bottom: velocity norm ($m.s^{-1}$), turbulent kinetic energy ($m^2.s^{-2}$), Lagrangian timescale (s).

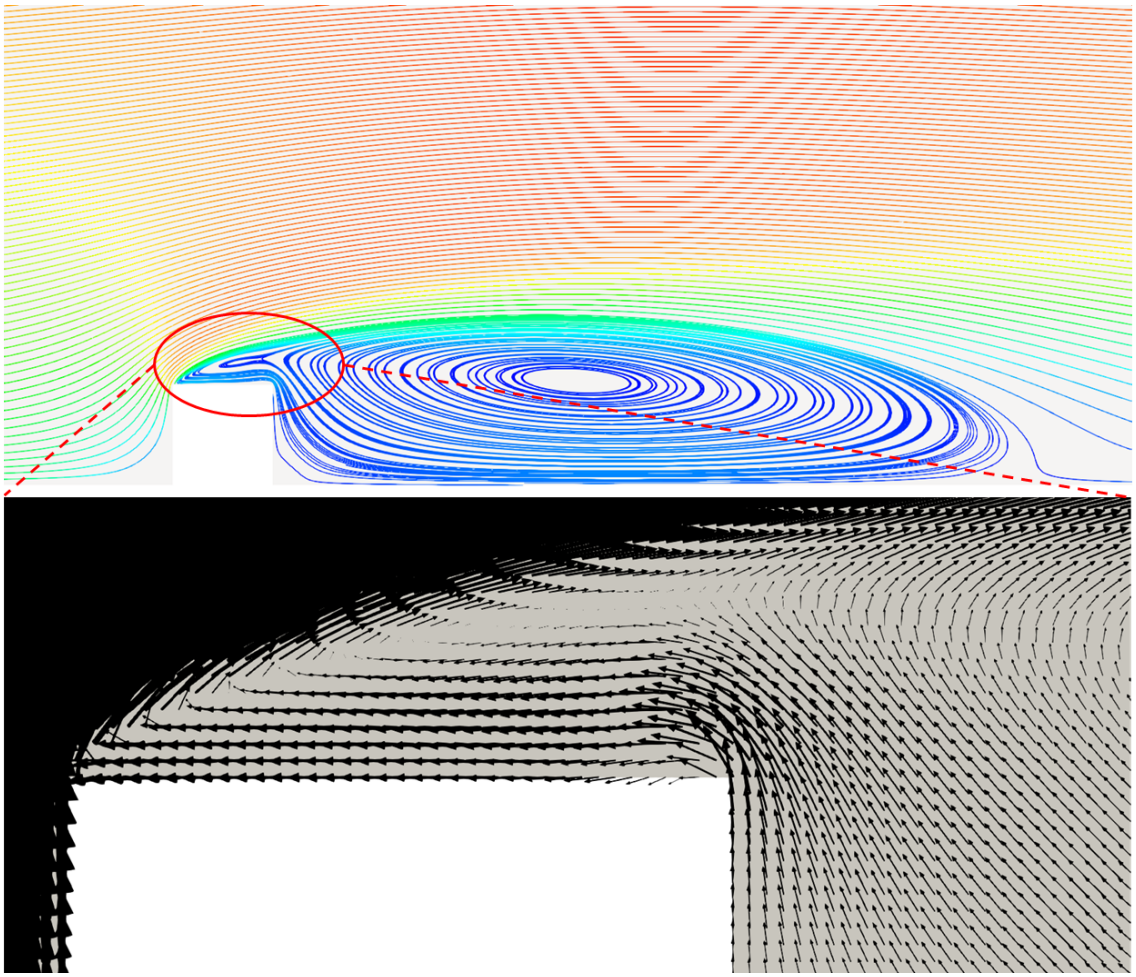


Figure 13: Mean fluid velocity field for the case of the flow around an obstacle within a boundary layer. Figure at the top shows the velocity streamlines. The close view around the obstacle displayed in the bottom figure reveals the complexity of the flow patterns, with a double recirculation on top and downstream of the obstacle.

izing a large number of particles ($N_{ini} = 2\,928\,000$) in the domain with a uniform position distribution to respect incompressibility. In each cell, particle velocities were initialized by sampling in a Gaussian distribution determined by the local value of the mean fluid velocity and second-order moments (the local value of the Reynolds-stress tensor). Unlike the infinite channel flow situation, this is a case with exit and inlet sections but with no periodic conditions. Therefore, during each time step, a number of fluid particles ($N_{inlet} = 352$) are injected through the inlet section, according to the profile of the inlet mass flow rate. This number corresponds to the following ratio: $\langle c \rangle \, Q \, \Delta t / m_p$, where Q is the global fluid flow rate at the inlet, $\langle c \rangle$ the expected mean concentration given the particle initialization, m_p the (fictitious) mass of each particle and Δt the time step used for the calculation. Simulations were run for a long-enough time for particles to cross the domain and mix while ensuring that the memory of these initial conditions is lost and do not influence final numerical outcomes. Nevertheless, this initialization is useful to avoid the time-consuming explicit simulation of the transient period where particles have to fill the whole domain and acts as an accelerator of convergence. When a steady-state is reached, a typical number of particles present in the domain is in the order of $N = 3\,000\,000$, *i.e.*, about 4 particles per cell. Therefore, to extract reliable statistics, a time-averaging procedure was applied as in the mixing layer case. In order to ensure that results are independent of the number of samples, time averaging was used for a large number of time steps, even up to 200 000 time steps (which means that, on average, statistics are, in that case, estimated with around 800 000 particles in each cell).

Note that for this case, no typical scales can be used in the whole domain, as u_* is not a constant and there is no self-similarity. Therefore, apart from the mean concentrations, plots are displayed in terms of dimensional variables.

3.3.3. Results for particle concentration

As for the mixing layer and infinite channel cases, the mean particle concentration follows from the choice of numerical parameters but the relevant variable is the normalized particle concentration. Resulting particle concentration fields are shown in Fig. 14. From the upper part of this figure, it is seen that a uniform particle concentration is obtained throughout the whole domain when the pressure-gradient term is correctly accounted for in the SLM. For a more precise and quantitative analysis, it is best to extract profiles of the normalized particle concentration at various longitudinal positions. To that effect, five profiles are taken along the vertical direction at various downstream distances from the inlet section, as shown in Fig. 15. Given the complex flow pattern over the obstacle, three profiles are chosen in this area, while the first profile is taken upstream of the obstacle (but sufficiently far from the inlet for fully-developed channel flow conditions to exist) and the last one is at the end of the domain downstream of the obstacle.

For the complete form of the SLM, the five selected profiles of the normalized concentration are shown in Fig. 16a, which confirms that a truly well-mixed condition is obtained since all the different profiles remain fairly constant, apart from some fluctuations inherent to particle stochastic simulations. Given the challenging flow structure on the top of

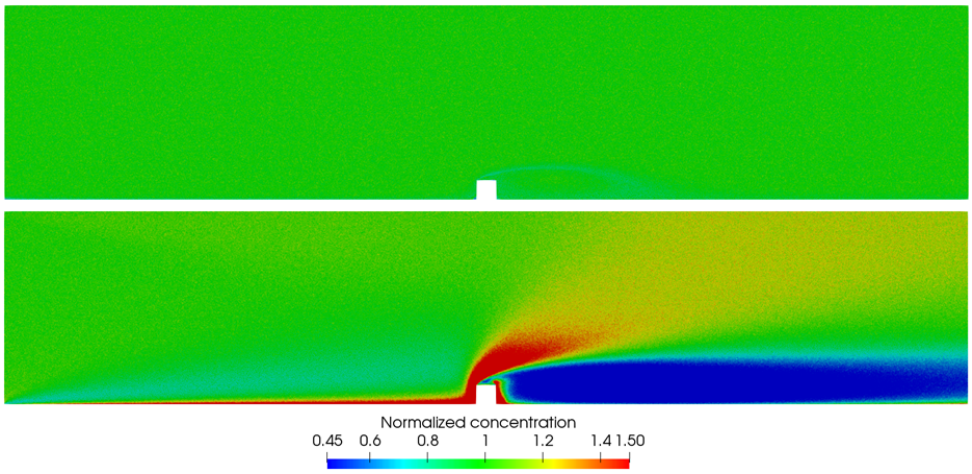


Figure 14: Particle normalized concentration field $c/\langle c \rangle$ for the case of flow around an obstacle within a boundary layer. From top to bottom: with and without the mean pressure-gradient term, respectively.

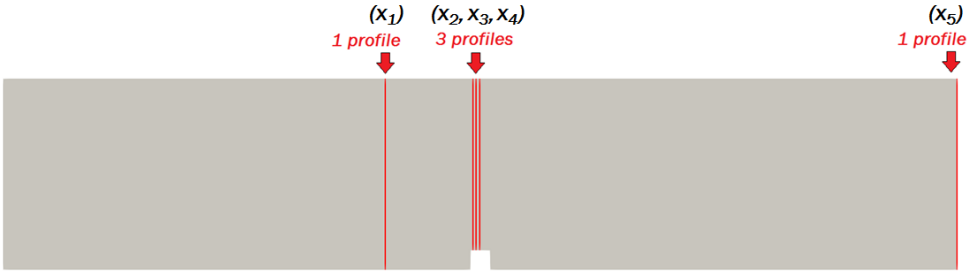
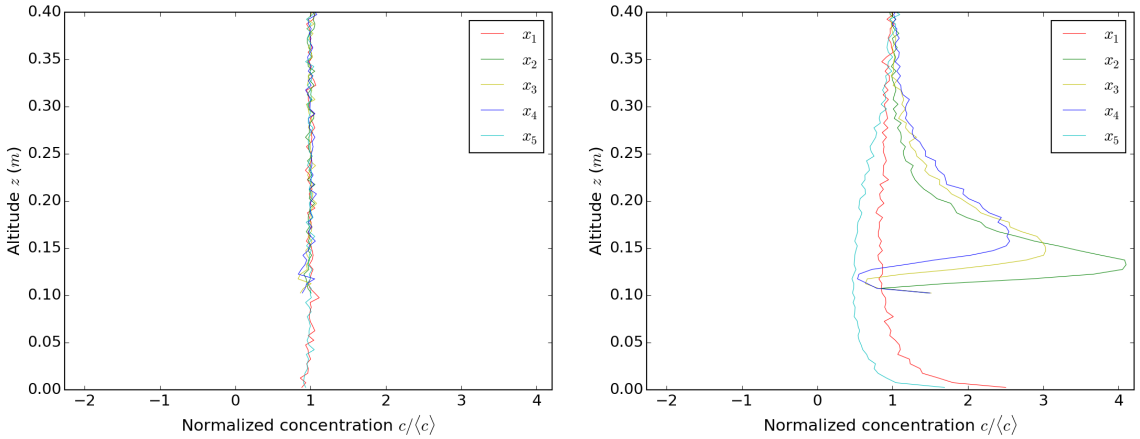


Figure 15: Position of the profiles for the case of the obstacle within a boundary layer. Five profiles are extracted: one upstream the obstacle (x_1), three in the critical region of the top of the obstacle (x_2, x_3 and x_4) and one near the outlet of the domain (x_5). Exact x coordinates of the profiles are: $x_1 = 2.00\ m$, $x_2 = 2.46\ m$, $x_3 = 2.48\ m$, $x_4 = 2.50\ m$, $x_5 = 5.00\ m$.

the obstacle, the fact that the normalized particle concentration remains equal to 1 is a noteworthy result. The global spatial error, defined as in Eq. (19), is 5.06% at the end of the calculation and is therefore satisfactorily low.

However, when the mean pressure-gradient term is not taken into account in the SLM, a completely different picture emerges with marked deviations of particle concentration from uniformity. This is already revealed by the color isovalues shown in the lower part of Fig. 14, with strong accumulation upstream of the obstacle (where fluid streamline curvatures are important) and zones of depletion downstream of the obstacle (in the recirculation zone). When profiles of the normalized concentration are extracted at the same five locations, it appears from the plots in Fig. 16b that severe errors are present, with some values reaching as high as four times the correct one. In that case, the global error is measured as high as 52.8%. This is clearly an unacceptable level of error which invalidates such formulations of dispersion models.



(a) With the mean pressure-gradient term (b) Without the mean pressure-gradient term

Figure 16: Vertical profiles of the particle normalized concentration at the five sections indicated in Fig. 15 for the case of the flow around an obstacle within a boundary layer. Comparison between the formulations with and without the mean pressure gradient in the SLM.

4. On the numerical implementation of incompressibility in particle models

The results of section 3 demonstrate that accounting for the mean pressure gradient in Langevin models ensures that no spurious drifts are present. As first put forward in Pope (1987), this is related to the respect of the mean continuity equation since, for incompressible flows, the mean pressure-gradient term acts as the mechanical force to guarantee that the mean velocity field is divergence free. Yet, in practical numerical implementations, its evaluation requires further consideration and two issues related to particle velocity and position corrections are now developed.

Correction of particle velocities. In stand-alone approaches, the mean pressure is calculated as the constraint needed to have $\mathrm{div}(\langle \mathbf{U}_p \rangle) = 0$ (cf. Minier and Pozorski (1999)). In hybrid Eulerian/Lagrangian formulations, it is easier to use directly the mean pressure gradient calculated by the Eulerian solver, say P^E, in the Langevin equations, so that Eq. (3b) can be expressed as

$$d\widetilde{U}_{p,i} = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial P^E}{\partial x_i}\,dt + dM_i \ , \ \text{where } \langle dM_i \rangle = 0 \ , \tag{22}$$

where the notation $\widetilde{U}_{p,i}$ is used to indicate that this is a first estimation of particle velocities and where dM_i stands for the fluctuating part of the Langevin models which is not relevant for the present discussion. There are, however, always small differences between the numerical predictions of $\langle \mathbf{U}_f \rangle(t, \mathbf{x})$ and $\langle \widetilde{\mathbf{U}}_p \rangle(t, \mathbf{x})$. Consequently, Eq. (22) means that the resulting mean velocity field obtained from the Lagrangian solver $\langle \widetilde{\mathbf{U}}_p \rangle(t, \mathbf{x})$ is only approximately a divergence-free field. A more precise implementation consists in writing

$$dU_{p,i} = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial P^E}{\partial x_i}\,dt - \frac{1}{\rho_f}\frac{\partial \delta P}{\partial x_i}\,dt + dM_i \ , \tag{23}$$

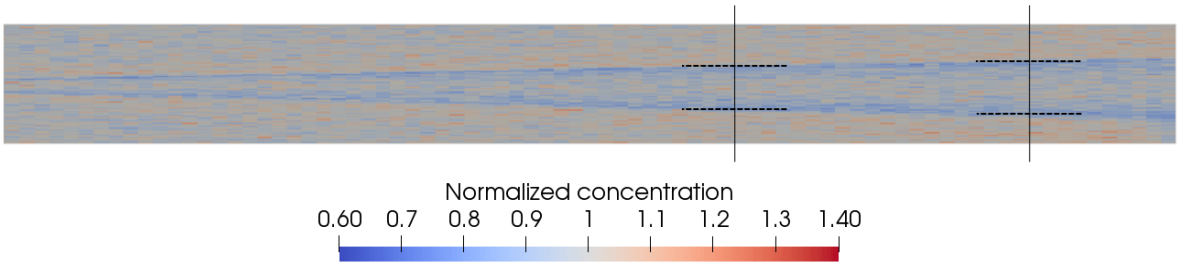


Figure 17: Concentration field in the mixing layer case without particle velocity correction (cf. Eq. (25)). A small depletion region develops downstream and is apparent at the edges of the mixing layer. The vertical lines which are indicated are used to extract and plot data at 7 m and 9 m, while the dashed lines locate the laminar-turbulent transitions at these downstream distances, cf. also Fig. 18.

where the pressure increments δP are computed to impose that $\mathrm{div}(\langle \mathbf{U}_p \rangle) = 0$. A classical numerical derivation based on the fractional time-step approach yields that δP is the solution of the Poisson equation

$$\frac{\Delta t}{\rho_f} \Delta(\delta P) = \mathrm{div}(\langle \widetilde{\mathbf{U}}_p \rangle) \ . \tag{24}$$

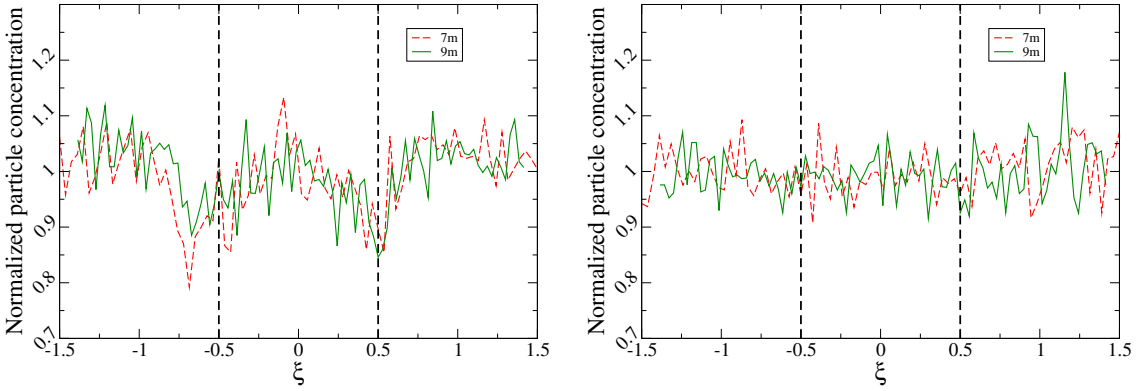
In order to test the importance of this correction, a short-cut method was used where particle velocities in a each cell are shifted so that the mean velocity field from the Lagrangian solver is equal to the one computed by the Eulerian solver. This is translated by the following correction: for each particle labeled $[k]$, with $k = 1, \ldots, N_{\mathbf{x}_m}$ where $N_{\mathbf{x}_m}$ is the number of particles located in the cell whose center is noted $\mathbf{x}_m$ (here m refers to the number of mesh cells), its instantaneous velocity is modified as

$$U_{p,i}^{[k]}(t) = \widetilde{U}_{p,i}^{[k]}(t) - \Big(\langle \widetilde{U}_{p,i} \rangle (t, \mathbf{x}_m) - \langle U_{f,i} \rangle (t, \mathbf{x}_m) \Big) \tag{25}$$

to enforce that $\langle U_{p,i} \rangle (t, \mathbf{x}) = \langle U_{f,i} \rangle (t, \mathbf{x})$ and retrieve a divergence-free mean velocity field.

The influence of this particle velocity correction can be estimated by considering the mixing layer case. When calculations are run without this velocity correction, it is seen from Fig. 17 that the normalized-concentration field is only approximately uniform with deviations from unity apparent at the edges of the mixing layer corresponding to the turbulent/laminar transition. This is confirmed by plotting concentration profiles along the lateral direction, as shown in Fig. 18a. However, when this velocity correction is applied, a better (and more stable) result is obtained, as revealed by the profiles in Fig. 18b.

Consequently, the particle velocity correction scheme was applied as the 'standard version' for the three examples studied in section 3. Note, therefore, that the profiles in Fig. 18b are the same of those in Fig. 6b, though a smaller scale for concentration values is used in Fig. 18b to bring out more clearly the respect of a uniform concentration.



(a) Without particle velocity correction (b) With particle velocity correction

Figure 18: Profiles of the particle normalized concentration in the mixing layer at various distances from the inlet: comparison between the formulations without and with particle velocity correction (cf. Eq. (25)). The dashed lines correspond to the laminar-turbulent transitions indicated in Fig. 17.

Correction of particle positions. While it helps to improve mean velocity statistics, the above correction introduces a somewhat asymmetric treatment of particle positions and velocities, since the evolution equations for $(\mathbf{X}_p, \mathbf{U}_p)$ can be written as:

$$d\widetilde{X}_{p,i} = \widetilde{U}_{p,i}\, dt \ , \tag{26a}$$

$$dU_{p,i} = d\widetilde{U}_{p,i} - \frac{1}{\rho_f}\frac{\partial \delta P}{\partial x_i}\, dt \tag{26b}$$

where the same notation $\widetilde{\mathbf{X}}_p$ for particle positions is used to indicate that this is a first estimation. Eq. (26a) shows that particle positions are influenced by the velocity correction but only in a sequential manner: once particle velocities are corrected, particle positions are modified at the following time step. This loose coupling can be sufficient in some cases, such as the mixing layer and infinite channel flow cases, but can be limited for more complex flow patterns with flow reversals and recirculation. This is the situation met with the flow around the obstacle in the neutral boundary layer. For this reason, tighter coupling is needed between particle positions and velocities.

In stand-alone PDF approaches (see Minier and Pozorski (1999); Bernardin et al. (2009); Chauvin et al. (2010)), as well as in Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) simulations of incompressible flows (Szewc et al., 2012), this is done by introducing a specific correction on particle positions, so that the complete system can be represented by

$$dX_{p,i} = \widetilde{U}_{p,i}\, dt + \delta X_{p,i} \ , \tag{27a}$$

$$dU_{p,i} = d\widetilde{U}_{p,i} - \frac{1}{\rho_f}\frac{\partial \delta P}{\partial x_i}\, dt \ , \tag{27b}$$

where in Eq. (27a) the correction term $\delta X_{p,i}$, accounts for the integrated effect (within each time step) of the one acting on particle velocities in Eq. (27b). This particle correction

term is derived by stating that a uniform particle concentration field should be obtained. Expressing $\delta X_{p,i}$ as the integrated effect of a potential correcting field $\delta\phi$, *i.e.*, with $\delta X_{p,i} = \partial(\delta\phi)/\partial x_i \, \Delta t$, leads to the formulation of a second Poisson equation whose solution is this correcting potential $\delta\phi$. Further details on this numerical implementation with corrections on particle velocities and positions can be found in Minier and Pozorski (1999).

As for particle velocities, a short-cut method was used to assess whether such a complete treatment is needed. To that effect, particle positions are simply modified by adding a Brownian-like term to the particle position equation, so that we have now

$$dX_{p,i} = \widetilde{U}_{p,i}\, dt + \alpha\, dW_i' \ , \tag{28a}$$

$$dU_{p,i} = d\widetilde{U}_{p,i} - \frac{1}{\rho_f}\frac{\partial \delta P}{\partial x_i}\, dt \ , \tag{28b}$$

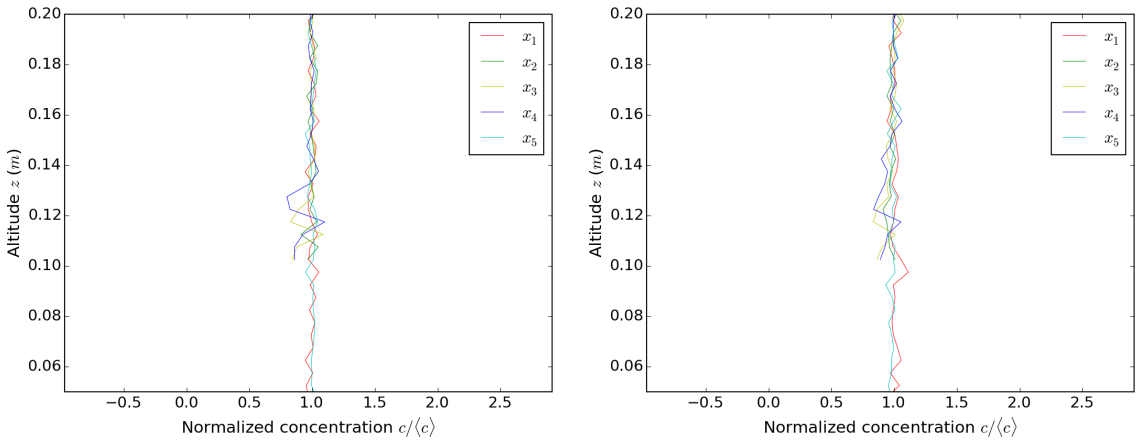
where α is a small parameter and $\mathbf{W}'$ a set of Wiener processes independent from the ones used in the Langevin model for particle velocities. This corresponds to applying a simple shifting term to particle positions, or a Laplacian term in the (Fokker-Planck type of) PDE governing the evolution of the particle concentration field.

In the case of the flow around the obstacle, this version was used to obtain the numerical results presented in section 3.3. In the simulations, the value of α had the same magnitude as the diffusion coefficient used to represent viscous effects (*i.e.*, $\alpha \approx$ 1-2 $\times \sqrt{2\nu}$ where ν is the fluid kinematic viscosity) but α remains nevertheless a numerical parameter in the present context. The effects of this particle correction scheme can be seen by comparing results on the particle concentration field with and without that term (cf. Figs. 19 and 20). Clearly, improved predictions are obtained when the correction term is applied. Given the simplified version used in Eq. (28a), this indicates that the complete formulation in terms of $\delta\phi$ as the solution of the corresponding Poisson equation needs to be introduced.

To sum up, two short-cut methods were used to reveal that the numerical implementation of the mean pressure-gradient term (coming from the Eulerian solver in hybrid formulations) should be supplemented with corrections both for particle velocities and positions. These correction terms have been proved necessary in stand-alone algorithms but should also be used in hybrid Eulerian/Lagrangian calculations.

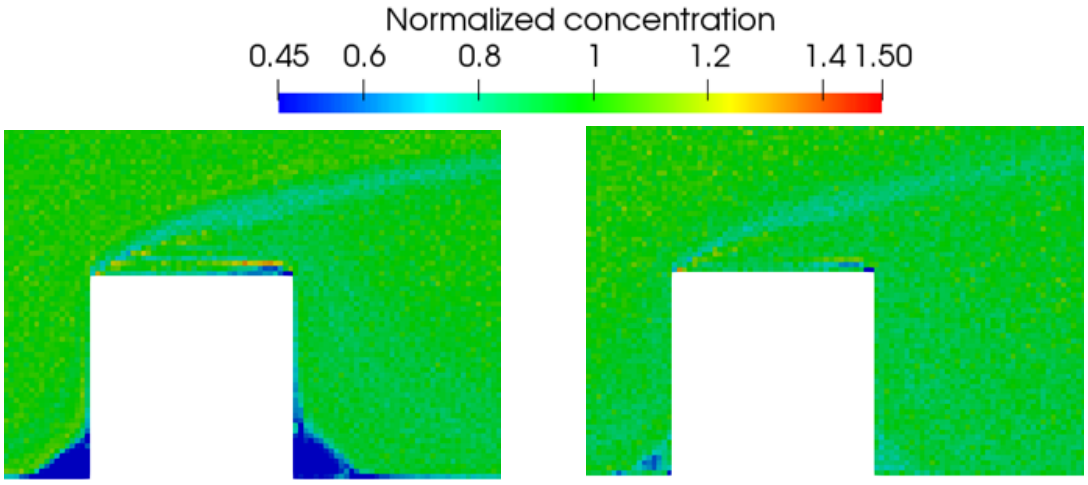
5. Numerical assessment of the consistency between fluid and particle phases

In section 2.3, the consistency issue between turbulence models used in hybrid Eulerian/Lagrangian formulations was brought out. The relevance of this issue is now addressed from a numerical point of view by analyzing results obtained with the cases studied in section 3. Given that the flow around the obstacle is similar to the one in a channel flow in the region upstream of the obstacle, it was chosen to concentrate on the two more complex flow situations. This corresponds to the cases of the mixing layer (cf. section 3.1) and of the flow around the obstacle in a neutral boundary layer (cf. section 3.3), for results pertaining to the bulk of the flow while the issue of wall-conditions consistency is assessed by considering the infinite channel flow case (cf. section 3.2) later on.



(a) Without particle position correction (b) With particle position correction

Figure 19: Vertical profiles of the particle normalized concentration at the five sections shown in Fig. 15 for the case of the flow around the obstacle within a boundary layer: comparison between the formulations with and without particle position correction, Eq. (28a). The particle velocity correction, Eq. (25), is applied in both formulations.



(a) Without particle position correction (b) With particle position correction

Figure 20: Zoom near the obstacle of the particle normalized concentration field for the case of the flow around obstacle within a boundary layer: comparison between the formulations without and with particle position correction, Eq. (28a). The particle velocity correction, Eq. (25), is applied in both formulations.

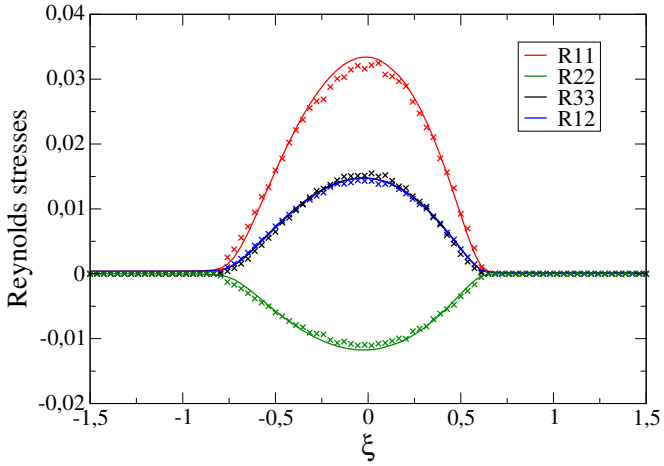


Figure 21: Profiles of the scaled Reynolds stresses in the self-similar regime (obtained here at 7 m) for the mixing layer case provided by the Eulerian solver (continuous lines) and the Lagrangian one (crosses) with the consistent hybrid Rotta model/SLM formulation. Both approaches yield nearly-identical predictions for the same second-order velocity moments.

It is important to remember that the aim is not to compare an 'Eulerian model' to a 'Lagrangian one' but to assess whether, in hybrid Eulerian/Lagrangian formulations, duplicate fields are indeed simulated as such, that is whether both predictions are identical. In that sense, inconsistency is revealed by discrepancies between numerical outcomes for mean fluid moments. Furthermore, since mean fluid velocity calculated by a CFD code are directly used in the return-to-equilibrium term of Langevin models (see the structure of the GLM, cf. Eq. (3b)) and given the numerical corrections detailed in section 4, consistency for the mean fluid velocity field is automatically ensured. Potential differences appear only at the level of second-order moments which are thus studied specifically here.

5.1. On the turbulence model consistency

We start with results obtained with the theoretically consistent hybrid formulation in which a second-order Rotta model is used in the Eulerian approach with the SLM for the Lagrangian one. Then, the effect of using a eddy-viscosity model, such as the $k-\epsilon$, for the Eulerian calculation is investigated.

In the mixing layer case, once the self-similar regime is reached, scaled Reynolds stresses are extracted from the Lagrangian calculation and compared to the ones from the Rotta model used in the CFD code (note that these results were already given in Fig. 5). Both predictions of the scaled non-zero second-order fluid velocity moments are shown in Fig. 21. It can be seen that the Reynolds stresses decrease as expected at the edges of the turbulent region where a turbulent/laminar transition is observed. More importantly for our present concern, it is clear that numerical results for the particle phase are in very good agreement with those for the fluid phase, indicating that consistency is achieved.

We now consider the case of the flow around an obstacle in a neutral boundary layer, which is more complex since it involves wall effects and flow recirculation. Following the

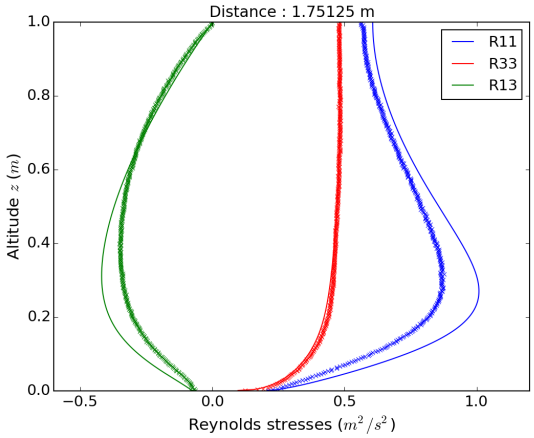
analysis in section 3.3, three zones (upstream, over, and downstream of the obstacle) are selected where vertical profiles are extracted. This is shown in Fig. 22 for the consistent hybrid Rotta-SLM formulation. It can be seen that the profiles computed through the Eulerian and Lagrangian approaches are quite similar, especially R_{33} where the identity is almost perfect. There are, however, small differences for R_{11} values, which is the longitudinal fluid kinetic energy. At that stage, it must recalled that, from a numerical point of view, consistency between Eulerian and Lagrangian approaches can not be perfectly enforced since the triple moment has to be modeled in the Eulerian formulation (usually through a Daly-Harlow closure) while it is treated without approximation by particle-based approaches. Over the obstacle, second-order moments are in a very good agreement, which is a noteworthy result given the possible difficulties caused by the strong recirculating flow patterns present in the region. In spite of small differences that still require further analysis, it can nevertheless be concluded that a quite satisfactory agreement between both Eulerian and Lagrangian results are obtained for these duplicate fields, which brings support for the overall hybrid formulation.

In order to illustrate the importance of consistent formulations, another simulation was performed using the first-order $k-\epsilon$ turbulence model for the Eulerian calculation. Results are shown in Fig. 23, which displays the turbulent kinetic energy vertical profiles at the same locations as the ones shown in Fig. 22. It is obvious that significant discrepancies are observed between predictions of the same physical quantity, proving that this hybrid formulation is inconsistent and, therefore, invalid for reliable predictions. Moreover, the resulting particle concentration field is also affected with non-negligible zones of depletion over the obstacle (see Fig. 24).

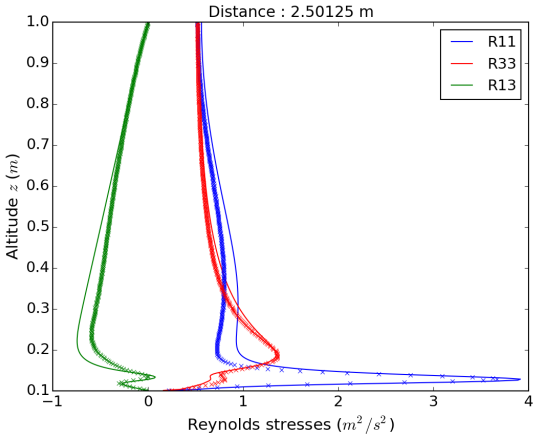
5.2. On the wall-boundary condition consistency

In this paragraph, we illustrate the effect of the wall-boundary conditions discussed in section 2.4 on fluid second-order velocity moments and, for that purpose, we consider the case of the infinite plane channel. Two calculations are performed: one with a wall-boundary condition corresponding to specular rebound ($U_{p,x}^{in} = U_{p,x}^{out}$ and $U_{p,y}^{in} = U_{p,y}^{out}$), and another one where the wall-boundary treatment consistent with the classical wall-function formulation is used (see Eqs. (11) in section 2.4).

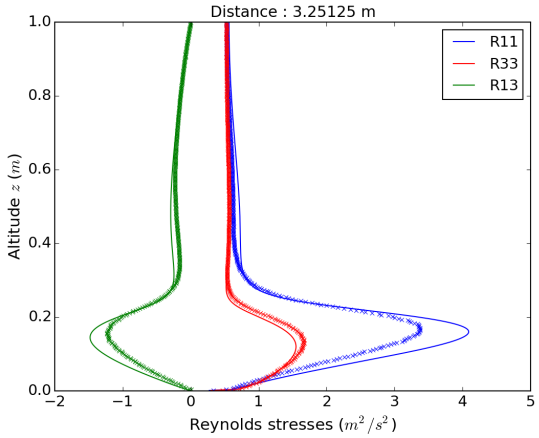
The profiles of the non-zero Reynolds stresses are displayed in Fig. 25. The effect of using consistent wall-boundary conditions can clearly be observed: the agreement between the Reynolds-stress values extracted from the Eulerian and Lagrangian solvers is much better than when specular rebound is used. In particular, the improvement is notable for R_{11} and R_{13} with the difference between Eulerian and Lagrangian values being reduced by half. It can be seen that R_{33} is not affected, which makes sense since the normal velocity remains unchanged, see Eqs. (11). The difference between the resulting profiles of the shear stress R_{13} is noteworthy since this is the key element of near-wall turbulent boundary layers (also called constant-stress layers) when the viscous sublayer is bridged: applying a specular rebound yields a zero-flux condition for the mean longitudinal velocity component and a zero shear stress completely at variance with classical laws of wall-boundary layers



(a) Upstream of the obstacle

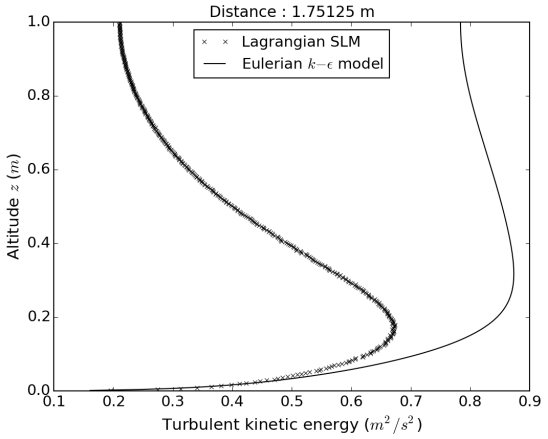


(b) Over the obstacle

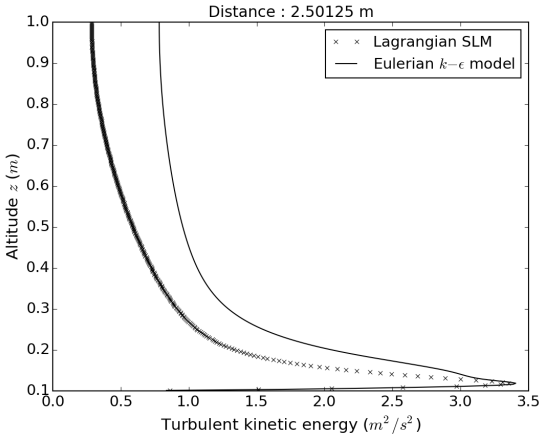


(c) Downstream of the obstacle

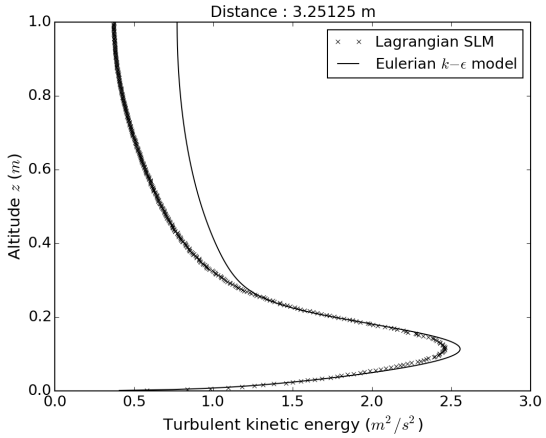
Figure 22: Reynolds stresses vertical profiles at various distances from the inlet obtained with the hybrid formulation Rotta model/SLM for the case of the flow around an obstacle within a boundary layer. The duplicate predictions correspond to the result of the Eulerian solver (continuous lines) and the Lagrangian one (crosses).



(a) Upstream of the obstacle



(b) Over the obstacle



(c) Downstream of the obstacle

Figure 23: Turbulent kinetic energy vertical profiles at various distances from the inlet for the case of the flow around an obstacle within a boundary layer. A different hybrid formulation is used, with the $k-\epsilon$ model applied in the Eulerian solver while the SLM is retained in the Lagrangian one. This results in inconsistent predictions for the fluid kinetic energy by this hybrid method.

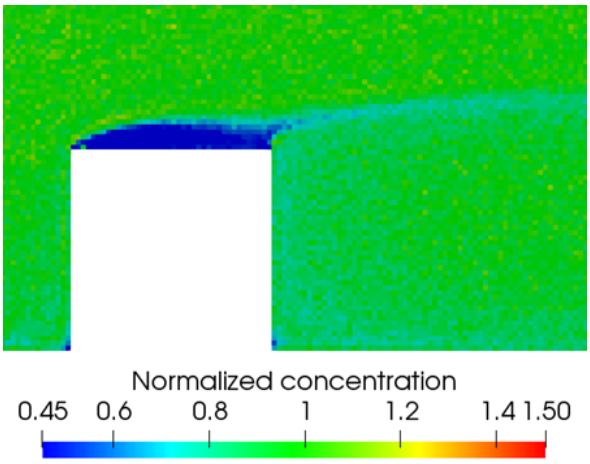


Figure 24: Zoom near the obstacle of the particle normalized concentration field for the case of the flow around obstacle within a boundary layer obtained with the inconsistent hybrid $k-\epsilon$ model/SLM formulation. Even with the particle correction schemes described in section 4, a depletion region appears on the top of the obstacle.

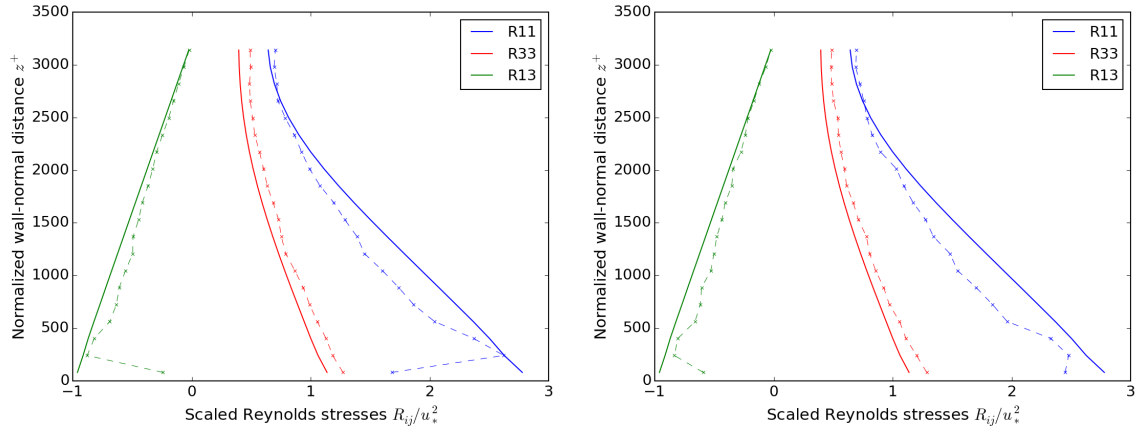
at high Reynolds-number turbulent flows, while a satisfactory behavior of the shear stress is retrieved with the complete boundary conditions in Eqs. (11).

In practical numerical formulations of wall-boundary conditions, specific discretizations are sometimes used. This is the case for the present implementation of wall-conditions in the CFD code *Code_Saturne* (where so-called two-velocity scale numerical implementations are used), which can explain remaining differences in the numerical outcomes. Further work needs to be done to ensure a full correspondence down to the actual numerical formulations. Nevertheless, it can be concluded that wall-boundary conditions are necessary in Lagrangian stochastic formulations and must be implemented consistently with the ones applied in the Eulerian solver when a hybrid formulation is used.

6. Conclusions and perspectives

The purpose of the present paper was to help the development and use of Lagrangian stochastic models for atmospheric dispersion applications by clarifying, through theoretical considerations and a range of numerical situations, the issues of the well-mixed condition and consistencies between duplicate fields in hybrid Eulerian/Lagrangian simulations.

First of all, it has been recalled that the respect of the well-mixed condition is ensured when the mean pressure-gradient term is correctly introduced as the mean drift term of Langevin models for the evolution of instantaneous fluid particle velocities, regardless of the details of the fluctuating part of these models. It is believed that this result is helpful for the development of physics-based stochastic models, since it allows to concentrate on the specific details of Langevin models (*i.e.*, the fluctuating part which governs the ability of a model to capture relevant timescales, etc.). This framework also simplifies the



(a) Specular rebound (b) Wall-boundary condition Eq. (11)

Figure 25: Reynolds stresses vertical profiles for the case of the infinite plane channel: comparison between two versions of wall-boundary conditions with the consistent hybrid Rotta/SLM formulation. In both versions, consistency is assessed by checking the similarity of the predictions from the Eulerian solver (continuous lines) and the Lagrangian one (dashed crosses).

analysis of Langevin models by providing a one-way approach in which Eulerian PDFs are derived from Lagrangian ones (and not the other way around) while safeguarding that the resulting formulation is always consistent with the mean Navier-Stokes equation and the incompressibility condition.

With respect to the well-mixed criterion, the importance of including the mean pressure-gradient term has been demonstrated by the new results presented in this work which cover a range of challenging situations involving non-homogeneous, recirculating and wall-bounded turbulent flows. These examples confirm that the well-mixed condition is satisfied when the mean pressure gradient is correctly accounted for, while serious discrepancies, with zones of particle depletion and/or accumulation, result when this term is absent.

In particle-based models, the incompressibility constraint is translated into a double one: that the mean velocity derived from particle velocities be of zero divergence, and that the mean concentration derived from particle positions remain constant. In practical numerical implementations, this is reflected by a double correction, first with the introduction of the mean pressure-gradient term calculated from the zero-divergence condition of the mean flow and, second, by a correction step on particle positions. This formulation is valid for both stand-alone and hybrid Eulerian/Lagrangian numerical codes.

In practice, most applications for atmospheric dispersion studies are carried out with hybrid Eulerian/Lagrangian simulations, which are not mandatory but nevertheless helpful to provide free-of-statistical-noise mean fluid properties (such as the mean velocity field) from the Eulerian solver to the Lagrangian one. However, hybrid formulations raise consistency issues for mean fluid properties predicted both from the Eulerian and Lagrangian models. It is therefore of paramount importance to realize that the development of im-

proved Eulerian solvers, through advanced turbulence models, does not necessarily entail that Lagrangian predictions, based on a given Langevin model, will be improved. What is central is that both Eulerian and Lagrangian turbulence models be consistent. In that sense, a second interest of the present work is to bring out this issue for atmospheric studies and to reveal, through numerical simulations in a neutral boundary layer, the potentially-damaging errors induced when inconsistent turbulence models are used.

It is hoped that present results will be helpful to atmospheric models by allowing future theoretical and numerical efforts to be safely channeled towards improved predictions while ensuring that basic conditions and constraints are satisfied. Indeed, Lagrangian stochastic models have great interest for passive (as well as reactive) scalar modeling. For example, Bahlali et al. (2018) have considered point source dispersion and correctly captured the near- and far-field dispersive behaviors even when using a simple Langevin model. For future investigations, it will therefore be interesting to extend present consistent hybrid Eulerian/Lagrangian approaches to include scalar modeling based on more-advanced Generalized Langevin Model.

Appendix A. On the relation between instantaneous and fluctuating velocities for Langevin models

From the definition of the fluctuating velocity, we have:

$$dU'_{p,i} = dU_{p,i} - d\langle U_{f,i}\rangle \ . \tag{A.1}$$

Recalling that the fluid particle velocity is simply the value of the velocity field at the particle location, *i.e.*, $U_{p,i}(t) = U_{f,i}(t, \mathbf{X}_p(t))$, the differential of the mean velocity of the fluid along an instantaneous fluid particle trajectory is expressed by:

$$\frac{d\langle U_{f,i}\rangle}{dt} = \frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial t} + U_{p,j}\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j} \ , \tag{A.2}$$

from which it follows that

$$\frac{d\langle U_{f,i}\rangle}{dt} = \frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial t} + \langle U_{f,j}\rangle\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j} + U'_{p,j}\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j} \ . \tag{A.3}$$

On the other hand, the mean Navier-Stokes equations is (leaving out the mean viscosity term (at high Reynolds-number numbers):

$$\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial t} + \langle U_{f,j}\rangle\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial\langle P_f\rangle}{\partial x_i} - \frac{\partial\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle}{\partial x_j} \ . \tag{A.4}$$

Injecting this last equation into Eq. (A.3) gives:

$$\frac{d\langle U_{f,i}\rangle}{dt} = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial\langle P_f\rangle}{\partial x_i} - \frac{\partial\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle}{\partial x_j} + U'_{p,j}\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j} \ , \tag{A.5}$$

which finally yields that:

$$dU'_{p,i} = dU_{p,i} + \left(\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial\langle P_f\rangle}{\partial x_i} + \frac{\partial\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle}{\partial x_j} - U'_{p,j}\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j}\right)dt \ . \tag{A.6}$$

If we consider a Langevin model such as the GLM (cf. Eq. (3)), we obtain that:

$$\begin{aligned} dU'_{p,i} = -\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial\langle P_f\rangle}{\partial x_i}dt - G_{ij}(U_{p,i} - \langle U_{f,i}\rangle)dt + \sqrt{C_0\epsilon_f}\,dW_i \\ + \left(\frac{1}{\rho_f}\frac{\partial\langle P_f\rangle}{\partial x_i} + \frac{\partial\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle}{\partial x_j} - U'_{p,j}\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j}\right)dt \end{aligned} \tag{A.7}$$

which, after simplification of the mean pressure-gradient term, gives:

$$dU'_{p,i} = \left(\frac{\partial\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle}{\partial x_j} - U'_{p,j}\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j}\right)dt - G_{ij}U'_{p,j}\,dt + \sqrt{C_0\epsilon_f}\,dW_i \ . \tag{A.8}$$

In the particular case of the SLM (cf. Eqs. (5)-(6)), we get therefore that:

$$dU'_{p,i} = \left(\frac{\partial\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle}{\partial x_j} - U'_{p,j}\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j}\right)dt - \frac{U'_{p,i}}{T_L}\,dt + \sqrt{C_0\epsilon_f}\,dW_i \ . \tag{A.9}$$

Appendix B. Demonstration of the $R_{ij} - \epsilon$ Rotta/SLM consistency

The PDF transport equation incorporating the GLM writes as follows:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V_i \frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \langle P_f \rangle}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial V_i} = -\frac{\partial}{\partial V_i} \left[f G_{ij} (V_j - \langle U_{f,j} \rangle) \right] + \frac{1}{2} C_0 \epsilon_f \frac{\partial^2 f}{\partial V_i V_j} \ . \tag{B.1}$$

Note that this equation is satisfied first by the Lagrangian PDF, $f_L(t; \mathbf{x}, \mathbf{V})$, from which the one satisfied by the Eulerian PDF, $f_E(t, \mathbf{x}; \mathbf{V})$, is derived (since the Eulerian PDF is defined as the Lagrangian conditioned on a given location). For incompressible flows, the PDF of particle location is a constant and f_E, which is then proportional to f_L, satisfies the same PDF equation as f_L. With these relations in mind, the index is dropped in the following derivations to keep simple notations. From Eq. (B.1), it is then straightforward to derive moments of the velocity field since, for any moment of order m, we have

$$\langle U_{f,i}^m(t, \mathbf{x}) \rangle = \int V_i^m \, f(t, \mathbf{x}; \mathbf{V}) \, d\mathbf{V} \ . \tag{B.2}$$

The equation for the first velocity moment is obtained by multiplying Eq. (B.1) by V_j and integrating over velocity space, from which we exactly retrieve the mean Navier-Stokes momentum equation. As for the second moment, multiplying Eq. (B.1) this time by $V_j V_k$ and integrating over $\mathbf{V}$ yields the following equation (after some manipulations to substract the one for $\langle U_{f,i} \rangle \langle U_{f,j} \rangle$):

$$\frac{D \langle U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle}{Dt} + \frac{\partial \langle U'_{f,i} U'_{f,j} U'_{f,k} \rangle}{\partial x_k} = P_{ij} + G_{ik} \langle U'_{f,j} U'_{f,k} \rangle + G_{jk} \langle U'_{f,i} U'_{f,k} \rangle + C_0 \epsilon_f \delta_{ij} \tag{B.3}$$

where $D/Dt = \partial/\partial t + \langle U_{f,j} \rangle \partial/\partial x_j$ stands for transport by the mean velocity and where P_{ij} is the production tensor:

$$P_{ij} = -\langle U'_{f,i} U'_{f,k} \rangle \frac{\partial \langle U_{f,j} \rangle}{\partial x_k} - \langle U'_{f,j} U'_{f,k} \rangle \frac{\partial \langle U_{f,i} \rangle}{\partial x_k} \ . \tag{B.4}$$

As explained by Pope (2000), the first three terms of Eq. (B.3) are exact. It is interesting to compare this equation to the exact Reynolds-stress equations, which are:

$$\frac{D \langle U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle}{Dt} + \frac{\partial T_{kij}}{\partial x_k} = P_{ij} + R_{ij} - \epsilon_{f,ij} \tag{B.5}$$

where:

$$T_{kij} = \langle U'_{f,i} U'_{f,j} U'_{f,k} \rangle - \nu \frac{\partial \langle U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle}{\partial x_k} + \frac{1}{\rho_f} \langle U'_{f,i} P'_f \rangle \delta_{jk} + \frac{1}{\rho_f} \langle U'_{f,j} P'_f \rangle \delta_{ik} \tag{B.6}$$

and:

$$R_{ij} = \left\langle \frac{P'_f}{\rho_f} \left(\frac{\partial U'_{f,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U'_{f,j}}{\partial x_i} \right) \right\rangle \ . \tag{B.7}$$

By identifying Eq. (B.1) to (B.5) and if we neglect viscous and pressure transport (last three terms of Eq. (B.6)), we obtain:

$$R_{ij} - \epsilon_{f,ij} = G_{ik}\langle U'_{f,j}U'_{f,k}\rangle + G_{jk}\langle U'_{f,i}U'_{f,k}\rangle + C_0\epsilon_f\delta_{ij} \ . \tag{B.8}$$

Assuming dissipation to be isotropic (Pope, 2000) yields:

$$R_{ij} = G_{ik}\langle U'_{f,j}U'_{f,k}\rangle + G_{jk}\langle U'_{f,i}U'_{f,k}\rangle + (\frac{2}{3} + C_0)\epsilon_f\delta_{ij} \ . \tag{B.9}$$

Now, if we consider the SLM equation, *i.e.*, $G_{ij} = -(\frac{1}{2} + \frac{3}{4}C_0)\frac{\epsilon_f}{k}\delta_{ij}$, we obtain:

$$R_{ij} = -(1 + \frac{3}{2}C_0)\,\frac{\epsilon_f}{k_f}\left(\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle - \frac{2}{3}k_f\delta_{ij}\right) \ , \tag{B.10}$$

which shows that the SLM corresponds to the Rotta model, with $C_R = 1 + \frac{3}{2}C_0$ as the 'Rotta coefficient'.

Appendix C. Estimation of the Monte Carlo error

Let us assume first that we simulate only one particle. Let $c_{j,i}$ be the random variable associated with particle $j \in \mathbb{N}^*$ such that:

$$\begin{cases} c_{j,i} = 0 & \text{if particle } j \text{ is not in cell } i \\ c_{j,i} = \dfrac{v_p}{v_i} & \text{if particle } j \text{ is in cell } i \end{cases} \tag{C.1}$$

where v_p is the (fictious) volume of particle j and v_i the volume of cell i, $i \in \mathbb{N}^*$.

We can then deduce the spatial mean and variance values of $c_{j,i}$ as follows:

$$\langle c_{j,i} \rangle = \frac{1}{N_{cells}} \sum_{k=1}^{N_{cells}} c_{j,k} = \frac{c_{j,i}}{N_{cells}} \tag{C.2}$$

and (unbiased estimation of variance):

$$\begin{array}{ll} \sigma^2_{c_{j,i}} & = \frac{1}{N_{cells}} \sum_{k=1}^{N_{cells}} (c_{j,k} - \langle c_{j,k} \rangle)^2 \\ & = \frac{1}{N_{cells}-1} \left[\langle c_{j,i} \rangle^2 (N_{cells} - 1) + (c_{j,i} - \langle c_{j,i} \rangle)^2 \right] \\ & = \frac{1}{N_{cells}-1} \left[\langle c_{j,i} \rangle^2 (N_{cells} - 1) + (N_{cells} \langle c_{j,i} \rangle - \langle c_{j,i} \rangle)^2 \right] \\ & = \frac{\langle c_{j,i} \rangle^2}{N_{cells}-1} (N_{cells} - 1)(1 + N_{cells} - 1) \end{array} \tag{C.3}$$

which yields:

$$\sigma^2_{c_{j,i}} = \langle c_{j,i} \rangle^2 N_{cells} \ . \tag{C.4}$$

Now, let us assume we simulate N particles. Let $X_{N,i}$ be the random variable such that:

$$X_{N,i} = \sum_{j=1}^{N} c_{j,i} \ . \tag{C.5}$$

$X_{N,i}$ represents the concentration in cell i associated with the ensemble of the N particles. Since $\{c_{j,i}\}_{\{j=1..N\}}$ is a sequence of independent and identically distributed random variables, then the central limit theorem applies and the spatial mean and variance of $X_{N,i}$ write as follows:

$$\langle X_{N,i} \rangle = N \langle c_{j,i} \rangle \ , \tag{C.6}$$

and:

$$\sigma^2_{X_{N,i}} = N \sigma^2_{c_{j,i}} = N \langle c_{j,i} \rangle^2 N_{cells} \tag{C.7}$$

Normalizing the standard deviation of $X_{N,i}$ by its mean, we deduce the following formula:

$$\frac{\sigma_{X_{N,i}}}{\langle X_{N,i} \rangle} = \frac{\sqrt{N}\sqrt{N_{cells}}}{N} \tag{C.8}$$

hence:

$$\frac{\sigma_{X_{N,i}}}{\langle X_{N,i} \rangle} = \sqrt{\frac{N_{cells}}{N}} \ . \tag{C.9}$$

We deduce from this formula that the normalized standard deviation depends on the ratio between the number of particles simulated N and the number of cells N_{cells}. If $N \to \infty$, this standard deviation tends to 0. This result is coherent because if an infinity of particles were simulated, there would be no more variability of their number between the cells since there would also be an infinity in each.

It is worth noting that this error can also be seen as the deviation from a Poisson repartition. Indeed, as we consider an ensemble of discrete particles uniformly distributed in the domain, then the number of particles $N_{k,i}$ within a given cell i can be considered a Poisson random variable, whose average is $\lambda = N/N_{cells}$. The probability of observing $N_{k,i}$ particles in cell i is then given by the following equation:

$$P(N_{k,i}) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^{N_{k,i}}}{N_{k,i}!} \ . \tag{C.10}$$

The expected value and variance of such a Poisson-distributed random variable are by definition both equal to λ, hence:

$$\frac{\sigma_{N_{k,i}}}{\langle N_{k,i} \rangle} = \frac{\sqrt{\lambda}}{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} = \sqrt{\frac{N_{cells}}{N}} \ . \tag{C.11}$$

As the random variables $X_{N,i}$ and $N_{k,i}$ are proportional ($X_{N,i} = N_{k,i} v_p / v_i$), same conclusion as through Eq. (C.9) is retrieved.

References

Alessandrini, S., Ferrero, E., 2009. A hybrid Lagrangian–Eulerian particle model for reacting pollutant dispersion in non-homogeneous non-isotropic turbulence. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 388 (8), 1375–1387.

Archambeau, F., Méchitoua, N., Sakiz, M., 2004. Code Saturne: A Finite Volume Code for the computation of turbulent incompressible flows - Industrial applications. International Journal on Finite Volumes 1 (1), http://code–saturne.org.

Bahlali, M. L., Dupont, E., Carissimo, B., 2018. A hybrid CFD RANS/Lagrangian approach to model atmospheric dispersion of pollutants in complex urban geometries. Submitted to International Journal of Environment and Pollution.

Bernardin, F., Bossy, M., Chauvin, C., Drobinski, P., Rousseau, A., Salameh, T., 2009. Stochastic downscaling method: application to wind refinement. Stochastic Environmental Research and Risk Assessment 23 (6), 851–859.

Borgas, M. S., Flesch, T. K., Sawford, B. L., 1997. Turbulent dispersion with broken reflectional symmetry. Journal of Fluid Mechanics 332, 141–156.

Cassiani, M., Franzese, P., Giostra, U., 2005a. A PDF micromixing model of dispersion for atmospheric flow. Part I: development of the model, application to homogeneous turbulence and to neutral boundary layer. Atmospheric Environment 39 (8), 1457–1469.

Cassiani, M., Franzese, P., Giostra, U., 2005b. A PDF micromixing model of dispersion for atmospheric flow. Part II: application to convective boundary layer. Atmospheric Environment 39 (8), 1471–1479.

Cassiani, M., Radicchi, A., Albertson, J. D., 2007. Modelling of concentration fluctuations in canopy turbulence. Boundary-Layer Meteorology 122 (3), 655–681.

Champagne, F. H., Pao, Y. H., Wygnanski, I. J., 1976. On the two-dimensional mixing region. Journal of Fluid Mechanics 74 (2), 209–250.

Chauvin, C., Bernardin, F., Bossy, M., Rousseau, A., 2010. Wind simulation refinement: some new challenges for particle methods. In: Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2008. Springer, pp. 765–770.

Chibbaro, S., Minier, J.-P., 2011. A note on the consistency of hybrid Eulerian/Lagrangian approach to multiphase flows. International Journal of Multiphase Flow 37 (3), 293–297.

De Baas, A. F., Van Dop, H., Nieuwstadt, F., 1986. An application of the Langevin equation for inhomogeneous conditions to dispersion in a convective boundary layer. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society 112 (471), 165–180.

Dreeben, T. D., Pope, S. B., 1997. Probability density function and Reynolds-stress modeling of near-wall turbulent flows. Physics of Fluids 9 (1), 154–163.

Franzese, P., 2003. Lagrangian stochastic modeling of a fluctuating plume in the convective boundary layer. Atmospheric Environment 37 (12), 1691–1701.

Gardiner, C. W., 1985. Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences. Springer.

Lin, J. C., Gerbig, C., 2013. How can we satisfy the well-mixed criterion in highly inhomogeneous flows? a practical approach. Lagrangian Modeling of the Atmosphere, 59–70.

Minier, J.-P., 2015. On Lagrangian stochastic methods for turbulent polydisperse two-phase reactive flows. Progress in Energy and Combustion Science 50, 1–62.

Minier, J.-P., 2016. Statistical descriptions of polydisperse turbulent two-phase flows. Physics Reports 665, 1–122.

Minier, J.-P., Chibbaro, S., Pope, S. B., 2014. Guidelines for the formulation of Lagrangian stochastic models for particle simulations of single-phase and dispersed two-phase turbulent flows. Physics of Fluids 26 (11), 113303.

Minier, J.-P., Peirano, E., 2001. The PDF approach to turbulent polydispersed two-phase flows. Physics Reports 352 (1), 1–214.

Minier, J.-P., Pozorski, J., 1999. Wall-boundary conditions in probability density function methods and application to a turbulent channel flow. Physics of Fluids 11 (9), 2632–2644.

Monin, A. S., Yaglom, A. M., 1971. Statistical fluid dynamics. MIT Press, Cambridge.

Öttinger, H. C., 1996. Stochastic processes in polymeric fluids: tools and examples for developing simulation algorithms. Springer.

Peirano, E., Chibbaro, S., Pozorski, J., Minier, J.-P., 2006. Mean-field/PDF numerical approach for polydispersed turbulent two-phase flows. Progress in Energy and Combustion Science 32 (3), 315–371.

Pope, S. B., 1985. PDF methods for turbulent reactive flows. Progress in Energy and Combustion Science 11 (2), 119–192.

Pope, S. B., 1987. Consistency conditions for random-walk models of turbulent dispersion. Physics of Fluids 30 (8), 2374–2379.

Pope, S. B., 1991. Computations of turbulent combustion: progress and challenges. In: Symposium (International) on Combustion. Vol. 23. Elsevier, pp. 591–612.

Pope, S. B., 1994a. Lagrangian PDF methods for turbulent flows. Annual Review of Fluid Mechanics 26 (1), 23–63.

Pope, S. B., 1994b. On the relationship between stochastic Lagrangian models of turbulence and second-moment closures. Physics of Fluids 6 (2), 973–985.

Pope, S. B., 2000. Turbulent flows. Cambridge Univ. Press.

Sawford, B., 1986. Generalized random forcing in random-walk turbulent dispersion models. Physics of Fluids 29 (11), 3582–3585.

Sawford, B. L., 1985. Lagrangian statistical simulation of concentration mean and fluctuation fields. Journal of Climate and Applied Meteorology 24 (11), 1152–1166.

Sawford, B. L., Guest, F. M., 1988. Uniqueness and universality of Lagrangian stochastic models of turbulent dispersion. In: 8th Symposium on Turbulence and Diffusion. Vol. 1. pp. 96–99.

Stohl, A., Forster, C., Frank, A., Seibert, P., Wotawa, G., 2005. The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 6.2. Atmospheric Chemistry and Physics 5 (9), 2461–2474.

Szewc, K., Pozorski, J., Minier, J.-P., 2012. Analysis of the incompressibility constraint in the smoothed particle hydrodynamics method. International Journal for Numerical Methods in Engineering 92 (4), 343–369.

Thomson, D. J., 1987. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. Journal of Fluid Mechanics 180, 529–556.

Tinarelli, G., Mortarini, L., Castelli, S. T., Carlino, G., Moussafir, J., Olry, C., Armand, P., Anfossi, D., 2013. Review and validation of MicroSpray, a Lagrangian particle model of turbulent dispersion. Lagrangian Modeling of the Atmosphere, 311–328.

Van Dop, H., Nieuwstadt, F. T. M., Hunt, J. C. R., 1985. Random walk models for particle displacements in inhomogeneous unsteady turbulent flows. Physics of fluids 28 (6), 1639–1653.

Wilson, J. D., Sawford, B. L., 1996. Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere. Springer.

Wilson, J. D., Thurtell, G. W., Kidd, G. E., 1981. Numerical simulation of particle trajectories in inhomogeneous turbulence, III: Comparison of predictions with experimental data for the atmospheric surface layer. Boundary-Layer Meteorology 21 (4), 443–463.

5.2 Complément

Suite à une demande spécifique d'EDF, une autre simulation relative au critère de mélange homogène a été réalisée, pour le cas de l'obstacle au sein d'une couche limite neutre. Pour cette nouvelle simulation, les paramètres suivants ont été modifiés :

— Les dimensions du domaine ont toutes été multipliées par 100 : le domaine est à présent de 500 m de longueur, de 100 m de hauteur, et l'obstacle est de taille 10 × 10 m.

— Au niveau du sol, une condition de paroi rugueuse a été imposée à la place de la paroi lisse, avec une valeur de rugosité de 10 cm.

— La condition limite au sommet du domaine, qui était une symétrie dans l'article Bahlali et al. (2018c), a été changée pour une entrée avec conditions de Dirichlet imposées pour la vitesse moyenne et le tenseur R_{ij}. Ceci afin d'imposer le flux correct de quantité de mouvement au sommet.

Le champ de concentration normalisé par la valeur moyenne attendue $c/\langle c \rangle$ obtenu est montré en Figure 5.1, avec une vue globale du domaine et un zoom autour de l'obstacle.

Nous observons une concentration uniforme dans tout le domaine, sauf au niveau de la zone située juste au-dessus de l'obstacle, où un puits de particules s'est formé. Pour une analyse plus précise, dans la Figure 5.2, nous présentons les profils verticaux de concentration normalisée extraits à cinq différentes distances dans la direction longitudinale. Les distances choisies pour les profils sont les mêmes (multipliées par 100) que pour le cas présenté dans l'article Bahlali et al. (2018c) reproduit en section 5.1 du présent chapitre, et le lecteur peut ainsi se référer à la Figure 15 de cet article pour retrouver la localisation des profils. Pour rappel, trois profils sont situés dans la zone critique au-dessus de l'obstacle, un profil est situé en amont de l'obstacle et le dernier se trouve en sortie de domaine.

Nous observons en Figure 5.2 que les cinq profils de concentration normalisée restent relativement constants, excepté à l'approche de l'obstacle où il existe une chute brutale des concentrations, correspondant au puits de particules précédemment mentionné. Plus d'investigations sont nécessaires sur ce sujet. Néanmoins, nous pouvons proposer une première analyse en Figure 5.3 en comparant les champs d'énergie cinétique turbulente autour de l'obstacle, par rapport au cas d'une paroi à très faible rugosité ($z_0 = 0.0025$ m) – cas dans lequel nous n'observons pas de puits de particules (non montré ici).

Sur la Figure 5.3, nous observons des niveaux d'énergie cinétique turbulente bien plus importants avec la configuration $z_0 = 0.1$ m, en particulier au niveau du coin

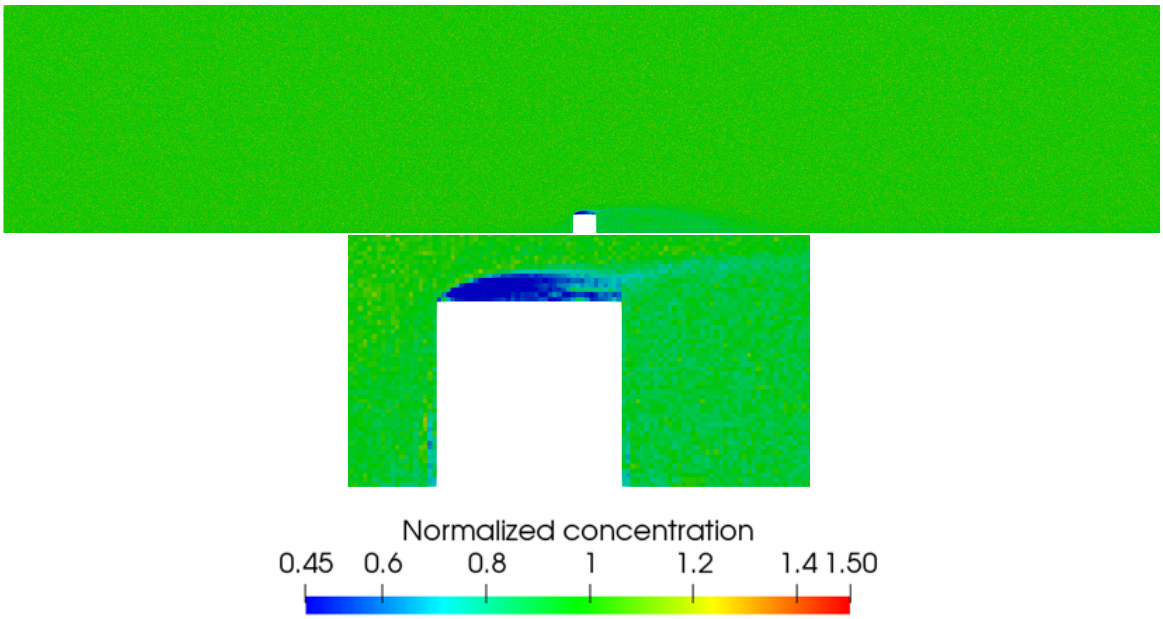


FIGURE 5.1 – Champ de concentration normalisé $c/\langle c \rangle$ pour le cas de l'obstacle au sein d'une couche limite, avec dimensions multipliées par 100, paroi rugueuse au sol et entrée au sommet. De haut en bas : vue globale, zoom autour de l'obstacle.

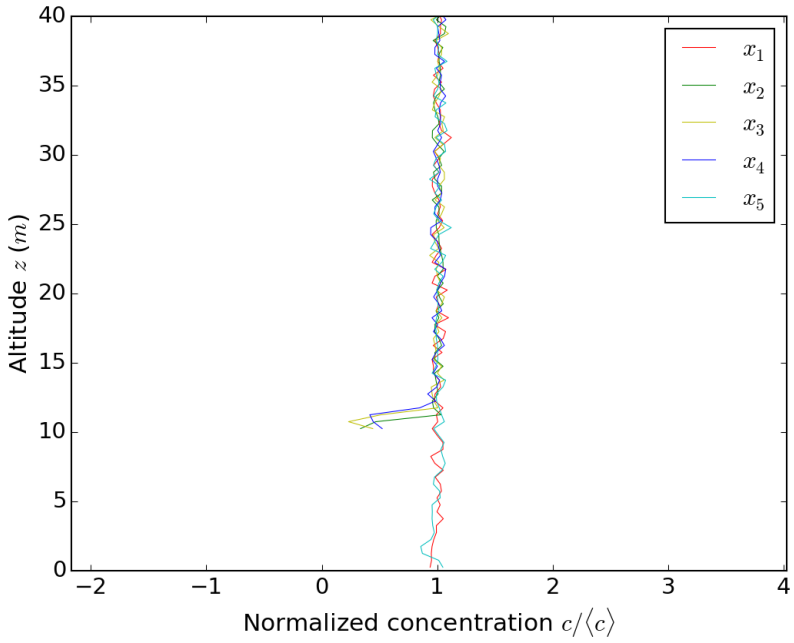


FIGURE 5.2 – Profils verticaux de concentration normalisée au niveau des cinq plans de coupe indiqués dans la Figure 15 de l'article BAHLALI et al. (2018c), pour le cas de l'obstacle au sein d'une couche limite, avec dimensions multipliées par 100, paroi rugueuse au sol et entrée au sommet.

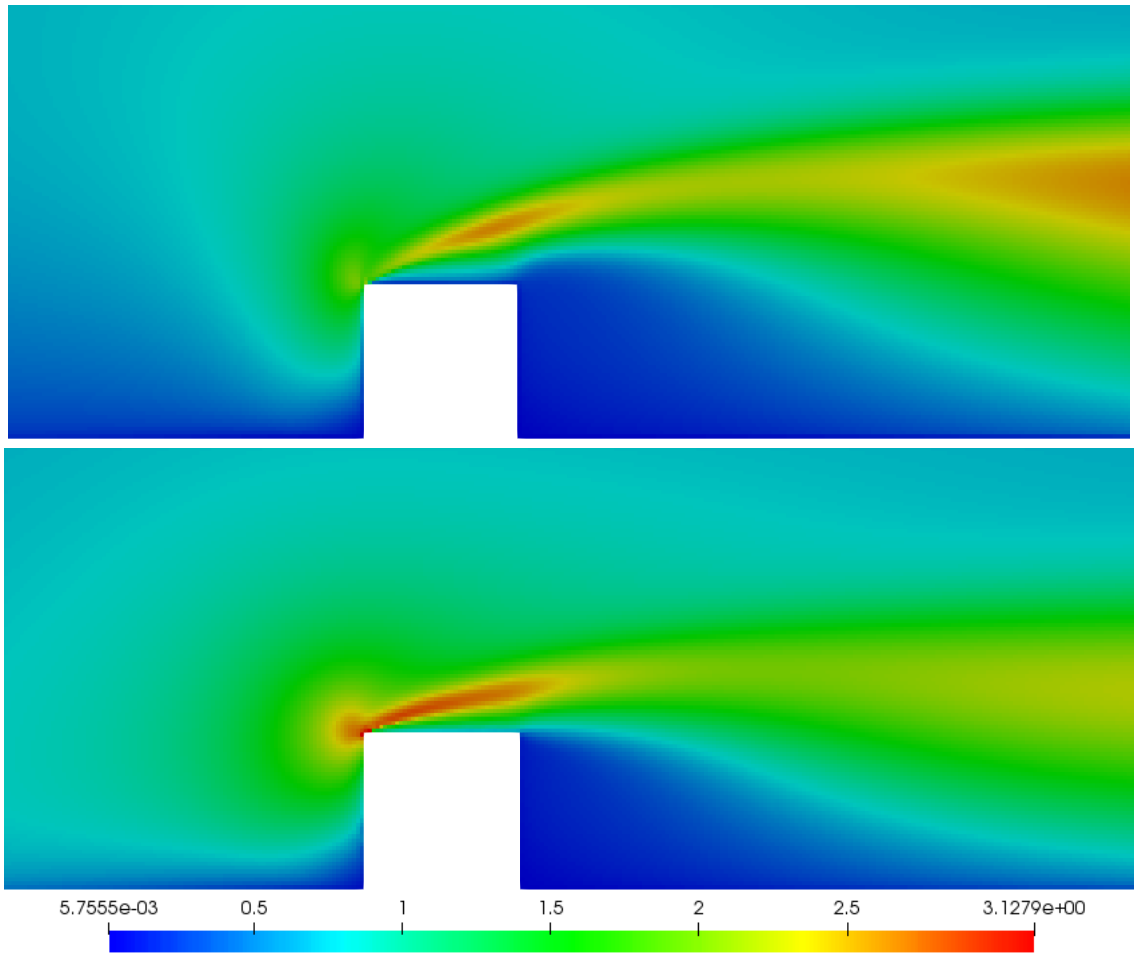
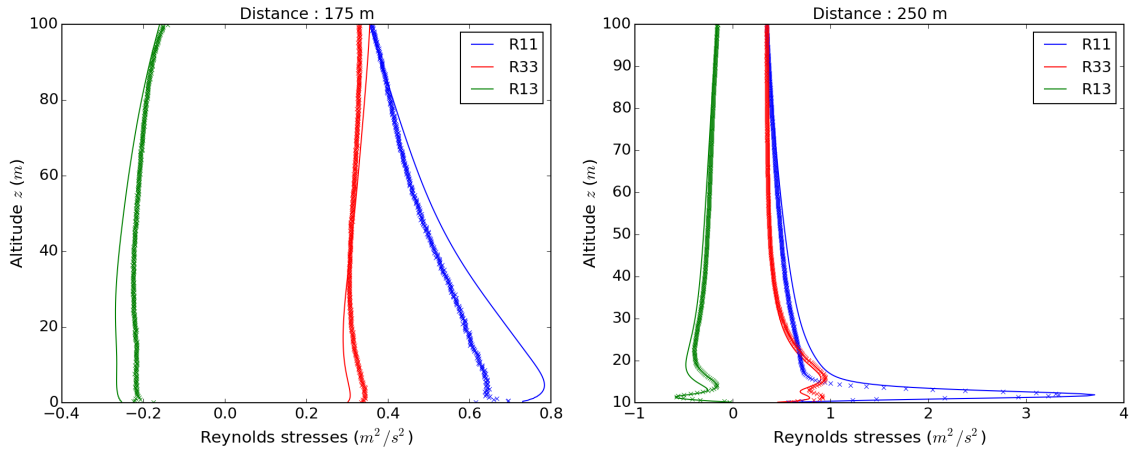


FIGURE 5.3 – Champ d'énergie cinétique turbulente pour le cas de l'obstacle au sein d'une couche limite, avec dimensions multipliées par 100, paroi rugueuse au sol et entrée au sommet. De haut en bas : $z_0 = 0.0025$ m, $z_0 = 0.1$ m.

gauche de l'obstacle et également au-dessus de celui-ci. Une analyse du déplacement des particules a permis de voir que la région où l'énergie cinétique turbulente est très importante correspond à la première région "vidée" par les particules. Il y a potentiellement une difficulté du modèle lagrangien à suivre les particules dans cette région de recirculation particulièrement complexe, accentuée en conditions rugueuses puisque la turbulence y est beaucoup plus importante. Des investigations plus approfondies sont en cours et sont à développer en perspectives de ce travail de thèse.

Enfin, de même que dans l'article Bahlali et al. (2018c), nous avons sélectionné trois zones (en amont, au-dessus, et en aval de l'obstacle), et au niveau de chacune de ces zones nous avons tracé les profils verticaux des tensions de Reynolds R_{11}, R_{33} et R_{13}. Ceci est illustré dans la Figure 5.4. Les formes des courbes sont différentes de celles présentées dans Bahlali et al. (2018c), puisque nous avons imposé au sommet une condition d'entrée afin d'avoir un flux R_{13} constant dans la couche limite considérée. En amont de l'obstacle, des écarts sont observés entre les prédictions dupliquées correspondant aux solveurs eulérien et lagrangien, en particulier en proche paroi. Nous observions un phénomène comparable dans le cas du canal plan infini de l'article Bahlali et al. (2018c), où des écarts entre les prédictions des deux solveurs étaient observés près de la paroi. En perspective, des travaux seraient donc à poursuivre sur les conditions aux limites particulaires.



(a) En amont de l'obstacle

(b) Sur l'obstacle

(c) En aval de l'obstacle

FIGURE 5.4 – Profils verticaux des tensions de Reynolds au niveau des trois plans de coupe utilisés dans la Figure 22 de l'article BAHLALI et al. (2018c), pour le cas de l'obstacle au sein d'une couche limite, avec dimensions multipliées par 100, paroi rugueuse au sol et entrée au sommet. Les prédictions dupliquées correspondent aux résultats du solveur eulérien (lignes continues) et du solveur lagrangien (croix).

Chapitre 6

Validation en conditions réelles : le Site Instrumental de Recherche par Télédétection Atmosphérique (SIRTA)

Jusqu'à présent, dans notre travail de thèse, nous avons participé au développement d'un outil de simulation permettant, par approche lagrangienne stochastique, de réaliser des études de dispersion. Cet outil a été validé sur des cas académiques, à la fois en turbulence homogène et en turbulence inhomogène (cf. chapitres 4 et 5). Cependant nous n'avons pas encore traité de cas avec stratification atmosphérique stable. Nous proposons de le faire dans ce chapitre en étudiant un cas réel mettant en jeu une campagne expérimentale de dispersion de polluants réalisée sur le site du SIRTA, en banlieue sud de Paris. Dans un premier temps, nous décrirons le site, le programme expérimental ainsi que les moyens de mesure. Ensuite, nous exposerons les résultats obtenus par le code CFD *Code_Saturne* : toujours au sein de la même simulation, nous discuterons des performances relatives des modèles eulérien et lagrangien utilisés en comparaison aux mesures de la campagne.

Sommaire

6.1 Présentation du programme expérimental 140
6.1.1 Description du site 140
6.1.2 Description de la POI n°11 142
6.2 Modélisation numérique 143
6.2.1 Domaine de simulation et maillage 143
6.2.2 Mise en données 144
6.2.3 Résultats 146
6.2.4 Sensibilité au nombre de particules 154
6.3 Conclusions et perspectives 159

6.1 Présentation du programme expérimental

6.1.1 Description du site

Le SIRTA se situe sur le campus de l'Ecole Polytechnique, en banlieue sud de Paris. Il s'agit de l'observatoire atmosphérique de l'IPSL (Institut Pierre-Simon Laplace) regroupant plusieurs laboratoires de la région parisienne, dont le CEREA où cette thèse est réalisée. Le SIRTA est un site complexe contenant entre autres des bâtiments, un lac ainsi que de la végétation plus ou moins dense. L'activité de recherche y est variée, des processus nuageux aux énergies renouvelables en passant par les études climatiques et la physique de la turbulence.

Pour notre travail, l'objectif est de simuler dans *Code_Saturne* une expérience de dispersion de polluants menée au SIRTA par le CEREA et exploitée par Wei (2016) dans le cadre de ses travaux de thèse. Avant cela, plusieurs autres travaux se basant sur les données du SIRTA ont déjà été réalisés. Par exemple, Fesquet et al. (2009) ont étudié l'impact de l'hétérogénéité du sol sur les propriétés des structures cohérentes au travers de simulations LES. Zaïdi et al. (2013) ont travaillé sur la modélisation à micro-échelle des hétérogénéités des variables turbulentes sur le site pour différentes directions de vent. L'objectif du travail de Wei (2016) a été de caractériser, au sein d'un site complexe, à la fois la structure fine de la turbulence et la dispersion d'un polluant dans l'atmosphère : le propylène (C_3H_6). Ceci a pu être réalisé grâce à des mesures de vent et de concentration à hautes résolutions spatiale et temporelle. Les mesures de vent et de température ont été obtenues par des anémomètres ultrasoniques, et celles de concentration en polluant par des détecteurs par photoionisation (en anglais, *PhotoIonization Detectors* – PID). Le choix du propylène est dû à sa toxicité réduite, sa faible température d'ébullition, son coût raisonnable ainsi que sa faible énergie d'ionisation.

Wei (2016) précise dans ses travaux les caractéristiques principales de la campagne :

— expérience en champ proche (50 à 200 m) ;

— stratification principalement stable, avec quelques situations neutres ;

— mesures à haute fréquence (environ 50 Hz) afin de couvrir l'ensemble du spectre fréquentiel de la turbulence.

Dans la Figure 6.1 est proposée une vue du ciel du SIRTA, avec une représentation de ses différentes zones. La campagne que nous traitons est située en zone 1 (encadrée en rouge sur la figure). Cette zone est délimitée par une forêt au nord et une route au sud.

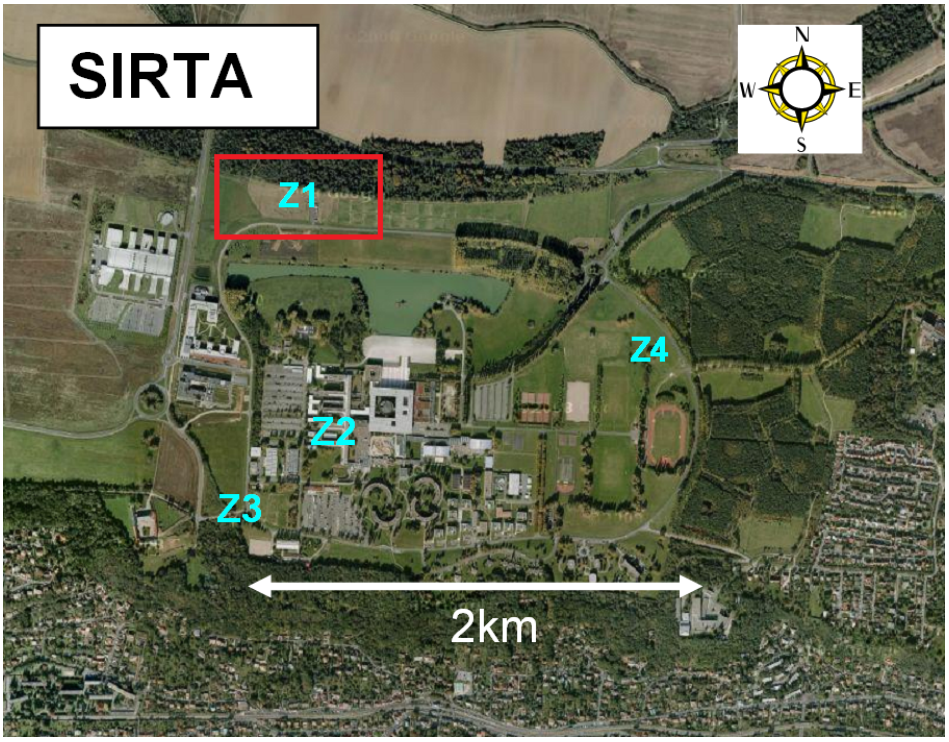


FIGURE 6.1 – Site du SIRTA – vue du ciel (d'après WEI (2016)).

En ce qui concerne les moyens de mesures utilisés dans la campagne ainsi que leurs positions, il sont illustrés en Figure 6.2. La source est représentée par le carré violet, les anémomètres ultrasoniques par les triangles rouges et les PID par les points verts. Il y a en tout douze anémomètres ultrasoniques. Quatre d'entre eux sont disposés autour de la source au niveau des coins d'un carré de côté 25 m. Cinq autres anémomètres sont localisés sur un arc de cercle à 50 m de la source. Ces neuf anémomètres sont situés à une hauteur de 3 m. Deux anémomètres ultrasoniques sont situés à des hauteurs respectives de 10 et 30 m, sur le même mât de 30 m, dans la partie sud-est du domaine. Un dernier anémomètre est fixé au sommet d'un mât de 10 m au sud-ouest de la zone. En ce qui concerne les PID, ils sont au nombre de six. Cinq d'entre eux sont positionnés avec les cinq anémomètres sur l'arc de cercle à 50 m. Le dernier est disposé en amont de la source afin de mesurer le "bruit" de concentration (nommé "background" sur la Figure 6.2). Lors de dernières campagnes de mesure, un PID supplémentaire a été ajouté à la hauteur de 10 m au-dessus du PID n°3, nous permettant de comparer des profils verticaux.

Les mesures de turbulence dans la zone 1 du SIRTA ont été réalisées de manière continue depuis avril 2012 tandis que les mesures de concentration ont été menées sur des petites périodes appelées Périodes d'Observation Intensives (POI). Dans le cadre de nos travaux, nous nous concentrerons sur la POI n°11 dont nous nous attacherons à décrire les conditions météorologiques dans le paragraphe suivant.

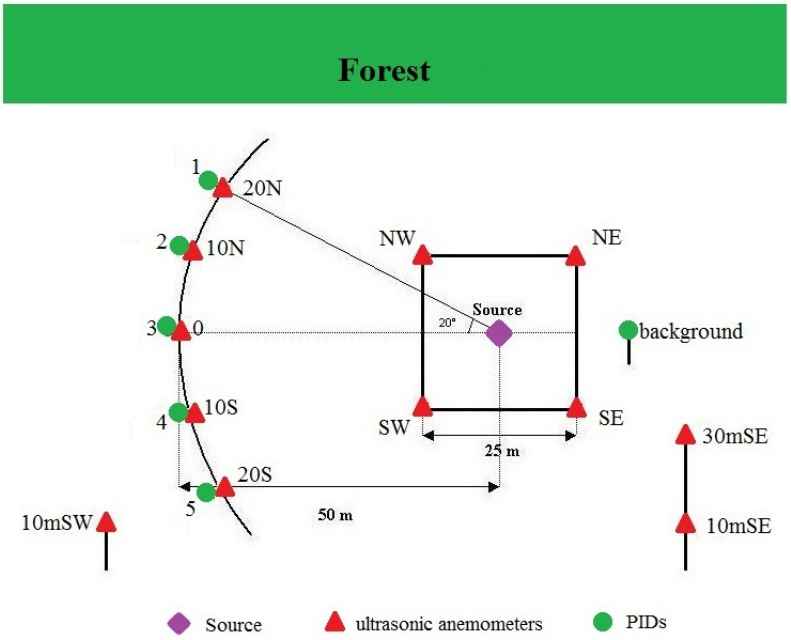


FIGURE 6.2 – Localisation des moyens de mesure sur le site du SIRTA (d'après WEI (2016)).

	NE	NW	SE	SW	20N	20S	10mSW	10mSE	30mSE
$z\ (m)$	3	3	3	3	3	3	10	10	30
Dir. vent (deg)	84.2	85.3	90.4	89.9	84.7	95.4	94.1	94.4	97.4
V. long. (m/s)	1.33	1.42	1.36	1.55	1.44	1.49	2.33	2.30	3.39
$L_{MO}\ (m)$	8	18	10	10	9	17	9	10	47

TABLE 6.1 – Quelques valeurs statistiques du champ de vent pour la POI n°11 (d'après WEI (2016)).

6.1.2 Description de la POI n°11

La POI n°11, réalisée le 11 mars 2015, fait partie des dernières campagnes de traçage qui ont été menées et dispose du PID additionnel à 10 m au-dessus du PID n°3. Le propylène a été relâché avec un débit de 200 L/min pendant 122 minutes et la durée totale de la POI est de 142 minutes. Nous sommes en présence d'une couche limite de surface stable, d'un vent d'est à 3 m, légèrement sud-est à 10 m. Plus de détails sont fournis dans la Table 6.1, tirée des travaux de WEI (2016). Ce tableau indique la direction du vent horizontal, la vitesse longitudinale moyenne ainsi que la longueur de Monin-Obukhov aux différents points de mesure.

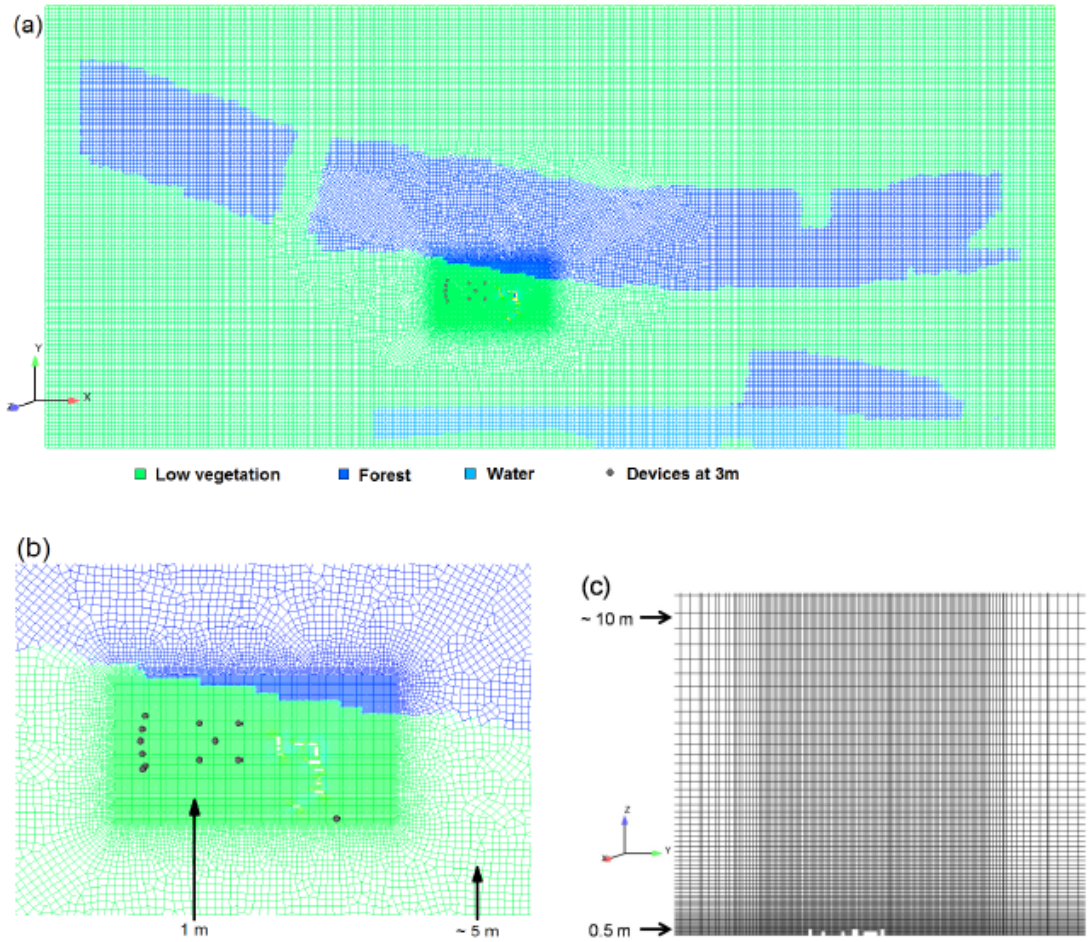


FIGURE 6.3 – Maillage du domaine de simulation. (a) Plan de coupe horizontal au niveau du sol ; (b) zoom sur la zone instrumentée au niveau du sol ; (c) plan de coupe vertical (d'après WEI (2016)).

6.2 Modélisation numérique

Dans cette section, nous nous attachons à présenter la méthodologie ainsi que la mise en données de notre simulation numérique de la POI n°11 dans *Code_Saturne*.

6.2.1 Domaine de simulation et maillage

Le domaine de simulation a pour dimensions 1600 m (Est-Ouest) × 700 m (Nord-Sud) × 200 m (direction verticale). Le maillage est illustré en Figure 6.3 ; il est raffiné près du sol et des instruments de mesure. La zone instrumentée mesure 180 m × 100 m et dans cette zone, la résolution horizontale du maillage est de 1 m. Dans le reste du domaine, elle est de 5 m. La résolution verticale du maillage, quant à elle, est de 0.5 m au niveau du sol et augmente progressivement jusqu'à 10 m au sommet du maillage (z = 200 m). Au total, le maillage contient 4 579 071 cellules.

En ce qui concerne les shelters (hauteur inférieure à 3 m) situés en amont de la zone instrumentée, ils sont explicitement maillés. Par ailleurs, une carte d'occupation du sol est fournie par l'Institut national de l'information géographique et forestière (IGN) et est utilisée afin de distinguer les différents types de sol (forêt, lac,...) et de leur assigner une valeur de rugosité qui leur est propre dans *Code_Saturne*.

6.2.2 Mise en données

6.2.2.1 Phase continue

Pour l'écoulement porteur, dans un premier temps le modèle $k-\epsilon$ avec fermeture SGDH pour les scalaires est utilisé. Nous avons repris les conditions aux limites des travaux de Wei (2016). Nous les rappelons ci-dessous :

— **Condition d'entrée de type Dirichlet**, avec profils analytiques tirés de la théorie de similitude de Monin-Obukhov. Pour les moyennes du vent et de la température, les expressions de Dyer et Hicks (1970); Businger et al. (1971); Hicks (1976) sont utilisées. Pour les champs de turbulence, nous avons appliqué les expressions de Kerschgens et al. (2000). La méthodologie dans le module atmosphérique de *Code_Saturne* consiste à fournir au code un "fichier météo" contenant les variables météorologiques que nous souhaitons imposer en entrée. Ce fichier est généré par la donnée d'une valeur de vitesse de vent à une certaine hauteur, une certaine direction de vent, une certaine longueur de Monin-Obukhov L_{MO} ainsi qu'une certaine rugosité. Les expressions des différents auteurs mentionnés plus haut sont ensuite calculées et fournies à *Code_Saturne*. Wei (2016) précise qu'en l'absence de mesures à l'entrée du domaine, les direction et vitesse moyenne du vent utilisées pour générer le profil sont celles à 30mSE (car à 30 m, les vents sont moins sensibles aux paramètres extérieurs environnants). Par ailleurs, la valeur de L_{MO} utilisée est celle mesurée à 10mSE car nous nous intéressons aux phénomènes se produisant près du sol.

— **Condition de sortie : sortie libre**.

— **Sol, végétation basse et bâti : paroi rugueuse**, rugosité de 0.3 m.

— **Lac : paroi rugueuse**, rugosité de 0.0001 m.

En ce qui concerne la forêt, elle est modélisée par analogie avec un milieu poreux en modifiant le modèle $k-\epsilon$ afin de simuler les pertes de quantité de mouvement et la production de turbulence induites par la présence de la forêt. La canopée crée en effet une force de traînée s'opposant à l'écoulement, ce qui occasionne une baisse de la vitesse du vent et une modification de la turbulence. Ce modèle a été utilisé par Wei (2016) et a été repris des travaux de Sanz (2003); Katul et al. (2004); Dalpé

C_μ	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	σ_k	σ_ϵ
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

TABLE 6.2 – Valeurs des constantes du modèle standard $k-\epsilon$ (LAUNDER et SPALDING, 1974).

et MASSON (2009); ZAÏDI et al. (2013). Il consiste en l'ajout de termes sources de quantité de mouvement et de turbulence. Ces termes sources sont ajoutés dans toute l'épaisseur de la canopée, c'est-à-dire 15 m dans le cas présent (épaisseur supposée homogène horizontalement).

Le terme source ajouté dans l'équation de Navier-Stokes sur la vitesse, représentant la perte de quantité de mouvement au travers de la forêt, s'exprime de la façon suivante :

$$S_{u,i} = -\rho\alpha C_d |\mathbf{U}_f| U_{f,i} \tag{6.1}$$

où C_d est le coefficient de traînée de la forêt et α la densité foliaire, représentant physiquement le nombre de m^2 de feuillage par unité de volume. Dans notre étude $C_d = 0.2$ (WEI, 2016) et $\alpha = 0.5\ \mathrm{m}^{-1}$.

Les termes sources de turbulence S_k et S_ϵ ajoutés dans les équations sur k et ϵ s'expriment de la façon suivante :

$$S_k = \rho\alpha C_d \beta_p |\mathbf{U}_f|^3 - \rho\alpha C_d \beta_d k |\mathbf{U}_f| \ , \tag{6.2a}$$

$$S_\epsilon = \rho\alpha C_d C_{\epsilon 4} \beta_p \frac{\epsilon}{k} |\mathbf{U}_f|^3 - \rho\alpha C_d C_{\epsilon 5} \beta_d \epsilon |\mathbf{U}_f| \ , \tag{6.2b}$$

où β_p, β_d, $C_{\epsilon 4}$ et $C_{\epsilon 5}$ sont des constantes du modèles, exprimées comme suit (WEI, 2016) :

$$\beta_p = 1 \ , \tag{6.3a}$$

$$\beta_d = \sqrt{C_\mu} \left(\frac{2}{0.05} \right)^{2/3} \beta_p + \frac{3}{\sigma_k} = 5.03 \ , \tag{6.3b}$$

$$C_{\epsilon 4} = C_{\epsilon 5} = \sigma_k \left[\left(\left(\frac{2}{\sigma_\epsilon} - \sqrt{C_\mu} \right) / 6 \right) \left(\frac{2}{0.05} \right)^{2/3} (C_{\epsilon 2} - C_{\epsilon 1}) \right] = 0.9 \ , \tag{6.3c}$$

où le set de constantes (C_μ, $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, σ_k, σ_ϵ) a pour valeurs celles correspondant au modèle standard de LAUNDER et SPALDING (1974). Ces valeurs figurent sur la Table 6.2.

WEI (2016) précise que les valeurs de $C_{\epsilon 4}$, $C_{\epsilon 5}$, β_p et β_d ont peu d'influence sur les résultats des simulations, d'après l'étude de ZAÏDI et al. (2013).

6.2.2.2 Phase dispersée

En approche eulérienne, nous injectons le polluant par terme source scalaire. Au niveau de la cellule d'injection, nous imposons un débit de 200 L/min.

En approche lagrangienne, au niveau de la même cellule d'injection, nous imposons le même débit de 200 L/min, avec $N = 20\,000$ particules par pas de temps $\Delta t = 0.01$ s. En paroi, la condition limite imposée est le rebond prenant en compte le frottement à la paroi, comme explicité en équation (4.12) (cela n'est pas montré ici, mais notons toutefois qu'en termes de concentration, nous avons observé que la condition de rebond spéculaire fournit les mêmes résultats).

Un point important à noter est que, compte tenu de la présence d'un terme source de quantité de mouvement dans les zones boisées, nous devrions, pour des questions de consistance, ajouter le terme de dérive équivalent dans l'équation de Langevin du modèle SLM. Nous ne l'avons pas fait, car la région du rejet et des points de mesure de concentration (PIDs) se situe dans une zone dans laquelle la forêt n'est pas présente (cf. Figure 6.3). Par conséquent, la dispersion des particules et les résultats de concentration lagrangiens dans cette zone ne sont pas affectés par la forêt et il n'était donc pas nécessaire de rajouter le terme source équivalent dans l'équation de Langevin. Néanmoins, si besoin est d'étudier la dispersion des particules lorsqu'elles pénètrent dans la forêt, il faudra garder à l'esprit l'implémentation de ce terme supplémentaire.

A ce stade, il est important de noter que deux simulations lagrangiennes ont été réalisées. La première simulation, en utilisant le modèle SLM "standard" (cf. équation (3.29)), et la seconde, en utilisant le modèle SLM "complet" (cf. équation (3.36)). Pour rappel, le modèle complet ajoute de l'anisotropie à la dispersion des particules de par l'ajout d'un terme de dérive non nul dans la direction verticale (voir le chapitre 3 pour plus de détails). Les résultats de la première simulation, avec le SLM standard, peuvent être retrouvés dans Bahlali et al. (2018b), article reproduit en Annexe B de ce manuscrit. Le présent chapitre expose les résultats de la seconde simulation, avec le modèle dit "complet", et les compare aux résultats du modèle "standard". Nous discuterons des différences observées entre les résultats de ces deux modèles.

6.2.3 Résultats

6.2.3.1 Champs fluides

La Figure 6.4 présente les champs de vitesse et d'énergie cinétique turbulente, à $z = 3$ m. On observe la forte inhomogénéité du champ de vitesse, avec notamment une décélération prononcée du vent au niveau de la forêt. On observe également des valeurs d'énergie cinétique turbulente plus faibles au niveau de la forêt et du lac.

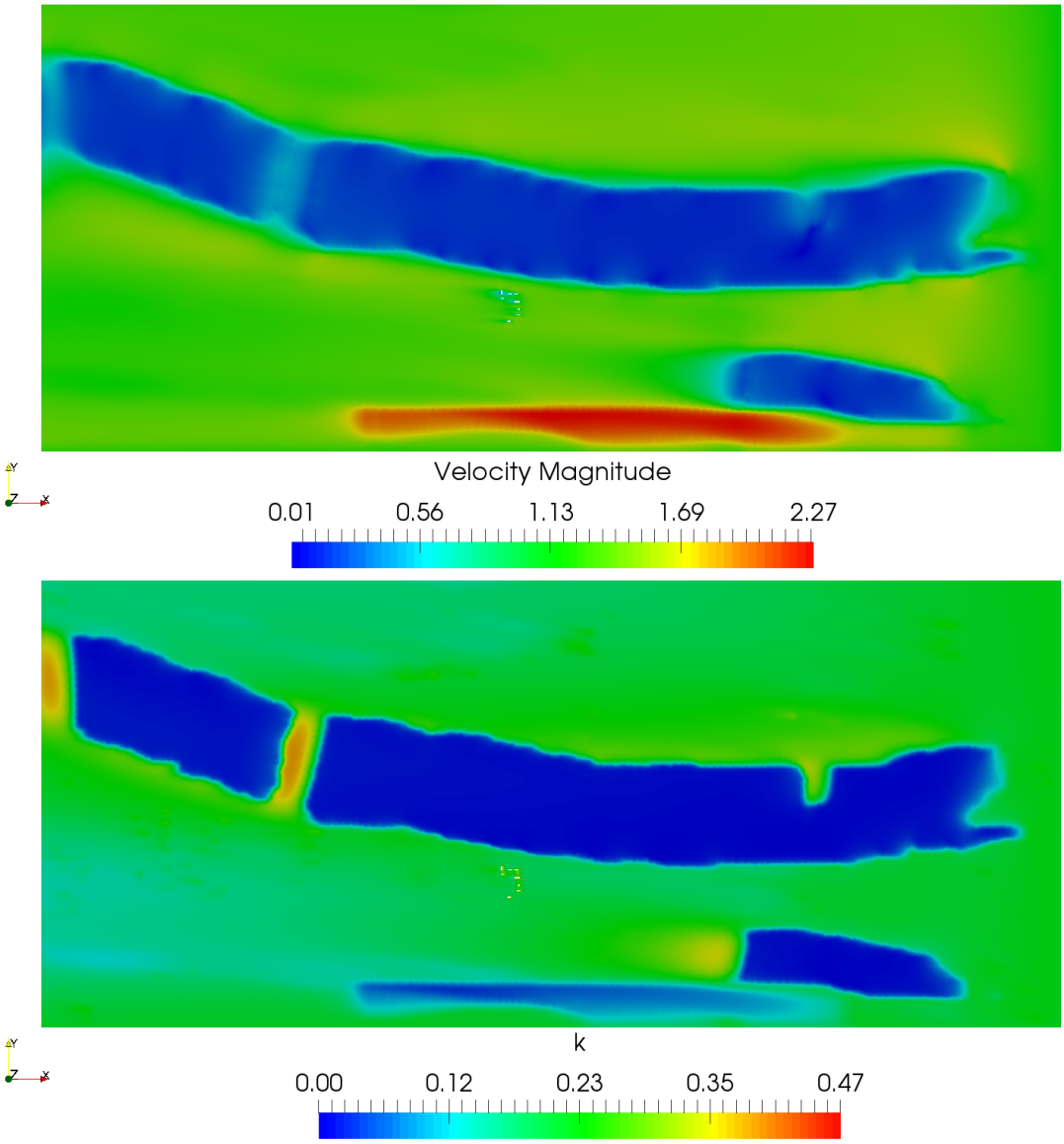


FIGURE 6.4 – Coupes horizontales à $z = 3$ m des champs fluides moyens pour la POI n°11. De haut en bas : norme de la vitesse (m/s), énergie cinétique turbulente (m^2/s^2).

Pour la suite de notre discussion, nous notons dd la valeur de la direction du vent, en degrés, calculée grâce aux valeurs des vitesses horizontales comme suit :

$$dd = arctan(\frac{-U_{f,x}}{-U_{f,y}}) \ . \tag{6.4}$$

Nous définissons également la norme de la vitesse horizontale ff comme suit :

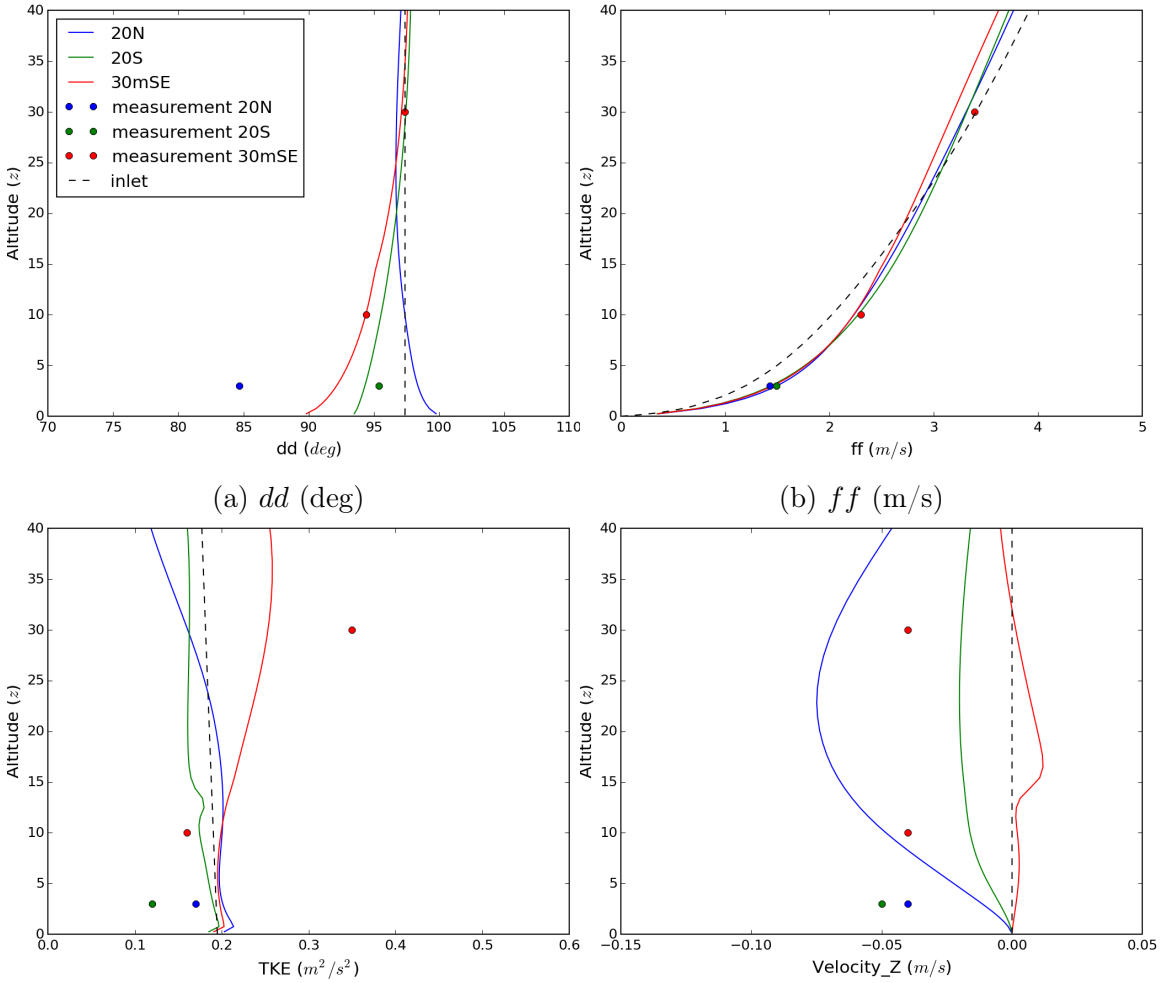
$$ff = \sqrt{U_{f,x}^2 + U_{f,y}^2} \ . \tag{6.5}$$

La Figure 6.5 compare les résultats de simulation du champ fluide avec les mesures obtenues de la POI n°11 au niveau des anémomètres 20S, 20N et 10mSE. Dans cette POI, si nous regardons les profils de dd, nous observons qu'il y a très peu d'effet de rotation du vent, contrairement à d'autres POI étudiées dans le cadre des travaux de Wei (2016). Ceci explique que nous observons un meilleur accord entre résultats de simulation et mesures de direction et amplitude de vitesse pour la POI n°11 que pour les autres POI étudiées par Wei (2016); Wei et al. (2016), pour lesquelles le vent est de direction nord-est. Comme mentionné dans ces travaux, l'effet de rotation (dû à la forêt) est correctement reproduit pour les anémomètres 20S et 10mSE, mais pas pour l'anémomètre 20N. Cela pourrait être dû au fait qu'il existe une incertitude de position d'environ 5 m dans l'extraction de la géométrie de la forêt depuis les cartes satellite et d'occupation des sols de l'IGN. Wei et al. (2016) précise que les valeurs de rotation du vent et d'énergie cinétique turbulente simulées sont justement très sensibles à la géométrie de la forêt, et une différence de 5 m peut potentiellement changer les résultats de façon non négligeable.

Les différences entre les simulations et les mesures d'énergie cinétique turbulente pourraient, elles, être dues en partie au fait que les profils dynamiques imposés en entrée de nos simulations s'appuient sur des profils théoriques et des mesures à l'intérieur du domaine de simulation, et non sur des mesures à la localisation précise de l'entrée. En effet, même à 30 m, les mesures à l'intérieur du domaine peuvent être affectées par la présence des obstacles, notamment de la forêt. Pour pallier ce problème, une perspective de recherche à ce sujet pourrait être l'assimilation de données des mesures sur le site.

6.2.3.2 Dispersion des polluants

La Figure 6.6 donne une idée générale de la répartition des particules dans le domaine, avec un zoom sur l'injection des particules au niveau de la source près des shelters.



(a) dd (deg)

(b) ff (m/s)

(c) Energie cinétique turbulente (m^2/s^2)

(d) Vitesse verticale $U_{f,z}$ (m/s)

FIGURE 6.5 – Profils verticaux des champs dynamiques à différentes localisations dans le domaine pour la POI n°11 : comparaison entre résultats de simulation, valeurs mesurées et profils imposés en entrée.

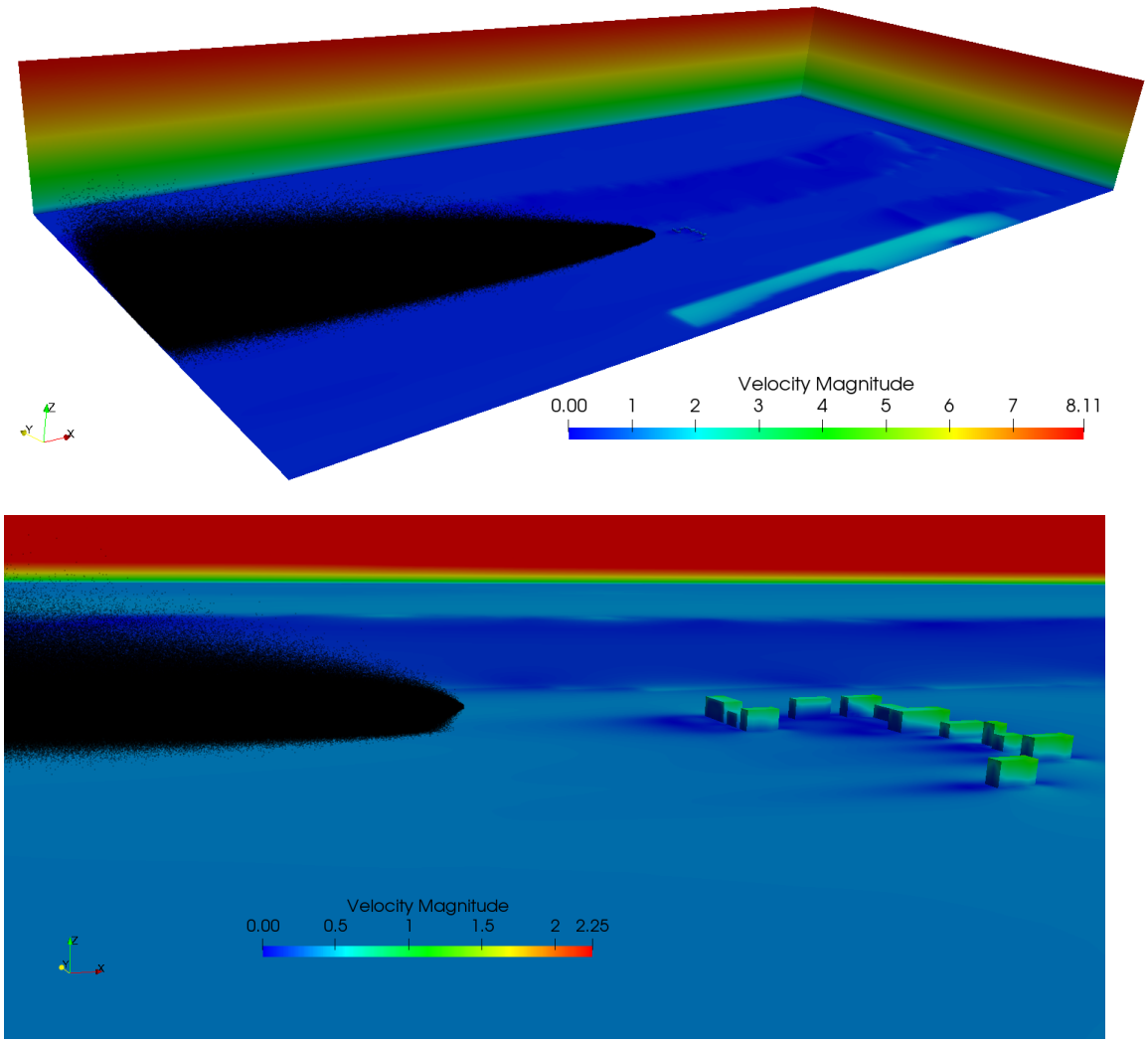


FIGURE 6.6 – Vue globale du domaine de simulation et de la répartition des particules (figure du haut), avec un zoom près de la zone de rejet (figure du bas), pour la POI n°11. Champs colorés : vitesse au sol et sur la surface des bâtiments. Les zones boisées ont des vitesses plus faibles dues au modèle de porosité.

La Figure 6.7 montre une coupe horizontale à $z = 3$ m des champs de concentration calculé par approche eulérienne et lagrangienne. Pour rappel, la fermeture turbulente des fluctuations de vitesse et de concentration utilisée en approche eulérienne est une fermeture du premier ordre (modèle SGDH, cf. chapitre 4). On observe une tendance du modèle lagrangien à diffuser plus fortement près de la source que le modèle eulérien à diffusivité turbulente. Cela est confirmé en Figure 6.9, où nous avons tracé l'évolution des concentrations (normalisées, ou non, par leurs valeurs maximales) selon l'axe du panache. Un aperçu de l'axe du panache dans le domaine est donné en Figure 6.8.

Un premier point important à noter à propos de la Figure 6.9a est la concentration maximale atteinte par les deux modèles (*i.e.*, la concentration à la source). Nous observons que celle-ci est bien plus importante en approche lagrangienne qu'en approche eulérienne. Cela est dû à l'échelle de discrétisation du domaine. Comme nous avons pu le voir en chapitre 4, l'échelle de discrétisation peut être de grande importance lorsqu'il s'agit de capturer les bons gradients de concentration près de la source. La taille de la cellule d'injection étant assez grossière (1 m $\times$ 1 m $\times$ 0.5 m, soit un volume de 0.5 m^3), les gradients de concentration avec les cellules latérales sont grands. Comme les modèles eulériens de type SGDH prédisent des fluctuations de concentration proportionnelles à ces gradients de concentration, alors il en découle que nous obtiendrons une diffusion très importante au niveau de la cellule d'injection. D'où une valeur de concentration bien plus faible que celle fournie par le modèle lagrangien, ne souffrant pas de cette limitation.

Intéressons-nous à présent à la Figure 6.9b, qui présente l'évolution des concentrations eulérienne et lagrangienne normalisées par leurs valeurs maximales. Cette figure permet de se rendre compte que la zone appelée "champ proche" est ici réduite : nous observons qu'au bout d'environ 10 à 15 m, les modèles eulériens et lagrangiens tendent à prédire la même diffusion. En fait, lorsque l'on parle de champ "proche" et "lointain", il s'agit toujours d'une comparaison par rapport à la valeur de T_L. Pour une analyse plus précise, dans le cas de la POI n°11, en cellule d'injection, la vitesse du fluide est environ 1.4 m/s et $T_L = \frac{1}{\frac{1}{2}+\frac{3}{4}C_0}\frac{k}{\epsilon} = 8.8$ s. Ainsi, la région "champ proche" correspond à des distances inférieures à environ $1.4 \times 8.8 \approx 12$ m. Il s'agit bien de ce que nous observons qualitativement en Figure 6.9.

Exactement comme dans le cas analytique présenté en chapitre 4, nous pouvons voir en Figure 6.9 la capacité du modèle lagrangien à reproduire la différence de comportement entre champ proche et lointain. En champ proche, c'est-à-dire pour des distances inférieures à 12 m, le modèle lagrangien présente une diffusion rapide, qui tend à diminuer d'intensité pour des plus grandes distances. Nous pouvons également observer la tendance des courbes lagrangienne et eulérienne à devenir parallèles à partir de cette

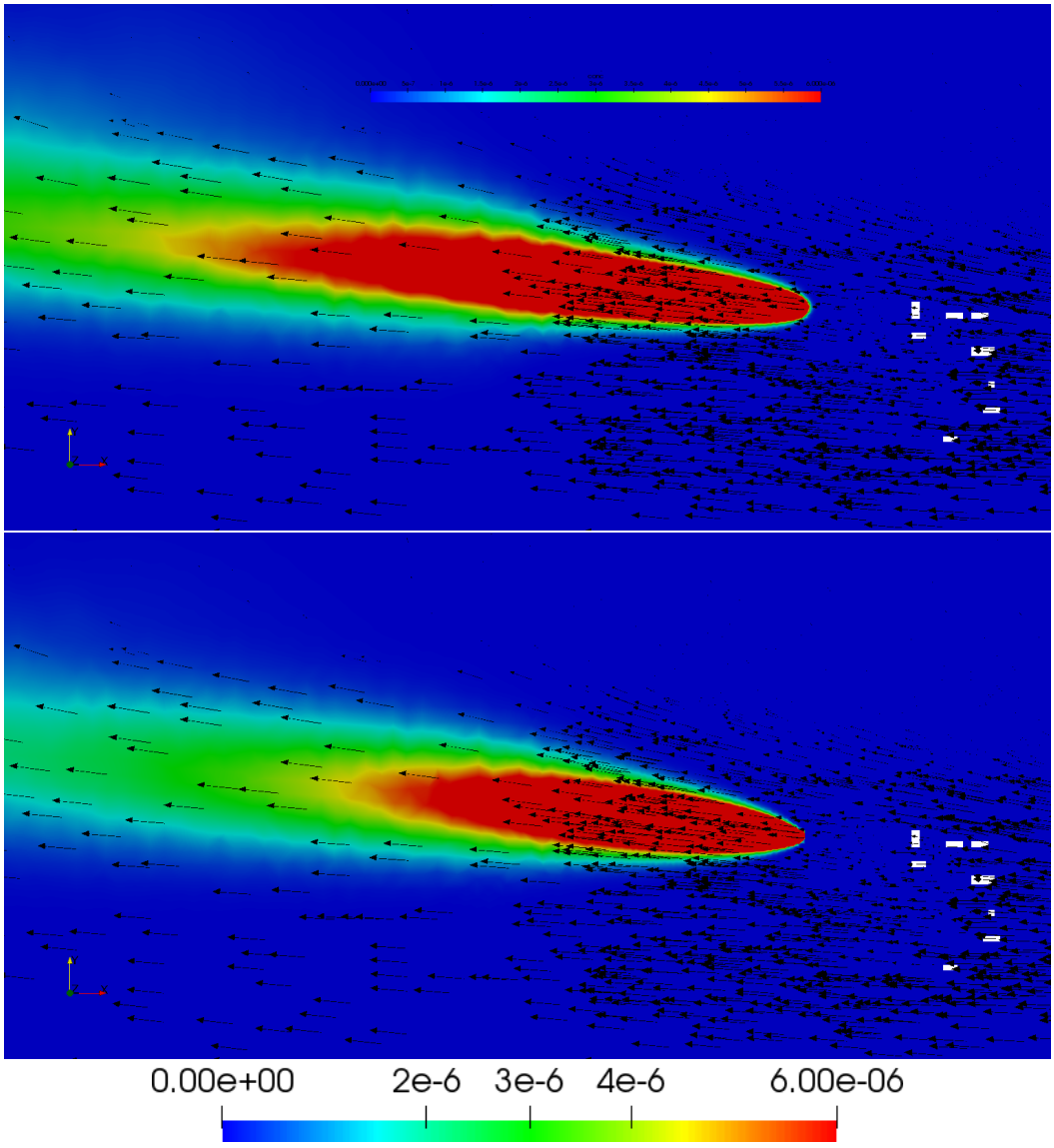


FIGURE 6.7 – Coupe horizontale à $z = 3$ m des champs de concentration (kg/kg) calculés par approche eulérienne (figure du haut) et lagrangienne (figure du bas), pour la POI n°11. Les flèches noires représentent le champ de vitesse fluide.

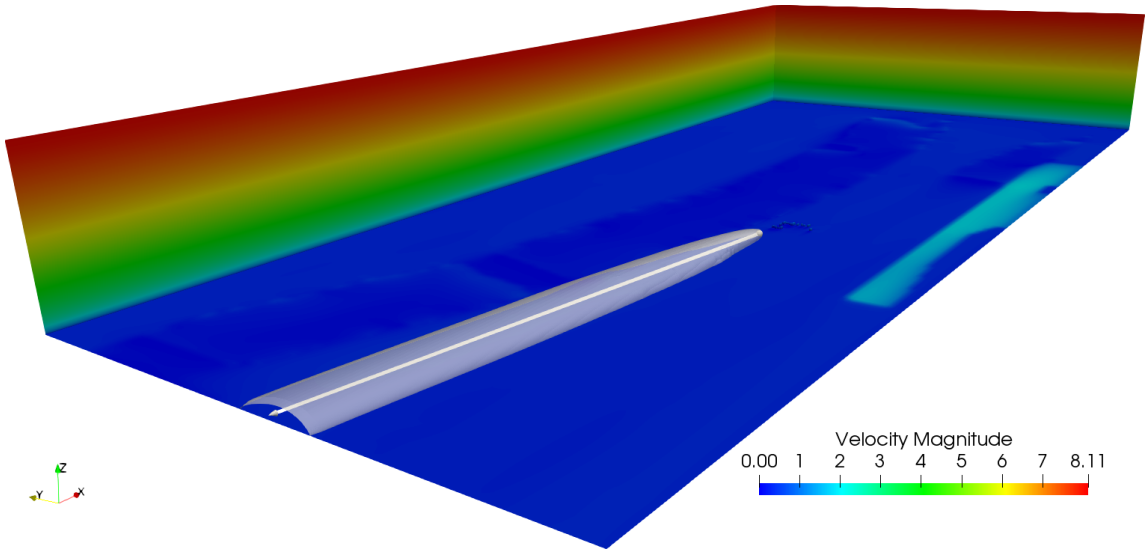
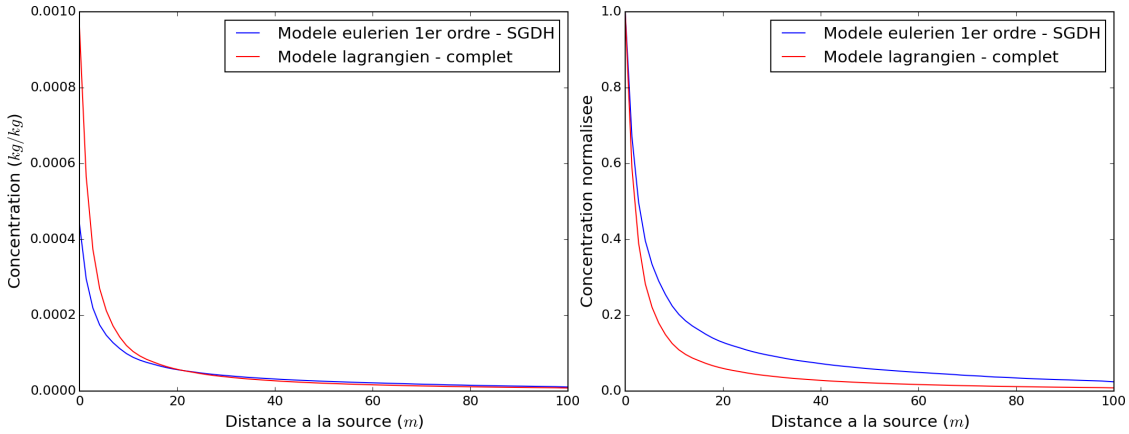


FIGURE 6.8 – Localisation de l'axe du panache dans le domaine pour les profils de concentration tracés dans la Figure 6.9.



(a) Concentration non normalisée (kg/kg) (b) Concentration normalisée

FIGURE 6.9 – Evolution des concentrations selon l'axe du panache, normalisées (b) ou non (a) par leurs valeurs maximales, pour la POI n°11.

distance. Une nouvelle fois, il doit être gardé à l'esprit que ces résultats sont dus au fait que les modèles eulérien et lagrangien utilisés ici ne sont pas au même ordre de fermeture. Le modèle eulérien utilise une fermeture à diffusivité turbulente, alors que le modèle lagrangien (SLM) est par construction du second ordre. Un modèle eulérien du second ordre (DFM, cf. chapitre 4) devrait fournir des résultats semblables à ceux du modèle lagrangien, si nous mettons de côté les potentielles erreurs dues au fait que les corrélations triples sont modélisées en approche eulérienne alors qu'elles ne le sont pas dans l'approche lagrangienne.

Une conclusion naturelle de cette simulation est que si nous nous intéressons au champ lointain (c'est-à-dire à des distances supérieures à 10-15 m dans notre cas), réaliser un calcul lagrangien n'apportera pas beaucoup plus de précision qu'un modèle eulérien du premier ordre, puisque dans cette zone ces deux modèles sont censés prédire la même évolution de diffusion (cf. chapitre 3). D'une manière générale, dès lors que la source se situera dans une zone où l'échelle de temps lagrangienne intégrale est petite, alors le champ lointain sera très vite atteint et les modèles eulérien à diffusivité turbulente et lagrangien de type Langevin prédiront la même diffusion. Ce point a d'ailleurs déjà été noté et expliqué auparavant dans la littérature ; nous référons le lecteur notamment à la référence Wilson et Yee (2007).

En Figure 6.11, nous avons comparé les résultats de concentration avec les mesures sur les cinq PID à hauteur de 3 m, pour les modèles "standard" et "complet". Quel que soit le modèle lagrangien utilisé, nous observons des résultats relativement proches des mesures. La prédiction de concentration du modèle lagrangien est plus faible que celle du modèle eulérien, et cette différence s'accentue lorsque le modèle standard est utilisé. En conséquence, la masse étant conservée, cela signifie que la diffusion verticale est moindre avec le modèle complet qu'avec le modèle standard. Cela est confirmé lorsque nous observons la Figure 6.12 qui présente une comparaison entre concentrations simulées et mesurées au niveau du profil vertical correspondant à l'alignement PID 3-6. La position de ce profil dans le domaine peut être observée en Figure 6.10. Nous observons effectivement une plus forte diffusion verticale lorsque le modèle standard est utilisé, en moindre accord avec les mesures.

6.2.4 Sensibilité au nombre de particules

Dans un contexte opérationnel, la dispersion atmosphérique par approche lagrangienne soulève le point sensible du temps de calcul, et donc, du nombre de particules simulées. Il est difficile de trouver des références dans la littérature expliquant comment concrètement procéder afin de fixer d'avance le nombre de particules à injecter, de sorte à combiner à la fois précision et temps de calcul réduit. Vendel (2011) explique

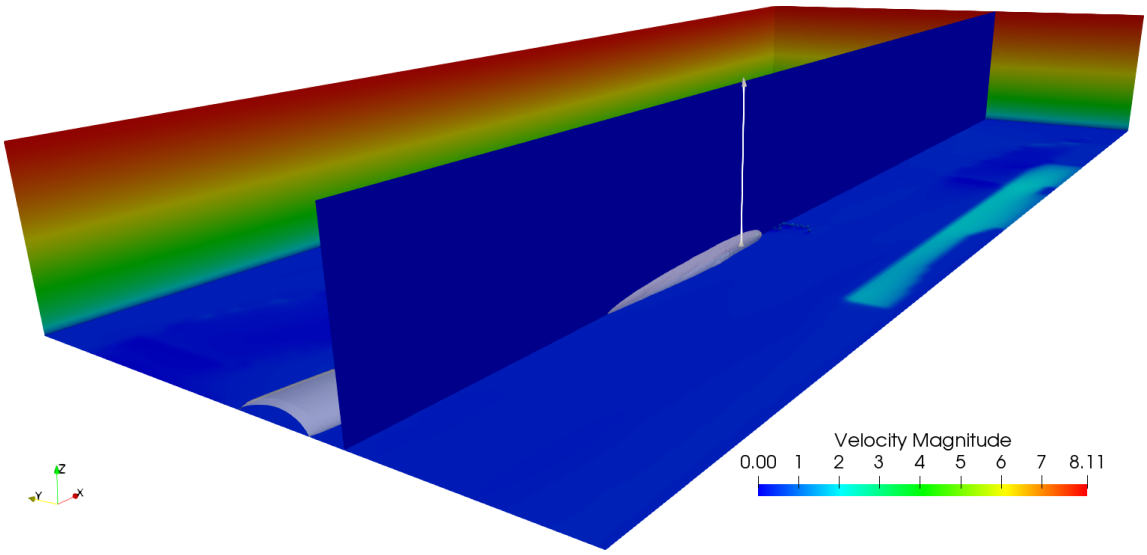


FIGURE 6.10 – Position du profil vertical tracé en Figure 6.12 dans le domaine.

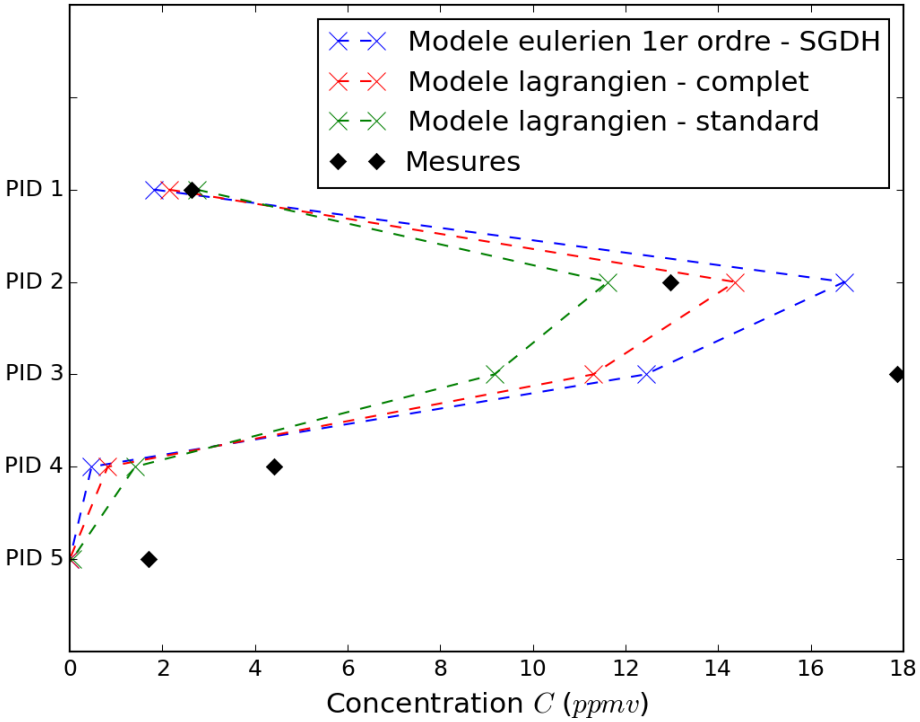


FIGURE 6.11 – Comparaison des concentrations moyennes ($ppmv$) entre simulations et mesures, pour la POI n°11. Le modèle eulérien est en bleu, les modèles lagrangien standard et complet sont respectivement en vert et en rouge.

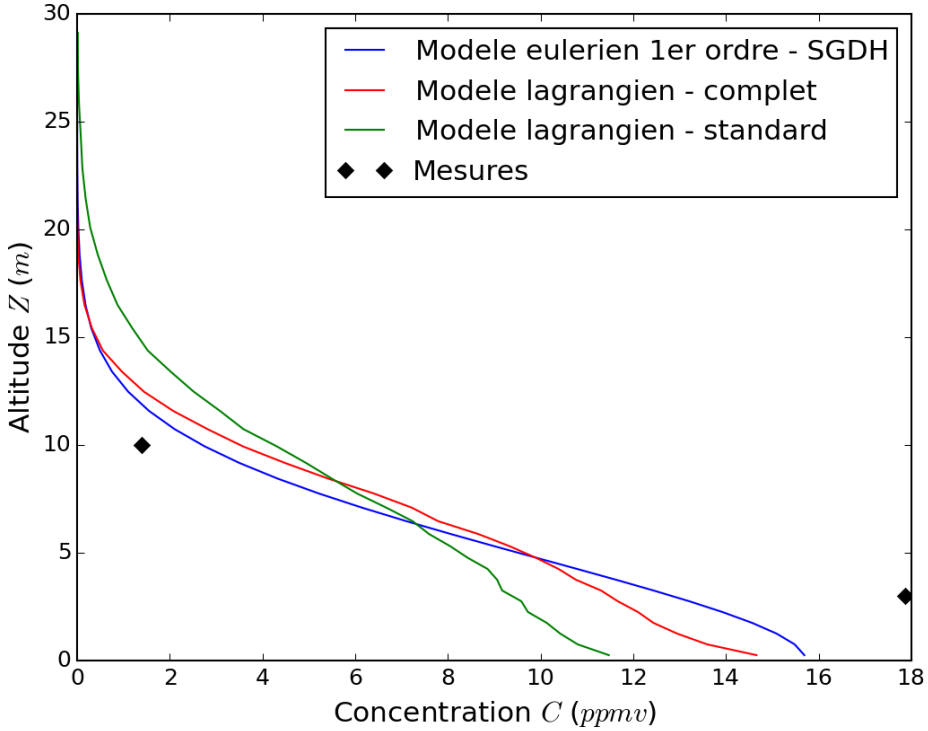


FIGURE 6.12 – Comparaison des profils verticaux de concentration ($ppmv$) entre simulations et mesures, pour la POI n°11. Le modèle eulérien est en bleu, les modèles lagrangien standard et complet sont respectivement en vert et en rouge. Les deux points de mesure correspondent aux PID 3 et 6.

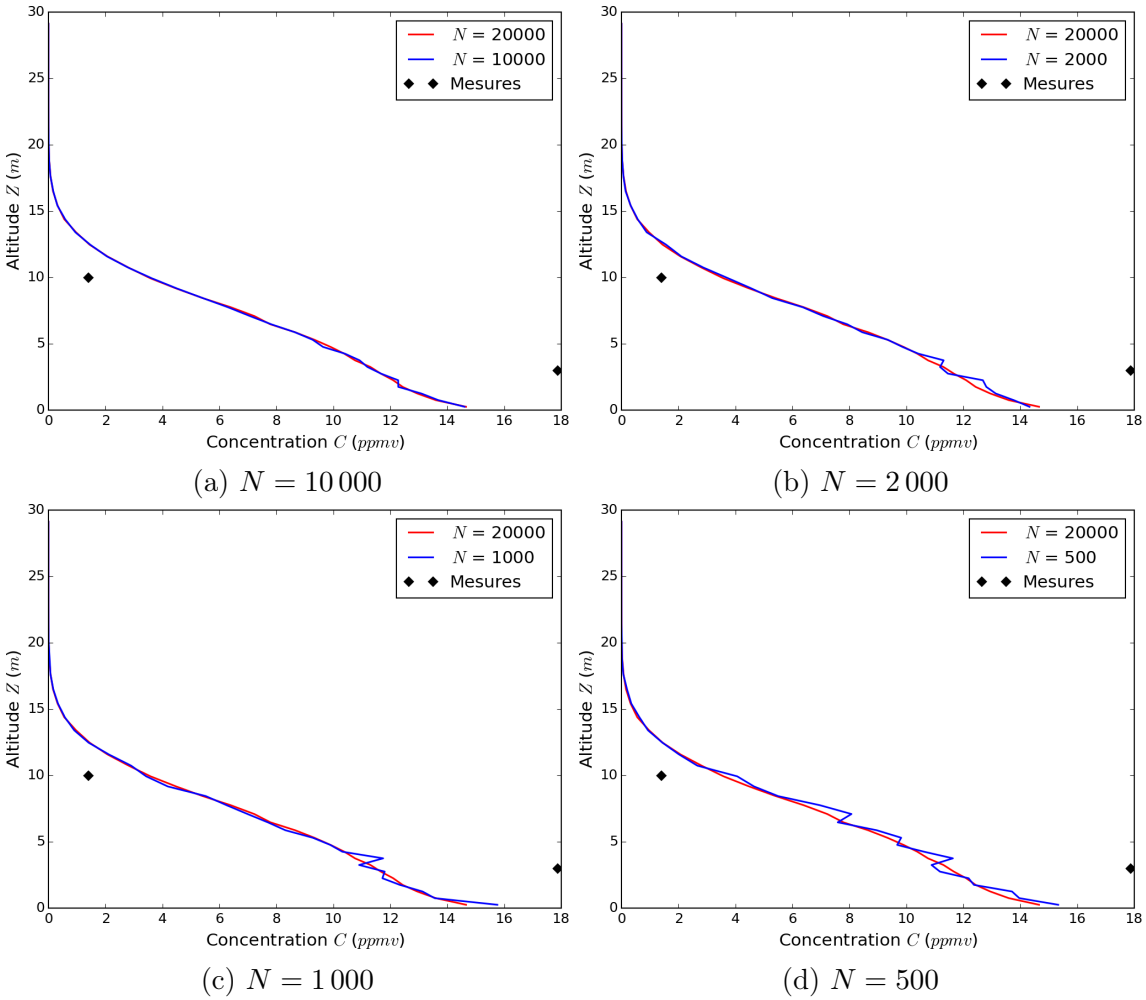
N	20 000	10 000	2 000	1 000	500
N_{total}	6 758 146	3 379 503	675 793	337 931	168 926

TABLE 6.3 – Résumé des simulations réalisées et des nombres de particules correspondants. N est le nombre de particules injectées par seconde, et N_{total} est le nombre de particules dans le domaine en fin de calcul.

que dans le cadre de ses travaux, il a d'abord préféré assurer une bonne précision en injectant en premier lieu un grand nombre de particules, puis il a observé l'effet de la diminution de leur nombre à la fois sur le temps de calcul et sur l'exploitabilité des résultats. C'est également l'approche que nous avons suivie ici.

Dans ce paragraphe, nous montrons les résultats de notre étude de sensibilité au nombre de particules. Pour rappel, dans les résultats présentés dans la section précédente, nous avions injecté $N = 20\,000$ particules par seconde. Ici, nous avons réalisé quatre simulations supplémentaires, respectivement avec des injections de 10 000, 2 000, 1 000 et 500 particules par seconde. Les nombres totaux de particules dans l'ensemble du domaine pour chacun de ces cas sont résumés en Table 6.3.

Dans la Figure 6.13, nous présentons les profils verticaux obtenus pour l'ensemble



(a) $N = 10\,000$ (b) $N = 2\,000$

(c) $N = 1\,000$ (d) $N = 500$

FIGURE 6.13 – Comparaison des résultats de concentration ($ppmv$) pour le profil vertical aligné sur l'axe PIDs 3-6 de la Figure 6.10, en fonction du nombre de particules injectées par seconde N.

de ces nouvelles simulations sur la ligne correspondant aux PIDs 3-6 (cf. Figure 6.10 pour rappel de la position du profil). Dans chacune des sous-figures de la Figure 6.13, nous avons reproduit le profil de la Figure 6.12 correspondant au résultat initialement obtenu avec $N = 20\,000$ particules injectées par seconde, afin de pouvoir s'y comparer. Nous observons que plus nous réduisons le nombre de particules N, plus le bruit est prononcé, en particulier près du sol. Ceci est cohérent car près du sol, le maillage est raffiné donc le nombre de particules par maille est réduit, ce qui engendre une plus grande variabilité entre les cellules. Dans cette étude, le bruit commence à devenir notable à partir du cas $N = 1\,000$ particules, et à partir de $N = 500$ particules, les résultats sont plus difficilement exploitables.

A propos des valeurs de concentration sur l'arc de cercle à $z = 3$ m des PIDs 1-2-3-4-5 (cf. Figure 6.11 pour la simulation initiale à $N = 20\,000$ particules), nous avons observé que le fait de réduire le nombre de particules ne modifiait que très peu les

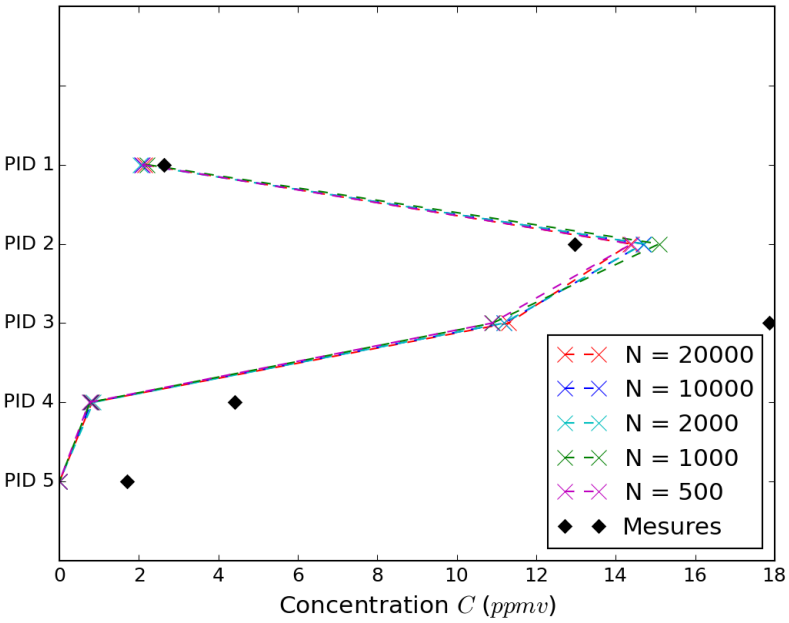


FIGURE 6.14 – Comparaison des concentrations moyennes ($ppmv$) entre simulations et mesures, pour différents nombres de particules injectées par seconde N.

résultats. Ceci est illustré en Figure 6.14.

Enfin, intéressons-nous aux temps de calcul CPU (*Central Processing Unit*) impliqués par chacune de ces simulations. En Figure 6.15, nous avons tracé le graphe de la fonction reliant temps de calcul CPU et nombre de particules simulées. Le temps CPU semble tendre vers une certaine asymptote lorsque le nombre de particules injectées tend vers 0. Ainsi, diminuer encore le nombre de particules lorsqu'il est déjà suffisamment réduit n'apporte pas beaucoup plus d'intérêt en termes de temps de calcul. Compte tenu de nos observations liées à la précision des simulations sur le profil vertical (cf. Figure 6.13), nous pouvons conclure que $N = 2\,000$ serait un bon choix pour une application opérationnelle : cette configuration permet de réduire le temps CPU d'un facteur 3 par rapport à $N = 20\,000$ et ne présente pas de fluctuations trop importantes près du sol.

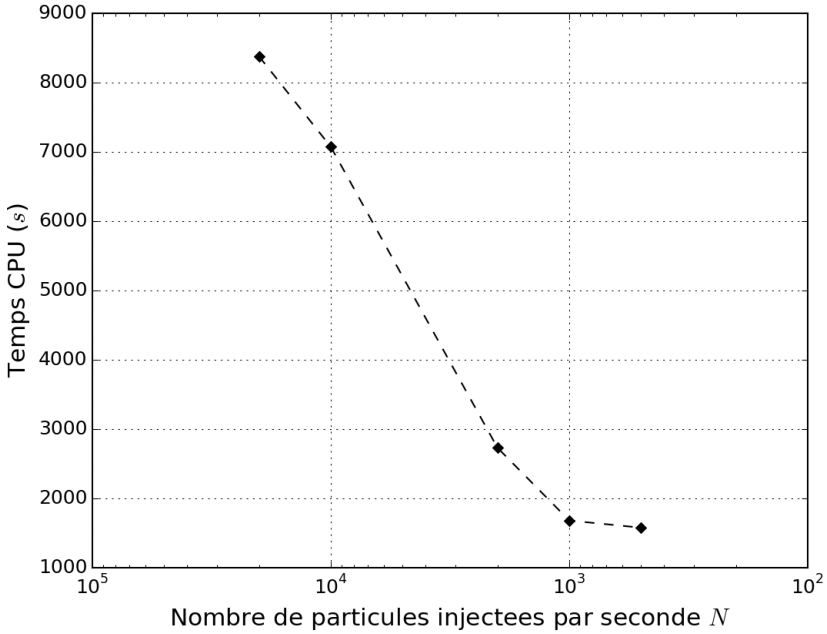


FIGURE 6.15 – Temps CPU (s) en fonction du nombre de particules injectées par seconde N, pour la POI n°11.

6.3 Conclusions et perspectives

Ce travail a permis de mettre en avant la validation du modèle lagrangien SLM en conditions réelles, et sous une stratification stable de l'atmosphère. L'expérience considérée, la POI n°11 du site du SIRTA, avait déjà été en partie étudiée avec *Code_Saturne* par WEI (2016), en utilisant un modèle eulérien $k-\epsilon$. Nous nous sommes proposés de compléter cette étude avec les résultats lagrangiens issus du SLM, en utilisant le même modèle de turbulence $k-\epsilon$ pour la phase fluide.

Nous avons pu montrer, au travers de cette étude, que le régime dit de "champ lointain" est très vite atteint, du fait de la faible valeur de l'échelle de temps intégrale lagrangienne T_L (environ 8.8 s au niveau de la cellule d'injection, ce qui, compte tenu de la valeur de la vitesse du fluide de 1.4 m/s dans cette même cellule, équivaut à une distance d'environ 12 m). Or, en champ lointain, nous savons que les modèles lagrangien de type Langevin et eulérien à fermeture turbulente de type diffusivité turbulente fournissent la même évolution de diffusion (cf. chapitre 3). Il est donc cohérent que nous obtenions des écarts entre les deux modèles de plus en plus faibles au fur et à mesure que nous nous éloignons de la source.

Dans cette étude, nous avons également pu mettre en avant la différence entre modèles SLM dits "standard" et "complet". Pour rappel, le modèle complet augmente l'anisotropie de la dispersion des particules via l'ajout d'un terme de dérive non nul dans

la direction verticale : le terme $(\langle U_{p,j}\rangle - \langle U_{f,j}\rangle)\partial\langle U_{f,i}\rangle/\partial x_j dt$. Il a été observé que l'ajout de ce terme a eu pour effet de réduire la diffusion verticale, et a notablement amélioré l'accord résultats/mesures en ce sens (cf. profil vertical présenté en Figure 6.12).

En perspectives de ce travail, il serait intéressant de réaliser la même étude en utilisant le modèle de turbulence du second ordre $R_{ij} - \epsilon$. D'une part, car il s'agit du modèle théoriquement consistant avec le SLM. Et d'autre part, en considérant simplement l'approche eulérienne et en dehors de toute considération lagrangienne, l'usage d'un modèle $R_{ij} - \epsilon$ permettrait de mieux prendre en compte l'anisotropie de la turbulence dans les simulations. Pour cela, il faudrait revoir les termes sources présentés en équations (6.1) et (6.2a) et les adapter à l'utilisation d'un modèle $R_{ij} - \epsilon$.

Une autre piste de travail serait la possibilité de comparer les variances de concentration, comme cela a été fait par Wei (2016). En approche lagrangienne, nous pourrions obtenir une estimation des variances de concentration en s'appuyant par exemple sur des modèles dits de micro-mélange, présentés en chapitre 3, paragraphe 3.1.3.6.

Chapitre 7

Article : Dispersion atmosphérique via une approche lagrangienne stochastique : application à une zone urbaine idéalisée sous des conditions météorologiques neutre et stable

Cet article a été soumis à *International Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. Nous y proposons de valider le modèle lagrangien stochastique SLM sur une campagne expérimentale impliquant des obstacles : la campagne MUST (*Mock Urban Setting Test*), conduite dans le désert de l'Utah aux Etats-Unis en 2001. Dans un premier temps, nous décrivons la campagne expérimentale, puis nous exposons les résultats des simulations réalisées. Nous comparons le modèle lagrangien étudié aux méthodes eulériennes ainsi qu'aux mesures de l'expérience. Un point important soulevé dans cet article est qu'il s'agit de garder à l'esprit les différences théoriques impliquées par les différents modèles eulérien et lagrangien (notamment au niveau de l'ordre de fermeture turbulente) afin d'être à même de mener des analyses critiques des résultats de simulations.

Sommaire

7.1 Article **161**

7.2 Complément **191**

7.1 Article

Atmospheric dispersion using a Lagrangian stochastic approach: application to an idealized urban area under neutral and stable meteorological conditions

Meïssam L. Bahlali[a], Eric Dupont[a], Bertrand Carissimo[a]

[a] *CEREA, Joint laboratory Ecole des Ponts ParisTech/EDF R&D, 6 quai Watier, 78401 Chatou Cedex, France*

Abstract

We present an adaptation of the Lagrangian dispersion module of the computational fluid dynamics (CFD) open source code *Code_Saturne* (`http://code-saturne.org/`) to simulate atmospheric dispersion of pollutants in complex urban geometries or around industrial plants. The wind is modeled within the same code with an Eulerian RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes equations) approach and thus involves the solution for the ensemble-mean velocity field and turbulent moments, using first-order $k-\epsilon$ or second-order $R_{ij}-\epsilon$ turbulence closures adapted to the atmosphere and complex geometries.

The Lagrangian stochastic model used for the dispersion of the particles within this flow field is the simplified Langevin model of Pope (2000), an approach referred to as PDF (Probability Density Function) method. This formulation of model has not been widely used in atmospheric applications, despite interesting theoretical and computational benefits. Therefore, its usage must be validated on different atmospheric cases. In this paper, we present the validation of the model with a field experiment, considering atmospheric stratification and buildings: the MUST (Mock Urban Setting Test) campaign, conducted in Utah's desert, USA.

Keywords: Atmospheric dispersion, Lagrangian models, Eulerian models, Wind flow modeling, MUST experiment

1. Introduction

An atmospheric dispersion model is a tool that can be used to simulate the atmospheric phenomena involved in the turbulent pollutant dispersion process. The differences between the many existing models to date are mainly in terms of the number of atmospheric processes considered, their degree of complexity, their field of application and, in particular, the methods used to solve the equations governing them. We can distinguish mainly three types of models:

Email address: `meissambahlali@gmail.com` (Meïssam L. Bahlali)

- Gaussian models, based on the analytical resolution of the so-called advection-diffusion equation (on a scalar corresponding to the concentration of pollutant) coupled with semi-empirical parameterizations of the main physical phenomena;
- Eulerian models, based on the resolution of the discretized advection-diffusion equation in time and space on a mesh;
- Lagrangian models, based on the computation of particle trajectories.

Eulerian models, when used through Computational Fluid Dynamics (CFD) methods, rely on the resolution of the advection-diffusion equation of a scalar on a mesh. This equation implies the knowledge of the velocity and turbulent fields. Therefore, the first step is the resolution of the Eulerian Navier-Stokes momentum equation, in order to compute the flow in which the dispersion will then take place. Generally, the resolution of the Navier-Stokes momentum and scalar transport equations are carried out within the same model. This therefore supposes to have a model that provides a solution for the dynamical fields of good enough quality, since it would strongly influence the solution obtained for the concentration field calculated through the advection-diffusion equation. In particular, this highlights the crucial importance of a correct modeling of flow turbulence.

On the other hand, Lagrangian models consist of calculating and following the trajectories of particles in a turbulent flow. Thus, the frame of reference is not fixed but follows the cloud described by a large number of particles emitted into the atmosphere. For each of these particles, a stochastic differential equation of a Langevin type is written on their velocity. By integrating over time, we are thus able to get the position of each and then deduce the concentration field over the computational domain. The main strength of Lagrangian models is that they treat convection without any approximation. In particular, they can treat without approximation local source terms when they are provided as known expressions of the variables associated with the particles, such as chemical source terms (Minier, 2015). Also, Lagrangian models are grid-free, which makes them accurate to capture the different turbulent structures in a statistical sense and avoid numerical diffusion problems that can be encountered within Eulerian models – especially near the source. However, one must keep in mind that they usually still depend on a grid in two ways:

- the stochastic differential equation that governs the velocity evolution of the particles usually involves fluid mean quantities that are provided by a grid-based meteorological pre-processor or a CFD calculation;
- the concept of 'concentration' is by definition mesh-based.

Both CFD Eulerian and Lagrangian models are well-suited for atmospheric dispersion studies in urban neighborhoods or around industrial plants, in the sense that they are capable to capture the complex interactions between the air flow and the buildings for different meteorological conditions. However, these two types of models have often been compared ignoring the level of turbulence closure used for each. Loosely speaking, a

common belief is that 'Eulerian models do not work well near the source'. In reality, the correct affirmation would be: 'Eulerian first-order models, based on a gradient-diffusion hypothesis, do not work well near the source', since this region corresponds to the short-time limit where the fully diffusive regime has not been reached yet (Taylor, 1921). In fact, in the atmospheric dispersion field, when we refer to Lagrangian models, it is usually to models simulating the particle **velocities** as stochastic diffusion processes, which by construction makes them second-order. On the other hand, a Lagrangian model simulating the **positions** as stochastic diffusion processes is first-order and would thus be equivalent to an Eulerian model using a gradient-diffusion hypothesis. More details can be found on that subject in Minier (2016). To sum up, the Eulerian/Lagrangian comparisons should not be about the approaches in themselves but rather about the level of closure that is considered. Throughout this paper, we will be coming back on this point of significant importance when it comes to rigorously comparing the accuracy of the results given by both approaches.

In the past few years, the constantly increasing computing power has enabled (and above all made easier) the use of Lagrangian stochastic methods for atmospheric purposes – see for example Franzese (2003), Stohl et al. (2005), Cassiani et al. (2005a,b), Bernardin et al. (2009), Alessandrini and Ferrero (2009), Tinarelli et al. (2013), etc. For our work, a simulation tool using a Lagrangian PDF (Probability Density Function) to carry out pollutant dispersion studies has been developed in the three-dimensional CFD code *Code_Saturne* (`http://code-saturne.org/`, see Archambeau et al. (2004) for more details). It has been validated on simple academic cases and showed to satisfactorily respect the well-mixed condition (see Bahlali et al. (2018a,b)). This paper is concerned with validating the model in real conditions by studying continuous point source dispersion of a non-reactive pollutant in an idealized urban area, as such a case is typical of an industrial or accidental release.

The present work will focus on the Mock Urban Setting Test (MUST) campaign, which has been widely studied in the literature. For previous numerical simulations of the experiment, the reader may for example refer to Hanna et al. (2004), Camelli et al. (2005), Donnelly et al. (2009), Antonioni et al. (2012), Kumar et al. (2015). Comparisons between different modeling systems have also been studied: Santiago et al. (2010) and Dejoan et al. (2010) compared large-eddy simulations (LES) to Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) computations, and Castelli et al. (2017) performed comparisons between different atmospheric Eulerian and Lagrangian modeling approaches. Experimental comparisons have been conducted as well: Leitl et al. (2007) worked on the Hamburg wind tunnel experiment, Yee et al. (2006) compared experimental wind-tunnel and water-channel simulations.

In the CFD code *Code_Saturne*, previous numerical simulations of the MUST campaign have also already been performed by Milliez and Carissimo (2007, 2008) and used an Eulerian first-order model of turbulent dispersion. The present work aims at studying the same cases using the Lagrangian stochastic model. The objective is twofold:

- first, we would like to assess the accuracy of the results provided by the Lagrangian model for this specific industrial application;
- second, we would like, in the same CFD simulations, to compare the Lagrangian results to the ones obtained with several Eulerian turbulence models, and above all explain the differences to provide a better understanding of the different modeling options.

A specificity of this work is that the wind is modeled *within the same code* as the dispersion, with an Eulerian RANS approach. It thus involves the solution for the ensemble-mean velocity field and turbulent moments, using first-order $k-\epsilon$ or second-order $R_{ij}-\epsilon$ turbulence closures adapted to the atmosphere and complex geometries. Note that Milliez and Carissimo (2007, 2008) only simulated the wind dynamical mean fields using a $k-\epsilon$ model. Therefore, in addition to the Lagrangian results, this paper will also expose new results on the Eulerian approach through the use of the second-order $R_{ij}-\epsilon$ model for the wind mean quantities.

This paper will be organized as follows. First, we will introduce both the Eulerian and Lagrangian model equations used in this work. Second, we will expose the experiment characteristics and the two cases we have chosen to study. Finally, we will show results for both these cases and the different modeling approaches will be discussed.

2. Model equations

The methodology for atmospheric dispersion calculations in *Code_Saturne* consists in two simulations:

- the first simulation solves the mean Navier-Stokes equations for the flow field;
- the second simulation restarts from the previous frozen flow field (velocity, turbulence and temperature) and computes the dispersion.

Let us present the different modeling options in Eulerian and Lagrangian approaches.

2.1. The Eulerian approach

Eulerian models, as explained in the introduction, are based on the resolution of the mean advection-diffusion equation of a given Reynolds-averaged scalar $\langle c \rangle$ through its discretization in time and space on a mesh. This equation writes as follows:

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} - \langle U'_{f,j} c' \rangle \right) + \langle S \rangle + \langle R \rangle \ , \tag{1}$$

where $U_{f,j}$ is the fluid velocity along the j axis, D the molecular diffusivity, S and R respectively the source and reactive terms.

This equation involves the unknown term $\langle U'_{f,j} c' \rangle$. For practical applications, two main families of closures are considered:

- first-order models (or algebraic models), which directly provide a local expression for $\langle U'_{f,j}c'\rangle$;
- second-order models, which consist of a complete transport of the turbulent scalar fluxes $\langle U'_{f,j}c'\rangle$.

First-order models are widely used in the atmospheric dispersion literature, usually through the following simple gradient-diffusion hypothesis:

$$\langle U'_{f,j}c'\rangle = -D_t \frac{\partial\langle c\rangle}{\partial x_j} \ , \tag{2}$$

where $D_t = \nu_t/Sc_t$, Sc_t being the turbulent Schmidt number, usually comprised between 0.7 and 1 for air.

In this expression, $\nu_t = C_\mu k^2/\epsilon$ is the fluid turbulent viscosity, k being the turbulent kinetic energy (TKE) and ϵ the turbulent dissipation rate. An important point to recall here is that if a turbulent-viscosity model is used for the resolution of the mean dynamical fields, then obviously, closure of $\langle U'_{f,j}c'\rangle$ will be performed through a first-order model. On the other hand, one can use a second-order $R_{ij}-\epsilon$ model to compute the mean dynamical fields and still use a first-order model for the turbulent scalar fluxes closure (*i.e.*, here, the model of Eq. (2)). Our work will provide new elements on that topic, by comparing, using either a $k-\epsilon$ or a $R_{ij}-\epsilon$ model to compute the mean dynamical fields, the results obtained through a first-order model for the scalar dispersion. As for second-order scalar fluctuations models for meteorological applications, they are in fact still an open and difficult research problem, and the subject of further investigations.

2.2. The Lagrangian approach

Let $\mathbf{X}_p$ be the position of a particle included in the air flow and $\mathbf{U}_p$ its velocity. Both variables are driven by the following system:

$$dX_{p,i} = U_{p,i}(t)dt \ , \tag{3a}$$

$$dU_{p,i} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial\langle P\rangle}{\partial x_i}dt + (\langle U_{p,i}\rangle - \langle U_{f,i}\rangle)\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_i} - \frac{U_{p,i}-\langle U_{f,i}\rangle}{T_L}dt + \sqrt{C_0\epsilon}dW_i \ , \tag{3b}$$

where the dW_i are Wiener processes of zero mean and variance dt, and $T_L = \dfrac{1}{\frac{1}{2}+\frac{3}{4}C_0}\dfrac{k}{\epsilon}$ is the Lagrangian integral timescale.

The stochastic differential equation governing the evolution of $\mathbf{U}_p$ is a model inspired by the two-phase flow formulation of Minier and Peirano (2001) and the Simplified Langevin Model (SLM) of Pope (2000) – it actually stands between the two of them, the difference lying in the $(\langle U_{p,i}\rangle - \langle U_{f,i}\rangle)\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_i}$ term. This formulation makes sense since even though we are dealing with fluid particles (putting us in the single-phase flow situation), particles dispersing from a point source can be seen as a subset of the whole simulated flow.

Therefore, in each cell of the computational domain, their mean velocity has no reason to be equal to the fluid one, hence the non-null production term on the second term of the right-hand-side of Eq. (3b). In fact, for a better understanding, let us assume that the whole flow is represented by particles uniformly distributed in the domain and affect a scalar α to each of them:

$$\begin{cases} \alpha = 1 \text{ if the particle comes from the source;} \\ \alpha = 0 \text{ if it does not come from the source.} \end{cases}$$

Therefore, the condition that the mean particle velocity field needs to observe is: $\mathbf{div}(\alpha\langle\mathbf{U}_p\rangle) = \mathbf{0}$, which is a complete different condition than the one the fluid velocity field has to meet, *i.e.*, $\mathbf{div}(\langle\mathbf{U}_f\rangle) = \mathbf{0}$.

Loosely speaking, this formulation stands in a philosophical line that is close to the LRR-IP (Launder, Reece, Rodi - Isotropization of Production) model of Pope (2000), except that the production term here is related to the mean particle velocity instead of the instantaneous one. This production term actually makes significant physical sense, since it adds more anisotropy to the dispersion of the particles. Furthermore, if we study the limit case of particles modeling the whole flow (*i.e.*, the 'fluid limit'), then it yields $\langle U_{p,i}\rangle = \langle U_{f,i}\rangle$ and the SLM is retrieved. Precisely, Bahlali et al. (2018b) have shown that the SLM fully respects the well-mixed criterion (as defined in Thomson (1987)) and that it is completely consistent with a second-order $R_{ij} - \epsilon$ (Rotta) turbulence model for the fluid phase. Both these conditions are in fact essential for any Lagrangian stochastic model of a Langevin type to be regarded as acceptable (see Minier et al. (2014)). In conclusion, the model defined in Eq. (3), since it relaxes to the SLM for the fluid limit, is well-mixed and able to reproduce transport equations for the first two moments of the velocity field: it can thus reasonably be used to simulate point source dispersion in non-homogeneous flows such as the one we will study in this work. However, one must keep in mind that this model has been developed for neutral conditions. It is possible to use it also for buoyancy-driven flows, as we did in this work, but some improvements can be made for these cases and are the subject of further investigations (cf. conclusion).

It should be noted that this Lagrangian model alone does not take into account molecular diffusion. Indeed, if we add a scalar c to the state vector associated with each particle, then: $dc/dt = 0$ (we deal with conservative particles, with a constant concentration along their trajectories). In order to represent the molecular diffusion phenomenon, a so-called 'micro-mixing model' can be used (see, for example, Villermaux and Devillon (1972); Pope (2000); Sawford (2004); Luhar and Sawford (2005); Amicarelli et al. (2012); Cassiani et al. (2015)). This type of model is often used in the case of reactive pollutants, since in this context molecular diffusion plays an important role. In the case of high Reynolds numbers, molecular diffusion does not affect concentration mean (Pope, 1998), and is therefore generally neglected compared to turbulent diffusion.

3. The Mock Urban Setting Test experiment

3.1. Description of the site

The experimental program this paper focuses on is the Mock Urban Setting Test campaign, conducted in Utah's desert, USA, by the US Defense Threat Reduction Agency (DTRA). It consists of the release of a pollutant in an idealized urban environment represented by several rows of containers. The details of the experiment as well as the results are described in Biltoft (2001) and Yee and Biltoft (2004).

In this work, the objective is to reproduce some of the simulations that have already been performed in the past by Milliez and Carissimo (2007, 2008) in *Mercure* (former name of the atmospheric module of *Code_Saturne*), but completing them with new results using the Lagrangian stochastic model previously introduced and the second-order $R_{ij} - \epsilon$ model for the fluid phase computation. Milliez and Carissimo (2007) described in detail the characteristics of the campaign, which we summarize below:

- 63 emissions of a neutral gas (propylene C_3H_6), among which 58 continuous and 5 puff releases;
- flat terrain with some bushes from 50 cm to 1 m high;
- presence of obstacles through a regular alignment of containers of dimensions 12.2 m (length) $\times$ 2.42 m (width) $\times$ 2.54 m (height);
- different wind conditions through varying angles of incidence, wind velocities, turbulence, temperature, stability conditions;
- different release heights: 0.15 m, 1.3 m, 1.8 m, 2.6 m and 5.2 m.

Figure 1 shows two photos of the MUST experiment. The regular alignment of the containers is supposed to represent an idealized city and the objective of the experiment is to observe the point source dispersion of the propylene continuously released in this environment. We are interested in checking how the Lagrangian model behaves in the presence of obstacles in a real situation. Indeed, when assessing the respect of the well-mixed criterion for the SLM, Bahlali et al. (2018b) studied the case of a non-homogeneous turbulent flow around an obstacle within a boundary layer and observed differences in the behavior of the particles depending on the turbulence model that was used to compute the fluid phase.

The experimental devices used in the campaign are illustrated in Figure 2. Wind and temperature measurements were carried out using sonic anemometers (30-m mast S just upstream the canopy, 32-m central tower T and 8-m masts A, B, C and D inside the canopy). As for pollutant concentrations, they were measured by photoionization detectors (PIDs), positioned on four horizontal lines (*'line 1, 2, 3, 4'* in Figure 2). These four lines were located at height 1.6 m. PIDs were also placed at 6 levels on the masts A, B, C, D and at 8 levels on the tower T.



Figure 1: Some views of the MUST experiment (after Milliez (2006)).

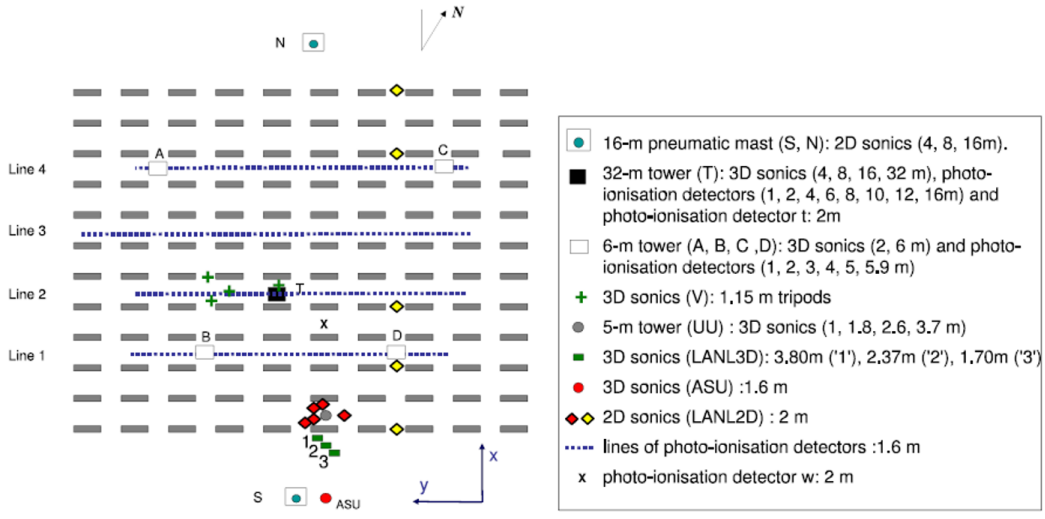


Figure 2: Schematic diagram of the MUST experiment and location of the experimental devices (after Milliez and Carissimo (2008)).

Case	α_4 (deg)	S_4 $(m.s^{-1})$	k_4 $(m^2.s^{-2})$	L (m)	Q $(L.min^{-1})$	Source location	z_s (m)
2681829	-41	7.93	4.263	28000	225	29	1.8
2692157	43	2.98	0.510	130	225	36	2.6

Table 1: Characteristics of the two selected trials: S_4 and α_4 are respectively the mean wind horizontal speed and direction at the 4-m level of mast S, k_4 is the turbulent kinetic energy and L the Monin-Obukhov length at the 4-m level of tower T, Q is the tracer release rate at the source, 'Source location' is the position of the source and z_s is the height of the source (after Milliez and Carissimo (2007)).

Finally, it should be noted that the tracer releases occured at dusk or dawn, thus under meteorological conditions ranging from stable to neutral. The duration of each release was 15 min and for the analysis of the results, periods of 200 s were extracted by Yee and Biltoft (2004). These periods were indeed quasi-steady in terms of wind speed and direction and also remained greater than the plume travel time.

3.2. Description of the cases studied

As previously mentioned, the MUST experiment consisted of 63 tracer releases and in the work of Milliez and Carissimo (2007, 2008), twenty cases were simulated. In this work, we have chosen to study the trials 2681829 and 2092157, respectively corresponding to situations of neutral and stable atmospheres. The characteristics of these trials are summarized in Table 1, and the characteristics of all cases can be found in Milliez and Carissimo (2007).

4. Numerical simulations

In this section, we present the methodology and results of the numerical simulations of trials 2681829 and 2692157 in *Code_Saturne*.

4.1. Simulation domain and mesh

The simulation domain is of dimensions 240 m (North-South) $\times$ 240 m (East-West) $\times$ 100 m (vertical direction). The corresponding mesh is displayed in Figure 3. It is refined near the ground and the obstacles, the horizontal resolution varying from 4 m to 0.6 m. The vertical resolution of the mesh increases gradually from 0.2 m near the ground until it reaches 4 m at the top of the domain. In total, the mesh contains 1 426 010 cells.

4.2. Numerical setup

4.2.1. Fluid phase

For the flow, the models $k-\epsilon$ et $R_{ij}-\epsilon$ (with simple gradient-diffusion hypothesis for the scalars) are used and will be further compared. The imposed boundary conditions are the following:

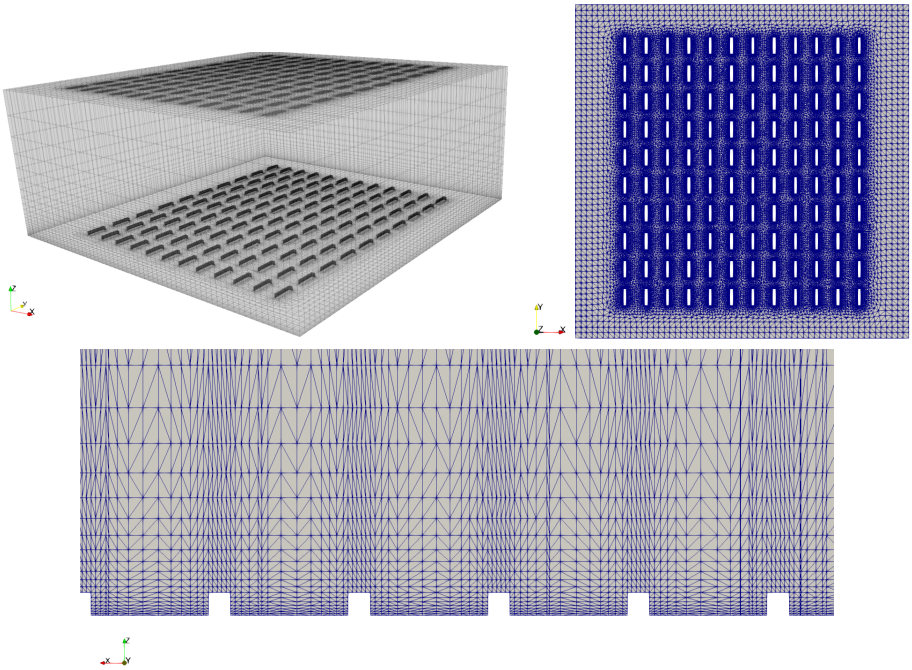


Figure 3: Mesh of the computational domain. From left to right and top to bottom: general view, horizontal cross-section, vertical cross-section.

- Inlet condition of Dirichlet type, with dynamical profiles derived from experimental measurements. Indeed, it has been shown in Milliez and Carissimo (2007) that the use of analytical profiles in equilibrium can induce an underestimation of turbulence. They found better results using experimental profiles (when available), which is why we have chosen to follow the same road.
- Outlet condition: free outflow.
- Ground and containers: rough wall, with a roughness length of 0.04 m.

4.2.2. Dispersed phase

With the Eulerian approach, the pollutant is injected through a scalar source term. At the injection cell, we have imposed a pollutant flow rate of 225 L/min for both neutral 2681829 and stable 2692157 trials (cf. Table 1). With the Lagrangian approach, at the same injection cell, 2 000 particles per time step are injected, with the same flow rate.

4.3. Results for neutral trial 2681829

4.3.1. Simulation of the fluid phase

As a reminder, we have performed two simulations of the fluid phase, corresponding respectively to the use of the first-order $k-\epsilon$ or second-order $R_{ij}-\epsilon$ turbulence closures. Figure 4 shows the mean velocity and TKE fields at height $z = 4\ m$ for both turbulence

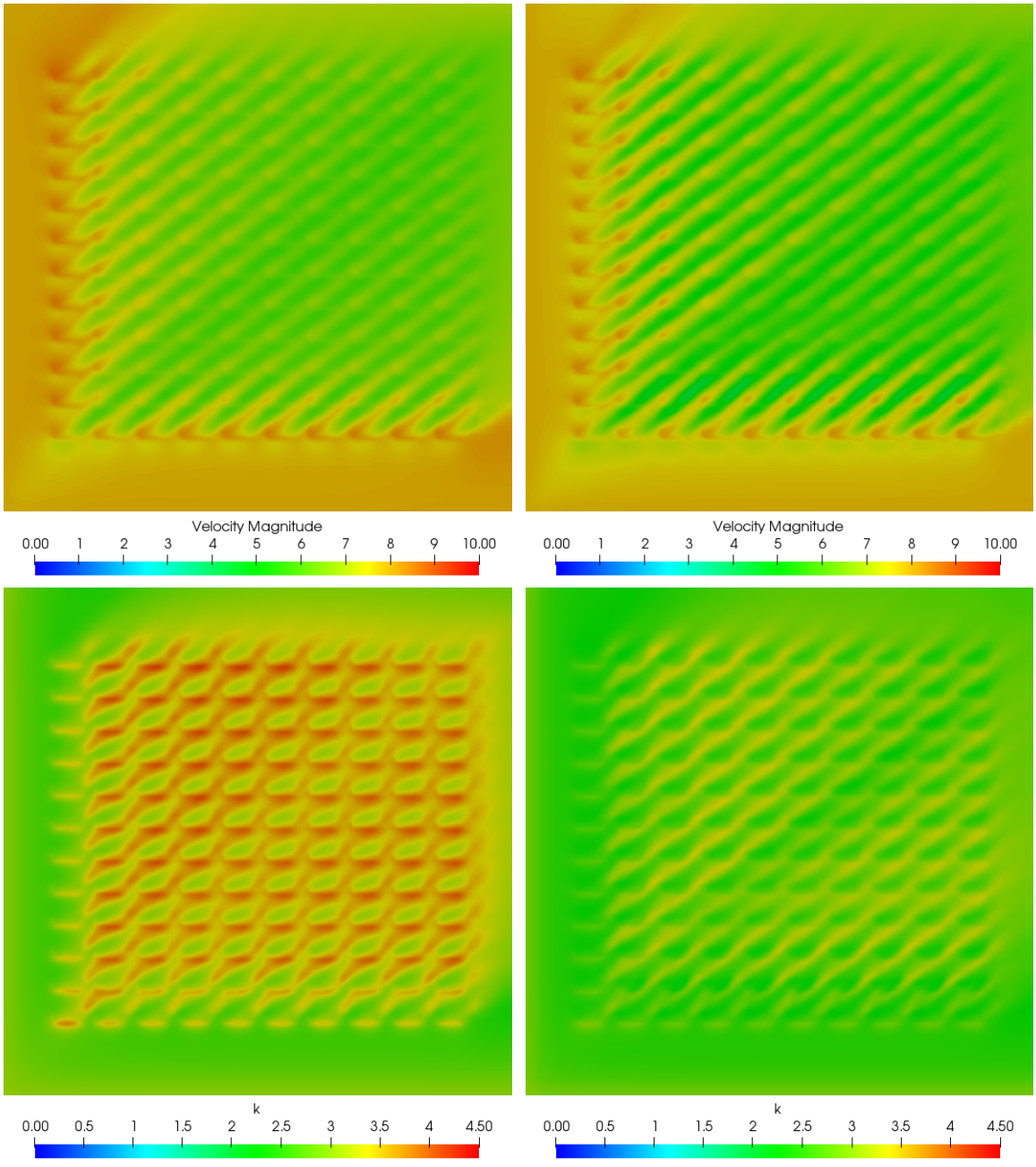
models. This height stands above the roofs ($z_{roofs} = 2.54\ m$) and we can observe the influence of the row of containers on the flow. Naturally, a slowdown of the flow and an increase in turbulent kinetic energy can be observed. It can also be seen that $k-\epsilon$ model tends to predict higher levels of turbulent kinetic energy upstream of the obstacles, which is a well-known result in turbulence modeling. However, when comparing to the measurements, it can be seen that the TKE values are always underestimated, with both $k-\epsilon$ and $R_{ij}-\epsilon$ models. Figure 5 shows the wind field in the source area, at 1.6 m height: the recirculation zones between the containers are well-captured and explain the previously mentioned decrease of velocity above the roofs at 4 m height. The recirculation zones are also wider and more pronounced with the $R_{ij}-\epsilon$ model. Finally, we have plotted in Figure 6 the mean velocity and TKE vertical profiles extracted from the masts when data was available. Once again, turbulence production is more pronounced with $k-\epsilon$ model. Velocity profiles are on the other hand not much affected by the turbulence model (as is also seen in the velocity magnitude field of Figure 4) and stand in good agreement with the measurements.

4.3.2. Simulation of the dispersion

Figure 7 shows the concentration fields at height 1.6 m, for both $k-\epsilon$ and $R_{ij}-\epsilon$ models. Whether it be through the Eulerian or the Lagrangian approach, it can be observed that the choice of the turbulence model plays an important role on the concentration patterns. In particular, we can see that the plume is wider using the $R_{ij}-\epsilon$ model.

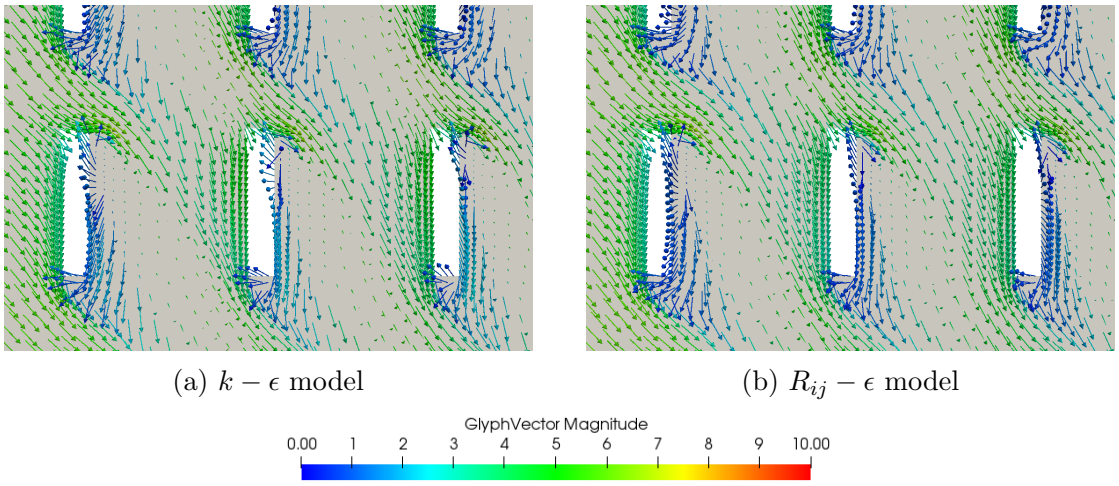
One can also observe that there is a deflection of the plume centerline compared to the -41^o wind direction. Note also that the plume deflection is more pronounced when using the $R_{ij}-\epsilon$ model, for both Eulerian and Lagrangian approaches. This deviation phenomenon has also been observed in Carissimo and Macdonald (2004) and Milliez and Carissimo (2007). Milliez and Carissimo (2007) explained it by the fact the pollutant is channeled into the streets perpendicular to the obstacle array axis, as is also observed in the experiment. Castelli et al. (2017), who also performed on the same trial Eulerian $k-\epsilon$ and Lagrangian calculations within their models RAMS6.0-mod and MicroRMS, noticed a lesser pronounced deflection with the Lagrangian modeling. They partly explained it by pointing out that their Lagrangian code did not account for the cross-correlation terms between the different components of wind velocity fluctuations. This is not the case with our model, since it is based on Pope's SLM, which implies that the cross-correlations of the wind velocity fluctuations are included in the mean-pressure gradient term of Eq. (3b) (this is actually one of the main advantages of this formulation, see Bahlali et al. (2018b) for more theoretical details). This may be why, when roughly comparing the concentration field obtained by Castelli et al. (2017) to the one we have displayed in Figure 7, we find a more pronounced deflection with the SLM than found in Castelli et al. (2017)'s results.

For a more precise analysis of the concentration field, we show in Figure 8 the concentration horizontal profiles on lines 1, 2, 3, 4 and in Figure 9 the vertical profiles on masts B, C, D and tower T. It can be observed that, in particular, the lines 1 and 2 show a shift in the plumes obtained by respectively the $k-\epsilon$ and the $R_{ij}-\epsilon$ models, which



(a) $k - \epsilon$ model (b) $R_{ij} - \epsilon$ model

Figure 4: Comparison of mean velocity and TKE fields at $z = 4\ m$ computed by $k-\epsilon$ or $R_{ij}-\epsilon$ turbulence models, for neutral trial 2681829.

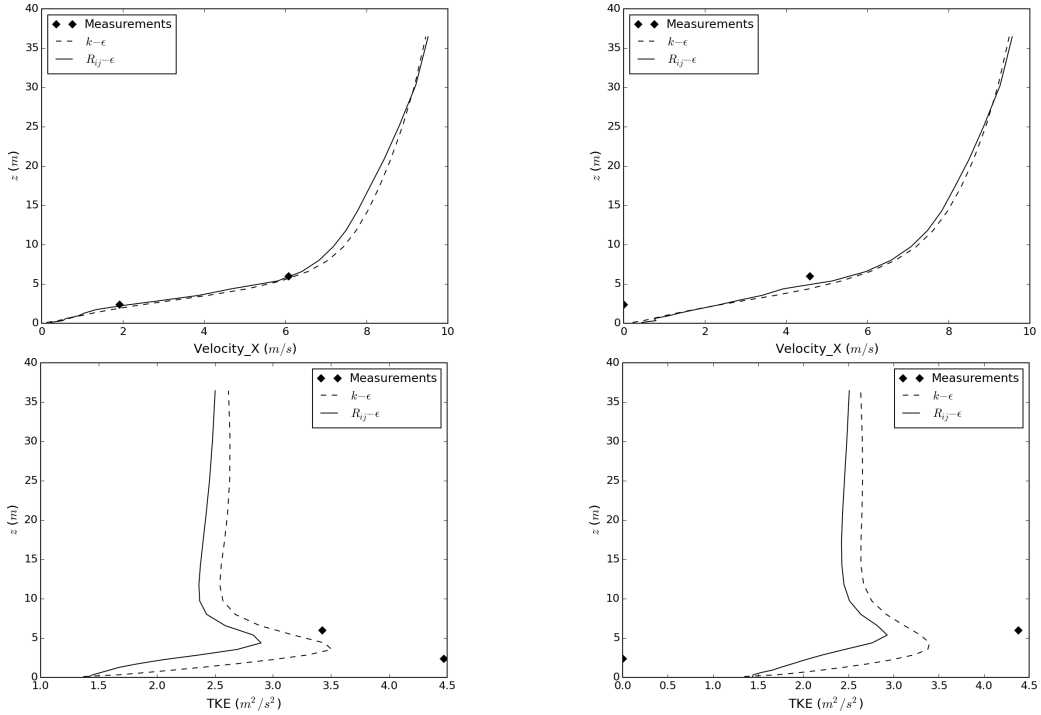


(a) $k - \epsilon$ model (b) $R_{ij} - \epsilon$ model

Figure 5: Comparison of wind fields around the source computed by $k - \epsilon$ or $R_{ij} - \epsilon$ turbulence models, for neutral trial 2681829.

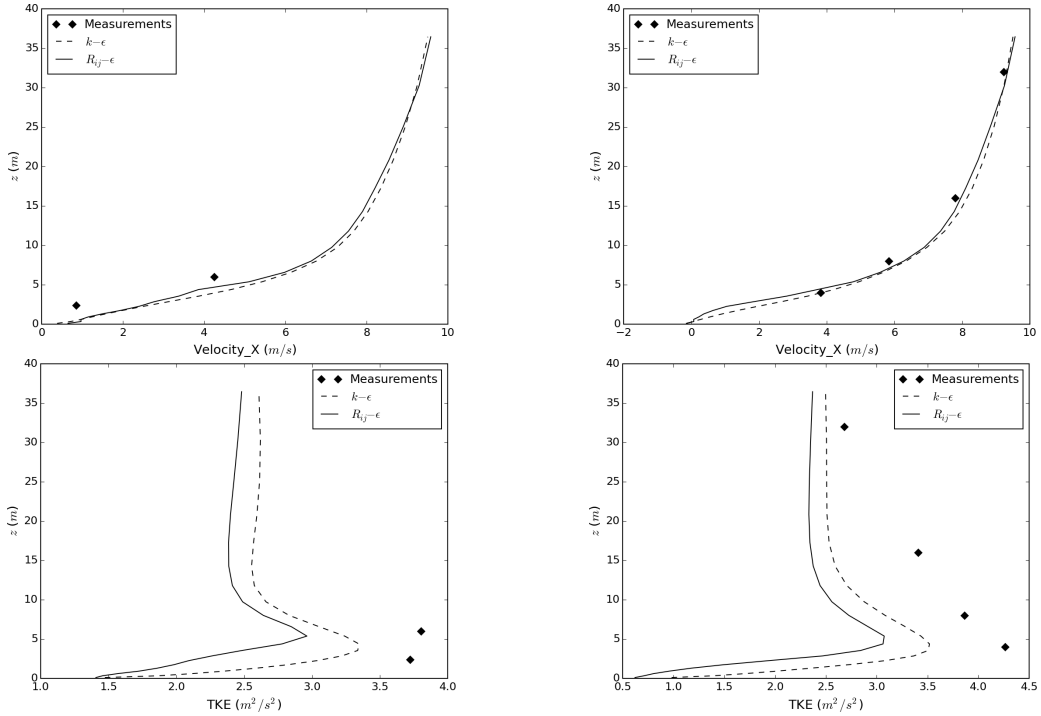
again highlights the observed more pronounced deflection with the $R_{ij} - \epsilon$ closure. When using the $R_{ij} - \epsilon$ closure, the effect of the obstacles is clearly visible through the 'steps' corresponding to the regular spacing between the containers. If we compare Eulerian to Lagrangian results, it is interesting to have a look at the concentration evolution from line 1 (closest to the source) to line 4. Both models seem to have approximately the same evolution of diffusion. This is better seen in Figure 10, where we have plotted the maximum concentration value over each line against the distance from the source. It is well-known that Langevin-like Lagrangian models show rapid diffusion near the source and then tend to a diffusive law in the far-field. On the other hand, first-order Eulerian models based on a simple gradient diffusion hypothesis model the whole dispersion process through a diffusive law (which is actually a shortcoming of this kind of models since the gradient-diffusion hypothesis is no longer valid near the source). One then might wonder why, here in Figure 10, both Eulerian and Lagrangian models seem to show the same evolution of diffusion, independently from the distance to the source. In fact, one important thing to point out here is that line 1 is already located in the so-called 'far-field region'. Indeed, when speaking about near and far fields, it is always in comparison to the value of the Lagrangian integral timescale T_L. For small diffusion times with respect to the value of T_L, diffusion should be evolving proportionally to time, while for higher diffusion times, it should be evolving as square-root of time (Taylor, 1921). In our case, the value of T_L at the injection cell is 0.93 s, and the velocity norm is 4.5 $m.s^{-1}$, which yields a 'near-field region' of approximately $0.93 \times 4.5 = 4.2$ m. The far field is thus quickly reached. As the maximum concentration value on line 1 is located at approximately 60 m ($\gg 4.2$ m) from the source, we deduce by extension that all the lines are already in the well-established far-field region. In consequence, it is logical that both the Lagrangian and the Eulerian models show the same evolution of diffusion.

Apart from the previous remarks, and still analyzing the lines, the agreement between



(a) Mast A

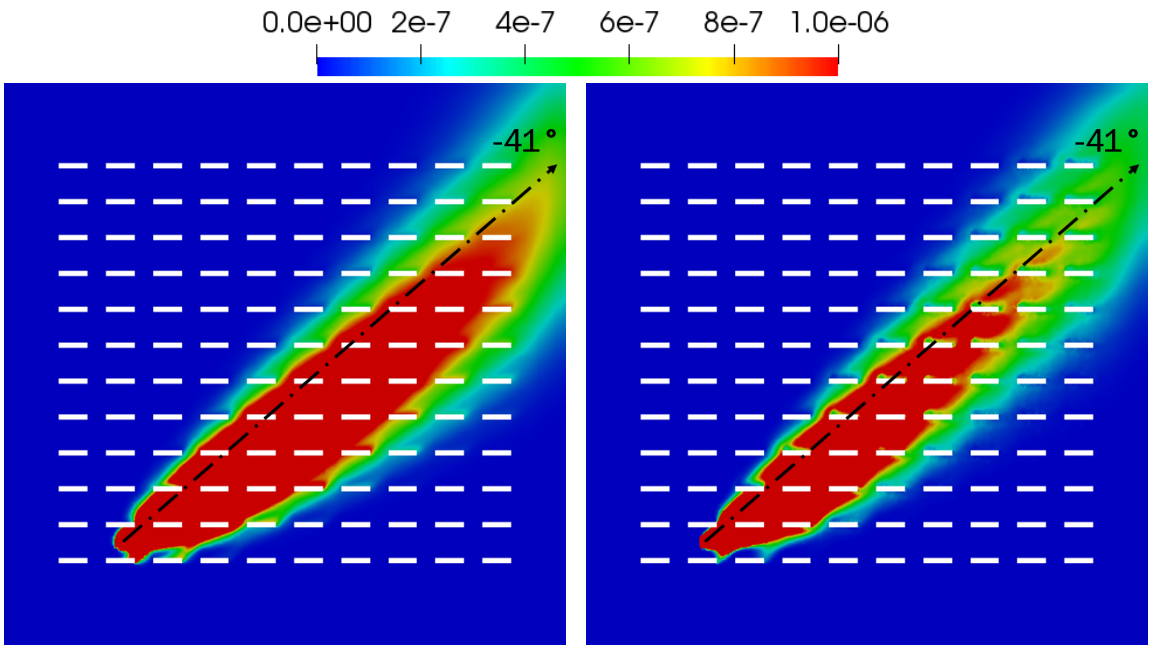
(b) Mast B



(c) Mast D

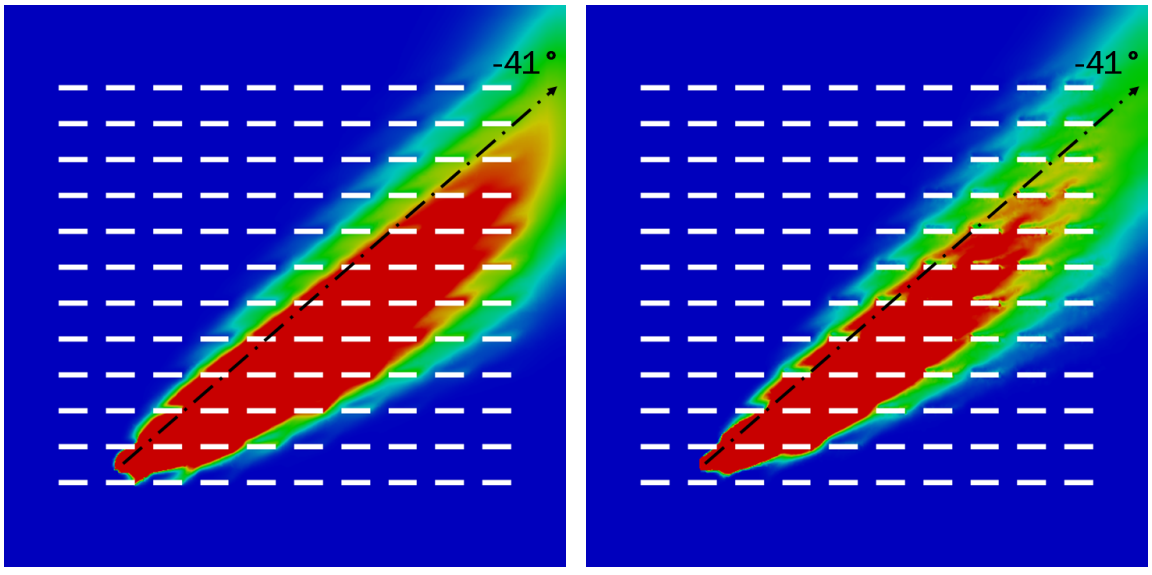
(d) Tower T

Figure 6: Comparison of vertical velocity and TKE profiles computed by $k-\epsilon$ or $R_{ij}-\epsilon$ turbulence models, for neutral trial 2681829.



(a) Eulerian model, $k - \epsilon$

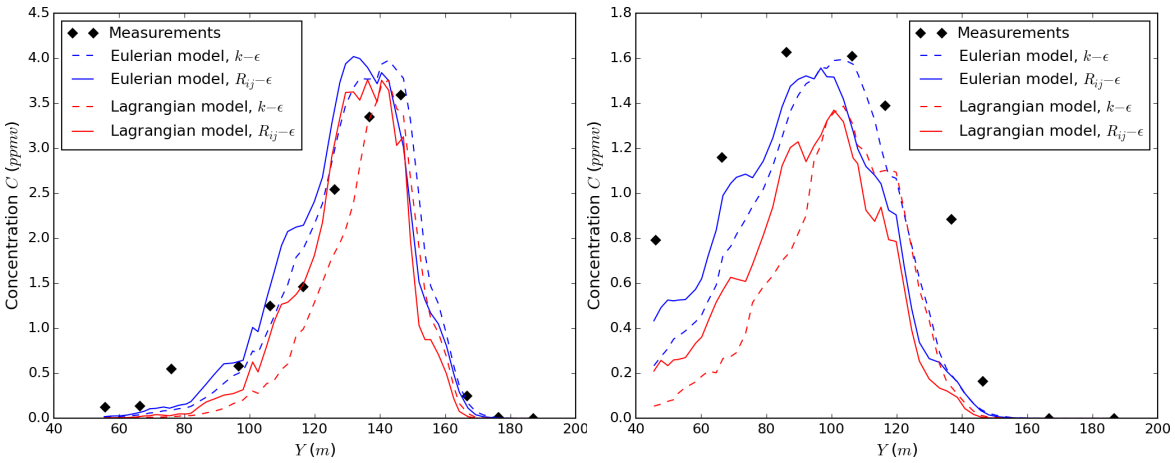
(b) Lagrangian model, $k - \epsilon$



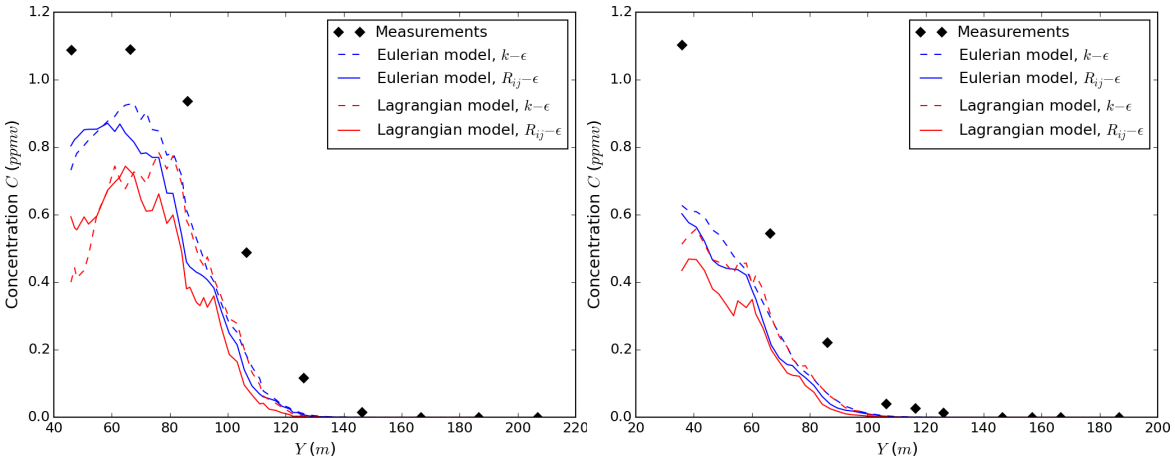
(c) Eulerian model, $R_{ij} - \epsilon$

(d) Lagrangian model, $R_{ij} - \epsilon$

Figure 7: Comparison of mean concentration (kg/kg) fields at $z = 1.6\ m$ computed by both Eulerian and Lagrangian models, through $k - \epsilon$ or $R_{ij} - \epsilon$ turbulence closures, for neutral trial 2681829.



(a) Line 1 (b) Line 2

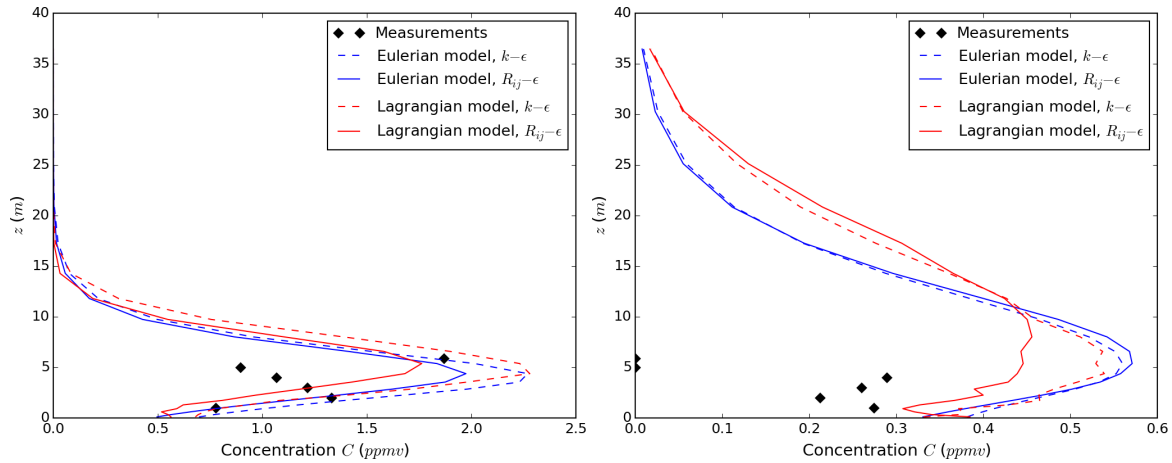


(c) Line 3 (d) Line 4

Figure 8: Comparison of concentration profiles on horizontal line samplers computed by both Eulerian and Lagrangian models, through $k-\epsilon$ or $R_{ij}-\epsilon$ turbulence closures, for neutral trial 2681829.

simulations and measurements is overall satisfactory and both Eulerian and Lagrangian models provide a quite acceptable representation of the spread of the plume, although the Lagrangian model seems to slightly underestimate the concentrations on all the lines.

If we focus now on vertical profiles (see Figure 9), it can be seen that the use of the $R_{ij}-\epsilon$ model for the fluid phase tends to reduce the maxima of concentrations on mast B (closest to the source), especially with the Lagrangian approach, making the results in better agreement with the measurements. On tower T, the maxima of concentrations are also lower and are due to the fact that the plume deflection is more pronounced using the $R_{ij}-\epsilon$ model for both Eulerian and Lagrangian approaches, making the plume go towards the South direction with more intensity and leaving lower concentration values on tower T. On mast C, the concentrations are also slightly reduced when using the $R_{ij}-\epsilon$ model for the same reason as for tower T. It is interesting to notice that on this mast, the Lagrangian



(a) Mast B

(b) Mast C

(c) Mast D

(d) Tower T

Figure 9: Comparison of vertical concentration profiles computed by both Eulerian and Lagrangian models, through $k-\epsilon$ or $R_{ij}-\epsilon$ turbulence closures, for neutral trial 2681829.

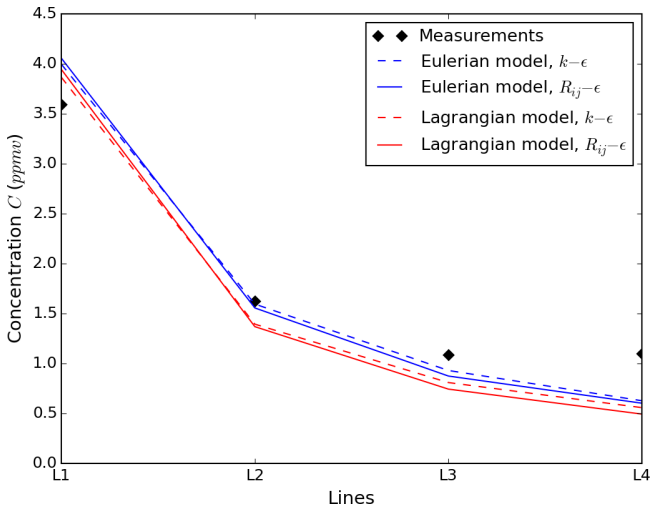


Figure 10: Maximum concentration value over each line against the distance from the source, for neutral trial 2681829.

approach captures the change of sign in the vertical gradient of concentration near the ground, while the Eulerian model does not. This is even more marked with the use of the $R_{ij} - \epsilon$ model. Finally, on mast D, concentrations are raised up when using the $R_{ij} - \epsilon$ model, which can also be explained by the plume deflection towards the South direction more pronounced with this model. On this mast, the Lagrangian approach provides better agreement with the measurements. However, note that one must be cautious in giving definite conclusions for masts C and D, since the concentrations are lower and can then imply more significant errors and uncertainties.

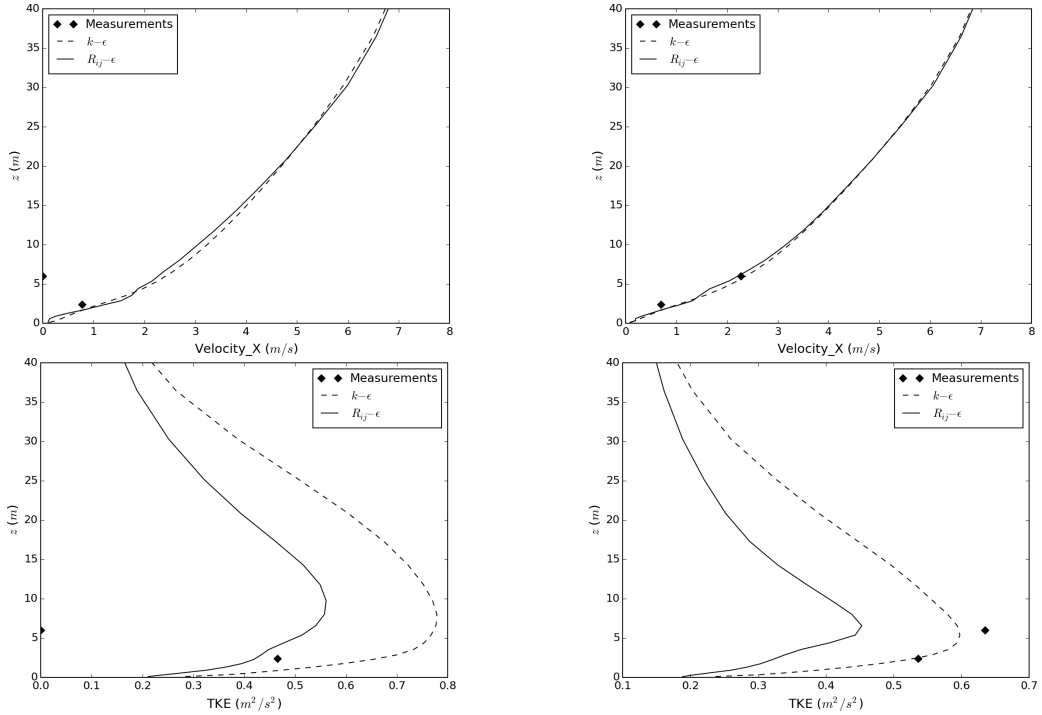
4.4. Results for stable trial 2692157

4.4.1. Simulation of the fluid phase

Analogously to neutral trial 2681829, we show in Figure 11 the mean velocity and TKE vertical profiles on masts A, B, C and tower T for both $k-\epsilon$ and $R_{ij}-\epsilon$ turbulence models. Velocities and TKE values are much lower than for trial 2681829, which is typical of stable stratification meteorological conditions. As in case 2681829, $k-\epsilon$ model tends to predict higher values of TKE than does $R_{ij}-\epsilon$ model. Velocity profiles are in good agreement with the measurements. Once again, they are not much affected by the choice of the turbulence model.

4.4.2. Simulation of the dispersion

Figure 12 displays the different concentration fields at height 1.6 m. It can be seen that as in trial 2681829, the plume is also wider when $R_{ij} - \epsilon$ model is used. The difference is even more pronounced through the Lagrangian approach. In addition, a plume deflection (compared to the 43^o wind direction) can also be observed in both Eulerian and Lagrangian results, more significant when using the $R_{ij} - \epsilon$ than the $k - \epsilon$ model for the fluid phase computation.



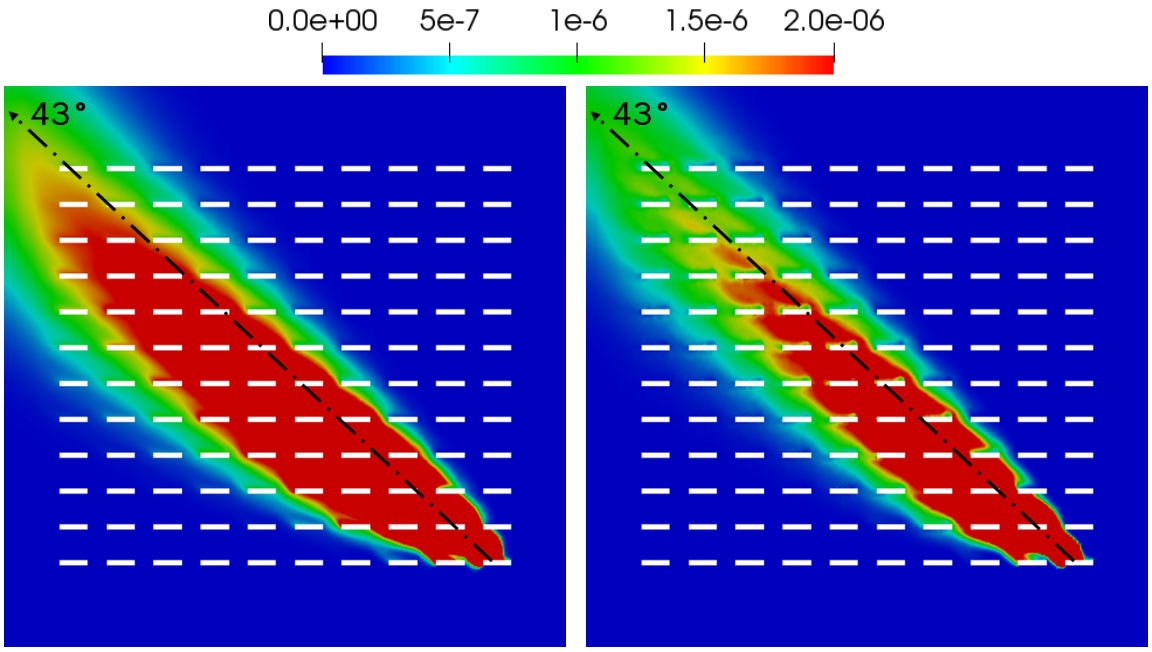
(a) Mast A

(b) Mast B

(c) Mast C

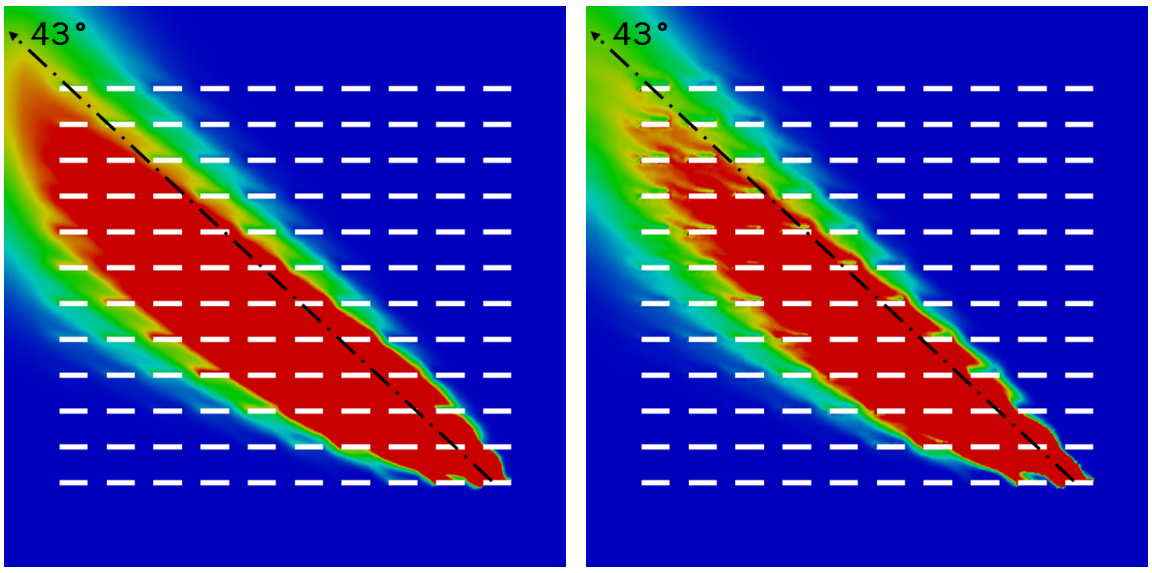
(d) Tower T

Figure 11: Comparison of vertical velocity and TKE profiles computed by $k-\epsilon$ or $R_{ij}-\epsilon$ turbulence models, for stable trial 2692157.



(a) Eulerian model, $k - \epsilon$

(b) Lagrangian model, $k - \epsilon$



(c) Eulerian model, $R_{ij} - \epsilon$

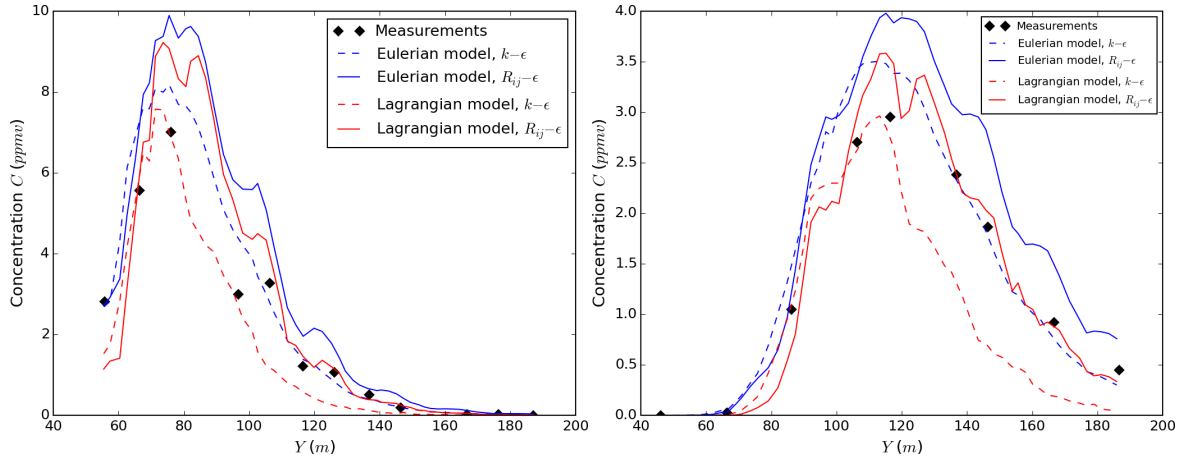
(d) Lagrangian model, $R_{ij} - \epsilon$

Figure 12: Comparison of mean concentration (kg/kg) fields at $z = 1.6\ m$ computed by both Eulerian and Lagrangian models, through $k - \epsilon$ or $R_{ij} - \epsilon$ turbulence closures, for stable trial 2692157.

In Figure 13, we show the horizontal concentration profiles on lines 1, 2, 3 and 4. It can be seen that the use of the $R_{ij} - \epsilon$ model leads to an overprediction of concentrations on line 1, for both Eulerian and Lagrangian approaches, even more marked on the Eulerian results. Such an overprediction may be due to the fact that TKE is underestimated with the $R_{ij} - \epsilon$ model as seen in Figure 11. Nevertheless, the $R_{ij} - \epsilon$ model shows again the advantage of better capturing the presence of the obstacles through the visible regular concentration 'steps'. Regardless of the turbulence model, one can also notice the strong decrease of concentrations between line 1 and line 2 with both Lagrangian and Eulerian models, less marked when moving to the next lines: the evolution of diffusion induced by both models look similar. In this trial, at the injection cell, $T_L = 0.73\ s$ and the velocity equals $1.7\ m.s^{-1}$: in consequence, the region corresponding to the 'near field' corresponds to distances below $0.73 \times 1.7 = 1.2\ m$. The far field is thus immediately reached. Finally, one may notice that the further we walk from the source, the closer Eulerian and Lagragian curves stand to each other. Also, the agreement with experimental measurements rises up.

In Figure 14 are displayed the vertical concentration profiles on masts A, B, D and tower T. On mast D, which is the closest to the source, both Lagrangian and Eulerian models overpredict the concentrations when the $R_{ij} - \epsilon$ model is used. Nevertheless, when using the $k - \epsilon$ closure, both models provides very accurate results. Same goes for tower T, where the use of the $R_{ij} - \epsilon$ turbulence closure leads to an overprediction of concentration especially near the ground. On this mast, it is interesting to point out that even though the Lagrangian model used with the $k - \epsilon$ closure underpredicts the concentration values, it captures the change in the sign of the vertical concentration gradient near the ground. Stepping even further from the source and looking at mast A, one can notice a stronger vertical diffusion in the Lagrangian results. In this case again, concentrations are overpredicted. For this trial, the study of masts D, T and A is interesting as the 'D-T-A' parametrical line is roughly aligned with the centerline of the plume. One general conclusion from these three masts is that the use of the $R_{ij} - \epsilon$ model leads to an overprediction of concentrations especially near the ground. As for the concentrations on mast B, they are influenced by the plume deviation. Indeed, since the $R_{ij} - \epsilon$ model involves a more pronounced deflection of the plume than the $k-\epsilon$ model towards the West direction, where mast B is located, then concentrations are expected to be higher, which is indeed what is observed in the simulation results. However, and once again, better accuracy is found when the $k - \epsilon$ model is used for both Eulerian and Lagrangian approaches (except on mast B for the Lagrangian results).

From all these results on stable stratification, one may think that the tendency of the $k - \epsilon$ model to compute high TKE values can be seen as an 'advantage' for stable conditions, since this strengthens diffusion processes and thus leads to lower concentration values (that are, in general, and in particular looking at the lines, in better agreement with the measurements). In fact, one should remember here that even when using a $R_{ij} - \epsilon$ model, the closure on potential temperature is still local, through the following Generalized Gradient Diffusion Hypothesis (GGDH):



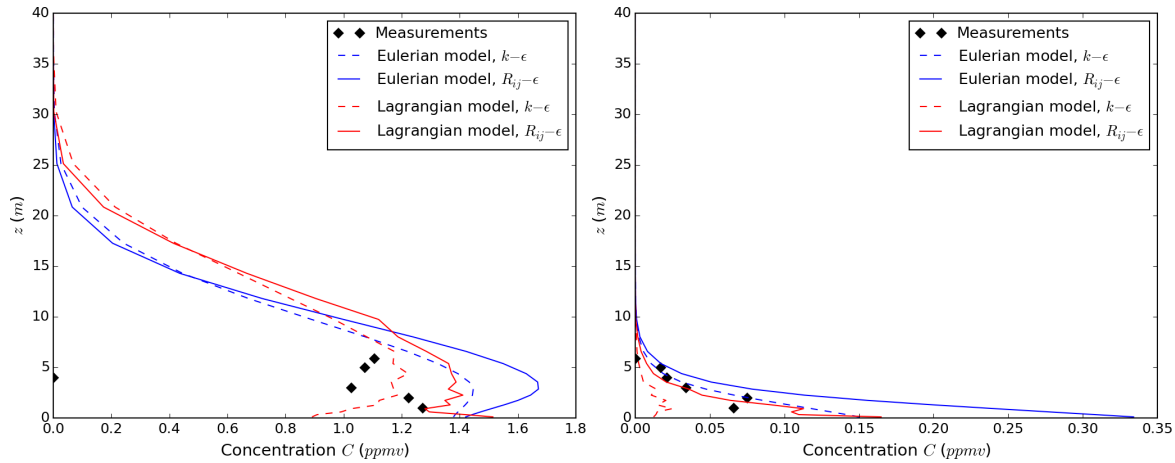
(a) Line 1

(b) Line 2

(c) Line 3

(d) Line 4

Figure 13: Comparison of concentration profiles on horizontal line samplers computed by both Eulerian and Lagrangian models, through $k-\epsilon$ or $R_{ij}-\epsilon$ turbulence closures, for stable trial 2692157.



(a) Mast A

(b) Mast B

(c) Mast D

(d) Tower T

Figure 14: Comparison of vertical concentration profiles computed by both Eulerian and Lagrangian models, through $k-\epsilon$ or $R_{ij}-\epsilon$ turbulence closures, for stable trial 2692157.

$$\langle U'_{f,j}\theta'\rangle = -C_\theta \frac{k}{\epsilon}\left(\langle U'_{f,j}U'_{f,k}\rangle \frac{\partial\langle\theta\rangle}{\partial x_k}\right) \ , \tag{4}$$

where $C_\theta = 0.3$.

An improvement, still under investigation, could be the use of a second-order model on potential temperature.

5. Conclusions

This work aimed at assessing the ability of a Lagrangian stochastic model to perform point source dispersion in an idealized urban area, for neutral and stable meteorological conditions. The Lagrangian model used was a model based on Pope (2000)'s SLM and Minier and Peirano (2001)'s two-phase flow formulation. Pope's PDF models have gone quite unnoticed in the atmospheric dispersion community, despite presenting some non-negligible theoretical and numerical advantages (see Bahlali et al. (2018a,b)).

As used within a hybrid Eulerian/Lagrangian approach, the Lagrangian solver was fed by the mean dynamical fields provided by the Eulerian solver of the same CFD code *Code_Saturne*. These fields were computed either through a first-order $k-\epsilon$ model or a second-order $R_{ij}-\epsilon$ model. The Lagrangian results were compared to the Eulerian ones, for both turbulence models. The Eulerian turbulence closure for the scalar fluctuations was first order, which implied constant diffusivity. We showed that since the region considered for concentration measurements is already located in the far field (*i.e.*, diffusion times higher than the Lagrangian integral timescale), both Eulerian and Lagrangian show the same evolution of diffusion.

Then, we showed that the obstacle array induced a deflection of the plume, as already observed by Milliez and Carissimo (2007) in the same code and Castelli et al. (2017) in another methodology. These works modeled turbulence only through a $k-\epsilon$ closure. Precisely, we showed that this plume deflection was more pronounced using a $R_{ij}-\epsilon$ model. This was the case with both Eulerian and Lagrangian approaches. For neutral stratification, the agreement between results and measurements is quite satisfactory. In particular, we can validate the accuracy of the results of the Lagrangian model. We showed that the use of the $R_{ij}-\epsilon$ model made it possible to have a more physical representation of the obstacles' influence on the concentration profiles, through the visible regular 'steps' corresponding to the spacing between the containers.

For stable stratification, we showed that the results obtained by both approaches were more accurate when using a $k-\epsilon$ closure for the fluid phase. Not as satisfactory results as for neutral trial were found with the use of the $R_{ij}-\epsilon$ closure for stable stratification. The Lagrangian model, which is dependent on the quality of the flow calculated by the Eulerian solver, also see its results affected by the use of the $R_{ij}-\epsilon$ model. Deeper investigations are needed on this subject, but it should be noted that the temperature fluctuations closure is still local even with the $R_{ij}-\epsilon$ model. For further investigations, an idea would be to explore full second-moment closure modeling for both temperature and scalar fluctuations.

In the Lagrangian modeling, another research path would be to add a temperature scalar to the state vector of the particles, driven by a new stochastic differential equation (in the spirit of the works of Das and Durbin (2005) or Bossy et al. (2018) for instance), in order to better account for buoyancy-induced turbulent patterns.

References

Alessandrini, S., Ferrero, E., 2009. A hybrid Lagrangian–Eulerian particle model for reacting pollutant dispersion in non-homogeneous non-isotropic turbulence. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 388 (8), 1375–1387.

Amicarelli, A., Leuzzi, G., Monti, P., et al., 2012. Lagrangian micromixing models for concentration fluctuations: an overview. American Journal of Environmental Sciences 8 (6), 577–590.

Antonioni, G., Burkhart, S., Burman, J., Dejoan, A., Fusco, A., Gaasbeek, R., Gjesdal, T., Jäppinen, A., Riikonen, K., Morra, P., et al., 2012. Comparison of CFD and operational dispersion models in an urban-like environment. Atmospheric Environment 47, 365–372.

Archambeau, F., Méchitoua, N., Sakiz, M., 2004. Code Saturne: A finite volume code for the computation of turbulent incompressible flows-Industrial applications. International Journal on Finite Volumes 1 (1), http://code–saturne.org.

Bahlali, M. L., Dupont, E., Carissimo, B., 2018a. A hybrid CFD RANS/Lagrangian approach to model atmospheric dispersion of pollutants in complex urban geometries. Submitted to International Journal of Environment and Pollution.

Bahlali, M. L., Henry, C., Carissimo, B., Minier, J.-P., 2018b. On the well-mixed condition and consistency issues in hybrid Eulerian/Lagrangian stochastic models of dispersion. Submitted to Atmospheric Environment.

Bernardin, F., Bossy, M., Chauvin, C., Drobinski, P., Rousseau, A., Salameh, T., 2009. Stochastic downscaling method: application to wind refinement. Stochastic Environmental Research and Risk Assessment 23 (6), 851–859.

Biltoft, C. A., 2001. Customer report for Mock Urban Setting Test. DPG Document Number 8-CO-160-000-052. Prepared for the Defence Threat Reduction Agency.

Bossy, M., Dupré, A., Drobinski, P., Violeau, L., Briard, C., 2018. Stochastic Lagrangian approach for wind farm simulation, http://hal.inria.fr/hal–01697815/.

Camelli, F., Lohner, R., Hanna, S., 2005. VLES study of MUST experiment. In: 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. p. 1279.

Carissimo, B., Macdonald, R., 2004. A porosity/drag approach for the modeling of flow and dispersion in the urban canopy. In: Air Pollution Modeling and Its Application XV. Springer, pp. 385–393.

Cassiani, M., Franzese, P., Giostra, U., 2005a. A PDF micromixing model of dispersion for atmospheric flow. Part I: development of the model, application to homogeneous turbulence and to neutral boundary layer. Atmospheric Environment 39 (8), 1457–1469.

Cassiani, M., Franzese, P., Giostra, U., 2005b. A PDF micromixing model of dispersion for atmospheric flow. Part II: application to convective boundary layer. Atmospheric Environment 39 (8), 1471–1479.

Cassiani, M., Stohl, A., Brioude, J., 2015. Lagrangian Stochastic Modelling of Dispersion in the Convective Boundary Layer with Skewed Turbulence Conditions and a Vertical Density Gradient: Formulation and Implementation in the FLEXPART Model. Boundary-Layer Meteorology 154 (3), 367–390.

Castelli, S. T., Tinarelli, G., Reisin, T., 2017. Comparison of atmospheric modelling systems simulating the flow, turbulence and dispersion at the microscale within obstacles. Environmental Fluid Mechanics 17 (5), 879–901.

Das, S., Durbin, P. A., 2005. A Lagrangian stochastic model for dispersion in stratified turbulence. Physics of Fluids 17 (2), 025109.

Dejoan, A., Santiago, J., Martilli, A., Martin, F., Pinelli, A., 2010. Comparison between Large-Eddy Simulation and Reynolds-averaged Navier–Stokes computations for the MUST field experiment. Part II: effects of incident wind angle deviation on the mean flow and plume dispersion. Boundary-Layer Meteorology 135 (1), 133–150.

Donnelly, R., Lyons, T., Flassak, T., 2009. Evaluation of results of a numerical simulation of dispersion in an idealised urban area for emergency response modelling. Atmospheric Environment 43 (29), 4416–4423.

Franzese, P., 2003. Lagrangian stochastic modeling of a fluctuating plume in the convective boundary layer. Atmospheric Environment 37 (12), 1691–1701.

Hanna, S. R., Hansen, O. R., Dharmavaram, S., 2004. FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations. Atmospheric Environment 38 (28), 4675–4687.

Kumar, P., Feiz, A.-A., Ngae, P., Singh, S. K., Issartel, J.-P., 2015. CFD simulation of short-range plume dispersion from a point release in an urban like environment. Atmospheric Environment 122, 645–656.

Leitl, B., Bezpalcova, K., Harms, F., 2007. Wind tunnel modelling of the MUST experiment. In: Proceeding of the 11th International Conference on Harmonization within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Cambridge. Vol. 2. p. 435e439.

Luhar, A. K., Sawford, B. L., 2005. Micromixing modelling of concentration fluctuations in inhomogeneous turbulence in the convective boundary layer. Boundary-Layer Meteorology 114 (1), 1–30.

Milliez, M., 2006. Modélisation micro-météorologique en milieu urbain: dispersion des polluants et prise en compte des effets radiatifs. Ph.D. thesis, École nationale des ponts et chaussées (France).

Milliez, M., Carissimo, B., 2007. Numerical simulations of pollutant dispersion in an idealized urban area, for different meteorological conditions. Boundary-Layer Meteorology 122 (2), 321–342.

Milliez, M., Carissimo, B., 2008. Computational fluid dynamical modelling of concentration fluctuations in an idealized urban area. Boundary-Layer Meteorology 127 (2), 241–259.

Minier, J.-P., 2015. On Lagrangian stochastic methods for turbulent polydisperse two-phase reactive flows. Progress in Energy and Combustion Science 50, 1–62.

Minier, J.-P., 2016. Statistical descriptions of polydisperse turbulent two-phase flows. Physics Reports 665, 1–122.

Minier, J.-P., Chibbaro, S., Pope, S. B., 2014. Guidelines for the formulation of Lagrangian stochastic models for particle simulations of single-phase and dispersed two-phase turbulent flows. Physics of Fluids (1994-present) 26 (11), 113303.

Minier, J.-P., Peirano, E., 2001. The PDF approach to turbulent polydispersed two-phase flows. Physics Reports 352 (1), 1–214.

Pope, S., 1998. The vanishing effect of molecular diffusivity on turbulent dispersion: implications for turbulent mixing and the scalar flux. Journal of Fluid Mechanics 359, 299–312.

Pope, S. B., 2000. Turbulent flows.

Santiago, J., Dejoan, A., Martilli, A., Martin, F., Pinelli, A., 2010. Comparison between Large-Eddy Simulation and Reynolds-averaged Navier–Stokes computations for the MUST field experiment. Part I: study of the flow for an incident wind directed perpendicularly to the front array of containers. Boundary-Layer Meteorology 135 (1), 109–132.

Sawford, B., 2004. Micro-mixing modelling of scalar fluctuations for plumes in homogeneous turbulence. Flow, Turbulence and Combustion 72 (2-4), 133–160.

Stohl, A., Forster, C., Frank, A., Seibert, P., Wotawa, G., 2005. The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 6.2. Atmospheric Chemistry and Physics 5 (9), 2461–2474.

Taylor, G. I., 1921. Diffusion by continuous movements. Proceedings of the London Mathematical Society 20, 196–211.

Thomson, D., 1987. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. Journal of Fluid Mechanics 180, 529–556.

Tinarelli, G., Mortarini, L., Castelli, S. T., Carlino, G., Moussafir, J., Olry, C., Armand, P., Anfossi, D., 2013. Review and validation of MicroSpray, a Lagrangian particle model of turbulent dispersion. Lagrangian Modeling of the Atmosphere, 311–328.

Villermaux, J., Devillon, J., 1972. Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide par un modele dinteraction phénoménologique. In: Proceedings of the 2nd International Symposium on Chemical Reaction Engineering. Vol. 26. Elsevier New York, pp. 1–13.

Yee, E., Biltoft, C. A., 2004. Concentration fluctuation measurements in a plume dispersing through a regular array of obstacles. Boundary-Layer Meteorology 111 (3), 363–415.

Yee, E., Gailis, R. M., Hill, A., Hilderman, T., Kiel, D., 2006. Comparison of wind-tunnel and water-channel simulations of plume dispersion through a large array of obstacles with a scaled field experiment. Boundary-Layer Meteorology 121 (3), 389–432.

7.2 Complément

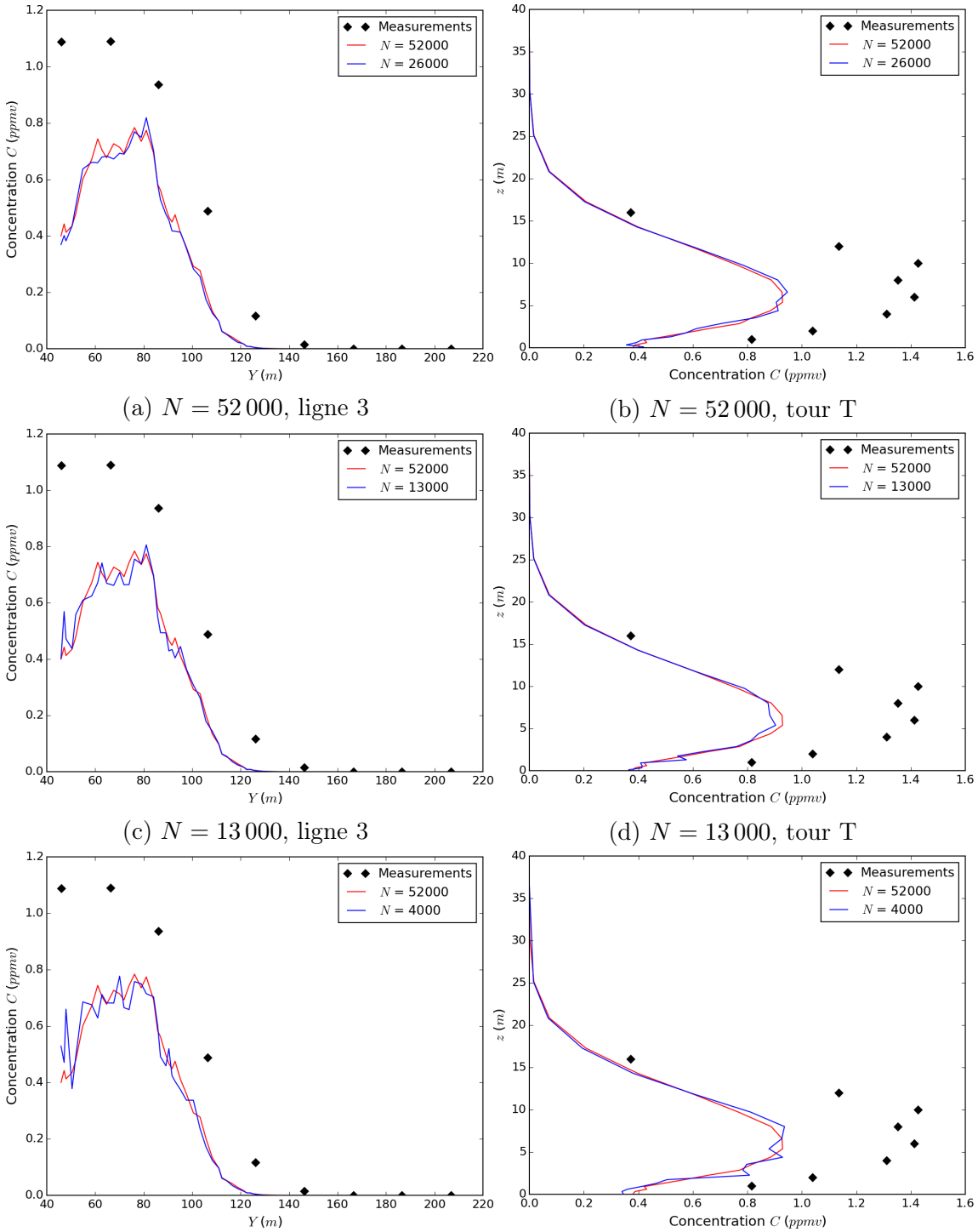
Ce paragraphe a pour objectif de réaliser une étude de sensibilité au nombre de particules, analoguement à notre étude du SIRTA (cf. chapitre 6). La procédure suivie est la même que celle suivie dans cette étude : nous sommes partis d'un nombre de particules conséquent afin d'assurer une bonne précision de nos calculs, puis nous avons souhaité observer l'influence de la diminution du nombre de particules sur la précision des résultats et le temps de calcul CPU.

Pour cette étude de sensibilité, nous avons sélectionné le cas neutre 2681829, avec la phase fluide calculée via le modèle $k-\epsilon$. Dans la simulation de ce cas présentée dans l'article Bahlali et al. (2018b), nous injections $N = 52\,000$ particules par seconde, pour un nombre total de 1 965 579 particules dans le domaine en fin de calcul. En plus de cette simulation, nous avons réalisé trois simulations supplémentaires, correspondant respectivement à : $N = 26\,000$, $N = 13\,000$ et $N = 4\,000$ particules injectées par seconde. Les nombres totaux de particules dans l'ensemble du domaine pour chacun de ces cas sont résumés en Table 7.1.

Pour réaliser nos comparaisons entre simulations, nous avons arbitrairement choisi une ligne et un mât de l'expérience : en l'occurrence, la ligne 3 et la tour T. Dans la Figure 7.1, nous montrons donc les profils obtenus pour l'ensemble des nouvelles simulations sur la ligne 3 et la tour T. A noter que dans chacune des sous-figures de la Figure 7.1, nous avons reproduit les profils correspondant aux résultats initialement obtenus avec $N = 52\,000$ particules injectées par seconde.

Nous observons des résultats très similaires entre $N = 52\,000$ et $N = 26\,000$ (Figures 7.1a et 7.1b), avec une très légère augmentation du bruit visible sur le profil relatif à la tour T (cf. Figure 7.1b). Au passage à $N = 13\,000$ (Figures 7.1c et 7.1d), l'augmentation du bruit est plus visible mais reste minime : ce cas pourrait tout à fait être exploitable dans un cadre opérationnel. En revanche, pour $N = 4\,000$ (Figures 7.1e et 7.1f), les courbes se dégradent et le bruit devient prédominant, en particulier sur la ligne 3 (cf. Figure 7.1e) : ces résultats ne sont pas exploitables.

En ce qui concerne les temps de calcul CPU, analoguement au cas du SIRTA en chapitre 6, nous avons tracé le graphe de la fonction reliant le temps de calcul CPU au nombre de particules simulées. Ce graphe est présenté en Figure 7.2. De même que pour le cas du SIRTA, nous observons un gain conséquent en temps de calcul pour les N grands, avec des gradients importants. Au fur et à mesure que N diminue, les gradients s'amenuisent et la réduction du nombre de particules devient ainsi moins intéressante vis-à-vis du temps de calcul CPU. Nous pouvons donc conclure, au vu de la bonne précision du calcul à $N = 13\,000$ (cf. Figures 7.1c et 7.1d) et du gain conséquent en



(a) $N = 52\,000$, ligne 3

(b) $N = 52\,000$, tour T

(c) $N = 13\,000$, ligne 3

(d) $N = 13\,000$, tour T

(e) $N = 4\,000$, ligne 3

(f) $N = 4\,000$, tour T

FIGURE 7.1 – Comparaison des profils de concentration (*ppmv*) sur les ligne 3 et tour T (cf. Figure 2 de l'article BAHLALI et al. (2018b)), en fonction du nombre de particules injectées par seconde N.

N	52 000	26 000	13 000	4 000
N_{total}	1 965 702	982 547	491 709	151 078

TABLE 7.1 – Résumé des simulations réalisées et des nombres de particules correspondants. N est le nombre de particules injectées par seconde, et N_{total} est le nombre de particules dans le domaine en fin de calcul.

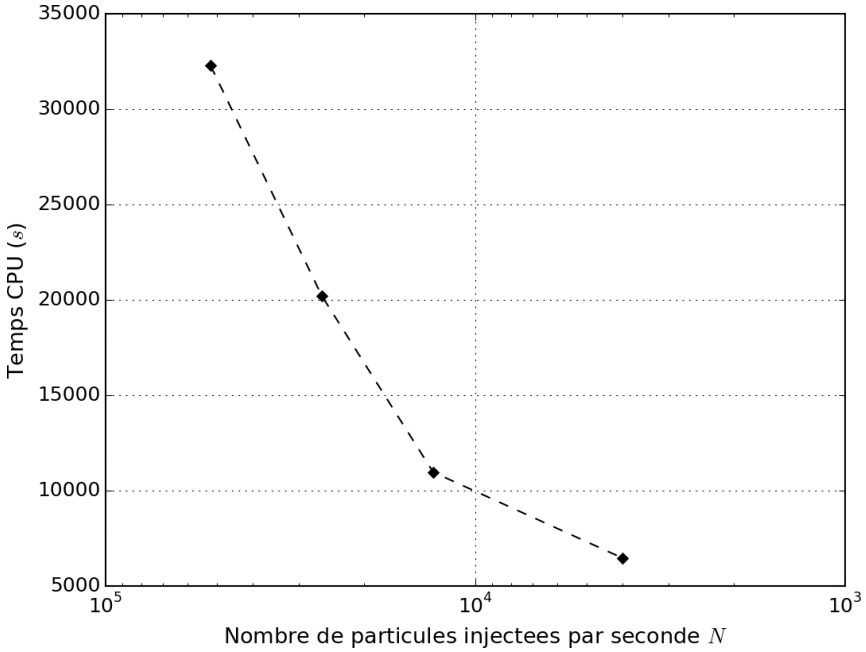


FIGURE 7.2 – Temps CPU (s) en fonction du nombre de particules injectées par seconde N, pour le cas neutre 2681829 de l'expérience MUST, avec un modèle $k - \epsilon$.

temps de calcul par rapport au cas initial à $N = 52\,000$ (nombre de particules divisé par 4 et temps de calcul divisé par 2.9), que cette option représente un bon compromis d'un point de vue opérationnel.

Conclusions et perspectives

Conclusions

Cette thèse, réalisée au CEREA, laboratoire commun EDF R&D-Ecole des Ponts ParisTech, avait pour objectif l'adaptation du modèle lagrangien stochastique du code CFD *Code_Saturne* pour la simulation de la dispersion atmosphérique de polluants à échelle locale. Les exemples typiques d'application pour EDF sont les cas de rejet accidentel au niveau de centrales de production, mais bien d'autres applications peuvent être étudiées via cette approche, comme la pollution liée au trafic urbain, ou bien les rejets normaux et continus provenant d'usines pour le ministère de la transition écologique et solidaire, l'autre tutelle du CEREA à travers l'Ecole des Ponts.

Plus précisément, l'approche suivie dans notre travail a suivi une formulation dite hybride eulérienne/lagrangienne, où les champs dynamiques moyens relatifs au vent (pression, vitesse, température, turbulence) sont calculés via une approche eulérienne, et sont ensuite fournis au solveur lagrangien. Ce type de formulation est couramment utilisé dans la littérature atmosphérique pour son efficacité numérique. Le modèle lagrangien stochastique considéré dans nos travaux est le *Simplified Langevin Model* (SLM), développé par Pope (1985, 2000). Ce modèle appartient aux méthodes communément appelées méthodes PDF (Probability Density Function), et, à notre connaissance, n'a pas été exploité auparavant dans le contexte de la dispersion atmosphérique de polluants. Pourtant, nous avons pu voir qu'il présente plusieurs avantages. Premièrement, sa formulation mathématique en termes de vitesses instantanées est très simple. En comparaison à la formulation en vitesses fluctuantes utilisée classiquement dans la littérature atmosphérique (cf. Thomson (1987)), nous avons vu que de nombreux termes inclus dans le terme de dérive du modèle de Langevin de la formulation en vitesses fluctuantes sont en fait l'équivalent du simple terme de gradient de pression moyen dans la formulation en vitesses instantanées. Rappelons que dans notre cas, nous utilisons la formulation en vitesses instantanées du SLM car nous avons accès au champ de pression moyen du fluide via *Code_Saturne*. Si celui-ci n'est pas disponible dans le code utilisé, la formulation en vitesses fluctuantes du SLM est préconisée. Par ailleurs, développé sur la base des équations de Navier-Stokes, le SLM assure une consistance

complète avec les équations moyennées de quantité de mouvement et les équations de transport des contraintes de Reynolds dites $R_{ij} - \epsilon$ avec fermeture turbulente de Rotta. Enfin, aucune hypothèse n'est faite sur la forme de la densité de probabilité associée au processus stochastique de la vitesse des particules, qui précisément *est* un résultat du modèle, à l'inverse de nombre de modèles historiquement utilisés dans la littérature atmosphérique.

Notre travail de thèse s'est articulé en plusieurs étapes. Après avoir bâti notre stratégie de modélisation lagrangienne de la dispersion autour du SLM, nous nous sommes attachés à vérifier que ce modèle respectait bien le critère dit de mélange homogène (Thomson, 1987). Ce critère, essentiel pour juger de la bonne qualité d'un modèle lagrangien stochastique, correspond au fait que si des particules sont initialement uniformément réparties dans un fluide incompressible, alors elles doivent le rester. En particulier, nous avons vérifié le bon respect du critère de mélange homogène pour trois cas de turbulence inhomogène représentatifs d'une large gamme d'applications pratiques : une couche de mélange, un canal plan infini, ainsi qu'un cas de type atmosphérique mettant en jeu un obstacle au sein d'une couche limite et impliquant une double recirculation de l'écoulement. Nous avons montré que le bon respect du critère de mélange homogène réside simplement en la bonne introduction du terme de gradient de pression en tant que terme de dérive moyen dans le modèle de Langevin (Pope, 1987; Minier et al., 2014; Bahlali et al., 2018c), indépendamment de la modélisation choisie pour la partie fluctuante de ce modèle. Cette approche simplifie également l'analyse des modèles de Langevin en proposant une vision unidirectionnelle dans laquelle les densités de probabilité eulériennes sont dérivées des lagrangiennes, et non l'inverse, tout en garantissant que la formulation est toujours consistante avec les équations moyennées de Navier-Stokes et la condition d'incompressibilité.

Cette condition d'incompressibilité, dans les modèles à particules (les modèles dits "stand-alone" ou SPH sont aussi concernés), est reflétée par une double condition : la vitesse moyenne dérivée des vitesses des particules doit être à divergence nulle, et la concentration moyenne dérivée des positions des particules doit rester constante. Dans la pratique, ceci se traduit par une double correction : d'abord, une première correction avec l'introduction du gradient de pression moyen calculé à partir de la condition de divergence nulle de l'écoulement fluide moyen, puis dans un second temps avec une étape de correction des positions des particules.

Parallèlement à ce travail, nous avons également discuté du problème de consistance entre champs eulériens et lagrangiens dans les formulations dites hybrides eulériennes/lagrangiennes (analyse détaillée dans Bahlali et al. (2018c)). Nous avons notamment montré, par des simulations numériques dans une couche limite neutre,

les erreurs pouvant potentiellement être générées lorsque les modèles de turbulence eulérien et lagrangien ne sont pas consistants. Cependant, dans les applications industrielles, il n'est pas toujours possible de travailler avec un modèle $R_{ij} - \epsilon$ Rotta (*i.e.*, pour rappel, le modèle complètement consistant avec le SLM) pour le calcul de la phase fluide. Dans ce travail de thèse, nous avons donc, en gardant à l'esprit les erreurs possiblement générées par ce type d'inconsistance de modèles de turbulence, également fait des comparaisons sur certaines études avec le modèle du premier ordre $k - \epsilon$ pour la phase fluide.

Suite à cela, nous avons réalisé un second cas de vérification, correspondant à un rejet de polluant ponctuel et continu, en conditions de vent uniforme et turbulence homogène. Dans ces conditions, nous disposons en effet d'une solution analytique nous permettant une vérification précise. Nous avons observé que dans ce cas, le modèle lagrangien SLM discrimine bien les deux différents régimes de diffusion de champ proche et champ lointain, ce qui n'est pas le cas du modèle eulérien à viscosité turbulente auquel nous nous sommes comparés (voir Bahlali et al. (2018b)). Ce résultat pour ce modèle eulérien était attendu, car il a déjà été montré que les modèles du premier ordre à gradient simple ne sont pas capables de capturer l'évolution correcte de diffusion donnée par Taylor (1921) près de la source, puisque cette région correspond à la limite de temps pour laquelle le régime diffusif n'a pas encore été atteint. En fait, il s'agit là de l'une des conclusions importantes de ce travail de thèse : les modèles eulérien et lagrangien sont assez régulièrement comparés l'un à l'autre en tant qu'approches globales, parfois sans précisions sur le degré de fermeture turbulente auxquels ils sont associés. De manière générale, lorsque l'on se réfère aux modèles lagrangiens dans la littérature relative à la dispersion atmosphérique de polluants, il s'agit généralement de modèles simulant les *vitesses* des particules comme des processus de diffusion, ce qui, par construction, leur confère un statut de modèle au second ordre (ce sont les modèles dits de type Langevin). En revanche, un modèle lagrangien simulant les positions des particules comme des processus de diffusion est un modèle du premier ordre, et est donc équivalent à un modèle eulérien à viscosité turbulente. En résumé, les comparaisons eulériennes/lagrangiennes ne devraient pas porter uniquement sur les approches en elles-mêmes, mais également insister sur le niveau de fermeture turbulente considéré.

Enfin, nous avons travaillé sur la validation du modèle sur plusieurs campagnes expérimentales en atmosphère réelle, en tenant compte de la stratification thermique de l'atmosphère et de la présence de bâtiments. Le premier programme expérimental considéré dans nos travaux concerne le site du SIRTA (Site Instrumental de Recherche par Télédétection Atmosphérique), dans la banlieue sud de Paris, et met en jeu un rejet ponctuel et continu de propylène, sous une stratification stable de la couche limite atmosphérique. Dans ce travail, nous avons mis en évidence une échelle intégrale

lagrangienne T_L faible au niveau de la source, ce qui, en conséquence, a induit une région dite de "champ proche" (correspondant aux distances inférieures à $T_L \times |\mathbf{U}_f| \approx 12$ m) réduite. Au-delà de cette zone, nous avons vu que les modèles eulérien à diffusivité turbulente et lagrangien de type Langevin prédisent la même évolution de diffusion.

La seconde campagne étudiée pour validation du modèle est l'expérience MUST (*Mock Urban Setting Test*). Réalisée aux Etats-Unis, dans le désert de l'Utah, cette expérience a pour but de représenter une ville idéalisée, au travers d'un ensemble de lignées de conteneurs. Deux rejets ont été simulés et analysés, respectivement en conditions d'atmosphères neutre et stable et ont été le sujet de l'article Bahlali et al. (2018a). Pour cette étude, nous avons calculé les champs fluides moyens, soit par un modèle $k-\epsilon$, soit par un modèle $R_{ij}-\epsilon$, afin de disposer également d'une étude de sensibilité au modèle de turbulence. Dans ce travail, nous avons également pu mettre en évidence une échelle de temps lagrangienne très faible au niveau de la source, d'où un champ proche restreint et un champ lointain très vite atteint, dans lequel les modèles eulérien et lagrangien prédisent la même évolution de diffusion. Ensuite, nous avons montré que le réseau de conteneurs induit une déviation du panache, comme déjà observé par Milliez et Carissimo (2007) dans *Code_Saturne* également, et par Castelli et al. (2017) dans une autre méthodologie. Nous avons observé que cette déviation de panache est plus prononcée lorsque la phase fluide est calculée via un modèle de turbulence $R_{ij}-\epsilon$. Il a également été noté que le l'usage du modèle $R_{ij}-\epsilon$ permettait d'avoir une meilleure représentation de l'influence des obstacles sur les profils de concentration. Pour le cas de stratification neutre, l'accord entre résultats de simulation et mesures est globalement satisfaisant, pour les deux approches eulérienne et lagrangienne ainsi que pour les deux modèles de turbulence utilisés pour la phase fluide. Pour le cas de stratification stable, nous avons obtenu des résultats en meilleur accord avec les mesures lorsque le modèle $k-\epsilon$ était utilisé. Des recherches plus approfondies sont nécessaires sur ce sujet.

Cette thèse a donné lieu à un article accepté pour publication et à deux articles soumis dans des revues internationales à comité de lecture.

Perspectives

En perspectives de ce travail, il serait intéressant de se pencher sur plusieurs thématiques.

La première serait de poursuivre le développement d'un modèle eulérien second ordre pour les fluctuations et les flux turbulents de concentration, dit DFM (*Differential Flux Model*). En effet, s'agissant du modèle eulérien équivalent aux modèles lagrangiens

de type Langevin, il serait alors possible de comparer rigoureusement les performances des deux approches, en commençant par le cas de vérification correspondant au rejet ponctuel et continu en turbulence homogène, puis en élargissant la validation aux cas industriels étudiés au cours de ces travaux par exemple.

D'une manière plus générale, sans lien avec la modélisation des fluctuations de concentration, il serait intéressant de pouvoir généraliser l'usage du modèle $R_{ij}-\epsilon$ pour le calcul de la phase fluide dans les applications industrielles d'EDF. En effet, ce modèle permettrait de mieux prendre en compte l'anisotropie de la turbulence atmosphérique. Cela a été un point nouveau réalisé dans cette thèse dans le cadre de la validation sur l'expérience MUST (cf. chapitre 7), car les résultats de Milliez et Carissimo (2007, 2008) étaient basés uniquement sur le modèle $k-\epsilon$ pour la phase fluide. Cependant, par manque de temps, nous n'avons pas pu réaliser d'études avec le modèle $R_{ij}-\epsilon$ pour le cas du SIRTA, puisque ce cas implique des formulations pour les termes sources de turbulence des zones forestières qu'il s'agit d'abord d'adapter au modèle $R_{ij}-\epsilon$.

Un point qui n'a pas été traité au cours de cette thèse est la modélisation des fluctuations de concentration au sein du modèle lagrangien. Nous avions évoqué, en chapitre 3 les différentes possibilités de modèles, notamment les modèles dit de micro-mélange (par exemple, le modèle IEM – *Interaction by Exchange with the Mean* – couramment utilisé dans la littérature). Il serait très intéressant d'implémenter ce type de modèles : en effet, les campagnes expérimentales MUST et SIRTA disposent toutes deux de mesures de variances de concentration que nous pourrions en ce sens continuer d'exploiter. Pour la campagne du SIRTA, nous pouvons aussi aller plus loin grâce à la colocalisation des mesures de concentration (PID) et de turbulence (anémomètres ultrasoniques) et ainsi également comparer les flux $\langle U'_{f,i}c'\rangle$.

Pour aller plus loin, le SLM, malgré sa simplicité, présente certaines limitations (limitations, par ailleurs, identiques à celles d'un modèle eulérien $R_{ij}-\epsilon$ utilisant la fermeture de Rotta) : entre autres, le terme de retour à l'équilibre est supposé isotrope, ce qui n'est pas complètement représentatif des mouvements verticaux atmosphériques. Nous pourrions, par exemple, en restant dans le cadre de la classe de modèles GLM (*Generalized Langevin Model*, cf. chapitre 3), considérer une autre sous-classe de modèle, comme par exemple le modèle LRR-IP (*Launder, Reece, Rodi - Isotropization of Production*, cf. Pope (2000)), qui définit la matrice G_{ij} d'une autre manière [1].

Cette autre formulation de G_{ij}, correspondant au modèle LRR-IP, est la somme

1.
$$G_{ij} = -\frac{1}{2}C_R\frac{\epsilon}{k}\delta_{ij} + C_2\frac{\partial\langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_j}\ , \tag{7.1}$$

où $C_R = 1+\frac{3}{2}C_0 - C_2\frac{\mathcal{P}}{\epsilon}$ avec $\mathcal{P} = \frac{1}{2}(\mathcal{P}_{11}+\mathcal{P}_{22}+\mathcal{P}_{33})$, le terme de production turbulente, qui, pour

d'une nouvelle contribution dite "d'isotropisation de la production" (en rouge dans l'équation (7.1)) et d'une contribution isotrope correspondant au modèle de Rotta (en noir dans l'équation (7.1)). En "coupant" le nouveau terme en rouge, qui conduit en fait à un terme additionnel $C_2\mathcal{P}_{ij}$ dans les équations de transport $R_{ij} - \epsilon$ équivalentes, on se ramène bien au SLM.

Il est raisonnable de penser que ce modèle, un peu plus complexe que le SLM mais néanmoins conservant une forme relativement simple, pourrait améliorer la qualité des résultats obtenus dans ces travaux, de par l'ajout d'anisotropie au niveau des fluctuations de vitesse des particules. Il serait donc une piste intéressante à étudier en perspective de ce travail de thèse.

rappel, s'écrit comme suit :

$$\mathcal{P}_{ij} = -\langle U'_{f,i}U'_{f,k}\rangle \frac{\partial \langle U_{f,j}\rangle}{\partial x_k} - \langle U'_{f,i}U'_{f,k}\rangle \frac{\partial \langle U_{f,i}\rangle}{\partial x_k} \ . \tag{7.2}$$

Annexe A

Relation entre échelles eulérienne et lagrangienne

Hanna (1981) explique dans ses travaux que l'un des problèmes fondamentaux au regard des phénomènes de diffusion turbulente est la relation entre les repères de référence eulérien et lagrangien pour la mesure de la turbulence. Les mesures lagrangiennes sont des mesures réalisées par le suivi de particules d'air entraînées par le vent. Quant aux mesures eulériennes, ce sont des mesures effectuées par un instrument dont la position est fixe dans l'espace, comme un anémomètre par exemple. Naturellement, la mesure lagrangienne est bien plus ardue que la mesure eulérienne, étant donné qu'il s'agit de disposer d'un instrument se déplaçant continûment dans l'espace. Dans l'article intitulé *"Lagrangian and Eulerian time-scale relations in the daytime boundary layer"*, Hanna (1981) propose par exemple de faire usage de ballons (standards ou tétraédriques) et de les suivre dans leur mouvement dans l'atmosphère via des théodolites ou des radars Doppler, sur une durée d'environ 25 minutes. Cette approche avait déjà été utilisée auparavant dans la littérature, avec les travaux de Gifford (1955) et de Angell et al. (1971).

Comme l'explique Hinze (1975), même s'il peut sembler assez intuitif que les mesures de la turbulence lagrangienne et eulérienne soient mathématiquement liées (puisqu'elles sont tirées du même champ turbulent), il n'est pas simple de le prouver théoriquement. Pour ce faire, il faut poser quelques hypothèses. La première hypothèse a été historiquement introduite par Gifford (1955) et Hay et Pasquill (1959), puis a été validée par les expériences de Angell et al. (1971) et Hanna (1981). Elle consiste à supposer que les fonctions d'autocorrélation eulérienne et lagrangienne sont "similaires en forme, mais décalées par un facteur d'échelle", qui précisément *est* le facteur β. Cela se traduit mathématiquement de la façon suivante :

$$R_{L,i}(\beta\tau) = R_{E,i}(\tau) \ , \tag{A.1}$$

où $R_{E,i}$ et $R_{L,i}$ sont respectivement les fonctions d'autocorrélation eulérienne et lagrangienne définies par :

$$R_{E,i}(\tau) = \frac{\langle U_{f,i}(\mathbf{x},t)U_{f,i}(\mathbf{x},t+\tau)\rangle}{\langle U_{f,i}^2(\mathbf{x},t)\rangle} \tag{A.2}$$

et :

$$R_{L,i}(\tau) = \frac{\langle U_{p,i}(t)U_{p,i}(t+\tau)\rangle}{\langle U_{p,i}^2(t)\rangle} \ . \tag{A.3}$$

La première moyenne est une moyenne sur l'ensemble des réalisations de l'écoulement, à un certain point $\mathbf{x}$, tandis que la seconde est une moyenne de type Monte-Carlo sur l'ensemble des particules.

Les échelles de temps intégrales sont ensuite définies par :

$$T_{E,i} = \int_0^\infty R_{E,i}(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{A.4}$$

et :

$$T_{L,i} = \int_0^\infty R_{L,i}(\tau)\mathrm{d}\tau \ . \tag{A.5}$$

Remarquons que l'autocorrélation eulérienne est une donnée locale, puisqu'elle est calculée à une certaine position $\mathbf{x}$. Si nous plaçons des sondes à différents endroits de l'écoulement, nous pouvons avoir différentes autocorrélations, ce qui est logique puisque l'autocorrélation des vitesses est un paramètre intrinsèquement lié au champ turbulent. Nous pouvons faire la même remarque pour l'autocorrélation lagrangienne : si nous réalisons des statistiques locales et non sur tout le domaine, celle-ci pourra différer selon les points locaux envisagés. Cela signifie, comme l'expliquent Anfossi et al. (2006), que ce champ turbulent doit être approximativement homogène si nous souhaitons obtenir des échelles de temps uniques. Si nous sommes dans le cas d'une turbulence très inhomogène, nous devrons définir les valeurs de $T_{E,i}$ et $T_{L,i}$ comme des fonctions de l'espace – et en particulier, dans le cas de la couche limite atmosphérique, de l'altitude (Rodean, 1996).

Outre l'hypothèse donnée par l'équation (A.1), la seconde hypothèse pour obtenir une expression mathématique de la relation entre échelle de temps lagrangienne et eulérienne est de supposer que le ratio β est proportionnel à l'inverse de l'intensité turbulente (Gifford, 1955; Corrsin, 1963) :

$$\beta = \frac{\gamma}{I} \ , \tag{A.6}$$

β	Source	Commentaire
$0.8/I$	Saffman (1963)	Petites valeurs de I
$0.7/I$	Hanna (1981)	Atmosphère convective
$0.4/I$	Gifford (1955) Angell et al. (1971)	Atmosphère neutre
$0.44/I$	Wandel et Kofoed-Hansen (1962)	Développements théoriques
$1+1.12/I$	Gifford (1955)	–
$0.35\sqrt{1+1/I^2}$	Philip (1967)	–
$0.39(1+1/I)$	Lee et Stone (1983)	–
$C_K^{3/2}/C_0$	Maurizi et al. (2004)	Sous-couche inertielle

Table A.1 – Différentes valeurs du ratio β dans la littérature.

où l'intensité turbulente I est définie par :

$$I = \frac{\sigma}{\langle U \rangle} \ . \tag{A.7}$$

Dans l'expression de I (A.7), la notation σ représente l'écart-type de la vitesse : $\sigma = \sqrt{\frac{1}{3}(\sigma^2_{U_{f,x}} + \sigma^2_{U_{f,y}} + \sigma^2_{U_{f,z}})}$. $\langle U \rangle$ représente la norme de la moyenne de la vitesse :

$$\langle U \rangle = \sqrt{\langle U_{f,x} \rangle^2 + \langle U_{f,y} \rangle^2 + \langle U_{f,z} \rangle^2} \ . \tag{A.8}$$

Moyennant ces deux hypothèses, nous résumons la relation entre échelles lagrangienne et eulérienne :

$$\frac{T_{L,i}}{T_{E,i}} = \beta = \frac{\gamma}{I} \ , \tag{A.9}$$

où γ est une constante comprise entre 0.35 et 0.8 (Anfossi et al., 2006).

Cette relation est aujourd'hui largement utilisée dans le cadre d'études de dispersion au sein de la couche limite atmosphérique (Anfossi et al., 2006). Hanna (1981), par exemple, au travers de ses expériences avec des ballons en atmosphère convective, trouve une valeur de γ d'environ 0.7.

Cependant, d'autres expressions de β en fonction de l'intensité turbulente I peuvent être retrouvées dans la littérature, fruits des travaux notamment de Gifford (1955), Philip (1967), Baldwin et Johnson (1972), Saffman (1963) et Lee et Stone (1983). Anfossi et al. (2006) font une revue de quelques différentes propositions que nous pouvons résumer dans la Table A.1.

La proposition de Anfossi et al. (2006) dans l'article *"Estimation of the ratio*

between the Lagrangian and Eulerian time scales in an atmospheric boundary layer generated by large eddy simulation" a été de réaliser une simulation LES de la turbulence dans trois conditions de stabilité de l'atmosphère (deux cas d'atmosphère convective avec deux valeurs de vitesse de vent différentes, et un cas d'atmosphère neutre) afin de tester si ces relations étaient valides et pouvaient être utilisées "en toute confiance" dans le cadre d'applications pratiques. De bons résultats ont été obtenus, en accord avec les expériences et les développements théoriques menés auparavant dans la littérature.

Il est à noter que Anfossi et al. (2006) n'ont pas tenu compte dans leurs travaux de la contribution des vitesses de sous-maille dans le calcul des trajectoires des particules. Ils justifient ce choix en remarquant que comme le but est d'obtenir les échelles intégrales eulérienne et lagrangienne et que celles-ci sont associées aux plus grandes échelles du mouvement, échelles explicitement résolues par la LES, les vitesses de sous-maille sont alors en première approximation "sans importance" (Anfossi et al., 2006; Wang et al., 1995). Nous pouvons également reprendre l'argument de Townsend (1980) et Tennekes et Lumley (1972) (voir chapitre 2), qui affirment pour rappel que les écoulements turbulents diffèrent les uns des autres principalement par leurs grandes structures tourbillonnaires et que les petites échelles sont quant à elles statistiquement similaires quel que soit l'écoulement. Finalement, Anfossi et al. (2006) citent également Armenio et al. (1999) qui, suite à des recherches sur les effets des modèles de sous-maille sur le mouvement des particules via une comparaison DNS/LES, affirment que "le mouvement d'une particule est gouverné par les grandes structures porteuses d'énergie, et l'effet du champ de vitesse fluctuant à petite échelle est négligeable", d'où l'aspect peu important de la paramétrisation sous-maille.

La méthode employée par Anfossi et al. (2006) a été de calculer les fonctions d'autocorrélation $R_{E,i}$ et $R_{L,i}$ via simulation LES, puis d'estimer les échelles $T_{E,i}$ et $T_{L,i}$ comme étant les temps requis par les fonctions d'autocorrélation pour atteindre la valeur $1/e = 0.37$. Mito et Hanratty (2002), notamment, pour des calculs de dispersion lagrangienne dans un canal via DNS, affirment en effet qu'il s'agit d'une bonne approximation de l'intégrale temporelle de l'autocorrélation. β a ensuite pu être calculé en faisant le rapport $T_{L,i}/T_{E,i}$. Par ailleurs, le champ de $1/I$ a également été calculé, pour enfin pouvoir tracer $\beta = f(1/I)$. En réalisant un ajustement de la courbe obtenue aux différentes expressions de la littérature de β en fonction de I (voir Table A.1), Anfossi et al. (2006) obtiennent des résultats relativement bons – sauf pour les relations de type "$\beta = 1 + c/I$" –, confirmant ainsi les précédents développements.

Cette approche LES pour estimer le ratio β dans la couche limite atmosphérique avait déjà été proposée auparavant par Rizza et al. (2004) qui donnèrent quelques résultats préliminaires, ainsi que Dosio et al. (2005). Le développement des machines

parallèles permettent aujourd'hui des calculs de haute résolution et font de la LES l'approche la plus réaliste pour simuler des écoulements à hauts nombres de Reynolds, c'est pourquoi il s'agit d'une base de données intéressante à étudier pour l'estimation du ratio β. Quant aux simulations DNS, utilisées par Mito et Hanratty (2002) par exemple, si elles ont l'avantage de résoudre explicitement toutes les échelles de la turbulence, elles se limitent à de faibles nombres de Reynolds, excluant donc le cas de la couche limite atmosphérique d'intérêt pour nos travaux.

Annexe B

Article : Une méthode hybride CFD RANS/lagrangienne PDF pour modéliser la dispersion atmosphérique de polluants en géométrie urbaine complexe

Cet article a été accepté pour publication dans *International Journal of Environment and Pollution*. Il rappelle d'abord des considérations théoriques sur les modèles eulérien et lagrangien de dispersion utilisés dans nos travaux. Il traite ensuite des cas de vérification du modèle lagrangien SLM : quelques éléments sur le critère de mélange homogène, puis le rejet ponctuel et continu en vent uniforme et turbulence homogène. Finalement, un cas de validation de rejet en atmosphère réelle est étudié : il s'agit de la POI n°11 du site du SIRTA, mettant en jeu une stratification stable de la couche limite atmosphérique.

A hybrid CFD RANS/Lagrangian approach to model atmospheric dispersion of pollutants in complex urban geometries

Meïssam L. Bahlali*, Eric Dupont, Bertrand Carissimo

CEREA,
Joint laboratory École des Ponts ParisTech/EDF R&D,
Université Paris-Est,
Marne-la-Vallée, France
E-mail: meissambahlali@gmail.com
E-mail: eric.dupont@edf.fr
E-mail: bertrand.carissimo@enpc.fr
*Corresponding author

Abstract Lagrangian atmospheric dispersion models consist in tracking the trajectories of particles of pollutant emitted into the atmosphere. In this paper, the objective is to compare the Lagrangian and Eulerian dispersion models in the same computational fluid dynamics code (*Code_Saturne*), therefore using the same wind and turbulence fields for both. The Lagrangian stochastic model used in this work is the *simplified Langevin model* (SLM) of Pope (1985, 2000) and pertains to the approaches referred to as probability density function methods. This model has been extensively used in turbulent combustion or multiphase flows, but to our knowledge, it has not been used in atmospheric dispersion applications. First, we show that the SLM respects the well-mixed criterion. Then, we validate the model in the case of a continuous point release with uniform mean wind speed and turbulent diffusivity. Finally, we validate the model with an experimental campaign involving a stably stratified surface layer.

Keywords: atmospheric dispersion, Lagrangian stochastic modeling, turbulence, CFD, environmental pollution.

Reference to this paper should be made as follows: Bahlali, M. L., Dupont, E. and Carissimo, B. (201X) 'A hybrid CFD RANS/Lagrangian approach to model atmospheric dispersion of pollutants in complex urban geometries', *International Journal of Environment and Pollution*, Vol. x, No. x, pp.xxx–xxx.

Biographical notes: Meïssam L. Bahlali is an Engineer and has a Master's degree in Fluid Mechanics and Energy Science. She is also a PhD student at CEREA on the subject of 'Adaptation of the hybrid Eulerian/Lagrangian stochastic model of the CFD code *Code_Saturne* to pollutant atmospheric dispersion at the micro-meteorological scale and comparison with the Eulerian method'.

Copyright © 2009 Inderscience Enterprises Ltd.

Eric Dupont is an Expert Scientist at CEREA and EDF R&D and specializes in dynamics of the lower atmosphere. His work focuses on the modeling of atmospheric flows and pollutant dispersion at different spatial scales (from mesoscale to microscale).

Bertrand Carissimo is a Senior Scientist at CEREA and EDF R&D and specializes in atmospheric environment. His work focuses on micro-meteorological modeling as well as pollutant dispersion at very local scale around industrial sites and wind farms.

This paper is a revised and expanded version of a paper entitled 'Adaptation of the Lagrangian module of a CFD code for atmospheric dispersion of pollutants in complex urban geometries and comparison with existing Eulerian results' presented at the 18th International conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Bologna, Italy, 9-12 October 2017.

Introduction

A cloud of pollutants released into the atmosphere is subject to various processes, among which the two main processes involved in this paper are: advection and diffusion. By definition, the turbulent dispersion is characterized by the combination of advection and turbulent diffusion. This phenomenon is highly dependent on turbulent flow characteristics. There is indeed a wide range of eddies in the atmospheric boundary layer and they all participate in their own way to the transport and diffusion of the cloud. In particular, the turbulent dispersion of the pollutants is not as effective close to the emission source as opposed to further away: the difficulty of its modeling therefore amounts to correctly take into account the effect of the different turbulent structures. In this work, the focus is on the atmospheric dispersion modeling at local scale (urban or industrial sites), *i.e.*, for distances of the order of a few kilometers.

The so-called Eulerian models of dispersion are based on the resolution of the advection-diffusion equation on a scalar field corresponding to the concentration of pollutant. This is done by performing a discretization of this equation in time and space on a mesh. Eulerian models have been used so far at EDF R&D (*Electricité de France*) to model atmospheric dispersion, by means of the computational fluid dynamics (CFD) code *Code_Saturne* and making use of its atmospheric module. On the other hand, the Lagrangian models consist in calculating and tracking the trajectories of particles in a turbulent flow. The cloud of pollutants is discretized and described by a large number of particles emitted into the atmosphere. In this work, the objective is to make use of both the Lagrangian and the atmospheric modules of *Code_Saturne* to model the turbulent dispersion of pollutants with the Lagrangian approach and compare it to the existing results previously obtained with the Eulerian methods.

Methodology

Code_Saturne (`http://code-saturne.org/`) is an open-source CFD code, developed at EDF R&D since 1997. It solves the general equations of fluid mechanics (*i.e.*, continuity equations, momentum, energy and turbulence) using numerical methods and turbulence models. These equations are solved on all types of meshes, including complex unstructured meshes. More details on the numerical methods implemented in the code are provided in Archambeau et al. (2004).

The methodology for stationary dispersion simulations in *Code_Saturne* is the following. Two calculations are performed. The first calculation is used to calculate the dynamical mean fields associated to the wind flow ('*continuous phase*'): velocity, pressure, temperature and turbulence. Once the steady state is reached, this calculation is stopped. The second calculation simulates the dispersion of pollutants within the pre-calculated flow field ('*dispersed phase*'), thus at frozen velocity, pressure and temperature and turbulence fields. The Eulerian and Lagrangian methods used in our work for the dispersion calculation are detailed subsequently. The turbulence models used for our studies are Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) models with classical first-order $k-\epsilon$ or second-order $R_{ij}-\epsilon$ closures adapted to the atmosphere and complex geometries.

Eulerian approach

If we consider a species of concentration c within the pre-calculated flow (assumed to be incompressible), *Code_Saturne* will solve the following advection-diffusion equation:

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \langle U_{f,j} \rangle \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} - \langle U'_{f,j} c' \rangle \right) + \langle S \rangle \ , \tag{1}$$

where $\langle U_{f,j} \rangle$ is the mean velocity of the fluid along the j axis, D the molecular diffusivity and $\langle S \rangle$ the source term.

Lagrangian approach

Let $\mathbf{X}_p(t)$ be the position of a particle included in the air flow at a time t. Then: $d\mathbf{X}_p = \mathbf{U}_p(t)\ dt$. The movement of each particle included in the flow described by $\mathbf{U}_p(t)$ is governed by Newton's second law. Assuming heavy particles, with a diameter of the same order of magnitude as the Kolmogorov length scale, the equation obtained on the particle velocity is (Minier and Peirano, 2001):

$$\frac{d\mathbf{U}_p}{dt} = \frac{\mathbf{U}_s - \mathbf{U}_p}{\tau_p} + \mathbf{g} \ , \tag{2}$$

where $\mathbf{U}_s$ is the velocity of the fluid sampled through the trajectory of the particle ($\mathbf{U}_s(t) = \mathbf{U}_f(\mathbf{X}_p(t)), t)$), and τ_p the relaxation timescale of the particle. When τ_p tends to zero, $\mathbf{U}_s$ tends to $\mathbf{U}_p$ and the limiting case of fluid particles is reached. Thus, every type of particles can be simulated, from gaseous particles to particulate matter.

As the wind flow is calculated using RANS models, we only have access to the statistical mean value of $\mathbf{U}_s$. Thus, in order to close (2), the turbulence effects need to be reconstructed: this is done by introducing a stochastic differential equation modeling the evolution of $\mathbf{U}_s$.

The Simplified Langevin Model (Pope, 1985, 2000)

For the sake of simplicity, let us consider the case of fluid particles, *i.e.*, $\mathbf{U}_s = \mathbf{U}_p$. Then the simplified Langevin model (SLM) writes as follows:

$$dU_{p,i} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i}\,dt - \frac{U_{p,i} - \langle U_{f,i} \rangle}{T_L}dt + \sqrt{C_0 \epsilon}\,dW_i \ , \tag{3}$$

where $\dfrac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i}$ is the mean pressure gradient, C_0 a constant, ϵ the mean dissipation and dW_i a Wiener process of mean 0 and variance dt. Also: $T_L = \dfrac{1}{\frac{1}{2} + \frac{3}{4}C_0}\dfrac{k}{\epsilon}$ is the 'Lagrangian timescale' which actually stands for a particle return-to-isotropy timescale. In the case of the simplified Langevin model, it is isotropic.

It should be noted that the simplified Langevin model is a particular case of the *Generalized Langevin Model* also introduced in (Pope, 1985, 2000), which writes as follows:

$$dU_{p,i} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial \langle P \rangle}{\partial x_i}dt + G_{ij}(U_{p,j} - \langle U_{f,j} \rangle)\,dt + \sqrt{C_0 \epsilon}\,dW_i \ . \tag{4}$$

Writing $G_{ij} = -1/T_L \delta_{ij}$, the SLM is retrieved. The SLM has been extensively used especially in turbulent combustion modeling (see Pope (1985, 1991)), in single-phase flow turbulence modeling (Pope, 1994), and also in dispersed turbulent two-phase flows applications (Minier and Peirano, 2001; Minier, 2015). It has also been adapted and used in the context of large-eddy simulation (LES) turbulent dispersion studies, see, for example, Gicquel et al. (2002) or Shotorban and Mashayek (2006).

On the other hand, to our knowledge, this formulation of model with the pressure gradient has not been widely used in the context of atmospheric dispersion. There are several reasons why we have chosen to go further developing it. First, it is written in terms of instantaneous velocity which allows a very simple formulation with the mean pressure-gradient term clearly included in the drift term. It should be highlighted that the presence of this mean-pressure gradient term is what allows the mean-continuity equation to be respected and thus ensures the model to be free of spurious drifts (Pope, 1987; Minier et al., 2014). Historically, in atmospheric studies, to make up for observed spurious drifts in their models, written in terms of fluctuating velocity, several authors heuristically added ad-hoc drift terms (see Lin and Gerbig (2013)). This made the formulation of their models much more complex than if they were written in terms of instantaneous velocity only with the pressure-gradient term. Indeed, the latter formulation requires the calculation of only 3 gradients, one for each direction, instead of 18 with the formulation written in terms of fluctuating velocity, used by Thomson (1987) for example. Moreover,

by construction (see Pope (2000)), the simplified Langevin model ensures full consistency with the mean Navier-Stokes and the Reynolds equations with Rotta's closure. Finally, no hypothesis is made on the probability density function (PDF) of the velocity of the particles, which was not the case of many of the models used in the atmospheric literature. For instance, Thomson (1987) and derived models assumed the PDF to be Gaussian, but this hypothesis is no longer valid when we move to convective atmospheric boundary layer cases. In these cases, several models following the Thomson (1987) approach and based on non-Gaussian PDFs have been developed: the reader may for example refer to Baerentsen and Berkowicz (1984), Luhar et al. (1996), Rotach et al. (1996). Another strategy for the convective boundary layer has been proposed in Franzese et al. (1999) and makes no assumption on the form of the PDF of the velocity. Instead, they introduce a simple parameterization for the drift term in the Langevin equation by approximating it as a quadratic function of velocity. In the case of the SLM, and more generally in the PDF framework developed by Pope, the PDF is a result of the model. It should be noted that no study in highly skewed turbulence conditions has yet been conducted with the SLM, which thus could be the subject of interesting further investigations.

Note that as we have mentioned, in our methodology, we use the formulation of the SLM with instantaneous velocity, that is with the mean-pressure gradient term, because we have access to the fluid mean pressure field through the *Code_Saturne* RANS simulation. In many other models used in the literature, the wind field is computed by a different large hydrostatic scale code, or by a wind field reconstruction code from the measurements. In these cases, the formulation in fluctuating velocity of the SLM, involving the mean quantities $\langle U_{f,i} \rangle$ and $\langle U'_{f,i} U'_{f,j} \rangle$ instead of the mean-pressure gradient term, is recommended. More details on the equivalence between models written in terms of instantaneous and fluctuating velocities can be found in Minier et al. (2014).

Well-mixed criterion

The well-mixed criterion states that an initially uniform particle concentration in a turbulent flow should remain uniform. In this section, we will show that the SLM respects this criterion. We studied two cases respectively corresponding to homogeneous and inhomogeneous turbulence. For the case with homogeneous turbulence we found that the criterion was well satisfied (not shown here). In this paper, we present the case of inhomogeneous turbulence which involves an obstacle within a boundary layer. Given the stationary flow corresponding to this situation, we first initialized the domain with uniform particle concentration. Then, we injected, at the inlet, a uniform particle concentration field. We then observed the temporal evolution of the particles (subjected to the mean velocity and turbulence fields relative to the carrier fluid). After a transient time where the particles mix in the domain, a stationary state is reached. The objective is to check if the concentration remains uniform over time.

The mesh is uniform and contains 798 400 cells. The fluid fields and the corresponding boundary conditions are shown on Figure 1. For the fluid phase, we use

the second-order $R_{ij} - \epsilon$ Launder, Reece and Rodi (LRR) model with Rotta's closure, which is by construction the model that is fully consistent with the simplified Langevin model (see Pope (2000) for details).

The time step is $dt = 0.0001\ s$ – such a value is due to the need to use a time step much smaller than the smallest value of T_L over the fluid domain ($T_{L,min} = 0.001\ s$). At each time step, 352 particles are injected so that the total number of particles over the domain is about 3 000 000 at convergence, *i.e.*, about 4 particles per cell, assuming a perfectly uniform repartition. Therefore, it should be noted that starting from a given time step t_0, which should be greater than the time needed for the calculation to reach its steady state, the computed statistics are cumulated over time, in order for them to be reliable. In other words, for any statistical variable Y and for any position $\mathbf{x}$, at each time step $t_n \geq t_0$, the cumulated-over-time statistic $\langle Y \rangle$ writes as follows:

$$\langle Y(\mathbf{x}, t_n) \rangle = \left(Y(\mathbf{x}, t_0) + \sum_{j=1}^{n} \frac{t_j - t_{j-1}}{t_n - t_0}\ Y(\mathbf{x}, t_j) \right) \ . \tag{5}$$

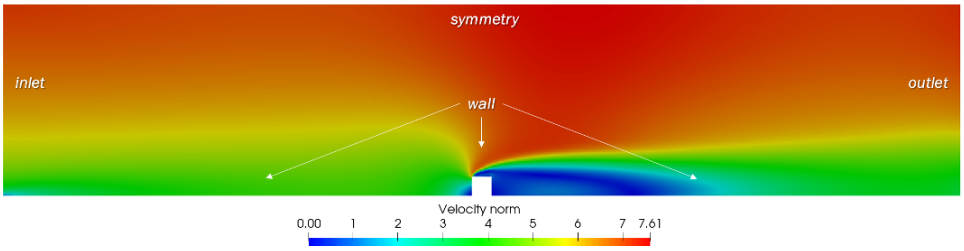
In our case, we choose to calculate cumulated-over-time statistics after the particles have gone through the whole domain at least once (*i.e.*, the so-called 'advection time' of the particles).

One point is to be made here, answering the following question: what happens if the pressure-gradient term is not properly taken into account in the Langevin equation? Indeed, it has not historically always been the case in the atmospheric Lagrangian models, as we discussed in the previous paragraph. To answer this question, two configurations are examined (see Figure 2, which shows mean normalized concentration fields $c/\langle c \rangle$, where $\langle c \rangle$ is the expected mean concentration given the particle initialization). Configuration (a) corresponds to the simulation with a properly taken into account pressure-gradient term and the use of the fully consistent $R_{ij} - \epsilon$ Rotta model, with a close view around the critical zone of the obstacle. Configuration (b) is the same as configuration (a), but removing the pressure-gradient term from the Langevin equation. The configuration (a) shows a uniform concentration (the global spatial error compared to the ideal uniform case is not shown here but is about 5.06% and is mainly due to small discrepancies around the obstacle: locally, in a few cells visible in the close view around the obstacle, the maximum deviation is up to 56%). Obviously the removal of the pressure-gradient term (configuration (b)) leads to important spurious drifts upstream and downstream the obstacle (the global spatial error increases up to 52.8%). This simulation highlights the fact that the pressure-gradient term, as it is such that the mean velocity field satisfies the divergence-free condition, is exactly what makes it possible to maintain a uniform concentration.

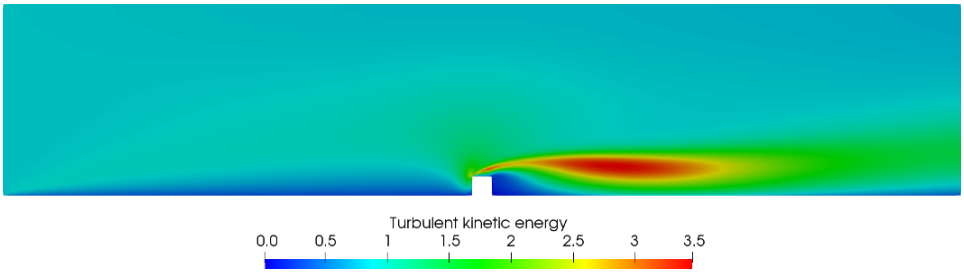
Validation case: continuous point release with uniform mean speed and turbulent diffusivity

In this section, the objective is to validate the SLM in the case of a continuous point release (mass flow rate: Q), under uniform mean wind speed and homogeneous

(a)



(b)



(c)

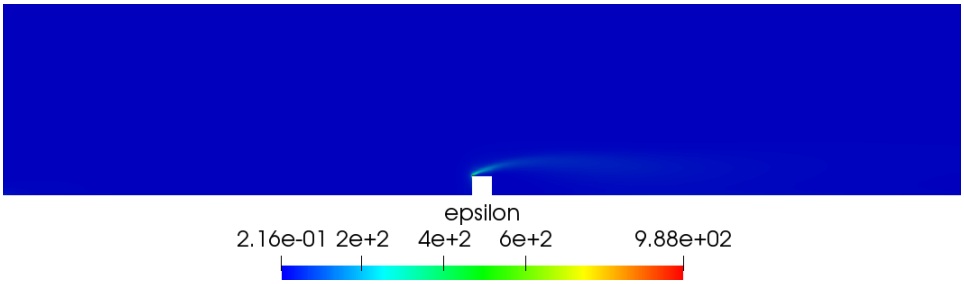
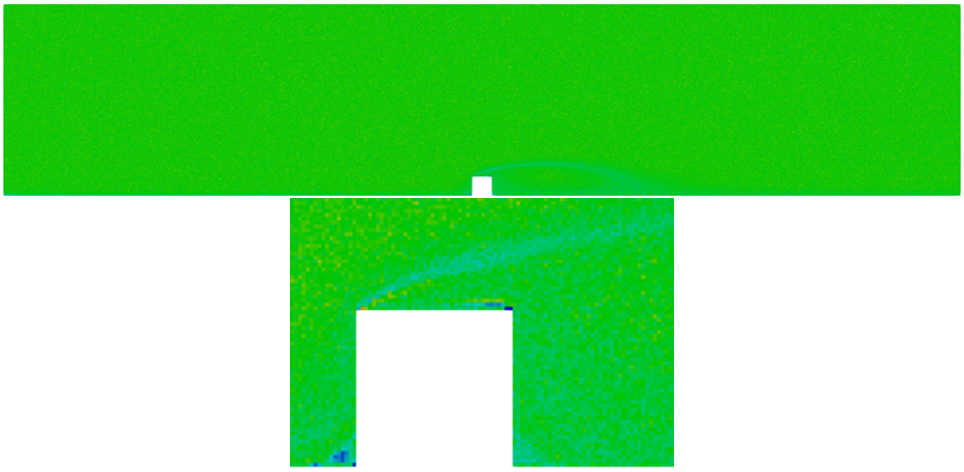


Figure 1: Mean fluid fields. (a) Velocity magnitude (m/s). – (b) Turbulent kinetic energy k (m^2/s^2). – (c) Turbulent kinetic energy dissipation rate ϵ (m^2/s^3).

(a)



(b)

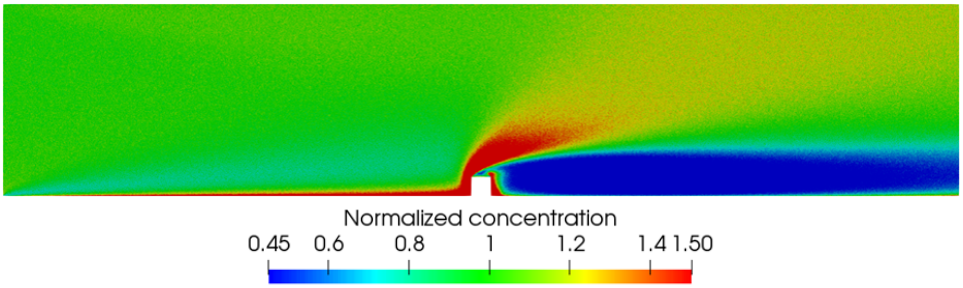


Figure 2: Mean normalized concentration field. (a) Taking into account pressure-gradient term and use of the fully SLM-consistent $R_{ij} - \epsilon$ Rotta model. – (b) No pressure-gradient term and use of the fully SLM-consistent $R_{ij} - \epsilon$ Rotta model.

turbulence conditions. This study is of interest because under these conditions, there is an analytical solution. It is therefore an opportunity to compare the Lagrangian SLM model with this solution, as well as to observe the differences with the Eulerian model. The solution was first obtained by Taylor with some hypothesis on the form of the autocorrelation function (see Arya (1999)), for the field of maximum concentration as a function of the distance to the source x. It writes as follows:

$$\langle c_{max}(x)\rangle = \frac{Q}{\sqrt{2\pi}\langle U_{f,x}\rangle\sigma_z(x)} \ , \tag{6}$$

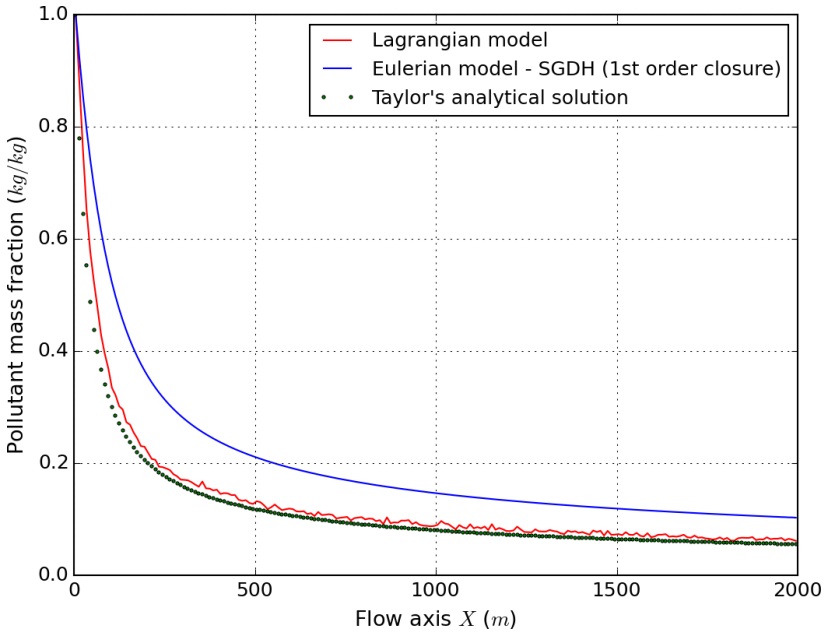
where $\sigma_z(x)$ is the plume standard deviation, formulated as follows:

$$\sigma_z(x) = \sigma_{U_{f,x}}(x) \ \frac{x}{\langle U_{f,x}\rangle\sqrt{1+\dfrac{x}{2\langle U_{f,x}\rangle T_L}}} \ . \tag{7}$$

This formulation, used in numerous atmospheric dispersion codes, allows the well-known discrimination of near-field/far-field regimes of diffusion (see Arya (1999)). Figure 3 shows the maximum concentration and the normalized plume standard deviation along the axis following the center of the plume. The objective is to compare both the Eulerian and Lagrangian results to the analytical solution previously introduced. It should be noted that the Eulerian model used here for the calculation of turbulent scalar fluxes is a first-order SGDH (Simple Gradient Diffusion Hypothesis) model.

Figure 3 shows that the Lagrangian model provides here much more accurate results than the Eulerian model. This is due to the fact that the Eulerian RANS first-order model (SGDH on the graphs) used in our study is not able to reproduce the different diffusion behaviors between near and far fields. In the near field, there is a rapid spread, while far from the source, the diffusion is slower. This is of course taken into account in the analytical solution through the formulation of the standard deviation (see Equations (6) and (7)). By construction – demonstration not shown here, see Pope (2000) for details –, this characteristic is also intrinsically included in the Lagrangian model. Figure 3 shows that near the source, there is a sharp and significant drop in concentration for the Lagrangian model and the analytical solution, which means rapid diffusion, whereas the Eulerian model diffuses much more slowly. On the other hand, far from the source, there is a quasi-parallelism between the three curves, which reflects an identical diffusion whatever the approach: the theoretically well-known proportionality of the plume concentration standard deviation to the inverse-distance from the source is retrieved. One important point to be remembered here is that the Eulerian model used for the calculation of turbulent scalar fluxes is an SGDH (Simple Gradient Diffusion Hypothesis) model, which uses a first-order closure for the advection-diffusion equation. A DFM (Differential Flux Model), or in other words a full second-order RANS model, should yield results more similar to the analytical solution, since it uses a second-order closure that completely transports the turbulent scalar fluxes. However, this model is not completely developed yet and has not been used here.

(a)



(b)

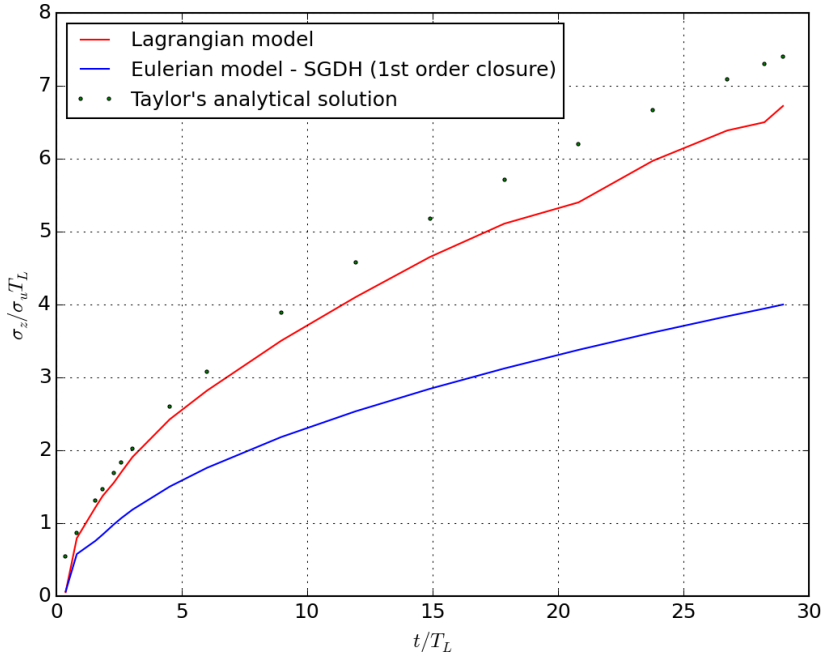


Figure 3: Maximum concentration and normalized plume standard deviation profiles along the axis following the center of the plume. (a) Maximum concentration along the flow axis. – (b) Normalized plume standard deviation along the flow axis.

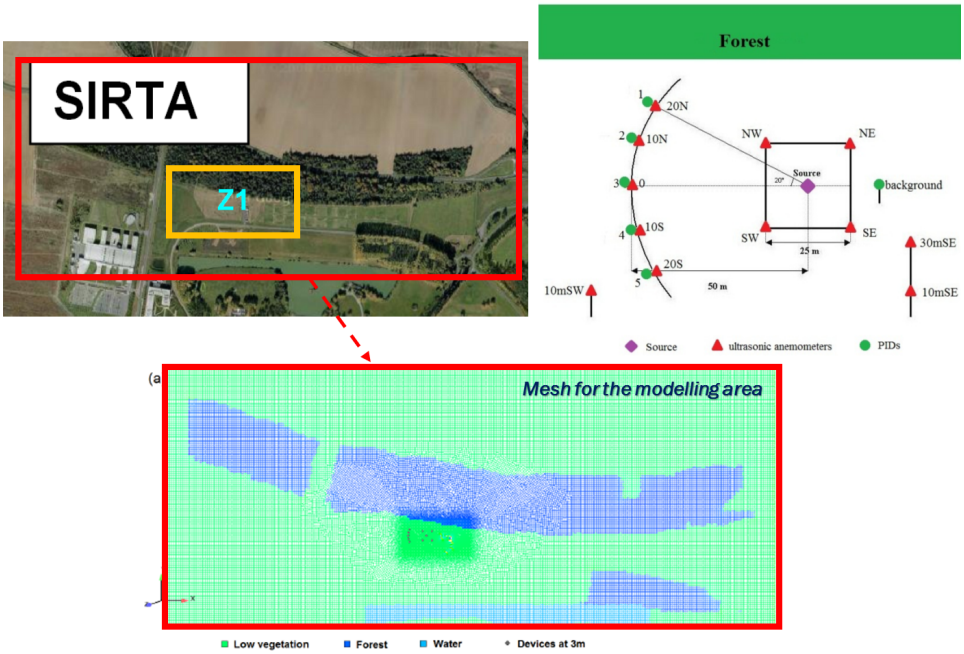


Figure 4: SIRTA site's map, instrumental devices and mesh (horizontal cross section) for the modeling area (from Wei et al. (2016).

Industrial case: SIRTA

The SIRTA (*Site Instrumental de Télédétection Atmosphérique*) site, located in the southern suburb of Paris, is a complex site containing buildings, a lake and area of dense vegetation. In our work, the objective is to simulate in *Code_Saturne* a near-field (50 to 200 m) dispersion experiment carried out on this site in 2015. The experimental campaign involved a stably stratified surface layer and an almost easterly wind. Simulations in *Code_Saturne* of different dispersion experiments at SIRTA have already been performed in the past by Wei et al. (2016) and Chahine et al. (2018). Figure 4 shows a view from the top of the SIRTA site, with a representation of its different zones. The campaign we study is located in zone 1 (in yellow on the figure) and the simulation domain is shown in red on the figure. This area is bounded by a forest to the north and a road to the south. The mesh for the modeling area and the position of the source and the device instruments are also shown in Figure 4.

The simulation domain is of dimensions 1600 m (East-West) $\times$ 700 m (North-South) $\times$ 200 m (vertical direction). The mesh contains 4 579 071 cells. It is refined near the ground and in the instrumented area. The horizontal resolution ranges from 1 m in the instrumented area (180 m $\times$ 100 m) to 5 m for the rest of the computational domain. The vertical resolution ranges from 0.5 m near the ground to 10 m at 200 m height. The buildings upstream the instrumented area are explicitly meshed. As for the ground modeling, a land-use file provided by the *Institut national*

de l'information géographique et forestière (IGN) is used to distinguish the different land cover types (forest, lake) and assign to each of them a corresponding roughness length.

The fluid phase is computed using a RANS $k-\epsilon$ model, with an SGDH closure for the scalars. The boundary conditions are defined as follows:

- Inlet condition of Dirichlet type, with analytical profiles obtained from Monin-Obukhov similarity theory.
- Outlet condition: free outflow.
- Ground, low vegetation and buildings: rough wall, with a roughness length of $0.3\ m$.
- Lake: rough wall, with a roughness length of $0.0001\ m$.

As for the forest, it is modelled through an analogy with a porous media. We modify the $k-\epsilon$ model equations in order to simulate the momentum losses and turbulence generation within the forest. Indeed, the canopy creates a drag force opposed to the flow, which reduces the wind velocity and modifies the turbulence fields. This model has been developed and used by Sanz (2003), Katul et al. (2004), Dalpé and Masson (2009), Zaïdi et al. (2013) and Wei et al. (2016). For earlier relevant references for the study of canopy flow, the reader may refer to Wilson and Shaw (1977), or Shaw and Schumann (1992) who used LES simulations. The added source term in the Navier-Stokes momentum equation writes as follows:

$$S_{u,i} = -\rho\alpha C_d |\mathbf{U}_f| U_{f,i} \tag{8}$$

where ρ is the air density, α the leaf area density and C_d the drag coefficient of the forest. In our study, $C_d = 0.2$ and $\alpha = 0.5\ m^{-1}$. The turbulence source terms S_k and S_ϵ in the k and ϵ equations express as:

$$S_k = \rho\alpha C_d \beta_p |\mathbf{U}_f|^3 - \rho\alpha C_d \beta_d k |\mathbf{U}_f| \ , \tag{9}$$

$$S_\epsilon = \rho\alpha C_d C_{\epsilon 4} \beta_p \frac{\epsilon}{k} |\mathbf{U}_f|^3 - \rho\alpha C_d C_{\epsilon 5} \beta_d \epsilon |\mathbf{U}_f| \ , \tag{10}$$

where β_p, β_d, $C_{\epsilon 4}$ and $C_{\epsilon 5}$ are constants of the model, expressed as follows:

$$\beta_p = 1 \ , \tag{11a}$$

$$\beta_d = \sqrt{C_\mu} \left(\frac{2}{0.05} \right)^{2/3} \beta_p + \frac{3}{\sigma_k} = 5.03 \ , \tag{11b}$$

$$C_{\epsilon 4} = C_{\epsilon 5} = \sigma_k \left[\left(\left(\frac{2}{\sigma_\epsilon} - \sqrt{C_\mu} \right) / 6 \right) \left(\frac{2}{0.05} \right)^{2/3} (C_{\epsilon 2} - C_{\epsilon 1}) \right] = 0.9 \ , \tag{11c}$$

where the set of constants (C_μ, $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, σ_k, σ_ϵ) takes the following values given by Launder and Spalding (1974)'s standard model:

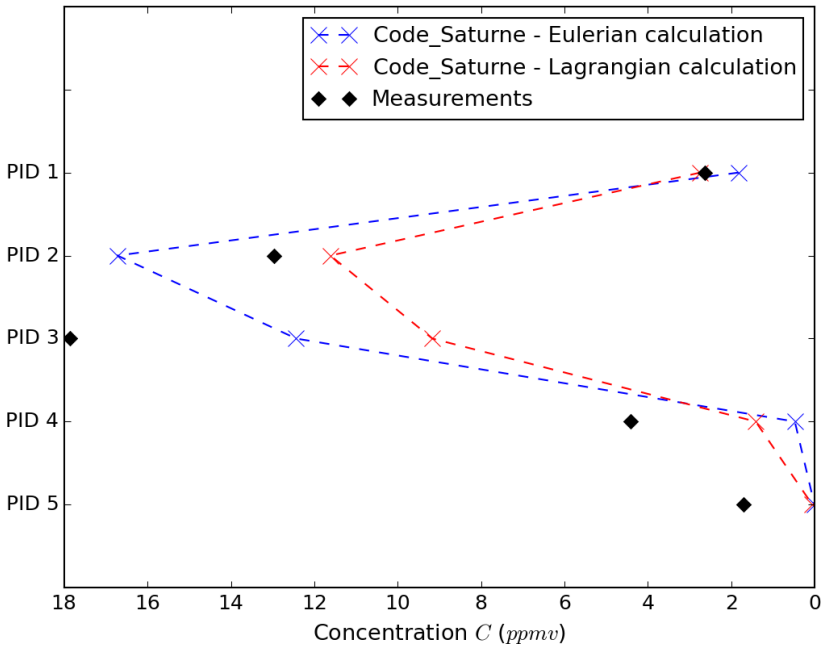


Figure 5: Comparison of the mean concentrations ($ppmv$) between measurements and simulations – PID 1 to 5. The plume corresponds to the sketch of the instrumented zone and the source shown in Figure 4, for a more visual representation.

C_μ	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	σ_k	σ_ϵ
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

Within this flow field, the pollutant (propylene, C_3H_6) is continuously injected through a scalar source term, with the imposed pollutant mass flow of 200 L/min. As for the Lagrangian approach, 20 000 particles per time step are injected, with the same imposed mass flow.

Figure 5 and 6 show the results through the comparison of the mean concentrations ($ppmv$) between measurements and simulations for the six points of measurements described in Figure 4 (green points corresponding to the 'PID' – PhotoIonization Detectors – caption). PID 1 to 5 are located at $z = 3\ m$ and PID 6 is not shown on Figure 4 but is located at $z = 10\ m$ over PID 3.

Generally speaking, the results given by the Lagrangian and Eulerian models are close, though we can observe in Figure 6 greater vertical diffusion with the Lagrangian SLM than with the Eulerian model, hence the lower concentrations at $z = 3\ m$ observed in Figure 5. The important vertical diffusion observed with the SLM is believed to be due to the fact that the SLM is a simple model with a linear return-to-isotropy assumption. The G_{ij} tensor of Equation (4) is diagonal and isotropic ($G_{ii} = -1/T_L$). A more advanced model, such as for instance the Launder, Reece, Rodi – isotropization of production (LRR-IP) model, adds to the

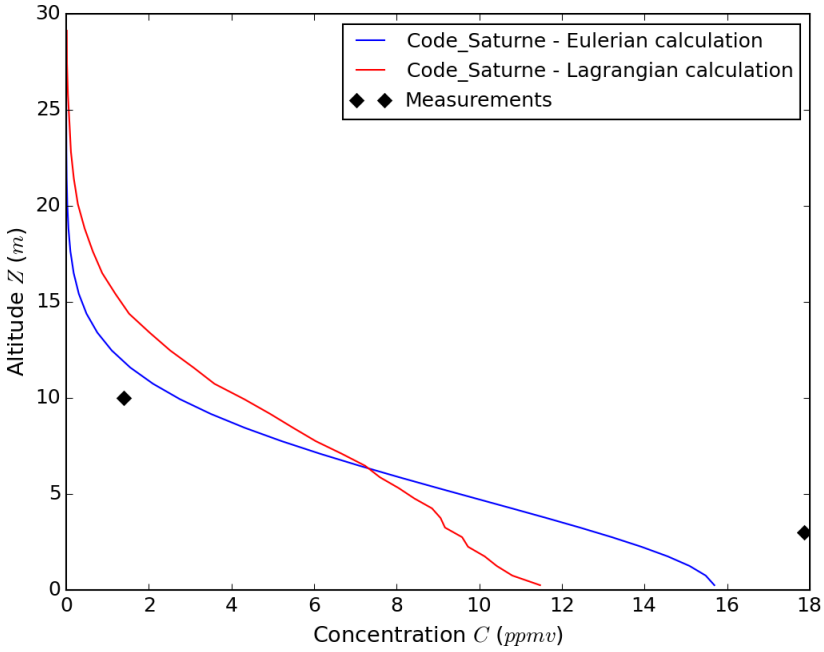


Figure 6: Comparison of the mean concentrations ($ppmv$) between measurements and simulations – vertical profile – PID 3 and 6.

Rotta model a contribution called 'isotropization of production', which increases the Reynolds-stress anisotropy (see Pope (2000)). This model could therefore be an interesting path for further investigations.

An interesting point is that the zone we are interested in, at a distance of 50 m, is already considered as 'far field', where both models are expected to show the same diffusion behavior. Indeed, when speaking about near and far fields, one has to remember that it is always in comparison to the value of T_L. At the injection cell, the fluid velocity is about 1.4 m/s and $T_L = 8.8$ s. Therefore, the near-field region corresponds to distances approximately below $1.4 \times 8.8 \approx 12m$. As the PID are located at a distance of 50 m, they are already located in the 'far-field region'. Figure 7 shows the concentration along the axis following the center of the plume, computed by both the Eulerian and Lagrangian approaches. This concentration is normalized by its maximum value obtained at the injection cell. Exactly as for the analytical case presented in the previous section, we can observe the ability of the Lagrangian model to reproduce the difference of behaviors between near and far fields. In the near field, that is to say for distances below approximately 12 meters, the Lagrangian model shows a rapid spread, which slows down for higher distances. We can also observe the logical tendency of both the Lagrangian and Eulerian curves to become parallel starting from this distance. Once again, one has to remember that these results are due to the fact that the Eulerian and Lagrangian models used here are not at the same level of closure. The Eulerian model uses a first-order turbulence closure whereas the Lagrangian model (SLM) is second-order.

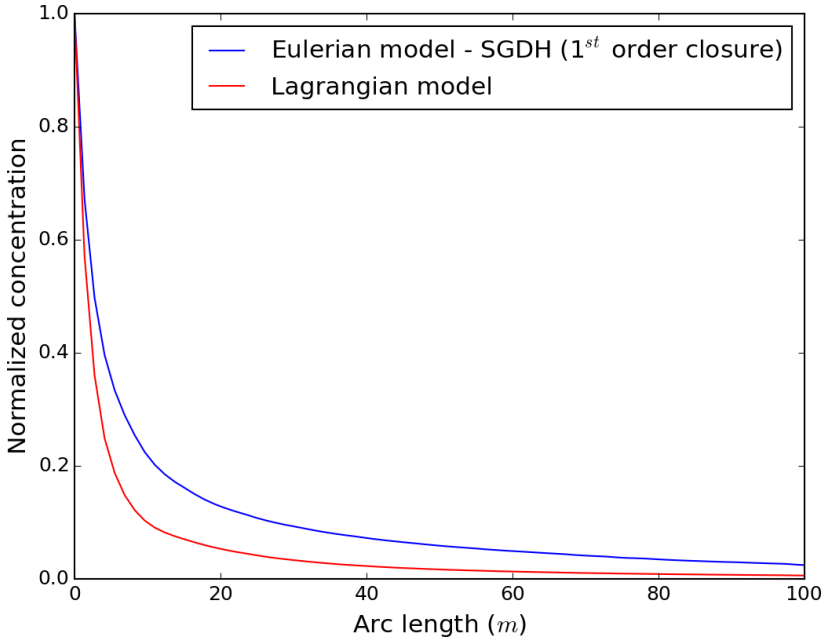


Figure 7: Normalized concentration along the axis following the center of the plume.

A full second-order Eulerian model would be expected to provide similar results as the Lagrangian model and is in fact the subject of further investigations.

Finally, to sum up, one important conclusion from this analysis is that as long as the source is located in a small-T_L region, then the 'near-field' region will stay close to the source. This will actually happen for all near-ground releases in general, as also mentioned in Näslund et al. (1994), given that T_L takes small values near the ground. In these cases, the usefulness of a Lagrangian Langevin model is therefore restricted and an Eulerian first-order model would be a satisfactory option.

Conclusions

The objective of this work is to develop a Lagrangian stochastic tool to simulate atmospheric dispersion simultaneously with Eulerian dispersion, within the CFD code *Code_Saturne*. After choosing to work with the SLM (Pope, 1985, 2000), we have validated this model for several situations. First we have ensured that our model respects the well-mixed criterion, considering a general case of inhomogeneous turbulence. In the latter case, we have shown that the pressure-gradient term is exactly what allows the well-mixed criterion to be fulfilled. Then, we have also validated the SLM by checking with an analytical solution and have shown indeed the well-known distinction by the model of the two regimes of diffusion (near and far fields). Finally, to this date, we are currently validating the model for several industrial cases. Results have been shown in this paper for the SIRTA campaign,

using a RANS $k-\epsilon$ model for the fluid phase. Further investigations are to be conducted on the use of the $R_{ij}-\epsilon$ model, as this requires the development of the right turbulence source terms corresponding to this model.

Acknowledgements

This research has been funded by CEREA, a member of the Pierre-Simon Laplace Institute (IPSL).

References

Archambeau, F., Méchitoua, N., and Sakiz, M. (2004). Code Saturne: A Finite Volume Code for the computation of turbulent incompressible flows - Industrial Applications. *International Journal on Finite Volumes*, *1*, 1–62.

Arya, S. P. (1999). *Air pollution meteorology and dispersion.* Oxford University Press, Oxford.

Baerentsen, J. H. and Berkowicz, R. (1984). Monte Carlo simulation of plume dispersion in the convective boundary layer. *Atmospheric Environment*, *18*(4), 701–712.

Chahine, A., Dupont, E., Musson-Genon, L., Legorgeu, C. and Carissimo, B. (2018). Long term modeling of the dynamical atmospheric flows over SIRTA site. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, *172*, 351–366.

Dalpé, B. and Masson, C. (2009). Numerical simulation of wind flow near a forest edge. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, *97*(5), 351–366.

Franzese, P., Luhar, A. K. and Borgas, M. S. (1999). An efficient Lagrangian stochastic model of vertical dispersion in the convective boundary layer. *Atmospheric Environment*, *33*(15), 2337–2345.

Gicquel, L. Y., Givi, P., Jaberi, F. A. and Pope, S. B. (2002). Velocity filtered density function for large eddy simulation of turbulent flows. *Physics of Fluids*, *14*(3), 1196–1213.

Katul, G. G., Mahrt, L., Poggi, D. and Sanz, C. (2004). One- and two-equation models for canopy turbulence. *Boundary-Layer Meteorology*, *113*(1), 81–109.

Launder, B. E. and Spalding, D. B. (1974). The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *3*(2), 269–289.

Lin, J. C., Gerbig, C. (2013). How can we satisfy the well-mixed criterion in highly inhomogeneous flows? A practical approach. *Lagrangian Modeling of the Atmosphere*, *200*, 59–69.

Luhar, A. K., Hibberd, M. F. and Hurley, P. J. (1996). Comparison of closure schemes used to specify the velocity PDF in Lagrangian stochastic dispersion models for convective conditions. *Atmospheric Environment*, *30*(9), 1407–1418.

Minier, J.-P. (2015). On Lagrangian stochastic methods for turbulent polydisperse two-phase reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, *50*, 1–62.

Minier, J.-P., Chibbaro, S. and Pope, S. B. (2014). Guidelines for the formulation of Lagrangian stochastic models for particle simulations of single-phase and dispersed two-phase turbulent flows. *Physics of Fluids*, *26*(11), 113–303.

Minier, J.-P. and Peirano, E. (2001). The PDF approach to turbulent polydispersed two-phase flows. *Physics Reports*, *352*(1), 1–214.

Näslund, E., Rodean, H. C. and Nasstrom, J. S. (1994). A comparison between two stochastic diffusion models in a complex three-dimensional flow. *Boundary-Layer Meteorology*, *67*(4), 369–384.

Pope, S. B. (1985). PDF methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, *352*(1), 119–192.

Pope, S. B. (1987). Consistency conditions for random-walk models of turbulent dispersion. *Physics of Fluids*, *30*(8), 2374–2379.

Pope, S. B. (1991). Computations of turbulent combustion: progress and challenges. *Symposium (International) on Combustion*, *23*, 591–612.

Pope, S. B. (1994). Lagrangian PDF methods for turbulent flows. *Annual review of Fluid Mechanics*, *26*(1), 23–63.

Pope, S. B. (2000). *Turbulent flows*. Cambridge University Press, Cambridge.

Rotach, M. W., Gryning, S. E. and Tassone, C. (1996). A two-dimensional Lagrangian stochastic dispersion model for daytime conditions. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *122*(530), 367–389.

Sanz, C. (2003). A note on k-ε modelling of vegetation canopy air-flows. *Boundary-Layer Meteorology*, *108*(1), 191–197.

Shaw, R. H. and Schumann, U. (1992). Large-eddy simulation of turbulent flow above and within a forest. *Boundary-Layer Meteorology*, *61*(1-2), 47–64.

Shotorban, B. and Mashayek, F. (2006). A stochastic model for particle motion in large-eddy simulation. *Journal of Turbulence*, *7*, N18.

Thomson, D. J. (1987). Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, *180*, 529–556.

Wei, X., Dupont, E., Carissimo, B., Gilbert, E. and Musson-Genon, L. (2016). Near-Field Pollutants Dispersion in a Stratified Surface Layer: Comparison of Numerical Study and Field Measurements of SIRTA. *Air Pollution Modeling and its Application*, *XXIV*, 365–389.

Wilson, N. R. and Shaw, R. H. (1977). A higher order closure model for canopy flow. *Journal of Applied Meteorology*, *16*(11), 1197–1205.

Zaïdi, H., Dupont, E., Milliez, M., Musson-Genon, L. and Carissimo, B. (2013). Numerical simulations of the microscale heterogeneities of turbulence observed on a complex site. *Boundary-Layer Meteorology*, *147*(2), 237–259.

Bibliographie

Anfossi, D., U. Rizza, C. Mangia, G. Degrazia et E. P. Marques Filho. 2006, Estimation of the ratio between the Lagrangian and Eulerian time scales in an atmospheric boundary layer generated by large eddy simulation, *Atmospheric Environment*, vol. 40, n° 2, p. 326–337. [Cité en pages 201, 202, and 203.]

Angell, J., D. Pack, W. Hoegker et N. Delver. 1971, Lagrangian-Eulerian time-scale ratios estimated from constant volume balloon flights past a tall tower, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 97, n° 411, p. 87–92. [Cité en pages 200 and 202.]

Archambeau, F., N. Méchitoua et M. Sakiz. 2004, Code Saturne : A finite volume code for the computation of turbulent incompressible flows-Industrial applications, *International Journal on Finite Volumes*, vol. 1, n° 1, p. http ://code–saturne.org. [Cité en page 62.]

Armenio, V., U. Piomelli et V. Fiorotto. 1999, Effect of the subgrid scales on particle motion, *Physics of Fluids*, vol. 11, n° 10, p. 3030–3042. [Cité en page 203.]

Arya, S. P. 1999, *Air pollution meteorology and dispersion*, Oxford University Press New York. [Cité en pages 1, 5, 10, 27, and 81.]

Bærentsen, J. H. et R. Berkowicz. 1984, Monte Carlo simulation of plume dispersion in the convective boundary layer, *Atmospheric Environment*, vol. 18, n° 4, p. 701–712. [Cité en pages 56, 57, and 60.]

Bahlali, M. L., E. Dupont et B. Carissimo. 2018a, Atmospheric dispersion using a Lagrangian stochastic approach : application to an idealized urban area under neutral and stable meteorological conditions, *Soumis à International Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. [Cité en pages iv, vi, and 197.]

Bahlali, M. L., E. Dupont et B. Carissimo. 2018b, A hybrid CFD RANS/Lagrangian approach to model atmospheric dispersion of pollutants in complex urban geometries, *Accepté dans International Journal of Environment and Pollution*. [Cité en pages iv, v, 33, 146, 191, 192, and 196.]

Bahlali, M. L., C. Henry, B. Carissimo et J.-P. Minier. 2018c, On the well-mixed condition and consistency issues in hybrid Eulerian/Lagrangian stochastic models of dispersion, *Soumis à Atmospheric Environment*. [Cité en pages iv, v, 53, 79, 134, 135, 137, 138, and 195.]

Baldwin, L. et G. Johnson. 1972, The estimation of turbulent diffusivities from anemometer measurements — I : fluid particles., *Civil Engineering Paper CEP71-72LVB-GRJ42, 65pp.* [Cité en page 202.]

Barnéoud, P. 2010, *Développement d'un modèle de fluctuations de concentration pour la dispersion atmosphérique de contaminants*, thèse de doctorat, Université du Québec à Montréal. [Cité en page 52.]

Basset, A. B. 1888, *A treatise on hydrodynamics : with numerous examples*, vol. 2, Deighton, Bell and Company. [Cité en page 39.]

Beard, P. 1994, *Modélisation lagrangienne de la dispersion et de l'évaporation de gouttes dans un écoulement turbulent instationnaire*, thèse de doctorat. [Cité en page 39.]

Borgas, M. et B. Sawford. 1994, A family of stochastic models for two-particle dispersion in isotropic homogeneous stationary turbulence, *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 279, p. 69–99. [Cité en page 77.]

Borgas, M. S., T. K. Flesch et B. L. Sawford. 1997, Turbulent dispersion with broken reflectional symmetry, *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 332, p. 141–156. [Cité en page 54.]

Boussinesq, J. 1903, *Théorie analytique de la chaleur : mise en harmonie avec la thermodynamique et avec la théorie mécanique de la lumière*, vol. 2, Gauthier-Villars. [Cité en page 39.]

Brown, R. 1828, XXVII. A brief account of microscopical observations made in the months of June, July and August 1827, on the particles contained in the pollen of plants ; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies, *The Philosophical Magazine*, vol. 4, n° 21, p. 161–173. [Cité en page 42.]

Businger, J. A., J. C. Wyngaard, Y. Izumi et E. F. Bradley. 1971, Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer, *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 28, n° 2, p. 181–189. [Cité en pages 23 and 144.]

Cassiani, M., P. Franzese et U. Giostra. 2005, A PDF micromixing model of dispersion for atmospheric flow. Part II : application to convective boundary layer, *Atmospheric Environment*, vol. 39, n° 8, p. 1471–1479. [Cité en pages 52 and 56.]

Cassiani, M., A. Stohl et J. Brioude. 2015, Lagrangian Stochastic Modelling of Dispersion in the Convective Boundary Layer with Skewed Turbulence Conditions and a Vertical Density Gradient : Formulation and Implementation in the FLEXPART Model, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 154, n° 3, p. 367–390. [Cité en page 56.]

Castelli, S. T., G. Tinarelli et T. Reisin. 2017, Comparison of atmospheric modelling systems simulating the flow, turbulence and dispersion at the microscale within obstacles, *Environmental Fluid Mechanics*, vol. 17, n° 5, p. 879–901. [Cité en pages 77 and 197.]

Chahine, A., P. Matharan, D. Wendum, L. Musson-Genon, R. Bresson et B. Carissimo. 2015, Modelling atmospheric effects on performance and plume dispersal from natural draft wet cooling towers, *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 136, p. 151–164. [Cité en page 63.]

Corrsin, S. 1963, Estimates of the relations between Eulerian and Lagrangian scales in large Reynolds number turbulence, *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 20, n° 2, p. 115–119. [Cité en page 201.]

Dalpé, B. et C. Masson. 2009, Numerical simulation of wind flow near a forest edge, *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, vol. 97, n° 5, p. 228–241. [Cité en page 144.]

Daly, B. J. et F. H. Harlow. 1970, Transport equations in turbulence, *Physics of Fluids*, vol. 13, n° 11, p. 2634–2649. [Cité en page 65.]

De Baas, A. F., H. Van Dop et F. Nieuwstadt. 1986, An application of the Langevin equation for inhomogeneous conditions to dispersion in a convective boundary layer, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 112, n° 471, p. 165–180. [Cité en page 56.]

De Haan, P. 1999, *Studies on short-range air pollution modeling*, thèse de doctorat, ETH Zurich. [Cité en page 77.]

Dehoux, F. 2012, *Modélisation statistique des écoulements turbulents en convection forcée, mixte et naturelle*, thèse de doctorat, Poitiers. [Cité en page 66.]

Demael, E. 2007, *Modélisation de la dispersion atmosphérique en milieu complexe et incertitudes associées*, thèse de doctorat, Marne-la-Vallée, ENPC. [Cité en page 19.]

Demael, E. et B. Carissimo. 2008, Comparative evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian plume models based on Prairie Grass dispersion experiment, *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, vol. 47, n° 3, p. 888–900. [Cité en page 63.]

DETERING, H. et D. ETLING. 1985, Application of the E-ε turbulence model to the atmospheric boundary layer, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 33, n° 2, p. 113–133. [Cité en page 32.]

DOSIO, A., J. V. GUERAU DE ARELLANO, A. A. HOLTSLAG et P. J. BUILTJES. 2005, Relating Eulerian and Lagrangian statistics for the turbulent dispersion in the atmospheric convective boundary layer, *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 62, n° 4, p. 1175–1191. [Cité en page 203.]

DOURY, A. 1976, *Une méthode de calcul pratique et générale pour la prévision numérique des pollutions véhiculées par l'atmosphère*, Centre d'études nucléaires de Saclay. [Cité en page 36.]

DREEBEN, T. D. et S. B. POPE. 1997, Probability density function and Reynolds-stress modeling of near-wall turbulent flows, *Physics of Fluids*, vol. 9, n° 1, p. 154–163. [Cité en page 79.]

DU, S., J. D. WILSON et E. YEE. 1994, Probability density functions for velocity in the convective boundary layer, and implied trajectory models, *Atmospheric Environment*, vol. 28, n° 6, p. 1211–1217. [Cité en page 58.]

DURBIN, P. 1980, A stochastic model of two-particle dispersion and concentration fluctuations in homogeneous turbulence, *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 100, n° 2, p. 279–302. [Cité en page 52.]

DUYNKERKE, P. 1988, Application of the E–ε turbulence closure model to the neutral and stable atmospheric boundary layer, *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 45, n° 5, p. 865–880. [Cité en page 32.]

DYER, A. 1974, A review of flux-profile relationships, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 7, n° 3, p. 363–372. [Cité en page 23.]

DYER, A. et B. HICKS. 1970, Flux-gradient relationships in the constant flux layer, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 96, n° 410, p. 715–721. [Cité en page 144.]

EINSTEIN, A. 1905, On the motion of small particles suspended in liquids at rest required by the molecular-kinetic theory of heat, *Annalen der physik*, vol. 17, p. 549–560. [Cité en page 42.]

FERRERO, E. et L. MORTARINI. 2005, Concentration fluctuations and relative dispersion PDF, *Atmospheric Environment*, vol. 39, n° 11, p. 2135–2143. [Cité en page 52.]

Fesquet, C., S. Dupont, P. Drobinski, T. Dubos et C. Barthlott. 2009, Impact of terrain heterogeneity on coherent structure properties : numerical approach, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 133, n° 1, p. 71–92. [Cité en page 140.]

Foken, T. 2006, 50 years of the Monin–Obukhov similarity theory, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 119, n° 3, p. 431–447. [Cité en page 16.]

Franzese, P., A. K. Luhar et M. S. Borgas. 1999, An efficient Lagrangian stochastic model of vertical dispersion in the convective boundary layer, *Atmospheric Environment*, vol. 33, n° 15, p. 2337–2345. [Cité en pages 58, 59, and 60.]

Gao, Z., R. Bresson, Y. Qu, M. Milliez, C. de Munck et B. Carissimo. 2018, High resolution unsteady RANS simulation of wind, thermal effects and pollution dispersion for studying urban renewal scenarios in a neighborhood of Toulouse, *Urban Climate*, vol. 23, p. 114–130. [Cité en page 63.]

Gardiner, C. W. et al.. 1985, *Handbook of stochastic methods*, vol. 4, Springer Berlin. [Cité en pages 46 and 59.]

Gifford, F. 1955, A Simultaneous Lagrangian-Eulerian Turbulence Experiment 1956, *Mon. Weath. Rev. US Weather Bureau*, vol. 83, p. 293–301. [Cité en pages 200, 201, and 202.]

Gingold, R. et J. Monaghan. 1982, Kernel estimates as a basis for general particle methods in hydrodynamics, *Journal of Computational Physics*, vol. 46, n° 3, p. 429–453. [Cité en page 77.]

Hanna, S. R. 1981, Lagrangian and Eulerian time-scale relations in the daytime boundary layer, *Journal of Applied Meteorology*, vol. 20, n° 3, p. 242–249. [Cité en pages 200 and 202.]

Hanna, S. R., G. A. Briggs et R. P. Hosker Jr. 1982, Handbook on atmospheric diffusion, cahier de recherche, National Oceanic and Atmospheric Administration, Oak Ridge, TN (USA). Atmospheric Turbulence and Diffusion Lab. [Cité en page 21.]

Hay, J. S. et F. Pasquill. 1959, Diffusion from a continuous source in relation to the spectrum and scale of turbulence, *Advances in Geophysics*, vol. 6, p. 345–365. [Cité en page 200.]

Hicks, B. 1976, Wind profile relationships from the 'Wangara' experiment, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 102, n° 433, p. 535–551. [Cité en page 144.]

Hinze, J. 1975, *Turbulence*, McGraw-Hill. [Cité en page 200.]

HÖGSTRÖM, U. 1988, Non-dimensional wind and temperature profiles in the atmospheric surface layer : A re-evaluation, dans *Topics in Micrometeorology. A Festschrift for Arch Dyer*, Springer, p. 55–78. [Cité en page 16.]

HÖGSTRÖM, U. 1996, Review of some basic characteristics of the atmospheric surface layer, dans *Boundary-Layer Meteorology 25th Anniversary Volume, 1970–1995*, Springer, p. 215–246. [Cité en page 16.]

HURLEY, P. et W. PHYSICK. 1991, A Lagrangian particle model of fumigation by breakdown of the nocturnal inversion, *Atmospheric Environment*, vol. 25, n° 7, p. 1313–1325. [Cité en page 77.]

KATUL, G. G., L. MAHRT, D. POGGI et C. SANZ. 2004, One-and two-equation models for canopy turbulence, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 113, n° 1, p. 81–109. [Cité en page 144.]

KERSCHGENS, M. J., C. NÖLLE et R. MARTENS. 2000, Comments on turbulence parameters for the calculation of dispersion in the atmospheric boundary layer, *Meteorologische Zeitschrift*, vol. 9, n° 3, p. 155–163. [Cité en page 144.]

LANGEVIN, P. 1908, Sur la théorie du mouvement brownien, *Compt. Rendus*, vol. 146, p. 530–533. [Cité en page 42.]

LAUNDER, B. E. et D. B. SPALDING. 1974, The numerical computation of turbulent flows, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, vol. 3, n° 2, p. 269–289. [Cité en pages 31, 32, and 145.]

LEE, J. et G. STONE. 1983, Eulerian—Lagrangian relationships in Monte Carlo simulations of turbulent diffusion, *Atmospheric Environment*, vol. 17, n° 12, p. 2483–2487. [Cité en page 202.]

LIN, J. C. et C. GERBIG. 2013, How can we satisfy the well-mixed criterion in highly inhomogeneous flows ? A practical approach, *Lagrangian Modeling of the Atmosphere*, p. 59–70. [Cité en page 54.]

LORIMER, G. S. 1986, The kernel method for air quality modelling—I. mathematical foundation, *Atmospheric Environment*, vol. 20, n° 7, p. 1447–1452. [Cité en page 77.]

LOUIS, J.-F. 1979, A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 17, n° 2, p. 187–202. [Cité en page 23.]

LUHAR, A. K. et R. E. BRITTER. 1989, A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer, *Atmospheric Environment*, vol. 23, n° 9, p. 1911–1924. [Cité en pages 56, 57, and 58.]

LUHAR, A. K., M. F. HIBBERD et P. J. HURLEY. 1996, Comparison of closure schemes used to specify the velocity PDF in Lagrangian stochastic dispersion models for convective conditions, *Atmospheric Environment*, vol. 30, n° 9, p. 1407–1418. [Cité en pages 58 and 59.]

LUHAR, A. K. et K. S. RAO. 1994, Lagrangian stochastic dispersion model simulations of tracer data in nocturnal flows over complex terrain, *Atmospheric Environment*, vol. 28, n° 21, p. 3417–3431. [Cité en page 77.]

LUHAR, A. K. et B. L. SAWFORD. 2005, Micromixing modelling of concentration fluctuations in inhomogeneous turbulence in the convective boundary layer, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 114, n° 1, p. 1–30. [Cité en page 52.]

MAURIZI, A., G. PAGNINI et F. TAMPIERI. 2004, Influence of Eulerian and Lagrangian scales on the relative dispersion properties in Lagrangian stochastic models of turbulence, *Physical Review E*, vol. 69, n° 3, p. 037 301. [Cité en page 202.]

MICHELOT, C. 1996, *Développement d'un modèle stochastique lagrangien application à la dispersion et à la chimie de l'atmosphère*, thèse de doctorat. [Cité en pages 52 and 57.]

MILLIEZ, M. et B. CARISSIMO. 2007, Numerical simulations of pollutant dispersion in an idealized urban area, for different meteorological conditions, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 122, n° 2, p. 321–342. [Cité en pages 63, 197, and 198.]

MILLIEZ, M. et B. CARISSIMO. 2008, Computational fluid dynamical modelling of concentration fluctuations in an idealized urban area, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 127, n° 2, p. 241–259. [Cité en pages 63 and 198.]

MINIER, J., E. PEIRANO et D. TALAY. 2001, Schémas numériques faibles pour les équations différentielles stochastiques intervenant dans les modeles diphasiques lagrangiens, cahier de recherche, EDF R&D Report. [Cité en page 64.]

MINIER, J. et J. POZORSKI. 1992, *Analysis of existing Lagrangian models and new propositions for particle dispersion in homogeneous stationary turbulence*, Electricité de France. [Cité en page 50.]

MINIER, J.-P. 2015, On Lagrangian stochastic methods for turbulent polydisperse two-phase reactive flows, *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 50, p. 1–62. [Cité en page 50.]

MINIER, J.-P., S. CHIBBARO et S. B. POPE. 2014, Guidelines for the formulation of Lagrangian stochastic models for particle simulations of single-phase and dispersed

two-phase turbulent flows, *Physics of Fluids*, vol. 26, n° 11, p. 113 303. [Cité en pages iv, v, 53, and 195.]

Minier, J.-P. et E. Peirano. 2001, The PDF approach to turbulent polydispersed two-phase flows, *Physics Reports*, vol. 352, n° 1, p. 1–214. [Cité en pages 40, 41, 48, 49, 50, 51, 59, and 64.]

Minier, J.-P. et J. Pozorski. 1996, Analysis of a PDF model in a mixing layer case, cahier de recherche, Electricite de France (EDF). [Cité en page 59.]

Minier, J.-P. et J. Pozorski. 1999, Wall-boundary conditions in probability density function methods and application to a turbulent channel flow, *Physics of Fluids*, vol. 11, n° 9, p. 2632–2644. [Cité en page 79.]

Mito, Y. et T. J. Hanratty. 2002, Use of a modified Langevin equation to describe turbulent dispersion of fluid particles in a channel flow, *Flow, turbulence and combustion*, vol. 68, n° 1, p. 1–26. [Cité en pages 203 and 204.]

Molina Jiménez, P. 2014, *Simulación numérica de un problema de contaminación atmosférica*, thèse de doctorat, Minas. [Cité en pages 5 and 6.]

Monin, A. et A. Obukhov. 1954, Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere, *Contrib. Geophys. Inst. Acad. Sci. USSR*, vol. 151, p. 163–187. [Cité en pages 21 and 22.]

Musson-Genon, L., E. Dupont et D. Wendum. 2007, Reconstruction of the surface-layer vertical structure from measurements of wind, temperature and humidity at two levels, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 124, n° 2, p. 235–250. [Cité en page 23.]

Näslund, E., H. C. Rodean et J. S. Nasstrom. 1994, A comparison between two stochastic diffusion models in a complex three-dimensional flow, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 67, n° 4, p. 369–384. [Cité en page 55.]

Oseen, C. W. 1927, Neuere methoden und ergebnisse in der hydrodynamik, *Leipzig : Akademische Verlagsgesellschaft mb H.* [Cité en page 39.]

Pasquill, F. 1961, The estimation of the dispersion of windborne material, *Meteorol. Magazine*, vol. 90, p. 33–49. [Cité en page 36.]

Peirano, E., S. Chibbaro, J. Pozorski et J.-P. Minier. 2006, Mean-field/PDF numerical approach for polydispersed turbulent two-phase flows, *Progress in energy and combustion science*, vol. 32, n° 3, p. 315–371. [Cité en pages 41 and 47.]

PERKINS, R., L. SOULHAC, P. MEJEAN et I. RIOS. 2005, *Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel. Vers un guide de l'utilisateur. Phase 1 : état de l'art. Phase 2 : évaluation des modèles*, LMFA, Ecole Centrale de Lyon. Rapport RECORD. [Cité en pages 11, 25, 26, and 80.]

PHILIP, J. 1967, Relation between Eulerian and Lagrangian statistics, *Physics of Fluids*, vol. 10, p. 69. [Cité en page 202.]

PIALAT, X. 2007, *Développement d'une méthode hybride eulériennelagrangienne pour la modélisation numérique de la phase particulaire dans les écoulements turbulents gaz-particules*, thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace. [Cité en page 39.]

POPE, S. 1985, PDF methods for turbulent reactive flows, *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 11, n° 2, p. 119–192. [Cité en pages iii, v, 48, and 194.]

POPE, S. B. 1987, Consistency conditions for random-walk models of turbulent dispersion, *Physics of Fluids*, vol. 30, n° 8, p. 2374–2379. [Cité en pages iv, v, 53, and 195.]

POPE, S. B. 2000, *Turbulent flows*, IOP Publishing. [Cité en pages iii, v, 43, 45, 48, 49, 51, 52, 60, 63, 78, 81, 82, 194, and 198.]

PRANDTL, L. 1932, Meteorologische anwendung der strömungslehre, *Beitr. Phys. Atmos*, vol. 19, p. 188–202. [Cité en page 16.]

RENOUX, A. et D. BOULAUD. 1998, *Les aérosols : physique et métrologie*, Tec/Doc-Lavoisier. [Cité en page 41.]

RIZZA, U., D. ANFOSSI, C. MANGIA et G. DEGRAZIA. 2004, On the relationship between the Lagrangian and Eulerian time scale : a preliminary evaluation with LES data, dans *Air Pollution Modeling and Its Application XV*, Springer, p. 357–364. [Cité en page 203.]

ROBERTS, O. 1923, The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, vol. 104, n° 728, p. 640–654. [Cité en page 36.]

RODEAN, H. C. 1996, *Stochastic Lagrangian models of turbulent diffusion*, vol. 45, Springer. [Cité en pages 43, 55, 56, 57, 58, and 201.]

SAFFMAN, P. 1963, An approximate calculation of the Lagrangian auto-correlation coefficient for stationary homogeneous turbulence, *Applied Scientific Research, Section A*, vol. 11, n° 3, p. 245–255. [Cité en page 202.]

SANZ, C. 2003, A note on k-ε modelling of vegetation canopy air-flows, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 108, n° 1, p. 191–197. [Cité en page 144.]

SAWFORD, B. 2004, Micro-mixing modelling of scalar fluctuations for plumes in homogeneous turbulence, *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 72, n° 2-4, p. 133–160. [Cité en page 52.]

SAWFORD, B. et F. GUEST. 1987, Lagrangian stochastic analysis of flux-gradient relationships in the convective boundary layer, *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 44, n° 8, p. 1152–1165. [Cité en page 56.]

SAWFORD, B. et F. GUEST. 1988, Uniqueness and universality of Lagrangian stochastic models of turbulent dispersion, dans *8th Symposium on Turbulence and Diffusion*, vol. 1, p. 96–99. [Cité en pages 54 and 55.]

SCHILLER, L. et Z. NAUMANN. 1935, A drag coefficient correlation, *Vdi Zeitung*, vol. 77, n° 318, p. 51. [Cité en page 41.]

SPORTISSE, B. 2006, Modélisation de la pollution atmosphérique, *Cours de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées*. [Cité en page 1.]

STOKES, G. G. 1851, *On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums*, vol. 9, Pitt Press Cambridge. [Cité en page 39.]

STULL, R. B. 1988, *An introduction to boundary layer meteorology*, vol. 13, Springer Science & Business Media. [Cité en page 21.]

TAYLOR, G. I. 1921, Diffusion by continuous movements, *Proceedings of the London Mathematical Society*, vol. 20, p. 196–211. [Cité en pages 35, 81, and 196.]

TENNEKES, H. et J. L. LUMLEY. 1972, *A first course in turbulence*, MIT press. [Cité en pages 33 and 203.]

THOMSON, D. 1987, Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows, *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 180, p. 529–556. [Cité en pages iii, v, 53, 55, 59, 60, 194, and 195.]

THOMSON, D. 1990, A stochastic model for the motion of particle pairs in isotropic high-Reynolds-number turbulence, and its application to the problem of concentration variance, *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 210, p. 113–153. [Cité en page 52.]

TINARELLI, G., L. MORTARINI, S. T. CASTELLI, G. CARLINO, J. MOUSSAFIR, C. OLRY, P. ARMAND et D. ANFOSSI. 2013, Review and validation of MicroSpray, a Lagrangian particle model of turbulent dispersion, *Lagrangian Modeling of the Atmosphere*, p. 311–328. [Cité en page 77.]

TOWNSEND, A. A. 1980, *The structure of turbulent shear flow*, Cambridge University Press. [Cité en pages 33 and 203.]

VENDEL, F. 2011, *Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes : application à l'étude de sites industriels*, thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon. [Cité en pages 1, 77, 84, and 154.]

VILLERMAUX, J. et J. DEVILLON. 1972, Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide par un modele d'interaction phénoménologique, dans *Proceedings of the 2nd International Symposium on Chemical Reaction Engineering*, vol. 26, Elsevier New York, p. 1–13. [Cité en page 52.]

VIOLLET, P. 1988, On the numerical modelling of stratified flows, dans *Physical processes in estuaries*, Springer, p. 257–277. [Cité en page 31.]

VON SMOLUCHOWSKI, M. 1906, Zur kinetischen theorie der brownschen molekularbewegung und der suspensionen, *Annalen der physik*, vol. 326, n° 14, p. 756–780. [Cité en page 42.]

WANDEL, C. et O. KOFOED-HANSEN. 1962, On the Eulerian-Lagrangian transform in the statistical theory of turbulence, *Journal of Geophysical Research*, vol. 67, n° 8, p. 3089–3093. [Cité en page 202.]

WANG, Q., K. D. SQUIRES et X. WU. 1995, Lagrangian statistics in turbulent channel flow, *Atmospheric Environment*, vol. 29, n° 18, p. 2417–2427. [Cité en page 203.]

WEI, X. 2016, *Experimental and numerical study of atmospheric turbulence and dispersion in stable conditions and in near field at a complex site*, thèse de doctorat, Paris-Est. [Cité en pages 62, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 148, 159, and 160.]

WEI, X., E. DUPONT, E. GILBERT, L. MUSSON-GENON et B. CARISSIMO. 2016, Experimental and numerical study of wind and turbulence in a near-field dispersion campaign at an inhomogeneous site, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 160, n° 3, p. 475–499. [Cité en page 148.]

WEIL, J. 1990, A diagnosis of the asymmetry in top-down and bottom-up diffusion using a Lagrangian stochastic model, *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 47, n° 4, p. 501–515. [Cité en pages 56 and 58.]

WILLIS, G. et J. DEARDORFF. 1976, A laboratory model of diffusion into the convective planetary boundary layer, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 102, n° 432, p. 427–445. [Cité en page 58.]

Willis, G. et J. Deardorff. 1978, A laboratory study of dispersion from an elevated source within a modeled convective planetary boundary layer, *Atmospheric Environment*, vol. 12, n° 6-7, p. 1305–1311. [Cité en page 58.]

Willis, G. E. et J. Deardorff. 1981, A laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convectively mixed layer, *Atmospheric Environment*, vol. 15, n° 2, p. 109–117. [Cité en page 58.]

Wilson, J. D. et B. L. Sawford. 1996, Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 78, n° 1-2, p. 191–210. [Cité en page 54.]

Wilson, J. D. et E. Yee. 2007, A critical examination of the random displacement model of turbulent dispersion, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 125, n° 3, p. 399–416. [Cité en page 154.]

Zaïdi, H., E. Dupont, M. Milliez, L. Musson-Genon et B. Carissimo. 2013, Numerical simulations of the microscale heterogeneities of turbulence observed on a complex site, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 147, n° 2, p. 237–259. [Cité en pages 140 and 145.]