ASSOCIATION R.E.C.O.R.D. CONTRAT N° 01-0805/2A

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2ème partie : Evaluation des modèles .

Richard Perkins Lionel Soulhac Patrick Méjean Isabelle Rios

Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique (LMFA - UMR CNRS 5509 – ECL – INSA - UCBL1) Ecole Centrale de Lyon 36, avenue Guy de Collongue 69134 ECULLY Cedex France

RAPPORT FINAL				
Date d'échéanc	e : 2 mai 2005			
Position sur pla	inning			
Signature	n°1	n°2	n°3	final
01/07/03	01/01/04	01/07/04	03/01/05	02/05/05

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Résumé: Ce rapport constitue le rapport final de l'étude RECORD. Il présente les logiciels de dispersion mis en place au LMFA et les résultats des comparaisons de ces logiciels avec des mesures de terrain. Ce rapport détaille notamment les fonctionnalités des logiciels et les modélisations physiques associées ainsi que l'étude de sensibilité concernant différents paramètres comme les conditions météorologiques ou la nature du site. Enfin, les résultats des comparaisons sur deux cas-tests sont présentés ainsi qu'une méthodologie d'étude des cas réels illustrée par l'exemple concret de l'usine ATOFINA sur le site de La Chambre en Savoie.

- Mots-clés : pollution atmosphérique, dispersion, couche limite atmosphérique, rejets industriels, inventaire de modèles
- Keywords : atmospheric pollution, dispersion, atmospheric boundary layer, industrial releases, model inventory

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

TABLE DES MATIERES

1. Intro	duction	
1.1.	Contexte de l'étude	9
1.2.	Objectifs de l'étude proposée	9
2. Prés	entation des modèles retenus	11
2.1.	Aria impact	11
2.1.1.	Description générale du modèle	11
2.1.2.	Les fonctionnalités du modèle	11
2.1.2	.1. Les sources	11
2.1.2	.2. Les polluants	11
2.1.2	.3. La météorologie	11
2.1.2	.4. Les différents types de calcul	12
2.1.3.	Les hypothèses et les modélisations physiques	12
2.1.3	.1. Les hypothèses générales	12
2.1.3	.2. La modélisation de la stabilité	12
2.1.3	.3. Le calcul des profils verticaux de vent	13
2.1.3	.4. Calcul de la hauteur de la couche de mélange	13
2.1.3	.5. La prise en compte des vents calmes	14
2.1.3	.6. La modélisation gaussienne	14
2.1.3	L'influence de la hauteur de la couche limite	14
2.1.3	.8. Le calcul des écarts-types	14
2.1.3	.9. Le calcul de la surhauteur	15
2.1.3	.10. Les rejets de particules	16
2.1.3	.11. La prise en compte de la topographie	16
2.1.4.	Les donnees d'entree et les variables calculees	1/
2.1.4	.1. Definition du site	17
2.1.4	.2. Les donnees d'emissions	17
2.1.4	.3. La meteorologie	17
2.1.4	.4. Les parametres de sonies	l <i>i</i>
2.1.J. 2.1.E	L Interface graphique	10
2.1.0	2 L'organisation des données	10
2.1.0	3 Le lancement de calcul en batch	19 19
216	Les performances et les limitations	19
216	1 Les avantages	19
2.1.6	2. Les limites	20
2.2.	ADMS 3	21
2.2.1	Description générale du modèle	21
2.2.2.	Les fonctionnalités du modèle	21
2.2.2	.1. Les sources	21
2.2.2	.2. Les polluants	21
2.2.2	.3. La météorologie	21
2.2.2	.4. Les différents types de calcul	22
2.2.2	1.5. La topographie et les bâtiments	22
2.2.2	.6. La visibilité du panache	22
2.2.2	.7. Les fluctuations de concentration	22
2.2.3.	Les hypothèses et les modélisations physiques	22
2.2.3	.1. Paramétrisation de la couche limite et calcul de la stabilité	22
2.2.3	.2. Calcul des concentrations	23
2.2.3	.3. Calcul de la surélévation du panache	24
2.2.3	.4. Calcul des dépôts secs et humides	24
2.2.3	.b. Les polluants radioactits	24

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2ème partie : Evaluation des modèles . La prise en compte du relief _____ 2.2.3.6. 24 Les effets de bâtiments ____ 25 2.2.3.7.

 2.2.3.7.
 Les effets de bâtiments

 2.2.4.
 Les données d'entrée et les variables calculées

 25 Définition du site _____ 25 2.2.4.1. Définition des sources et des émissions _____ 25 2.2.4.2. La météorologie_____ 2.2.4.3. _____ 25 2.2.4.4. Les variables calculées 26 2.2.5. L'interface _____ 26 L'interface graphique _____ 26 2.2.5.1. _____ 27 L'organisation des données 2.2.5.2. Le lancement de calcul en batch _____ 28 2.2.5.3. 2.2.6. Les performances et les limitations _____ 28 2.2.6.1. Les avantages _____ 28 Les limites ____ 2.2.6.2. 28 La plate-forme ARIA INDUSTRY _____ 2.3. 29 2.4. Le modèle météorologique MINERVE ______30 2.5. Le modèle TRAMES 32 2.5.1. Description générale du modèle 32 2.5.2. Les fonctionnalités du modèle 32 2.5.2.1. Les sources 32 Les polluants 2.5.2.2. 32 Les différents types de calcul _____ 2.5.2.3. 32

 2.5.2.4.
 Les différents types de calcul

 2.5.3.
 Les hypothèses et les modélisations physiques

 2.5.2.4. 33 33 2.5.3.1. Les hypothèses générales 33 2.5.3.2. La modélisation du transport par le vent 33 _____ 2.5.3.3. La modélisation gaussienne de la dispersion du polluant 34 2.5.3.4. Les écarts-types 35 Les dépôts secs et humides _____ 2.5.3.5. 35 La hauteur de la couche limite_____ 2.5.3.6. 36 2.5.3.7. Le calcul de la surhauteur _____ 36 2.5.4. Les données d'entrée et les variables calculées 36 Définition du site 2.5.4.1. 36 Les données d'émissions 2.5.4.2. 36 2.5.4.3. La météorologie 36 Les paramètres de sorties 2.5.4.4. 37 2.5.5. L'interface 37 2.5.5.1. L'interface graphique 37 L'organisation des données 2.5.5.2. 38 Le lancement de calcul en batch 2.5.5.3. 38 2.5.6. Les performances et les limitations 39 2.5.6.1. Les avantages _____ 39 2.5.6.2. Les limites 39 2.6. Le modèle HERMES 40 Description générale du modèle 2.6.1. _____ 40 Les fonctionnalités du modèle 40 2.6.2. 2.6.2.1. Les sources 40 2.6.2.2. Les polluants _____ 40 2.6.2.3. La météorologie 40 Les différents types de calcul 2.6.2.4. 40 2.6.3. Les hypothèses et les modélisations physiques 41 Les hypothèses générales______ Les équations qui régissent le problème ______ 2.6.3.1. 41 2.6.3.2. 41 2.6.3.3. Les conditions aux limites 41 La modélisation de la turbulence 2.6.3.4. 42 2.6.3.5. Calcul de la hauteur de la couche limite _____ 43

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2ème partie : Evaluation des modèles . Les dépôts secs et humides _____ 2.6.3.6. 43 Le calcul de la surhauteur 2.6.3.7. _____ 43 La résolution numérique des équations sur le maillage 2.6.3.8. 43 2.6.4. Les données d'entrée et les variables calculées 43 Définition du site 2.6.4.1. _____ 43 Les données d'émissions 2.6.4.2. 44 2.6.4.3. La météorologie 44 Les paramètres de sortie_____ 2.6.4.4. 44 2.6.5. L'interface 45 L'interface graphique 45 2.6.5.1. _____ 46 L'organisation des données 2.6.5.2. Le lancement de calcul en batch 46 2.6.5.3. 2.6.6. Les performances et les limitations 46 2.6.6.1. Les avantages _____ 46 2.6.6.2. Les limites 47 2.7. Le modèle SPRAY 48 Description générale du modèle _____ 48 2.7.1. 2.7.2. Les fonctionnalités du modèle 48 2.7.2.1. Les sources 48 2.7.2.2. Les polluants 48 La météorologie 2.7.2.3. La météorologie______ Les différents types de calcul ______ 48 2.7.2.4. 48 2.7.3. Les hypothèses et les modélisations physiques 49 2.7.3.1. Les hypothèses générales _____ 49 Les équations qui régissent le problème 2.7.3.2. 49 Les conditions aux limites 50 2.7.3.3. La modélisation de la turbulence : le modèle TURKEY 2.7.3.4 51 2.7.3.5. Les dépôts secs et humides _____ 52 2.7.3.6. Les effets de gravité 52 Le calcul de la surhauteur 2.7.4. Les données d'entrée et les variables calculées _____ 2.7.3.7. 52 52 Définition du site 52 2.7.4.1. Les données d'émissions 2.7.4.2. 53 La meteorologie______ 2.7.4.3. 53 2.7.4.4. 53 2.7.5. L'interface _____ 54 L'interface graphique 2.7.5.1. 54 2.7.5.2. L'organisation des données _____ 55 Le lancement de calcul en batch 2.7.5.3. 55 2.7.6. Les performances et les limitations 56 Les avantages _____ 2.7.6.1. 56 2.7.6.2. Les limites 56 2.8. Le traitement statistique des résultats_____ 56 _____ 57 3. Etude de sensibilité Rappel du comportement général d'un panache de polluants _____58 3.1. 3.2. 59 Influence des conditions de rejet _____ 3.2.1. 59 3.2.2. 59 3.2.3. 61 3.2.4. Le calcul de surhauteur 64 Les différents modèles de surhauteur _____ 64 3.2.4.1. La modification du terme source _____ 3.2.4.2 65 3.2.5. Géométrie de la source _____67 Comportement du panache pour différentes tailles de source ______ 67 3.2.5.1. 3.2.5.2. Comportement du panache pour différentes formes de sources _ 70

6/228

odélisation c	e la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateu partie : Evaluation des modèles .	ır - 2 ^{ème}
3.2.5 3.2.5 3.2.5	 Critère de représentation de sources complexes par des sources plus simples Exemples de représentation d'une source de géométrie complexe par une source ponct Exemples de représentation d'une source de géométrie complexe par une source 	73 uelle79 ce de
géor 3.2.5	nétrie plus simple 6.6. Exemples de regroupement de sources multiples en une source ponctuelle : cas d'u	80 n site
326	Variabilité temporelle des conditions d'émission	03 85
3.2.6	1. Description des données d'entrée et de la démarche utilisée	85
3.2.6	.2. Les caractéristiques du rejet sont constantes pour toutes les heures de l'année	86
3.2.6	.3. Modulation diurne des émissions	88
3.2.6	Modulation hebdomadaire des émissions	_ 91
3.2.6	6.6. Conclusion	93 96
3.3.	Influence des conditions météorologiques	96
3.3.1.	Vitesse du vent moyen	96
3.3.1	.1. Influence de la vitesse du vent moyen sur la concentration	96
3.3.1	.2. Paramètres influençant la vitesse du vent moyen	_ 96
3.3.2.	Direction du vent	- 97 97
3.3.2	.2. Paramètres influencant la direction du vent	
3.3.3.	La stabilité atmosphérique	99
3.3.3	.1. Influence de la stabilité atmosphérique sur la dispersion	99
3.3.3	.2. Paramètres influençant la stabilité de l'atmosphère	_ 101
3.3.4.	l urbulence atmosphérique	101
১.১.4 ব ব ⊿	Paramètres influencent la turbulence atmosphérique	101
3.3.5.	La couverture nuageuse	103
3.3.5	.1. Situation de jour	104
3.3.5	.2. Situation de nuit	107
3.3.6.	Hauteur de la couche limite	_ 109
3.3.6	1.1. Influence de la hauteur de la couche limite sur la concentration	_ 109
3.3.0	Précipitations	- 111 111
3.3.8.	Représentativité des mesures météorologiques	113
3.3.9.	Variabilité des conditions météorologiques	113
3.4.	Influence des caractéristiques du site	_117
3.4.1.	Présence du sol et processus de dépôt sec	117
3.4.2.	Rugosité du sol	_ 119
3.4.3.	Relief	_ 121
3.4.3 3.4.3	2 Ecoulement neutre	_ 121 _ 127
3.4.4.	Obstacles	_ 133
4. Prés	entation des résultats obtenus sur les cas tests	140
4.1.	La démarche d'évaluation des modèles sur les cas tests	_140
4.1.1.	Rappel des objectifs initiaux de l'évaluation des modèles sur des cas tests	_ 140
4.1.2.	Presentation des cas tests	_ 141
4.1.3. 113	La demarche d'évaluation	_ 141 1/1
4.1.3	2. Choix des variables à comparer	142
4.1.3	.3. Calcul des paramètres statistiques	143
4.2.	Le cas test de Prairie Grass	_146
4.2.1.	Présentation de l'expérience	_ 146
4.2.2.	Elaboration des scénarios de simulation avec le logiciel ADMS et présentation des resultats	_ 146
4.2.3.	Elaboration des scenarios de simulation avec ARIA IVIPAU EL présentation des résultats	_ 149
4.2.4.		ats 194

7/228

	partie : Evaluation des modèles .	r - 2`
4.2.5.	Elaboration des scénarios de simulation avec le modèle SPRAY et présentation des resultats	s 158
4.2.6.	Comparaison des résultats des modèles gaussiens	160
4.2.7.	Conclusion	163
43	Le cas test d'Indianapolis	164
431	Présentation de l'expérience	164
4.3.2	Elaboration des scénarios nour ADMS et présentation des résultats	164
4.3.3.	Elaboration des scénarios pour ARIA IMPACT et présentation des résultats	168
4.3.4	Elaboration des scénarios pour le modèle TRAMES et analyse des résultas	171
4.3.5	Elaboration des scénarios pour le modèle SPRAY et analyse des résultats	173
4.3.6.	Comparaison des modèles gaussiens	177
4.3.7.	Conclusion	179
4.4.	Conclusion sur l'étude des cas tests	_ 180
5. Etude	des cas industriels	181
5.1.	Objectifs initiaux et réorientations de l'étude	181
5.2	Pécenitulatif des ess industrials proposés lors des entrations	402
5 .2.1.	SOCOTEC	_10∡ 182
5.2.2.	ATOFINA	182
5.2.3.	EDF	183
5.2.4.	RENAULT	183
5.2.5.	Ciments Lafarge	183
5.2.6.	Suez Environnement	183
5.3.	Démarche de modélisation des cas industriels	184
5.3.1.	Définition de la situation physique à modéliser	184
5.3.1.	1. Les phénomènes météorologiques locaux	184
5.3.1.	2. La nature des polluants	187
5.3.1.	3. Les caractéristiques du rejet	188
5.3.2.	Inventaire des données disponibles	188
5.3.2.	1. Les données concernant le site	188
5.3.2.	2. Les caractéristiques du rejet	189
5.3.2.	 Les caractéristiques du polluant 	190
5.3.2.	4. La météorologie	191
5.3.3.	Le choix des hypothèses de modélisation	192
5.3.3.	1. Le choix du modèle	192
5.3.3.1	2. Le choix des options de modélisation	193
5.3.3.3	3. Le choix de la mise en œuvre du problème	194
5.4.	Application de la méthodologie d'étude d'un cas réel à l'usine Atofina de	e La
	IJJ Définition de la situation physique à modélicer	105
0.4.1. 5/1	Δοιπιιώτι με la situation physique à MOUEllSel 1 Δnalves du site et des nhénomènes météorologiques locaux	190
5/11	Analyse du site et des prenomenes meteorologiques locaux	100
541	2. Les caractéristiques du rejet	107
541	1 La météorologie	107
541	5 Analyse climatologique	190
542	Application de plusieurs modèles de dispersion au cas industriel ATOFINA	206
542	1 Le choix du modèle	200
542	2. Application du modèle ADMS	206
542	Application des logiciels MINERVE et SPRAY au cas réel de l'usine de La Chambre	200
5.4.2	 Application des logiciels MINERVE et HERMES au cas réel de l'usine de la Chambre 	217
5.4.3.	Conclusion sur l'étude du cas réel de l'usine ATOFINA	222
		222
6. (CONC		

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

7.1. HERMES	Elaboration des scénarios pour le cas test de prairie grass avec le mo S et présentation des resultats	dèle _224
7.2. et analys	Elaboration des scénarios pour le cas test d'indianapolis avec le modèle HER se des résultas	MES _226
8. REFE	ERENCES	228
8.1.	Scientifiques	_228
8.2.	Adresses URL	_228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

1. INTRODUCTION

1.1. CONTEXTE DE L'ETUDE

L'Association R.E.C.O.R.D. a confié au Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique de L'Ecole Centrale de Lyon (LMFA), une étude relative à la dispersion des émissions atmosphériques chroniques d'un site industriel correspondant à un fonctionnement normal des installations. Le contexte de l'étude concerne principalement la prise en compte de la modélisation du transport et de la dispersion des polluants atmosphériques dans les études réglementaires (études d'impact). Rappelons que l'objectif de la modélisation dans les études d'impact est en particulier de déterminer l'impact maximum au sol ou sur des cibles bien identifiées de rejets de polluants dans l'atmosphère. Plus précisément, il s'agit de localiser et de quantifier cet impact, soit pour des séquences météorologiques bien définies (impact à court terme), soit pour des périodes plus longues (impact à long terme).

Dans le cadre des études d'impact que les industriels doivent réaliser, il est donc important de pouvoir connaître la précision et les limitations des modèles mis en œuvre. Pour cela, il est nécessaire d'évaluer ces modèles afin de vérifier qu'ils feront bien les bonnes prédictions. L'évaluation doit porter sur les performances opérationnelles des modèles : est-ce qu'ils prédisent correctement les niveaux maximums de concentration, mais également sur la physique qu'ils contiennent : est-ce que le modèle est basé sur des principes physiques solides et est-ce qu'il donne de bonnes prédictions pour de bonnes raisons ? Enfin, l'évaluation doit permettre de pouvoir distinguer les performances entre différents modèles. Souvent dans les études d'impact, on ne va considérer que les performances opérationnelles des modèles en plaçant au second ordre la physique qu'ils renferment. Il existe pourtant de bonnes raisons pratiques à l'utilisation d'une physique bien adaptée au problème à modéliser. C'est en particulier de pouvoir faire confiance aux prédictions du modèle lorsqu'il est utilisé en dehors des plages correspondant aux données expérimentales existantes ou lorsqu'il est nécessaire de modéliser de nouvelles situations avec des conditions de dispersion différentes. L'évaluation des modèles que nous avons réalisée s'est faite en plusieurs étapes. Une première étape a consisté à analyser les principes physiques mis en œuvre dans les différents modèles et les avantages et les limites de chaque modélisation ; cette partie fait l'objet du chapitre 2. Ensuite, nous avons identifié la sensibilité des modèles aux paramètres d'entrée (chapitre 3). Nous avons aussi évalué les modèles sur des cas tests (deux campagnes de terrain), les résultats de cette évaluation sont présentés au 4^{ème} chapitre. Enfin, nous avons utilisé les modèles sur des cas réels afin notamment de comparer l'intérêt d'une approche de modélisation par rapport à une autre (chapitre 5).

1.2. OBJECTIFS DE L'ETUDE PROPOSEE

Une première étude réalisée au cours des années 2001 et 2002 a permis d'établir un état de l'art dans le domaine de la modélisation du transport et de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel. Cet état de l'art comporte notamment des rappels théoriques sur la dispersion turbulente, la météorologie locale et la dispersion atmosphérique, ainsi que les modélisations associées. Cette étude a aussi permis de réaliser un inventaire des différents modèles de dispersion proposés sur le marché et de faire un bilan des bases de données expérimentales susceptibles de fournir des cas tests.

Le travail proposé sur la deuxième phase du projet avait pour principal objectif d'évaluer un nombre restreint de modèles sur des cas tests suffisamment documentés, représentatifs de situations typiques de dispersion dans l'atmosphère, et sur des cas réels plus proches des études d'impact réalisées par les industriels.

Ce travail permet de répondre à un certain nombres de questions que se posent les utilisateurs concernant d'une part les performances des modèles et d'autres part la mise en œuvre de ces modèles sur des cas réels.

10/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Nous avons retenu cinq modèles.

- Un modèle de panache gaussien « deuxième génération » ADMS 3 distribué par NUMTECH
- Un modèle de panache gaussien « première génération » ARIA IMPACT
- Un modèle à bouffées gaussiennes TRAMES
- Un modèle lagrangien SPRAY
- Un modèle eulérien HERMES

Ces 4 derniers modèles sont distribués par ARIA Technologies. Nous avons souhaité travaillé avec un troisième fournisseur de logiciel, TRANSOFT, mais après plusieurs discussions, ils n'ont finalement pas souhaité participer au projet.

La première étape d'évaluation des modèles consiste à étudier les possibilités de simulation qu'ils offrent à l'utilisateur et quelles sont les modélisations physiques associées.

La deuxième étape d'évaluation des modèles est l'étude de deux cas tests représentant des situations relativement courantes : sol plat avec différentes stratifications (stable, neutre et instable). Elle permet de disposer de simulations commentées qui sont notamment utiles à la formation des utilisateurs et à la prise en main des modèles. Elle permet aussi d'établir une comparaison des possibilités et des fonctionnalités de chaque approche de modélisation et de réaliser un premier classement des modèles en fonction des problèmes à traiter. Elle permet enfin d'évaluer les modèles en fonction de leurs performances propres, sur des cas réels correspondant aux principaux phénomènes rencontrés.

Parallèlement à cette étude des cas tests, nous avons effectué une étude de sensibilité à partir des questions qui se posent à l'utilisateur quand il doit utiliser le modèle dans un cas concret. Elle permet notamment d'identifier et de quantifier les incertitudes sur les données de sortie en fonction de la qualité des données d'entrée dont on dispose pour réaliser les études.

Enfin, pour guider l'utilisateur dans sa démarche de modélisation d'un site industriel, nous avons élaboré une méthodologie d'analyse de la situation à modéliser. Cette méthode illustrée par l'étude d'un cas réel complexe permet en particulier aux industriels d'appréhender concrètement l'intérêt d'une approche de modélisation par rapport à une autre en fonction de la complexité de la situation à modéliser.

11/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2. PRESENTATION DES MODELES RETENUS

L'objectif de ce chapitre est de présenter les différentes fonctionnalités des logiciels de dispersion que nous avons utilisés pour l'étude RECORD comme un nouvel utilisateur pourrait les découvrir. Nous analysons les différents modèles physiques qui sont appliqués pour calculer la dispersion. Enfin, nous présentons les données d'entrée nécessaires au modèle et comment l'utilisateur communique avec le logiciel.

2.1. ARIA IMPACT

2.1.1. DESCRIPTION GENERALE DU MODELE

Le logiciel ARIA IMPACT est distribué par la société ARIA Technologies. C'est un modèle de panache gaussien qui permet de simuler la dispersion des polluants atmosphériques issus d'une ou de plusieurs sources pour des domaines de 1km à 30km de côté. Il permet de déterminer des concentrations de polluant uniquement au sol pour des situations météorologiques particulières et de simuler la dispersion de rejets sur le long terme. L'utilisateur communique avec le logiciel au moyen d'une interface graphique.

Les conditions d'obtention du logiciel sont disponibles auprès de la société ARIA Technologies.

2.1.2. LES FONCTIONNALITES DU MODELE

2.1.2.1. Les sources

Le logiciel ARIA IMPACT permet de prendre en compte des sources de différentes formes : elles peuvent être ponctuelles, linéiques, surfaciques ou volumiques. Il est aussi possible de faire un calcul avec plusieurs sources : le programme effectue un calcul pour chaque source et somme la contribution de chacune des sources

L'utilisateur définit le débit massique des sources et peut affecter une modulation temporelle au rejet.

Le logiciel ARIA IMPACT permet de calculer la surélévation du panache. Plusieurs modélisations sont proposées, elles seront détaillées dans le paragraphe 2.1.3.9.

2.1.2.2. Les polluants

Il est possible de prendre en compte deux types de polluants : les effluents gazeux passifs et les poussières sensibles aux effets de la gravité. Dans ce cas, le logiciel permet de calculer les dépôts secs et humides de poussières.

2.1.2.3. La météorologie

Le logiciel ARIA IMPACT permet de simuler l'état turbulent de l'atmosphère par un système de classes de stabilité.

Il contient un modèle à bouffées gaussiennes qui lui permet de prendre en compte les vents calmes.

Il est possible de calculer la variation verticale du vent et de la température. A partir des données de vent et de température définies à une certaine hauteur, le logiciel recalcule le vent et la température à la hauteur de la source.

Les effets de relief peuvent être pris en compte de manière simplifiée. La modélisation de ces phénomènes est décrite au paragraphe suivant. En revanche, les obstacles ne peuvent pas être pris en compte.

12/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.1.2.4. Les différents types de calcul

Le logiciel permet d'effectuer plusieurs types de simulation :

- un calcul académique à partir d'une situation météorologique particulière définit par l'utilisateur.
- un calcul statistique à long terme à partir d'une série météorologique. Il est alors possible de calculer la moyenne de concentration annuelle, la moyenne mensuelle, les fréquences de dépassement d'un seuil et les centiles.
- un calcul statistique à long terme à partir d'une rose des vents.

Le logiciel peut aussi calculer une rose des vents à partir d'une série météorologique.

2.1.3. LES HYPOTHESES ET LES MODELISATIONS PHYSIQUES

2.1.3.1. Les hypothèses générales

Pour tous les types de calculs, les hypothèses suivantes ont été retenues :

- La météorologie (vent, turbulence, température) est homogène sur tout le domaine. On considère que l'écoulement horizontal est uniforme et que la composante verticale du vent est négligeable devant la composante horizontale
- La densité des polluants est voisine de celle de l'air
- On considère une situation stationnaire.

2.1.3.2. La modélisation de la stabilité

Dans le logiciel ARIA IMPACT, la stabilité est définie sous forme de classe (cf Etat de l'art ch 3.2). Elle peut être définie par l'utilisateur au moment de la définition des paramètres météorologiques ou calculée par le logiciel. Ce sont les formulations de Pasquill qui sont utilisées par le modèle pour la détermination des classes mais il existe dans le logiciel des correspondances entre les différentes formulations (Pasquill, Doury et Brookhaven).

Le logiciel propose plusieurs méthodes de détermination de la classe de stabilité en fonction des paramètres météorologiques définis.

• La méthode « rayonnement-vent »

Cette méthode utilise la vitesse du vent et la valeur du rayonnement net le jour et la nébulosité la nuit pour déterminer la classe de stabilité.

Le jour, plus le rayonnement augmente plus l'atmosphère est instable. De même, plus le vent est faible plus l'atmosphère est instable. La stabilité diurne varie entre très instable et neutre.

La nuit, l'atmosphère est stable ou neutre.

La méthode de gradient de température

Si on connaît la température à deux altitudes on peut calculer le gradient thermique. Il existe alors une correspondance entre la valeur du gradient et la classe de stabilité.

• Méthode « sigma-direction »

L'écart-type de la fluctuation de la direction du vent permet de déterminer la classe de stabilité.

Plus l'écart-type sur la direction est grand plus l'atmosphère est instable.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• Méthode « gradient de température et humidité »

Cette méthode permet d'affiner la méthode de détermination de la stabilité à partir du gradient thermique en ajoutant une condition sur l'humidité.

• Méthode « nébulosité-vent »

C'est la méthode la plus couramment utilisée car les données météorologiques disponibles contiennent souvent la nébulosité.

Dans cette méthode, on détermine un indicateur de rayonnement qui dépend de la nébulosité et de l'heure de la journée donc de la hauteur du soleil.

Le jour, plus le vent est faible, plus l'atmosphère est instable. De même, plus le rayonnement est fort, plus l'atmosphère est instable. La stabilité diurne varie entre très instable et neutre.

La nuit ou un jour couvert, l'atmosphère est stable ou neutre.

Commentaire :

Les méthodes de détermination de la classe de stabilité à partir des données météorologiques sont des méthodes semi-empiriques fondées sur les principes physiques suivants. La turbulence de l'atmosphère a 2 origines : l'une mécanique engendrée par le vent et ses fluctuations et l'autre thermique. D'un point de vue général, lorsque le vent est fort, la turbulence mécanique est prépondérante et l'atmosphère est neutre. Lorsque le vent est faible, si l'énergie thermique près du sol est importante et que la convection naturelle s'installe, l'atmosphère est instable. Sinon, l'atmosphère est stable.

Ces méthodes permettent d'avoir une estimation globale de la stabilité de l'atmosphère, mais elles ne permettent pas d'avoir une description de la structure verticale de l'atmosphère.

2.1.3.3. Le calcul des profils verticaux de vent

Les données de vent et de température fournies au logiciel sont généralement des données ponctuelles correspondant à une mesure à une hauteur donnée. Si cette hauteur est différente de la hauteur de la source, on peut calculer des profils de vent et de température afin d'estimer le vent et la température à la hauteur du rejet (cf Etat de l'art ch 3.2.2.1).

Le profil de vent est calculé suivant la loi d'Irwin valable sur 200m au-dessus du sol.

$$V(z) = U_0 \left(\frac{z}{z_0}\right)^b$$
 (2.1)

Avec V la vitesse du vent à l'altitude z et U_0 la vitesse du vent à l'altitude z_0 .

Le coefficient b dépend de la classe de stabilité et de l'occupation des sols. Le modèle distingue deux types de sols (zone urbaine ou zone rurale).

Commentaires :

L'utilisation de cette formule expérimentale permet d'estimer le vent à la hauteur de la source.

2.1.3.4. Calcul de la hauteur de la couche de mélange

Pour une simulation à partir de données météorologiques séquentielles, le logiciel ARIA IMPACT calcule la hauteur de la couche de mélange. Ce calcul est effectué par le préprocesseur météo METPRO qui permet d'évaluer la hauteur de la couche limite ainsi que la longueur de Monin Obukhov et la vitesse de frottement. La hauteur de la couche limite est déterminée à partir du bilan énergétique à la surface du sol.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.1.3.5. La prise en compte des vents calmes

Il est possible dans le cas des vents calmes de calculer la concentration au sol. Le logiciel ARIA IMPACT utilise pour cela un modèle à bouffées gaussiennes.

2.1.3.6. La modélisation gaussienne

Le logiciel ARIA IMPACT est fondé sur un modèle de panache gaussien (cf Etat de l'art ch 2.3.1.1), la concentration des polluants au sol dans un repère centré sur la source et orienté dans la direction du vent est donc déterminée de la manière suivante

$$C = \frac{Q_s}{\pi \sigma_y \sigma_z U} \exp\left(-\frac{1}{2}\left[\frac{H^2}{\sigma_z} + \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right]\right)$$
(2.2)

Avec Q_s le débit massique de la source, H la hauteur du rejet, U la vitesse du vent à la hauteur du rejet H, et σ_y et σ_z les écarts-types du panache qui dépendent de la distance entre le récepteur et la source et de la stabilité.

2.1.3.7. L'influence de la hauteur de la couche limite

Si la hauteur de la couche limite est connue, l'utilisateur peut choisir de tenir compte du blocage du panache par le sommet de la couche (cf Etat de l'art ch 3.2.3). Dans le calcul de la concentration au sol, on suppose alors que le panache est réfléchi sur le sommet de la couche limite. La concentration au sol est donc modifiée de la manière suivante :

$$C = \frac{Q_s}{2\pi\sigma_y\sigma_z U} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left(\exp\left[\frac{-H^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[\frac{-(2h-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[\frac{-(2h+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[\frac{-(2h+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right)$$
(2.3)

Où h est la hauteur de la couche limite.

2.1.3.8. Le calcul des écarts-types

Le logiciel propose plusieurs formulations des écarts-types (cf Etat de l'art ch 4.1.3) :

- La formulation de Pasquill-Turner (1974) : les écarts-types sont fonction de la distance à la source et des 6 classes de stabilité de Pasquill. Cette formulation a été établie à partir des résultats de l'expérience de Prairie Grass.
- Les formulations de Briggs (1973) : il existe deux formulations suivant la rugosité du terrain. Les écarts-types sont fonction des classes de stabilité de Pasquill et de la distance à la source. Si la rugosité est inférieure à 0.5 m (site de campagne peu accidenté), on utilise les formules de Briggs Open Country et si la rugosité est supérieur à 0.5 m (site urbain) on utilise les formules de Briggs Urban. Ces relations empiriques pour décrire les écart-types de diffusion ont été obtenues à partir de résultats d'expériences menées à St-Louis aux Etats-Unis.
- La formulation de Doury recommandée par le CEA (1976) : les écart-types dépendent du temps et des 2 classes de stabilité de Doury : diffusion faible et diffusion normale.
- La formulation du Brookhaven National Laboratory : les écarts-types sont fonction de la distance à la source et des 4 classes de stabilité de Brookhaven.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.1.3.9. Le calcul de la surhauteur

Lorsque les rejets ont une température supérieure à celle de l'air ambiant ou que leur vitesse d'éjection est importante, les panaches s'élèvent au-dessus de la cheminée (cf Etat de l'art ch 4.4.2). Pour calculer la concentration de polluants au sol, il convient de tenir compte de cette surhauteur. Le logiciel ARIA IMPACT propose plusieurs méthodes pour calculer la surélévation finale; ces méthodes tiennent compte soit des effets thermiques soit des effets dynamiques soit des deux méthodes (Tableau 1).

Dans le calcul de la concentration au sol, la hauteur effective du rejet est la somme de la hauteur de la source et de la surélévation.

Formules	Sources	Stabilité atmosphérique	Vent	Distance à la source	Remarques
Holland	Petites cheminées	Non	tous	Non prise en compte	Seuls les effets dynamiques sont pris en compte
	Flux thermique modeste				
Briggs (1986)	Toutes	Oui	tous	Prise en compte	Distinction entre les effets de flottabilité et les effets dynamiques
Anfossi	Toutes	Oui	tous	Prise en compte	
Concawe	Grosses cheminées, flux thermique important	Non	> 1m/s	Non prise en compte	Seuls les effets thermiques sont pris en compte
Stumke	Petites cheminées Flux thermique modeste	Non	> 1m/s	Non prise en compte	Seuls les effets dynamiques sont pris en compte
Cude	toutes	Non	> 2m/s	Prise en compte	Seuls les effets dynamiques sont pris en compte. Une déflection du panache est calculé pour les gaz plus lourds que l'air.

Tableau 1 – Différentes formulations de la surhauteur contenues dans le logiciel ARIA IMPACT.

Commentaires :

Ces méthodes de modélisation permettent de prendre en compte les effets de surélévation du panache de manière plus ou moins simplifiée. La méthode semi-empirique de Briggs (1975) qui utilise un critère pour distinguer les effets thermiques des effets dynamiques est certainement la plus précise.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.1.3.10. Les rejets de particules

Dans le cas d'un rejet de particules dont le diamètre d et la masse volumique ρ_p sont connus, les particules sont soumises aux effets de la gravité (cf Etat de l'art ch 4.3.2) et elles ont donc une vitesse de chute non nulle. Cette vitesse est calculée suivant la loi de Stokes :

$$V_{g} = \frac{d^{2}g(\rho_{p} - \rho_{a})}{18\mu}$$
(2.4)

Avec ρ_a la masse volumique de l'air et μ la viscosité dynamique de l'air.

Remarque : habituellement, cette formule est valable pour des nombres de Reynolds inférieur à 1, donc pour des particules dont le diamètre est inférieur à 1 micron. Cependant, pour des particules de diamètre inférieur à 10 microns, la vitesse de chute est négligeable devant la vitesse d'advection. On considère donc que les petites particules se comportent comme un gaz. L'utilisation de cette formule pour des particules de tailles non négligeables surestime la vitesse de chute.

Cet effet de gravité modifie la hauteur effective H_p du panache :

$$H_{p} = H - V_{g} \frac{x}{U}$$
 (2.5)

Où x est la distance à la source et U la vitesse du vent.

La formulation gaussienne de la concentration au sol devient donc :

$$C = \frac{Q_s}{\pi \sigma_y \sigma_z U} \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{H_p^2}{\sigma_z^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2}\right]\right)$$
(2.6)

Le logiciel permet de calculer le dépôt sec de particules en tenant compte de l'appauvrissement du panache au cours de son évolution et le dépôt humide dû au lessivage par la pluie.

Commentaires :

Le calcul des dépôts est discrétisé suivant l'axe de propagation du panache.

2.1.3.11. La prise en compte de la topographie

Le logiciel ARIA IMPACT permet de prendre en compte le relief en aval de l'écoulement de manière simplifiée. Si le panache d'une hauteur H passe au-dessus d'un relief de hauteur H_t inférieure à H :

- En atmosphère neutre ou instable, la hauteur de l'axe du panache est H+H_{t/2}
- En atmosphère stable, la hauteur de l'axe du panache reste constante.

Si le panache d'une hauteur H passe au dessus d'un relief de hauteur H_t supérieure à H :

- En atmosphère neutre ou instable, la hauteur de l'axe du panache est Ht+H/2
- En atmosphère stable, la hauteur de l'axe du panache est fixée à 10m au dessus du sol.

C'est un modèle très simple, fondé sur un comportement qualitatif du panache en fonction de la stabilité, qui ne permet pas de représenter des zones de relief marqué. Ce modèle ne permet en aucun cas de décrire l'écoulement autour d'un relief.

17/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.1.4. LES DONNEES D'ENTREE ET LES VARIABLES CALCULEES

Le logiciel propose une organisation sous forme de « projet » dans lequel sont définis le domaine d'étude, les espèces, les sources et la météorologie. Les options de modélisation sont définies au moment du lancement du calcul.

2.1.4.1. Définition du site

La grille de calcul et les éléments comme les sources et les récepteurs peuvent être définis manuellement par l'utilisateur au moyen de l'interface ou importés du préprocesseur ARIA Relief qui permet de convertir des données de topographie type IGN ou USGS au format ARIA.

Il convient aussi de préciser le type de sol du site parmi les 10 catégories proposées (urbain, forêt, neige,...). Chaque catégorie correspond à une valeur de rugosité et de l'albédo.

La grille de calcul est définie par les coordonnées du point sud-ouest (au format géographique, Lambert II ou UTM) ainsi que par le nombre de points dans les directions x et y et la distance entre les points.

Les sources et les récepteurs sont définis par leurs coordonnées.

2.1.4.2. Les données d'émissions

Les sources sont localisées par l'intermédiaire de l'interface graphique. Elles peuvent être ponctuelles, linéiques, surfaciques ou volumiques. Il convient ensuite de préciser les caractéristiques de ces sources : dimensions géométriques, hauteur, vitesses et températures des rejets, débits de polluants ainsi que la modulation des émissions (horaire, hebdomadaire et mensuelle).

Il est aussi nécessaire de donner les caractéristiques des polluants : la masse volumique pour les gaz et la vitesse de dépôt, le diamètre et la masse volumique pour les poussières.

2.1.4.3. La météorologie

Pour un calcul et pour une situation météorologique particulière, l'utilisateur doit spécifier les données météorologiques via l'interface. Les données obligatoires sont la date et l'heure GMT du calcul, la vitesse et la direction du vent, la température et un paramètre permettant de déterminer la classe de stabilité atmosphérique par exemple la classe de Pasquill ou la nébulosité.

Pour un calcul depuis une rose des vents, l'utilisateur doit remplir un tableau d'occurrence correspondant à la rose des vents. Cette option permet uniquement de réaliser des calculs de concentration moyenne.

Pour un calcul statistique à partir d'un fichier météorologique, l'utilisateur doit importer un fichier contenant les paramètres suivants : les dates et heures, pour chaque date la vitesse et la direction du vent, la température et un paramètre permettant de déterminer la stabilité atmosphérique.

2.1.4.4. Les paramètres de sorties

Les différents paramètres calculés par ARIA IMPACT sont

- La concentration et éventuellement les dépôts au niveau du sol sur la grille définie par l'utilisateur et aux points récepteurs dans le cas d'un calcul académique.
- La concentration moyenne, les percentiles et les fréquences de dépassement de seuil pour un calcul statistique.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Le logiciel ARIA IMPACT crée plusieurs fichiers de sortie : un fichier binaire de résultat contenant la concentration au sol et les dépôts sur la grille définie par l'utilisateur, un fichier texte contenant les options de calcul et les concentrations aux points récepteurs, un fichier texte contenant les concentrations calculées sous l'axe du panache.

Il est possible de visualiser par l'interface graphique les résultats sous forme d'iso-contours sur la carte du domaine ou encore d'exporter les résultats aux formats suivants : Surfer, Mapinfo, Arcinfo ou texte.

2.1.5. L'INTERFACE

2.1.5.1. L'interface graphique

L'utilisateur peut construire et effectuer des simulations par l'intermédiaire d'une interface graphique. Des onglets permettent de définir les données d'entrées (le site, la météorologie, les polluants) et de lancer l'exécution d'un calcul. Un écran permet de visualiser le site défini avec les sources, les récepteurs et les éléments de cartographie ainsi que les résultats de la simulation sous forme d'iso-contours (Cf. Figure 1 et Figure 2).



Figure 1 : Présentation de l'interface graphique d'ARIA IMPACT

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 2 : Visualisation des concentrations au sol avec ARIA IMPACT

2.1.5.2. L'organisation des données

Les scénarios de simulations sont stockés sous forme de projet. Chaque projet contient plusieurs fichiers où sont définis les éléments du scénario (le site, les caractéristiques des sources et des polluants, la météorologie,...) ainsi que les options de modélisation. Par défaut, les fichiers de résultats sont stockés dans le même répertoire.

2.1.5.3. Le lancement de calcul en batch

Il est possible de lancer un ensemble de simulations en mode batch à partir du répertoire contenant les exécutables du logiciel en précisant le nom du projet et des fichiers de sorties.

2.1.6. LES PERFORMANCES ET LES LIMITATIONS

2.1.6.1. Les avantages

- Les temps de calculs du logiciel sont très courts, ce qui permet de faire des études statistiques sur des séries météorologiques dans un temps raisonnable. Pour étudier une source avec un an de données météorologiques séquentielles, avec un pentium 4 à 3GHZ et 1Go de RAM, il faut de 2 à 3 minutes.
- Le logiciel permet de prendre en compte différentes espèces : gaz ou particules.
- Le logiciel est capable d'exécuter des calculs sur plusieurs sources de formes différentes.
- Il permet de faire différents types de calcul : soit à partir d'une rose des vents, soit à partir d'une série météorologique.
- Il est possible de prendre en compte les vents calmes.

19/228

20/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.1.6.2. Les limites

- La paramétrisation de la stabilité de l'atmosphère n'est pas continue mais discrétisée sous forme de classe.
- La météorologie est homogène sur tout le domaine.
- Les bâtiments ne sont pas pris en compte.
- Les transformations chimiques ne sont pas prises en compte.
- Les résultats des calculs de concentrations ne sont disponibles qu'au niveau du sol.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.2. ADMS 3

2.2.1. DESCRIPTION GENERALE DU MODELE

Le logiciel ADMS 3 est distribué en France par la société NUMTECH. C'est un modèle de panache gaussien de nouvelle génération, développé par le Cambridge Environmental Research Consultants (CERC). Ce logiciel permet de simuler la dispersion atmosphérique d'un rejet industriel sur un domaine allant de quelques centaines de mètres de côté à 50km. Il est capable de simuler des évènements à court terme et de calculer des paramètres statistiques sur le long terme. ADMS permet de reproduire des effets atmosphériques simples liés par exemple à la stratification thermique ou à la présence d'obstacles. Une interface graphique permet à l'utilisateur de réaliser ses simulations.

Les conditions d'obtention du logiciel sont disponibles auprès de la société NUMTECH.

2.2.2. LES FONCTIONNALITES DU MODELE

2.2.2.1. Les sources

Le logiciel ADMS permet de simuler des rejets issus de plusieurs sources. Ces sources peuvent être ponctuelles, linéiques, surfaciques, volumiques ou bien encore correspondre à des jets orientés, c'est-à-dire que la vitesse d'éjection des gaz a une composante horizontale.

L'utilisateur définit le débit massique de chaque polluant pour les différentes sources. Il a aussi la possibilité de moduler les émissions dans le temps soit par l'intermédiaire de l'interface graphique, soit en important un fichier de modulation.

La surhauteur du panache est prise en compte par ADMS en résolvant les équations de conservation de la quantité de mouvement et de la flottabilité.

2.2.2.2. Les polluants

Il est possible de prendre en compte plusieurs types de polluants : soit des gaz, soit des particules. Le calcul des dépôts secs et humides est possible. Certains polluants classiques sont prédéfinis dans ADMS mais l'utilisateur peut créer de nouvelles espèces en précisant leurs noms et leurs caractéristiques. Les polluants peuvent être radioactifs et un calcul de la décroissance radioactive et du débit de dose est possible.

Un module permet d'intégrer les réactions chimiques entre NO, NO_2 et O_3 dans le calcul de concentration.

2.2.2.3. La météorologie

Les données météorologiques peuvent être rentrées manuellement via l'interface graphique ou importées. Il est possible de préciser des caractéristiques du site météorologique différentes du site de la source. Par exemple, les mesures météorologiques peuvent provenir d'un site rural alors que la source est dans une zone urbaine. On peut alors préciser la rugosité, l'albédo, la longueur de Monin Obukhov minimale et les précipitations caractéristiques du site météorologique.

Le logiciel ADMS ne prend pas en compte les vents calmes, la valeur minimale du vent à 10 m est de 0.75 m/s. Dans le cas d'un vent inférieur à 0.75 m/s, le logiciel refuse de faire le calcul.

22/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.2.2.4. Les différents types de calcul

Le logiciel ADMS permet de simuler la dispersion sur le court terme d'un ou de plusieurs polluants à partir d'une situation météorologique précise définie par l'utilisateur via l'interface ou à partir d'un fichier météorologique importé.

ADMS permet aussi de faire un calcul sur le long terme de la concentration. L'utilisateur peut choisir le temps de moyennage ainsi que les percentiles qui l'intéressent.

Il est possible de calculer les dépôts de polluants en fonction des caractéristiques des espèces et des précipitations pour les dépôts humides.

Si on s'intéresse à des polluants radioactifs, il est possible de calculer le rayonnement gamma en des points définis par l'utilisateur.

Enfin il est aussi possible de modéliser la dispersion d'un rejet instantané. Le logiciel utilise alors un modèle à bouffées.

2.2.2.5. La topographie et les bâtiments

Les effets de topographie comme les collines ou les fronts de mer peuvent être pris en compte dans ADMS. Il est aussi possible de prendre en compte les variations de rugosité.

Le logiciel ADMS permet de prendre en compte l'effet d'un bâtiment proche de la source. Il est possible de spécifier jusqu'à 10 bâtiments. En revanche ce calcul n'est possible qu'avec une source ponctuelle.

2.2.2.6. La visibilité du panache

Le logiciel ADMS propose un calcul de visibilité du panache. Il est alors nécessaire de préciser le rapport de mélange du rejet, ainsi que l'humidité et la température de l'air ambiant.

2.2.2.7. Les fluctuations de concentration

Le logiciel ADMS peut calculer des fluctuations de concentration afin de répondre à des problématiques de calcul d'odeur.

2.2.3. LES HYPOTHESES ET LES MODELISATIONS PHYSIQUES

2.2.3.1. Paramétrisation de la couche limite et calcul de la stabilité

Dans ADMS, la stabilité de la couche limite atmosphérique n'est pas déterminée par une classe, mais de manière continue par le rapport de 2 paramètres : la hauteur de la couche limite et la longueur de Monin-Obukhov. (cf Etat de l'art ch 3.2.3.2) La longueur de Monin-Obukhov est définie par :

$$L_{MO} = \frac{-u_*^3 \rho C_p T_0}{\kappa g F_{\theta 0}}$$
(2.7)

Avec u^{*} la vitesse de frottement, κ la constante de von Kaman, $F_{\theta 0}$ le flux de chaleur à la surface, T la température de l'air près du sol, ρ la masse volumique et Cp la capacité thermique.

Dans des conditions instables, la longueur de Monin-Obukhov est négative. Dans des conditions stables, la longueur est positive et dans un cas neutre, la valeur absolue de la longueur est infinie.

Deux paramètres décrivent donc la structure de la couche limite : z/h, avec z l'altitude et h la hauteur du sommet de la couche limite et z/L_{MO} . Contrairement à la modélisation de Pasquill Gifford, les propriétés turbulentes de la couche limite varient donc avec l'altitude.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

ADMS calcule aussi différentes variables qui varie en fonction de z : la vitesse horizontale, la température et la masse volumique, ainsi que des paramètres qui quantifient la turbulence : les écarts-types sur la vitesse, les échelles de longueurs turbulentes, l'énergie de dissipation, l'échelle de temps lagrangienne et la fréquence de flottabilité.

2.2.3.2. Calcul des concentrations

Dans les situations neutres et stables

La concentration de polluant est calculée à partir de la formule gaussienne qui prend en compte la réflexion sur le sol et sur le sommet de la couche limite

$$C = \frac{Q_{s}}{2\pi\sigma_{y}\sigma_{z}U} \exp(-\frac{y^{2}}{2\sigma_{y}^{2}}) \begin{pmatrix} \exp(\frac{-(z-H)^{2}}{2\sigma_{z}^{2}}) + \exp(\frac{-(z+H)^{2}}{2\sigma_{z}^{2}}) + \exp(\frac{-(z+2h-H)^{2}}{2\sigma_{z}^{2}}) + \exp(\frac{-(z-2h-H)^{2}}{2\sigma_{z}^{2}}) + \exp(\frac{-(z-2h-H)^{2}}{2\sigma_{$$

Avec Q_s le débit massique de la source, U la vitesse du vent à la hauteur du rejet H, h la hauteur de la couche limite et σ_y et σ_z les écarts-types.

L'écart-type σ_z est lié à la vitesse turbulente verticale σ_w et au temps de parcours depuis la source t par la relation suivante : (cf Etat de l'art 4.1.3 et 4.2.2)

$$\sigma_{z} = \sigma_{w} t \left(\frac{1}{b^{2}} + \frac{N^{2}t^{2}}{1 + 2Nt} \right)^{-0.5}$$
(2.9)

Où N est la fréquence de flottabilité et b un coefficient.

L'écart-type σ_v est défini de la manière suivante :

$$\sigma_y^2 = \sigma_{yt}^2 + \sigma_{yw}^2 \tag{2.10}$$

Avec
$$\sigma_{yt} = \sigma_v t (1 + (15.6)^{1/3} u_* t/h)^{-0.5}$$
 (2.11)

 σ_{vw} est égal à $\sigma_{\theta}x$ où σ_{θ} est l'écart-type sur la direction du vent moyen.

Dans le cas instable

Le logiciel utilise des distributions de concentrations gaussiennes latérales. La concentration de polluant est alors la somme pondérée de deux termes : la concentration dans un cas neutre ou stable et la concentration de la couche limite convective. Le calcul des écarts-types est alors le suivant :

$$\sigma_{\rm yc} = \sigma_{\rm vc} t (1 + \frac{t}{h} 0.75^{1/3} \, w_*)^{-1/2}$$
 (2.12)

$$\sigma_{yn} = \sigma_{vm} t (1 + \frac{t}{h} 15.6^{1/3} u_*)^{-1/2}$$
 (2.13)

$$\sigma_y^2 = \sigma_{yn}^2 + \sigma_{yc}^2 + \sigma_{yw}^2$$
(2.14)

Dans le cas instable, la distribution verticale de concentration est non gaussienne. cf (état de l'art ch 4.2.1).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Commentaires : cette détermination des écarts-types de diffusion permet de décrire à chaque instant et en tout point du domaine la concentration en polluant. Les travaux de recherches qui ont conduit à ces formulations ont été réalisés au cours des années 84-85. Il n'existe pas actuellement de formules plus récentes pour calculer les écart-types de diffusion.

2.2.3.3. Calcul de la surélévation du panache

Le logiciel ADMS calcule l'élévation du panache en utilisant un modèle intégral. Les équations intégrales de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de la chaleur sont résolues en supposant que le panache est continu et de section circulaire.

Ce modèle calcule donc la surélévation du panache par rapport à la source en tout point de l'axe du panache et prend en compte les effets de flottabilité et les effets dynamiques.

2.2.3.4. Calcul des dépôts secs et humides

Le dépôt sec de particules est proportionnel à la concentration près du sol (cf Etat de l'art ch 4.6). La constante de proportionnalité étant la vitesse de dépôt du polluant. Cette vitesse dépend de la nature du polluant et de la taille des particules.

Le dépôt humide de particules dépend du taux de lessivage du polluant par la pluie et de la concentration.

2.2.3.5. Les polluants radioactifs

Le logiciel permet de prendre en compte des polluants radioactifs et de modéliser la désintégration radioactive des éléments. La désintégration des isotopes est régie par l'équation suivante :

$$\frac{dN_i}{dt} = -\lambda_i N_i + \sum_{j \neq i} f_{ij} \lambda_j N_j$$

Avec Ni le nombre de moles de l'isotope i, λ la constante radioactive et f_{ij} la fraction de l'isotope j dégradé en isotope i (cf état de l'art 4.3.3).

Il est aussi possible de calculer la dose de rayonnement gamma qui impacte le sol en un point défini par l'utilisateur.

Les isotopes utilisables dans ADMS sont limités.

2.2.3.6. La prise en compte du relief

Le logiciel ADMS peut prendre en compte les effets de relief et de changement de rugosité (cf Etat de l'art ch 4.5.1). En effet le modèle météo FLOWSTAR-D fondé sur un modèle diagnostique linéarisé (Carruthers 1991), calcule l'écoulement en tenant compte de la topographie, de l'occupation des sols et de la stratification thermique. Le calcul des écarts-types et de la concentration dépend ensuite de l'état de stabilité de l'atmosphère.

Le modèle d'écoulement a été testé avec des mesures de terrain et des expériences en soufflerie. Il n'est valable que pour des reliefs modérés (pentes inférieures à 33%). Une pente de 50% avec une zone de recirculation, entraînerait des erreurs considérables dans le calcul de la concentration. Un changement de rugosité d'un facteur 10 est toléré par le modèle.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.2.3.7. Les effets de bâtiments

Il est possible de prendre en compte l'effet des bâtiments (au maximum 10) situé à proximité des sources. On modélise l'effet de la recirculation de l'air en aval du bâtiment par une concentration uniforme dans la zone de recirculation (cf Etat de l'art ch 4.5.2). Cette concentration dépend de la fraction du panache qui est entraînée dans cette zone.

La concentration en aval du bâtiment est alors la somme de deux contributions : le panache au niveau du sol issu de la zone de recirculation et le panache situé au-dessus des bâtiments.

L'effet de rabattement du panache est modélisé par une diminution de la hauteur du panache et une augmentation de la dispersion.

Pour les sources situées en aval du bâtiment, donc dans le sillage, la hauteur du panache est diminuée en fonction de la vitesse du vent à la cheminée et de la vitesse de rejet de la source.

L'effet de rabattement du panache n'a pas été entièrement validé par les expériences.

2.2.4. LES DONNEES D'ENTREE ET LES VARIABLES CALCULEES

Le logiciel propose une organisation sous forme de « scénario » dans lequel sont définis le domaine d'étude et les caractéristiques du site, les espèces, les sources et la météorologie et les options de modélisation.

2.2.4.1. Définition du site

L'utilisateur doit tout d'abord préciser les caractéristiques du site : la latitude et la rugosité. Pour le cas d'un calcul qui tient compte du relief, l'utilisateur doit importer un fichier contenant les données de relief et de rugosité.

La grille de calcul et les coordonnées des récepteurs sont définies via l'interface. Deux systèmes de coordonnées sont disponibles : le système cartésien (x, y, z) et le système polaire (r, θ , z). La grille ne peut excéder 10000 points et le nombre de récepteurs est limité à 100.

2.2.4.2. Définition des sources et des émissions

Les sources sont définies par l'intermédiaire de l'interface graphique, elles peuvent être ponctuelles, linéiques, surfaciques, volumiques ou des jets. Il convient ensuite de préciser les caractéristiques de ces sources : les coordonnées, la hauteur et le diamètre de la cheminée, les vitesses de rejet et les températures d'éjection. Il est aussi nécessaire de donner les caractéristiques du rejet : la masse volumique, la masse molaire, la capacité thermique. Enfin, il est possible d'ajouter une modulation sur les émissions, soit à la main, soit en important un fichier de modulation.

L'utilisateur définit aussi les polluants et leurs caractéristiques : débit massique, nature du polluant (gaz ou particule), le coefficient de lessivage et la vitesse de dépôt.

2.2.4.3. La météorologie

Les données météorologiques peuvent être définies par l'utilisateur via l'interface graphique. Les données obligatoires sont alors : la vitesse et la direction du vent, la date, l'heure et la couverture nuageuse ou la vitesse et la direction du vent, et le flux de chaleur à la surface. Il faut aussi préciser la hauteur de la mesure du vent. D'autres paramètres peuvent être précisés, mais ils ne sont pas obligatoires : la hauteur de la couche limite, la température, l'écart-type sur la direction horizontale du vent et l'humidité relative.

Il est aussi possible d'importer un fichier de données météorologiques. Ce fichier doit contenir au minimum les données décrites précédemment. Il est aussi possible de remplacer le flux de chaleur à la surface par l'inverse de la longueur de Monin-Obukhov.

26/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.2.4.4. Les variables calculées

Pour un calcul sur le court terme, le logiciel ADMS calcule la concentration de polluants au sol sur les points de la grille définie et sur les points récepteurs. Le logiciel calcule aussi la concentration sur l'axe du panache. Il est également possible de connaître les écarts-types, les dépôts secs et humides, la hauteur moyenne du panache et la fraction de polluant qui traverse la couche limite.

Pour un calcul sur le long terme, le logiciel calcule sur la grille définie par l'utilisateur la concentration moyenne, les dépôts et les percentiles paramétrés par l'utilisateur.

le logiciel ADMS permet aussi de connaître les valeurs des variables calculées par le préprocesseur météorologique.

Tous les résultats sont stockés dans des fichiers au format texte. Il est possible depuis l'interface graphique de visualiser certaines courbes comme la concentration sur l'axe en fonction de la distance à la source. Le logiciel ADMS est interfacé avec le logiciel Surfer, il est donc possible de visualiser les résultats sous forme d'iso-contours.

2.2.5. L'INTERFACE

2.2.5.1. L'interface graphique

L'utilisateur peut construire et effectuer des simulations par l'intermédiaire d'une interface graphique. Des onglets permettent de définir les données d'entrées (le site, la météorologie, les polluants, les options de calcul) et de lancer l'exécution d'un calcul (Cf Figure 3). Un onglet permet de visualiser les résultats du calcul de certaines variables (Cf Figure 4 et Figure 5). Par exemple, on peut observer la concentration sur l'axe au sol ou à la hauteur du panache en fonction de la distance à la source.

File	Run! Results I	Jtilities	Pollutar	nts He	lp							
\square	Set <u>u</u> p	Ŷ	<u>S</u> our	ce	ĩ	Me	eteorolo	gy Ì	<u>(</u>	<u>à</u> rids		∫ <u>O</u> utput
6	Enter source d	ata _	New New	Del	ete ete					Emissi	ons	
	Name	Source type	Height (m)	Diam. (m)	Vel (m/s)	Vol (m³/s)	Temp. (°C)	Xp (m)	Yp (m)	L1	•	
S	ource078	Р	50	1	15	11.781	15	0	0	1		
											•	Geometry
	Time varying Name of the Hourly factor	emissio time va	n facto rying fi Data	rs le C:	ACER	C\adm	s-3\da	ita\timev	ary.var			Browse

Figure 3 : Interface graphique d'ADMS

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 4 : Fenêtre de visualisation des résultats de la simulation

ጅ ADMS 3 Line Plotting					- 🗆 >
		<u>A</u> DM	S 3 <u>C</u> ontours	C <u>l</u> ose	<u>P</u> lot
<u>Definition</u> <u>G</u> raph					
	Line Plotting Details				
Type of Modelling Run	e: [Utilisateur]	-	P	ollutants	
Time Dependent Puff	Path: e:\delapo~1\record\cas	s test	SE6		
Type of Graph					
Concentration K Ground Level	G e.\ G delano~1			imes (s)	
Plume Centreline	record				
O Deposition	🗁 cas_test				
□ Wet	bd_brut				
🗖 Total	□ resul □ souffl~1				
O Spread Parameters 🗖 Sigma y	🗋 terrain				
Sigma z					
O Plume Height					
Mean Height	: 00L (w1 101				
O Crosswind Position	i-03b6~1.!01	-			
O Travel Time from Source	i-85-2~1.101				
C Fraction Penetrating Inversion	i-85-2~2.101				
Controline Humidity	i-85-2~4.101				
	i-9002~1.101				
O Probability Distribution Function	i-900b~1.!01				
O Standard Deviation	i-900c~1.101				
O Short Time Average Percentiles	i-900f~1.!01	-			
Select one or more files from those listed for pla	itting		Min:	Max:	

Figure 5 : Les différentes variables visualisables dans l'utilitaire graphique

2.2.5.2. L'organisation des données

Les scénarios de simulations sont stockés sous forme des fichiers textes avec l'extension .APL. Ces fichiers contiennent toute la définition de la simulation : les caractéristiques du site, les données météorologiques, les sources et les polluants, la grille de sortie et les options de modélisation retenues. Les fichiers de résultats sont stockés dans le même répertoire que le scénario de simulation.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.2.5.3. Le lancement de calcul en batch

Il est possible de lancer des simulations en mode batch en précisant le nom de l'exécutable ADMS et le nom du fichier d'extension .APL que l'on souhaite exécuter.

2.2.6. LES PERFORMANCES ET LES LIMITATIONS

2.2.6.1. Les avantages

- Le logiciel ADMS permet de simuler un grand nombre de phénomènes liés à des problématiques de dispersion atmosphérique.
- Il permet de simuler l'impact des rejets atmosphériques sur le long terme et sur le court terme et de calculer des statistiques dans un temps raisonnable. Pour étudier une source avec un an de données météorologiques séquentielles, avec un pentium 4 à 3GHZ et 1Go de RAM, il faut quelques minutes. Les temps de calculs augmentent si on choisit différentes options qui font appel au modèle Flowstar.
- Il permet de calculer l'évolution de la hauteur du panache depuis la source.
- Il permet de prendre en compte de manière précise des effets de topographie (à condition que les variations de relief soient modérées) ou de bâtiments en calculant l'écoulement perturbé par la présence de ces obstacles, les zones de recirculation,...
- Il est aussi possible d'intégrer les caractéristiques du site météorologique.
- Grâce à plusieurs modules spécifiques intégrés au logiciel, ADMS permet de répondre à des problématiques complexes comme le rejet de particules ou de polluants radioactifs ou encore les rejets discontinus, les problèmes d'odeur.

2.2.6.2. Les limites

- Il est possible de visualiser la rose des vents correspondant à une série météorologique, mais il n'est pas possible de l'utiliser pour un calcul à long terme. Il est nécessaire de spécifier manuellement les directions, les vitesses et les fréquences d'occurrence pour faire un calcul à partir d'une rose des vents.
- Le logiciel ADMS est construit sur les bases d'un modèle gaussien. Il ne permet donc pas d'intégrer des écoulements complexes dans un site au relief très accidenté.
- Il n'est pas possible de prendre en compte les vents calmes.

29/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.3. LA PLATE-FORME ARIA INDUSTRY

La plate-forme ARIA INDUSTRY distribuée par la société ARIA Technologies propose 3 modèles de dispersion : un modèle à bouffées gaussiennes (TRAMES), un modèle eulérien (HERMES) et un modèle lagrangien (SPRAY). Ces modèles permettent de calculer la dispersion d'un polluant dans un champ de vent tridimensionnel. Contrairement au modèle gaussien classique, ces modèles permettent de décrire des situations instationnaires comme un rejet non continu et l'évolution du polluant au cours du temps. Ce logiciel propose aussi un modèle météorologique de type diagnostique : MINERVE, qui permet d'interpoler des mesures météorologiques sur un maillage à trois dimensions. Le modèle de météorologie et les 3 modèles de dispersion installés avec la plateforme ARIA Industry sont indépendants les uns des autres et les options de modélisation ne sont pas uniformisées entre les modèles. L'utilisateur communique avec le logiciel au moyen d'une interface graphique. Cette interface lui permet de préparer les données d'entrée pour simuler un problème de rejet de polluant dans l'atmosphère au moyen de différents préprocesseurs :

- Relief : ce préprocesseur permet de générer un fichier contenant les données de topographie au format ARIA à partir de données issue de l'IGN ou de l'USGS.
- Site manager : ce préprocesseur permet de définir les caractéristiques du site industriel (occupation des sols et définition des sources).
- Emission manager : ce préprocesseur permet de définir les espèces émises et les conditions de rejets (débit, modulation, température de rejet,...)

L'utilisateur peut ensuite utiliser le modèle MINERVE pour calculer les fichiers météorologiques qui seront utilisés par les modèles de dispersion. L'utilisation de ce modèle n'est pas obligatoire si l'utilisateur possède déjà des données météorologiques maillées au format ARIA.

L'interface graphique (Figure 6) permet ensuite à l'utilisateur d'appeler l'un des modèles de dispersion. Le choix du modèle de dispersion est entièrement laissé à l'utilisateur. Chaque modèle possède sa propre interface graphique qui permet à l'utilisateur de définir les paramètres de calcul et d'exécuter le calcul. Ces interfaces sont interactives, certaines options ne sont pas accessibles suivant les choix effectués par l'utilisateur. Les options de modélisation contenues dans ces interfaces ne sont malheureusement pas toujours très explicites pour l'utilisateur.

Il est aussi possible d'exécuter chacun des modèles en mode Batch, ce qui permet de faire un grand nombre de simulation de manière automatique.

Les résultats du modèle météorologique MINERVE et des 3 modèles de dispersion sont stockés dans des fichiers binaires. Un post-processeur permet de convertir ces fichiers dans un format lisible par le logiciel SAVI3D qui permet de visualiser en 3 dimensions des isocontours, des lignes de courants,...

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

lcul									ébout
OUVEAU CALCUL			-		TD	AN	(D)	C	Hoode
Début du calo	ul 03-07-80 11:	00:00	-		IL	TIV.	Ľ	i)	Relief
Fin du calc	ul 03-07-80 12:	00:00	-	Fichier météorologique		JERVE\PG1\min1.aiu			
		an janda ya		Tichici mocosi ologiquo	Levennestan				Site Manager
 	ĩ	Ť.	(. r r	1				Emission Manager
omaine Météo	Emission	Reprise	Turi	oulence Options	Sortie			1	
								Valider	Minerve
Grille	GRILLE METEC	ROLOGIQUE	-	4752 450					
Coordonnées				4703,400			<u> </u>	Défaut	Trames
	min	max						Annuler	Umura
x	470,000	473.450	km					Aide	nennes
У	4750.000	4753.450	km				_		Spray
nombre	Pas	étendue	lar.						BIN - RAF
× 70	0.050	3.450	кт	4750.000					
y 70	0.050	3.450	кт	470.000	a d	473.	450		PAR - RAF
									SAVI3D
990-2003 ARIA Techn	ologies							Ilog inside	

Figure 6 : exemple de l'interface graphique ARIA INDUSTRY

Il existe une documentation pour chaque modèle. Ces documentations ne sont pas très faciles d'emploi, entre les références aux variables Fortran et les options de l'interface graphique. De plus, elles ne sont pas toujours à jour et les descriptions techniques des modèles sont parfois imprécises et comportent quelques erreurs.

Ces modèles ont été validés au cours de plusieurs campagnes de mesures : notamment sur la région industrielle de l'Etang de Berre (A. Albergel, 2004), et le site de Notre-Dame de Gravenchon.

Dans la partie suivante, nous allons présenter le modèle météorologique, puis nous détaillerons les principes de calcul et les fonctionnalités des différents modèles tridimensionnels.

2.4. LE MODELE METEOROLOGIQUE MINERVE

Le modèle MINERVE est un modèle météorologique de type diagnostique qui permet, à partir de mesures de vent et de température en surface et en altitude, de reconstituer par une méthode d'interpolation les champs de vent et de température sur un maillage tridimensionnel régulier. Le champ de vent interpolé est ensuite ajusté pour remplir la condition de conservation de la masse.

La topographie

Le modèle MINERVE permet de calculer un champ de vent sur une zone au relief marqué. Il est aussi possible de préciser les variations d'occupations des sols sur la zone d'étude. Le modèle calcule alors le champ de vent en fonction de ces paramètres. En théorie, ce modèle s'applique sur tous les types de relief. Cependant la qualité du résultat dépend beaucoup des données d'entrée du modèle. En effet, si on possède un réseau important de mesures météorologiques au sol et en altitude, il est possible de reconstituer très fidèlement le champ de vent sur une zone de relief accidenté.

Le modèle MINERVE propose différentes méthodes d'interpolation des mesures sur le maillage, le choix étant laissé à l'utilisateur. Les résultats de ces méthodes sont dans l'ensemble équivalents.

30/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• Les obstacles

Il n'est pas possible de prendre en compte les obstacles dans la version actuelle du modèle, mais une nouvelle version prenant en compte les obstacles est en cours de développement chez ARIA Technologies.

La turbulence

Il est possible, en plus du champ de vent, de calculer les coefficients de diffusivité turbulente sur le maillage.

• Les fichiers de sorties

Les fichiers de sortie du modèle MINERVE sont des fichiers binaires contenant le vent et la température sur le maillage tridimensionnel et éventuellement la turbulence et l'humidité.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.5. LE MODELE TRAMES

2.5.1. DESCRIPTION GENERALE DU MODELE

Le modèle TRAMES est intégré au logiciel ARIA Industry. C'est un modèle à bouffées gaussiennes qui permet de simuler en 3 dimensions la dispersion des polluants atmosphériques issus d'une ou de plusieurs sources. Le modèle est fondé sur le principe d'une formulation gaussienne qui permet de suivre dans l'espace et le temps l'évolution d'une bouffée.

2.5.2. LES FONCTIONNALITES DU MODELE

2.5.2.1. Les sources

Le modèle TRAMES permet de prendre en compte des sources de différentes formes : elles peuvent être ponctuelles, linéiques, surfaciques ou volumiques. Il est aussi possible de faire un calcul avec plusieurs sources.

L'utilisateur définit la période d'émission de la source et les caractéristiques du rejet pendant cette période (température, vitesse, quantité émise pendant la période).

Le logiciel TRAMES permet de calculer la surélévation du panache. Plusieurs modélisations sont proposées analogues à celles proposées dans le modèle ARIA IMPACT.

2.5.2.2. Les polluants

Il est possible de prendre en compte plusieurs types de polluants : les effluents gazeux passifs, les poussières, les aérosols, les gaz lourds, les éléments radioactifs. Le logiciel calcule les dépôts secs et humides ainsi que la décroissance radioactive.

2.5.2.3. La météorologie

Le logiciel TRAMES utilise les champs météorologiques tridimensionnels issus d'un modèle spécifique (par exemple MINERVE). Les données indispensables sont le vent et la température sur un maillage à 3 dimensions.

Il est possible de préciser certaines variables comme la température au sol ou le taux de pluie, si ces données ne sont pas comprises dans le fichier météorologique 3D.

La turbulence peut être renseignée de 3 façons :

- l'utilisateur précise une classe de stabilité homogène sur tout le domaine (classe A de Pasquill, par exemple).
- la classe de stabilité est déterminée à partir du champ tridimensionnel de température
- les coefficients de diffusivité turbulente verticale et horizontale font partie des données météorologiques importées.

Le modèle TRAMES permet de prendre en compte des situations de vents calmes.

Les obstacles ne peuvent pas être pris en compte.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.5.2.4. Les différents types de calcul

Le logiciel permet d'effectuer plusieurs calculs:

- La concentration instantanée
- La concentration intégrée sur la durée de la simulation
- La concentration maximale sur la durée de la simulation
- La concentration moyenne sur la durée de la simulation

Le logiciel ne permet pas de calculer directement les variables statistiques comme les percentiles ou les fréquences de dépassement de seuil.

2.5.3. LES HYPOTHESES ET LES MODELISATIONS PHYSIQUES

2.5.3.1. Les hypothèses générales

Le rejet de polluant est modélisé par des bouffées discrètes qui suivent l'écoulement et s'étalent au fur et à mesure qu'elles s'éloignent de la source.

On suppose que la bouffée est advectée uniformément, c'est-à-dire que la vitesse en tout point de la bouffée est égale à la vitesse du centre de masse de la bouffée. Cette hypothèse peut être limitante dans les situations de fort cisaillement (cf état de l'art, ch 2.2.5). En effet, lorsque la taille de la bouffée est importante, le vent peut être très différent dans le bas de la bouffée et dans le haut. Le modèle TRAMES ne tient alors pas compte de la déformation de la bouffée. Cette hypothèse est aussi pénalisante dans les cas de fort relief, la bouffée reste de forme sphérique pour contourner le relief ce qui ne représente pas la physique du problème.

2.5.3.2. La modélisation du transport par le vent

Le modèle TRAMES détermine la trajectoire des bouffées en se basant sur les champs de vent. Dans les directions horizontales, les bouffées ont la même vitesse que le vent. Dans la direction verticale, les particules ont la même vitesse que le vent moins une vitesse de chute due à la gravité. Pour les gaz, cette vitesse de chute est nulle et pour les particules, cette vitesse de chute est déterminée par la loi de Stokes, elle dépend des caractéristiques granulométriques des particules.

$$V_{g} = \frac{d^{2}g(\rho_{p} - \rho_{a})}{18\mu}$$

Avec d le diamètre des particules, g la gravité, μ la viscosité, ρ_p la masse volumique des particules et ρ_a la masse volumique de l'air.

Remarque : habituellement, cette formule est valable pour des nombres de Reynolds inférieur à 1, donc pour des particules dont le diamètre est inférieur à 1 micron. Cependant, pour des particules de diamètre inférieur à 10 microns, la vitesse de chute est négligeable devant la vitesse d'advection. On considère donc que les petites particules se comportent comme un gaz. L'utilisation de cette formule pour des particules de tailles non négligeables surestime la vitesse de chute.

Les équations utilisées pour décrire les trajectoires du centre de la bouffée sont les suivantes :

dx = u(x, y, z, t)dt dy = v(x, y, z, t)dt $dz = [w(x, y, z, t) - V_g]dt$

Ces 3 équations sont discrétisées suivant un schéma de Runge Kutta à l'ordre 3.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.5.3.3. La modélisation gaussienne de la dispersion du polluant

Le rejet instantané du polluant est modélisé par une bouffée de forme gaussienne. Cette bouffée va suivre les trajectoires définies précédemment, de telle sorte que le centre de masse de la bouffée soit sur la trajectoire. Au fur et à mesure du temps, la bouffée va aussi s'étaler en fonction des caractéristiques diffusives de l'atmosphère.

A un instant donné, connaissant la position d'une bouffée (x_i,y_i,z_i) et sa masse M, on peut déterminer la concentration en polluant due à cette bouffée. On considère que les écarts-types dans les 2 directions horizontales sont égaux.

$$C = \frac{M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_{y}^{2} \sigma_{z}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{(z-z_{i})^{2}}{\sigma_{z}^{2}} + \frac{(x-x_{i})^{2} + (y-y_{i})^{2}}{\sigma_{y}^{2}}\right]\right)$$

Avec σ_y et σ_z les écarts-types du panache qui dépendent de la distance entre la bouffée et la source et la stabilité.

Le modèle prend en compte la réflexion du panache sur le sol, la concentration due à une bouffée devient donc :

$$C = \frac{M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_{y}^{2} \sigma_{z}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{(x - x_{i})^{2} + (y - y_{i})^{2}}{\sigma_{y}^{2}}\right]\right) * \left(\exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{(z - z_{i})^{2}}{\sigma_{z}^{2}}\right]\right) + \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{(z + z_{i})^{2}}{\sigma_{z}^{2}}\right]\right)\right)$$

La concentration en polluant à un instant t s'obtient en sommant la contribution de toutes les bouffées émises avant cet instant t.

Remarque : cette forme gaussienne présente des limites dans les périodes de convection. En effet, dans ce cas la distribution verticale de la concentration n'est plus gaussienne. Ce phénomène n'est pas pris en compte dans le modèle TRAMES. De même dans les cas de relief marqué ou dans le cas d'un écoulement fortement cisaillé, la forme gaussienne des bouffées n'est pas adaptée.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.5.3.4. Les écarts-types

Le logiciel propose plusieurs formulations des écarts-types :

• Le modèle de diffusion turbulente : les écarts-types sont calculés à partir des coefficients de diffusivité turbulente déterminés par le modèle météorologique ou spécifié par l'utilisateur (cf Etat de l'art ch 4.1.3).

Dans le cas uniforme :

$$\sigma_{\rm h} = \sqrt{2K_{\rm h}(t-t_{\rm e})}$$
$$\sigma_{\rm v} = \sqrt{2K_{\rm v}(t-t_{\rm e})}$$

Avec K_h et K_v les coefficients de diffusivité horizontaux et verticaux calculés par le modèle météorologique. t_e est l'instant où la bouffée est émise.

Dans le cas où la diffusivité est variable le long des trajectoires,

$$\frac{1}{2}\sigma^2(t) = \int_{te}^t K(\tau) d\tau$$

- La formulation de Pasquill-Turner.
- Les formulations de Briggs.
- La formulation de Doury.
- La formulation du Brookhaven National Laboratory.

Ces formulations sont décrites dans le paragraphe concernant ARIA IMPACT, elles dépendent de la classe de stabilité définie par l'utilisateur ou déterminée par le logiciel. Si la classe de stabilité est définie par l'utilisateur, on considère qu'elle est uniforme sur tout le domaine. Dans le cas où la classe de stabilité est déterminée par le logiciel, la stabilité peut être différente suivant les zones. Celle-ci dépend des caractéristiques turbulentes de l'atmosphère et donc de l'occupation des sols et de la topographie.

2.5.3.5. Les dépôts secs et humides

Les dépôts secs sont pris en compte par l'intermédiaire d'une vitesse de dépôt caractéristique du polluant et du sol. Cette vitesse de dépôt est homogène sur toute la zone. On peut alors calculer la perte de masse d'une bouffée par unité de temps.

Le lessivage par la pluie est modélisé par un taux de lessivage qui dépend de la nature du polluant et de l'intensité des précipitations.

Ces différents phénomènes physiques font diminuer la masse d'une bouffée. On tient compte par la suite de cette perte de masse dans les calculs. On parle d'appauvrissement des bouffées. Dans ce modèle, on considère que cette perte de masse concerne toute la bouffée de manière uniforme. Or, d'un point de vue physique, les particules déposées au sol sont celles qui se situent à proximité du sol et donc en bas de la bouffée. La perte de matière à donc lieu dans le bas de la bouffée, alors que le sommet de la bouffée n'est pas affecté par ce phénomène. Dans ce cas, la répartition du polluant dans la bouffée n'est plus gaussienne. Cette imprécision peut conduire à une surestimation des concentrations au voisinage du sol.

36/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.5.3.6. La hauteur de la couche limite

La réflexion du panache sur le sommet de la couche limite est prise en compte par le modèle TRAMES mais la méthode utilisée n'est pas décrite dans la documentation.

2.5.3.7. Le calcul de la surhauteur

Le logiciel TRAMES propose plusieurs méthodes pour le calcul de la surhauteur du panache. La surhauteur calculée est la surhauteur finale. Ces méthodes sont les mêmes que celles utilisées dans le logiciel ARIA IMPACT. La surhauteur est prise en compte en considérant une source virtuelle ayant les mêmes caractéristiques que la source réelle, mais située à une hauteur égale à la hauteur de la source initiale plus la surhauteur calculée.

2.5.4. LES DONNEES D'ENTREE ET LES VARIABLES CALCULEES

2.5.4.1. Définition du site

La grille de calcul initiale est importée depuis le modèle météorologique. Cette grille contient les coordonnées des points du maillage, les données de topographie et les niveaux verticaux. Il est possible de définir via l'interface graphique une grille horizontale plus fine incluse dans la grille météorologique mais le maillage vertical est toujours celui de la grille météorologique.

Il n'est pas nécessaire d'introduire de données d'occupation des sols.

2.5.4.2. Les données d'émissions

Les sources et les espèces sont définies à partir de deux fichiers :

- Un fichier décrivant les espèces émises et leurs caractéristiques : nom, vitesse de dépôt, granulométrie, densité,...
- Un fichier décrivant les sources et leurs caractéristiques pour chaque échéance météo : type de source, coordonnées, géométrie, conditions de rejet (température, vitesse, débit), le nom des espèces émises,...

L'utilisateur doit aussi spécifier la cadence d'émissions des bouffées dt. Cette cadence doit être telle que le produit U*dt est inférieur à la taille des mailles de la grille de calcul. Ce pas de temps doit aussi être tel que la condition de recouvrement des bouffées soit remplie dans la zone d'étude qui nous intéresse.

2.5.4.3. La météorologie

Les données météorologiques sont lues dans le fichier binaire importé du modèle météorologique. Ces données contiennent le vent et la température sur le maillage de calcul et éventuellement des données de précipitation, de turbulence et d'humidité.

La hauteur de la couche limite peut être soit lue dans un fichier issu du modèle MINERVE, soit précisée par l'utilisateur.

Les précipitations peuvent être renseignées par l'utilisateur, elles sont alors uniformes et constantes pour toute la durée de la simulation.

Si les données de turbulence ne sont pas comprises dans le fichier de données météorologiques, l'utilisateur doit préciser une classe de stabilité pour le calcul, ou une valeur de coefficient de diffusivité turbulente.
Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.5.4.4. Les paramètres de sorties

Les différents paramètres calculés par TRAMES sont :

- La concentration instantanée sur tous les points du maillage
- Eventuellement les dépôts secs et humides instantanés
- La concentration intégrée sur la durée de la simulation
- Les dépôts intégrés
- La concentration maximale sur la durée de la simulation
- La concentration moyenne dans le temps

Ces paramètres peuvent être calculés sur la grille horizontale au niveau du sol, ou sur le maillage tridimensionnel. L'utilisateur peut choisir la cadence de stockage des résultats.

2.5.5. L'INTERFACE

2.5.5.1. L'interface graphique

Une interface graphique permet à l'utilisateur de spécifier les fichiers d'entrée et les options de calcul qui l'intéressent. Cette interface permet aussi d'exécuter un calcul.

Début du	calcul 03-07-80 16:00:00 calcul 03-07-80 17:00:00	▼ ▼	Fichier météorologique C:\ARI	AREG\MINERVE\PG1\min1.aju	VIES
omaine Météo Grille Grille -Coordonnées X Y Y Nombre X 70 Y 70	Emission Reprise T GRILLE METEOROLOGI 470.000 4750.000 Pas 0 0.050	urbulence Options Sor DUE ••••••••••••••••••••••••••••••••••••	4753.450 4750.000 4750.000		Valider Défaut Annuler Aide
990-2003 ARIA Technologies					

38/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.5.5.2. L'organisation des données

Les différentes données d'entrée et de sortie du modèle TRAMES sont présentées sur la figure ci-après.



2.5.5.3. Le lancement de calcul en batch

Il est possible de lancer un ensemble de simulations en mode batch à partir du répertoire contenant les exécutables du logiciel en précisant le nom du projet, les fichiers d'entrée (météo, émissions) et les fichiers de sortie.

39/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.5.6. LES PERFORMANCES ET LES LIMITATIONS

2.5.6.1. Les avantages

- Le modèle TRAMES est un modèle à bouffées gaussiennes, qui permet d'étudier la dispersion dans un écoulement relativement complexe et dans des situations instationnaires.
- Les temps de calculs du logiciel sont très courts. Pour étudier la dispersion issue d'une source ponctuelle sur un maillage de 200*200 points sur une heure de meteo, avec un pentium 4 à 3GHZ et 1Go de RAM, il faut 10 minutes environ. Le temps de calcul dépend du nombre de bouffées à traiter.
- Le logiciel permet de prendre en compte différentes espèces : gaz, particules ou éléments radioactifs et de calculer les dépôts secs et humides.

2.5.6.2. Les limites

- Les situations de relief trop marqué sont difficiles à reproduire.
- Le champ de vitesse est uniforme à l'échelle de la bouffée. Par conséquent, les effets de cisaillement de vent ne sont pas pris en compte. Le modèle n'est pas adapté à un fort gradient vertical de vent.
- Le logiciel est capable d'exécuter des calculs sur plusieurs sources de formes différentes. Cependant, les temps de calculs sont considérablement augmentés si les sources sont nombreuses en raison du grand nombre de bouffées à traiter.
- Les concentrations au voisinage de la source sont mal modélisées. Le modèle est valable pour des distances supérieures à environ 100m de la source. Cette distance limite varie suivant la cadence d'émission des bouffées.
- Les bâtiments ne sont pas pris en compte.
- Les transformations chimiques ne sont pas prises en compte.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.6. LE MODELE HERMES

2.6.1. DESCRIPTION GENERALE DU MODELE

Le modèle HERMES est intégré au logiciel ARIA Industry. Il contient un modèle météorologique hydrostatique qui permet de calculer l'écoulement sur un relief complexe à partir de données météorologiques issues d'un modèle à plus grande échelle ou d'observations. Le modèle HERMES permet aussi de calculer la dispersion des polluants atmosphériques dans un écoulement complexe en résolvant les équations de transport d'un scalaire passif sur un maillage à 3 dimensions. Le modèle s'applique à des domaines de 20 à 500 km. Le modèle HERMES est plutôt adapté à des études d'impact à l'échelle régionale. Au début de cette étude, nous souhaitions tester le modèle eulérien Fluyd'in Panache distribué par la société Transoft. Malheureusement, cette entreprise n'a pas souhaité collaborer à ce projet. Nous proposons malgré tout de décrire les fonctionnalités et les principes de modélisation du modèle HERMES comme illustration des méthodes eulériennes de calcul de la dispersion.

Dans la suite de cette étude, nous étudierons uniquement la partie « dispersion » du modèle HERMES, les données concernant l'écoulement étant calculées avec le modèle MINERVE.

2.6.2. LES FONCTIONNALITES DU MODELE

2.6.2.1. Les sources

Le modèle HERMES permet de prendre en compte des sources de différentes formes : elles peuvent être ponctuelles, linéiques, surfaciques ou volumiques. Il est aussi possible de faire un calcul avec plusieurs sources.

L'utilisateur définit la période d'émission de la source et les caractéristiques du rejet pendant cette période (température, vitesse, quantité émise pendant la période).

Le logiciel HERMES permet de calculer la surélévation du panache.

2.6.2.2. Les polluants

Il est possible de prendre en compte plusieurs types de polluants : les effluents gazeux passifs, les poussières, les aérosols liquides, les gaz lourds.

Le logiciel prend en compte les phénomènes de dépôts secs et humides pour les calculs d'appauvrissement du panache, mais la quantité de polluant déposée au sol n'est pas accessible à l'utilisateur. On ne s'intéresse qu'à la perte de « matière » dans l'atmosphère pour déterminer la concentration en polluant, mais pas à la quantité de polluant absorbée par le sol.

2.6.2.3. La météorologie

Le modèle HERMES utilise les champs météorologiques tridimensionnels issus du modèle MINERVE. Les données indispensables sont le vent et la température sur un maillage à 3 dimensions.

La turbulence est calculée par le modèle HERMES. Plusieurs modélisations sont possibles.

Le modèle HERMES permet de prendre en compte les vents calmes.

Les obstacles ne peuvent pas être pris en compte.

2.6.2.4. Les différents types de calcul

Le logiciel calcule la concentration en polluant à chaque pas de temps. L'utilisateur choisit la fréquence de stockage des résultats (concentration instantanée).

41/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Le logiciel ne permet pas de calculer directement les variables statistiques comme les percentiles ou les fréquences de dépassement de seuil.

2.6.3. LES HYPOTHESES ET LES MODELISATIONS PHYSIQUES

2.6.3.1. Les hypothèses générales

On considère que l'atmosphère est à l'équilibre hydrostatique. Ce qui signifie que dans l'équation qui régit la vitesse verticale du vent, tous les termes sont négligeables devant le gradient de pression verticale et le terme de gravité. Cette hypothèse est vérifiée dans les situations où l'accélération verticale est faible et donc dans les situations de relief modéré.

2.6.3.2. Les équations qui régissent le problème

La conservation d'un scalaire passif

$$\frac{\partial \rho \mathbf{C}}{\partial t} + \frac{\partial \rho \mathbf{C} \mathbf{u}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{i}} = -\rho \frac{\partial \overline{\mathbf{C}' \mathbf{u}_{i}'}}{\partial \mathbf{x}_{i}} + \mathbf{S}\mathbf{c}$$

 u_i est la i^{ème} composante de la vitesse. Sc est la somme des termes sources et des termes puits pour le scalaire C.

Cette équation s'applique à la concentration d'un polluant.

2.6.3.3. Les conditions aux limites

Pour résoudre les équations sur le maillage, il faut préciser les conditions aux limites du domaine. Pour la concentration au sol, le flux de polluant est nul si il n'y a pas de dépôts. Pour les bords du domaine, les flux de polluant entrant sont nuls et les flux de polluant sortant sont non nuls.

Au sommet de la couche limite, les flux turbulents sont nuls, il n'y a donc pas de polluant qui traverse la couche limite.

Ces conditions aux limites permettent de tenir compte de la réflexion sur le sol et le sommet de la couche limite de manière intrinsèque.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.6.3.4. La modélisation de la turbulence

Dans l'équation du transport de polluant, on cherche à modéliser le terme u'c' qui traduit le flux turbulent de polluant.

Dans le modèle HERMES, l'atmosphère est divisée verticalement en 2 zones

La couche de surface

C'est la zone entre le sol et le premier niveau de calcul du modèle. D'après la théorie de Monin-Obukhov, on considère dans cette partie de l'atmosphère que le flux turbulent est constant suivant z. Deux paramétrisations permettent de déterminer ce flux : la paramétrisation de Businger-Dyer et la paramétrisation de Louis.

Cette étape permet de déterminer les conditions aux limites pour les flux turbulents.

• La couche limite

On définit K_c les coefficients de diffusivité turbulente. Ces coefficients lient les flux turbulents au gradient vertical de la concentration moyenne

$$\overline{c'w'} = -K_c \frac{\partial c}{\partial z}$$

Les coefficients K_c peuvent être déterminés par différentes méthodes :

La formulation d'O'Brien

Cette formulation permet de décrire l'évolution du coefficient K_c en fonction de l'altitude z par une fonction polynomiale telle que au niveau de la couche de surface, le coefficient K_c est égal au coefficient calculé dans la couche de surface et au sommet de la couche limite, K_c prend des valeurs très faibles. Cette méthode est très robuste et s'applique à toutes les configurations. Cependant elle ne s'appuie pas sur les caractéristiques de l'écoulement local.

La formulation de Louis

Les coefficients de diffusion turbulente sont fonctions du cisaillement vertical du vent horizontal moyen et de la stabilité et donc des caractéristiques locales de l'écoulement.

$$\mathbf{K}_{c} = \mathbf{I}^{2} \left[\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{z}} \right)^{2} + \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{z}} \right)^{2} \right]^{1/2} \mathbf{f}(\mathbf{R}_{i})$$

Où l est une longueur de mélange et f(Ri) est une fonction du nombre de Richardson qui traduit les effets locaux de la stabilité. Cette méthode de fermeture est couramment utilisée dans les modèles de Météo France et par le Centre Européen de Prévisions Météorologiques à Moyen Terme ; elle est plus précise que la méthode précédente.

La formulation de Terry Lacarrère

Le coefficient K est lié au gradient vertical de l'énergie cinétique turbulente.

Les formulations d'O'Brien et de Louis permettent de faire un raccordement entre le flux turbulent dans la couche de surface et le flux turbulent au sommet du domaine de calcul.

La diffusion horizontale est déterminée par un coefficient qui ne dépend que du maillage et la topographie du site. On parle de diffusion numérique. Ce coefficient ne dépend pas des caractéristiques de l'écoulement. Cette méthode conduit à sous-estimer les concentrations dans les cas stables notamment au voisinage de la source.

43/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.6.3.5. Calcul de la hauteur de la couche limite

La hauteur de couche limite peut être définie par l'utilisateur ou lue dans le fichier météorologique importé. Le logiciel peut aussi la calculer par plusieurs méthodes :

- La méthode intégrale.
- La hauteur de la couche limite est calculée en recherchant le minimum du flux de chaleur négatif sur chaque profil vertical de température calculé par MINERVE. Cette méthode de calcul s'appuie sur une observation des phénomènes physiques. Elle est rapide et facile à mettre en œuvre mais elle n'est pas équivalente à une méthode de calcul fondée sur l'évolution des paramètres météorologiques comme celle utilisée dans MINERVE.
- La méthode de Vautard qui utilise la température potentielle virtuelle. Cette méthode revient à simuler le rejet d'une bulle d'air chaud au niveau du sol et à constater à quelle altitude la bulle reste bloquée. Cette méthode est utilisée dans le modèle CHIMERE.

Ces deux méthodes dépendent très fortement de la qualité des données de température.

2.6.3.6. Les dépôts secs et humides

Les quantités de polluant déposées au sol par des phénomènes de déposition sèche ou humide ne sont pas calculées. En revanche, le modèle tient compte de la perte de masse du panache par ces phénomènes. Cet appauvrissement du panache est pris en compte dans les équations par un terme puit qui dépend des caractéristiques du polluant et du taux de pluie. La perte de matière due aux dépôts secs ne concerne que le niveau au voisinage du sol, alors que le lessivage par la pluie entraîne une perte de matière dans tout le volume de calcul.

2.6.3.7. Le calcul de la surhauteur

Le logiciel HERMES propose plusieurs méthodes pour le calcul de la surhauteur finale du panache. Ces méthodes sont les mêmes que celles utilisées dans le logiciel ARIA IMPACT.

La surhauteur est prise en compte en simulant le rejet issu d'une source virtuelle dont la hauteur est celle de la source réelle plus la surhauteur finale, toutes les autres caractéristiques étant les mêmes.

2.6.3.8. La résolution numérique des équations sur le maillage

Le maillage de résolution doit être régulier et la taille des mailles est la même dans les directions x et y. il n'est pas possible de raffiner le maillage autour d'un point.

Le schéma temporel de résolution des équations est un schéma explicite centré en temps et en espace (leapfrog). Le pas de temps de résolution des équations est déterminé par le modèle en fonction du maillage spatial et de la stabilité du schéma numérique.

2.6.4. LES DONNEES D'ENTREE ET LES VARIABLES CALCULEES

2.6.4.1. Définition du site

La grille de calcul initiale est importée depuis le modèle de topographie RELIEF. Cette grille contient les coordonnées des points du maillage, les données de topographie. Le maillage vertical est ensuite défini par l'utilisateur via l'interface graphique. Il doit préciser le nombre de niveaux verticaux et leur distribution, l'altitude du plafond de calcul et la hauteur de la couche de surface qui correspond à la hauteur du premier niveau.

L'utilisateur peut aussi importer un fichier d'occupation des sols ou préciser une valeur de la rugosité uniforme sur toute la zone.

44/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.6.4.2. Les données d'émissions

Les sources et les espèces sont définies à partir de deux fichiers :

- Un fichier décrivant les espèces émises et leur caractéristiques : nom, vitesse de dépôt, granulométrie, densité,...
- Un fichier décrivant les sources et leurs caractéristiques : type de source, coordonnées, géométrie, conditions de rejet (température, vitesse, débit), le nom des espèces émises,...

2.6.4.3. La météorologie

Les données météorologiques qui caractérisent l'écoulement sont lues dans le fichier binaire importé du modèle météorologique. Ces données contiennent le vent et la température sur un maillage identique au maillage de calcul et éventuellement des données d'humidité, de précipitation, de turbulence, la hauteur de la couche limite.

Si ces données ne font pas partie du fichier météo, l'utilisateur peut spécifier certaines variables comme le taux de précipitation. Dans ce cas, les valeurs sont uniformes sur toute la zone.

2.6.4.4. Les paramètres de sortie

Lors d'un calcul de concentration uniquement, les différents paramètres calculés par HERMES sur l'ensemble du maillage sont :

- Les caractéristiques de l'écoulement de l'air.
- La concentration instantanée sur tous les points du maillage.

L'utilisateur peut choisir la cadence de stockage des résultats.

45/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.6.5. L'INTERFACE

2.6.5.1. L'interface graphique

Une interface graphique permet à l'utilisateur de spécifier les fichiers d'entrée et les options de calcul qui l'intéressent. Cette interface permet aussi d'exécuter un calcul.

ce Grille verticale Météo Interface Sol/Air Eau	u Concentration Simulation Sortie	
Topographie		
Coordonnées		Valider
*	min max 470.000 473.450 km	
х У	4750.000 4753.450 km	Derau
z	1 1 m	0 merula
		Hindic
Grille horizontale	nombre Pas étendue	Aide
x	70 0.050 3.450 km	
γ	70 0.050 3.450 km	
Fichier des parametres sol		
		@ 1990.20

Figure 8 : interface graphique du modèle HERMES

46/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.6.5.2. L'organisation des données

Les différentes données d'entrée et de sortie du modèle HERMES sont présentées sur la figure ci-après.



2.6.5.3. Le lancement de calcul en batch

Il est possible de lancer un ensemble de simulations en mode batch à partir du répertoire contenant les exécutables du logiciel en précisant le nom du projet, les fichiers d'entrée (météo, émissions) et les fichiers de sortie

2.6.6. LES PERFORMANCES ET LES LIMITATIONS

2.6.6.1. Les avantages

- Le modèle HERMES est un modèle qui permet d'étudier la dispersion dans un écoulement complexe.
- Le logiciel permet de prendre en compte différentes espèces : gaz, particules ou éléments radioactifs.
- Le logiciel est capable d'exécuter des calculs sur plusieurs sources de formes différentes. Le temps de calcul est indépendant du nombre de source.
- Le logiciel est intéressant pour calculer des épisodes de pollution sur des durées relativement courtes.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.6.6.2. Les limites

- Le champ de concentration au voisinage de la source est mal décrit car on ne peut pas représenter réellement une source ponctuelle, les émissions sont « diluées » dans toute la maille qui contient la source. Suivant la taille des mailles, cette limite a un impact à une distance plus ou moins importante de la source. (cf étude de sensibilité géométrie de la source)
- Les bâtiments ne sont pas pris en compte. Dans le cas où l'écoulement tiendrait compte de la présence d'obstacle, le modèle HERMES ne serait cependant pas adapté car le maillage régulier et les conditions aux limites uniformes sur le domaine ne permettent pas de représenter convenablement l'effet d'un obstacle.
- Les transformations chimiques ne sont pas prises en compte.
- Les temps de calcul sont beaucoup plus long qu'avec un modèle gaussien, mais ils ne dépendent que de la taille du maillage et pas du nombre de sources. Pour traiter une source ponctuelle sur un domaine de 200*200 mailles de 50m et 25 niveaux verticaux, pour une heure de météo, il faut 15h de calcul avec un pentium 4, 3 Ghz et 3 Go de RAM.
- La documentation en notre possession n'est pas claire : elle correspond à une version du logiciel destinée à faire des études de risques industriels et des rejet de gaz lourds.
- Le modèle eulérien HERMES est relativement compliqué, il nécessite une bonne connaissance des phénomènes physiques qui régissent la dispersion et les modélisations associées pour être utilisé dans de bonnes conditions.
- Le logiciel ne répond pas à une logique d'étude d'impact : il est nécessaire d'exploiter « à la main » les résultats pour calculer les concentrations en moyenne annuelle, les percentiles,...

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.7. LE MODELE SPRAY

2.7.1. DESCRIPTION GENERALE DU MODELE

Le modèle SPRAY est intégré au logiciel ARIA Industry distribué par la société ARIA-Technologies. C'est un modèle lagrangien qui permet de simuler le transport, la dispersion et les dépôts de polluant dans un champ météorologique complexe.

2.7.2. LES FONCTIONNALITES DU MODELE

2.7.2.1. Les sources

Le modèle SPRAY permet de prendre en compte des sources de différentes formes : elles peuvent être ponctuelles, linéiques, surfaciques ou volumiques. Le rejet peut être continu ou discontinu. Il est aussi possible de faire un calcul avec plusieurs sources.

Le logiciel SPRAY permet de calculer la surélévation du panache.

2.7.2.2. Les polluants

Il est possible de prendre en compte plusieurs types de polluants : les effluents gazeux passifs, les poussières, les aérosols liquides, les éléments radioactifs. Le logiciel calcule les dépôts secs et humides et les décroissances radioactives.

2.7.2.3. La météorologie

Le logiciel SPRAY utilise les champs météorologiques tridimensionnels issus de MINERVE. Les données indispensables sont les champs de vent sur un maillage à 3 dimensions.

La turbulence est calculée par le modèle en fonction de la météorologie et de l'occupation des sols.

Le modèle SPRAY permet de prendre en compte les vents calmes.

Les obstacles ne peuvent pas être pris en compte.

2.7.2.4. Les différents types de calcul

Le logiciel permet de calculer la concentration sur le même maillage tridimensionnel que celui des données météorologiques ou les dépôts en polluant au sol à une fréquence définie par l'utilisateur. La concentration est moyennée sur une durée elle aussi définie par l'utilisateur. Il est aussi possible de calculer des doses.

Le logiciel ne permet pas de calculer directement les variables statistiques comme les percentiles ou les fréquences de dépassement de seuil.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.7.3. LES HYPOTHESES ET LES MODELISATIONS PHYSIQUES

2.7.3.1. Les hypothèses générales

Le rejet de polluant est discrétisé en un nombre fini de particules lagrangiennes portant chacune une certaine masse de polluant (cf Etat de l'art, ch 2.3.2). Chaque particule suit une trajectoire chaotique qui dépend de l'écoulement et de son état turbulent. Il faut un grand nombre de particules lagrangiennes pour décrire toutes les trajectoires possibles du polluant. A un instant t, la distribution spatiale de ces particules permet de déterminer la concentration de polluant.

On suppose que la diffusion moléculaire est négligeable devant la dispersion turbulente et que la concentration en polluant des particules lagrangiennes est constante.

La turbulence est inhomogène.

On suppose que lorsque le polluant atteint un niveau de mélange homogène, (well mixed solution), le polluant garde cet état. C'est-à-dire que les particules ne vont pas se regrouper en un point.

2.7.3.2. Les équations qui régissent le problème

Le logiciel SPRAY est fondé sur un modèle stochastique, c'est-à-dire que les fluctuations temporelles et spatiales des variables météorologiques sont modélisées comme aléatoires.

• Les équations de Langevin

La trajectoire X(t) et la vitesse U(t) d'une particule sont définies par le modèle de Thomson (1987) :

$$\frac{dX(t)}{dt} = U(t)$$

$$dU(t) = a(X,U)dt + \sqrt{B_0(X)dt}d\mu$$

Avec µ un terme gaussien aléatoire de moyenne nulle et de variance 1. Le terme B₀ s'écrit :

$$\mathsf{B}_{\mathsf{0}} = \frac{\sigma_{\mathsf{U}_{\mathsf{i}}}}{\mathsf{T}_{\mathsf{L}_{\mathsf{i}}}}$$

avec T_{Li} l'échelle de temps lagrangienne,

$$\sigma_{U'} = \overline{U'^2}$$

le flux de turbulence cinématique.

• L'équation de Fokker Planck

Les deux équations lagrangiennes précédentes sont équivalentes à une équation eulérienne pour la densité de probabilité P(X,U,t), probabilité qu'une particule se trouve au voisinage de la position X avec une vitesse voisine de U à un instant t.

Cette équation dite de Fokker Planck s'écrit :

$$U_{x}\frac{\partial P}{\partial x} + U_{y}\frac{\partial P}{\partial y} + U_{z}\frac{\partial P}{\partial z} = -\left(\frac{\partial(aP)}{\partial u_{x}} + \frac{\partial(aP)}{\partial u_{y}} + \frac{\partial(aP)}{\partial u_{z}}\right) + B_{0_{x}}\frac{\partial^{2}P}{\partial u_{x}^{2}} + B_{0_{y}}\frac{\partial^{2}P}{\partial u_{y}^{2}} + B_{0_{z}}\frac{\partial^{2}P}{\partial u_{z}^{2}}$$

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

La résolution des équations

Les équations de Langevin sont discrétisées suivant la méthode des différences finies. La vitesse turbulente horizontale U' est alors définie par

$$\mathbf{U}_{i}'(t+\Delta t) = \left[1 - \frac{\Delta t}{\mathsf{T}_{\mathsf{L}_{i}}(\mathsf{X},t)}\right] \mathbf{U}_{i}'(t) + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{\mathsf{U}_{i}'}^{2}}{\partial \mathsf{x}^{2}} \left(1 + \frac{\mathsf{U}_{i}'(t)^{2}}{\sigma_{\mathsf{U}_{i}'}^{2}}\right) \Delta t + \mu_{i}'(t) \sigma_{\mathsf{U}_{i}'} \sqrt{\frac{2\Delta t}{\mathsf{T}_{\mathsf{L}_{i}}}}$$

Avec i=x,y.

La vitesse turbulente verticale s'écrit :

$$\mathbf{U}_{z}'(t + \Delta t) = \mathbf{a}(\mathbf{U}_{z}', \mathbf{X}) + \mu_{z}' \sigma_{\mathbf{U}_{z}'} \sqrt{\frac{2\Delta t}{\mathsf{T}_{\mathsf{L}_{z}}}}$$

Le terme a est déterminé en utilisant la fonction de densité de probabilité de Gram-Charlier décrivant les fluctuations de la vitesse verticale.

$$P(x,z) = \frac{e^{\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} (1 + C_3 H_3 + C_4 H_4)$$
$$x = \frac{W}{\sigma_w}$$

Avec C_3 et C_4 des coefficients et H_3 et H_4 des polynômes.

Cette fonction de densité de probabilité non gaussienne est telle que la moyenne vaut 0 et l'écart-type vaut 1. Cette distribution traduit le fait que les vitesses verticales négatives sont nombreuses mais de faible intensité alors que les vitesses verticales positives sont moins nombreuses mais d'intensité plus forte.

La résolution de l'équation de Fokker Planck avec cette fonction permet de déterminer a :

$$\mathbf{a} = \sigma_{w} \frac{\frac{1}{\tau}(\mathsf{T}_{1}) + \frac{\partial \sigma_{w}}{\partial \mathsf{Z}}(\mathsf{T}_{2})}{\mathsf{T}_{3}}$$

Avec T_1, T_2 et T_3 des fonctions de C_3 , C_4 et de x.

2.7.3.3. Les conditions aux limites

La définition des conditions aux limites revient à décrire le comportement des particules sur les limites du domaine. Pour les limites latérales et au sommet du domaine, les particules traversent ces surfaces. Le modèle « perd » donc ces particules.

Pour les conditions au sol, les particules qui atteignent le sol subissent un choc élastique. La partie aléatoire de la vitesse est recalculée à chaque choc. Cette condition est équivalente à la condition de réflexion pour les panaches gaussiens.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2ème partie : Evaluation des modèles .

2.7.3.4. La modélisation de la turbulence : le modèle TURKEY

La paramétrisation de la turbulence dans le modèle SPRAY est celle développée par Hanna (1982), qui fait intervenir la longueur de rugosité z_0 , la vitesse de frottement u^{*}, la longueur de Monin Obukhov Lmo, l'échelle de vitesse verticale w* qui caractérise les mouvements verticaux en situation convective et h la hauteur de la couche limite. Ces paramètres sont calculés à partir des caractéristiques de l'occupation des sols et des variables météorologiques. Si ces paramètres ne sont pas renseignés par l'utilisateur, le modèle les calcule en utilisant le préprocesseur METPRO mis au point par l'EPA. u* et Lmo sont calculés par la méthode de Holstag-Van Ulden pour les situations de jour et par la méthode de Venkatram pour les situations de nuit. La hauteur de la couche limite est déterminée en fonction du bilan radiatif au sol. En période de convection, la hauteur de la couche limite est fonction du flux de chaleur à la surface. En période stables ou neutres, la hauteur de la couche limite est paramétrée par Lmo, u* et le paramètre de Coriolis.

A partir de ces paramètres, le modèle TURKEY calcule les variables turbulentes suivantes : σ_{Ux} , σ_{Uy} , σ_{Uz} , w³, et les échelles de temps lagrangienne : T_{Lx} , T_{Ly} , T_{Lz} en fonction de la stabilité de l'atmosphère.

Le domaine est séparé en 3 zones sur la verticale :

La couche limite : z<h •

. .

- La couche résiduelle h<z<hresiduelle .
- Le haut du domaine hresiduelle<z<zsommet. .

Dans la couche limite, les variables turbulentes se calculent comme suit.

Conditions stables 0<Lmo<300

$$\begin{split} &\sigma_{u}(z) = 2.0u_{*}(1 - z/h) \\ &\sigma_{v}(z) = 1.3u_{*}(1 - z/h) \\ &\sigma_{U_{x}} = \sigma_{U_{y}} = \sqrt{0.5(\sigma_{u}^{2} + \sigma_{v}^{2})} \\ &\sigma_{w}(z) = 1.3u_{*}(1 - z/h) \\ &T_{L_{x}}(z) = T_{L_{y}}(z) = 0.11(\frac{h}{\sigma_{U_{x}}})(\frac{z}{h})^{0.5} \\ &T_{L_{z}} = 0.11(\frac{h}{\sigma_{w}})(\frac{z}{h})^{0.8} \\ &w^{i^{3}} = 0 \\ &\bullet \quad \text{Conditions neutres Lmo>300 ou Lmo<-300} \\ &\sigma_{u}(z) = 2.0u_{*}e^{(-3fz/u_{*})} \\ &\sigma_{v}(z) = 1.3u_{*}e^{(-2fz/u_{*})} \\ &\sigma_{U_{x}} = \sigma_{U_{y}} = \sqrt{0.5(\sigma_{u}^{2} + \sigma_{v}^{2})} \\ &\sigma_{w}(z) = 1.3u_{*}e^{(-2fz/u_{*})} \\ &T_{L_{x}}(z) = T_{L_{y}}(z) = T_{L_{z}}(z) = 0.5\frac{z}{\sigma_{w}}(1 + 15\frac{fz}{u_{*}}) \end{split}$$

 $w'^{3}=0$

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• Conditions instables -300<Lmo<0

$$\sigma_{u_x} = \sigma_{u_y} = u_* (12 - 0.5h/L)^{1/3}$$

$$\sigma_{w}(z) = \begin{cases} 0.763(z/h)^{0.175} & z \le 0.4h \\ 0.722w_*(1 - z/h)^{0.207} & 0.4h < z \le 0.96h \\ 0.37w_* & 0.96h < z \le h \end{cases}$$

$$\begin{split} \overline{w'^{3}} &= w_{*}^{3}(1.4z/h)e^{(-2.5z/h)} \\ T_{L_{x}}(z) &= T_{L_{y}}(z) = 0.15h/\sigma_{U_{x}} \\ T_{L_{z}}(z) &= \begin{cases} 0.1z/\left[\sigma_{w}(0.55+0.38(z-z_{0})/L\right] & z \leq 0.1h & z < z_{0}-L \\ 0.59z/\sigma_{w} & z \leq 0.1h & z \geq z_{0}-L \\ 0.15(h/\sigma_{w})\left[1-e^{(-5z/h)}\right] & z > 0.1h \end{cases} \end{split}$$

Dans la couche résiduelle, les variables sont calculées comme dans le cas neutre. Dans la dernière couche, les échelles de temps lagrangiennes sont constantes et les autres variables diminuent linéairement avec z, pour avoir la valeur 0 au sommet du domaine.

2.7.3.5. Les dépôts secs et humides

Le flux de polluant déposé au sol est proportionnel à la concentration au niveau du sol :

 $F_d = Cw_d$

où w_d est la vitesse de déposition qui dépend de la nature du polluant et de la nature du sol.

Les dépôts humides sont calculés en fonction du taux de précipitation et du coefficient de lessivage par la pluie d'un polluant.

2.7.3.6. Les effets de gravité

Pour les rejets de particules solides, les effets de la gravité ne sont pas négligeables. La loi de Stokes permet de définir une vitesse de chute Vg qui s'ajoute à la vitesse verticale des particules (cf TRAMES).

2.7.3.7. Le calcul de la surhauteur

Le logiciel SPRAY permet de calculer la surhauteur instantanée du panache par la méthode de Briggs. L'évolution du panache est calculée à chaque instant. On modélise donc les effets de la surélévation du panache au voisinage de la source. On ne se contente pas seulement de décaler la hauteur du rejet et de modéliser les impacts de la surhauteur loin de la source.

2.7.4. LES DONNEES D'ENTREE ET LES VARIABLES CALCULEES

2.7.4.1. Définition du site

La grille de calcul, ainsi que les données de relief sont importées depuis les fichiers météo issus du modèle MINERVE.

L'occupation des sols (rugosité, albédo et rapport de Bowen) peut être définie par l'utilisateur via l'interface graphique, elle est alors uniforme sur tout le domaine. Il est aussi possible d'importer un fichier où l'occupation des sols est définie sur le maillage bidimensionnel.

52/228

53/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.7.4.2. Les données d'émissions

Les sources et les espèces sont définies à partir de trois fichiers :

- Un fichier décrivant les espèces émises et leur caractéristiques : nom, vitesse de dépôt, granulométrie, densité,...
- Un fichier décrivant les sources et leurs caractéristiques : type de source, coordonnées, géométrie, conditions de rejet (température, vitesse, débit), nom des espèces émises,...
- Un fichier optionnel décrivant les caractéristiques des particules de polluant utilisées dans le modèle. Ces données peuvent être définies par l'interface.

2.7.4.3. La météorologie

Le fichier de données météorologiques importé depuis MINERVE doit contenir au minimum les champs de vents sur le maillage tridimensionnel. Ce fichier doit aussi contenir les champs de température pour le calcul de la surhauteur et les données de précipitations pour un calcul de dépôt humide.

Ce fichier peut aussi contenir les paramètres décrivant l'état turbulent de l'atmosphère : la longueur de Monin Obukhov, la hauteur de la couche limite, la vitesse de frottement,...

Pour faire fonctionner le modèle de turbulence TURKEY, l'utilisateur doit aussi importer un fichier CROMET dans lequel sont définis les variables météorologiques horaires depuis minuit la veille de la date de l'épisode. Ces données concernent la température, le gradient de température, le flux de chaleur au sol, le rayonnement net, la nébulosité. Elles ne sont pas toutes obligatoires. Elles permettent de calculer les paramètres comme la longueur de Monin Obukhov ou la hauteur de la couche limite.

Il est aussi possible de calculer les variables turbulentes comme les échelles de temps lagrangiennes ou les écarts-types sur les vitesses avec un autre modèle de turbulence et de les intégrer aux paramètres météorologiques. Dans ce cas, le modèle TURKEY n'est pas activé.

2.7.4.4. Les paramètres de sortie

L'utilisateur doit préciser s'il souhaite avoir un calcul de la concentration, des doses, des dépôts. Il doit alors préciser la fréquence de calcul de la concentration ainsi que la durée de moyennage.

L'utilisateur peut aussi choisir d'enregistrer les trajectoires des particules et les caractéristiques turbulentes calculées par le modèle.

54/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.7.5. L'INTERFACE

2.7.5.1. L'interface graphique

Une interface graphique permet à l'utilisateur de spécifier les fichiers d'entrée et les options de calcul qui l'intéressent. Cette interface permet aussi d'exécuter un calcul.

UI OUVEAU CAL	LCUL Début du calcul	03-07-80 16:00:00	<u>•</u>					S	pra	ay I
	Fin du calcul	03-07-80 17:00:00	<u> </u>		Fichier mété	orologique C:\Al	RIAREG\MINERVE\F	G1\min1.aju		<u>.</u>
maine	Météo Emir	reion Denrice T	whulence Ontions	Sortia	1					
	Meteo Ellis	sion Reprise in	arbaience Options	borde						
Grille		GBILLE METED								Valider
Grine		Contract of the feature			4753.450					
Coordonnée	s									Défaut
Y		min 470.000	max 473 450	km						
Ŷ		4750.000	4753.450	km						Annuler
,			1							
	nombre	Pas	étendue							Aide
×	70	0.050	3.450	km		ľ				<u></u>
У	70	0.050	3.450	km	4750.000	470.000			473.450	
90-2003 ARIA	.Technologies									● Ilog in
and the second se										

Figure 9 : interface graphique du modèle SPRAY

55/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.7.5.2. L'organisation des données

Les différentes données d'entrée et de sortie du modèle SPRAY sont présentées sur la figure ci-après.



2.7.5.3. Le lancement de calcul en batch

Il est possible de lancer un ensemble de simulations en mode batch à partir du répertoire contenant les exécutables du logiciel en précisant le nom du projet, les fichiers d'entrée (météo, émissions) et les fichiers de sortie

56/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

2.7.6. LES PERFORMANCES ET LES LIMITATIONS

2.7.6.1. Les avantages

- Le modèle SPRAY est un modèle lagrangien qui permet d'étudier la dispersion dans un écoulement complexe.
- Le logiciel permet de prendre en compte différentes espèces : gaz, particules ou éléments radioactifs.
- Le logiciel est capable d'exécuter des calculs sur plusieurs sources de formes différentes.
- La surhauteur du panache est calculée à chaque instant et la surélévation du panache est modélisée au voisinage de la source.

2.7.6.2. Les limites

- Les bâtiments ne sont pas pris en compte.
- Les transformations chimiques ne sont pas prises en compte.
- Les temps de calcul sont très longs. Pour traiter une source ponctuelle modélisée par un rejet de 2000 particules toutes les 10 s, pour 1 heure de météorologie, il faut 30 minutes de calcul avec un pentium 4, 3Ghz et 3 Go de RAM.
- Le logiciel ne répond pas à une logique d'étude d'impact : il est nécessaire d'exploiter les résultats pour calculer les concentrations en moyenne annuelle, les percentiles,...
- L'interaction avec le modèle MINERVE n'est pas optimisée notamment pour le calcul de la turbulence.

2.8. LE TRAITEMENT STATISTIQUE DES RESULTATS

Les modèles de la plateforme ARIA Industry ne permettent pas de faire des calculs statistiques à long terme. L'utilisateur doit exploiter les résultats « à la main » si il souhaite calculer des concentrations moyennes ou des percentiles. ARIA Industry met à la disposition des utilisateurs un utilitaire qui permet d'extraire un fichier de résultat bidimensionnel au format ASCI ou grd (compatible avec Surfer) à partir du fichier binaire de résultat tridimensionnel. Cet utilitaire permet donc d'extraire le champ de concentration au sol calculé par le modèle. Il est donc relativement facile de stocker les champs de concentration au sol pour différentes échéances et de faire des calculs statistiques « à la main » à partir de ces différents fichiers.

57/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3. ETUDE DE SENSIBILITE

L'étude de sensibilité des processus de dispersion atmosphérique constitue une étape dans la démarche d'évaluation des modèles mise en place dans le cadre de cette étude. Si l'on fait l'inventaire des sources d'erreurs rencontrées dans la mise en œuvre d'un modèle de dispersion, on peut en distinguer trois principaux types :

- Les erreurs liées au modèle proprement dit, à savoir les hypothèses de modélisation (formulation mathématique du modèle), les erreurs de résolution numérique (passage du modèle mathématique au modèle algorithmique) ou encore les erreurs de programmation du logiciel (mise en œuvre informatique).
- Les erreurs dues aux incertitudes ou à la connaissance partielle des données d'entrée du modèle.
- Les erreurs liées au manque d'expérience de l'utilisateur qui peut conduire à une mauvaise utilisation du modèle par rapport au problème à traiter.

L'étude de sensibilité effectuée a pour objectif d'aider à la quantification ou à la réduction de ces trois types d'erreurs :

- Concernant les erreurs dues au modèle, l'étude de sensibilité permettra d'évaluer l'influence des différents phénomènes physiques sur la concentration en polluants, afin de déterminer les conséquences d'une non prise en compte de ces phénomènes dans les modèles.
- L'étude de sensibilité permettra également d'évaluer l'impact sur les concentrations calculées d'une erreur ou d'une incertitude sur les données d'entrée du modèle.
- Cette étude permettra enfin aux utilisateurs des modèles d'acquérir une expérience des phénomènes influençant la dispersion, afin de minimiser leurs erreurs dans la mise en œuvre de ces outils.

De plus, cette étude de sensibilité vise à évaluer l'influence de différentes méthodologies de mise en œuvre des modèles sur les résultats finaux. Il s'agit par exemple de s'interroger sur l'impact d'un regroupement de plusieurs sources en une source unique équivalente ou encore d'évaluer l'effet d'une prise en compte par une rose des vents de la variabilité météorologique. De ce point de vue, l'étude de sensibilité fournira aux industriels des éléments de réponse concernant les approches de mise en œuvre des modèles sur des cas réels.

Sur le plan pratique, l'étude de sensibilité consiste à évaluer l'impact sur la concentration des différents paramètres caractérisant le problème étudié : émissions, météorologie, site. L'étude sera donc menée en considérant successivement ces trois grandes familles de paramètres. La démarche est cependant rendue complexe par l'interdépendance entre les différents paramètres. D'une part, la sensibilité à certains paramètres dépend de la valeur prise par d'autres paramètres (nous verrons en particulier les interactions possibles entre le phénomène de surhauteur et la hauteur de la couche limite atmosphérique). D'autre part, certains paramètres (dits "primaires") agissent directement sur le comportement du panache alors que d'autres paramètres (dits "secondaires") agissent sur la concentration en modifiant les paramètres primaires (exemple de la rugosité qui agit sur la vitesse du vent et sur la turbulence). Dans le cadre de cette étude, nous essaierons, dans la mesure du possible, de mettre en évidence les relations entre les paramètres considérés.

58/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Pour quantifier la sensibilité de la concentration aux différents paramètres du problème, une démarche idéale consisterait à mesurer directement dans l'atmosphère l'impact de ces paramètres sur le comportement d'un panache. Malheureusement, ce type de mesures est très difficile à réaliser et il est donc plus simple d'utiliser les modèles, théoriques ou empiriques, disponibles dans la littérature, en considérant que ces modèles constituent l'état des connaissances scientifiques actuelles. Dans cette optique, nous utiliserons pour mener à bien l'étude de sensibilité des modèles analytiques simples, mais également des outils logiciels tels que ADMS ou ARIA IMPACT, qui intègrent également ce type de modèles.

Pour réaliser cette étude de sensibilité, nous avons utilisé, dans la mesure du possible, des données réelles fournies par les industriels afin d'illustrer de manière concrète les différents points que nous avons abordés.

3.1. RAPPEL DU COMPORTEMENT GENERAL D'UN PANACHE DE POLLUANTS

Si on observe l'allure d'un nuage de polluant issue d'une source ponctuelle, on peut noter trois effets majeurs (Figure 10 et Figure 11) :

- Le panache s'étire dans la direction du vent. Le vent transporte le polluant en aval de la source.
- Le panache s'étale dans les directions transversales par diffusion turbulente. La distribution transversale de concentration est approximativement gaussienne. Cette distribution est caractérisée par le débit de la source, la vitesse du vent et les écart-types horizontaux et verticaux. Ces écart-types augmentent quand on s'éloigne de la source sous l'effet du mélange par la turbulence atmosphérique. Au fur et à mesure que le panache s'étale, la concentration sur l'axe diminue.
- Le panache de polluant s'élève au dessus de la source par des effets thermiques et dynamiques.



Figure 10 : allure d'un panache issue d'une source ponctuelle



Ce comportement théorique d'un panache est compliqué par une multitude d'effets liés aux caractéristiques du site et du polluant et aux caractéristiques de l'écoulement.

59/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.2. INFLUENCE DES CONDITIONS DE REJET

3.2.1. LE DEBIT DE LA SOURCE

La concentration d'un polluant issu d'une source est directement proportionnelle au débit de la source.

3.2.2. HAUTEUR DE LA SOURCE

L'objectif est d'évaluer l'influence de la hauteur de la source sur le niveau de concentration au sol et sur la distance entre la source et le point de concentration maximale au sol. Les tests suivants ont été réalisés à partir d'un modèle gaussien.

On considère une situation météorologique neutre qui correspond à la classe D de la classification de Pasquill (Cf.Tableau 2).

Vitesse (m/s)	Direction du vent (°)	Flux de chaleur (wm ⁻²)	Hauteur de la couche Limite (m)	
5	270	0	800	

Tableau 2

Les principales caractéristiques de la source étudiée sont reportées dans le Tableau 3. La hauteur de la couche limite est suffisamment haute pour ne pas avoir d'influence sur la dispersion du panache.

Source: cheminée	Diamètre (D)	hauteur (H)	Vitesse des rejets (W)	Température (T)	Débit de la source (Q)	Rugosité (R)	Hauteur de la couche limite h
Ponctuelle	1 m	Varie (m)	5 ms⁻¹	20 °C	1 gs⁻¹	0.1 m	800 m

Tableau 3

Les différentes hauteurs de la cheminée étudiées sont 0, 20, 40, 50, 60, 80m. On trace pour chaque hauteur, les concentrations au sol sur l'axe du panache. Les résultats sont présentés sur la Figure 12 et la Figure 13

60/228



Figure 12 : Concentration au sol sur l'axe du panache pour différentes hauteurs de rejet



Figure 13 : Impact au sol (concentration en $\mu g/m^3$) pour différentes hauteurs de rejet

61/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

D'après ces résultats, plus la hauteur de la cheminée est grande plus les concentrations sont faibles. De plus, le maximum des concentrations s'éloigne de la source au fur et à mesure que la hauteur de la source croît. Cela s'explique par le terme exp $(-H^2/2^*\sigma_z^2)$ dans la formulation gaussienne (Cf. équation 2.2).

3.2.3. VITESSE ET TEMPERATURE DU REJET

Vitesse verticale du rejet

La source étudiée possède les caractéristiques suivantes (Cf. Tableau 4).

Source: ponctuelle	Diamètre (D)	Hauteur H)	Vitesse de rejets (W)	Température (T)	Débit de la source (Q)	Rugosité (R)	Hauteur de la couche limite atmosphérique (Hcla)
Cheminée centrée	1m	50m	Varie (m.s⁻¹)	50°C	1g.s⁻¹	0.1m	800m

Tableau 4

La vitesse d'éjection du gaz varie entre 1 et 30 m.s⁻¹. Les concentrations au sol sur l'axe du panache et la surhauteur due aux différentes vitesses d'éjections de la cheminée sont représentées sur la Figure 14 et la Figure 15.



Figure 14 : Evolution de la surhauteur en fonction de la vitesse d'éjection

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 15 : Concentration au sol sur l'axe du panache pour différentes vitesse de rejet

On observe sur ces figures que lorsque la vitesse d'éjection des polluant diminue, la concentration au sol augmente et que le point d'impact correspondant à la concentration maximale (C_{max}) se rapproche de la source. Cela est dû à une diminution de la surhauteur qui conduit à une diminution de la hauteur finale du panache. Ce résultat est en accord avec l'influence de la hauteur de la source illustrée sur la Figure 12 et la Figure 13

Température du rejet

Les caractéristiques de la source étudiée sont regroupées dans le Tableau 5.

Source: ponctuelle	Diamètre (D)	Hauteur (H)	Vitesse de rejets (W)	Température (T)	Débit de la source (Q)	Rugosité (R)	Hauteur de la couche limite atmosphérique (Hcla)
cheminée	1m	50m	5 (ms ⁻¹)	Varie	1g.s⁻¹	0.1m	800m

Tableau 5

Les températures d'éjections de la cheminée varient entre 0 et 300°C. Les concentrations au sol sur l'axe du panache et la surhauteur en fonction de la température sont représentées sur la Figure 16 et la Figure 17.

62/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 16 : Evolution de la surhauteur en fonction de la température du rejet



Figure 17 : Concentration au sol sur l'axe du panache pour différentes températures de rejet

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

On montre sur ces résultats que lorsque la température d'éjection diminue, la surhauteur diminue. Cela conduit à une augmentation des concentrations au sol et à une diminution de la distance entre le point de concentration maximale au sol (C_{max}) et la source.

3.2.4. LE CALCUL DE SURHAUTEUR

3.2.4.1. Les différents modèles de surhauteur

Il existe plusieurs méthodes pour calculer la surhauteur d'un panache. Le logiciel ARIA IMPACT propose 5 méthodes différentes fondées sur des formules semi-empiriques qui permettent de déterminer la surhauteur finale. Le logiciel ADMS propose une méthode de calcul de la surhauteur instantanée en résolvant les équations de conservation de la quantité de mouvement, de la masse et de l'énergie thermique à chaque instant pour une section du panache. La valeur retenue de surhauteur calculée par ADMS pour comparer les différentes méthodes est la surhauteur finale.

Nous avons étudié ces différentes méthodes pour un rejet de NO_2 issue d'une cheminée de 10m ayant un diamètre de 1m. Le vent est uniforme et de 3m/s, les conditions atmosphériques sont neutres et la température est de 15 °C.

Nous avons étudié 3 types de rejet :

- un rejet chaud ayant une vitesse de rejet de 1m/s et une température de 100°C.
- un rejet dynamique ayant une vitesse de rejet de 20 m/s et une température de 15°C
- un rejet chaud et dynamique ayant une vitesse de rejet de 20 m/s et une température de 100°C

	ADMS	Concawe	Briggs	Anfossi	Holland	Stumke	Cude
Rejet chaud	15 m	10 m	5 m	3.3 m	0.7 m	41 m	1 m
Rejet dynamique	20 m		10 m		10 m	49 m	20 m
Rejet chaud et dynamique	90 m	42.5 m	30 m	20 m	14 m	51 m	18 m

Nous obtenons les résultats suivants pour les surhauteurs finales :

Tableau 6 : résultat des calculs de surhauteur par différentes méthodes

On remarque que les résultats des différentes méthodes sont assez différents. La méthode de calcul de la surhauteur implémentée dans le logiciel ADMS est théoriquement la plus fiable car elle est fondée sur une résolution des équations de conservation de la quantité de mouvement. Alors que les autres formulations sont fondées sur des analyses empiriques. De même parmi les différentes formulations, la formule de Briggs a fait l'objet de nombreux travaux de recherche et elle s'applique à tous les cas possibles de rejet et de conditions météorologiques.

A partir des formules de Briggs, nous avons établi un abaque (Figure 18) qui permet de représenter l'évolution de la surhauteur finale en fonction de la température pour différentes vitesses de rejet.

Ces abaques ont été calculés pour un rejet issu d'une cheminée ayant un diamètre de 2 m, la vitesse d'écoulement est de 3 m/s et la température extérieure de 20°C, les conditions atmosphériques sont neutres.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 18 : évolution de la surhauteur finale d'un panache en fonction de la température et de la vitesse du rejet

3.2.4.2. La modification du terme source

Il existe 2 méthodes pour modéliser l'impact de la surhauteur sur le panache de polluant :

- on tient compte de la phase d'élévation du panache au voisinage de la source en calculant point par point la position du centre du panache.
- on ajoute à la hauteur de la source la surhauteur finale calculée par le modèle et on considère que l'axe du panache est à une altitude égale à la hauteur plus la surhauteur.

Cette deuxième hypothèse revient à sous-estimer la concentration au voisinage de la source.

Pour comprendre ce phénomène, nous avons modélisé avec ADMS une source de 10 m rejetant un gaz à la vitesse de 5 m/s et à une température de 50 °C. La surhauteur finale du panache calculée par ADMS est de 30 m et elle est atteinte à une distance de 4000m de la source. Nous avons comparé la concentration au sol d'un tel rejet avec la concentration au sol d'un même rejet issu d'une cheminée de 40m sans surhauteur (Figure 19).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 19 : évolution de la concentration au sol pour 2 types de rejet

On remarque que dans ce cas précis, pour une distance inférieure à 600m de la source, la concentration du rejet à 40m sans surhauteur est plus faible que la concentration du rejet à 10m avec surhauteur. Cet exemple permet de montrer que le choix de la méthode de prise en compte de la surhauteur peut avoir un impact sur la concentration au sol. En revanche, la distance à partir de laquelle les deux méthodes sont équivalentes dépend des conditions de rejet et des conditions de l'écoulement.

67/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.2.5. GEOMETRIE DE LA SOURCE

La plupart des modélisations effectuées dans le cadre de cette étude ont porté sur le cas de sources ponctuelles où l'on néglige la géométrie exacte de l'exutoire de polluants. Cela correspond au cas fréquent d'un rejet collecté dans une cheminée. Or dans un certain nombre de situations, les rejets se font de façon plus diffuse :

- Soit parce que l'émission s'effectue le long d'une ligne ou à travers une surface (exemple du dégazage d'un stockage de déchets, de l'envol de poussière dans une carrière)
- Soit parce que l'émission est constituée d'une multitude de sources ponctuelles qu'il n'est pas possible d'identifier individuellement (exemple de fuites multiples dans une unité chimique)

Le champ de concentration en aval d'une source de géométrie quelconque dépend bien évidemment de cette géométrie et il est impossible de décrire en détail toutes les géométries que l'on peut rencontrer dans la pratique. L'objectif de l'étude de sensibilité sur la géométrie des sources a donc été :

- De présenter le champ de concentration en aval de quelques géométries caractéristiques afin d'illustrer les modifications que l'on est susceptible d'observer (paragraphes 3.2.5.1 et 3.2.5.2).
- D'évaluer à partir de quelle distance le panache issu d'une source complexe peut être représenté par une source plus simple, voire par une source ponctuelle (paragraphes 3.2.5.3 à 3.2.5.6).

3.2.5.1. Comportement du panache pour différentes tailles de source

Nous avons tout d'abord comparé sur la Figure 21 et la Figure 20 les concentrations en aval de sources surfaciques circulaires de même débit et de rayon variant progressivement de 0 à 100 m. On observe que la dimension de la source modifie le champ de concentration sur la source elle-même et en aval. Plus la source est étalée, plus les niveaux de concentration sur la source sont faibles. Le maximum de concentration est systématiquement observé sur le bord aval de la source. Dans le sillage de la source, le panache est d'autant plus large (et la concentration d'autant plus faible) que la source est étalée. A une grande distance de la source, les différents panaches ont un comportement qui se rapproche du panache issu de la source ponctuelle.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 20 : comparaison des panaches de concentration issus de sources surfaciques circulaires de différents rayons R mais de même débit. Les sources sont représentées en bleu. Les panaches représentés correspondent au plan de la source.

68/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 21 : comparaison des concentrations sur l'axe de panaches issus de sources surfaciques circulaires de différents rayons R mais de même débit.

69/228

70/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



3.2.5.2. Comportement du panache pour différentes formes de sources

Figure 22 : comparaison des panaches de concentration issus de sources linéiques avec un panache issu d'une source ponctuelle de même débit. Les sources sont représentées en bleu. Les panaches représentés correspondent au plan de la source.

LMFA – UMR 5509 CNRS / ECL / UCB 71/228 Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles . 71/228



Figure 23 : comparaison des concentrations sur l'axe de panaches issus de sources linéiques avec le cas d'un panache issu d'une source ponctuelle de même débit.





72/228
Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Nous avons représenté sur la Figure 22 et sur la Figure 24 les panaches issus de sources linéiques et surfaciques simples (segments de droite et carrés de différentes orientations), en comparaison avec le panache issu d'une source ponctuelle de même débit. Les concentrations sur l'axe des panaches dans ces différents cas sont représentées sur la Figure 23 et la Figure 25.

De manière générale, on constate que la forme de la source a une influence non négligeable sur l'allure du champ de concentration en aval de celle-ci. Cependant, on peut remarquer que l'importance de cet effet dépend de la direction dans laquelle s'étend la source :

- Lorsque l'extension de la source est principalement dans la direction de l'écoulement (cas de la source linéique alignée avec le vent), on constate que le champ de concentration se rapproche rapidement du cas de la source ponctuelle lorsque l'on s'éloigne de la source.
- Lorsque la source s'étend dans la direction transversale à l'écoulement, la modification du champ de concentration est plus importante.

Les différences entre l'extension longitudinale de la source et l'extension transversale seront expliquées quantitativement au paragraphe 3.2.5.3 mais il apparaît d'ores et déjà qu'un étalement transversal aura plus d'effet qu'un étalement longitudinal. Il faut noter que la direction longitudinale et la direction transversale dépendent de l'orientation du vent ; ainsi, dans le cas d'un bâtiment allongé, l'allure du panache sera très différente selon que le vent sera parallèle ou perpendiculaire à l'axe du bâtiment. Les conclusions sur l'effet de la géométrie devront donc être adaptées en fonction de l'orientation du vent.

Les cas de sources surfaciques permettent également d'observer le champ de concentration sur la source elle-même. Il apparaît que la concentration augmente jusqu'au bord aval de la source où l'on atteint la valeur maximale de concentration dans l'écoulement.

3.2.5.3. Critère de représentation de sources complexes par des sources plus simples

Les logiciels de modélisation de la dispersion atmosphérique ne permettent pas tous de décrire des sources de géométrie quelconque. Ils permettent tous de traiter des sources ponctuelles et un certain nombre d'entre eux permettent de traiter des sources linéiques, surfaciques ou volumiques simples (segment de droite, rectangle, parallélépipède). Lorsque la source que l'on souhaite modéliser est plus complexe que cela, ou lorsque l'on souhaite simplifier la source pour faciliter le traitement, il est nécessaire de déterminer comment passer d'une source complexe à une source plus simple. Dans ce paragraphe, nous allons proposer une approche permettant de déterminer les caractéristiques d'une source ponctuelle équivalente à une source complexe et d'évaluer l'erreur occasionnée par cette simplification.

Barycentre et écarts-types d'une source complexe

Pour modéliser une source complexe par une source ponctuelle équivalente, il semble naturel de localiser cette source ponctuelle au barycentre de la distribution de débit de la source réelle.

Dans le cas où la source réelle est constituée d'un ensemble de sources ponctuelles de débits différents, nous allons déterminer un certain nombre de formules pour caractériser la source équivalente. Soit N sources de coordonnées (x_i, y_i, z_i) et de débit Q_i , où i varie de 1 à N. Le débit total de la source équivalente s'obtient alors en sommant tous les Q_i :

$$\mathbf{Q} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{Q}_{i}$$

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

On calculera alors les coordonnées du barycentre G de la source par les relations :

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{G} = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i}.\mathbf{Q}_{i} \\ \mathbf{y}_{G} = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{y}_{i}.\mathbf{Q}_{i} \\ \mathbf{z}_{G} = \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{z}_{i}.\mathbf{Q}_{i} \end{cases}$$

Afin de quantifier l'erreur occasionnée par l'utilisation de cette source équivalente, il est nécessaire d'estimer l'extension de la source réelle dans les différentes directions. Pour cela, nous allons utiliser la notion d'écart-type de la distribution d'émission. Les écarts-types de la source dans les différentes directions sont notés d_x , d_y et d_z . Ils sont fournis par les relations suivantes :

$$\begin{cases} d_{x} = \sqrt{\frac{1}{Q}\sum_{i=1}^{N} (x_{i} - x_{G})^{2}.Q_{i}} \\ d_{y} = \sqrt{\frac{1}{Q}\sum_{i=1}^{N} (y_{i} - y_{G})^{2}.Q_{i}} \\ d_{z} = \sqrt{\frac{1}{Q}\sum_{i=1}^{N} (z_{i} - z_{G})^{2}.Q_{i}} \end{cases}$$

Ces différentes formules ont été illustrées sur la Figure 26 pour la détermination du barycentre et des écarts-types d'un ensemble de sources ponctuelles.



Figure 26 : exemple du barycentre (croix rouge) et des écarts-types (représentés par des ellipses rouges) d'un ensemble de sources (croix noires) de mêmes débits.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Afin d'étendre ce formalisme au cas de sources diffuses (sources linéiques, surfaciques ou volumiques), nous allons généraliser les formules précédentes en remplaçant les sommes par des intégrales volumiques. Considérons la densité volumique d'émission $q_v(x,y,z)$. Cette densité, exprimée en kg.m⁻³.s⁻¹, représente le débit d'émission dans un volume unitaire autour du point de coordonnées (x,y,z). Les nouvelles formules exprimant le débit total, les coordonnées du barycentre et les écarts-types sont alors :

$$Q = \iiint q_v(x, y, z) dv$$

$$\begin{cases}
x_G = \frac{1}{Q} \iiint x.q_v(x, y, z) dv \\
y_G = \frac{1}{Q} \iiint y.q_v(x, y, z) dv \\
z_G = \frac{1}{Q} \iiint z.q_v(x, y, z) dv \\
d_x = \sqrt{\frac{1}{Q} \iiint (x - x_G)^2.q_v(x, y, z) dv} \\
d_y = \sqrt{\frac{1}{Q} \iiint (y - y_G)^2.q_v(x, y, z) dv} \\
d_z = \sqrt{\frac{1}{Q} \iiint (z - z_G)^2.q_v(x, y, z) dv}
\end{cases}$$

Nous fournissons ci-dessous les valeurs de ces paramètres pour quelques géométries simples :

• Segment de droite de longueur L orienté dans la direction x :

G est le centre du segment

$$d_x = \frac{L}{2\sqrt{3}}$$

 $d_y = d_z = 0$

• Disque horizontal de rayon R :

 $\begin{cases} G \text{ est le centre du disque} \\ d_x = d_y = \frac{R}{2} \\ d_z = 0 \end{cases}$

• Carré horizontal de côté L et d'axes x et y :

$$\begin{cases} G \text{ est le centre du carré} \\ d_x = d_y = \frac{L}{2\sqrt{3}} \\ d_z = 0 \end{cases}$$

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Nous avons donc convenu d'utiliser comme source équivalente une source ponctuelle, placée au barycentre de la distribution de débit d'émission. La question qu'il reste à aborder est de savoir quelle est l'erreur occasionnée par cette simplification et comment cette erreur dépend de l'étalement de la source réelle (quantifié par les écarts-types d_x , d_y et d_z). Pour cela, nous allons établir un critère simple sur un modèle à deux sources ponctuelles et généraliser ce modèle à des sources quelconques

Représentation de deux sources par une source équivalente

Pour déterminer notre critère d'erreur, il est impossible d'envisager toutes les géométries possibles de source et il est donc impossible a priori de déterminer un critère universel. Notre démarche va donc consister a évaluer un critère pour un cas assez pénalisant et à appliquer ce critère à différents cas pour vérifier qu'il est bien englobant. Le critère ainsi obtenu, même s'il n'est peut-être pas universel, permettra une bonne estimation de l'erreur occasionnée par l'utilisation d'une source ponctuelle équivalente.

Considérons une source réelle constituée de deux sources ponctuelles A et B, de même débit Q et distantes d'une longueur L. La source ponctuelle équivalente à cette source réelle est située au centre du segment [AB] et a pour débit 2Q. Ce cas peut être considéré comme assez défavorable car les deux sources réelles sont nettement distinctes. Pour évaluer l'écart entre le champ de concentration réel et le champ de concentration équivalent, nous allons utiliser un modèle de dispersion gaussien pour chaque source ponctuelle, décrit par la relation :

$$C = \frac{Q}{2\pi\sigma_{y}\sigma_{z}} exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y-y_{s}}{\sigma_{y}}\right)^{2}\right] exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-z_{s}}{\sigma_{z}}\right)^{2}\right]$$

pour un panache orienté dans la direction x. Lorsque les deux sources réelles A et B sont alignées dans la direction transversale y, on peut montrer que l'erreur relative au centre du panache (position où elle est maximale) entre la source réelle et la source équivalente est donnée par la relation :

$$\operatorname{Err}_{y} = \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{d_{y}}{\sigma_{y}}\right)^{2}\right] - 1$$

où d_y représente l'écart-type de la source réelle dans la direction y (en l'occurrence, d_y = L/2) et σ_y l'écart-type du panache dans la direction y et à la distance x considérée. Etant donné que σ_y augmente avec la distance à la source, on peut en conclure que l'erreur relative diminue au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la source. L'erreur Err_y est représentée sur la Figure 28. Sur cette figure, la partie gauche correspond aux abaques de dispersion de Briggs (milieu rural) et la partie droite à la formule précédente pour Err_y. Pour utiliser cette figure, on se donne une distance x par rapport à la source, un écart-type d_y de cette source et une classe de stabilité. En reportant la distance x dans la partie gauche de la figure et en utilisant la courbe correspondant à la valeur de stabilité donnée, on détermine dans un premier temps l'écart-type σ_y du panache à la distance x. Connaissant maintenant σ_y et d_y, on utilise la partie droite de la figure pour déterminer l'erreur relative Err_y.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

De même, on peut montrer que lorsque les deux sources réelles A et B sont alignées dans la direction verticale z, l'erreur relative maximale entre la source réelle et la source équivalente est donnée par la relation :

$$Err_{z} = exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d_{z}}{\sigma_{z}} \right)^{2} \right] - 1$$

où d_z représente l'écart-type de la source réelle dans la direction z (en l'occurrence, d_z = L/2) et σ_z l'écart-type du panache dans la direction z et à la distance x considérée. L'erreur Err_z est représentée sur la Figure 29.

Lorsque les deux sources réelles A et B sont alignées dans la direction du vent x, on obtient (moyennant quelques hypothèses sur les écarts-types de dispersion) une relation différente pour l'erreur relative maximale :

$$\operatorname{Err}_{x} = \left(\frac{\operatorname{d}_{x}}{\operatorname{x}}\right)^{2}$$

où d_x représente l'écart-type de la source réelle dans la direction x (en l'occurrence, $d_x = L/2$). L'erreur Err_x est représentée sur la Figure 27.

Généralisation au cas d'une source quelconque

Dans le cas d'une source de géométrie quelconque, nous supposerons que les trois expressions précédentes de l'erreur pourront s'appliquer. Nous vérifierons dans les paragraphes suivants que ces expressions majorent effectivement l'erreur observée. Si la source réelle est caractérisée par des écarts-types d_x , d_y et d_z , l'erreur relative totale sera approximativement égale à la somme des 3 erreurs relatives Err_x , Err_y et Err_z :

$$\operatorname{Err}_{\operatorname{Tot}} = \operatorname{Err}_{x} + \operatorname{Err}_{y} + \operatorname{Err}_{z}$$

Cette approximation est valable tant que les erreurs relatives ne dépassent pas quelques dizaines de pourcents.

Voici donc un résumé de la démarche que nous proposons pour la modélisation des sources complexes par une source ponctuelle équivalente :

- Calcul de la position et du débit de la source équivalente au moyen des expressions barycentriques.
- Calcul des écarts-types d_x, d_y et d_z de la source réelle.
- Evaluation, pour une distance donnée, des erreurs relatives dans les trois directions au moyen des formules ou des abaques.
- Somme des trois erreurs relatives pour obtenir l'erreur relative totale.

Il est important de noter que l'erreur relative dépend de la distance à la source, de l'état de stabilité et, dans le cas d'une source anisotrope, de la direction du vent.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 27 : Représentation de Err_x en fonction de l'écart-type de la source d_x et de la distance x.



Figure 28 : Représentation de Err_y *en fonction de l'écart-type de la source* d_y *et de la distance* x *et de la classe de stabilité (courbes obtenues avec le modèle de Briggs en milieu rural)*





Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Exemple d'application de la démarche

Considérons une source complexe dont les écarts-types dans les 3 directions sont $d_x = d_y = d_z = 10 \text{ m}$. On souhaite connaître l'erreur que l'on commet à 500 m de la source si l'on modélise cette source par une source ponctuelle équivalente. On se place dans des conditions de dispersion neutre (classe D de Pasquill).

En utilisant les abaques de la Figure 27, de la Figure 28 et de la Figure 29, on obtient les valeurs suivantes pour les différentes erreurs relatives (La démarche d'utilisation des abaques est représentée par les pointillés bleus) :

 $\left. \begin{array}{l} Err_x \ll 1\% \\ Err_y \approx 4\% \\ Err_z \approx 10\% \end{array} \right\} \Longrightarrow Err_{Tot} \approx 14\%$

On obtient ainsi une erreur total de 14%.

Limitations de la démarche

La démarche proposée fournit une estimation de l'erreur commise lors de l'utilisation d'une source ponctuelle équivalente. Cette approche présente un certain nombre de limitations :

- L'approche est basée sur la généralisation d'un cas simple si bien que l'estimation de l'erreur est majorante.
- La démarche suppose de connaître les écarts-types de dispersion à la distance considérée. Les abaques présentées ci-dessus on été obtenues à partir du modèle de dispersion de Briggs pour un milieu rural. Ces abaques pourrait être refaites avec tout autre modèle.
- La démarche s'appuit sur un modèle de dispersion simple, qui suppose un écoulement uniforme. De nombreux processus non pris en compte (surhauteur de panache, relief, bâtiments) pourraient modifier l'erreur associée à l'utilisation d'une source ponctuelle équivalente. Le résultat fournit pas cette méthode doit donc être considéré à titre indicatif.

3.2.5.4. Exemples de représentation d'une source de géométrie complexe par une source ponctuelle

Nous avons présenté, sur la Figure 20, la Figure 22 et la Figure 24 des panaches issus de sources linéiques ou surfaciques de formes et d'orientation diverses. Pour chaque type de source, nous avons déterminé, avec la méthode proposée au paragraphe précédent, la source ponctuelle équivalente, ainsi que la distance estimée au-delà de laquelle l'erreur relative devrait être inférieure à 5% en utilisant cette source équivalente. Nous avons comparé cette distance estimée avec la distance effective à laquelle on atteint ce seuil de 5%. Les résultats sont présentés dans le Tableau 7 :

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

	1	
Type de source	Distance estimée par la méthode proposée, à laquelle l'erreur devient inférieure à 5%	Distance effective à laquelle l'erreur devient inférieure à 5%
Source circulaire R = 20 m	410 m	398 m
Source circulaire R = 40 m	834 m	812 m
Source circulaire R = 60 m	1276 m	1240 m
Source circulaire R = 80 m	1730 m	1690 m
Source circulaire R = 100 m	2217 m	2155 m
Source linéique (L = 100 m) à 90°	1224 m	1020 m
Source surfacique carrée (L = 100 m) à 0°	1224 m	865 m

 Tableau 7 : Comparaison des distances estimées et effectives à laquelle on obtient une erreur de 5% avec une source ponctuelle équivalente.

On constate que la méthode proposée fournit une bonne estimation de l'erreur effective en étant toujours majorante comme nous l'avions présupposé. De manière plus générale, ces résultats illustrent une fois de plus que l'erreur se ressent d'autant plus loin que la source est étalée.

3.2.5.5. Exemples de représentation d'une source de géométrie complexe par une source de géométrie plus simple

Dans un certain nombre de cas, on souhaite représenter une source complexe par une source plus simple mais qui n'est pas nécessairement ponctuelle. Pour déterminer l'erreur commise dans cette situation, nous proposons d'appliquer les expressions de l'erreur proposées précédemment, en utilisant pour les écarts-types d_x , d_y et d_z les distances caractéristiques des différences entre la source réelle et la source plus simple. Pour mieux comprendre ce principe, considérons deux sources "complexes", l'une linéique et l'autre surfacique, que l'on souhaite modéliser par une source plus simple (cf. Figure 30).



Figure 30 : Représentation de sources complexes (trait plein) par des sources de forme géométrique plus simple (pointillés)



81/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

La dispersion des panaches et les profils de concentration sur l'axe, correspondant à ces deux configurations, sont représentés de la Figure 31 à la Figure 34.



Figure 31 : comparaison des panaches de concentration issus d'une source linéique complexe et d'une source rectiligne de même débit. Les sources sont représentées en bleu. Les panaches représentés correspondent au plan de la source.



Figure 32 : comparaison des concentrations sur l'axe de panaches issus d'une source linéique complexe et d'une source rectiligne de même débit.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 33 : comparaison des panaches de concentration issus d'une source surfacique complexe et d'une source carrée de même débit. Les sources sont représentées en bleu. Les panaches représentés correspondent au plan de la source.



Figure 34 : comparaison des concentrations sur l'axe de panaches issus d'une source surfacique complexe et d'une source carrée de même débit.

On constate dans les deux cas que le panache issu de la source simplifiée devient rapidement très proche du panache réel. Comme dans les cas précédents, nous avons estimé la distance à laquelle l'erreur relative devient inférieure à 5% (estimée à partir des valeur de dx et dy obtenues sur la Figure 30) et nous avons comparé cette distance avec la distance effective à laquelle on atteint cette erreur. Les résultats sont présentés dans le Tableau 8.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Type de source	Distance estimée par la méthode proposée, à laquelle l'erreur devient inférieure à 5%	Distance effective à laquelle l'erreur devient inférieure à 5%
Source linéique complexe / source rectiligne	9,3 m	8 m
Source surfacique complexe / source carrée	101 m	78 m

 Tableau 8 : Comparaison des distances estimées et effectives à laquelle on obtient une erreur de 5% avec une source simple équivalente.

On constate, comme on pouvait s'y attendre, que les distances sont relativement courtes par rapport aux distances obtenues pour une modélisation par une source ponctuelle. L'estimation fournie par notre méthode est proche de la distance effective et elle est là-encore majorante.

3.2.5.6. Exemples de regroupement de sources multiples en une source ponctuelle : cas d'un site industriel de Renault

Pour illustrer l'intérêt de la méthode proposée sur un exemple concret, nous avons étudié le regroupement des sources sur un site industriel du groupe Renault, illustré sur la Figure 35.



Figure 35 : Site de Renault pour l'étude du regroupement des sources. Le cercle en pointillés rouges correspond au bâtiment étudié.

Nous nous sommes intéressé en particulier au bâtiment entouré sur la Figure 35. Ce bâtiment comprend en réalité 31 sources de débits différents. Nous avons étudié une situation de stabilité neutre et de vent d'ouest. Après avoir déterminé le barycentre de la source ponctuelle équivalente, nous avons simulé la dispersion dans les deux cas et les résultats sont illustrés sur la Figure 36 et la Figure 37.



Renault et d'une source ponctuelle équivalente.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

On observe sur ces résultats qu'il faut une distance supérieure à 1 km en aval avant que la source ponctuelle ne représente correctement le comportement du panache.

Afin d'estimer l'erreur relative d'un point de vue quantitatif, nous avons évalué les écarts-types de la source réelle et l'on obtient $d_x = 95 \text{ m}$ et $d_y = 39 \text{ m}$. À partir de ces valeurs, nous avons estimé la distance à laquelle l'erreur relative devient inférieure à 5%. On obtient une distance estimée de 1723 m. Cette distance est relativement importante et nous indique que la modélisation par une source ponctuelle n'est certainement pas adaptée si l'on s'intéresse à des impacts en champ proche.

Dans ce cas, la distance effective à laquelle on atteint une erreur de 5% est de 1478 m, ce qui nous indique que notre estimation était majorante et du bon ordre de grandeur.

3.2.6. VARIABILITE TEMPORELLE DES CONDITIONS D'EMISSION

3.2.6.1. Description des données d'entrée et de la démarche utilisée

Pour décrire les conditions de rejet d'un site industriel, plusieurs méthodes sont possibles :

- On peut considérer les valeurs moyennes des caractéristiques du rejet (débit, température et vitesse).
- On peut moduler les caractéristiques en fonction du fonctionnement du site.

Nous allons montrer sur un exemple particulier l'impact de la modulation des émissions sur un calcul à long terme de la dispersion d'un polluant.

Pour réaliser cette étude, nous avons utilisé les données météorologiques horaires de la ville de Lyon pour l'année 2003. Les variables utilisées sont le vent à 10 m en vitesse et en direction, la température, la couverture nuageuse et les précipitations.

La source modélisée est une cheminée de 10 m de hauteur rejetant des oxydes d'azote sur un terrain plat de rugosité 0.1m. La température du rejet est constante et égale à 15°C et la vitesse du rejet est de 5m/s.

Nous avons étudié 4 scénarios différents :

- Les caractéristiques du rejet sont constantes tout au long de l'année.
- Le débit de polluant varie suivant les heures de jour et les heures de nuit.
- Le débit de polluant varie suivant les jours ouvrables et les jours de week-end.
- Le débit de polluant varie suivant les saisons.

Pour comparer ces différents scénarios, les modulations sont choisies de telle sorte que le débit de polluant en moyenne annuelle est de 1g/s.

Pour chaque scénario, nous présenterons les caractéristiques météorologiques du site, la concentration au sol en moyenne annuelle ainsi que le percentiles 98.

86/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.2.6.2. Les caractéristiques du rejet sont constantes pour toutes les heures de l'année

La météorologie à Lyon est très particulière : les vents dominants sont du nord et du sud (Figure 38). La proportion de vents calmes est assez importante : 500 heures dans l'année.



Figure 38 : rose des vents année 2003

Les résultats du scénario sans modulation des émissions sont présentés ci-dessous (Figure 39, Figure 40).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 39 : concentration moyenne annuelle $(\mu g/m^3)$ au sol sans modulation



Figure 40 : percentile 98 (μ g/m³) sans modulation

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.2.6.3. Modulation diurne des émissions

Pour simuler une source qui fonctionnerait uniquement pendant la journée, on applique un coefficient 2 aux émissions de 8h à 19h et un coefficient 0 pour les heures de nuit.



Figure 41 : évolution du débit de polluant en fonction de l'heure de la journée

Les caractéristiques météorologiques de l'année 2003 pour les heures de jour et les heures de nuit sont décrites ci-dessous (Figure 42 et 43, Tableau 9)



Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

	jour	nuit
stable	952	3152
instable	1321	110
neutre	2110	1117

Tableau 9 : répartition des situations de stabilité suivant le jour et la nuit

On remarque qu'il y a plus de situations de vents calmes la nuit que le jour et que les vents modérés ou forts sont plus fréquents en journée que la nuit. On remarque aussi que les situations stables sont très fréquentes la nuit et que les situations instables ou neutres sont très fréquentes le jour.

La concentration moyenne annuelle et les percentiles 98 obtenus pour ce scénario sont présentés ci-dessous (Figure 44, Figure 45).





Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 45 : percentile 98 (μ g/m³) avec une modulation jour-nuit

Distance à la source		С		P98
suivant	C sans	modulation	P 98 sans	modulation
l'axe Nord-	modulation	diurne	modulation	diurne
Sud (m)	(µ g /m ³)	(µg/m³)	(µg/m³)	(µg/m³)
-2000	0.676	0.507	6.939	4.798
-1600	0.895	0.699	8.766	6.774
-1200	1.300	1.081	11.947	10.723
-800	2.241	2.052	18.595	20.234
-400	5.908	6.395	42.907	58.356
-266.67	10.381	12.210	70.578	105.797
-133.33	22.210	30.270	149.425	264.044
0	0.000	0.000	0.000	0.000
133.33	16.435	18.821	133.488	232.063
266.67	8.227	7.855	69.964	93.187
400	4.829	4.171	42.353	49.517
800	1.927	1.328	18.591	15.873
1200	1.143	0.683	11.739	7.892
1600	0.794	0.429	8.027	4.931
2000	0.603	0.302	6.109	3.445

Tableau 10 : évolution des concentrations moyennes et des percentiles 98

La modulation des émissions sur la journée à un impact important sur le calcul de la pollution à long terme. D'une part, la concentration moyenne annuelle est différente pour les deux scénarios :

- lorsque les émissions sont modulées entre le jour et la nuit, l'impact de la source se fait sentir à une moins grande distance que si les émissions sont constantes.
- le maximum de concentration observé au voisinage de la source est plus fort dans le cas où les émissions sont modulées.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Ces deux phénomènes s'expliquent par le fait que dans les situations instables ou neutres, le panache se disperse plus vite que dans les conditions stables. Par conséquent, dans le cas de la modulation diurne, l'impact du rejet est plus fort près de la source mais moins important si on s'éloigne de la source. D'autre part, les percentiles 98 sont différents : ils sont beaucoup plus élevés au voisinage de la source dans le cas de la modulation diurne.

3.2.6.4. Modulation hebdomadaire des émissions

Pour simuler une source qui fonctionnerait uniquement les jours de semaine, on applique un coefficient 0 aux émissions des samedi et dimanche et un coefficient 1.4 aux émissions des jours de semaine, de telle sorte que les émissions moyennes soit toujours les mêmes que dans le cas où les émissions ne sont pas modulées.



Figure 46 : évolution du débit de la source en fonction du jour de la semaine

Pour ce scénario, la concentration moyenne annuelle et le percentile 98 obtenus sont représentés sur les figures suivantes.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 47 : concentration moyenne annuelle (μ g/m³) avec une modulation semaine week-end



Figure 48 : percentiles 98 (μ g/m³) avec une modulation semaine week-end

On remarque que lorsque les émissions sont modulées entre la semaine et le week-end, l'impact est assez faible. En comparant les résultats avec le scénario sans modulation des émissions, les variables statistiques telle que la concentration moyenne annuelle et le percentile 98 sont très proches. Sur une année complète, la météorologie est statistiquement la même en semaine et le week-end, c'est pourquoi on observe assez peu de différences entre les deux scénarios.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.2.6.5. Modulation saisonnière des émissions

Pour simuler une source qui fonctionnerait plus en hiver qu'en été, on applique un coefficient 1.65 aux émissions des jours compris entre le 1^{er} novembre et le 1^{er} avril et un coefficient 0.55 aux émissions des autres jours, de telle sorte que les émissions moyennes soit toujours les mêmes que dans le cas où les émissions ne sont pas modulées.



Figure 49 : évolution du débit de la source en fonction du mois de l'année

Pour ces deux périodes, les caractéristiques météorologiques sont décrites ci-dessous (Figure 50 et 17)



Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

	hiver	été
stable	57%	40%
instable	10%	21%
neutre	33%	39%

Tableau 11 : répartition des conditions de stabilité pour les deux périodes

Les roses des vents des deux périodes sont très semblables. On peut cependant remarquer qu'il y a plus de situations stables en hiver qu'en été.

Pour ce nouveau scénario, la concentration moyenne annuelle et le percentile 98 sont représentés ci-dessous (Figure 52, Figure 53).



Figure 52 : concentration moyenne annuelle (µg/m³) pour une modulation hiver-été

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 53 : percentile 98 (µg/m³) pour une modulation hiver-été

	1			
Distance à				D 00
la source	_			P 98
suivant	C sans	C modulation	P 98 sans	modulation
l'axe Nord-	modulation	annuelle	modulation	annuelle
Sud (m)	(µg/m ³)	(µg/m ³)	(µg/m ³)	(µg/m ³)
-2000	0.676	0.355	6.939	4.096
-1600	0.895	0.476	8.766	5.330
-1200	1.300	0.706	11.947	7.459
-800	2.241	1.258	18.595	12.531
-400	5.908	3.329	42.907	28.971
-266.67	10.381	5.766	70.578	52.729
-133.33	22.210	11.319	149.425	110.684
0	0.000	0.000	0.000	0.000
133.33	16.435	8.635	133.488	111.385
266.67	8.227	4.371	69.964	51.866
400	4.829	2.507	42.353	28.353
800	1.927	0.919	18.591	10.926
1200	1.143	0.509	11.739	6.153
1600	0.794	0.338	8.027	4.096
2000	0.603	0.248	6.109	2.992

Tableau 12 :

Lorsqu'on module les émissions suivant les saisons (émissions plus fortes l'hiver que l'été) on remarque que la concentration moyenne annuelle est plus faible que pour des émissions constantes, de même pour les percentiles. Ce résultat n'est pas général ; il dépend des caractéristiques météorologiques du site et de la topographie du site.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.2.6.6. Conclusion

Cette étude permet de montrer que la modulation des émissions a un impact non négligeable sur le calcul de la pollution à long terme. D'autre part, suivant la modulation utilisée et la situation modélisée l'impact n'est pas le même. Enfin, cette étude permet de montrer qu'on ne peut pas définir de manière systématique si une approche simplifiée où l'on utilise des émissions moyennées est majorante ou minorante.

3.3. INFLUENCE DES CONDITIONS METEOROLOGIQUES

3.3.1. VITESSE DU VENT MOYEN

3.3.1.1. Influence de la vitesse du vent moyen sur la concentration

La vitesse du vent moyen est un paramètre essentiel dans les phénomènes de dispersion dans l'atmosphère. Plus le vent est fort, plus le polluant se disperse. On se place en un point en aval d'une source et on mesure une concentration C_0 pour une vitesse de vent de U_0 . Toutes choses égales par ailleurs, si le vent augmente, la concentration diminue suivant une loi en 1/U (Figure 54)



Figure 54 : évolution de la concentration en un point en fonction de la vitesse du vent

3.3.1.2. Paramètres influençant la vitesse du vent moyen

La vitesse du vent moyen est influencée par la rugosité du sol. En effet, la rugosité du sol a un impact sur le profil vertical du vent : plus la rugosité du sol est élevée, plus l'écoulement est ralenti au voisinage du sol. (cf Etat de l'art 3.2.2.1)

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.3.2. DIRECTION DU VENT

3.3.2.1. Influence de la direction du vent sur la concentration

La direction du vent a un impact direct sur la concentration. En effet, un décalage de quelques degrés dans la direction du vent change l'orientation du panache et pour un point fixe, la concentration peut varier considérablement. Pour comprendre ce phénomène, on modélise une source ponctuelle et on calcule la concentration de polluant au sol sur des points récepteurs fixes. On fait ensuite varier la direction du vent de 2°, 5°, 10° et 20°. On calcule les nouvelles concentrations sur les mêmes points récepteurs que dans le premier cas et on les compare point par point aux concentrations initiales (Cf Figure 55, Figure 56, Figure 57 et Figure 58).



Figure 55 : Décalage de 2 degrés



Figure 57 : Décalage de 10 degrés



Figure 56 : Décalage de 5 degrés



Figure 58 : Décalage de 20 degrés

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Ce calcul montre bien l'influence de la direction du vent sur la concentration. Un écart de 5° dans la direction du vent peut entraîner un écart de 50 % sur les concentrations. Il est important de noter que les données issues des stations de Météo France sont fournies par intervalle de 10° .

3.3.2.2. Paramètres influençant la direction du vent

La présence d'obstacle ou de relief à proximité d'un site peut modifier de manière sensible la direction de l'écoulement. Une station météorologique qui n'est pas soumise aux mêmes variations de l'écoulement que le site industriel peut être assez peu représentative du site, même si elle est située à proximité.

99/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.3.3. LA STABILITE ATMOSPHERIQUE

3.3.3.1. Influence de la stabilité atmosphérique sur la dispersion

La stabilité atmosphérique est déterminée par l'amplitude des mouvements verticaux de l'atmosphère (cf Etat de l'art ch 3.1.2.3). En situation instable, le mouvement vertical d'une particule d'air est amplifié. En situation stable le mouvement vertical d'une particule d'air est atténué. En situation neutre, le mouvement vertical d'une particule d'air n'est ni atténué ni amplifié. Les conditions de stabilité atmosphérique sont donc déterminantes pour la dispersion.

Dans une atmosphère stable, les mouvements verticaux de l'atmosphère sont faibles, il y a peu de turbulence, les polluants vont peu se disperser. Dans une atmosphère instable, les mouvements verticaux de l'atmosphère sont importants, la turbulence est forte, les polluants vont fortement se disperser. Un paramètre permettant de quantifier la stabilité est l'inverse de la longueur de Monin Obukhov. Si 1/LMO est négatif, l'atmosphère est instable, si 1/LMO est positif, l'atmosphère est stable. Si 1/LMO tend vers 0, l'atmosphère est neutre.

Pour illustrer ce phénomène, on étudie un rejet de polluant pour différentes valeurs de 1/LMO. On compare la concentration au sol et les écart-types (Figure 59 Figure 60 Figure 61).



Figure 59 : concentration au sol pour différentes valeurs de 1/LMO

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .





Figure 61 : écart-types verticaux pour différentes valeurs de 1/LMO

On remarque que plus l'écoulement est instable, plus les écarts-types verticaux et horizontaux sont grands et plus la concentration au sol est faible. Les conditions de stabilité de l'atmosphère sont donc déterminantes pour la dispersion.

101/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.3.3.2. Paramètres influençant la stabilité de l'atmosphère

La stabilité de l'atmosphère dépend essentiellement des échanges thermiques avec le sol et plus précisément du flux de chaleur sensible, c'est-à-dire le flux de chaleur échangé par convection entre le sol et l'atmosphère. Dans la journée, le flux de chaleur sensible est positif, il se crée une couche limite instable au voisinage du sol et au dessus, une couche de mélange neutre. La nuit, le flux de chaleur sensible est négatif, la couche limite est stable.

Le flux de chaleur sensible dépend de l'ensoleillement, de la couverture nuageuse, de la nature et de la température du sol.

3.3.4. TURBULENCE ATMOSPHERIQUE

3.3.4.1. Influence de la turbulence atmosphérique sur la concentration

La dilution d'un polluant gazeux dans l'atmosphère dépend principalement de la turbulence de l'écoulement dans la couche limite atmosphérique. On observe que l'étalement d'un panache de polluant (caractérisé par les écart-types σ_y et σ_z) est d'autant plus rapide que la turbulence est élevée. La turbulence étant caractérisée par les écart-types sur la vitesse de l'écoulement (σ_v et σ_w).

Pour illustrer ceci, nous avons calculé la concentration issue d'une source ponctuelle pour plusieurs intensités de turbulence.

Les écart-types de diffusion sont paramétrés de la façon suivante :

$$\sigma_{y} = \frac{\sigma_{v}t}{\sqrt{1 + \frac{1}{2T_{L}}}}$$

Où T_L est l'échelle de temps lagrangienne. Cette échelle peut être paramétrée comme suit :

$$T_L = \frac{cte}{\sigma_v}$$

La constante est de l'ordre de 10 m

L'intensité de turbulence est définie par le rapport σ_v/U , où U est la vitesse de l'écoulement. On fait varier l'intensité de turbulence entre 0.08 (écoulement peu turbulent correspondant à une stratification stable et une rugosité de 10^{-3} m) et 0.5 (écoulement très turbulent correspondant à une situation instable avec une rugosité de 1m). Pour ces différents états turbulents, on compare la concentration au sol et la concentration sur l'axe.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 62 : concentration au sol pour différentes conditions turbulentes de l'atmosphère

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 63 : concentration su l'axe du panache pour différentes intensités de turbulence

On remarque que plus l'intensité de turbulence augmente plus le panache s'étale verticalement et horizontalement. C'est pourquoi, la concentration au sol diminue quand la turbulence augmente, la vitesse du vent étant constante.

3.3.4.2. Paramètres influençant la turbulence atmosphérique

• Le frottement mécanique induit par le sol (rugosité, obstacles, ...)

Dans une couche limite neutre thermiquement, la turbulence est liée au gradient de vitesse. C'est le frottement des couches de fluides les unes sur les autres qui génère des tourbillons dans l'écoulement. Donc plus il y a de frottement, plus l'écoulement est turbulent. Le frottement de l'écoulement sur le sol a donc un impact très important sur les caractéristiques de l'écoulement. La nature du sol, en particulier son état de rugosité, modifie les caractéristiques de l'écoulement : plus le sol est rugueux, plus l'écoulement est turbulent.

D'autre part les obstacles présents dans l'écoulement vont modifier les caractéristiques de l'écoulement au voisinage de l'obstacle. En effet, le sillage créé par un obstacle dans un écoulement est une zone où la turbulence est élevée et où l'écoulement est très perturbé. Lorsqu'on s'éloigne de l'obstacle, l'écoulement retrouve ses caractéristiques initiales.

La stratification atmosphérique

Dans une couche limite neutre ou stable, la turbulence de l'écoulement est uniquement d'origine mécanique. L'existence d'une stratification stable conduit même à une destruction de la turbulence sous les effets de la stabilité.

Dans une couche limite instable, les effets thermiques entre le sol et l'atmosphère créent de la turbulence qui vient s'ajouter à la turbulence d'origine mécanique.

On peut donc résumer les effets de la stratification atmosphérique sur la turbulence par le tableau suivant.

104/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

stratification	Rôle des effets mécaniques sur la turbulence	Rôle des effets thermiques sur la turbulence	Intensité de turbulence
stable	Production	destruction	faible
neutre	Production	aucun	moyenne
instable	Production	production	forte

Tableau 13 : bilan des effets thermiques et mécaniques sur la turbulence

3.3.5. LA COUVERTURE NUAGEUSE

La couverture nuageuse a un impact sur les échanges thermiques et radiatifs entre la terre et l'atmosphère et ainsi sur la stratification thermique de l'atmosphère. La couverture nuageuse se mesure en oktas sur une échelle de 0 à 8 ; 0 correspondant à un ciel dégagé et 8 à un ciel couvert. La présence de nuages filtre une partie du rayonnement solaire ainsi que le rayonnement terrestre. Durant la journée, les nuages diminuent le flux radiatif net arrivant au sol alors que pendant la nuit, ils limitent le refroidissement du sol. Les nuages font tendre l'atmosphère vers un état neutre.

Pour illustrer ce phénomène, nous avons étudié un rejet ponctuel à 1m du sol sans surhauteur dans les situations suivantes :

- Situation de jour, avec une couverture nuageuse en oktas de 0, 4, 6 ou 8.
- Situation de nuit, avec une couverture nuageuse en oktas de 0, 4, 6 ou 8.

Le vent est constant et égal à 2m/s.

Pour ces différentes situations météorologiques, nous avons étudié la stabilité (inverse de la longueur de Monin Obukhov, hauteur de couche limite) (Tableau 14 et Tableau 15) puis nous avons calculé la concentration au sol en polluant issu du rejet ponctuel (Figure 64 et Figure 67), ainsi que les écart-types de diffusion verticaux et horizontaux (Figure 65, Figure 66, Figure 68 et Figure 69).

3.3.5.1. Situation de jour

Jour	Couverture nuageuse : 0	Couverture nuageuse : 4	Couverture nuageuse : 6	Couverture nuageuse : 8
1/LMO	-0.13	-0.12	-0.10	-0.03
H _{cla}	1017	1015	870	380
stabilité	instable	instable	instable	neutre

Tableau 14 : paramètres de stabilité obtenus pour différentes couvertures nuageuse dans une situation de jour

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 64 : évolution de la concentration au sol pour différentes couvertures nuageuses dans une situation de jour



Figure 65 : évolution écart-types horizontaux pour une situation de jour

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 66 : évolution des écart-types verticaux pour une situation de jour

On remarque que dans les situations de jour (situations habituellement instables ou neutres), lorsque la couverture nuageuse augmente, la stratification tend vers une situation neutre. On remarque que les écarts-types de diffusion horizontaux et verticaux diminuent quand la couverture nuageuse augmente. L'atmosphère devient moins dispersive et la concentration au sol est plus forte lorsque le ciel est couvert que lorsque le ciel est dégagé.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.3.5.2. Situation de nuit

nuit	Couverture nuageuse : 0	Couverture nuageuse : 4	Couverture nuageuse : 6	Couverture nuageuse : 8
1/LMO	0.76	0.52	0.21	0.04
H _{cla}	50	50	50	56
stabilité	Très stable	Très stable	stable	neutre

Tableau 15 : paramètres de stabilité obtenus pour différentes couvertures nuageuse dans une situation de nuit



Figure 67 : évolution de la concentration au sol pour différentes couvertures nuageuses dans une situation de nuit



108/228



Dans les situations de nuit (situations stables) lorsque la couverture nuageuse augmente, la stratification tend vers une situation neutre. On remarque que les écarts-types de diffusion horizontaux varient très peu mais les écart-types verticaux augmentent quand la couverture nuageuse augmente. L'atmosphère devient plus dispersive et la concentration au sol est plus faible lorsque le ciel est couvert que lorsque le ciel est dégagé.
109/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.3.6. HAUTEUR DE LA COUCHE LIMITE

La hauteur de la couche limite dépend de l'état de stabilité de la couche limite. Si l'atmosphère est stable, la couche limite est basse alors que si l'atmosphère est instable, la couche limite est haute. D'autre part, le sommet de la couche limite joue le rôle de couvercle, c'est-à-dire que le panache de polluant subit une réflexion sur le sommet de la couche limite. Cependant, si le panache à une énergie cinétique suffisamment importante, il peut traverser le sommet de la couche limite.

3.3.6.1. Influence de la hauteur de la couche limite sur la concentration

Source: ponctuelle	Diamètre (D)	Hauteur (H)	Vitesse de rejets (W)	Température (T)	Débit (Q)	Rugosité (R)	Hauteur de la couche limite atmosphérique (hcla)
cheminée	1m	50m	5 (ms⁻¹)	50°C	1gs⁻¹	0.1m	varie

Les caractéristiques de la source étudiée sont présentées dans le Tableau 16

Tableau 16

La hauteur de la couche limite atmosphérique varie entre 60 et 1500 m. Les concentrations au sol suivant l'axe du panache pour les différentes hauteurs de la couche limite, la concentration maximale en fonction de la hauteur de la couche limite et la fraction de concentration pénétrant la couche limite sont respectivement présentées sur la Figure 70, la Figure 71 et la Figure 72.







Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 71 : Concentrations maximales au sol sur l'axe du panache pour différentes hauteurs de la couche limite



Figure 72 : Fraction de polluant qui pénètre la couche limite pour différentes hauteurs

111/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

On observe deux comportements des courbes selon la hauteur de la couche limite.

1^{er} cas : La hauteur de la couche limite est supérieure à 100m.

Celle-ci est suffisamment haute pour que les polluants restent entre le sol et le sommet de la couche limite. Il n'y a pas de pénétration des polluants dans l'atmosphère libre. Dans ce cas, plus la hauteur de la couche limite est haute plus l'atmosphère est turbulente et plus la concentration au sol est faible. Le maximum de concentration est obtenu pour les mêmes distances.

2^{ème} cas : La hauteur de la couche limite est inférieure à 100 m.

Une partie du panache pénètre à travers le sommet de la couche limite atmosphérique (Cf.Figure 72). Il y a réflexion d'une partie des polluants par le sommet de la couche limite. Si on regarde la fraction de panache qui pénètre dans l'atmosphère libre (PINV), on obtient une valeur non nulle. Les concentrations au sol sur l'axe du panache dépendent de la fraction de concentration pénétrant le sommet de la couche limite atmosphérique. Ainsi, si cette fraction est importante, la concentration au sol est faible (c'est le cas pour : hcla=60m) ; dans le cas contraire, la concentration devient plus importante (c'est le cas pour : hcla=80,100 et 150m).

3.3.6.2. Paramètres influençant la hauteur de la couche limite atmosphérique

La hauteur de la couche limite est due à la stabilité et donc aux échanges radiatifs. La nuit, en situation stable, la couche limite est basse (entre 50 et 200m), lorsque le jour se lève, le flux de chaleur sensible devient positif et il se crée une couche convective dont la hauteur peut atteindre 3000m.

3.3.7. **PRECIPITATIONS**

La présence de précipitations conduit à un processus de lessivage du panache par les gouttes de pluies (également appelé "dépôt humide") qui entraîne une diminution de la concentration dans l'air (cf. Etat de l'art). L'amplitude de la diminution de concentration dépend de l'intensité des précipitations. Nous avons représenté sur la Figure 73 et la Figure 74 la modification de la concentration dans un panache (émis au niveau du sol) pour différentes valeurs du taux de précipitation. Les calculs ont été réalisés pour une constante de lessivage de 10^{-4} mm⁻¹.h.s⁻¹. (valeur caractéristique des constantes utilisées dans la plupart des modèles). On constate que pour des pluies fortes (Pr > 10 mm/h), l'influence du lessivage sur la concentration peut s'avérer assez importante.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 73 : Influence de l'intensité des précipitations sur le champ de concentration au niveau du sol



Figure 74 : Influence de l'intensité des précipitations sur la concentration dans l'axe du panache

113/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.3.8. **REPRESENTATIVITE DES MESURES METEOROLOGIQUES**

Les mesures météorologiques utilisées pour les études d'impact proviennent le plus souvent de stations Météo France. Ces stations ne sont pas toujours à proximité des sites industriels, il convient alors de se poser la question de la représentativité des mesures météorologiques pour l'étude. Plusieurs cas sont envisageables.

- Le site de mesure météorologique et le site industriel sont situés dans une zone où il n'y a pas de relief. Les mesures météorologiques peuvent être néanmoins différentes de la météorologie sur le site industriel si l'occupation des sols est différente. En effet, les mesures Météo France sont généralement effectuées sur des sites recouverts d'herbe donc de rugosité faible. Or les sites industriels, s'ils sont situés en zone urbaine ont une rugosité importante, le profil de vent n'est donc pas le même. Il convient alors d'apporter une correction au module du vent pour tenir compte de ce changement d'occupation des sols entre les 2 sites. (cf Etat de l'art ch 3.2.2.1). Une différence de l'occupation des sols peut aussi avoir un impact sur la température, mais il ne s'agit que d'un biais, les variations de température restant généralement les mêmes entre les deux sites.
- Le site de mesure météorologique et le site industriel sont situés dans une zone de relief. Si les 2 sites sont soumis au même régime d'écoulement (ils sont dans une même vallée) on peut considérer que le vent mesuré sera représentatif du vent sur le site industriel. Si les 2 sites sont dans une même vallée, mais que cette vallée change de direction, la vitesse du vent sera sans doute assez proche sur les 2 sites, mais la direction sera différente. Dans tous les autres cas (les sites sont séparés par un relief ou les sites sont à des altitudes différentes) les mesures météorologiques de la station ne seront pas représentatives du site industriel. Il est alors nécessaire de déterminer la météorologie sur le site industriel, soit en effectuant de nouvelles mesures plus proches du site, soit en appliquant un modèle météorologique.

3.3.9. VARIABILITE DES CONDITIONS METEOROLOGIQUES

Pour modéliser la dispersion atmosphérique sur le long terme, il est possible d'utiliser les données météorologiques séquentielles ou des données statistiques sous forme de rose des vents. Suivant le modèle utilisé, il n'est parfois pas possible de traiter des données météorologiques séquentielles en raison des temps de calcul. D'autre part, les données statistiques sont moins coûteuses que les données séquentielles. C'est pourquoi il est parfois intéressant de faire un calcul à partir d'une rose des vents qui coûte beaucoup moins chère.

Nous effectuons une analyse comparative des concentrations entre les données météorologiques et la rose des vents. La source choisie présente les caractéristiques décrites dans le Tableau 17.

Source	Hauteur	Diamètre	Débit de la source	Vitesses des rejets	Température d'éjection du gaz
cheminée	50m	1 m	1g/s	5 ms⁻¹	50°C

Tableau 1	17
-----------	----

Les données météorologiques utilisées sont celle de la ville de Lyon pour l'année 2003.

Données horaires

Les données horaires comptent plusieurs paramètres principaux tel que la vitesse, la direction du vent, la température, la couverture nuageuse et la pluviométrie.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• La rose des vents

Pour générer la rose des vents, on procède de la manière suivante : on choisit 3 intervalles de vitesses des vents [0, 3 m/s] ; [4 ,7 m/s] et supérieur a 7m/s. Pour chaque direction et pour chaque vitesse des vents, on calcule la fréquence des vitesses correspondante. La rose des vents ainsi obtenue est présentée sur la Figure 75.



Figure 75 : Rose des vents obtenue à partir des données séquentielles

Pour le calcul, on a choisi une vitesse de 2 m/s pour représenter le premier intervalle, de 5 m/s pour le deuxième et de 9 m/s pour le troisième. Il est aussi nécessaire de préciser un paramètre de stabilité. Nous avons considéré une situation neutre pour toute la rose des vents.

Avant de pouvoir visualiser le résultat du calcul à partir de la rose des vents et le comparer au calcul séquentiel, il faut faire la moyenne pondérée des concentrations obtenues pour chaque vitesse et pour chaque direction.

Résultats

Les temps de calcul avec les deux méthodes sont différents. Le calcul avec les données séquentielles dure environ 15 min, alors que le calcul avec la rose des vents dure 2 min.

On obtient deux panaches assez similaires (cf Figure 76 et Figure 77). On vérifie bien dans les deux cas, la dominance nord-sud des vents. Cependant, le panache correspondant à la rose des vents diffère du panache correspondant aux données séquentielles en trois points essentiels :

- Le panache de la rose des vents retombe plus loin de la source.
- Le panache de la rose des vents est plus étalé.
- Le panache de la rose des vents montre un pique de concentration correspondant à un vent de sud qui est assez important alors qu'il est à peine visible sur le panache des données séquentielles.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 76 : Concentration moyenne annuelle (µg/m³) obtenue à partir de données météorologiques séquentielles



Figure 77 : Concentration moyenne annuelle ($\mu g/m^3$) obtenue à partir d'une rose des vents

Interprétation des résultats

Le fait que le panache de la rose des vents retombe plus loin que celui du calcul séquentiel est probablement dû au choix des vitesses pour chaque intervalle. Une vitesse de 2 m/s pour représenter l'intervalle des vents faibles est peut-être un peu trop élevée. Pour vérifier cela, nous avons modifié les données de vitesse de vent séquentielles de la manière suivante :

- si 0<V≤3 on affecte la valeur 2 m/s
- si 3<V≤7 on affecte la valeur 5 m/s
- si V>7 on affecte la valeur 9m/s

116/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

On effectue ensuite un nouveau calcul sur le long terme avec ces nouvelles données séquentielles. On obtient le panache représenté sur la Figure 78.



Figure 78 : Concentration moyenne ($\mu g/m^3$) obtenue à partir des données séquentielles modifiées

On voit l'apparition d'un espace de concentration nulle autour de la source, plus petit que celui observé sur la figure de la rose des vents. L'existence de celui-ci est due à la dégradation de l'information sur les vitesses. En effet, un panache pour une vitesse de 1 ms⁻¹ retombe plus prêt de la source par rapport à un panache pour une vitesse de 2 ms⁻¹, tout étant égal par ailleurs. Or en choisissant 2 ms⁻¹ pour l'intervalle des vents faibles, on relève toutes les vitesses à cette valeur donc le panache retombe plus loin de la source.

Une des hypothèses de la simulation à partir de la rose des vents est d'imposer une stabilité neutre. Nous nous sommes donc intéressés à l'impact sur le résultat de cette hypothèse. Nous avons donc modifié le fichier de données météorologiques de la manière suivante : nous avons supprimé l'information sur la couverture nuageuse et la température au sol et nous avons imposé comme paramètre de stabilité l'inverse de la longueur de Monin Obukhov. Nous avons fixé cette valeur à 0.005 m⁻¹ pour toutes les heures de l'année, ce qui correspond à une situation proche de la neutralité. Nous obtenons ainsi le panache représenté sur la Figure 79.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 79 : Concentration moyenne ($\mu g/m^3$) obtenue en imposant une stabilité neutre

On observe que le panache retombe plus loin de la source comme dans le cas de la rose des vents. On peut donc dire que la dégradation de l'information sur les paramètres qui permettent de déterminer la stabilité est pénalisante pour la qualité du résultat.

Bilan

L'utilisation d'une rose des vents pour calculer une concentration moyenne présente des limites. Le choix des vitesses moyennes pour définir la rose des vents est important. Enfin, on peut améliorer les résultats de la rose des vents en intégrant un critère de stabilité. Par exemple, il peut être intéressant de calculer 3 roses des vents : une pour les situations stables, une pour les situations neutres et une pour les situations instables.

3.4. INFLUENCE DES CARACTERISTIQUES DU SITE

3.4.1. PRESENCE DU SOL ET PROCESSUS DE DEPOT SEC

Au contact du sol, certains polluants atmosphériques réagissent chimiquement avec les composés du sol et sont ainsi captés par la surface (cf. Etat de l'art). Ce mécanisme de dépôt, appelé "dépôt sec" dépend à la fois de la nature du polluant et de la nature du sol. Il est généralement quantifié au moyen d'une vitesse de dépôt, dont les valeurs caractéristiques sont de l'ordre du cm/s. Nous avons représenté sur la Figure 80 et la Figure 81 la modification de la concentration dans un panache (émis au niveau du sol) pour différentes valeurs de la vitesse de dépôt. On constate que l'effet du dépôt sec sur la concentration au sol peut être relativement important. Il est important de noter que si la concentration dans l'air est diminuée par ce processus, la concentration dans le sol augmente si bien que la pollution change de nature mais ne disparaît pas.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 80 : Influence de l'intensité de la vitesse de dépôt sur le champ de concentration au niveau du sol



Figure 81 : Influence de l'intensité de la vitesse de dépôt sur la concentration dans l'axe du panache

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.4.2. RUGOSITE DU SOL

La source étudiée possède les caractéristiques suivantes (Tableau 18) :

Source: ponctuelle	Diamètre (D)	Hauteur (H)	Vitesse de rejets (W)	Température (T)	Débit de la source (Q)	Rugosité (R)	Hauteur de la couche limite atmosphérique (Hcla)
cheminée	1m	50m	5 (m.s⁻¹)	50 °C	1g.s⁻¹	Varie (m)	800m

Tableau 18

La rugosité est une propriété intrinsèque du sol. Un terrain accidenté contenant des obstacles possède une rugosité importante. La rugosité a un impact sur la turbulence à conditions météorologiques égales par ailleurs. Plus la rugosité augmente, plus la turbulence est importante. Cela se traduit par des écarts-types de dispersion plus grands et donc une meilleure dispersion. (Etat de l'art ch 3.2.2.1)

On sait que la rugosité influe sur deux paramètres. D'une part le profil de vent dépend de la rugosité : plus la rugosité est forte plus le freinage du vent par le sol est ressenti à une altitude élevée. D'autre part, la rugosité joue sur la dispersion verticale : plus la rugosité est grande, meilleure est la dispersion. Pour s'affranchir de l'effet de la rugosité sur le profil de vent, nous avons spécifié dans la modélisation que la hauteur de la mesure du vent était égale à la hauteur de la cheminée.

Les valeurs testées sont : 10⁻³,10⁻², 10⁻¹, 0.5, 1 et 1.5 m correspondant respectivement à la surface de la mer, champs vert, champs, steppes, parc, ville et large zone urbaine. La concentration au sol sur l'axe du panache est présentée sur la *Figure 82*. On remarque bien que plus la rugosité est élevée, plus le panache s'étale.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 82 : Evolution de la concentration au sol sur l'axe du panache pour différentes longueurs de rugosité

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.4.3. RELIEF

Nous allons étudier dans cette partie l'influence du relief sur la dispersion. La présence de relief perturbe l'écoulement et donc la dispersion (cf Etat de l'art ch 3.3). Cette perturbation dépend des conditions de stabilité de l'atmosphère. Dans une atmosphère neutre ou instable, l'écoulement suit le relief, il est légèrement accéléré au sommet de la colline puis ralenti dans les pentes descendantes. Dans une atmosphère stable, l'écoulement contourne le relief et il se crée une zone de recirculation en aval du relief.

Pour illustrer ces phénomènes, nous avons modélisé avec le code MERCURE (code eulérien d'EDF, résolvant les équations tridimensionnelles des écoulements atmosphériques) une colline de 500m de haut avec une pente d'environ 10°. Nous avons étudié 5 rejets à différentes positions autour de la colline à l'amont et à l'aval dans une situation météorologique neutre et dans une situation stable.

3.4.3.1. Ecoulement stable

Les caractéristiques de l'écoulement sont les suivantes : le vent en entrée du modèle est un vent à 3m/s à 10m avec un profil log et une rugosité de 0.1m. Le gradient de température est de -6°/km ce qui correspond à une situation stable.

Dans un écoulement stable, les mouvements verticaux n'ont pas le temps de se développer, le fluide contourne donc le relief. Il se crée alors 2 phénomènes : une zone de recirculation en aval de la source où l'écoulement est très perturbé et une zone de sillage assez étendue. Dans notre exemple, la présence du relief perturbe très fortement l'écoulement et donc la dispersion. Pour les 5 sources situées à l'amont ou à l'aval de la colline, on trace le panache de concentration au sol et dans le plan vertical (Figure 84 à Figure 89). La colline est représentée par des lignes de niveaux tous les 50m.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 84 : champ de concentration au sol (μg/m³) pour la source située à 5000m en amont du sommet de la colline



Figure 85 : champ de concentration au sol (μg/m³) pour la source située à 2500m en amont du sommet de la colline

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .







Figure 87: champ de concentration au sol ($\mu g/m^3$) pour la source située à 2500m en aval de la colline



Figure 88 : champ de concentration au sol ($\mu g/m^3$) pour la source située à 5000m en aval de la colline

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Lorsque la source est située en amont de la colline, le panache suit l'écoulement qui contourne le relief. Une partie du polluant est ensuite entraînée dans la zone de recirculation.

Au sommet de la colline, l'écoulement est légèrement accéléré, le panache issu de la source au sommet se disperse donc normalement, jusqu'à ce qu'il atteigne la zone de recirculation. Le polluant se disperse alors très brutalement.

Lorsque la dernière source est située dans la zone de recirculation, le polluant est emporté dans la direction inverse de l'écoulement moyen. Il se disperse dans la zone de recirculation puis il est advecté vers l'aval. On remarque que dans cette configuration, la présence du relief modifie complètement le champ de concentration.

1) source sur terrain plat



Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Les panaches de concentration au sol et dans le plan vertical sont très différents d'un panache issu d'une source sur un terrain plat. Pour évaluer les différences induites par la présence du relief, on compare les concentrations au sol sur l'axe du panache pour chaque source et pour une source sur un terrain plat (Figure 90 à Figure 94).



Figure 90 : comparaison des concentrations sur l'axe pour la source à -5000 m du sommet et pour une source sur terrain plat



Figure 91 : comparaison des concentrations sur l'axe pour la source à -2500 m du sommet et pour une source sur terrain plat



Figure 92 : comparaison des concentrations sur l'axe pour la source au sommet et pour une source sur terrain plat



Figure 93 : comparaison des concentrations sur l'axe pour la source à +2500 m du sommet et pour une source sur terrain plat

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 94 : comparaison des concentrations sur l'axe pour la source à +5000 m du sommet et pour une source sur terrain plat

Pour les sources situées en aval du relief, le panache contourne le relief, la concentration sur l'axe est donc plus faible que dans le cas d'une source sur terrain plat. En revanche, la concentration sur les flans de la colline est plus élevée qu'en l'absence de relief. Pour les sources situées au sommet de la colline et à 2500m en aval du sommet, on distingue 2 zones :

- au voisinage de la source la concentration au sol est très proche de la concentration pour une source sur terrain plat.
- A l'approche de la zone de recirculation qui forme un gros tourbillon, le polluant est fortement dispersé et la concentration au sol chute brutalement.

La source située à 5000m en aval du sommet de la colline est dans la zone de recirculation. La concentration en amont de la source est donc assez élevée. En aval de la source, la concentration sur l'axe est plus faible que dans le cas d'une source sur terrain plat.

127/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.4.3.2. Ecoulement neutre

Les caractéristiques de l'écoulement sont les suivantes : le vent en entrée du modèle est un vent à 3m/s à 10m avec un profil log et une rugosité de 0.1m. Le gradient de température est de -9.8°/km ce qui correspond à une situation neutre.

Dans un écoulement neutre, le fluide passe au dessus du relief. A l'amont de la colline, le vent est légèrement ralenti. Au sommet de la colline, le vent est nettement accéléré puis à l'aval de la colline, on observe un déficit de vitesse qui peut parfois même conduire à une zone de recirculation. Lorsqu'on s'éloigne du relief, l'écoulement retrouve rapidement ses caractéristiques initiales. Pour les 5 sources situées à l'amont ou à l'aval de la colline, on trace le panache de concentration au sol et dans le plan vertical (Figure 96 à Figure 101).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 95 : champ de concentration au sol (μ g/m³) pour un écoulement non perturbé



Figure 96 : champ de concentration au sol ($\mu g/m^3$) pour la source située à 5000m en amont de la colline





Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 98 : champ de concentration au sol ($\mu g/m^3$) pour la source située au sommet de la colline



Figure 99 : champ de concentration au sol (μ g/m³) pour la source située au sommet à 2500m du sommet en aval



Figure 100 : champ de concentration au sol ($\mu g/m^3$) pour la source située à 5000m en aval

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 101: champ de concentration ($\mu g/m^3$) dans le plan vertical

Dans le cas que nous avons modélisé, on remarque nettement que le vent est accéléré au sommet de la colline puis ralenti sur les pentes aval mais il n'apparaît pas de zone de recirculation. Pour comprendre les différences avec un écoulement sur terrain plat, nous avons comparé les concentrations au sol sur l'axe du panache pour chaque source et pour une source sur un terrain plat (Figure 102 à Figure 106).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 102 : comparaison des concentrations sur l'axe pour la source à -5000 m du sommet et pour une source sur terrain plat



Figure 103 : comparaison des concentrations sur l'axe pour la source à -2500 m du sommet et pour une source sur terrain plat



Figure 104: comparaison des concentrations sur l'axe pour la source au sommet et pour une source sur terrain plat



Figure 105 : comparaison des concentrations sur l'axe pour la source à +2500 m du sommet et pour une source sur terrain plat

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 106 : comparaison des concentrations sur l'axe pour la source à +5000 m du sommet et pour une source sur terrain plat

Les concentrations au sol issues des sources sont légèrement inférieures à la concentration de la source sur terrain plat. En effet, le relief ralentit le fluide, mais il crée aussi de la turbulence, le polluant est donc plus dispersé. Pour la source située à 5000m en aval du sommet de la colline, la concentration au sol est sensiblement la même que dans le cas de la source sur terrain plat.

Dans nos exemples, la comparaison des concentrations sur l'axe et des allures de panache montre que dans le cas d'un écoulement neutre la prise en compte du relief change moins les niveaux de concentration que dans un écoulement stable. Ceci est dû au fait que l'écoulement est peu modifié par le relief dans cette situation neutre et qu'il n'apparaît pas de zone de recirculation à l'aval du relief. En revanche, nous avons vu que dans les situations stables, l'écoulement et donc la dispersion pouvaient être fortement modifiés. Ces exemples sur un cas académique ne permettent pas de quantifier l'erreur commise lorsqu'on ne tient pas compte du relief, mais ils illustrent l'impact que peut avoir le relief sur l'écoulement et la dispersion. Lorsqu'un site industriel est situé à proximité dans une zone de relief, il convient d'être très vigilant sur la modélisation de l'écoulement.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

3.4.4. OBSTACLES

La présence d'un obstacle au voisinage d'une source a un impact sur la dispersion du polluant issu de cette source. D'une part l'écoulement autour de l'obstacle est perturbé : en amont de l'obstacle, l'écoulement est ralenti, il contourne l'obstacle et il se forme une zone de recirculation en aval de l'obstacle (cf Etat de l'art ch 3.4.1) Pour illustrer ceci, nous avons modélisé avec le code MERCURE (code eulérien d'EDF, résolvant les équations tridimensionnelles des écoulements atmosphériques) un écoulement autour d'un obstacle cubique de 20m de côté. Nous avons étudié 5 rejets à différentes distances de l'obstacle à l'amont et à l'aval.



Figure 107 : position des sources par rapport à l'obstacle

L'écoulement modélisé est un écoulement neutre, de vitesse 1m/s. les polluants sont des gaz inertes émis sans surhauteur.

Pour chaque source, on s'intéresse au champ de concentration au sol et dans le plan vertical de symétrie (Figure 108 à Figure 111). On comparera ensuite la concentration au sol sur l'axe avec un rejet sans la présence de l'obstacle (Figure 112 à Figure 116).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 108 : champ de concentration au sol (μ g/m³) pour les 5 sources en présence de l'obstacle et pour une source sans obstacle

135/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .





Figure 111 : détail du champ de concentration et de l'écoulement au voisinage de l'obstacle

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 112 : comparaison des concentrations (µg/m³) sur l'axe pour la source à -100 m de l'obstacle et pour une source sans obstacle



Figure 114 : comparaisons des concentrations $(\mu g/m^3)$ sur l'axe pour la source sur l'obstacle et pour une source de hauteur 20 m sans obstacle



Figure 113 : comparaison des concentrations (µg/m³) sur l'axe pour la source à -25 m de l'obstacle et pour une source sans obstacle



Figure 115 : comparaison des concentrations $(\mu g/m^3)$ sur l'axe pour la source à +20 m de l'obstacle et pour une source sans obstacle

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 116 : comparaison des concentrations sur l'axe (μ g/m³) pour la source à +100 m de l'obstacle et pour une source sans obstacle

Lorsque la source est située en amont de l'obstacle, le panache suit l'écoulement. Il est dévié par l'obstacle. La présence de l'obstacle augmente la diffusion. La concentration augmente donc autour de l'obstacle, le panache est plus large mais la concentration sur l'axe est plus faible derrière l'obstacle.

Lorsque la source est située sur le sommet du bâtiment, une partie du panache est capté par la zone de recirculation, la concentration au sol est donc plus forte que dans le cas d'une source de même hauteur mais sans la présence de l'obstacle.

De même lorsque la source est située dans la zone de recirculation, on observe des concentrations élevées en amont de la source sur la face aval de l'obstacle. Le panache s'étale dans toute la zone de recirculation qui est très turbulente. En revanche, la concentration sur l'axe en dehors de la zone de recirculation est plus faible que dans le cas d'une source sans obstacle.

Enfin, si la source est à l'aval de l'obstacle à une distance égale à 5 fois la hauteur de l'obstacle, l'écoulement est encore légèrement perturbé. Il est plus turbulent que dans un cas sans obstacle, la concentration sur l'axe est donc légèrement plus faible.

Cet exemple permet d'illustrer l'impact d'un obstacle à proximité d'une source. Lorsque la source est située à une distance inférieure à 5 fois la hauteur de l'obstacle, l'impact sur la concentration est fort (à 200m de la source, la concentration sur l'axe issue de la source située à -100m de l'obstacle diffère d'un facteur 3 avec le cas sans obstacle). On considère qu'il faut que la source soit à une distance supérieure à 10 fois la hauteur de l'obstacle pour que l'impact de l'obstacle soit négligeable. Il est important de noter que la situation se complique encore quand il y a plusieurs obstacles à proximité de la source.

140/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

4. PRESENTATION DES RESULTATS OBTENUS SUR LES CAS TESTS

4.1. LA DEMARCHE D'EVALUATION DES MODELES SUR LES CAS TESTS

4.1.1. RAPPEL DES OBJECTIFS INITIAUX DE L'EVALUATION DES MODELES SUR DES CAS TESTS

D'une manière générale, l'utilisation de cas tests présente un intérêt à plusieurs niveaux. Au niveau du développement des modèles, les cas tests permettent en particulier d'identifier les processus physiques prépondérants pour le transport et la dispersion dans le contexte spécifique à étudier et de déterminer la sensibilité des paramètres d'influence du problème posé. Au niveau de l'évaluation des modèles, les cas tests permettent leur validation sur des applications pour lesquelles les modèles ont été développés, mais aussi leur inter-comparaison. Au niveau de l'utilisation des modèles, les cas tests permettent la formation des modélisateurs afin qu'ils puissent acquérir une sensibilité suffisante sur l'utilisation du modèle et sur les paramètres importants à prendre en compte.

Pour ce qui concerne plus précisément l'évaluation des modèles, nous avions prévu de réaliser une évaluation sur des cas tests représentant des situations relativement courantes. Les objectifs de cette première évaluation des modèles étaient notamment les suivants :

- Evaluer les modèles en fonction de leurs performances propres dans des situations réalistes pas trop complexes et bien documentées, représentatives des principaux phénomènes rencontrés.
- Etablir une comparaison des possibilités et des fonctionnalités de chaque approche de modélisation.
- Disposer de situations commentées pour la formation des utilisateurs et la prise en main des modèles.
- Montrer l'intérêt et l'importance de l'analyse préliminaire de la situation à traiter et des données d'entrée dans le choix de la démarche de modélisation.

Compte tenu du premier bilan réalisé sur les entretiens avec les tuteurs industriels, nous avons restreint cette partie d'évaluation des modèles sur les cas tests. Rappelons que les industriels rencontrés lors des entretiens n'ont pas souhaité que l'on passe trop de temps sur cette partie de l'étude qui constitue pour eux une évaluation des modèles à caractère scientifique. Nous avons, dans cette partie, réalisé la comparaison des différents types de modélisation avec des expériences sur un nombre limité à deux cas tests et constitué des situations commentées pour la formation des utilisateurs. L'analyse que nous avons menée a été réalisée en concertation avec les fournisseurs de logiciel afin de s'assurer que les scénarios de modélisation que nous avions élaborés étaient cohérents et de résoudre les éventuelles erreurs des logiciels.

141/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

4.1.2. **PRESENTATION DES CAS TESTS**

Lors de la première étude, nous avions recensé dans la littérature scientifique un certain nombre de bases de données relatives aux expériences de terrain et en soufflerie. Parmi l'ensemble de ces données, nous avons retenu les expériences de « Prairie Grass » et d' « Indianapolis » du « Model Validation Kit ». Les données de « Prairie Grass » ont largement contribuées à la définition des écarts-types de dispersion de Pasquill et sont toujours utilisées comme référence dans les évaluations des modèles. Elles présentent un intérêt certain dans la comparaison des différents types de modélisation, sachant que les modèles gaussiens devraient a priori donner de bons résultats. Elles sont relatives à un rejet au sol en milieu rural. Les données d' « Indianapolis » sont relatives à un rejet à la cheminée en milieu urbain. Elles constituent une situation suffisamment représentative des rejets industriels à la cheminée en présence d'obstacles.

4.1.3. LA DEMARCHE D'EVALUATION

4.1.3.1. Méthodologie de mise en œuvre des cas tests

La construction d'une simulation à partir de données de terrain présente certaines difficultés.

- La diversité des mesures météorologiques : en général, au cours d'une expérience, plusieurs mesures météorologiques ont été effectuées en différents points du site. L'utilisateur est donc confronté à un choix entre ces différentes mesures. D'autre part, les mesures disponibles ne répondent pas toujours aux exigences du logiciel et il est nécessaire d'appliquer certaines hypothèses
- Le choix des paramètres physiques qui permettent de représenter le site : certaines informations indispensables pour le fonctionnement du modèle ne sont pas disponibles. Il faut alors faire des conjectures
- Le choix des options de modélisation : parmi les différentes options proposées par le logiciel, il faut faire un choix qui permet de représenter le plus fidèlement possible les conditions réelles de l'expérience. Par exemple, le choix de la méthode de calcul de la turbulence ou de la hauteur de la couche limite peut avoir un impact sur le résultat de la modélisation.
- Les erreurs des modèles : la mise en œuvre des modèles sur les cas tests permet d'identifier des erreurs dans les modèles.

Au regard de toutes ces difficultés, nous avons adopté la méthode suivante pour étudier les cas test. Nous avons tout d'abord élaboré un premier scénario à partir des données de terrain que nous possédions et qui nous paraissait raisonnable. Nous avons ensuite réalisé une simulation avec ce scénario et comparé nos résultats aux mesures puis aux résultats du modèle disponibles dans la littérature scientifique. Bien souvent ce premier scénario ne permettait pas d'obtenir des résultats satisfaisants et il était nécessaire de faire des ajustements. Nous avons donc essayé de déterminer d'où provenaient les différences en faisant des comparaisons modèles-mesures en fonction de différents paramètres comme la stabilité ou la vitesse du vent. Ces comparaisons nous ont ensuite permis d'ajuster certains paramètres physiques comme la rugosité, ou de modifier certaines options du modèle comme la prise en compte du blocage par la couche limite. Nous avons à chaque fois adopté une démarche qui consistait à apporter des modifications ayant un sens physique. Ces ajustements nous ont par ailleurs permis de déterminer la sensibilité du modèle à certains paramètres d'entrée et à certaines options. Enfin, nous avons retenu un scénario pour comparer le modèle et les mesures et analyser les performances du modèle.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Remarque : le modèle eulérien HERMES, dans la configuration qui nous a été proposée, n'est pas adapté aux cas tests qui ont été retenus. En effet, le modèle HERMES est prévu pour calculer la dispersion sur des domaines allant de 20 à 500 km avec un maillage ayant une résolution de quelques centaines de mètres. Or dans le cas test de Prairie Grass, les récepteurs sont situés à quelques centaines de mètres de la source et dans le cas test d'Indianapolis, les récepteurs ne dépassent pas 12 km de la source. D'autre part, le modèle HERMES est fondé sur une description assez fine de l'écoulement. Il nécessite au moins une mesure de vent et de température au sol et un profil vertical de vent et de température relativement détaillé. Or nous ne possédons pas toutes ces mesures. Enfin, les discussions avec ARIA Technologies ont montré qu'il aurait peut-être été possible d'obtenir de meilleurs résultats en modifiant certains paramètres n'apparaissent pas directement à l'utilisateur. Au regard de toutes ces remarques, nous avons souhaité montrer les résultats du modèle HERMES sur les différents cas test en annexe afin d'avoir un exemple d'application d'un modèle en dehors de son contexte.

4.1.3.2. Choix des variables à comparer

Les campagnes de mesures comme celles que nous avons étudiées sont réalisées de la manière suivante. On considère une source dont les caractéristiques de rejets sont connues et on effectue des mesures de concentration en aval de l'écoulement. Les récepteurs sont placés sur des arcs à des distances fixes de la source (cf. Figure 117).



Figure 117 : Schéma de la disposition des récepteurs autour d'une source

Dans le cadre de la comparaison des mesures et des résultats des modèles, il est possible de comparer les concentrations mesurées et modélisées en chaque point récepteur. Cette méthode directe conduit en général à des écarts relativement importants entre le modèle et les mesures. En effet, un décalage de quelques degrés dans la direction du vent change l'orientation du panache et pour un point fixe, la concentration peut varier considérablement.

D'une manière générale dans la littérature scientifique, on constate que les comparaisons vont plutôt porter sur les maximums de concentration par arc de mesure et sur les écart-types horizontaux du panache. Cette démarche permet en particulier de s'affranchir de l'incertitude qui peut exister sur la variabilité du vent. C'est cette démarche que nous avons adopté par la suite pour traiter les comparaisons entre les modèles et les cas tests.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

D'autre part, les concentrations mesurées sur le terrain sont des concentrations moyennées sur un certain intervalle qui dépend du protocole expérimental. Suivant les modèles, nous avons essayé d'effectuer un calcul le plus proche possible des conditions de l'expérience mais cela n'a pas toujours été possible. En effet, un modèle gaussien classique permet de simuler uniquement un état permanent.

4.1.3.3. Calcul des paramètres statistiques

Lorsque l'on souhaite évaluer un modèle par comparaison à des expériences, il est nécessaire d'introduire des paramètres permettant de quantifier les différences entre le modèle et les mesures. De nombreux travaux antérieurs ont abordé cette question récurrente et ont conduit à la définition de quelques paramètres importants qui seront utilisés dans ce projet. Ces paramètres sont décrits brièvement dans le paragraphe suivant.

En préambule, considérons un jeu de N données expérimentales pour lesquelles nous avons déterminé les prédictions correspondantes d'un modèle quelconque. Si l'on représente sur un graphe les données prédites en fonction des données mesurées, on obtient une figure analogue à la Figure 118. Sur cette figure a également été portée la droite « 1-1 » qui correspondrait à un modèle idéal reproduisant parfaitement l'expérience (droite continue). Enfin nous avons tracé la droite de régression du nuage de point qui passe par l'origine (droite en pointillés). Les paramètres que nous allons présenter ont pour objectif de quantifier deux types d'erreurs que l'ont peut observer sur cette figure :

- L'erreur systématique, qui implique que le modèle aura une tendance globale à surestimer ou à sous-estimer la réalité. Cela se traduit par la différence de pente entre la droite de régression et la droite de pente « 1-1 ».
- L'erreur « locale », qui correspond aux écarts des prédictions individuelles par rapport au comportement moyen du modèle. Cette erreur se traduit par un étalement du nuage de points sur le graphe.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2ème partie : Evaluation des modèles . 6000 4000 0 2000 0 2000 4000 6000



La comparaison entre les modèles et les mesures est également réalisée sur la base de paramètres statistiques décrits brièvement ci-après ; ces paramètres sont définis et expliqués en détail dans un rapport de Hanna et al. (1991) fournit avec le « Model Validation Kit » :

Le biais fractionnel : $FB = \frac{\overline{C_p} - \overline{C_m}}{\frac{1}{2}(\overline{C_p} + \overline{C_m})}$. Il quantifie l'erreur systématique.

L'erreur quadratique moyenne normalisée : NMSE = $\frac{\overline{(C_p - C_m)^2}}{\overline{C_n C_m}}$. Elle quantifie l'erreur

locale.

L'écart relatif moyen : $ER = \left(\frac{|C_p - C_m|}{\frac{1}{2}(C_p + C_m)}\right)$. Il quantifie l'erreur locale.

• Le coefficient de corrélation :
$$R = \frac{\overline{(C_p - \overline{C_p})(C_m - \overline{C_m})}}{\sqrt{(C_p - \overline{C_p})^2 (C_m - \overline{C_m})^2}}$$

Le biais géométrique moyen : $MG = exp\left[\overline{ln(C_p) - ln(C_m)} \right]$. Lorsque les valeurs mesurées et simulées s'étendent sur plusieurs ordres de grandeur, les paramètres FB, NMSE, ER et R dépendent davantage des valeurs élevées que des valeurs faibles. Pour compenser cet effet, il peut être intéressant d'utiliser des paramètres basés sur le logarithme des valeurs. Le biais géométrique moyen quantifie de cette manière l'erreur systématique du modèle.
Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• La variance géométrique quadratique moyenne : $VG = exp\left[\left(In(C_p) - In(C_m)\right)^2\right]$. Elle

permet de quantifier l'erreur locale pour des données dont les ordres de grandeur sont très différents.

• La "fraction dans un facteur de 2" : fraction FAC2 des données telles que $0.5 \le C_p/C_m \le 2$. Ce paramètre indique la capacité du modèle à ne pas dépasser une erreur limite.

Dans les équations présentées ci-dessus, C_p et C_m représentent respectivement les concentrations prédites par le modèle et mesurées.

Pour les deux cas tests, nous avons comparé les résultats de chaque modèle et les mesures des maximums de concentrations sur les arcs. Nous avons étudié les paramètres statistiques obtenus avec chaque modèle. Ces comparaisons nous permettent d'avoir une idée du comportement global d'un modèle. Pour essayer de comprendre les limites d'un modèle on étudie son comportement en fonction de la stabilité et de la distance à la source. Pour cela, pour une même distance et un même régime de stabilité, on moyenne les concentrations maximums sur l'arc mesurées et modélisées et on calcule le biais fractionnel de ces moyennes. On peut déterminer ainsi si le modèle est meilleur proche de la source ou loin de la source et si il est meilleur dans les cas stables ou les cas instables

146/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

4.2. LE CAS TEST DE PRAIRIE GRASS

4.2.1. **PRESENTATION DE L'EXPERIENCE**

Les expériences se sont déroulées en 1956 dans le Nebraska (Barad, 1956, Haugen, 1959). Elles ont été réalisées sur un terrain plat recouvert d'herbe. Les essais, au nombre de 70, ont été effectués pour moitié dans des conditions de stabilité atmosphérique instable (atmosphère convective) et pour le reste dans des conditions stables. Le gaz traceur utilisé était du SO₂ et la hauteur du rejet était de 0.5m par rapport au sol. Le gaz traceur était injecté sur des périodes de 10 minutes. Il n'y avait pas d'effet de surhauteur cinématique ou thermique. Les récepteurs étaient positionnés à une hauteur de 1.5m par rapport au sol, selon 5 arcs situés à 50m, 100m, 200m, 400m et 800m de la source. Les données météorologiques disponibles concernent les mesures à 2m du sol de la vitesse et de la direction du vent, des fluctuations du vent, ainsi que du gradient vertical de la température entre 2m et 16m du sol. D'autres données comme la vitesse de frottement, la longueur de Monin-Obukhov, ... ont pu être estimées pour chaque configuration à partir de ces mesures. De nombreux auteurs se sont intéressés à ces données pour le développement des modèles et leur validation. Les données en notre possession, relative à chaque récepteur, proviennent du site ftp de J.S. Irwin (ftp://ftp.epa.gov/amd/asmd/irwin/); ces données sont déjà interprétées et informatisées. Nous possédons aussi les données interprétées par S. Hanna pour certains essais.

4.2.2. ELABORATION DES SCENARIOS DE SIMULATION AVEC LE LOGICIEL ADMS ET PRESENTATION DES RESULTATS

Ne possédant pas les données météorologiques brutes nécessaires pour construire les scénarios d'ADMS, nous avons utilisé deux sources de données : les données de J.S Irwin disponibles sur le site de l'EPA et les données de S. Hanna.

Les données de J.S. Irwin couvrent 68 expériences et comprennent la date et l'heure, le vent à 8m, la couverture nuageuse, la hauteur de la couche limite. A partir de ces données, nous avons élaborés plusieurs scénarios.

• Scénario 1

Nous avons tout d'abord considéré les données météorologiques calculées par J.S. Irwin pour les 68 expériences comprenant la date et l'heure, le vent à 8m et la couverture nuageuse. Les résultats des simulations construites à partir de ces données sont très proches des résultats des simulations d'Irwin avec le logiciel ADMS. La comparaison des paramètres statistiques sur le maximum de concentration sur l'arc divisé par le débit de la source est présentée ci-dessous dans le Tableau 19 . Les paramètres statistiques sont ceux définis au paragraphe 4.1.3.

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Std (10 ⁻³ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	2.23	3.90						
ADMS	1.39	3.29	0.46	0.17	1.46	0.50	0.57	0.88

Tableau 19 : comparaison des paramètres statistiques calculés pour les 68 expériences sur lesconcentrations maximums sur l'arc divisées par le débit

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 119 : comparaison des résultats du premier scénario et des mesures du maximum sur l'arc divisé par le débit de la source

Scénario 2

J.S Irwin propose un classement des expériences de Prairie Grass en fonction de 7 classes de stabilité (Irwin,EPA). Nous avons donc construit un deuxième scénario utilisant les paramètres météorologiques suivants : le vent à 8 m et le flux de chaleur associé à la classe de stabilité de l'expérience. Les résultats pour ce scénario sont présentés dans le Tableau 20.

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Std (10 ⁻³ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	2.23	3.90						
ADMS	1.18	2.90	0.62	0.29	1.81	0.46	0.51	0.86

Tableau 20 : comparaison des paramètres statistiques calculés pour les 68 expériences sur lesconcentrations maximums sur l'arc divisé par le débit

Les résultats des scénarios 1 et 2 sont très proches. Dans les deux cas, le modèle ADMS sousestime les concentrations. Il est intéressant de comparer point par point les résultats et les mesures des maximums de concentration sur l'arc (cf Figure 119 Figure 120) pour les deux scénarios. On remarque que la plupart des points sont autour d'une droite moyenne, mais que certains s'en écartent beaucoup.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 120 : comparaison des résultats du deuxième scénario et des mesures du maximum sur l'arc

• Résultats des simulations du CERC

Dans le rapport de validation d'ADMS fournit par le CERC, les résultats sont regroupés dans le Tableau 21

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Std (10 ⁻³ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2
mesures	1.54	2.81					
ADMS	1.27	2.65	0.19	0.06	0.88	0.89	0.61

Tableau 21 : paramètres statistiques calculés pour les 68 expériences sur les concentrations maximums sur l'arc divisées par le débit

Les expériences qui ont permis d'obtenir ces résultats ainsi que les données météorologiques ne sont pas précisées, il est donc difficile d'interpréter les différences avec nos propres simulations. Après discussion de nos résultats avec la société NUMTECH, les différences entre les résultats de nos simulations et les leurs proviennent en partie du fait que nous avons modélisé un rejet vertical alors que dans leurs simulations, ils ont modélisé un jet horizontal.

• Analyse des résultats

Il est intéressant de regarder le comportement du modèle en fonction de la distance à la source et de la stabilité. La classe A de stabilité correspond au cas très instable et la classe G au cas très stable. Si on s'intéresse à l'évolution du biais fractionnel (cf Figure 121) en fonction de la distance à la source et pour différents régimes de stabilité, on remarque que le logiciel ADMS est proche des mesures dans les cas instables et qu'il a tendance à sous-estimer les mesures dans les autres cas. Pour une raison encore inexpliquée, il surestime très fortement les concentrations dans le cas très stable et proche de la source.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



- Figure 121 : Evolution du biais fractionnel en fonction de la distance à la source pour les différentes classes de stabilité

4.2.3. ELABORATION DES SCENARIOS DE SIMULATION AVEC ARIA IMPACT ET PRESENTATION DES RESULTATS

Nous avons construit plusieurs scénarios pour simuler le cas de Prairie Grass ; ils sont présentés ci-dessous.

• Scénario 1

Nous avons utilisé les données météorologiques suivantes : le vent à 8m, la température, la couverture nuageuse. Nous avons choisi la méthode « vent-nébulosité » pour calculer la classe de stabilité et nous avons utilisé les écarts-types de Pasquill pour le calcul de la concentration. N'ayant pas la possibilité de calculer la concentration à la hauteur de 1.5m au dessus du sol, nous avons calculé la concentration au niveau du sol. Les paramètres statistiques ont été calculés pour le maximum de concentration sur l'arc divisé par le débit de la source à partir des 68 expériences (Tableau 22).

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Std (10 ⁻³ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	2.23	3.90						
Pasquill	1.86	4.05	0.18	-0.04	0.92	0.60	0.58	0.89

Tableau 22 : paramètres statistiques pour le premier scénario

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 122 : comparaison modèle-mesure pour les concentrations maximums sur l'arc divisé par le débit de la source

Au regard des paramètres statistiques, la moyenne des concentrations modélisées sur toutes les expériences est proche de la moyenne des concentrations mesurées. D'autre part, le coefficient de corrélation de 0.6 et le pourcentage de résultats dans un facteur 2 par rapport aux mesures de l'ordre de 60% sont très satisfaisants. Le nuage de points (Figure 122) des résultats du modèle en fonction des mesures est cependant assez étalé et on peut remarquer un point singulier où la mesure est très faible alors que le modèle donne une concentration très élevée.

• Scénario 2

Nous avons gardé les mêmes paramètres météorologiques et nous avons utilisé les écartstypes de Doury pour calculer la concentration. Les paramètres statistiques ont été calculés pour le maximum de concentration sur l'arc à partir des 68 expériences (Tableau 23).

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Std (10 ⁻³ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	2.23	3.90						
Doury	2.32	2.88	-0.04	0.30	0.71	0.65	0.39	0.75

Tableau 23 : paramètres statistiques pour le 2ème scénario

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 123 : comparaison modèle-mesures pour les maximums de concentration sur l'arc

En ce qui concerne les résultats de la simulation avec les écarts-types de Doury, les moyennes des concentrations mesurées et modélisées sont très proches. Le modèle surestime légèrement les concentrations. Le coefficient de corrélation est de 0.65 mais le pourcentage de résultats dans un facteur 2 est de 40% ce qui est moins bon qu'avec la modélisation de Pasquill. D'autre part, le nuage de points (Figure 123) est assez étalé et plusieurs points sont assez éloignés de la droite moyenne.

• Scénario 3

Nous avons aussi testé les écarts-types de Briggs avec les mêmes paramètres météorologiques. Les paramètres statistiques ont été calculés pour le maximum de concentration sur l'arc à partir des 68 expériences (Tableau 24).

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Std (10 ⁻³ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	2.23	3.90						
Briggs	1.18	2.35	0.62	0.49	0.99	0.70	0.40	0.86

Tableau 24 : paramètres statistiques pour le 3ème scénario

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 124 : comparaison modèle-mesures pour les maximums de concentration sur l'arc divisé par le débit de la source

Les résultats de la modélisation avec les écart-types de Briggs montrent que le modèle a tendance à sous-estimer les mesures. Cependant, le coefficient de corrélation est de 0.7 ce qui est très satisfaisant et le nuage de point (Figure 124) n'est pas très dispersé.

• Scénario 4

Enfin, nous avons gardé les mêmes paramètres météorologiques auxquels nous avons ajouté la classe de Pasquill correspondant à l'expérience. Cette classe ayant été déterminée par Irwin. Puis nous avons repris les écarts-types de Pasquill pour le calcul de la concentration. Les paramètres statistiques ont été calculés pour le maximum de concentration sur l'arc à partir des 68 expériences (Tableau 25).

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Std (10 ⁻³ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	2.23	3.90						
Pasquill	1.94	4.83	0.14	-0.21	0.83	0.66	0.46	0.91

Tableau 25 : paramètres statistiques pour le 4ème scénario

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 125 : comparaison modèle-mesures pour les maximums de concentration sur l'arc

Les résultats du 4^{ème} scénario où nous avons utilisé la stabilité calculée par Irwin donne des résultats proche du premier scénario. Ceci montre que la méthode utilisée par Irwin pour calculer la stabilité est proche de la méthode « vent nébulosité » mais que quelques expériences diffèrent.

• Analyse des résultats

Les paramètres statistiques calculés et les nuages de points que nous avons obtenus montrent que les différentes approches de modélisation des écarts-types de diffusion ne sont pas équivalentes. La méthode la plus pertinente pour modéliser les expériences de Prairie Grass est la méthode de Pasquill. Ceci est logique car, historiquement, les écarts-types de Pasquill ont été ajustés avec les résultats de l'expérience de Prairie Grass.

Cependant, pour certaines mesures, il y a de grands écarts avec les résultats du modèle. Donc, pour essayer de comprendre les limites du modèle de Pasquill, on calcule le biais fractionnel en fonction de la distance à la source et pour différentes classes de stabilité.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 126 : évolution du biais fractionnel en fonction de la distance à la source et pour différents régimes de stabilité

On peut remarquer que dans les cas très stables (classe F) au voisinage de la source, le modèle de Pasquill surestime les concentrations. Dans les autres cas, le modèle sous-estime les concentrations.

4.2.4. ELABORATION DES SCENARIOS DE SIMULATION AVEC LE MODELE TRAMES ET PRESENTATION DES RESULTATS

Pour construire les fichiers de données météorologiques nécessaires au fonctionnement de TRAMES, nous avons utilisé le modèle diagnostique MINERVE. Le relief du site de Prairie Grass étant plat, le modèle effectue uniquement une interpolation des mesures de vent et de température sur un maillage horizontal ayant un pas de 20m et un maillage vertical de 50 niveaux verticaux. Le sommet du domaine de calcul est de 50m et la hauteur du premier niveau au dessus du sol est de 1.5m. Le modèle MINERVE effectue aussi un calcul de turbulence. La turbulence est calculée par la méthode de Smagorinski et la hauteur de la couche limite est déterminée par la méthode de Vautard.

• 1^{er} scénario

Le modèle TRAMES est utilisé sur le même maillage que celui défini dans MINERVE. Les épisodes de rejet de SO_2 sont modélisés comme des rejets continus sur des périodes de 10 minutes, les bouffées sont émises toutes les 10 secondes. Le modèle de diffusion utilisé est le modèle de Pasquill et pour chaque expérience, la classe de stabilité est renseignée par l'utilisateur à partir des données d'Irwin. La hauteur de la couche limite est celle calculée par MINERVE.

155/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Le calcul de la concentration au sol est moyenné sur 10 minutes. Les paramètres statistiques ont été calculés pour le maximum de concentration sur l'arc à partir des 68 expériences (Tableau 26)

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Std (10 ⁻³ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	2.23	3.90						
TRAMES	1.32	2.76	0.50	0.33	0.94	0.66	0.46	0.91

v=1.06*x R²=0.53 25 20 MESURES (10⁻³s/m³) 15 10 5 C C 0 25 5 10 15 20 TRAMES (10-3s/m3)

Tableau 26 : paramètres statistiques pour le 1^{er} scénario

Figure 127 : comparaison des mesures et des résultats du modèle TRAMES pour les concentrations maximums sur l'arc divisé par le débit de la source

Au regard des paramètres statistiques, on remarque que le modèle TRAMES sous-estime en moyenne les concentrations. Le nuage de points (Figure 127) des résultats du modèle en fonction des mesures est assez étalé et on peut remarquer quelques points singuliers où la mesure est très différente du résultat du modèle.

• 2^{ème} scénario

Nous avons construit un deuxième scénario pour TRAMES, la classe de stabilité n'est plus définie par l'utilisateur, mais les coefficients de diffusion turbulente sont calculés par MINERVE en fonction des conditions météorologiques.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Le calcul de la concentration au sol est moyenné sur 10 minutes. Les paramètres statistiques ont été calculés pour le maximum de concentration sur l'arc à partir des 68 expériences (Tableau 27)

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Std (10 ⁻³ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	2.23	3.90						
TRAMES	1.78	3.34	0.21	0.15	0.48	0.76	0.41	0.63

y=0.96*x R²=0.67 25 • 20 MESURES (10⁻³s/m³) 15 10 C 5 C C 0 20 25 0 5 10 15 TRAMES (10-3s/m3)

Tableau 27 : paramètres statistiques pour le 2^{ème} scénario

Figure 128 : comparaison des concentrations mesurées et modélisées

A partir de ce scénario, nous obtenons des résultats satisfaisants, la concentration moyenne calculée est de 1.78 pour une concentration moyenne mesurée de 2.19. D'autre part, la proportion de résultats dans un facteur 2 par rapport aux mesures est de 41%. Le nuage de points (Figure 128) des résultats du modèle en fonction des mesures est assez étalé et la proportion de résultats dans un facteur 5 par rapport aux mesures n'est que de 63%.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Analyse des résultats

Pour essayer de comprendre l'origine de ces erreurs, nous avons étudié le comportement du modèle en fonction de la distance à la source et de la stabilité. (Figure 129).



Figure 129 : évolution de biais fractionnel en fonction de la distance à la source et pour les différentes classes de stabilité pour le premier scénario

On remarque que pour toutes les situations, le modèle TRAMES sous-estime les concentrations. Cependant, pour les classes stables, le biais fractionnel augmente quand on s'éloigne de la source. En revanche pour les classes B et C, le biais fractionnel diminue quand on s'éloigne de la source.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 130 : évolution du biais fractionnel en fonction de la distance à la source et pour différentes classes de stabilité pour le 2^{ème} scénario.

On remarque que pour les situations neutres et stables, le modèle donne des résultats proches des mesures puisque le biais fractionnel est voisin de 0. Pour les situations très instables, le modèle sous-estime les concentrations au voisinage de la source puis il surestime les concentrations quand on s'éloigne de la source. Dans les situations instables (classe B et C) le modèle sous-estime nettement les concentrations. L'évaluation des conditions de stabilité par le modèle pose visiblement certains problèmes.

4.2.5. ELABORATION DES SCENARIOS DE SIMULATION AVEC LE MODELE SPRAY ET PRESENTATION DES RESULTATS

Les scénarios de modélisation pour le modèle SPRAY sont assez différents des scénarios de modélisation pour TRAMES. Pour construire les fichiers de données météorologiques nécessaires au fonctionnement de SPRAY, nous avons utilisé le modèle diagnostique MINERVE. Le relief du site de Prairie Grass étant plat, le modèle effectue uniquement une interpolation des mesures de vent et de température sur un maillage horizontal ayant un pas de 20m et un maillage vertical de 50 niveaux verticaux. Le sommet du domaine de calcul est de 500m et la hauteur du premier niveau vertical est de 1.5m. Le modèle MINERVE n'effectue pas le calcul de turbulence.

Le modèle SPRAY permet de calculer la turbulence à l'aide de la méthode TURKEY niveau 1. Ne possédant pas les données météorologiques des journées complètes de chaque expérience, nous avons construit les fichiers de chronologies météorologiques en imposant la valeur de la température et de la nébulosité de l'heure de l'expérience.

Le modèle SPRAY est utilisé sur le même maillage que celui défini dans MINERVE. Les épisodes de rejet de SO₂ sont modélisés comme des rejets de 10000 particules émises toutes les 10 secondes.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Les concentrations au sol sont moyennées sur 5 minutes. Pour effectuer les calculs statistiques, nous avons utilisé les concentrations calculées au bout de 10 minutes, mais dans les situations où le vent est inférieur à 2 m/s, pour les récepteurs situés à 800m de la source, nous avons utilisé les concentrations calculées à 15 minutes. Les paramètres statistiques ont été calculés pour le maximum de concentration sur l'arc à partir des 68 expériences. (Tableau 28)

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Std (10 ⁻³ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	2.23	3.90						
SPRAY	0.7	1.05	1.03	1.15	3.05	0.66	0.39	0.81



Tableau 28 : paramètres statistiques pour le modèle SPRAY

Figure 131 : comparaison des mesures et des résultats du modèle SPRAY

On remarque que le modèle SPRAY sous-estime fortement les concentrations. La moyenne des concentrations modélisées est de 0.7, alors que la moyenne des concentrations mesurées est de 2.19. Seulement 40% des résultats sont dans un facteur 2 par rapport aux mesures.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• Analyse des résultats

Pour essayer de comprendre l'origine de ces erreurs, nous avons étudié le comportement du modèle en fonction de la distance à la source et de la stabilité (Figure 132).



Figure 132 : évolution du biais fractionnel en fonction de la distance à la source et pour les différentes classes de stabilité

On remarque qu'au voisinage de la source, le modèle sous-estime fortement les mesures, mais les résultats sont plus proches des mesures quand on s'éloigne de la source. Cependant dans les situations instables, le modèle a tendance à surestimer les mesures.

Conclusion

Les résultats du modèle SPRAY sont inférieurs aux mesures, notamment dans les situations stables. Ces erreurs sont peut-être dues au calcul de turbulence, il est possible que les écart-types sur les vitesses soient mal évalués.

4.2.6. COMPARAISON DES RESULTATS DES MODELES GAUSSIENS

Les trois modèles Gaussiens : ADMS, ARIA IMPACT et TRAMES sont fondés sur des méthodologies de calcul de la dispersion très proches. Nous avons donc comparé les résultats de ces trois modèles.

Les modèles ARIA IMPACT et ADMS donnent des résultats statistiques assez proches. Si on les compare point par point (Figure 133) on remarque que les 2 modèles sont relativement proches malgré quelques points qui s'écartent de la droite moyenne. Ceci s'explique par le fait que le calcul des écart-types est différent dans les deux modèles.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 133 : comparaison des résultats d'ADMS et d'ARIA IMPACT

Le modèle TRAMES est un modèle à bouffées gaussiennes, donc sur un terrain plat la solution de ce modèle tend vers une solution gaussienne continue. Nous avons donc comparé les résultats du modèle TRAMES aux résultats du modèle ARIA IMPACT avec la même formulation des écarts-types (Figure 134 et Figure 135).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 134 : comparaison des concentrations sur l'axe calculées par TRAMES et par IMPACT pour les classes de stabilité A, B et C



Figure 135 : comparaison des concentrations calculées par TRAMES et IMPACT pour les classes de stabilité D, E et F

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

On remarque sur ces graphes que les 2 modèles donnent des résultats très proches pour les situations instables. En revanche, pour les situations stables et neutres, les résultats du modèle TRAMES diffèrent des résultats d'IMPACT d'un facteur supérieur à 1.5.

Lors des comparaisons du modèle ARIA IMPACT avec les mesures de l'expérience de Prairie Grass, nous avons vu que les moyennes des concentrations mesurées et modélisées étaient très proches. En regardant les résultats en détails, nous avions constaté que le modèle ARIA IMPACT surestimait les concentrations au voisinage de la source dans les situations stables et sous-estimait les concentrations dans les autres cas. Or les résultats du modèle TRAMES diffèrent des résultats du modèle ARIA IMPACT dans les situations stables. La moyenne des concentrations modélisées avec TRAMES est donc plus faible que la moyenne des concentrations mesurées. Après discussion avec ARIA Technologies, le fait que le modèle TRAMES donne des concentrations plus faibles que IMPACT au voisinage de la source dans les cas stables provient de l'initialisation des écarts-types au niveau de la source. En diminuant la valeur initiale des écarts-types on obtient des concentrations plus fortes au voisinage de la source.

4.2.7. CONCLUSION

En comparant les résultats des 4 modèles de dispersion sur l'expérience de Prairie Grass, on peut remarquer que les modèles gaussiens donnent des résultats semblables assez proche en moyenne des mesures. En revanche, le modèle lagrangien a tendance à sous-estimer en moyenne les mesures, bien que la proportion de résultats dans un facteur 2 soit d'environ 40% comme pour les modèles gaussiens.

164/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

4.3. LE CAS TEST D'INDIANAPOLIS

4.3.1. **PRESENTATION DE L'EXPERIENCE**

L'Electric Power Research Institute (EPRI) a fait réaliser une campagne de traçage au SF6 sur le site de la centrale électrique de Perry situé à Indianapolis (TRC, 1986). La centrale se situe dans un site urbain complexe (longueur de rugosité de 1m) et est entourée d'un grand nombre d'immeubles dans un rayon de 1 à 2km. Les émissions de SF₆ ont été réalisées à partir d'une cheminée de 83.8m de hauteur par rapport au sol. La base de données comprend 170 heures de traçage comprises entre septembre et octobre 1985, regroupées en 19 blocs de 8 à 9 heures chacun. Les mesures de concentration ont été réalisées au moyen d'un réseau de 160 récepteurs situés au niveau du sol et placés suivant des arcs à des distances comprises entre 0.25 et 12km. Les données météorologiques ont été mesurées à partir d'un mat de 94m placé au sommet d'un immeuble situé au centre du domaine d'étude et de trois mats de 10m situés à des emplacements urbain, suburbain et rural. A chaque mesure, un indicateur de qualité compris entre 0 et 3 a été affecté. Les calculs des paramètres statistiques n'ont été effectué que sur les expériences de qualité 2 ou 3.

4.3.2. ELABORATION DES SCENARIOS POUR ADMS ET PRESENTATION DES RESULTATS

A partir de cette base de données, plusieurs scénarios ont été envisagés.

• Scénario1

Nous avons d'abord utilisé les données de vent à 94m, la couverture nuageuse, la température au sol et la hauteur de la couche limite. La longueur de rugosité a été choisie à 1m. Les calculs statistiques sont présentés ci-dessous (cf Tableau 29).

	Mean (10 ⁻⁹ s/m ³)	Std (10 ⁻⁹ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	258.51	221.46						
ADMS	172.5	230.13	0.40	-0.04	0.99	0.41	0.34	0.54

Tableau 29 : paramètres statistiques calculés pour les 170 expériences de qualité 2 et 3 (excepté la journéedu 29 septembre) sur les concentrations maximums sur l'arc

• Scénario 2

Nous avons ensuite utilisé les mesures de vent à 10m pour construire le deuxième scénario. Les calculs statistiques sont présentés ci-dessous (cf Tableau 30).

	Mean (10 ⁻⁹ s/m ³)	Std (10 ⁻⁹ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	258.51	221.46						
ADMS	190.67	227.8	0.30	-0.03	0.89	0.40	0.39	0.65

 Tableau 30 : paramètres statistiques calculés pour les 170 expériences de qualité 2 et 3 (excepté la journée du 29 septembre) sur les concentrations maximums sur l'arc.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Le modèle ADMS sous-estime les concentrations. Ces résultats sont aussi assez différents de ceux que l'on trouve dans la littérature. Nous avons donc recherché les causes possibles, responsables de tels écarts, afin d'améliorer nos scénarios de simulation et faire que nos résultats soient plus proches des mesures. Une analyse des résultats nous a permis de constater que pour les cas stables, la hauteur de la couche limite est basse (environ 200m). Une fraction importante du panache traverse la couche limite et donc n'est plus prise en compte dans le calcul. Dans les scénarios suivants, nous avons donc augmenté la longueur de rugosité de 1 m à 3 m. Augmenter la rugosité à deux effets (cf étude de sensibilité chapitre 3.5) :

- cela augmente la dispersion donc la hauteur de la couche limite calculée est plus haute.
- le profil vertical de vent est modifié et le vent calculé à 100m est plus fort pour une rugosité de 3m que pour une rugosité de 1m.

En augmentant la hauteur de couche limite, le panache ne traverse pas le sommet de cette couche mais reste confiné entre le sol et le sommet. D'autre part, il n'est pas incohérent de prendre une longueur de rugosité de 3m pour le site d'Indianapolis qui est un site fortement urbanisé avec des bâtiments hauts et proches les uns des autres.

• Scénario 3

Le troisième scénario est identique au deuxième, à un paramètre près, nous avons augmenté la longueur de rugosité de 1m à 3m. Les calculs statistiques sont présentés ci-dessous (cf Tableau 31).

	Mean (10 ⁻⁹ s/m ³)	Std (10 ⁻⁹ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	257.78	221.56						
ADMS	248.78	249.32	0.03	-0.12	0.98	0.28	0.39	0.74

Tableau 31 : paramètres statistiques calculés pour les 170 expériences de qualité 2 et 3 pour lesconcentrations maximum sur l'arc

Remarque : nous n'avons pas effectué de scénario avec les mesures de vent à 94m et une longueur de rugosité de 3m car pour un grand nombre d'expériences ADMS calcule une situation de vent calme au sol et n'est donc pas en mesure de poursuivre le calcul.

• Scénario 4

Le scénario précédent donne des résultats très satisfaisants. ADMS sous-estime légèrement les concentrations (4 %) mais dans la littérature les tests effectués sur le logiciel ADMS montrent une tendance à la surestimation (CERC 2001), ce qui n'est pas le cas de nos résultats. Nous avons donc cherché à définir un scénario correspondant aux résultats présentés dans ces articles. Le quatrième scénario a été construit avec les mêmes données que le troisième scénario mais la hauteur de la couche limite n'est plus spécifiée par l'utilisateur, elle est calculée par le logiciel. Nous obtenons ainsi les résultats suivants pour les expériences de qualité 2 et 3 (cf Tableau 32).

	Mean (10 ⁻⁹ s/m ³)	Std (10 ⁻⁹ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	257.78	221.56						
ADMS	257.63	234.6	0.01	-0.06	0.90	0.28	0.43	0.79

Tableau 32 : paramètres statistiques calculés pour les 170 expériences de qualité 2 et 3 pour les concentrations maximum sur l'arc

Il est important de noter que la comparaison point par point des maximums de concentration sur l'arc donne un nuage de points très étalé (CfFigure 136).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 136 : Comparaison des résultats du quatrième scénario d'ADMS et des mesures

• Résultats des simulations du CERC

Dans le rapport de validation d'ADMS fournit par le CERC, les résultats de la validation du logiciel sur le cas test d'Indianapolis sont les suivants (cf Tableau 33).

	Mean (10 ⁻⁹ s/m ³)	Std (10 ⁻⁹ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2
mesures	257.8	221.6					
ADMS	267.3	258.2	-0.04	-0.15	1.3	0.23	0.42

Tableau 33 : paramètres statistiques calculés pour les 170 expériences de qualité 2 et 3 pour les maximums de concentration sur l'arc

Les moyennes sur les concentrations maximales obtenues par le CERC ne sont pas tout à fait les mêmes que les nôtres, mais les proportions de valeur dans un facteur 2 sont semblables : Fac2=40% pour les deux simulations.

167/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• Analyse des résultats

On étudie l'évolution du biais fractionnel en fonction de la distance à la source et de la stabilité. (cf Figure 137).



distance à la source en km

Figure 137 : Evolution du biais fractionnel des résultats d'ADMS en fonction de la distance à la source pour différents régimes de stabilité

Le logiciel ADMS a tendance à surestimer les concentrations au voisinage de la source et à les sous-estimer sur les arcs plus éloignés.

168/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

4.3.3. ELABORATION DES SCENARIOS POUR ARIA IMPACT ET PRESENTATION DES RESULTATS

Compte tenu des différences entre les logiciels ARIA IMPACT et ADMS, il n'est pas possible de réaliser rigoureusement les mêmes simulations avec les deux logiciels. Nous avons donc construit de nouveaux scénarios pour étudier le cas d'Indianapolis, ils sont présentés cidessous.

• Scénario 1

Nous avons d'abord utilisé les données de vent à 94m, la température au sol et la classe de stabilité de Pasquill. La longueur de rugosité a été choisie à 1m et les écarts-types de Briggs ont été utilisés. Il n'y a pas de blocage par la couche limite. Les surhauteurs de panache sont calculées avec la méthode de Briggs. Les calculs statistiques ont été réalisés pour les résultats de toutes les expériences de qualité 2 et 3, excepté pour la journée du 29 septembre, uniquement sur la concentration maximum sur l'arc.

• Scénario 2

Nous avons ensuite gardé les mêmes paramètres météorologiques et nous avons utilisé les écarts-types de Pasquill. Les calculs statistiques ont été réalisés pour les résultats de toutes les expériences de qualité 2 et 3 excepté pour la journée du 29 septembre.

	Mean (10 ⁻⁹ s/m ³)	Std (10 ⁻⁹ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	259.00	221.52						
IMPACT Briggs	261.13	269.42	-0.01	-0.20	0.87	0.37	0.40	0.65
IMPACT Pasquill	247.44	290.35	0.05	-0.27	0.81	0.45	0.42	0.63

Tableau 34 : comparaison des paramètres statistiques pour l'expérience d'Indianapolis

Les résultats des deux scénarios donnent des résultats semblables. La modélisation avec les écart-types de Briggs a tendance à surestimer très légèrement les résultats alors que la modélisation avec les écarts-types de Pasquill tend à les sous-estimer. La proportion de résultats dans un facteur 2 est la même pour les deux approches de modélisation.

Il est intéressant de comparer les résultats du logiciel et les observations point par point. Bien que les moyennes sur toute l'expérience soient bonnes, les nuages de points sont assez étalés (Figure 138 Figure 139).

Remarque : nous avons modifié l'échelle de la figure représentant les concentrations obtenues avec le deuxième scénario pour pouvoir visualiser tous les points

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 138 : comparaison des mesures et des résultats d'ARIA IMPACT sur le scénario 1



Figure 139 : comparaison des mesures et des résultats d'ARIA IMPACT sur le scénario 2 (attention, l'échelle n'est pas la même que dans la précédente comparaison)

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• Analyse des résultats

Pour essayer de comprendre les limites des modèles, on étudie leur comportement en fonction de la stabilité et de la distance à la source. (cf Figure 140 et Figure 141).



Figure 140 : Evolution du biais fractionnel des résultats du modèle de Briggs en fonction de la distance à la source pour différents régimes de stabilité





171/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

On remarque sur les courbes de la Figure 140 que le modèle de Briggs sous-estime très largement les concentrations dans les situations stables. Ceci est du au fait qu'avec la modélisation de Briggs, dans les situations stables, le panache atteint le sol à une distance supérieure à 12 km c'est pourquoi les concentrations sont nulles sur les arcs. En revanche le modèle de Pasquill (Figure 141) donne une bonne estimation des concentrations dans les situations stables à partir de 4 km. Au voisinage de la source le modèle sous-estime les concentrations. Dans les situations instables, le modèle de Briggs et le modèle de Pasquill surestime légèrement les concentrations au voisinage de la source puis les sous-estime lorsqu'on s'éloigne de la source.

4.3.4. ELABORATION DES SCENARIOS POUR LE MODELE TRAMES ET ANALYSE DES RESULTAS

Pour construire les fichiers de données météorologiques nécessaires au fonctionnement de TRAMES, nous avons utilisé le modèle diagnostique MINERVE. Le relief du site d'Indianapolis étant plat, le modèle effectue uniquement une interpolation des mesures de vent et de température sur un maillage tridimensionnel. Pour diminuer les temps de calculs, nous avons choisi 2 maillages horizontaux en fonction de la position des récepteurs. Le premier maillage ayant un pas de 100m sur l'horizontal et un maillage vertical de 50 niveaux verticaux, le deuxième maillage ayant un pas de 200m sur l'horizontal et un maillage vertical de 50 niveaux. Le sommet du domaine de calcul est de 600m et la hauteur du premier niveau au dessus du sol est de 10m. la longueur de rugosité du sol est de 1m.

Le modèle TRAMES est utilisé sur le même maillage que celui défini dans MINERVE. Les épisodes de rejet de SF_6 sont modélisés comme des rejets continus sur des périodes de 1 heures, les bouffées sont émises toutes les 10 secondes. Le modèle de diffusion utilisé est le modèle de Briggs Urban et pour chaque expérience, la classe de stabilité et la hauteur de la couche limite sont renseignées par l'utilisateur à partir des données présentent dans la base de données du cas test.

Le rejet de SF₆ étant chaud et dynamique, le modèle calcule les surhauteurs par la méthode de Briggs.

Remarque : dans les situations stables, la hauteur de la couche limite est de l'ordre de 200m et les surhauteurs calculées peuvent atteindre 400m. Dans ces cas précis, la modélisation du rejet est telle que tout le polluant est émis au dessus de la couche limite et ne redescend pas vers le sol. Les concentrations au sol modélisées sont alors nulles. Pour s'affranchir de ce problème, nous avons choisi une hauteur de couche limite minimum de 500m.

Les calculs statistiques ont été réalisés sur les maximums de concentration sur les arcs pour les résultats de toutes les expériences de qualité 2 et 3 excepté pour la journée du 29 septembre.

	Mean (10 ⁻⁹ s/m ³)	Std (10 ⁻⁹ s/m³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	258.51	221.46						
TRAMES	233.76	215.03	0.10	0.03	0.80	0.33	0.41	0.71

Tableau 35 : paramètres statistiques pour le modèle TRAMES

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 142 : comparaison des mesures et des résultats du modèle TRAMES pour les concentrations maximales sur l'arc divisées par le débit de la source

On remarque d'après les paramètres statistiques que le modèle TRAMES sous-estime légèrement les concentrations. La moyenne des maximums de concentrations sur l'arc modélisés est très proche de la moyenne mesurée. Cependant, le nuage de points est assez étalé. La proportion de résultats dans un facteur 2 par rapport aux mesures est de 40%.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• Analyse des résultats

On calcule le biais fractionnel en fonction de la distance à la source et pour les différentes classes de stabilité (Figure 143). On peut déterminer ainsi si le modèle est meilleur proche de la source ou loin de la source et si il est meilleur dans les cas stables ou les cas instables.





On remarque que dans les situations instables, le modèle TRAMES surestime les concentrations au voisinage de la source puis les sous-estime en s'éloignant de la source. Mais pour les situations stables, le panache modélisé atteint le sol à une distance importante de la source et donc la concentration modélisée au voisinage de la source est nulle. En s'éloignant de la source, les concentrations mesurées sont proches des concentrations modélisées.

4.3.5. ELABORATION DES SCENARIOS POUR LE MODELE SPRAY ET ANALYSE DES RESULTATS

Pour construire les fichiers de données météorologiques nécessaires au fonctionnement de SPRAY, nous avons utilisé le modèle diagnostique MINERVE. Le relief du site d'Indianapolis étant plat, le modèle effectue uniquement une interpolation des mesures de vent et de température sur un maillage tridimensionnel. Pour diminuer les temps de calculs, nous avons choisi 2 maillages horizontaux en fonction de la position des récepteurs. Le premier maillage ayant un pas de 100m sur l'horizontal et un maillage vertical de 50 niveaux verticaux, le deuxième maillage ayant un pas de 200m sur l'horizontal et un maillage vertical de 50 niveaux. Le sommet du domaine de calcul est de 600m et la hauteur du premier niveau au dessus du sol est de 10m. La longueur de rugosité est de 1m.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Le modèle SPRAY permet de calculer la turbulence à l'aide de la méthode TURKEY niveau 1. Ne possédant pas les données météorologiques des journées complètes de chaque expérience, nous avons construit les fichiers de chronologies météorologiques de la manière suivante :

- Chaque expérience faisant partie d'une série de mesures sur 8 ou 9 heures, nous avons utilisé les mesures disponibles aux heures précédant l'expérience pour renseigner la température la nébulosité et le flux radiatif net.
- Pour les heures pour lesquelles on ne dispose pas de mesure, on impose la valeur de la température et de la nébulosité et du flux radiatif net de l'heure de l'expérience.

Le modèle SPRAY est utilisé sur le même maillage que celui défini dans MINERVE. Les épisodes de rejet de SF_6 sont modélisés comme des rejets de 5000 particules émises toutes les 10 secondes pendant une heure. La concentration au sol est moyennée sur 10 minutes et les résultats sont stockés toutes les 10 minutes.

Le rejet de SF6 étant chaud et dynamique, le modèle calcule les surhauteurs par la méthode de Briggs.

Les premiers résultats ont montré qu'un nombre de 5000 particules par pas de temps n'était pas suffisant pour modéliser la continuité du panache. Sur une même expérience d'une heure, on observe de grands écarts entre 2 pas de stockage de la concentration du fait du caractère aléatoire du modèle Lagrangien. Cependant, un nombre plus grand de particules n'est pas envisageable car cela augmente considérablement les temps de calcul. Pour lisser les résultats, pour chaque expérience, nous avons fait la moyenne des concentrations calculées toutes les 10 minutes.

Les calculs statistiques ont été réalisés sur les maximums de concentration sur les arcs pour les résultats de toutes les expériences de qualité 2 et 3 excepté pour la journée du 29 septembre.

	Mean (10 ⁻⁹ s/m ³)	Std (10 ⁻⁹ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	258.09	221.63						
SPRAY	187.29	284.74	0.32	-0.25	1.65	0.23	0.26	0.45

Tableau 36 : paramètres statistiques pour le modèle SPRAY

Remarque : nous avons modifié l'échelle de la figure représentant les concentrations modélisées en fonction des mesures pour pouvoir visualiser tous les points

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 144 : comparaison modèle mesure pour SPRAY pour le premier scénario (attention, changement d'échelle)

On remarque que le modèle SPRAY sous-estime en moyenne les concentrations. Plusieurs explications sont possibles : tout d'abord, la hauteur de la couche limite est calculée par le modèle en utilisant la méthode METPRO évolutive. Dans les situations stables, la hauteur de la couche limite calculée est inférieure à 200m, or la hauteur du rejet avec surhauteur est supérieure à 200m. Dans ces situations particulières, tout le polluant est rejeté au dessus de la couche limite et la concentration calculée au sol est nulle. Contrairement au modèle TRAMES, l'utilisateur ne peut pas imposer la hauteur de la couche limite. Une solution pour augmenter la hauteur de la couche limite serait de prendre une longueur de rugosité de 3m comme cela a été fait avec le logiciel ADMS. En augmentant la rugosité, on augmente la turbulence dans la couche limite et donc la hauteur de la couche limite.

D'autre part, nous avons remarqué que dans certaines situations, le gradient de température au sol dans les fichiers MINERVE était très élevé et ne correspondait pas aux mesures. En concertation avec ARIA Technologies, nous avons utilisé une autre méthode d'interpolation pour déterminer le champ de température. A partir de ces nouveaux fichiers météorologiques et en prenant une longueur de rugosité de 3m, nous obtenons les résultats suivants

	Mean (10 ⁻⁹ s/m ³)	Std (10 ⁻⁹ s/m ³)	FB	FS	NMSE	R	FAC2	FAC5
mesures	257.78	221.58						
SPRAY	252.56	195.53	0.02	0.12	0.72	0.32	0.44	0.75

Tableau 37 : paramètres statistiques pour le modèle SPRAY

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 145 : comparaison modèle-mesure pour le deuxième scénario (attention changement d'échelle)

Les résultats statistiques du modèle SPRAY avec ce deuxième scénario sont très satisfaisants. En moyenne les concentrations modélisées sont très proches des concentrations mesurées. Cependant le nuage de point est très dispersé. La proportion de résultat dans un facteur 2 est de 40%.

177/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• Analyse des résultats

On calcul le biais fractionnel en fonction de la distance à la source et pour différentes classes de stabilité (Figure 146).



Figure 146 : évolution du biais fractionnel en fonction de la distance à la source et pour différentes classes de stabilité

On remarque que le modèle SPRAY a un comportement satisfaisant entre 1km et 6 km quelque soit la classe de stabilité. Lorsqu'on s'éloigne de la source, le modèle sous-estime les concentrations. Ceci est en partie dû à notre méthode de calcul de la concentration en moyennant les concentrations calculées toutes les 10 minutes. En effet, un récepteur situé à 10 km de la source est atteint par le polluant au bout d'environ 50 minutes pour un vent de 3m/s. La concentration moyennée sur une heure est donc plus faible que la concentration moyennée sur les 10 dernières minutes de l'heure de l'expérience.

4.3.6. COMPARAISON DES MODELES GAUSSIENS

Les deux modèles ADMS et ARIA IMPACT donnent des résultats statistiques comparables. Les moyennes des concentrations maximales sur les arcs sont proches des mesures et les coefficients de corrélation sont de l'ordre de 0.4. Cependant, il faut émettre une certaine réserve quant aux résultats. On peut dire que pour un ensemble de situations météorologiques couvrant des cas stables et des cas instables, les deux modèles sont en moyenne proche de la réalité mais si on regarde les résultats au cas par cas, on s'aperçoit que les modèles ont tendance à surestimer les concentrations dans certains cas et à les sous-estimer dans d'autres. Les erreurs se compensent et en moyenne les résultats du modèle sont cohérents avec les mesures. L'écart du modèle à la mesure serait encore plus grand si on s'intéressait à des comparaisons de concentration sur tout l'arc et non pas uniquement sur le maximum sur l'arc (cf chapitre 4.1.)

Si on compare les résultats d'ADMS et ceux d'ARIA IMPACT (cf Figure 147), ils sont globalement cohérents, même si certains points sont assez éloignés de la droite moyenne, notamment les points correspondants aux situations stables.

De même, les résultats de TRAMES et d'ARIA IMPACT sont assez cohérents (Figure 148).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 147 : Comparaison des résultats des modèles ADMS et ARIA IMPACT sur le cas test d'Indianapolis



Figure 148 : Comparaison des résultats des modèles TRAMES et ARIA IMPACT sur le cas test d'Indianapolis

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

4.3.7. CONCLUSION

En comparant les résultats des 4 modèles de dispersion sur l'expérience d'Indianapolis, on peut remarquer que les modèles ADMS, ARIA IMPACT, TRAMES et SPRAY donnent des résultats semblables très proches en moyenne des mesures. Les comparaisons point par point des modèles par rapport aux mesures sont très dispersées dans tous les cas.

180/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

4.4. CONCLUSION SUR L'ETUDE DES CAS TESTS

Au cours de cette étude, nous avons étudié avec l'ensemble des modèles deux cas tests relativement simples : un rejet ponctuel sur un terrain plat soumis à différents régimes météorologiques. Ces expériences sont représentatives des situations couramment rencontrées dans les études d'impact. La démarche que nous avons adoptée pour étudier les cas tests a été de construire des scénarios de modélisation à partir des mesures de terrain effectuées pour ces expériences et des observations disponibles et ensuite d'analyser les résultats de ces différents scénarios. Certains paramètres des scénarios de modélisation ont nécessité quelques ajustements afin d'obtenir des résultats satisfaisants avec les différents modèles. L'analyse des résultats du modèle en fonction de la distance des récepteurs par rapport à la source et en fonction des conditions météorologiques a permis d'identifier d'éventuelles erreurs dans les logiciels de dispersion et de les corriger avec l'aide des fournisseurs de logiciels.

Sur le cas test de Prairie Grass, les modèles gaussiens donnent des concentrations moyennes proches des mesures et relativement meilleurs que le modèle lagrangien. Ce résultat est assez logique pour les modèles ARIA IMPACT et TRAMES car les écart-types de diffusion de ces modèles gaussiens ont été calculés à partir de cette expérience. Sur les cas test d'Indianapolis, les résultats statistiques des modèles gaussiens sont très proches des mesures, le modèle lagrangien sous-estime légèrement les mesures. Cependant les nuages de points sont très dispersés pour tous les modèles. Il faut donc être prudent sur l'interprétation des résultats : un modèle qui donne de bons résultats à la lecture des paramètres statistiques n'est pas pour autant fiable dans toutes les situations. D'autant plus que les paramètres statistiques sont calculés sur les maximums de concentrations sur les arcs et non sur toutes les mesures de concentrations. On ne peut donc pas affirmer qu'un des modèles testés est plus performant qu'un autre.

L'étude des cas tests a permis aussi de prendre conscience de l'intérêt des études statistiques par rapport aux études ponctuelles. En effet, pour étudier l'impact d'un rejet sur un site, on modélise parfois le cas météorologique le plus défavorable pour la dispersion et on extrapole les résultats aux cas où la dispersion est meilleure. Or si le modèle sous estime très fortement les concentrations dans les cas stables, on ne peut pas conclure que les concentrations des cas instables seront plus faibles. Il est donc parfois nécessaire de calculer une concentration moyenne annuelle à partir d'une rose des vents ou d'une série météorologique afin de ne pas privilégier inconsciemment une situation particulière où le modèle n'est pas forcément très performant.
181/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5. ETUDE DES CAS INDUSTRIELS

5.1. OBJECTIFS INITIAUX ET REORIENTATIONS DE L'ETUDE

Les objectifs initiaux de l'étude de cas réels étaient en particulier de montrer et d'expliquer la démarche de modélisation dans des situations complexes rencontrées par les industriels et les simplifications pouvant être introduites. C'était également de montrer comment préparer les données d'entrée nécessaires au modèle et comment interpréter les résultats en sortie du modèle. C'était enfin de disposer d'un ensemble de cas de référence bien documentés pour la formation des utilisateurs et la prise en main des modèles.

Comme nous l'avons déjà mentionné auparavant, les premières conclusions des entretiens avec les tuteurs industriels, nous ont amené à réorienter l'étude en diminuant la partie relative aux cas tests pouvant être interprétée comme trop scientifique et en se focalisant sur des situations plus concrètes couramment rencontrées dans les études d'impact. Il ressort en effet de ces entretiens que la problématique de la modélisation de la dispersion dans les études d'impact conduit à réaliser des calculs de dispersion sur le long terme. Dans ce cas, les industriels pensent que l'utilisation de modèles compliqués pour calculer la dispersion n'est pas adaptée. Ces calculs avec des modèles compliqués seront plus onéreux, demanderont plus de temps et plus de données en entrée des modèles ainsi que plus de compétences au niveau des utilisateurs. En revanche, si les industriels sont convaincus qu'il faut utiliser des modèles simples pour les études d'impact, ils se posent encore beaucoup de questions quant à leur mise en œuvre dans des situations complexes. Ils sont en particulier intéressés par l'influence que peuvent avoir des simplifications dans la démarche de modélisation sur les résultats.

Pour guider les industriels dans leur choix de modèles et dans leur mise en œuvre sur des cas réels, nous avons établi une méthodologie. Cette méthodologie permet à l'utilisateur d'identifier parmi les caractéristiques du site industriel, de la météorologie et des caractéristiques du rejet, tous les facteurs déterminants dont il doit tenir compte dans sa modélisation. Cette méthodologie permet aussi de faire le point sur les données que l'utilisateur doit rassembler pour réaliser une étude. Le chapitre suivant détaille les différents points de la méthodologie proposée.

Nous pensons que l'étude de sensibilité permet de répondre à un grand nombre de questions concernant les simplifications que l'utilisateur est amené à faire dans sa démarche de modélisation. L'étude d'un cas réel présentant des problèmes similaires à ceux étudiés dans l'étude de sensibilité n'apporterait pas d'éléments de réponse supplémentaires. Nous avons donc étudié en détail le cas réel concernant un site de montagne. Pour visualiser les effets de la topographie particulière du site, nous avions imaginé d'étudier ce cas avec 3 modèles : le modèle ADMS, le modèle SPRAY couplé avec le modèle diagnostique d'écoulement MINERVE et enfin le modèle eulérien de mécanique des fluides MERCURE. L'utilisation de ce dernier a cependant posé un grand nombre de problème notamment en raison du peu de données météorologiques que nous possédions sur ce cas réel. Nous avons donc décidé d'utiliser le modèle HERMES et de comparer les résultats avec le modèle SPRAY. Nous avons également étudié plusieurs scénarios de modélisation : l'utilisation de données météorologiques séquentielles sur une année entière, l'utilisation d'une rose des vents, l'utilisation de scénarios météorologiques représentatifs de journées types.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5.2. RECAPITULATIF DES CAS INDUSTRIELS PROPOSES LORS DES ENTRETIENS

Les différents cas industriels proposés lors des entretiens sont résumés par industriel dans ce qui suit.

5.2.1. SOCOTEC

Deux cas réels ont été proposés par SOCOTEC sur la base de deux études. Il s'agit d'études concernant la dispersion de poussières et métaux lourds sur le long terme. Les rejets sont effectués à partir de cheminées de faibles hauteurs. Les données météorologiques correspondent à des observations tri-horaires. La problématique associée à ces études concerne les formules de calcul de la surélévation du panache, la prise en compte de la granulométrie des poussières dans les calculs de dispersion et les dépôts.

Actuellement, nous possédons les données suivantes :

- *Rejet de mercure à la cheminée :* Les données « papier » mises à notre disposition par SOCOTEC concernent principalement :
 - Les conditions de rejet : position, diamètre et hauteur des cheminées, vitesses et températures des rejets, quantité de mercure émis par heure, vitesses de chute et de dépôt.
 - Les données météorologiques : rose des vents.
 - Les données topographiques : site plat, pas d'informations sur le bâti.
- *Rejet de particules à la cheminée :* Les données « papier » mises à notre disposition par SOCOTEC concernent principalement :
 - Les conditions de rejet : position, diamètre et hauteur des cheminées, vitesses et températures des rejets, quantités de poussières émises par heure, granulométrie des poussières, vitesses de chute et de dépôt.
 - Les données météorologiques : rose des vents.
 - Les données topographiques : site plat, pas d'informations sur le bâti.

5.2.2. ATOFINA

L'étude envisagée par ATOFINA concerne un site de vallée de montagne et un site de bord de mer. Les calculs de dispersion pourraient être effectuées pour des épisodes et ou du long terme. Les données que nous possédons sont décrites dans ce qui suit.

- *Rejet de NO_x à la cheminée sur le site de l'usine de La Chambre située en Maurienne :* Les données disponibles concernent principalement :
 - Les conditions de rejet : position, diamètre et hauteur de la cheminée, vitesse et température du rejet, quantité moyenne de NO_x émis par seconde.
 - Les données météorologiques : données de la station météo France de Sainte-Marie-de-Cuines, située à moins de 2 km de l'usine ; un point de sortie du modèle ALADIN correspondant à la zone étudiée. Ces données ont été obtenues directement auprès des services de Météo-France dans le cadre d'une convention spécifique d'enseignement et de recherche signée entre l'Ecole Centrale de Lyon et Météo-France.
 - *Les données topographiques :* Les données topographiques ont été tirées de la carte IGN de la zone considérée.
- Rejet de COV à la cheminée et émissions fugitives sur le site de l'usine de Lavéra située en bord de mer : Les données disponibles concernent principalement :

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

- Les conditions de rejet : position, diamètre et hauteur de la cheminée, position et dimensions de la source volumique, vitesse et température du rejet à la cheminée, quantités de COV émis par les deux sources.
- Les données météorologiques : il est possible récupérer des données provenant soit du réseau de surveillance de la qualité de l'air soit des stations de Météo-France, soit des deux.
- *Les données topographiques :* terrain plat pour l'instant ; utilisation de la carte IGN de la zone considérée si nécessaire.

5.2.3. EDF

Les études qui intéressent EDF concernent des sites du type « bord de mer » et des sites avec un relief marqué sur le site (falaise) ou dans le proche voisinage. EDF n'est pas en mesure de proposer un cas réel pour des raisons de confidentialité.

5.2.4. RENAULT

La problématique rencontrée par RENAULT concerne en particulier l'influence des obstacles sur la dispersion ainsi que le regroupement de sources.

Les données mises à notre disposition sont :

- Les conditions de rejet : position, diamètre ou section, hauteur de chaque cheminée ainsi que les quantités de COV et les débits d'air associés à chaque émissaire.
- Les données météorologiques : pas de données météorologiques pour l'instant. Nous essayerons de les obtenir via notre convention de collaboration avec Météo-France.
- Les données topographiques : position et hauteur de chaque bâtiment. Site pratiquement plat.

Ces données ont été utilisées pour l'étude de sensibilité sur le regroupement des sources et la modélisation d'une source complexe par une source ponctuelle équivalente.

5.2.5. CIMENTS LAFARGE

Le cas réel proposé par les ciments LAFARGE concerne plusieurs cheminées de la cimenterie située près du Havre, rejetant des particules. Les données disponibles sont les suivantes :

- Les conditions de rejet : position, diamètre et hauteur de chaque cheminée ainsi que les quantités de particules émises, les débits d'air et la température associés à chaque cheminée.
- Les données météorologiques : données météorologiques horaires correspondant à l'année 2001.
- Les données topographiques : position et hauteur des principaux bâtiments. Site plat.

5.2.6. SUEZ ENVIRONNEMENT

Le cas réel proposé par SUEZ ENVIRONNEMENT concerne un ensemble de rejets canalisés et de rejets diffus de différents polluants.

- Les conditions de rejet : dimensions géométriques des différents rejets et quantités des différents polluants émis.
- Les données météorologiques : pas de données météorologiques.
- Les données topographiques : pas de données de terrain.

184/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5.3. DEMARCHE DE MODELISATION DES CAS INDUSTRIELS

Les études de dispersion atmosphérique sur des sites industriels peuvent être très différentes les unes des autres en fonction des caractéristiques du site industriel et des objectifs de l'étude. Cette diversité des problèmes relatifs à un site particulier ne permet pas d'établir des règles précises d'utilisation des modèles de dispersion applicables à tous les sites. En revanche, il est possible d'établir une liste des problèmes que le modélisateur peut rencontrer dans l'étude d'un cas industriel et des questions qu'il doit se poser pour établir des scénarios de modélisation le plus pertinents possibles. Il est fondamental que le modélisateur ait conscience de l'impact de ses choix de modélisation sur le résultat d'une simulation et qu'il puisse les justifier. C'est dans cette optique que nous avons établi cette méthodologie d'étude des cas industriels. Nous proposons trois axes de réflexion :

- Quels sont les phénomènes physiques qui influent sur la dispersion d'un polluant (les caractéristiques météorologiques, la nature du polluant, les caractéristiques du rejet) ?
- Quelles sont les données disponibles ?
- Quelles sont les possibilités qui s'offrent au modélisateur en terme de choix de modèles, de choix d'options de modélisation et de choix de scénarios de modélisation ?

5.3.1. DEFINITION DE LA SITUATION PHYSIQUE A MODELISER

Avant de construire un scénario de modélisation de la dispersion atmosphérique sur un site industriel, il convient d'analyser différents paramètres pour évaluer l'impact sur le résultat de la simulation des hypothèses retenues. Nous allons donc détailler dans cette partie les questions que l'utilisateur doit se poser pour analyser la situation qu'il doit modéliser.

5.3.1.1. Les phénomènes météorologiques locaux

Remarques générales : cette partie décrit les phénomènes météorologiques locaux qui peuvent apparaître sur un site. Suivant leur importance, il est parfois nécessaire d'utiliser un modèle spécifique pour les prendre en compte. Cependant, une mesure météorologique pertinente est parfois suffisante pour tenir compte de la modification de l'écoulement par les éléments extérieurs. D'autre part différents phénomènes peuvent interagir : un site peut être situé à proximité d'une montagne et d'un bâtiment. Ces deux éléments vont avoir un impact sur l'écoulement. Suivant l'objectif de l'étude d'impact, il est parfois possible de négliger un phénomène par rapport à un autre. Cependant, ces situations sont souvent très complexes à modéliser et nécessitent une attention particulière. L'utilisateur doit avoir une bonne connaissance de l'impact sur le résultat que peut induire une simplification dans la modélisation des phénomènes locaux.

L'impact de l'occupation des sols

• Sol homogène

L'occupation des sols a un impact direct sur la dispersion atmosphérique. Tout d'abord, la rugosité du sol par des effets de frottement va influencer le profil vertical du vent dans la couche limite et par des effets mécaniques, la rugosité va influencer la turbulence verticale. (cf étude de sensibilité). D'autre part, la nature du sol et plus précisément les caractéristiques thermiques et radiatives du sol vont avoir un impact sur les échanges thermiques au niveau du sol et donc sur la stabilité de la couche limite.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• Variation de l'occupation des sols

De même que la rugosité moyenne du site est importante, une forte variation de rugosité ou de l'occupation des sols (transition ville campagne) à proximité du site peut avoir un impact fort sur la dispersion. Cet impact peut concerner uniquement les caractéristiques turbulentes de l'atmosphère mais lorsque la différence d'occupation des sols est telle que la température de l'air est différente sur les deux zones, il se crée des brises thermiques qui modifient totalement l'écoulement. Il est alors intéressant d'utiliser un modèle spécifique qui permet de prendre en compte les variations des caractéristiques du site.

Le cas spécifique du bord de mer

La présence de la mer à proximité d'un site industriel n'est pas sans conséquence pour la dispersion atmosphérique : la variation de rugosité d'une part et de température au niveau du sol d'autre part induisent des phénomènes très particuliers comme les brises côtières ou les phénomènes de fumigation (cf état de l'art). Si le site industriel est suffisamment éloigné de la mer (10 km), ces phénomènes peuvent être négligés, sinon, il convient de les modéliser avec un modèle spécifique.

Il existe différentes méthodes plus ou moins précises pour prendre en compte l'occupation des sols. Par exemple un modèle gaussien fondé sur les écarts-types de Briggs distingue seulement 2 types de sols : urbain ou rural. D'autres modèles plus élaborés prennent en compte la valeur numérique de la longueur de rugosité dans le calcul des écarts-types.

L'occupation des sols peut être définie sous forme de classe (urbain, terrain agricole,...) ou par l'intermédiaire de paramètres physiques comme la longueur de rugosité dont on connaît la valeur numérique.

La topographie du site

La topographie du site a un impact direct sur l'écoulement et donc sur la dispersion.

Présence de relief « important » autour du site.

Un site industriel situé dans une zone de relief accidenté, va être soumis à un écoulement particulier fortement influencé par ce relief. On distingue deux types de perturbations induites par le relief :

• La modification de l'écoulement par des effets dynamiques

Le relief agit comme un obstacle dans l'écoulement. Il se crée donc une zone de sillage en aval du relief dans lequel l'écoulement est fortement perturbé. L'écoulement est aussi modifié en amont du relief. Pour savoir s'il est nécessaire de prendre en compte ces perturbations dans la modélisation d'un site industriel, nous avons retenu le critère décrit ci-dessous.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Pour un relief situé à moins de 10 km du site, si la source est située à une distance inférieure à 10 fois la hauteur du relief, le panache va subir l'influence du relief. Il est alors nécessaire de prendre en compte la perturbation induite par le relief et d'utiliser un modèle spécifique.



Pour un relief important situé à une distance supérieure à 10 km de la source, l'écoulement général va être perturbé mais une mesure météorologique pertinente permet de prendre en compte cette perturbation.

La modification de l'écoulement par des effets thermiques

Pour les sites de montagnes, où il existe de forts gradients de température entre la vallée et les sommets, des brises thermiques et des effets particuliers de stratification peuvent apparaître. Si les données de la station météorologique utilisées pour simuler la dispersion sont représentatives de ces phénomènes, il ne sera pas indispensable d'utiliser un modèle spécifique. En revanche, si les mesures météorologiques ne sont pas représentatives du site, un modèle qui permet de prendre en compte les effets météorologiques liés à la topographie du site peut être intéressant.

Présence d'obstacles au voisinage du site

La présence d'obstacles (bâtiment ou autre) à proximité de la source perturbe l'écoulement et donc la dispersion. La présence d'obstacle se traduit par une diminution du vent moyen et une augmentation de la turbulence. La présence de l'obstacle pourra être négligée si la source est située à une distance supérieure à environ 10 fois la hauteur de l'obstacle. Sinon il sera nécessaire d'utiliser un modèle qui permet de prendre en compte les obstacles et de connaître la dimension et la géométrie de ceux-ci.

Les obstacles peuvent être pris en compte de deux manières :

- Une augmentation de la rugosité : pour les obstacles situés en champ lointain et suffisamment peu élevés pour être sous la ligne d'influence, une augmentation de la longueur de rugosité permet de prendre en compte les effets de ces obstacles.
- Une modification des caractéristiques de l'écoulement (vitesse moyenne et turbulence) : pour les obstacles situés en champ proche et coupant la ligne d'influence, il est nécessaire d'utiliser un modèle spécifique qui prend en compte la modification de l'écoulement induite par les obstacles en fonction de la géométrie et de la position de ceux-ci.

186/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Si on trace une droite faisant un angle de 6 degrés avec l'horizontale et partant de la source, les bâtiments situés sous la droite peuvent être pris en compte en augmentant la longueur de rugosité, alors que les bâtiments coupés par la droite doivent être pris en compte par un modèle spécifique.

Dans le cas où la cheminée est placée au sommet d'un bâtiment. Si la hauteur de la cheminée est supérieure à 5 fois la hauteur du bâtiment, l'influence du bâtiment peutêtre négligée.

Les vents calmes

Certains sites sont soumis à des régimes de vents particuliers où la direction du vent n'est pas stable et où la vitesse, en moyenne faible, varie beaucoup. Ces situations dites de vents calmes sont très pénalisantes pour la dispersion et assez difficile à modéliser. Pour les sites présentant un grand nombre de situations de vents calmes au cours d'une année, un modèle spécifique qui permet de prendre en compte ces situations particulières est parfois nécessaire.

5.3.1.2. La nature des polluants

Le comportement d'un polluant dans l'atmosphère dépend de ses caractéristiques chimiques et physiques. Il convient donc de distinguer les différents types de polluant.

Gaz sans réaction chimique

Tous les modèles de dispersion permettent de modéliser un gaz inerte.

Gaz avec réaction chimique

Certains gaz sont très réactifs et se transforment rapidement dans l'atmosphère (les oxydes d'azote par exemple). Une modélisation classique peut donc surestimer les concentrations du polluant initial et sous-estimer les concentrations du produit de la réaction. Il est donc parfois nécessaire d'utiliser un modèle chimique.

Si l'utilisateur souhaite modéliser la concentration exacte d'un tel polluant dans l'atmosphère, il doit utiliser des données de pollution de fond.

Les particules

Les particules ayant une masse intrinsèque, leur comportement est différent de celui d'un gaz. Plusieurs phénomènes rentrent en jeu :

- La sédimentation : au fur et à mesure de l'étalement du nuage, les particules vont se déposer sur le sol et appauvrir le nuage.
- Coalescence de particules : en s'entrechoquant les unes avec les autres, les particules peuvent s'agglomérer et donc former des particules plus grosses et ayant des propriétés différentes.
- Comportement chimique des particules : comme pour les gaz, les particules peuvent être inertes ou réactives avec l'atmosphère et générer de nouveaux polluants.

188/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

• Les dépôts sec et humides : au voisinage du sol, les polluants peuvent se déposer au sol. La quantité de polluant déposée dépend de la nature du sol et du polluant. Le lessivage par la pluie entraîne le dépôt humide de particules au sol.

Des modèles spécifiques permettent de prendre en compte ces phénomènes. Il est alors nécessaire de renseigner le modèle sur les caractéristiques des particules (granulométrie).

Si la taille des particules est inférieure à 5 microns, on peut considérer que le polluant se comporte comme un gaz.

5.3.1.3. Les caractéristiques du rejet

Les caractéristiques du rejet ont un impact sur les phénomènes de dispersion. Suivant que le rejet est ponctuel ou réparti spatialement, suivant sa température et sa vitesse d'éjection, la définition du terme source diffère.

Rejet ponctuel imposé sans surhauteur

Rejet chaud ou avec une vitesse d'éjection pouvant induire une surhauteur

Un rejet chaud ou ayant une vitesse initiale va s'élever au dessus de la source par des effets de flottabilité et des effets dynamiques. Cette élévation du panache au-dessus de la source a un impact sur la concentration au sol (cf étude de sensibilité). Il convient alors d'utiliser un modèle qui prend en compte ces effets thermiques et dynamiques de la dispersion.

Rejet réparti spatialement (source linéique, surfacique ou volumique)

La géométrie d'une source peut avoir un impact sur les concentrations en polluant. Suivant les dimensions de la source et la distance entre les récepteurs et la source, cet impact peut ou non être négligé. (cf étude de sensibilité).

Caractéristiques du rejet dépendant des conditions météo (envol de poussières, évaporation de liquide)

Dans certaines situations, la caractérisation du terme source n'est pas immédiate. Par exemple dans les situations d'envol de poussière ou d'évaporation de liquide, le débit de polluant dépend des caractéristiques météorologiques. Ces situations nécessitent un modèle spécifique qui permet de calculer les émissions en fonction de la météorologie.

5.3.2. INVENTAIRE DES DONNEES DISPONIBLES

Lorsque les différents phénomènes physiques qui vont influencer la dispersion sur un site ont été identifiés, il convient de recenser les données nécessaires pour la modélisation. Ces données concernent la description du site, le rejet, les polluants et la météorologie.

5.3.2.1. Les données concernant le site

Les coordonnées géographiques du site

Il est nécessaire de renseigner le modèle sur la position du site sur la Terre et donc de définir les coordonnées géographiques du site. La précision de ces données a peu d'importance pour le calcul de la dispersion. La position de la source sur la Terre peut être définie à 50 km près sans impact sur le calcul de la concentration de polluant.

En général, un repère est ensuite défini par l'utilisateur et les éléments géographiques du site (les sources, les récepteurs, les obstacles,...) sont définis dans ce repère local.

L'occupation des sols (rugosité, albédo,...)

Les paramètres caractéristiques pour décrire l'occupation des sols sont les suivants.

• Caractéristique dynamique : la longueur de rugosité correspond à la hauteur où la vitesse du vent s'annule par effet de frottement.

189/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

- Caractéristique radiative :
 - > L'albédo : rapport entre le rayonnement incident et le rayonnement réfléchi
 - > L'émissivité : capacité du sol à émettre un rayonnement
- Caractéristique thermique : capacité thermique
- Caractéristique hygrométrique : humidité

L'utilisateur doit spécifier les caractéristiques de l'occupation des sols du site qu'il modélise. Il peut spécifier la nature du sol (terrain agricole, zone urbaine, forêt...) et utiliser la valeur des paramètres physiques correspondant à la catégorie choisie. Il peut aussi définir les caractéristiques du site en précisant la valeur numérique des paramètres physiques décrits cidessus.

L'utilisateur peut choisir de décrire l'occupation des sols de manière plus ou moins précise :

- L'occupation des sols est uniforme sur la zone
- Le site est défini par 2 zones distinctes où l'occupation des sols est différente
- Le site est maillé et l'occupation des sols de chaque maille est connue (données Corine Land Cover ou USGS). Cette description très fine de l'occupation des sols n'est pas utile dans le cadre de notre problématique.

Des données d'occupation des sols sont disponibles sur le site de l'USGS : <u>http://lpdaac.usgs.gov/glcc/glcc.asp</u> Ces données couvrent l'ensemble du globe.

Des données européennes (Corinne Land Cover) sont aussi disponibles sur le site de l'IFEN : <u>www.ifen.fr</u>

La topographie (format, précision)

Lorsqu'un utilisateur souhaite modéliser un site au relief marqué, il doit se procurer des données de topographie dans un format et avec une précision compatible avec le logiciel qu'il utilise et avec le problème à traiter.

A titre d'exemple : l'IGN fournit des données de relief payantes avec une précision allant jusqu'à 50m. L'USGS fournit des données gratuites avec une précision allant jusqu'à 1km : <u>http://edcdaac.usgs.gov/gtopo30/gtopo30.asp</u>

La géométrie des bâtiments et des obstacles

L'utilisateur peut choisir de modéliser la présence d'obstacles ou de bâtiments autour du site qu'il étudie.

Deux méthodes permettent de prendre en compte la présence d'obstacles :

- Les obstacles situés dans un voisinage très proche de la source peuvent être décrits directement : position, géométrie. Il faut noter que la plupart des modèles qui prennent en compte les obstacles les considèrent de forme parallélépipédique.
- Les obstacles peuvent être pris en compte via la longueur de rugosité. On impose une longueur de rugosité assez élevée pour simuler l'augmentation de la turbulence crée par les obstacles.

5.3.2.2. Les caractéristiques du rejet

Position des sources

L'utilisateur doit spécifier la position des sources qu'il étudie. Il faut donc déterminer les coordonnées des sources.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Géométrie des sources

Il est important de renseigner le modèle sur la géométrie des sources.

S'il s'agit de sources ponctuelles, il faut spécifier la hauteur de la source et éventuellement le diamètre.

Si l'utilisateur souhaite prendre en compte la géométrie des sources complexes (linéiques, surfaciques ou volumiques) suivant le modèle qu'il utilise, il doit préciser toutes les caractéristiques géométriques ou un paramètre comme une longueur ou une surface caractéristique.

La température du rejet

C'est un paramètre important pour évaluer la surhauteur

La vitesse du rejet

C'est un paramètre important pour évaluer la surhauteur

Le débit de polluant

Le débit de polluant est un paramètre fondamental pour calculer la concentration de polluant.

Dans certains cas particuliers comme les envolées de poussières ou les évaporations de liquide, le débit de la source dépend des conditions météorologiques. Ces cas particuliers nécessitent un modèle spécifique pour calculer le terme source.

Modulation des caractéristiques du rejet

Ces trois derniers paramètres peuvent être constants ou modulés dans le temps. L'utilisateur peut donc choisir de spécifier cette modulation. Il devra alors utiliser des données météorologiques séquentielles.

5.3.2.3. Les caractéristiques du polluant

Masse volumique

Granulométrie

Lorsque l'utilisateur choisit de modéliser la dispersion de poussières, il doit spécifier les caractéristiques granulométriques des particules : diamètre des particules, vitesse de dépôt.

Paramètres chimiques

De même si l'utilisateur choisit de modéliser les réactions chimiques du polluant, il doit spécifier les paramètres chimiques notamment les constantes de réaction si elles ne sont pas intégrées dans le module de chimie du modèle.

La pollution de fond.

Il doit aussi spécifier la pollution de fond pour toute la durée de l'épisode modélisé s'il souhaite connaître la concentration en polluant totale dans l'atmosphère et pas seulement la concentration du polluant due au rejet.

191/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5.3.2.4. La météorologie

Les données météorologiques peuvent provenir d'un site de mesure ou d'un modèle météorologique. Lorsque les données sont mesurées, il faut regarder la position de la station de mesure par rapport à la source et s'assurer que la météorologie mesurée est représentative du site industriel. Dans certains modèles, il est possible d'utiliser des données provenant d'une station de mesure éloignée de la source et installée sur un site dont les caractéristiques d'occupation des sols sont différentes du site industriel. Il faut alors renseigner le modèle sur ces caractéristiques.

Les mesures de vent issues d'une station peuvent avoir différents formats :

- Les données séquentielles : heure par heure on mesure le vent en vitesse et en direction.
- Les données moyennes sous forme d'une rose des vents. Pour une gamme de vitesse donnée, par exemple 1 à 3 m/s, et une direction donnée, par exemple entre 250° et 259°, on connaît la fréquence d'occurrence annuelle, par exemple 1000 heures dans l'année.

La vitesse du vent

Il est important, quand on renseigne un modèle sur la vitesse du vent, de le renseigner aussi sur la hauteur à laquelle cette vitesse correspond. Pour les mesures Météo France, cette hauteur est de 10m

La vitesse du vent est à donner en m/s. la précision des données de Météo France étant de 1m/s.

La direction du vent

La direction du vent est généralement donnée en degré, mais elle peut aussi être donnée en secteur (nord, sud-sud-est,...). Nous avons vu dans l'étude de sensibilité que la précision sur la direction du vent pouvait avoir un impact important sur la concentration au sol. Il est donc important de noter la précision des mesures de direction de vent. Les données Météo France ont une précision de 10°.

La température

Les données de température ne sont pas toujours indispensables suivant les modèles. Le plus souvent, la température utilisée dans les modèles est la température au niveau du sol. Les données Météo France sont souvent les données de température sous abri à 1,5m du sol avec une précision au dixième de degré.

Les précipitations

Dans le cas d'un calcul de dépôt humide, le lessivage par la pluie joue un rôle très important. Il est donc nécessaire de connaître les précipitations sur le site que l'on étudie. Les mesures de précipitations représentent une hauteur d'eau cumulée par heure. Les mesures Météo France sont précises au mm/h près.

192/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Le paramètre de « stabilité »

Pour déterminer les caractéristiques turbulentes de l'atmosphère, il faut spécifier certains paramètres aux modèles. Suivant les modèles, ces paramètres peuvent être :

- La couverture nuageuse. Ce paramètre est souvent donné en oktas sur une échelle de 0 à 8.
- Le flux thermique : il est le résultat du bilan des échanges radiatifs à la surface de la terre. C'est une puissance par unité de surface.
- Le rayonnement. C'est l'énergie apportée par le soleil. C'est une puissance par unité de surface
- Le gradient de température : il permet de décrire la stabilité thermique de l'atmosphère. Il s'exprime en °C/m.
- Les fluctuations horizontales du vent : elles décrivent l'état turbulent de l'atmosphère.

Suivant les modèles, d'autres paramètres peuvent encore être précisés comme la hauteur de la couche limite.

Humidité et pression

Les variables humidité et pression ne sont pas indispensables au calcul de dispersion classique, mais elles sont nécessaires dans le cas d'une problématique de panache de condensation.

Le réseau de capteur Météo France permet de couvrir toute la France. Il existe au moins une station par département. Ces données sont payantes et disponibles sur le site : <u>http://climatheque.meteo.fr/okapi/accueil/okapiWeb/index.jsp</u>

Il est aussi possible d'obtenir des sorties de modèles météorologiques en s'adressant à Météo France.

5.3.3. LE CHOIX DES HYPOTHESES DE MODELISATION

5.3.3.1. Le choix du modèle

Comme nous l'avons déjà vu précédemment, il existe plusieurs types de modèles :

- Les modèles de panache gaussien
- Les modèles à bouffées gaussiennes
- Les modèles eulériens
- Les modèles lagrangiens

L'analyse de la situation physique à modéliser et des données disponibles doit permettre de guider l'utilisateur dans le choix du modèle de dispersion. Cependant, le choix du modèle est souvent motivé par des contraintes extérieures aux problèmes de dispersion atmosphérique. En effet, souvent, l'utilisateur possède déjà un modèle ou des contraintes d'ordre financière ou informatique impose de choisir un modèle simple et peu coûteux. Cependant, même si le modèle est imposé, il faut encore faire le choix des options de modélisation et de la mise en œuvre de la simulation.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5.3.3.2. Le choix des options de modélisation

Un logiciel de dispersion, même s'il est fondé sur une modélisation précise, peut proposer plusieurs options de calcul. En fonction du problème à traiter, l'utilisateur choisit de les utiliser ou non.

Ces options concernent les problèmes suivants :

- La description de l'écoulement
 - > Le calcul d'un profil de vent et de température
 - > La prise en compte du relief
 - > La prise en compte des obstacles
 - > La modélisation du bord de mer
 - Les variations de l'occupation des sols
 - Les phénomènes de vents calmes
- La description du rejet
 - > Le calcul de la surélévation du panache
 - > La géométrie de la source
 - > Le blocage du polluant par la couche limite
 - > Les dépôts de polluants au sol, secs ou humides
 - > Les réactions chimiques du polluant avec l'atmosphère

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5.3.3.3. Le choix de la mise en œuvre du problème

Indépendamment du choix du modèle et des options de modélisation, l'utilisateur doit déterminer une méthode pour traiter son problème.

Les grandeurs à calculer

En fonction des exigences des études d'impact, l'utilisateur peut choisir de calculer les moyennes annuelles de concentration de polluant au sol ou en des points récepteurs précis. Certaines valeurs statistiques peuvent être exigées comme les percentiles ou les valeurs limites de concentration et les fréquences de dépassement.

Le traitement de la statistique temporelle

Pour réaliser une étude d'impact, plusieurs approches sont possibles. Le choix d'une approche par rapport à une autre dépend beaucoup des données disponibles et des temps de calcul des modèles.

Utilisation de données séquentielles

On peut calculer la dispersion pour toutes les heures d'une année et calculer ensuite la moyenne des concentrations en certains points ainsi que des paramètres statistiques comme des percentiles ou des fréquences de dépassement d'une valeur limite. Cette méthode nécessite de posséder des données météorologiques séquentielles pour toutes les heures de l'année.

Pour les approches de modélisation utilisant des données météorologiques séquentielles, l'utilisateur doit se poser la question de la modulation des émissions. Si les émissions du site ne sont pas constantes et que l'utilisateur connaît la modulation temporelle des caractéristiques du rejet, il peut choisir de prendre en compte cette modulation ou de faire une simulation avec les caractéristiques moyennes des émissions.

Utilisation d'une rose des vents

Il est aussi possible de calculer la dispersion sur un site industriel à partir de la rose des vents du site. Connaissant la fréquence d'occurrence des situations météorologiques, on calcule la moyenne pondérée de toutes les situations. La rose des vents peut être plus ou moins détaillée :

- Les intervalles de direction du vent peuvent être de 5°, 10°, 20° ou 30°
- On peut définir plusieurs intervalles de vitesse, par exemple on définit 3 classes de vent : vent faible inférieur à 3 m/s, vent moyen compris entre 3 et 7 m/s et vent fort supérieur à 7m/s. On calcule une rose des vents pour chaque classe de vitesse.
- On peut imposer une classe de stabilité, ou calculer une rose des vents par régime de stabilité.

Utilisation d'un scénario type

Il est possible de réaliser une étude d'impact en définissant un scénario de modélisation. Ce scénario peut représenter une situation météorologique pénalisante, on calcule ainsi la concentration que l'on peut obtenir dans un cas défavorable pour la dispersion.

Le scénario de modélisation peut aussi représenter une journée type. L'objectif est de représenter les fluctuations journalières moyennes de la météorologie. Cette méthode permet par exemple de représenter les cycles de vents thermiques. Généralement, on distingue les journées d'été et les journées d'hiver, les fluctuations météorologiques étant relativement dépendantes de la saison. La méthode pour déterminer les caractéristiques de la journée type est la suivante :

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

- A partir des données météo horaires d'une ou plusieurs années, on établit une rose des vents pour chaque heure de la journée. On peut éventuellement distinguer les journées d'hiver et les journées d'été.
- On affecte à chaque heure de la journée type la température moyenne de cette heure ainsi que la vitesse du vent moyenne et éventuellement la nébulosité et les précipitations moyennes.
- La direction du vent pour chaque heure est la direction privilégiée qui apparaît sur la rose des vents horaire.

Cette méthode permet d'étudier l'évolution du polluant sur une journée complète. Elle peut notamment permettre de modéliser les phénomènes d'accumulation de polluant d'une heure sur l'autre lorsque le vent est faible.

Le regroupement des sources

Certaines situations présentent plusieurs sources distinctes. Suivant la géométrie des sources, leurs positions les unes par rapport aux autres et la position des cibles, l'utilisateur peut choisir de regrouper les sources en une source ponctuelle équivalente. Mais cette hypothèse peut parfois induire des erreurs importantes dans les résultats (cf étude de sensibilité) et il est alors nécessaire de modéliser toutes les sources.

5.4. APPLICATION DE LA METHODOLOGIE D'ETUDE D'UN CAS REEL A L'USINE ATOFINA DE LA CHAMBRE

Dans cette partie, nous allons étudier le cas industriel de l'usine ATOFINA de la commune de La Chambre en Savoie. L'objectif de cette partie est de montrer une application de la méthodologie d'étude d'un cas réel que nous avons précédemment établie. Nous nous sommes efforcés autant que possible de suivre le plan de la méthodologie, mais l'étude des caractéristiques du site et l'inventaire des données disponibles sont liées. Ces deux partie ont donc été regroupées.

Nous proposons 3 solutions différentes pour modéliser la dispersion des polluants issue de l'usine. Nous analyserons les mises en œuvre de ces 3 solutions ainsi que les résultats obtenus.

5.4.1. DEFINITION DE LA SITUATION PHYSIQUE A MODELISER

5.4.1.1. Analyse du site et des phénomènes météorologiques locaux

Les coordonnées géographiques du site

L'usine ATOFINA de La Chambre a pour coordonnée 45.356°N et 6.298°E. Soit en coordonnées Lambert II, 910250 km selon x et 2047250 selon y.

L'occupation des sols

L'usine d'ATOFINA est située dans la vallée de la Maurienne en Savoie au bord de l'Arc et à proximité du village de La Chambre. L'environnement autour de l'usine est de type rural (alternance de champ ouvert, de village et de forêt). Il n'y a pas de variation notoire de l'occupation des sols au voisinage du site. L'environnement de type rural au voisinage de l'usine est modélisé par une rugosité de 0.5m, un albédo de 0.18 et un rapport de Bowen de 0.5. Ces grandeurs sont uniformes sur toute la zone. Ces valeurs ont été choisies arbitrairement d'après les valeurs proposées par l'USGS pour ce type d'occupation des sols.

La topographie du site

Présence de relief « important » autour du site.

L'usine est située dans une vallée alpine très encaissée, avec des sommets de plus de 2000m d'altitude à moins de 3 km du site.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



906000 907000 908000 909000 910000 911000 912000 913000 914000 915000 916000

Figure 149 : le relief autour du site de La Chambre

La modification de l'écoulement par des effets dynamiques

Le vent dans la vallée est canalisé par le relief et dépend peu du vent synoptique en altitude.

• La modification de l'écoulement par des effets thermiques

Des brises thermiques peuvent apparaître en fonction de l'ensoleillement .Au cours de la journée, l'ensoleillement dans la vallée échauffe les couches d'air à proximité du sol. L'air en altitude est beaucoup plus froid. Il se crée une circulation d'air : l'air chaud s'élève en remontant l'axe de la vallée.

Nous possédons les données de relief de l'IGN, avec une précision de 50m.

Présence d'obstacles au voisinage du site

La cheminée de rejet des polluants est haute de 47 m. elle n'est pas soumise à l'influence des bâtiments de l'usine. Aucun obstacle autour du site n'est susceptible de perturber l'écoulement.

5.4.1.2. La nature des polluants

Le rejet étudié est un rejet de SO₂ ou de NO₂. On ne tient pas compte des éventuelles réactions chimiques du gaz avec l'atmosphère. On considère que le polluant étudié est un gaz inerte de même masse volumique que l'air.

196/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5.4.1.3. Les caractéristiques du rejet

Rejet chaud avec une vitesse d'éjection pouvant induire une surhauteur

Le polluant est issue d'une cheminée de 47.5m de hauteur et ayant un diamètre de 1.5m. On modélise cette source comme une source ponctuelle. La température de rejet est de 224.15°C et la vitesse d'éjection des gaz est de 13.75 m/s. le rejet va dons être soumis à des phénomènes de surhauteur élevée dont il faudra tenir compte.

Le débit de polluant

Le débit de polluant est de 8.51 g/s en moyenne.

Modulation des caractéristiques du rejet

Nous ne disposons pas des données de modulation de ces caractéristiques d'émission. Le rejet est supposé constant.

5.4.1.4. La météorologie

Les données météorologiques dont on dispose, sont d'une part des mesures Météo France issues de la station de mesure de Sainte Marie de Cuines située à 2km de l'usine. Ces données sont disponibles toutes les heures sur 3 années : 2000, 2001 et 2002. Les mesures de la station de Ste Marie de Cuines concernent le vent à 10m avec une précision de 1m/s pour le module et une précision de 10 degrés pour la direction ainsi que la température sous abri avec une précision de 0.1°C.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 150 : localisation de l'usine et de la station Météo France

D'autre part, nous possédons les données issues du modèle ALADIN de Météo France. Ces données sont disponibles toutes les 6 heures sur 3 années : 2000, 2001 et 2002. Elles concernent le vent en vitesse et en direction, la température et l'humidité relative pour différents niveaux de pression : 1000hpa, 950 hpa, 925 hpa, 900 hpa, 850 hpa, 800 hpa, 700 hpa, 600 hpa, 500 hpa, ainsi que la couverture nuageuse en oktas.

198/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5.4.1.5. Analyse climatologique

Les données mesurées par Météo France à Ste Marie de Cuines

L'analyse des roses des vents pour les années 2000, 2001 et 2002 (Figure 151 Figure 152 Figure 153) nous permet de faire les remarques suivantes. Les vents dominants dans la vallée sont orientés dans l'axe principal de la vallée, c'est-à-dire dans les directions nord-ouest et sudest. Il apparaît aussi des vents dans la direction sud-ouest. On remarque également que les vents forts (supérieur à 7m/s) apparaissent essentiellement dans la direction sud-est.

D'autre part, les situations de vents faibles sont très fréquentes, on comptabilise plus de 8000 heures avec un vent nul pour les 3 ans ; soit environ 1/3 du temps.





Figure 151 : rose des vents à Ste Marie de Cuines pour l'année 2000





Figure 153 : rose des vents à Ste Marie de Cuines pour l'année 2002



Figure 156 : été 12h-17h

Figure 157 : été 18h-23h

On remarque que pendant les mois d'été, le vent est majoritairement orienté au Nord-ouest pendant les heures les plus chaudes (12h-17h). L'air qui s'échauffe remonte la vallée. Il se crée donc un vent moyen (compris entre 3 et 7m/s) orienté au Nord-ouest. Pendant les heures de nuit, le vent est plus faible il n'a pas vraiment d'orientation privilégiée.



201/228



Pour les mois d'hiver, on remarque que les vents de sud-est sont légèrement majoritaires pendant les heures de nuit et les vents de Nord-ouest sont plus fréquents le jour.

La vallée est donc bien soumise à un régime de vent de type thermique. Avec les modèles actuels, ces régimes de vents sont assez difficiles à modéliser à l'échelle du site de la Chambre. Il faudrait plusieurs points de mesures pour connaître plus précisément le champ de vent dans la vallée.

202/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Les données du modèle ALADIN

Les données du modèle ALADIN correspondent à un point situé au nord de l'usine. Si on s'intéresse au vent pour un niveau de pression de 1000 hPa, ce qui correspond à quelques mètres au dessus du sol, on remarque que les vents sont orientés majoritairement Nord-ouest et Sud-est (Figure 162). Pour une pression de 800 hpa, les vents sont encore orienté dans l'axe de la vallée, mais les vents d'ouest sont plus fréquents (Figure 163). Pour une pression de 500hpa, ce qui correspond à une altitude de 5000m, les vents sont orientés entre le sud-ouest et le nord-ouest (Figure 164). Le vent en altitude et le vent dans la vallée sont décorrélés. Le vent dans la vallée n'est donc pas déterminé par un courant à grande échelle mais bien par des phénomènes locaux comme les brises thermiques.





Figure 162 : rose des vents ALADIN pour le niveau 1000 hPa





Figure 164 : rose des vents ALADIN pour le niveau 500 hPa

203/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Pour pouvoir exploiter au mieux les données du modèle ALADIN, on étudie la corrélation entre le modèle et les mesures. Pour tous les vents ALADIN au niveau 1000 hPa et au niveau 500 hPA compris entre 300 et 360 degrés puis entre 120 et 180 degrés, on compte les fréquences d'occurrence des vents mesurés à Ste Marie de Cuines dans toutes les directions (Figure 165).



Figure 165 : Corrélation entre le vent modélisé à 1000hpa ayant une direction comprise entre 300 et 360 et les mesures

On remarque que les vents mesurés sont majoritairement dans la direction nord-ouest. Cependant, il apparaît un nombre non négligeable de cas où le vent est orienté sud-ouest.

204/228

Vent nul = 588 heures

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 166 : Corrélation entre le vent modélisé à 1000hpa ayant une direction comprise entre 120 et 180 et les mesures

Les vents mesurés sont majoritairement nuls ou orientés sud-est.



Figure 167 : Corrélation entre le vent modélisé à 500hpa ayant une direction comprise entre 180 et 270 et les mesures

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 168 : Corrélation entre le vent modélisé à 500hpa ayant une direction comprise entre 280 et 360 et les mesures

Les directions privilégiées qui apparaissent dans les deux cas (Figure 167et Figure 168) sont les directions nord-ouest et sud-est, c'est-à-dire les directions qui apparaissent sur la rose des vents globale du capteur de Sainte-Marie de Cuines. Il n'y a donc pas de corrélation évidente entre le vent à grande échelle et le vent au niveau du sol.

Les données d'ALADIN concernant la couverture nuageuse sont disponibles tous les jours des 3 années toutes les 6 heures. Nous avons effectué ensuite une interpolation de ces données pour déterminer la couverture nuageuse pour toutes les heures. Les données de vent sont plus difficiles à exploiter : le modèle ADMS ne permet d'utiliser les données météorologiques de plusieurs stations. Pour tenir compte des deux informations, celle du modèle Aladin et celle de la station de mesures, il faudrait faire une interpolation « à la main » des données mesurées à Ste Marie de Cuines et des données d'ALADIN ce qui n'a pas beaucoup de sens.

206/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5.4.2. APPLICATION DE PLUSIEURS MODELES DE DISPERSION AU CAS INDUSTRIEL ATOFINA

5.4.2.1. Le choix du modèle

Pour illustrer les différences de mise en œuvre des modèles de dispersion, nous avons utilisés 3 modèles différents et 3 approches de modélisations différentes.

- Le modèle de panache gaussien ADMS.
- Le modèle lagrangien SPRAY couplé avec le modèle météorologique diagnostique MINERVE.
- Le modèle eulérien HERMES couplé avec le modèle météorologique diagnostique MINERVE.

Nous présentons dans les parties suivantes les hypothèses qui ont été retenues pour chacun des modèles en fonction de ses capacités ainsi que les choix de mise en œuvre de ces modèles. Nous présentons aussi les résultats obtenus en terme de concentration moyenne.

5.4.2.2. Application du modèle ADMS

Le modèle ADMS est un modèle de panache gaussien. Il est donc très rapide et permet d'étudier 3 ans de données météorologiques séquentielles dans un temps raisonnable (environ 1h). Pour modéliser l'usine ATOFINA du site de La Chambre, nous avons retenu les options suivantes

- La description du site
 - Nous nous sommes limités à la partie plate autour de l'usine. Les limites de la zone d'étude sont donc 909000 km et 913000 km dans la direction est-ouest et 2044500 km et 2049000 dans la direction nord-sud. La cheminée de l'usine est située au point de coordonnées 910250, 2047250.
 - La latitude moyenne du domaine est de 45.3°N
 - La rugosité du site est uniforme et égale à 0.5m
- La description de l'écoulement
 - Les mesures météorologiques utilisées sont les mesures de vent et de température à la station de Ste Marie de Cuines pour les années 2000, 2001 et 2002.
 - Pour le calcul de la stabilité, on détermine la couverture nuageuse à partir des données en altitude issues du modèle ALADIN.
 - Nous avons choisi de ne pas activer l'option d'ADMS qui permet de prendre en compte le relief. En effet, le modèle FLOWSTAR d'ADMS qui permet de calculer l'écoulement en présence de relief ne peut s'appliquer que dans le cas d'un relief simple. La vallée encaissée de la Maurienne est un relief trop marqué avec des pentes trop fortes pour pouvoir être modélisée par FLOWSTAR. Nous avons donc limité l'étude à la zone plate de la vallée et nous avons supposé que les mesures météorologiques de Ste-Marie de Cuines étaient représentatives du vent dans toute la zone. Cette approximation est très grossière, mais elle est plus raisonnable que l'utilisation du modèle d'écoulement FLOWSTAR en dehors de son cadre d'application.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

- Il n'est pas possible de prendre en compte les vents calmes avec le modèle ADMS ; la valeur minimale du vent à 10m étant de 0.75m/s. Or les heures de vent calmes sont très nombreuses (environ 1/3 des heures dans la série météorologique) on ne peut donc pas les négliger. Pour chaque heure de vent calme, nous avons forcé le vent à 1m/s et nous avons calculé la concentration pour 18 directions de vent. On moyenne ensuite la concentration de ces 18 calculs. Cette hypothèse revient à dire que les situations de vents nuls sont en fait des situations de vents faibles mais tournants.
- La description du rejet
 - La source est modélisée comme une source ponctuelle de hauteur égale à la hauteur de la cheminée (47.5 m) et de diamètre égal à 1.51m.
 - Le modèle est renseigné sur la température et la vitesse du rejet afin d'effectuer un calcul de surhauteur.
 - > Le modèle tient compte du blocage des polluants par la couche limite
 - Il n'y a pas de calcul des dépôts au sol ni des réactions chimiques avec l'atmosphère.

Le choix de la mise en œuvre du problème

Indépendamment du choix du modèle et des options de modélisation, l'utilisateur doit déterminer une méthode pour traiter son problème.

• Le traitement de la statistique temporelle

Les bonnes performances d'ADMS en terme de temps de calcul nous permettent d'étudier ce cas en utilisant 3 années de météorologie de façon séquentielle. En revanche, nous ne connaissons pas la modulation temporelle des caractéristiques des émissions, nous avons donc considéré les données moyennes pour le débit de la source, ainsi que pour la température et la vitesse du rejet.

• Les grandeurs à calculer

Deux modes de calcul sont disponibles dans ADMS, pour les calculs à court terme le logiciel stocke la concentration pour toutes les heures de la séquence, le nombre d'heure étant limité. L'utilisateur peut ensuite traiter les résultats comme il le souhaite pour calculer la concentration moyenne ou les percentiles. Pour un calcul à long terme, le logiciel stocke uniquement la concentration moyenne et les percentiles sur tout le domaine. Nous avons choisi cette deuxième solution. Cependant, notre méthode de calcul des situations de vents calmes ne nous permet pas de calculer les percentiles. Pour chaque situation de vent calme, il faudrait stocker la concentration calculée pour les 18 directions de vent et en faire la moyenne puis intégrer ces résultats à l'ensemble des résultats de concentration pour toutes les heures des 3 années étudiées. Ensuite il serait possible de calculer « à la main » les percentiles. Cette opération est très fastidieuse et le stockage des résultats du calcul ADMS pour chaque heure est très coûteux en place mémoire, nous nous intéresserons donc uniquement à la concentration moyenne au sol (Figure 184).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 169 : concentration moyenne ($\mu g/m^3$) obtenue à partir de 3 années de météorologie

Le résultat du calcul ADMS (Figure 169) montre que les niveaux de concentration moyens sont relativement faibles (inférieur à 3 μ g/m3). Les panaches sont orientés dans l'axe principal de la vallée. Conformément à la rose des vents. Il est important de noter que la concentration à proximité de la source est très faible, ceci est dû au fait que la cheminée est assez haute et que la surhauteur est importante. Le panache atteint donc le sol loin de la source.

L'hypothèse du champ de vent uniforme dans la vallée n'est pas satisfaisante. La météorologie mesurée à Ste Marie de Cuines est certainement assez proche de la météo du site industriel, mais l'écoulement est modifié au voisinage des reliefs. Cette hypothèse nous oblige aussi à étudier uniquement la zone plate autour du site ; or l'impact de l'usine est non négligeable sur une zone plus étendue qui prend en compte les reliefs. En effet, dans les situations stables, le panache s'élève au dessus de la source par des effets de surhauteur et il se disperse très peu. La concentration au sol sur la zone plate autour de la source est donc très faible mais lorsque le panache atteint le relief sur la ligne de niveau correspondant à l'altitude du panache, la concentration est forte. Or, le modèle ADMS ne permet pas de créer un maillage au sol qui suive le relief sans activer le modèle d'écoulement. Pour calculer l'impact sur une zone plus étendue tenant compte des reliefs, il aurait fallu préciser « à la main » des récepteurs permettant de simuler le relief.

Enfin, le modèle ADMS ne permet pas de prendre en compte les éventuels effets d'accumulation de polluant d'une heure sur l'autre lorsque le vent est calme.

208/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5.4.2.3. Application des logiciels MINERVE et SPRAY au cas réel de l'usine de La Chambre

Le modèle SPRAY est un modèle lagrangien. Les temps de calcul étant relativement longs, il ne permet pas d'étudier 3 ans de données météorologiques séquentielles dans un temps raisonnable. Nous avons donc choisi de traiter ce cas réel par deux méthodes : d'une part par une approche statistique à partir d'une rose des vents et d'autre part en étudiant une journée caractéristique. Pour modéliser l'usine ATOFINA du site de La Chambre, nous avons retenu les options suivantes

- La description du site
 - Nous avons choisi un domaine d'étude intégrant le relief autour de l'usine. Les limites de la zone d'étude sont donc 906000 km et 916000 km dans la direction est-ouest et 2042000 km et 2052000 dans la direction nord-sud. La cheminée de l'usine est située au point de coordonnées 910250, 2047250.
 - La rugosité du site est uniforme et égale à 0.5m, l'albédo est pris égal à 0.18 et le rapport de Bowen est égal à 0.5.
- La description de l'écoulement
 - Le modèle MINERVE effectue une interpolation des données météorologiques en fonction du relief puis le modèle ajuste le champ de vent pour répondre à la condition de conservation de la masse. En fonction de la stabilité, la modification de l'écoulement par le relief n'est pas le même. Pour renseigner le modèle sur la stabilité, on impose un coefficient alpha. Ce coefficient est égal à 1 dans les situations instables et neutres et il est égal à 0.05 dans les situations stables.
 - On renseigne le modèle MINERVE avec les données météorologiques mesurées à Ste Marie de Cuines. Le profil vertical du vent est un profil log pour une rugosité au sol de 0.5m. le profil de température est un profil linéaire, le gradient dépend de la stabilité.
 - Théoriquement, le modèle SPRAY permet de prendre en compte les vents \geq calmes. Lorsque le champ de vent est nul sur le domaine d'étude, le résultat du calcul de dispersion montre un panache qui s'élève au dessus de la source et donc une concentration nulle au sol. Cette solution ne nous paraissait pas satisfaisante. En réalité, lorsque le vent est nul au niveau du sol, deux situations peuvent se produire : le panache s'élève et lorsqu'il atteint une certaine altitude, le vent n'est plus nul et le panache se disperse, ou encore, le panache s'élève et il atteint le sommet de la couche d'inversion qui forme un couvercle infranchissable au dessus de la vallée. Le panache se diffuse lentement et le polluant s'accumule. Ces deux situations sont difficiles à reproduire. Pour modéliser les situations de vent calme, nous avons imposé un vent à 10m de 0.2m/s, le profil vertical du vent est un profil de type log avec une rugosité de 0.5m. La température au sol est égale à la température moyenne annuelle et le profil de température est linéaire avec un gradient de -0.6°C par 100m. Le coefficient alpha est pris égal à 0.5. L'heure est prise égale à 8h. Nous avons calculé la concentration pour 36 directions de vent et nous avons calculé la concentration moyenne au sol en pondérant en fonction de la rose des vents globale.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

- La description du rejet
 - La source est modélisée comme une source ponctuelle de hauteur égale à la hauteur de la cheminée (47.5 m) et de diamètre égal à 1.51m.
 - Le modèle est renseigné sur la température et la vitesse du rejet afin d'effectuer un calcul de surhauteur. Le rejet est modélisé par un rejet de 2000 particules lagrangiennes émises toutes les 10 secondes.
 - > Le modèle tient compte du blocage des polluants par la couche limite
 - Il n'y a pas de calcul des dépôts au sol ni des réactions chimiques avec l'atmosphère.

Le choix de la mise en œuvre du problème : l'approche statistique

Indépendamment du choix du modèle et des options de modélisation, l'utilisateur doit déterminer une méthode pour traiter son problème.

• Le traitement de la statistique temporelle

Le modèle SPRAY étant coûteux en temps de calcul, nous avons choisi d'étudier le cas de l'usine ATOFINA par une approche statistique.

Nous avons utilisé le calcul météo d'ADMS pour établir une classification des situations météorologiques. Nous distinguons 4 situations :

- Les vents calmes
- Les situations stables (1/Lmo>0.01)
- Les situations neutres(-0.01<1/Lmo<0.01)
- Les situations instables (1/Lmo<-0.01)

Nous avons donc établi les trois roses des vents pour ces différents régimes et nous avons calculé la dispersion pour chaque situation de stabilité et pour 36 directions de vent. La vitesse du vent étant égale à la moyenne des vitesses pour chaque situation. Les mesures météorologiques utilisées sont les mesures de vent et de température à la station de Ste Marie de Cuines pour les années 2000, 2001 et 2002

Les scénarios de modélisation pour MINERVE ont été établis de la façon suivante :

- Pour les situations stables, le vent à 10 m est égal à 1.3m/s et le profil vertical du vent est un profil de type log avec une rugosité de 0.5m. la température au sol est égale à la température moyenne annuelle et le profil de température est linéaire avec un gradient de 0.6° par 100m. le coefficient alpha est pris égal à 0.05. L'heure est prise égale à 1h.
- Pour les situations neutres, le vent à 10 m est égal à 4.3m/s et le profil vertical du vent est un profil de type log avec une rugosité de 0.5m. La température au sol est égale à la température moyenne annuelle et le profil de température est linéaire avec un gradient de 1° par 100m. le coefficient alpha est pris égal à 1. l'heure est prise égale à 8h.
- Pour les situations instables, le vent à 10 m est égal à 1.4m/s et le profil vertical du vent est un profil de type log avec une rugosité de 0.5m. la température au sol est égale à la température moyenne annuelle et le profil de température est linéaire avec un gradient de -1.2°C par 100m. Le coefficient alpha est pris égal à 1. L'heure est prise égale à 13h.

Le modèle SPRAY est utilisé avec la méthode de calcul de turbulence TURKEY niveau 1, les fichiers « cromet » qui permettent de déterminer les paramètres de stabilité comme la hauteur de la couche limite ou la longueur de Monin Obukhov sont établis de telle sorte qu'ils définissent des situations stables, instables ou neutres.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Pour intégrer les heures de vents calmes, nous avons comparé 2 méthodes. D'une part, on considère que pour les heures de vent calme, le vent est effectivement nul et le panache de polluant monte et ne retombe pas sur le sol. La contribution des heures de vent calme est donc nulle. D'autre part, on considère que les vents calmes sont des vents de module faible mais tournant, la répartition des directions étant la même que celle de la rose des vents et on intègre la contribution de ces vents faibles à la concentration. Ces deux méthodes donnent des résultats sensiblement identiques. En effet dans le cas où on impose un écoulement nul, le panache de polluant monte et n'atteint jamais le sol, la concentration pour ces cas est donc nulle. Dans le cas où le vent est faible, mais tournant, le panache s'élève aussi et la concentration au sol au bout d'une heure est très faible. Il aurait fallu calculer la concentration au bout de 4 heures pour voir l'impact au sol, ce qui n'a pas de sens dans notre approche statistique.

• Les grandeurs à calculer

L'utilisation de données statistiques ne permet pas de calculer les percentiles. Nous avons donc calculé uniquement la concentration moyenne au sol sur tout le domaine.

°OC 0.2 2042000-909000 910000 911000 912000 913000 914000 915000

Présentation des résultats

Figure 170 : concentration moyenne au sol ($\mu g/m^3$)

On remarque que la concentration dans la vallée est faible mais que des zones d'accumulation apparaissent sur les reliefs notamment au fond de la vallée au Nord-est de l'usine. Ces zones de fortes concentrations sont dues aux situations stables où le panache s'élève de plusieurs mètres au dessus de l'usine par des effets de surhauteur et où il est transporté par l'écoulement sans beaucoup se disperser. Le panache impacte ensuite le relief. Ces résultats sont très différents de ceux obtenus avec ADMS, les niveaux de pollution moyens sont beaucoup plus élevés.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

On voit apparaître 3 panaches principaux correspondants aux axes de la vallée, mais dans ces lobes, les niveaux de concentration sont plus faibles qu'avec ADMS. Les points sensibles ayant des concentrations élevées sont situés loin de la source dans les zones de relief.

Le choix de la mise en œuvre du problème : exemple d'une journée type

La méthode que nous avons utilisée précédemment permet d'évaluer une moyenne statistique de la concentration de polluant sur la zone, mais cette moyenne est calculée en découplant les heures les unes des autres et ne permet pas de prendre en compte des effets d'accumulation de polluant d'une heure sur l'autre.

• Le traitement de la statistique temporelle

Nous avons donc choisi d'étudier une journée caractéristique pour observer ces phénomènes d'accumulation et décrire de manière plus réaliste la dispersion du polluant dans la vallée. La journée que nous avons retenue est le 18 juillet 2000. Cette journée est caractéristique d'une journée d'été : la nuit, le vent est nul ou très faible et en journée au fur et à mesure que l'air s'échauffe un vent thermique remontant la vallée s'établit. Ce vent est modéré et atteint 7m/s à 16h.

Le champ de vent est calculé par Minerve en utilisant les mesures météorologiques de la station de Ste Marie de Cuines (Figure 171). De 0h à 7h, les conditions sont stables de 8h à 20h les conditions sont modérément instables. Et de 21h à minuit les conditions sont stables.



Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 171 : évolution des paramètres météorologiques mesurés à Ste-Marie de Cuines pour la journée du 18 juillet 2000

• Les grandeurs à calculer

Nous avons calculé la concentration en polluant heure par heure ainsi que la concentration moyenne sur la journée.

Présentation des résultats

Pour observer l'évolution du panache au cours de la journée, on s'intéresse à l'isosurface 10microg/m3 (Figure 172 à Figure 183). On note aussi la direction et la vitesse du vent mesuré à Ste-Marie de Cuines.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



214/228

916000

916000

916000

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .





Figure 180 : 18/07/2000 18h 2 m/s 2052000 2050000 2048000 Μ 2046000 2044000 2042000 914000 910000 916000 908000 906000 912000 Figure 182 : 18/07/2000 21h 2 m/s





215/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

À 1h, le vent est du sud et de 1m/s, les conditions sont stables donc le panache contourne le relief. Ensuite, il n'y a pas de vent jusqu'à 7 h. le polluant s'accumule puis à 7 h le vent est orienté à l'est et de vitesse 1m/s et la pollution se disperse petit à petit. À 9h, le vent thermique se lève et s'oriente au nord-ouest dans l'axe de la vallée. Il forcit petit à petit. Pendant toute cette période, le vent relativement fort entraîne les polluants loin de la source. Le soir, le vent mollit et s'oriente au sud-ouest puis à l'ouest. Les polluants vont donc se concentrer dans les vallées très encaissées vers St Martin sur La chambre.



Figure 184 : concentration moyenne ($\mu g/m^3$) pour la journée du 18 juillet 2000

On remarque sur cette journée (Figure 184) que la concentration peut-être très élevée sur certaines zones du fait de l'accumulation des polluants les heures où le vent est très faible. La concentration en moyenne annuelle obtenue avec la méthode statistique ne permettait pas de mettre en évidence de telles situations. Il est possible que le modèle SPRAY surestime les concentrations dans les zones où le polluant s'accumule (par exemple dans la vallée à l'est de l'usine). Cette vallée est très encaissée et le modèle MINERVE calcule un vent nul dans cette zone. Les particules vont donc être piégées dans cette zone et les concentrations calculées sont très élevées.
Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

L'utilisation des modèles MINERVE et SPRAY sur le cas réel de La Chambre est très intéressante car elle permet de calculer l'écoulement en fonction du relief et de suivre l'évolution du panache dans cet écoulement. Cependant, ne possédant qu'une mesure météorologique, la reconstitution diagnostique du champ de vent est assez aléatoire et nous n'avons aucun moyen de la valider. D'autre part, la vallée de La Chambre est soumise à des phénomènes de vent thermique que le modèle MINERVE n'est pas capable de représenter. Pour profiter pleinement des capacités des modèles MINERVE et SPRAY, il faudrait plusieurs points de mesures météorologiques au sol ainsi que des mesures des profils verticaux de vent et de température. Enfin, les temps de calcul du logiciel sont très longs :

- 30 minutes pour simuler une heure où le rejet est modélisé par 2000 particules émises toutes les 10 secondes.
- 10 heures pour simuler 24 heures où le rejet est modélisé par 1000 particules émises toutes les 10 secondes.

Il n'est donc pas envisageable de traiter un an de données de façon séquentielle.

5.4.2.4. Application des logiciels MINERVE et HERMES au cas réel de l'usine de La Chambre

Le modèle HERMES est un modèle eulérien. Les temps de calcul étant très longs, il ne permet pas de traiter 3 ans de données météorologiques de façon séquentielle, ni même de traiter une ou plusieurs roses des vents dans le temps qui nous était imparti. Nous avons donc choisi de traiter la journée type du 18 juillet 2000 et de comparer nos résultats à ceux de SPRAY.

- La description du site
 - Nous avons choisi un domaine d'étude intégrant le relief autour de l'usine. Les limites de la zone d'étude sont donc 906000 km et 916000 km dans la direction est-ouest et 2042000 km et 2052000 dans la direction nord-sud. La cheminée de l'usine est située au point de coordonnées 910250, 2047250. Le maillage choisi est un maillage régulier de 50 m de côté. Il y a donc 201*201 mailles et 25 niveaux verticaux. La taille de maille que nous avons choisie est inférieure aux tailles recommandées pour l'utilisation d'HERMES, mais cette taille est nécessaire pour décrire l'écoulement en fonction du relief.
 - La rugosité du site est uniforme et égale à 0.5m, l'évolution de la température au sol est fonction de la hauteur du soleil
- La description de l'écoulement
 - Le modèle MINERVE effectue une interpolation des données météorologiques en fonction du relief puis le modèle ajuste le champ de vent pour répondre à la condition de conservation de la masse. En fonction de la stabilité, la modification de l'écoulement par le relief n'est pas le même. Pour renseigner le modèle sur la stabilité, on impose un coefficient alpha. Ce coefficient est égal à 1 dans les situations instables et neutres et il est égal à 0.05 dans les situations stables.
 - On renseigne le modèle MINERVE avec les données météorologiques mesurées à Ste Marie de Cuines. Le profil vertical du vent est un profil log pour une rugosité au sol de 0.5m. le profil de température est un profil linéaire, le gradient dépend de la stabilité.
 - Le modèle de couche limite utilisé pour le calcul de la turbulence est le modèle de Louis.
 - Le modèle HERMES permet de prendre en compte les vents calmes.

218/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

- La description du rejet
 - La source est modélisée comme une source ponctuelle de hauteur égale à la hauteur de la cheminée (47.5 m) et de diamètre égal à 1.51m.
 - Le modèle est renseigné sur la température et la vitesse du rejet afin d'effectuer un calcul de surhauteur par la méthode de Briggs itératif.
 - > Le modèle tient compte du blocage des polluants par la couche limite
 - Il n'y a pas de calcul des dépôts au sol ni des réactions chimiques avec l'atmosphère.

Le choix de la mise en œuvre du problème

Indépendamment du choix du modèle et des options de modélisation, l'utilisateur doit déterminer une méthode pour traiter son problème.

• Le traitement de la statistique temporelle

Le modèle HERMES étant très coûteux en temps de calcul notamment sur un maillage ayant un pas de 50m (il faut 12h pour traiter une heure de météo), nous avons choisi d'étudier le cas de l'usine ATOFINA uniquement sur la journée du 18 juillet 2000 caractéristique d'une journée d'été.

• Les grandeurs à calculer

L'utilisation d'un scénario ne permet pas de calculer les percentiles. Nous avons donc calculé uniquement la concentration moyenne au sol sur tout le domaine.

Présentation des résultats

Pour observer l'évolution du panache au cours de la journée, on s'intéresse à l'isosurface $10\mu g/m^3$ (Figure 185 à Figure 196)

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



219/228

220/228





Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

On remarque que tout au long de la journée, le panache calculé par HERMES se comporte légèrement différemment de celui calculé par SPRAY. En effet, il s'étale plus et il monte moins haut. Après discussions avec ARIA Technologies, nous nous sommes aperçus que la méthode de calcul de surhauteur implémentée dans HERMES sous-estime la surhauteur du panache dans ce cas là. La concentration au sol est donc plus forte proche de la source dans le calcul réalisé avec HERMES. Nous avons comparé sur une heure le résultat du modèle SPRAY et le résultat du modèle HERMES en imposant comme hauteur de cheminée la hauteur réelle de la cheminée plus la surhauteur calculée par SPRAY. Les deux modèles donnent des résultats très proches. On aurait donc pu améliorer les résultats du modèle HERMES en corrigeant pour chaque heure la hauteur de la cheminée.



906000 907000 908000 909000 910000 911000 912000 913000 914000 915000 916000

Figure 197 : concentration moyenne au sol (μ g/m³) pour la journée du 18 juillet 2000

La concentration moyenne journalière (Figure 197) calculée par HERMES est assez élevée au voisinage de la source. Ceci est dû au fait que pour les heures de vent faible, la surhauteur étant plus faible que celle calculée dans SPRAY, le polluant s'accumule dans les mailles au voisinage du sol autour de la source. On obtient donc des niveaux de concentration élevés dans cette zone. D'autre part, on n'observe pas de zone d'accumulation de polluant dans la vallée à l'est de l'usine comme dans le résultat de calcul de SPRAY où les particules étaient piégées dans les zones où il n'y avait pas de vent.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

5.4.3. CONCLUSION SUR L'ETUDE DU CAS REEL DE L'USINE ATOFINA

Cette étude a permis de montrer que les résultats des 3 modèles utilisant des théories différentes sur un même cas réel sont très différents. Ne disposant pas de mesures de concentrations autour de l'usine, il n'est pas possible de dire si un modèle est meilleur qu'un autre. On peut cependant faire quelques remarques.

- Le champ de concentration moyen calculé par ADMS autour de l'usine est assez cohérent, mais l'impact de l'usine est certainement plus important sur les pentes des reliefs qui bordent la vallée où il apparaît des niveaux de concentration élevée avec les autres modèles. La méthode que nous avons adoptée ne permettait pas de voir ces impacts. L'activation de l'option relief d'ADMS pourrait permettre de calculer la concentration sur les reliefs, mais le champ de vent calculé alors par FLOWSTAR est incohérent et le champ de concentration est faussé.
- Les résultats obtenus avec SPRAY paraissent satisfaisants à condition que le champ de vent calculé par MINERVE soit correct. Or nous n'avons pas de moyen de vérifier la validité des résultats de MINERVE. Il faudrait pour cela d'autres mesures de terrain au sol et en altitude. Concernant les deux méthodes de calcul que nous avons utilisées, l'approche statistique à l'aide d'une rose des vents nous permet de calculer l'impact moyen de l'usine dans la vallée alors que l'approche par une journée type nous permet de modéliser les effets d'accumulation de polluant d'une heure sur l'autre et de connaître l'impact de l'usine pour une situation particulière.
- Les résultats obtenus avec HERMES sont assez différents des résultats obtenus avec SPRAY bien que le champ de vent utilisé soit le même pour les deux modèle. Nous avons remarqué que la méthode de calcul de surhauteur implémentée dans HERMES et la gestion des heures de vent nul, conduisent à surestimer la concentration au voisinage de la source. En effet, dans le calcul du modèle SPRAY, le panache s'élève au dessus de la source et le polluant s'accumule au dessus de la cheminée ; ce qui est un résultat plus physique. D'autre part, les panaches calculés par HERMES s'étalent plus que ceux calculés par SPRAY. Enfin les temps de calcul d'HERMES sont beaucoup plus longs que les temps de calcul de SPRAY.

Actuellement, il n'existe pas d'approche parfaitement satisfaisante pour décrire l'écoulement et la dispersion dans un site avec un relief très accidenté. Il faut donc être très vigilant quant à l'interprétation des résultats des modèles dans ce genre de situation.

223/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

6. CONCLUSION

L'utilisation des logiciels de dispersion atmosphérique ADMS, ARIA IMPACT et ARIA INDUSTRY a permis d'analyser les différentes théories de modélisation de la dispersion et de comprendre les enjeux de chacune de ces théories. L'étude de ces différents modèles a aussi montré qu'une bonne connaissance théorique des écoulements dans la couche limite atmosphérique et de la dispersion était indispensable pour utiliser correctement les modèles de dispersion.

L'étude de sensibilité a permis de comprendre les mécanismes de la dispersion atmosphérique et d'évaluer l'impact sur le calcul de la concentration des variations des paramètres d'entrée, notamment les conditions de rejet, les paramètres météorologiques et les caractéristiques du site industriel. L'étude de sensibilité a aussi montré les limites des différentes hypothèses simplificatrices dans les scénarios de modélisation.

L'étude des cas tests a permis d'une part d'approfondir la connaissance des modèles de dispersion et d'évaluer les performances des modèles sur deux situations simples et représentatives des études d'impact. Les modèles que nous avons étudiés donnent des résultats satisfaisants en moyenne sur les deux cas tests, mais la comparaison point par point des résultats des modèles par rapport aux mesures est très aléatoire. Cette étude a aussi montré l'importance de l'expérience de l'utilisateur dans la mise en œuvre d'un modèle de dispersion.

En ce qui concerne l'étude des cas réels, le méthodologie que nous avons mise en place en s'appuyant sur l'étude de sensibilité doit permettre à l'utilisateur de s'interroger sur l'influence des différents paramètres qui entrent en jeu dans la modélisation d'un cas réel et d'évaluer l'impact sur le résultat des différentes simplifications utilisées. Pour illustrer cette étude, nous avons étudié en détail un site industriel réel situé dans une zone de relief marqué. Nous avons étudié 3 démarches de modélisation :

- L'utilisation d'un modèle gaussien simple avec une météorologie représentative du site
- L'utilisation d'un modèle lagrangien couplé avec un préprocesseur météorologique qui permet de calculer un champ de vent tridimensionnel
- L'utilisation d'un modèle eulérien couplé avec un préprocesseur météorologique qui permet de calculer un champ de vent tridimensionnel.

Les 3 modèles donnent des résultats très différents et ne disposant pas de mesures de concentration sur le site, il est impossible de dire quel modèle donne les meilleurs résultats. D'autant plus que la complexité du site ne permet pas de se faire une idée intuitive de l'impact de l'usine dans la vallée. Cette étude a cependant permis de montrer les avantages et les limites de chaque méthode de modélisation en fonction des données que nous avions à notre disposition.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2ème partie : Evaluation des modèles .

7. ANNEXE : PRESENTATION DES RESULTATS DU MODELE HERMES SUR LES CAS TEST DE PRAIRIE GRASS ET D'INDIANAPOLIS

Nous présentons en annexe les résultats du modèle eulérien HERMES sur les cas tests de Prairie Grass et d'Indianapolis. Ces cas tests sont en dehors du cadre d'application classique du modèle. Les résultats du modèle sont donc très différents des mesures. Ces résultats présentent un exemple des erreurs que l'on peut commettre en utilisant un modèle en dehors de son champ d'application. Un autre modèle eulérien plus adapté à l'échelle de ces cas tests aurait peut-être donné de très bons résultats, malheureusement, nous n'avons pas eu l'occasion de travailler avec un autre modèle.

7.1.

ELABORATION DES SCENARIOS POUR LE CAS TEST DE PRAIRIE GRASS AVEC LE MODELE HERMES ET PRESENTATION DES RESULTATS

Pour construire les fichiers de données météorologiques nécessaires au fonctionnement de HERMES, nous avons utilisé le modèle diagnostique MINERVE. Le relief du site de Prairie Grass étant plat, le modèle effectue uniquement une interpolation des mesures de vent et de température sur un maillage horizontal avant un pas de 20m et un maillage vertical de 50 niveaux verticaux. Le sommet du domaine de calcul est de 500m et la hauteur du premier niveau vertical est de 5m. Le modèle MINERVE effectue un calcul de la hauteur de la couche limite avec la méthode METPRO évolutive. Ne possédant pas les données météorologiques des journées complètes de chaque expérience, nous avons construit les fichiers de chronologies météorologiques en imposant la valeur de la température et de la nébulosité de l'heure de l'expérience.

Le modèle de turbulence utilisé dans HERMES est le modèle d'O'Brien.

Les concentrations au sol sont stockées toutes les 5 minutes. Pour effectuer les calculs statistiques, nous avons utilisé les concentrations calculées au bout de 10 minutes, mais dans les situations où le vent est inférieur à 2 m/s, pour les récepteurs situés à 800m de la source, nous avons utilisé les concentrations calculées à 15 minutes. Les paramètres statistiques ont été calculés pour le maximum de concentration sur l'arc à partir des 68 expériences.(Tableau 38)

Model	Mean	Std	FB	FS	NMSE	R	FAC2
PG	2.19	3.86					
HERMES	0.25	0.19	1.59	1.82	17.13	0.68	0.21

Tableau 38 : paramètres statistiques pour le modèle HERMES

Les résultats obtenus avec le modèle HERMES sont très en dessous des mesures. La moyenne des concentrations modélisées est de 0.25 alors que la moyenne des concentrations mesurées est de 2.19. D'autre part, l'écart-type sur les concentrations modélisées est faible : 0.19. Quelque soit les conditions de l'expérience, la concentration maximale ne dépasse jamais 1 et les écarts entre les situations stables et les situations instables sont faibles.

partie : Evaluation des modèles .

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème}





On remarque sur la Figure 198 que dans les situations stables et neutres, le modèle HERMES sous-estime les concentrations pour tous les récepteurs. Dans les situations instables, le modèle sous-estime les concentrations au voisinage de la source (moins de 200m) et les surestime quand on s'éloigne de la source.

Conclusion

Le modèle HERMES sous-estime très largement les concentrations sauf dans les situations instables loin de la source. Nous avons essayé d'améliorer les résultats en calculant un profil de vent pour Minerve correspondant à la classe de stabilité de l'expérience afin d'améliorer le calcul de turbulence, mais les résultats ont été très peu modifiés. Dans le modèle, la diffusivité horizontale ne dépend pas des conditions de stabilité, mais uniquement des caractéristiques du maillage et de la topographie. On parle de diffusivité numérique. Il est fort possible que cette modélisation ne soit pas adaptée au problème de Prairie Grass où les récepteurs sont très proches de la source. D'autre part, l'utilisation d'un maillage ayant un pas de 20m dépasse largement le cadre d'utilisation du modèle.

225/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

7.2. ELABORATION DES SCENARIOS POUR LE CAS TEST D'INDIANAPOLIS AVEC LE MODELE HERMES ET ANALYSE DES RESULTAS

Pour construire les fichiers de données météorologiques nécessaires au fonctionnement de HERMES, nous avons utilisé le modèle diagnostique MINERVE. Le relief du site d'Indianapolis étant plat, le modèle effectue uniquement une interpolation des mesures de vent et de température sur un maillage tridimensionnel. Pour diminuer les temps de calculs, nous avons choisi 2 maillages horizontaux en fonction de la position des récepteurs. Le premier maillage ayant un pas de 100m sur l'horizontal et un maillage vertical de 50 niveaux verticaux, le deuxième maillage ayant un pas de 200m sur l'horizontal et un maillage vertical de 50 niveaux. Le sommet du domaine de calcul est de 600m et la hauteur du premier niveau au dessus du sol est de 10m. La longueur de rugosité est de 1m.

Le modèle de couche limite utilisé dans HERMES est le modèle de Louis. La hauteur de la couche limite est renseignée par l'utilisateur à partir des données présentes dans la base de données du cas test.

Le rejet de SF6 étant chaud et dynamique, le modèle calcule les surhauteurs par la méthode de Briggs.

Les concentrations au sol sont stockées toutes les 25 minutes. Pour effectuer les calculs statistiques, nous avons utilisé les concentrations calculées au bout de 50 minutes.

Les calculs statistiques ont été réalisés sur les maximums de concentration sur les arcs pour les résultats de toutes les expériences de qualité 2 et 3.

Model	Mean	Std	FB	FS	NMSE	R	FAC2
INDI	257.78	221.58					
HERMES	1414.91	8927.18	-1.38	-1.90	181.04	0.04	0.11

Tableau 39 : paramètres statistiques obtenus avec le modèle HERMES

227/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .



Figure 199 : comparaison des mesures et des résultats du modèle HERMES pour les concentrations maximales sur l'arc (attention, l'échelles des mesures est différente de l'échelle du modèle)

On remarque que le modèle HERMES surestime fortement les concentrations. Le nuage de point est très dispersé et la proportion de résultat dans un facteur 2 par rapport aux mesures n'est que de 10%.

Dans le modèle HERMES, les coefficients de diffusivité turbulente sont calculés à partir des données de vent et de température uniquement. Or nous ne possédons que 2 mesures pour chacune de ces variables, ce qui est très peu pour décrire les profils verticaux. Il est fort possible que les grands écarts entre les résultats du modèle et les mesures soient liés au manque d'information sur la météorologie.

228/228

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

8. **REFERENCES**

8.1. SCIENTIFIQUES

A. Albergel, 2004, A. Fresneau, J Moussafir, Operational on-line modelling tool: evaluation of the three most common techniques (Gaussian puff, Eulerian and Lagrangian). Application on Fos-Berre data

American Society for Testing and Materials, 2000. Standard Guide for Statistical Evaluation of Atmospheric Dispersion Model Performance (D 6589), (Available at <u>http://www.astm.org</u>), 100 Barr Harbor Drive, PO Box C700, West Conshohocken, PA 19428, 17 pages.

Briggs G.A, 1973, Diffusion estimation for small emission, ATDL 79 Oak Ridge Tennessee USA.

Briggs G.A, Plume rise prediction, in : Lecture on air pollution and environmental impact analyses, Workshop Proceedings, Boston.

Barad, M.L. (Editor), 1958. Project Prairie Grass, A Field Program In Diffusion, Geophysical Research Paper, No. 59, Vol I and II, Report AFCRC-TR-58-235, Air Force Cambridge Research Center, 439 pp.

D.J. Carruthers, J.C.R. Hunt and W. Weng, 1988: Computational model of airflow over hills. FLOWSTAR I. Proc. Of Envirosoft. Computer Techniques in Environmental Studies, P. Zanetti, Ed., Springer Verlag.

A. DOURY Une méthode de calcul pratique et générale pour la prévision numérique des pollutions véhiculées par l'atmosphère, Rapport CEA R4280 (Rév. 1), 1976.

Hanna, S.R. and J.C. Chang, 1991: Modification of HPDM for Urban Conditions and Its Evaluation using the Indianapolis Data Set. Final Report Prepared for EPRI by EARTH TECH, 196 Baker Ave., Concord, MA 10742.

Haugen, D.A. (Editor), 1959. Project Prairie Grass, A Field Program In Diffusion, Geophysical Research Papers, No. 59, Vol. III, AFCRC-TR-58-235, Air Force Cambridge Research Center, 673 pp.

Hunt,C.R., S Leibovich and K.J. Richards, 1988: Turbulent shear flow over hills. Quart. J. Roy. Meteo. Soc., 114, 1435 to 1470.

McHugh, C.A., Carruthers, D.J., Higson, H. and S.J. Dyster 1999. Comparison of model evaluation methodologies with appilcation to ADMS 3 and US models, 6th international conference.on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Rouen, France, October 11-14, 1999.

Olesen, H.R. 1995. 'Data Sets and Protocol for Model Validation'. Workshop on Operational Short-range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assessment in Europe, Mol, Belgium, Nov. 1994, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 5, Nos. 4-6, 693-701.

Olesen, H.R. 1995. 'The model validation exercise at Mol : overview of results'. Workshop on Operational Short-range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assessment in Europe, Mol, Belgium, Nov. 1994, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 5, Nos. 4-6, 761-784.

Pasquill F, 1974, Atmospheric diffusion, 2nd ed. John Wiley and Sons, New York NY.

8.2. ADRESSES URL

ASTM

Site FTP Irwin

http://www.astm.org ftp://ftp.epa.gov/amd/asmd/irwin/