



HAL
open science

Étude de l'influence de la stratification atmosphérique dans la dispersion des polluants avec un logiciel de mécanique des fluides numérique

Fanny Coulon

► **To cite this version:**

Fanny Coulon. Étude de l'influence de la stratification atmosphérique dans la dispersion des polluants avec un logiciel de mécanique des fluides numérique. *Météorologie*. 2010. dumas-00600660

HAL Id: dumas-00600660

<https://dumas.ccsd.cnrs.fr/dumas-00600660>

Submitted on 15 Jun 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Rapport de Travail de Fin d'Etudes :

Etude de l'influence de la stratification atmosphérique sur la dispersion des polluants avec un modèle de mécanique des fluides numérique

Validation de Code_Saturne sur l'expérience Prairie Grass



Fanny COULON

Maître de stage : Bertrand CARISSIMO

6 Avril – 24 Septembre 2010

Remerciements

En tout premier lieu, je remercie Bertrand Carissimo, mon maître de stage, de m'avoir donné la chance d'effectuer ce travail de fin d'études à ses côtés et de m'avoir fait partager son expérience et son savoir-faire en environnement atmosphérique. Merci à vous de m'avoir ouvert les portes de ce vaste domaine.

Maya Milliez et Eric Gilbert ont fortement contribué à mon encadrement, technique ou non, et je tiens à les en remercier sincèrement.

Les conditions de travail exceptionnelles dont j'ai pu bénéficier durant ces six mois de stage doivent également beaucoup à l'accueil chaleureux et sympathique du groupe 'Météorologie Appliquée et Environnement Atmosphérique' d'EDF R&D, dont je remercie tout particulièrement le chef, Damien Bilbault.

Je me dois aussi de remercier le Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique et notamment son directeur adjoint, Luc Musson-Genon, qui m'offre la possibilité de prolonger cette formidable expérience par un poste d'ingénieur de recherche au CEREA.

Enfin, cette atmosphère si particulière n'aurait jamais été la même sans la belle brochette de stagiaires et thésard. Par ordre d'apparition dans mon bureau : le trio Eve, Julien et Herbert pour nos fous rires quotidiens, Mélanie et Solenne et enfin Cédric, pour ses sages conseils d'orientation. Je leur souhaite à tous un bon vent... mais qu'ils ne se dispersent pas trop loin !

Sommaire

INTRODUCTION	5
CHAPITRE 1 : PRESENTATION DU STAGE	6
I. LA STRUCTURE D'ACCUEIL	6
1. LE DEPARTEMENT MFEE DE EDF R&D	6
2. LE CEREА	7
II. LE SUJET D'ETUDE	7
1. INTITULE DE STAGE	7
2. LES ENJEUX DE L'ETUDE	7
a. La dispersion atmosphérique	7
b. La prise en compte de la stratification atmosphérique	8
c. La validation du logiciel Code_Saturne	9
d. Le choix de la campagne Prairie Grass	10
CHAPITRE 2 : MODELISATION DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE	11
I. LA DISPERSION DANS LA COUCHE LIMITE ATMOSPHERIQUE	11
1. ELEMENTS DE MICRO-METEOROLOGIE	11
a. Structure de l'atmosphère	11
b. Stabilité de l'atmosphère	12
2. LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE	13
a. Définition	13
b. Influence de la stratification thermique	13
II. MODELISATION DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE	14
1. LE MODELE DE PANACHE GAUSSIEN	14
a. Formulation de Briggs	15
b. Formulation de Doury	15
2. LE MODELE DE MECANIQUE DES FLUIDES NUMERIQUE : CODE_SATURNE ET SON MODULE ATMOSPHERIQUE	16
a. Une approche eulérienne	16
b. Une approche statistique	16
i. Les équations de Navier-Stokes en moyenne de Reynolds	17
ii. Le modèle de fermeture de la turbulence	18
iii. Anisotropie de la dispersion turbulente	20
c. Méthodes numériques	20

CHAPITRE 3 : ETUDE COMPARATIVE DE LA DISPERSION SUR TERRAIN PLAT EN CONDITION DE STRATIFICATION NEUTRE ET STABLE **21**

I. LA CAMPAGNE EXPERIMENTALE PRAIRIE GRASS	21
1. DESCRIPTION DE LA CAMPAGNE DE MESURES	21
2. DONNEES EXPERIMENTALES DISPONIBLES	21
a. Données mesurées	21
b. Données interprétées	22
II. MISE EN PLACE DES SIMULATIONS CODE_SATURNE	22
1. LE MAILLAGE	22
2. CONDITIONS DE REJET	23
3. LES CONDITIONS AUX LIMITES ET INITIALES	23
a. Les conditions aux limites	23
i. Conditions d'entrée	24
ii. Conditions de symétrie	26
iii. Conditions de paroi rugueuse	26
iv. Conditions de sortie	26
b. Les conditions initiales	26
4. PARAMETRES DE CALCULS	26
5. ANALYSE DES SIMULATIONS	27
a. Mesures	27
b. Indicateurs statistiques	27
III. RESULTATS ET DISCUSSIONS	29
1. CONDITIONS DE STRATIFICATION NEUTRE	29
a. Présentation d'un cas neutre : l'expérience 21	29
b. Etude globale des cas neutres	36
c. Conclusion	39
2. CONDITIONS DE STRATIFICATION STABLE	40
a. Présentation d'un cas stable : l'expérience 59	40
b. Etude globale des cas stables	45
c. Conclusion	49
3. CONCLUSIONS DE L'ETUDE ET PERSPECTIVES	49

CONCLUSION GENERALE **51**

BIBLIOGRAPHIE **52**

Introduction

Le présent rapport s'attache à décrire le stage de fin d'études effectué dans le cadre de mon double cursus à l'Ecole Centrale de Nantes. Il concerne tout à la fois l'option disciplinaire 'Hydrodynamique et Génie Océanique' et l'option professionnelle 'Recherche et Développement' du cursus ingénieur ainsi que le Master Recherche 'Sciences et Techniques des Environnements Urbains', en spécialité 'Atmosphère, Eau et Environnements Urbains'.

Dans une première partie, le cadre du stage sera dressé, à travers la présentation de la structure d'accueil, du sujet d'étude et de ses différents enjeux, tant dans le domaine de la dispersion atmosphérique que dans celui de la modélisation numérique.

Un état de l'art sera dans une seconde partie effectué, à travers les fondements théoriques de l'étude de la dispersion atmosphérique, sa modélisation par les modèles gaussiens et par le modèle de mécanique des fluides numérique Code_Saturne.

Enfin, ce champ de connaissances acquis, sera présentée l'étude comparative proprement dite de la dispersion atmosphérique de polluants sur terrain plat, en condition de stabilité atmosphérique neutre et stable. Nous reviendrons tout d'abord sur la campagne expérimentale Prairie Grass, qui servira de référence, puis sur la mise en place des simulations sous Code_Saturne. S'en suivront la présentation des résultats pour les cas de stratifications neutre et stable ainsi que les discussions associées.

Chapitre 1 : Présentation du stage

I. La structure d'accueil

Mon stage de fin d'études s'est déroulé au sein du département 'Mécanique des Fluides, Energie et Environnement' (département MFEE) d'EDF R&D, en partenariat avec le Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique (CEREA).

Mon maître de stage, Bertrand Carissimo, travaille pour ces deux entités au titre de chercheur senior d'EDF R&D et responsable de l'équipe 'Mécanique des fluides atmosphériques et modélisation de la qualité de l'air à petite échelle' au CEREA.

Du 6 avril au 24 septembre 2010, mon travail de fin d'études s'est déroulé sur le site d'EDF R&D de Chatou (78), en proche banlieue parisienne.

1. Le département MFEE d'EDF R&D

Créé en 1946 comme Etablissement Public à Caractère Industriel et Commercial (EPIC), le groupe Electricité De France (EDF) est une Société Anonyme à conseil d'administration depuis 2004. Leader mondial dans le domaine de l'énergie, son nouveau statut juridique lui permet d'élargir son offre commerciale au-delà de la simple fourniture d'électricité. De multiples sources d'énergie sont dorénavant exploitées, l'accent étant mis sur la filière nucléaire (87.1% de la production d'EDF en France) et sur les énergies renouvelables, notamment à travers sa filiale EDF Energies Nouvelles.

La filière 'Recherche et Développement' d'EDF vise à contribuer à la performance opérationnelle de tous les métiers du groupe. En particulier, son département 'Mécanique des Fluides, Energie et Environnement' fournit au sein du groupe les appuis techniques au développement, à la conception et à l'exploitation des moyens de production actuels et futurs (nucléaire, thermique, hydraulique, énergies renouvelables) ainsi que les moyens de stockage de ces énergies.

Le groupe 'Météorologie Appliquée et Environnement Atmosphérique' du département MFEE, composé d'une vingtaine de chercheurs permanents, est divisé en deux domaines d'activités.

La première équipe étudie les impacts de l'environnement sur les activités d'EDF. Leurs principales thématiques concernent ainsi la prévision des conditions météorologiques en vue de l'optimisation de la production d'énergie, en termes de réponse à la demande énergétique et de conditions d'exploitation des unités de production (conditions de température pour les centrales thermiques, conditions d'ensoleillement pour les sites de production d'énergie photovoltaïque, états de mer adaptés au système houlomoteur, etc.) ainsi que l'étude des impacts du réchauffement climatique sur les activités d'EDF.

L'équipe qui m'a accueillie durant mon stage s'intéresse cette fois-ci aux impacts, par la voie atmosphérique, des activités d'EDF sur l'environnement. L'accent est mis sur la modélisation

numérique à petite échelle de la dispersion des panaches issus des centrales de production ou encore sur la caractérisation de l'atmosphère en vue d'optimiser les rejets thermiques.

2. Le CEREAA

L'équipe 'Environnement Atmosphérique' d'EDF R&D appartient en partie au Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique (CEREAA). Créé en 2003, ce laboratoire est commun à EDF R&D et à l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (ENPC). Ses équipes sont localisées sur le site de l'ENPC de Champs sur Marne (77), sur le site d'EDF R&D de Chatou (78) ainsi que sur le site de Rocquencourt (78) de l'Institut National de Recherche en Informatique et Automatique (INRIA).

Les activités de recherche du CEREAA sont principalement axées sur trois grandes thématiques, toutes liées à la pollution atmosphérique :

- Les mesures expérimentales, la modélisation de l'atmosphère et de la dispersion à l'échelle locale
- La modélisation de la qualité de l'air (transport et chimie atmosphérique)
- L'assimilation de données et d'images et le développement des méthodes inverses

La valorisation de ces travaux de recherche passe notamment par l'utilisation des outils de modélisation du CEREAA (notamment Code_Saturne et Polyphemus) pour des études d'impacts, aussi bien pour les centrales thermiques ou nucléaires d'EDF que pour la modélisation du transport routier, ou encore pour la prévision de la qualité de l'air.

II. Le sujet d'étude

1. Intitulé de stage

Mon travail de fin d'études s'est concentré sur un sujet de recherche opérationnelle, visant à étudier l'influence de la stratification atmosphérique sur la dispersion des polluants avec le modèle de mécanique des fluides numérique Code_Saturne, développé par EDF.

L'objectif à terme est d'évaluer, au sein du modèle, l'impact de la paramétrisation de la stratification de l'atmosphère sur le champ de concentration moyen en polluants, et ainsi valider le modèle Code_Saturne en stratification neutre et stable, par comparaison avec les mesures relevées lors de la campagne expérimentale Prairie Grass (Barad, 1958).

2. Les enjeux de l'étude

a. La dispersion atmosphérique

La recherche sur la dispersion des polluants atmosphériques possède un historique relativement récent, détaillé dans (Hanna, 2010). Durant les années 1950 à 1960, les travaux étaient principalement dédiés aux applications militaires, traitant de la dispersion des rejets de bombes biologiques, chimiques ou nucléaires. Les années 80 et la mise en place de critères environnementaux et de santé publique ont alors orienté les recherches vers l'évaluation de la qualité de l'air. Au-delà des seules études d'impact,

le nouveau millénaire s'attache davantage aux études à micro-échelle, prenant en compte les effets radiatifs au sein des environnements urbains (Milliez, 2006) et en particulier au sein des rues-canyons. L'implication de plus en plus d'industriels dans la recherche atmosphérique n'est pas anodine. La directive européenne dite Seveso impose aux états membres de l'Union Européenne d'identifier les sites industriels présentant des risques d'accidents majeurs. Ils est notamment demandé aux industriels la réalisation d'études de danger pour identifier tous les scénarios possibles d'accident, d'évaluer leurs conséquences en termes de rejets atmosphériques et de mettre en place des moyens de prévention. La réglementation Seveso impose aussi aux industriels d'étudier les risques inhérents à la proximité de leurs installations avec d'autres sites industriels. L'objectif est de prévenir les effets 'domino', conséquences en cascade qui, à partir d'un accident sur un site provoquerait un autre accident sur un second site. Outre ces études de risques accidentels, les industriels sont aussi chargés d'évaluer les impacts à long terme des rejets atmosphériques issus des centrales thermiques, à flamme ou nucléaires.

A travers sa collaboration avec le CEREVA, le département R&D du groupe EDF, en améliorant la connaissance des mécanismes de dispersion et leur modélisation, permet ainsi la mise en place d'études de risques sur leurs sites industriels, de scénarios de gestion de crise et l'évaluation des impacts à long terme. Les efforts d'EDF se concentrent sur la réduction maximale de l'impact des centrales nucléaires, en particulier en termes de rejets atmosphériques. Bien que la production nucléaire d'électricité n'émette pas de CO₂, des accidents de type fusion du cœur, suite à une brèche dans le circuit d'eau primaire, ou rupture dans l'échangeur thermique, peuvent en effet être à l'origine d'émission de produits radioactifs dans l'atmosphère, avec des conséquences sanitaires et environnementales importantes.

b. La prise en compte de la stratification atmosphérique

La stratification stable ou instable de l'atmosphère est liée au fait que ni la température, ni la masse volumique de l'air ne sont alors homogènes sur la verticale. Bien qu'influençant la dilution des polluants dans l'atmosphère (*voir Chapitre 2, § I.1.b*), ce phénomène physique complexe est encore peu considéré, tant dans les modélisations numériques de type CFD qu'en soufflerie. Ceci s'explique, dans les deux cas, par le difficile maintien des conditions météorologiques propres à un état stratifié de l'atmosphère. Dans le domaine de la modélisation numérique, la prise en compte de la stratification atmosphérique seule a toutefois fait l'objet de nombreuses études, tendant à améliorer les résultats (Duynkerke, 1988), (Huser, 1997).

Certains modèles simplifiés de type panache gaussien paramétrisent aussi cette stratification atmosphérique, notamment les formulations de Briggs et de Doury (*voir Chapitre 2, § II.1.a*).

En ce qui concerne les études de dangers, le Ministère de l'Ecologie, de l'Energie, du Développement Durable et de la Mer préconise, pour des rejets au niveau du sol, de considérer des conditions atmosphériques de type D (neutre) et F (stable), respectivement associées à des vitesses de vent de 5 et 3 m/s à 10m du sol, conditions admises comme conduisant aux distances les plus pénalisantes pour ce type de rejets.

c. La validation du logiciel Code_Saturne

Les recherches appliquées sur la dispersion des polluants atmosphériques se sont rapidement tournées vers la modélisation numérique. Des moyens informatiques toujours plus performants ou encore la nécessité de reproduire les études sur de nombreux cas l'ont en effet privilégiée au détriment des méthodes expérimentales au réel ou en soufflerie. De nombreux modèles numériques ont ainsi été développés pour l'étude des écoulements atmosphériques, adaptés des modèles de mécanique des fluides classiques.

Code_Saturne est le logiciel généraliste de mécanique des fluides numérique développé par EDF depuis 1997 (Archambeau, F., & al., 2003). Logiciel libre¹, il est basé sur une approche en volumes finis co-localisés, acceptant différents types de maillages (structuré ou non, conforme ou non, etc.) composés de divers éléments (tétraèdre, hexaèdre, pyramide, etc.). L'étude présentée dans ce rapport concerne la version la plus récente du logiciel, Code_Saturne 2.0.0-rc1.

Modélisant les écoulements incompressibles ou dilatables, avec ou sans turbulence ou transfert de chaleur, il dispose de nombreux modules spécifiques lui permettant d'être utilisé au sein d'EDF par différents cœurs de métiers, de la combustion aux écoulements polyphasiques. Son module atmosphérique est notamment dédié aux 'spécificités' atmosphériques. Par la résolution des équations de Navier-Stokes et de l'équation d'advection-diffusion en moyenne de Reynolds, Code_Saturne permet ainsi l'accès aux caractéristiques de l'écoulement (vitesse et champs turbulents) et au champ moyen de concentration en polluants atmosphériques (*voir Chapitre 2, §II.2.b*).

L'utilisation d'un tel logiciel à des fins opérationnelles réclame cependant l'évaluation préalable de ses performances sur plusieurs expériences et sur plusieurs états atmosphériques. Cette démarche de validation, classique mais néanmoins nécessaire, permet ainsi de juger de la pertinence des résultats obtenus, par comparaison à des données expérimentales ou empiriques et *in fine*, de préciser les études d'impact. L'évaluation de Code_Saturne 2.0.0-rc1 par l'expérimental est au cœur du sujet du stage, à travers la reproduction du cas test de Prairie Grass, en particulier en condition de stratification stable, et la comparaison des résultats numériques obtenus avec les données expérimentales relevées (*voir Chapitre 3, §III*).

¹ <http://innovation.edf.com/recherche-et-communautaire-scientifique/logiciels/code-saturne/telechargements-45340.html>

d. Le choix de la campagne Prairie Grass

Bien que se déroulant durant l'été 1956, la campagne de mesures Prairie Grass fait encore aujourd'hui office de référence pour nombre d'études. Ceci tient notamment à l'ampleur des moyens techniques alors mis en œuvre et à la richesse de son jeu de données. L'exploitation de ces nombreuses mesures expérimentales fut en particulier à l'origine de formulations analytiques des écart-types de la dispersion atmosphérique (Briggs, 1973). Ces formulations spécifiques des modèles de panache gaussien, adaptées aux mesures expérimentales de Prairie Grass de par leur nature, seront utilisées pour mener l'évaluation de Code_Saturne.

S'assurer de la performance de Code_Saturne 2.0.0-rc1 en stratification neutre et stable par comparaison avec les soixante-huit expériences référencées dans la campagne Prairie Grass est donc un gage de qualité et de reconnaissance assuré au sein de la communauté scientifique. Cas test recommandé par la communauté scientifique² pour la validation de logiciels de CFD, il pourra être envisagé de comparer les résultats obtenus par Code_Saturne en stratification neutre et stable avec d'autres modèles numériques. En particulier, nous nous appuyons sur la thèse effectuée par Emmanuel Demaël au sein du laboratoire EDF R&D-CEREA et qui valida la précédente version de Code_Saturne, Mercure_Saturne, en stratification neutre par comparaison à la campagne expérimentale Prairie Grass (Demaël, 2007).

² www.harmo.org/kit/

Chapitre 2 : Modélisation de la dispersion atmosphérique

Cette partie du rapport est dédiée aux fondements physiques de la dispersion des polluants atmosphériques. Des éléments de micro-météorologie³ seront rappelés avant de caractériser la dispersion atmosphérique à travers ses processus physiques et l'influence de la stratification de l'atmosphère. Deux méthodes de modélisation de la dispersion atmosphérique seront enfin précisées, l'approche gaussienne et l'approche eulérienne utilisée dans Code_Saturne.

I. La dispersion dans la couche limite atmosphérique

1. Eléments de micro-météorologie

a. Structure de l'atmosphère

Le phénomène de dispersion atmosphérique des effluents industriels intervient au sein de la troposphère, couche la plus basse de l'atmosphère terrestre, dans une zone appelée couche limite atmosphérique. (Stull, 1988) la définit ainsi comme la partie de l'atmosphère directement influencée par la présence de la surface terrestre et répondant aux forçages induits à des échelles de temps de l'ordre de l'heure. Zone en constante évolution, elle représente en moyenne 10 % de la partie inférieure de la troposphère, son altitude variant de quelques centaines de mètres à quelques kilomètres.

La couche de surface atmosphérique représente les 10% de la partie basse de la couche limite atmosphérique. Nommée communément couche inertielle ou couche à flux constants, on lui applique généralement la théorie de similitude de Monin-Obukhov (*voir Chapitre 3, §II.3.a*). De par sa proximité à la surface terrestre, elle est le siège de deux sources de turbulence, d'origine dynamique et thermique.

La turbulence d'origine dynamique est liée au frottement au sol de l'écoulement. Constamment générée au sein de la couche de surface atmosphérique, son intensité est liée à la rugosité dynamique de la surface considérée : pour un vent donné, plus cette propriété intrinsèque du sol est grande, plus la turbulence d'origine dynamique est forte. La turbulence d'origine thermique est quant à elle liée aux échanges thermiques entre la surface terrestre et l'atmosphère, variables selon le cycle diurne du rayonnement solaire. L'état de stratification thermique de l'atmosphère est alors lié à son intensité.

³ La micro-météorologie concerne l'étude des phénomènes atmosphériques à petite échelle (micro-échelle et échelle locale). Elle traite entre autres les processus observés dans la couche limite atmosphérique.

b. Stabilité de l'atmosphère

La notion de température potentielle Θ est généralement préférée à celle de température absolue T pour caractériser l'état de stratification de l'atmosphère. Définie comme la température d'une parcelle d'air amenée adiabatiquement de sa position initiale à une pression de référence p_{ref} au niveau de la mer, elle permet d'étudier les gradients thermiques en s'affranchissant des effets causés par les variations de pression avec l'altitude et obéit à l'équation suivante :

$$\theta = T \left(\frac{p_{ref}}{p} \right)^\gamma$$

avec $\gamma = R^*/C_p$ avec R^* constante des gaz parfaits pour l'air sec
 C_p capacité calorifique massique à pression constante

La stabilité de l'atmosphère est caractérisée par trois états décrivant le comportement d'une parcelle d'air écartée, selon la verticale et de façon adiabatique, de son état d'équilibre (Hanna, 1982).

L'atmosphère est stable lorsque le gradient vertical de température potentielle est positif. Les masses d'air froides, plus lourdes, sont situées sous les masses d'air chaudes et les échanges thermiques se font de l'atmosphère vers la surface terrestre. La parcelle d'air a alors tendance à revenir vers son état initial. Cet état de l'atmosphère survient généralement la nuit, lorsque le sol se refroidit.

L'atmosphère est neutre lorsque le gradient vertical de température potentielle est nul. La température potentielle est alors uniforme sur toute la verticale et les échanges thermiques entre l'atmosphère et la surface terrestre sont inexistantes. La particule reste à l'état où elle a été amenée adiabatiquement.

L'atmosphère est instable lorsque le gradient vertical de température potentielle est négatif. Les masses d'air chaudes, plus légères, sont situées sous les masses d'air froides et les échanges thermiques se font de la surface terrestre vers l'atmosphère. La parcelle d'air a alors tendance à s'éloigner de son état initial. Cet état convectif se rencontre principalement durant la journée, lorsque les rayons lumineux réchauffent le sol.

L'état de l'atmosphère est souvent décrit à travers les classes de stabilité dites de Pasquill (Pasquill, 1961). Fonction des conditions de vent à 10 mètres d'altitude, de la nébulosité et de l'intensité de l'ensoleillement, six classes de A à F caractérisent les états des plus instables aux plus stables (Tab.1).

Vent à 10m (m/s)	Classes de stabilité en journée			Classes de stabilité de nuit	
	Radiation solaire incidente			Nébulosité	
	forte	modérée	faible	entre 4/8 et 7/8	<3/8
$U < 2$	A	A-B	B	-	-
$2 \leq U \leq 3$	A-B	B	C	E	F
$3 \leq U \leq 5$	B	B-C	C	D	E
$5 \leq U \leq 6$	C	C-D	D	D	D
$6 \leq U$	C	D	D	D	D

Tableau 1: Classes de stabilité de Pasquill, tirées de (Pasquill, 1961)

La prise en compte de l'état de stabilité de l'atmosphère apparaît donc comme importante dans les études atmosphériques, pour déterminer les profils verticaux de température et de vitesse de l'écoulement mais aussi les paramètres de turbulence, affectant ainsi la dispersion des polluants atmosphériques.

2. La dispersion atmosphérique

a. Définition

La dispersion turbulente de polluants atmosphériques est un phénomène physique d'évolution dans le temps et dans l'espace, d'un nuage d'effluents issu d'un rejet continu ou instantané, volumique ou ponctuel. Elle résulte de l'interaction des processus d'advection, de diffusion moléculaire et de diffusion turbulente.

L'advection permet le transport de l'espèce chimique par le champ de vitesse relatif au vent dominant. La diffusion moléculaire transporte la matière à une échelle microscopique et conduit, à plus grande échelle, à une dilution de l'espèce chimique dans l'espace. La diffusion turbulente est quant à elle responsable du transport et de la déformation progressive du nuage de polluants par l'ensemble des structures turbulentes.

b. Influence de la stratification thermique

La dispersion turbulente est fortement dépendante de l'état de stratification de l'atmosphère et des processus turbulents dominants qui en découlent. L'évolution d'un panache de fumée suivant les conditions de stratification de l'atmosphère peut être schématisée comme suit (Fig.1).

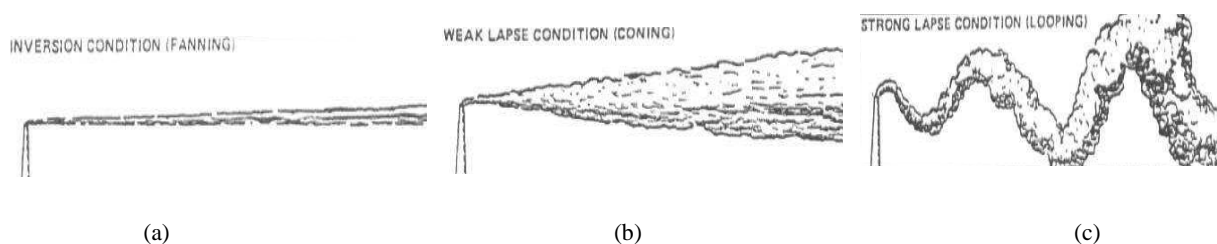


Figure 1 : Dispersion d'un panache de fumée en condition (a) stable, (b) neutre, (c) instable. Issu de (Slade, 1968)

Au sein d'une atmosphère stable, où les échanges verticaux sont limités et la dispersion réduite, le panache, de forme tubulaire, est confiné dans une zone verticale restreinte. D'importantes concentrations en polluants sont en général observées dans ces conditions, au centre du panache.

Le panache en condition de stratification neutre est quant à lui plus étalé. La distribution spatiale des concentrations dans un plan transversal, en fonction de la distance à l'axe du panache, est proche de la distribution gaussienne.

Au sein d'une atmosphère instable, les fortes turbulences atmosphériques amplifient les échanges entre les couches d'air et diluent les concentrations en polluants. L'expansion verticale du panache de fumée est importante et le panache présente une allure serpentée. Cette importante fluctuation de concentration est difficilement reproductible par un modèle de mécanique des fluides numérique de type RANS mais reste possible en LES (Large Eddy Simulation). Dans le cadre de mon stage, les cas référencés instables de la campagne expérimentale Prairie Grass n'ont pas été traités.

II. Modélisation de la dispersion atmosphérique

Face aux difficultés inhérentes aux campagnes expérimentales en nature ou en soufflerie, l'utilisation de modèles de dispersion atmosphérique est rapidement devenue incontournable pour la mise en place d'études d'impact. Différentes approches existent, caractérisées par leur degré de simplification, leurs conditions d'applications mais aussi par la précision de leurs résultats. Les modèles gaussiens obéissant aux formulations de Briggs et de Doury ainsi que le modèle eulérien proposé par le logiciel Code_Saturne sont présentés dans la suite de cette partie.

1. Le modèle de panache gaussien

Les modèles gaussiens sont des modèles semi-analytiques, basés sur une résolution analytique de l'équation d'advection-diffusion, régissant la dispersion turbulente, couplée avec des paramétrisations semi-empiriques des principaux processus physico-chimiques.

La simplicité associée aux modèles de panache gaussien est généralement adaptée aux études opérationnelles, qui réclament des résultats dans des courts délais, mais ne permet pas de traiter des écoulements complexes (présence de relief ou d'obstacles, processus physico-chimiques complexes, etc.). L'utilisation d'un tel modèle suppose de considérer des hypothèses fortes : l'écoulement doit être homogène et stationnaire sur un terrain plat, sans modification dans le temps et l'espace des conditions d'émission ou des conditions météorologiques, la vitesse du vent étant supérieure à 1 m/s.

Dans le cas d'un rejet ponctuel et continu de débit Q , à une hauteur H du sol et pour un écoulement uniforme de vitesse \bar{u} , le champ de concentration se présente sous forme d'une gaussienne et s'écrit :

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}$$

où l'on néglige la diffusion turbulente selon x, dans le sens de l'écoulement, au profit du transport advectif et où l'on introduit les écarts-types de la distribution, horizontal et vertical, respectivement σ_y et σ_z .

Les deux principales formulations des écarts-types de dispersion, édictées par Briggs (Briggs, 1973) et Doury (Doury, 1983), sont présentées ci-après.

a. Formulation de Briggs

La formulation des écarts-types σ_y et σ_z proposée par Briggs est dépendante de la classe de stabilité de Pasquill considérée. Pour une dispersion en milieu rural ou en milieu urbain, on considère ainsi les formules suivantes, où x est la distance à la source (Tab.2).

Classe de Pasquill	σ_y (m)	σ_z (m)
Dispersion en milieu rural		
A	$0,22x(1+0,0001x)^{-0,5}$	0,20x
B	$0,16x(1+0,0001x)^{-0,5}$	0,12x
C	$0,11x(1+0,0001x)^{-0,5}$	$0,08x(1+0,0002x)^{-0,5}$
D	$0,08x(1+0,0001x)^{-0,5}$	$0,06x(1+0,0015x)^{-0,5}$
E	$0,06x(1+0,0001x)^{-0,5}$	$0,03x(1+0,0003x)^{-1}$
F	$0,04x(1+0,0001x)^{-0,5}$	$0,016x(1+0,0003x)^{-1}$
Dispersion en milieu urbain		
A-B	$0,32x(1+0,0004x)^{-0,5}$	$0,24x(1+0,001x)^{-0,5}$
C	$0,22x(1+0,0004x)^{-0,5}$	0,20x
D	$0,16x(1+0,0004x)^{-0,5}$	$0,14x(1+0,0003x)^{-0,5}$
E-F	$0,11x(1+0,0004x)^{-0,5}$	$0,08x(1+0,0015x)^{-0,5}$

Tableau 2 : Formulation des écarts-types de la dispersion par Briggs

Cette paramétrisation étant établie à partir des expériences de Prairie Grass, l'adéquation entre ce modèle de panache gaussien et les mesures expérimentales sont généralement satisfaisantes. Nous nous attendons donc d'ores et déjà à une bonne corrélation dans la comparaison prévisions-observations effectuée dans le chapitre 3, pour laquelle la paramétrisation de Briggs en milieu rural a été utilisée.

b. Formulation de Doury

La formulation proposée par Doury, établie historiquement pour les besoins des autorités de sûreté nucléaire françaises, se distingue en deux classes en fonction de l'intensité de la diffusion verticale mais n'est pas directement liée à la stabilité de l'atmosphère. La dispersion verticale est ainsi considérée comme faible lorsque le gradient vertical de température excède $-5^\circ\text{C}/\text{km}$. Au contraire, on la qualifie de normale pour des variations de température inférieures. Les écarts-types σ_y et σ_z obéissent aux relations suivantes :

$$\sigma_y = (K_y t)^{\alpha_y} \quad \sigma_z = (K_z t)^{\alpha_z}$$

où t est le temps de transport depuis la source, relié à la distance à la source à travers la vitesse du vent supposé uniforme et K_y et K_z sont les coefficients de diffusivité turbulente respectivement latéral et vertical.

Dans la suite de l'étude, nous nous placerons en situation de diffusion normale pour les cas de stratification neutre et de diffusion faible en stratification stable. Les paramétrisations proposées par Doury sont rassemblées dans le tableau suivant (Tab.3).

	Temps de transport (s)	K_y (m^2/S)	K_z (m^2/S)	α_y	α_z
Diffusion normale	0 à 240	0,405	0,42	0,859	0,814
	240 à 3280	0,135	1	1,13	0,685
	3280 à 97000	0,135	20	1,13	0,5
	97000 à 508000	0,463	20	1	0,5
	508000 à 1300000	6,5	20	0,824	0,5
	> 1300000	200000	20	0,5	0,5
Diffusion faible	0 à 240	0,405	0,20	0,859	0,5
	240 à 97000	0,135	0.20	1,13	0,5
	97000 à 508000	0,463	0.20	1	0,5
	508000 à 1300000	6.5	0.20	0.824	0,5
	>1300000	200000	0.20	0,5	0,5

Tableau 3 : Paramétrisation de la dispersion par Doury, en diffusion normale et faible

2. Le modèle de mécanique des fluides numérique : Code_Saturne et son module atmosphérique

La modélisation de la dispersion par les outils CFD (pour Computational Fluid Dynamics) est basée sur la résolution numérique des équations régissant l'écoulement atmosphérique. S'affranchissant des hypothèses lourdes des modèles gaussiens, cette approche est adaptée à l'étude d'écoulements complexes, de par leur configuration ou la prédominance de processus physico-chimiques. En contre-partie, les coûts de calcul sont plus importants, ce qui les rend peu appropriés pour des études en temps réel.

a. Une approche eulérienne

Code_Saturne et son module atmosphérique proposent une approche eulérienne de l'écoulement : la dilution de la concentration moyenne en polluants est calculée au fur et à mesure de sa diffusion dans un espace discrétisé. La résolution de l'équation d'advection-diffusion et la modélisation d'un coefficient de diffusion K permettent d'accéder au champ moyen de concentration.

Cette démarche diffère des méthodes lagrangiennes, qui modélisent les vitesses des particules polluantes à l'aide de relations stochastiques, et des méthodes gaussiennes, précédemment présentées, qui décrivent l'évolution du nuage polluant par la variance des positions des particules.

b. Une approche statistique

La couche limite atmosphérique étant le siège d'écoulements turbulents, les variables caractéristiques et le champ de vitesse sont considérés comme aléatoires. Les évolutions prépondérantes de ces variables turbulentes sont néanmoins rendues accessibles par l'utilisation d'outils statistiques, en

particulier à travers l'opérateur de moyenne de Reynolds. La décomposition proposée par Reynolds (Reynolds, 1894) décrit ainsi toute variable aléatoire x comme la somme de sa moyenne d'ensemble \bar{x} et d'une fluctuation aléatoire x' centrée sur cette moyenne.

L'approche RANS (pour Reynolds Averaged Navier Stokes) consiste à appliquer l'opérateur de moyenne de Reynolds aux équations de Navier Stokes caractéristiques de l'écoulement du fluide, supposé newtonien et incompressible. Toutes les échelles de la turbulence sont alors modélisées par ce type de méthode. Le système d'équations fondamentales considérées dans le logiciel Code_Saturne est décrit dans la suite de ce paragraphe.

i. Les équations de Navier-Stokes en moyenne de Reynolds

Conservation de la masse

L'approximation de Boussinesq est considérée : l'état thermodynamique réel de l'atmosphère s'écarte peu d'un état de référence ou de repos, considéré comme hydrostatique et adiabatique. En particulier, on considère que la fluctuation de masse volumique ρ reste faible dans la couche limite atmosphérique, sauf pour les effets de flottabilité qui entrent en jeu dans la stratification atmosphérique. On substitue ainsi la masse volumique à sa moyenne et l'équation de conservation de la masse s'écrit alors, pour $\alpha = 1, 2, 3$:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0$$

Conservation de la quantité de mouvement

Les équations de Navier Stokes moyennées au sens de Reynolds, sous l'approximation de Boussinesq et en négligeant les forces de Coriolis, s'écrivent pour $\alpha = 1, 2, 3$ et $j = 1, 2, 3$:

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \bar{u}_\alpha}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_\alpha}{\partial x_j} \right) = -\bar{\rho} g \delta_{\alpha 3} + \bar{\rho} g \delta_{\alpha 3} \beta (\bar{\theta} - \theta_{ref}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_\alpha}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_\alpha} \right) - (\bar{\rho} \overline{u'_j u'_\alpha}) \right]$$

avec β le coefficient de flottabilité et μ la viscosité dynamique.

La prise en compte de la turbulence dans la conservation de la quantité de mouvement fait ainsi apparaître des termes de corrélations doubles entre fluctuations de vitesses, correspondant aux termes $\overline{u'_j u'_\alpha}$. Ces inconnues supplémentaires, appelées tenseurs de Reynolds, nécessitent un traitement particulier, donné par un modèle de fermeture de la turbulence.

Conservation de l'énergie

D'une façon similaire, l'opérateur de moyenne de Reynolds est appliqué à l'équation de la chaleur pour donner la relation suivante, pour $j = 1, 2, 3$:

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\bar{\rho} C_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} - \overline{\theta' u_j'} \right) + \bar{S}_\theta$$

avec θ la température potentielle, C_p la capacité calorifique massique à pression constante, λ la conductivité thermique moléculaire et S_θ le terme source de température potentielle.

Cette dernière relation fait de nouveau apparaître des termes de corrélations doubles $\overline{\theta' u_j'}$ entre fluctuations de température et fluctuations de vitesse. Ces termes seront comme précédemment traités par le modèle de fermeture retenu.

Equation d'advection-diffusion

Soit C_i la concentration massique de l'espèce chimique i . L'application de l'opérateur de moyenne de Reynolds au principe de conservation de la masse de l'espèce i conduit à la relation suivante, pour $j = 1, 2, 3$:

$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_i \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_j} - \overline{C_i' u_j'} \right) + \bar{S}_i + \bar{R}_i$$

avec D_i la diffusivité moléculaire issue de la loi de Fick, S_i le terme source (positif pour un rejet, négatif pour un prélèvement) et R_i le terme de production ou destruction de l'espèce chimique i par réaction chimique.

Dans la suite, nous considérerons le rejet d'un traceur passif, sans prise en compte des réactions chimiques susceptibles de se produire ($R_i = 0$) et la diffusivité moléculaire sera négligée ($D_i = 0$).

Le modèle de fermeture de la turbulence s'attachera encore une fois à résoudre les termes de corrélations doubles $\overline{C_i' u_j'}$.

ii. Le modèle de fermeture de la turbulence

Le traitement des flux turbulents précédemment décrits de quantité de mouvement, d'énergie et de concentration en polluants, passe par un modèle de fermeture, objet de nombreuses recherches et formulations, rappelées par exemple dans (Demaël, 2007). L'objectif est d'obtenir un système avec autant d'équations que d'inconnues pour ainsi résoudre l'écoulement.

Le logiciel Code_Saturne peut utiliser un modèle de fermeture au premier ordre, consistant à relier les flux turbulents $\overline{u_j' u_\alpha'}$, $\overline{\theta' u_j'}$ et $\overline{C_i' u_j'}$ aux champs moyens \bar{u}_j , $\bar{\theta}$ et \bar{p} , à l'aide d'une loi de comportement, appelée modèle de viscosité turbulente.

Modèle de Boussinesq à viscosité turbulente

La fermeture au premier ordre des flux turbulents repose sur l'hypothèse de Boussinesq, établissant une analogie entre les flux turbulents et les flux de masse de type diffusif, régis par une loi de Fick. Tout flux turbulent peut ainsi être modélisé à l'aide des gradients moyens et d'un coefficient dit de diffusivité ou viscosité turbulente ν_t . Contrairement à la diffusivité moléculaire qui est une propriété intrinsèque du fluide, cette viscosité turbulente dépend de l'écoulement étudié (Arya, 1999).

Les termes de corrélations doubles, constituant les inconnues du système précédemment décrit, s'écrivent alors :

$$\text{Tenseurs de Reynolds:} \quad -\overline{u_j' u_\alpha'} = \nu_t \left(\frac{\partial \overline{u_\alpha}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij}$$

$$\text{Flux turbulent de chaleur:} \quad -\overline{\theta' u_j'} = \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j}$$

$$\text{Flux turbulent de matière:} \quad -\overline{C_i' u_j'} = \frac{\nu_t}{S_{ct}} \frac{\partial \overline{C_i}}{\partial x_j}$$

$$\text{avec } k \text{ l'énergie cinétique de turbulence, définie par:} \quad k = \frac{1}{2} \overline{u_j' u_j'}$$

avec Pr_t et S_{ct} respectivement nombres turbulents de Prandtl et de Schmidt

On notera l'apparition du coefficient de diffusivité turbulente K_t défini comme le rapport de la viscosité turbulente ν_t sur le nombre de Schmidt turbulent S_{ct} .

L'utilisation d'un modèle de fermeture permet ainsi d'obtenir le paramètre de viscosité turbulente ν_t , de remonter jusqu'aux flux turbulents puis à la résolution des équations de conservation et donc à la connaissance de l'écoulement.

Modèle de type k-ε

La modélisation de la turbulence que nous avons choisie parmi les options de Code_Saturne est de type k-ε, résolvant la turbulence au moyen de l'énergie cinétique de turbulence k et son taux de dissipation ε, reliés de la façon suivante, avec C_μ une constante:

$$\nu_t = C_\mu \frac{\overline{k}^2}{\overline{\epsilon}}$$

Les grandeurs turbulentes k et ε sont quant à elles obtenues par la résolution de deux équations de transport supplémentaires :

$$\frac{\partial \overline{k}}{\partial t} + \overline{u_j} \frac{\partial \overline{k}}{\partial x_j} = P_k + B_k - \overline{\epsilon} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \overline{k}}{\partial x_j} \right]$$

$$\frac{\partial \overline{\epsilon}}{\partial t} + \overline{u_j} \frac{\partial \overline{\epsilon}}{\partial x_j} = C_{\epsilon 1} \left(\frac{\overline{\epsilon}}{\overline{k}} \right) P_k + C_{\epsilon 2} \left(\frac{\overline{\epsilon}}{\overline{k}} \right) B_k - C_{\epsilon 3} \left(\frac{\overline{\epsilon}}{\overline{k}} \right) \overline{\epsilon} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \overline{\epsilon}}{\partial x_j} \right]$$

avec σ_k et σ_ϵ , les nombres de Prandtl respectivement pour k et ε ; $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, $C_{\epsilon 3}$ des constantes; P_k et B_k , respectivement les termes de production dynamique et thermique de la turbulence, définis comme suit :

$$P_k = -\overline{u_j' u_\alpha'} \frac{\partial \overline{u_\alpha}}{\partial x_j} \quad B_k = \frac{g}{\theta_0} \overline{\theta' u_3'}$$

iii. Anisotropie de la dispersion turbulente

La résolution de la turbulence par un modèle de fermeture de type k-ε à viscosité turbulente apparaît clairement comme délicate pour les études atmosphériques. En particulier, l'isotropie affectée à la dispersion turbulente au travers d'une unique diffusivité turbulente K_t , quelque soit la direction horizontale ou verticale considérée, n'est pas complètement réaliste. Il est ainsi reconnu que les modèles eulériens à diffusivité turbulente tels que Code_Saturne ont tendance à sous-estimer la diffusion horizontale vis-à-vis de l'advection par l'écoulement dans la direction du vent, notamment en champ proche, et ainsi surestimer les maximums de concentration dans l'axe du panache près de la source. Nous pourrions constater ce comportement du logiciel dans la comparaison effectuée entre les mesures de Prairie Grass et nos prévisions.

Pour s'affranchir de cette isotropie et vérifier ou non une amélioration des résultats, nous retiendrons la méthode utilisée par Emmanuel Demaël dans sa thèse (Demaël, 2007). Il s'agit de définir une diffusivité horizontale plus grande que la diffusivité verticale, cette dernière n'étant pas modifiée. Dans l'équation d'advection-diffusion, les diffusivités horizontales seront ainsi augmentées d'une constante K_{0h} à déterminer empiriquement. La formulation considérée dans notre étude sera la suivante :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{v_t}{S_{ct}} + K_{0h} \right) \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{v_t}{S_{ct}} + K_{0h} \right) \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{v_t}{S_{ct}} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right]$$

c. Méthodes numériques

La résolution numérique des équations ainsi présentées ne peut se faire sur tout un domaine d'étude, compte tenu des temps de calculs excessifs alors mis en œuvre. Le nombre de points de calcul est ainsi réduit à celui des nœuds d'un maillage structuré tridimensionnel.

La discrétisation des équations est de type volumes finis, le système RANS étant intégré sur les volumes de contrôle ainsi créés et résolu en leur centre, selon une approche dite co-localisée. En particulier, les variables sur les bords de ces volumes de contrôle sont interpolées à partir de celles obtenues en leur centre.

Code_Saturne utilise un schéma en temps de type Euler implicite, nécessitant pour déterminer les variables au pas de temps n , la résolution d'un système linéaire fonction des variables aux pas de temps précédents.

La discrétisation des équations est réalisée au moyen d'un schéma à pas de temps fractionné. Le système d'équations RANS faisant apparaître un couplage vitesse-pression, les première et troisième étapes du calcul sont dévolues à l'algorithme de « prédiction-corrrection », induisant la solution d'une équation de Poisson pour la pression, l'objectif étant de satisfaire le principe de conservation de la masse. La résolution des variables turbulentes k et ϵ intervient dans une seconde étape permettant d'accéder dans une dernière étape aux solutions des équations caractéristiques des grandeurs scalaires aux centres des cellules, l'ensemble des variables étant mis à jour en fin de pas de temps.

Chapitre 3 : Etude comparative de la dispersion sur terrain plat en condition de stratification neutre et stable

Dans le présent chapitre, on s'attachera à présenter la campagne expérimentale Prairie Grass qui servira de cas-test pour la validation de Code_Saturne en condition de stratification neutre et stable. Nous insisterons sur les données disponibles, paramètres qui nous permettront de mettre en place les différentes simulations sous Code_Saturne. Dans la dernière partie, nous présenterons en particulier les résultats obtenus pour deux configurations atmosphériques, un cas de stratification neutre et un autre stable avant de généraliser à l'ensemble des expériences référencées neutres et stables.

I. La campagne expérimentale Prairie Grass

1. Description de la campagne de mesures

La campagne expérimentale Prairie Grass (Barad, 1958) se déroula durant l'été 1956 sur un champ plat d'herbe rase du Nebraska (USA), sous la direction du Centre de Recherche de Cambridge pour la force aérienne. Le projet visait à déterminer, en fonction des conditions météorologiques, le taux de diffusion d'un traceur passif émis ponctuellement et continuellement.

Durant deux mois, au cours desquels toutes les conditions de stratification atmosphérique furent répertoriées, soixante-dix expériences ont été menées. La rugosité dynamique du terrain considéré est relativement faible, telle que $z_0 = 0.006$ m. Pour chaque cas, un rejet horizontal de dioxyde de soufre (SO_2) est effectué durant dix minutes, à 0.46 mètres du sol et avec un débit d'émission connu.

2. Données expérimentales disponibles

a. Données mesurées

La campagne expérimentale Prairie Grass est réputée pour son important jeu de données. Différentes sources de données sont disponibles dans la littérature scientifique, sans qu'aucun ne fasse véritablement consensus. Pour l'étude présentée, nous utiliserons les données de Hanna, utilisées dans la thèse d'Emmanuel Demaël, complétée au besoin par celles d'Irwin⁴.

Concentration

La mesure de la concentration en SO_2 est assurée par des capteurs répartis en aval de l'écoulement, à une hauteur de 1.5 mètres, sur des arcs semi-circulaires centrés sur le point d'émission et de rayons 50, 100, 200, 400 et 800 mètres. Six tours positionnées sur l'arc de rayon 100 mètres permettent de relever

⁴ www.jsirwin.com

des profils verticaux de concentrations, de 0.5 à 17.5 mètres du sol. Les données correspondent à des moyennes temporelles effectuées sur les dix minutes du rejet.

Conditions micro-météorologiques

Un mât météorologique, placé en aval du dernier arc, permet de disposer des mesures de température et de vitesse horizontale du vent, sur des hauteurs allant de 0.25 à 16 mètres du sol, et moyennées sur vingt minutes, les relevés débutant cinq minutes avant le rejet de traceur passif et se terminant cinq minutes après.

b. Données interprétées

Nombre d'exploitations ont été faites de ces jeux de données, tant pour l'établissement des classes de Pasquill que pour la paramétrisation de la dispersion par le modèle de panache gaussien ou encore l'estimation de paramètres turbulents (longueur de Monin-Obukhov L_{MO} , vitesse de frottement u^*).

Nous verrons en particulier l'importance de ces données turbulentes dans les conditions aux limites du modèle Code_Saturne. Les données issues de Hanna seront exploitées ainsi que celles que nous avons obtenues par une méthode itérative, basée sur les gradients de vitesse et de température, mesurés entre deux altitudes (Musson-Genon, 2007).

Les données mesurées et interprétées utilisées pour la mise en place des simulations Code_Saturne sont regroupées en *Annexe A*.

II. Mise en place des simulations Code_Saturne

Pour mener à bien la comparaison entre observations et prévisions, nous tâcherons de reproduire les conditions expérimentales et micro-météorologiques caractéristiques de chaque expérience de la campagne Prairie Grass. Ceci concerne notamment le maillage, les conditions de rejet ainsi que les conditions initiales et aux limites du domaine.

1. Le maillage

Le domaine de discrétisation, aux nœuds duquel l'écoulement est résolu, doit être de dimensions suffisantes pour permettre la modélisation des dispersions verticale et latérale. Concernant la hauteur du domaine, celle-ci doit en particulier être adaptée à l'état de stabilité atmosphérique que l'on souhaite modéliser : en conditions de stratification stable, le panache étant plus fin, on réduira le temps de calculs en diminuant la hauteur du domaine par rapport aux cas de stratification neutre.

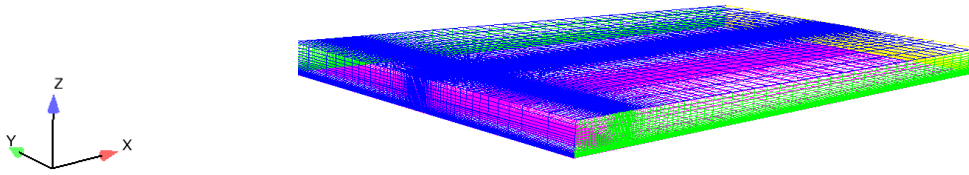


Figure 2 : Maillage utilisé dans l'étude

Le maillage tridimensionnel et structuré, utilisé par Emmanuel Demaël et repris ici, mesure 940 mètres dans la direction longitudinale et 520 mètres dans la direction transversale (Fig.2). En condition de stratification stable, 40 mètres suffisent pour la direction verticale lorsque 100 mètres sont utilisés en stratification neutre.

Les cellules hexaédriques constituant le maillage sont progressivement élargies au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la source. Un raffinement des mailles, assurant une plus grande précision mais induisant des temps de calculs plus longs, est en effet opéré au niveau des zones d'intérêt : le long de l'axe de l'écoulement et sur une dimension transversale, l'intersection se faisant au niveau de la source. Au plus proche du rejet, les mailles mesurent ainsi 1.5 m x 1.5 m x 0.2 m.

2. Conditions de rejet

Le rejet de traceur passif est modélisé par un terme source massique, activé au niveau de deux cellules du troisième niveau vertical, proche de la hauteur de rejet expérimentale de 0.45m. La source ainsi modélisée est délibérément placée au centre du domaine en aval de la face d'entrée. Suffisamment éloignée des frontières du domaine, elle est d'autant moins influencée par les conditions qui y sont imposées.

Pour toutes les expériences Prairie Grass modélisées, on considèrera une vitesse de rejet ainsi que des paramètres turbulents (k , ϵ) nuls, ceci correspondant à un rejet passif sans effet de jet. Le débit massique rejeté sera adapté selon les conditions expérimentales propres à chaque cas.

3. Les conditions aux limites et initiales

Implémenter des conditions aux limites et initiales est fondamental dans le processus de modélisation numérique en ce qu'elles alimentent les calculs, à l'instant initial et tout au long de la période de simulation.

a. Les conditions aux limites

Les conditions aux limites sur les variables principales diffèrent selon les frontières du domaine considérées (Fig.3).

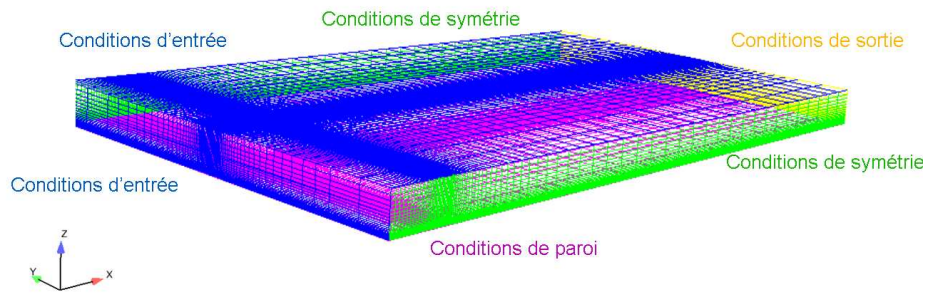


Figure 3 : Conditions aux limites implémentées dans Code_Saturne

i. Conditions d'entrée

On considère comme entrées de domaine, la face en amont de l'écoulement du vent ainsi que le bord supérieur.

Un forçage météorologique est imposé en entrée de domaine, au moyen de profils verticaux obtenus par la théorie de similitude de Monin-Obukhov dans la couche de surface atmosphérique. Ces conditions de type Dirichlet pour les variables transportées (vitesse, paramètres turbulents, concentration), injectées aux nœuds des faces d'entrée, sont liées à l'état de stratification atmosphérique. Un flux nul est imposé pour la pression, sur les faces d'entrées, comme condition de type Neumann homogène.

L'étude sera en particulier restreinte à un vent de seule composante horizontale et de direction constante, selon l'axe X, correspondant à la direction du vent pour chaque expérience.

Théorie de Monin-Obukhov

La théorie de Monin-Obukhov est basée sur une analyse dimensionnelle appliquée à la couche de surface atmosphérique. Elle postule en particulier l'existence de relations universelles entre les flux et les gradients verticaux des variables de vitesse, température et turbulence. On donnera ici les formulations relatives aux conditions de stratification stable et neutre.

Les relations obtenues mettent notamment en jeu des variables fondamentales pour l'étude de la turbulence atmosphérique : u^* , vitesse de frottement liée au frottement exercé par la surface; z_0 longueur de rugosité dynamique et enfin L_{MO} , longueur de Monin-Obukhov définie comme une échelle de longueur caractéristique des effets thermiques dans la couche de surface atmosphérique.

A partir de cette dernière donnée, on peut notamment définir les critères de stabilité suivants (Demaël, 2007) :

- En condition de stratification stable : $L_{mo} > 0$
- En condition de stratification neutre : $L_{mo} \pm \infty$
- En condition de stratification instable : $L_{mo} < 0$

Théorie de Monin-Obukhov en stratification neutre

En condition de stratification neutre, où les effets thermiques n'interviennent pas, l'évolution des variables caractéristiques est de type logarithmique, suivant les formulations suivantes, respectivement pour la vitesse, la température, l'énergie cinétique de turbulence et la dissipation de la turbulence:

$$u(z) = \frac{u^*(z)}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z + z_0}{z_0} \right) \right]$$

$$T(z) = T_0 - 0.0098 * z$$

$$k(z) = \frac{u^{*2}(z)}{\sqrt{C_\mu}}$$

$$\epsilon(z) = \frac{u^{*3}(z)}{\kappa(z + z_0)}$$

Théorie de Monin-Obukhov en stratification stable

En condition de stratification stable, on retrouve dans les basses couches l'évolution logarithmique caractéristique d'une couche neutre à laquelle s'ajoute un profil linéaire, fonction de la longueur de Monin-Obukhov.

$$u(z) = \frac{u^*(z)}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z + z_0}{z_0} \right) + 5 \frac{z}{L_{mo}} \right]$$

$$T(z) = T_0 - 0.0098 * z + \frac{u^*(z)^2}{\kappa^2 * 9.81 * L_{mo}} (T_0 + 273.15) \left[0.74 * \ln \left(\frac{z + z_0}{z_0} \right) + 5 \frac{z}{L_{mo}} \right]$$

$$k(z) = \frac{u^{*2}(z)}{\sqrt{C_\mu}}$$

$$\epsilon(z) = \frac{u^{*3}(z)}{\kappa(z + z_0)} \left[1 + 4 \frac{z + z_0}{L_{mo}} \right]$$

ii. Conditions de symétrie

Les faces latérales du domaine sont caractérisées par des conditions de symétrie : condition de flux nuls pour les scalaires (condition de type Neumann homogène) et vitesse normale nulle.

iii. Conditions de paroi rugueuse

La paroi inférieure est la seule frontière réellement physique du domaine discrétisé. Caractérisé par sa longueur de rugosité dynamique z_0 , le sol est supposé imperméable au fluide : une contrainte tangentielle est imposée pour la vitesse et les autres scalaires reçoivent une condition de flux nuls (condition de type Neumann homogène).

Pour les cas de stratification stable, on impose une température au sol, cohérente avec la température imposée dans les basses couches des frontières d'entrée. La paroi est aussi caractérisée par sa rugosité thermique, définie comme une échelle surfacique de longueur pour la température. Dans notre étude, nous la considérerons prise égale à la rugosité dynamique.

iv. Conditions de sortie

Le bord en aval de l'écoulement est considéré comme une face de sortie du domaine : le flux de masse est dirigé vers l'extérieur. Des conditions de flux nuls pour les variables transportées ainsi qu'une condition de Dirichlet pour la pression, égale à la pression de référence, sont implémentées.

b. Les conditions initiales

Les conditions initiales permettent de reconstituer l'état physique de l'atmosphère au moment où les calculs débutent. Pour chaque expérience Prairie Grass simulée, on appliquera comme conditions initiales les profils verticaux obtenus par la théorie de Monin-Obukhov. En ce qui concerne le scalaire concentration, on impose qu'il soit nul en début de simulation.

4. Paramètres de calculs

Physique de l'atmosphère

Certains paramètres ou propriétés physiques sont implantés par défaut dans Code_Saturne. Nous ne citerons ici que ceux qui peuvent influencer notre étude de validation du modèle.

Par défaut, l'atmosphère est caractérisée par une pression de référence $P_0 = 1013.25$ Pa, une température de référence $T_0 = 273.15$ K et une viscosité $\nu = 1.83 \cdot 10^{-5}$ Pa.s. Cette viscosité est aussi celle imposée au traceur passif. L'humidité de l'atmosphère n'étant pas un paramètre majeur de notre étude, nous la considérerons nulle.

Pris égal à 1 dans la version précédente de Code_Saturne, le nombre de Schmidt S_c est désormais fixé par défaut à 0.7, comme dans la majorité des codes de CFD. Ce paramètre influence fortement la dispersion atmosphérique, la diffusivité turbulente K_t se définissant comme le rapport de la viscosité turbulente à ce nombre. On gardera donc en mémoire cette différence lors de la comparaison de nos résultats à ceux précédemment obtenus par Emmanuel Demaël en stratification neutre.

Aspects numériques

La résolution de l'écoulement est menée en instationnaire, sur un nombre d'itérations suffisant pour satisfaire la convergence temporelle des calculs. De ce fait, les simulations effectuées compteront généralement 200 itérations pour un pas de temps moyen, variable en temps et en espace, d'environ 0.5 s. La durée totale d'une simulation, de l'ordre de 30 minutes CPU, sera cependant réduite par la parallélisation des calculs sur plusieurs processeurs.

5. Analyse des simulations

a. Mesures

Pour chaque cas Prairie Grass simulé, une analyse dynamique précèdera celle basée sur les concentrations. Le transport de polluant étant assuré par l'écoulement dynamique et les effets thermiques, il est en effet nécessaire de vérifier la concordance entre les comportements simulés et expérimentaux. Les profils verticaux de vitesse, énergie cinétique de turbulence, dissipation de turbulence, viscosité turbulente, température et masse volumique seront ainsi établis pour chaque simulation, aux distances expérimentales des capteurs, soit à 50, 100, 200, 400 et 800 mètres de la source fictive, suivant l'axe de l'écoulement. Il s'agira de comparer ces résultats aux données expérimentales et s'assurer qu'il n'existe pas de différence notable.

Cette première vérification faite, l'étude se penchera sur les concentrations obtenues par Code_Saturne en moyenne sur toute la durée de la simulation. Notre analyse sera principalement faite selon l'axe de l'écoulement, où les maximums de concentrations sont attendus. Pour chaque cas simulé, les profils latéraux de concentrations seront tracés pour les arcs distants de 50, 100, 200, 400 et 800 mètres de la source fictive, à 1.5 mètres du sol. L'accent sera mis sur l'analyse des maximums de concentration obtenus par arc, les concentrations extrêmes étant généralement décisives lorsque l'on mène une étude d'impact.

Outre ces différents profils qui permettent de juger visuellement du bien-fondé ou non de la simulation réalisée, nous baserons aussi notre analyse sur un ensemble de paramètres statistiques définis ci-après.

b. Indicateurs statistiques

L'utilisation d'indicateurs statistiques rend objective et fondée la comparaison entre les résultats obtenus par Code_Saturne, ou par les modèles gaussiens de type Briggs et Doury, et les mesures expérimentales. Pour chaque cas Prairie Grass reproduit, les statistiques porteront ainsi sur les prédictions faites par les différents modèles en termes de concentration globale ou maximale, par arc de mesure ou pour tous les arcs.

Les paramètres statistiques utilisés sont définis par les formulations suivantes, où C_o et C_p sont respectivement les observations expérimentales et les prédictions des modèles (Code_Saturne, Briggs, Doury), l'opérateur de moyenne s'opérant ensuite sur l'ensemble des données.

$$FB = \frac{(\overline{C_0} - \overline{C_p})}{0.5(C_0 + C_p)}$$

$$MG = \exp(\overline{\ln C_0} - \overline{\ln C_p})$$

$$NMSE = \frac{\overline{(C_0 - C_p)^2}}{C_0 C_p}$$

$$VG = \exp\left[\overline{(\ln C_0 - \ln C_p)^2}\right]$$

FAC2 = fraction des données telles que : $\frac{1}{2} \leq \frac{C_p}{C_0} \leq 2$

FAC5 = fraction des données telles que : $\frac{1}{5} \leq \frac{C_p}{C_0} \leq 5$

Un tel traitement statistique permet de quantifier l'écart ou l'erreur entre prévisions et observations. Deux types d'erreur peuvent être ainsi renseignés.

L'erreur systématique caractérise le comportement global du modèle vis-à-vis des mesures, sans favoriser les valeurs élevées par rapport aux faibles. Le biais fractionnel FB et le biais géométrique moyen MG permettent ainsi de conclure à une tendance globale à la sous ou surestimation.

L'erreur relative caractérise quant à elle les écarts des prédictions individuelles par rapport au comportement moyen du modèle. L'erreur quadratique moyenne normalisée NMSE et la variance géométrique quadratique moyenne VG sont ainsi des paramètres adaptés aux données dont les ordres de grandeurs sont très différents. Enfin, les facteurs FAC2 et FAC5 renseignent sur la proportion des valeurs simulées à moins d'un facteur 2, respectivement d'un facteur 5, des observations. Classiquement utilisés, ces paramètres permettent de donner une estimation brute des performances du modèle évalué.

On donne ici les critères statistiques généralement considérés pour conclure quant aux performances d'un modèle.

Un modèle parfait obtiendrait les statistiques suivantes : $FB = NMSE = 0$ et $MG = VG = FAC2 = FAC5 = 1$. Un modèle sera jugé suffisamment performant s'il fournit les résultats suivants (Chang & Hanna, 2004): $-0.3 < FB < 0.3$, $0.7 < MG < 1.3$, $NMSE < 4$, $VG < 1.6$ et $FAC2 \geq 0.5$.

L'ensemble de ces analyses, tant graphiques que statistiques, seront mis à profit dans l'évaluation de Code_Saturne par comparaison à l'expérience de Prairie Grass.

III. Résultats et discussions

Dans un premier temps, il s'agit de s'assurer que les résultats que nous obtenons en conditions de stratification neutre sont conformes à ceux présentés par Emmanuel Demaël dans sa thèse, pour laquelle la précédente version du logiciel Code_Saturne a été utilisée. Dans cette optique, la modélisation de l'expérience 21 de Prairie Grass sera détaillée, en termes de dynamique de l'écoulement et de transport de polluant. L'analyse globale des cas répertoriés de stratification neutre sera ensuite présentée, l'accent étant mis sur les paramètres statistiques obtenus avec Code_Saturne. Ce schéma d'étude sera ensuite appliqué aux cas répertoriés stables, l'expérience 58 étant cette fois-ci détaillée.

1. Conditions de stratification neutre

Comme expliqué précédemment, les effets thermiques n'influencent pas la dispersion de polluant en conditions de stratification neutre. La densité de l'atmosphère n'a pas d'influence et les variations de température sont celles du gradient adiabatique. La production de turbulence, d'origine exclusivement dynamique, est contrebalancée par sa dissipation et l'énergie cinétique de turbulence k est constante sur toute la verticale. Les variables de l'écoulement (vitesse, énergie cinétique de turbulence, dissipation de la turbulence, viscosité turbulente) suivent les évolutions verticales logarithmiques données par la théorie de Monin-Obukhov.

Sur les 68 expériences réalisées lors de la campagne Prairie Grass, 33 sont répertoriées comme neutres, appartenant aux classes C, D et E au sens de Pasquill.

a. Présentation d'un cas neutre : l'expérience 21

L'expérience 21 se déroula durant la nuit du 25 juillet 1956. Les conditions météorologiques correspondantes ont permis de la référencer comme appartenant à la classe D. Avec une vitesse horizontale mesurée à 2m de 6.11 m/s, on illustre ici un cas relativement classique en conditions de stratification neutre. On modélise l'injection du traceur passif avec un débit de 50.9 g/s, correspondant aux données expérimentales.

Dynamique de l'écoulement

La dynamique de l'écoulement simulé par Code_Saturne est satisfaisante et concorde avec les observations expérimentales. Les profils verticaux de vitesse horizontale u et d'énergie cinétique de turbulence k illustrent de plus une bonne conservation des profils météorologiques initialement injectés et ce, tout le long du domaine (Fig.5).

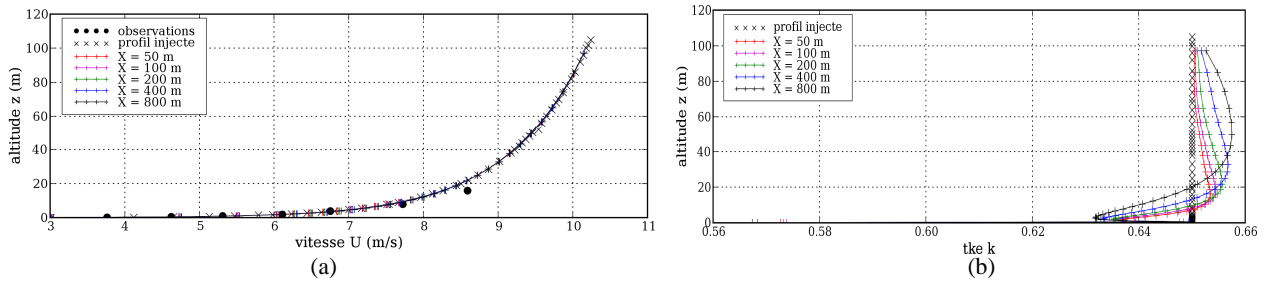


Figure 5 : Profils verticaux (a) de vitesse (m/s), (b) d'énergie cinétique de turbulence (m^2/s^2) obtenus pour l'expérience 21 à différentes distances de la source, suivant l'axe de l'écoulement, par le modèle Code_Saturne

Des écarts raisonnables sont toutefois constatés pour l'énergie cinétique de turbulence. On relève en particulier un pic de turbulence sur le deuxième niveau de la verticale, phénomène souvent mis en évidence dans la littérature scientifique (Hargreaves & Wright, 2006).

Dispersion des polluants

Comme expliqué précédemment, en condition de stratification neutre, la dispersion atmosphérique n'est ni augmentée, ni atténuée. L'établissement des profils latéraux de concentration (Fig.6), à différentes distances de la source suivant l'axe de l'écoulement et à 1.5 m du sol, permet la comparaison des prévisions obtenues par Code_Saturne et les deux modèles gaussiens de Briggs et Doury par rapport aux observations. L'unité adaptée à l'étude des faibles concentrations est la partie par million (ppm), correspondant à un rapport de 10^{-6} . Une partie par million massique (ppm-m) représente ainsi 10^{-6} kg/kg.

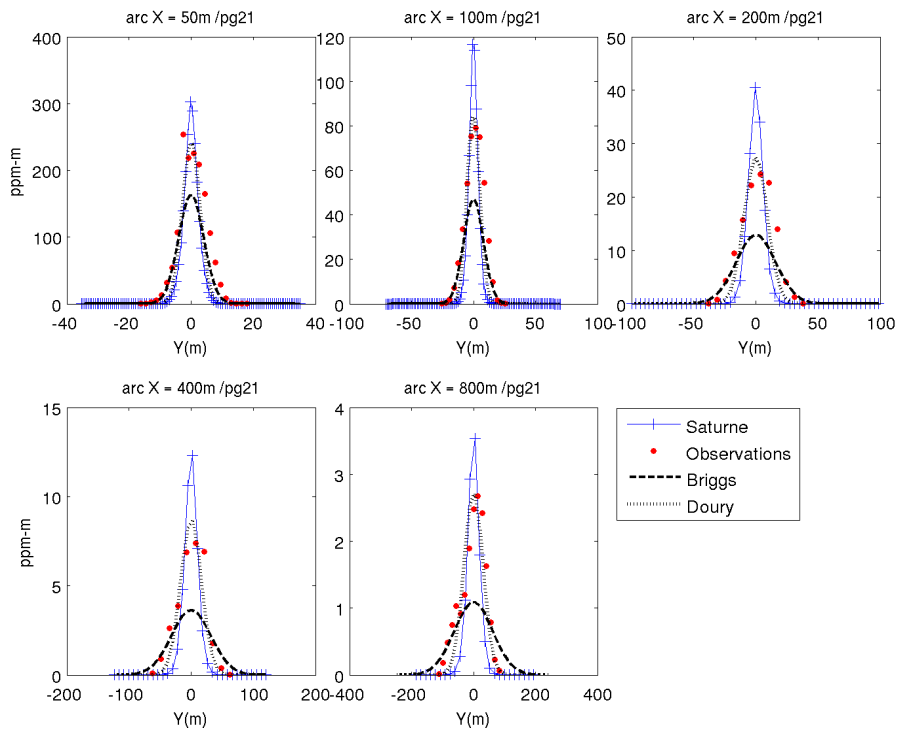


Figure 6 : Profils latéraux de concentration obtenus pour l'expérience 21, à différentes distances de la source et à 1.5m du sol, par les modèles Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury

Plusieurs commentaires peuvent être faits sur ces résultats.

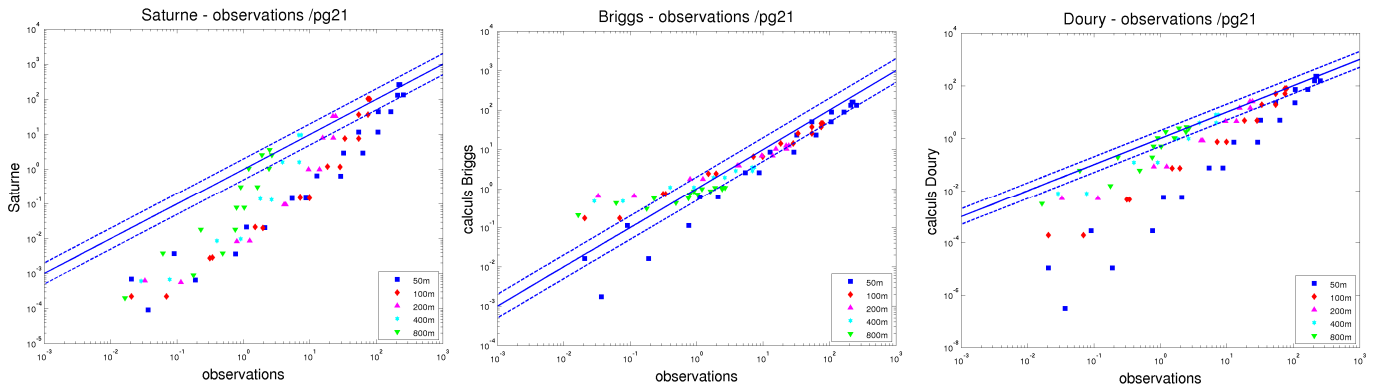
Concernant le [modèle Code_Saturne](#), les profils obtenus sont globalement cohérents avec les observations. Tout le long du domaine, on vérifie bien que la valeur maximale est obtenue suivant la direction imposée pour l'écoulement, en $Y=0$. Ces figures témoignent néanmoins d'une surestimation des concentrations maximales par le modèle Code_Saturne, quelque soit la distance à la source. Ces surestimations sont liées à une sous-estimation de la dispersion horizontale vis-à-vis du transport advectif par l'écoulement (Demaël & Carissimo, 2007).

La modélisation de l'expérience 21 par Code_Saturne illustre ainsi un défaut du modèle : considérer, par défaut, la dispersion turbulente dans l'atmosphère comme isotrope n'est pas réaliste et entraîne une sous-estimation de la dispersion latérale, en particulier en champ lointain, conduisant à des surestimations des pics de concentration. Il s'agira donc d'augmenter 'artificiellement' le coefficient de diffusivité turbulente K_t dans la dimension horizontale, sans modifier la diffusivité verticale. En forçant ainsi la dispersion selon les directions X et Y, on s'attend à réduire les pics de concentration obtenus dans l'axe $Y=0$ et à améliorer les performances de Code_Saturne dans la direction latérale. Les résultats issus de la modélisation anisotrope de l'expérience 21 seront présentés dans la suite. Cette démarche fut aussi celle adoptée dans (Demaël & Carissimo, 2007).

Concernant le [modèle gaussien de type Briggs](#), on constate au contraire une nette sous-évaluation des maximums de concentration, signifiant ainsi que la dispersion suivant la direction du vent est surestimée. La dispersion latérale est néanmoins bien représentée à proximité de la source, jusqu'à 200m.

Concernant le [modèle gaussien de type Doury](#), une bonne concordance aux mesures expérimentales est obtenue tout le long du domaine, notamment en termes d'extremums de concentration.

L'ensemble de ces analyses peut encore être illustrée par les diagrammes de dispersion (scatter diagram) suivants, comparant en échelle logarithmique les observations aux prévisions, pour l'ensemble des mesures (Fig.7) et pour les maximums de concentration (Fig.8). La première bissectrice correspond à une concordance parfaite entre prévisions et observations ; les droites tiretées délimitent la zone du facteur 2, où $0.5 \leq FAC2 \leq 2$.

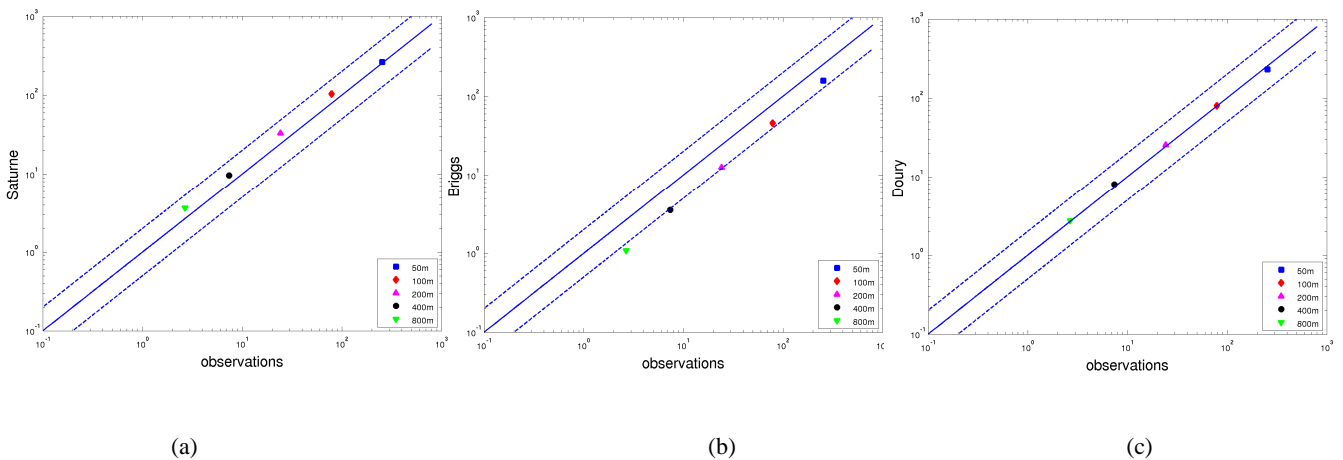


(a) (b) (c)
 Figure 7: Diagramme de dispersion de l'expérience 21 obtenus pour l'ensemble des résultats par les modèles
 (a) Code_Saturne isotrope, (b) Briggs, (c) Doury

La partie gauche du nuage de points correspondant aux prévisions de Code_Saturne, qui s'écarte de la zone 'idéale' du facteur 2, illustre la sous-estimation des concentrations vis-à-vis des observations expérimentales, sur les bords latéraux du panache.

Le nuage de points relatif au modèle de Briggs, très resserré, révèle une évaluation satisfaisante des concentrations, légèrement nuancée par une sous-estimation des concentrations à 50m et par une surestimation au-delà, toujours dans la dimension latérale à l'écoulement. Le diagramme confirme de plus la sous-estimation des pics de concentration, situés sous la première bissectrice. Enfin, on retrouve bien dans le diagramme correspondant au modèle de Doury, une bonne estimation des maximums de concentration contrebalancée par l'évaluation grossière des concentrations sur les bords du panache, sous-estimées sur l'ensemble du domaine.

En termes d'évaluation des maximums de concentration sur l'expérience 21, Code_Saturne se situe entre les modèles gaussiens de Doury et de Briggs (Fig.8). Si le pic est atteint à 50m de la source, ce diagramme prouve encore une la tendance du modèle à surestimer les maximums.



(a) (b) (c)
 Figure 8. : Diagramme de dispersion de l'expérience 21 obtenus pour les maximums de concentration par les modèles
 (a) Code_Saturne isotrope, (b) Briggs, (c) Doury

Paramètres statistiques

Les indicateurs précédemment définis permettent l'évaluation statistique des modèles eulériens et gaussiens de Code_Saturne, Briggs et Doury. Une première étude est menée pour l'ensemble des résultats, sur tous les arcs de mesure (Tab.4).

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Code_Saturne	0.4493	1.9773	1.7589	3.4917	0.2162	0.3514
Briggs	0.4670	1.4077	1.2182	1.3849	0.6081	0.8649
Doury	0.3899	1.6052	0.9608	1.7526	0.3919	0.5676

Tableau 4 : Paramètres statistiques de l'expérience 21 obtenus pour l'ensemble des résultats, sur les 5 arcs de mesures, par les modèles de Code_Saturne, Briggs et Doury

Si l'on se réfère uniquement au facteur 2 pour juger de la performance des différents modèles, les résultats obtenus par Code_Saturne sur l'expérience 21 sont globalement peu concluants, pénalisés par les erreurs sur les bords du panache. Le modèle proposé par Briggs, lié historiquement à l'expérience Prairie Grass, présente la meilleure performance, au regard des critères d'évaluation proposés précédemment.

La même étude est menée sur les seuls maximums de concentration, sur l'ensemble des arcs de mesures (Tab.5). Comme illustré par les diagrammes de dispersion, les pics de concentration prévus par Code_Saturne et le modèle de Doury concordent bien avec ceux relevés expérimentalement. Le modèle de Briggs n'est pas aussi performant dans l'estimation des pics de concentration.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Code_Saturne	-0.1184	0.7854	0.0259	1.0720	1.0000	1.0000
Briggs	0.4926	1.9357	0.6276	1.5818	0.6000	1.0000
Doury	0.0589	0.9871	0.0218	1.0038	1.0000	1.0000

Tableau 5 : Paramètres statistiques de l'expérience 21 obtenus pour les maximums de concentration, sur les 5 arcs de mesures, par les modèles de Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury

Anisotropie de la dispersion turbulente

Jusqu'à présent, les résultats Code_Saturne ont été obtenus avec un coefficient de diffusivité turbulente isotrope. L'anisotropie de la dispersion turbulente, au profit de la dispersion horizontale, est maintenant modélisée par l'ajout d'un coefficient K_{0h} aux termes de diffusivités turbulentes horizontales K_x et K_y , le paramètre K_z dans la direction verticale n'étant pas modifié. Le choix du coefficient K_{0h} s'est fait par tâtonnements, l'objectif étant d'optimiser la concordance des prédictions aux observations, en se basant notamment sur le paramètre FAC2. En particulier, pour l'expérience 21, un coefficient supplémentaire de 1.5 m²/s s'est avéré donner les meilleurs résultats. Notons que les modèles gaussiens de Briggs et Doury, par nature anisotropes, ne sont pas modifiés.

Les profils latéraux de concentration présentés ci-dessous (Fig.9) illustrent les effets de l'anisotropie de la dispersion : les prédictions de Code_Saturne concordent désormais beaucoup mieux avec les observations en termes d'écart-type latéral et ce, en particulier au-delà de 100m de la source. Si les maximums de concentration ont été réduits par rapport à la méthode isotrope (Fig.6), le modèle

présente en contrepartie une tendance à la sous-estimation des maximums de concentration, en particulier à proximité de la source.

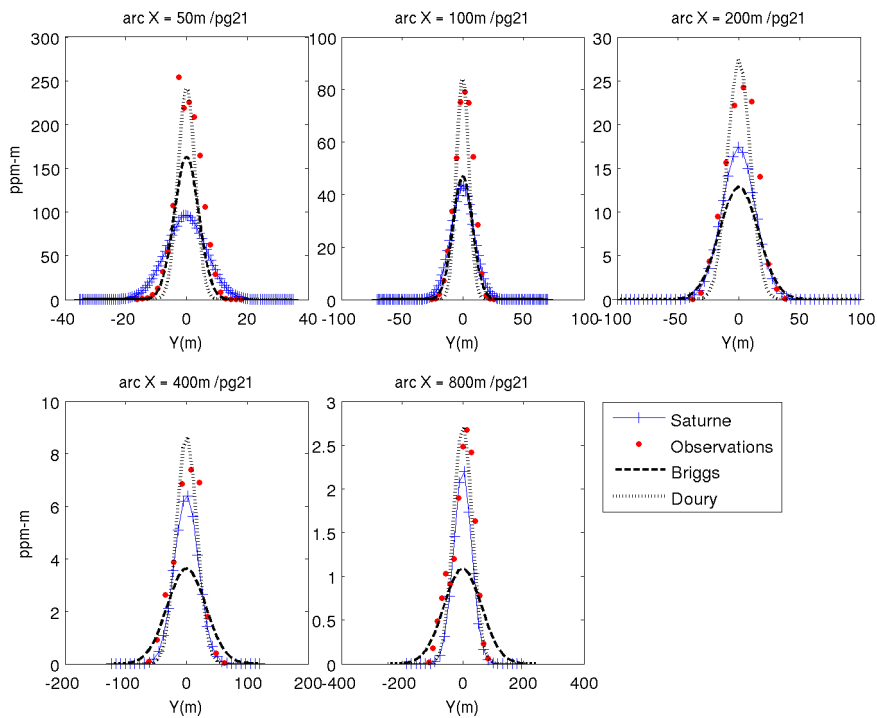


Figure 9 : Profils latéraux de concentration de l'expérience 21 obtenus, à différentes distances de la source et à 1.5m du sol, par les modèles de Code_Saturne en condition de dispersion anisotrope, Briggs et Doury

Les résultats statistiques obtenus par Code_Saturne, relativement satisfaisants, nous confortent dans l'idée de forcer l'anisotropie de la dispersion turbulente (Tab.6). On soulignera en particulier les bons scores atteints par les facteurs 2 et 5 sur l'ensemble des arcs de mesures, pour l'ensemble des prévisions ou uniquement sur les concentrations maximales.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Global	0.4482	1.3616	2.4589	1.3910	0.5676	0.8108
Cmax	0.7647	1.5944	2.1771	1.3568	0.8000	1.0000

Tableau 6: Paramètres statistiques de l'expérience 21 obtenus, pour l'ensemble des résultats et pour les seuls pics de concentration Cmax, par Code_Saturne en condition de dispersion anisotrope

Les résultats précédents sont comparés à ceux obtenus par Emmanuel Demaël, sur l'expérience 21. Des différences entre les deux configurations de simulation sont cependant à préciser. La version de Code_Saturne utilisée dans la thèse, considérant un coefficient de Schmidt de 1, est moins dispersive que la version 2.0 utilisée dans notre étude. Ceci explique qu'un plus grand coefficient soit ajouté à la diffusivité horizontale, de 4.720 m²/s contre 1.5 m²/s dans notre étude.

Les effets de la dispersion considérée anisotrope par Emmanuel Demaël sont moins concluants que ceux obtenus par notre étude (Fig.10): sur tout le domaine, les concentrations latérales sont surestimées signifiant que la dispersion latérale n'est pas assez développée. Les pics de concentration expérimentaux sont cependant atteints en champ éloigné, au-delà de 400m. Les paramètres statistiques relevés, quoique bons, n'atteignent pas nos performances (Tab.7).

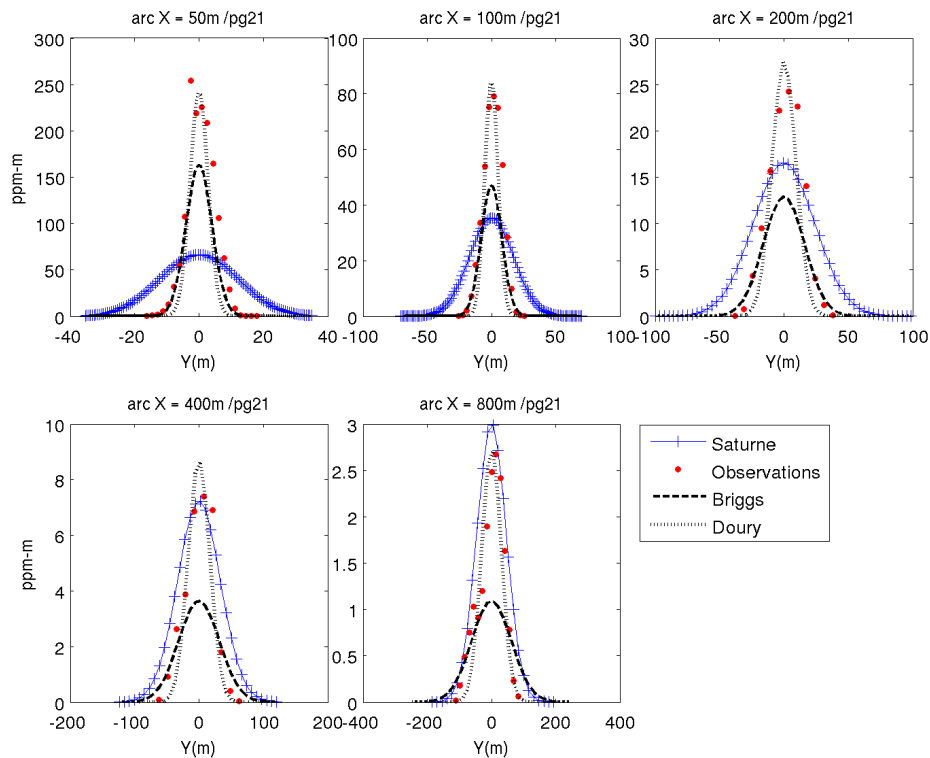


Figure 10 : Profils latéraux de concentration de l'expérience 21 obtenus, à différentes distances de la source et à 1.5m du sol, par les modèles d'Emmanuel Demaël en condition de dispersion anisotrope, Briggs et Doury

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Global	0.2687	0.8203	3.0714	1.9863	0.4324	0.6892
Cmax	0.9673	1.6405	3.9627	1.6934	0.6000	1.0000

Tableau 7: Paramètres statistiques de l'expérience 21 obtenus pour l'ensemble des résultats et pour les maximums de concentration, par le modèle d'Emmanuel Demaël en condition de dispersion anisotrope

b. Etude globale des cas neutres

L'étude précédemment développée pour l'expérience 21 est étendue à l'ensemble des cas répertoriés neutres, avec le modèle isotrope puis avec le modèle anisotrope. Le comportement global de Code_Saturne peut ainsi être évalué, en conditions de stratification neutre. On trouvera en *Annexe B* l'ensemble des résultats statistiques, détaillés par arc de mesure. On appuiera notamment l'analyse de nos résultats sur une comparaison avec l'étude globale effectuée par Emmanuel Demaël, en configuration de dispersion anisotrope.

Ensemble des résultats

On présente ici les résultats statistiques obtenus sur l'ensemble des cas de stratification neutre. Les variations des paramètres statistiques en fonction de l'éloignement à la source illustrent le comportement local de chacun des trois modèles, pour l'ensemble des prévisions (Fig.11).

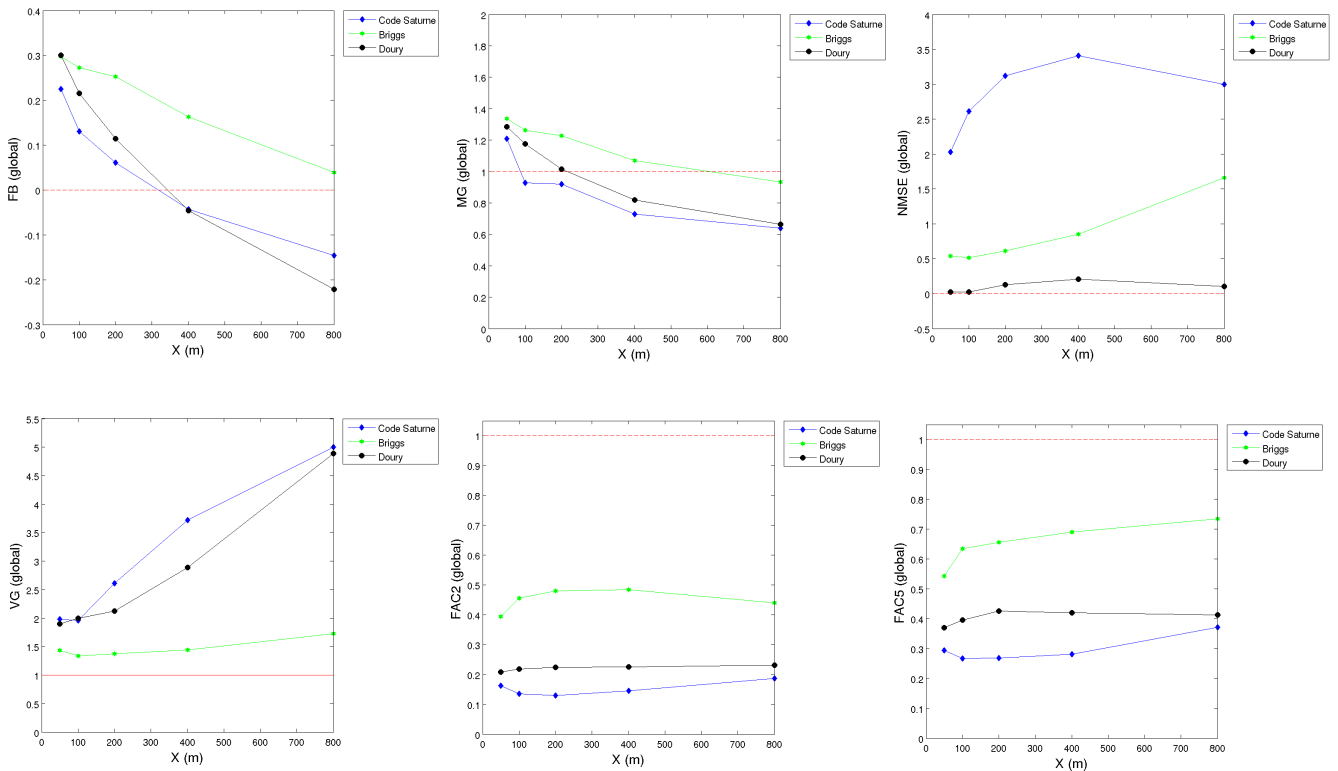


Figure 11: Evolution des paramètres statistiques de l'ensemble des résultats en stratification neutre obtenus, le long de l'axe de l'écoulement, par les modèles Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury. Les lignes tiretées rouges représentent les valeurs idéales des paramètres statistiques.

Les résultats donnés par Code_Saturne isotrope s'avèrent ainsi peu satisfaisants, les indicateurs statistiques étant constamment éloignés de leur valeur cible. On notera cependant que ni le modèle de Briggs, ni celui de Doury, ne parviennent véritablement à prouver leur performance.

L'évolution peu concluante des paramètres statistiques tout au long du domaine se répercute sur les statistiques globales, calculées pour l'ensemble des résultats en cas de stratification neutre, sur l'ensemble des arcs de mesure (Tab.8).

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Code_Saturne	0.1885	0.8777	4.3896	2.83	0.153	0.2967
Briggs	0.2860	1.1590	1.1888	1.4624	0.4447	0.6449
Doury	0.2616	0.9645	4.1737	2.6144	0.2206	0.4012

Tableau 8 : Paramètres statistiques obtenus pour l'ensemble des résultats en condition de stratification neutre, sur les 5 arcs de mesures, par les modèles de Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury

Maximums de concentration

On focalise désormais l'analyse des résultats sur les maximums de concentrations prédits par les trois modèles. Les diagrammes suivants (Fig.12) illustrent le comportement de chacun en termes de maximums de concentration, pour l'ensemble des 33 cas répertoriés neutres.

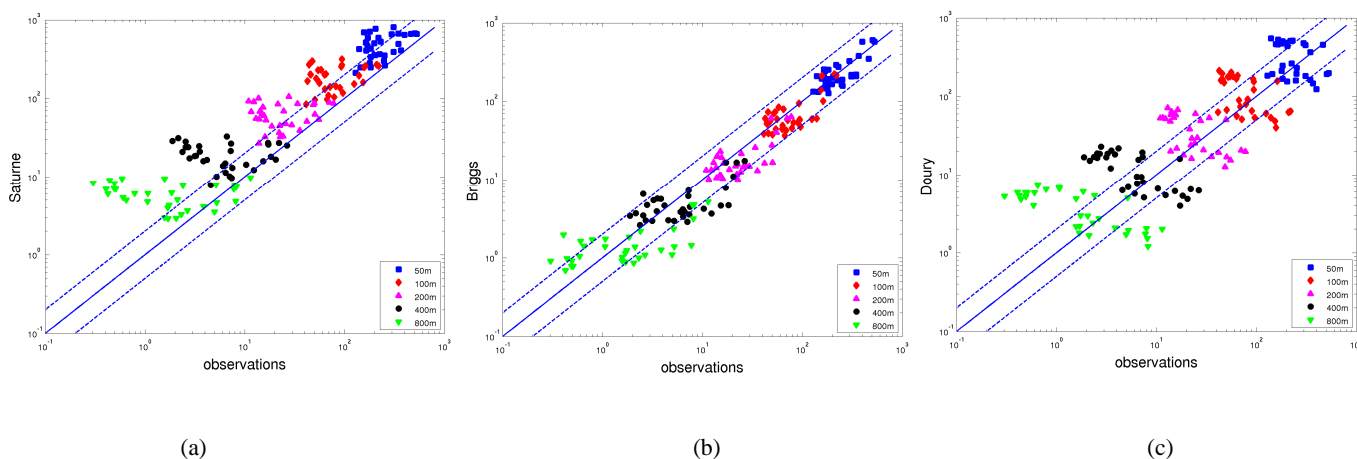


Figure 12: Diagramme de dispersion obtenus pour les maximums de concentration en condition de stratification neutre, par les modèles (a) Code_Saturne isotrope, (b) Briggs, (c) Doury

Il apparaît que le modèle proposé par Code_Saturne isotrope surestime de façon générale les pics de concentration, et ce d'autant plus que l'on s'éloigne de la source. La pente du nuage de points est cependant en adéquation avec la première bissectrice, signifiant un comportement globalement proche de la réalité.

Le modèle de Briggs apporte une meilleure concordance avec les valeurs expérimentales. La majorité des points du nuage appartient à la zone de validation vérifiant $0.5 < FAC2 < 2$. Le modèle de Doury est quant à lui assez dispersé, spécifiant ainsi que pour une même distance à la source, il sur- ou sous-estime les pics de concentration, selon le cas neutre étudié.

La capacité de chaque modèle à reproduire les pics de concentration pour les cas neutres est évaluée à travers les indicateurs statistiques précédemment décrits, soit en fonction de la distance à la source (Fig.13), soit de façon globale sur tout le domaine (Tab.9).

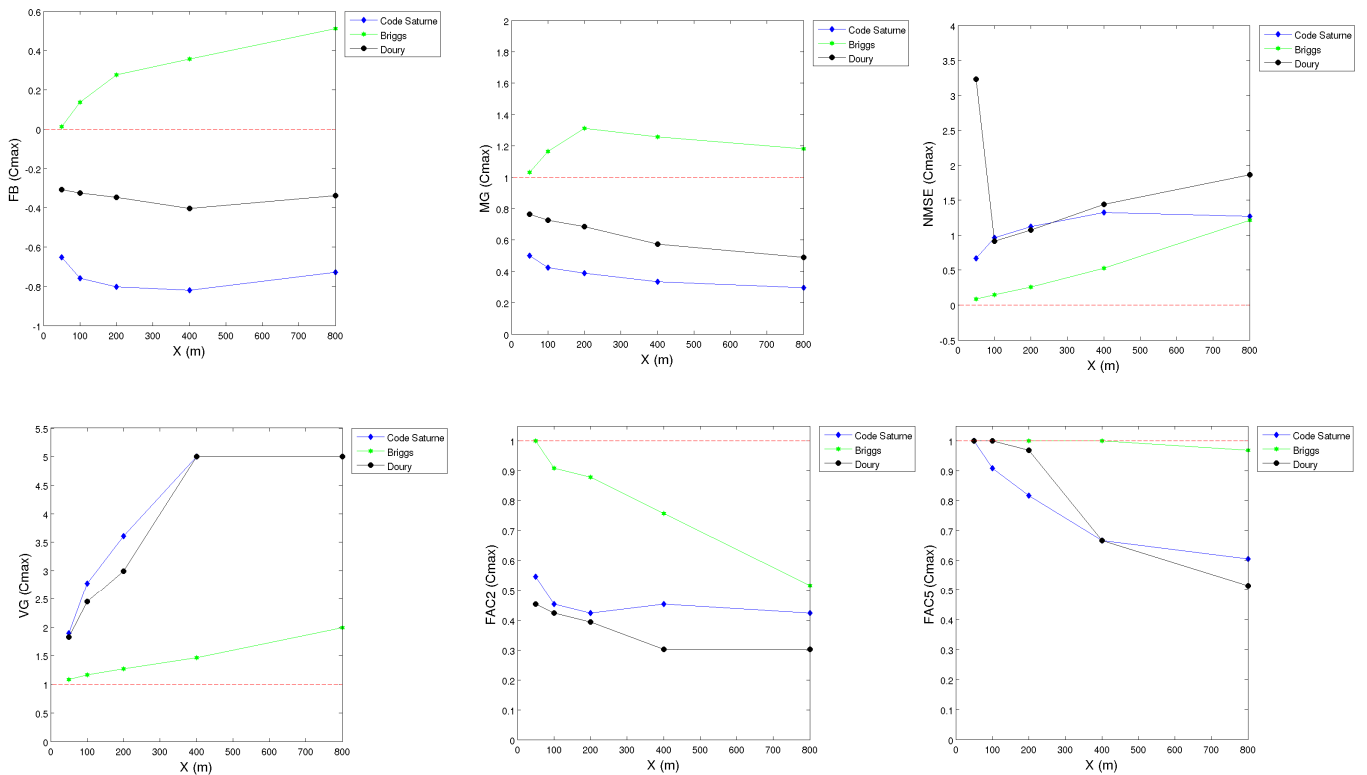


Figure 13 : Evolution des paramètres statistiques obtenus pour l'ensemble des maximums de concentration en stratification neutre, le long de l'axe de l'écoulement, par les modèles Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury. Les lignes tiretées rouges représentent les valeurs idéales des paramètres statistiques.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Code_Saturne	-0,6957	0.3818	1.731	4.6722	0.4606	0.8
Briggs	0.0681	1.1849	0.2432	1.3602	0.8121	0.9939
Doury	-0.3168	0.6386	1.6781	4.1446	0.3758	0.8303

Tableau 10: Paramètres statistiques obtenus pour l'ensemble des maximums de concentration en stratification neutre, sur les 5 arcs de mesures, par les modèles de Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury

Les résultats obtenus par Code_Saturne en termes de concentrations maximales, pour l'ensemble des cas neutres, sont assez satisfaisants, au regard de la valeur du FAC2. Tous les critères de performance relatifs aux paramètres statistiques ne sont cependant pas vérifiés, en particulier ce qui concerne le biais fractionnel FB et la variance géométrique quadratique moyenne VG.

Le modèle de Briggs apparaît être le plus adapté à reproduire les pics de concentration, avec un FAC2 de plus de 80% et un respect plus global des critères de satisfaction propres aux paramètres statistiques.

Anisotropie de la dispersion turbulente

De la même façon que pour l'expérience 21, nous élargissons à l'ensemble des cas neutres le modèle de dispersion anisotrope développé dans Code_Saturne, le but étant d'optimiser les résultats précédemment présentés. Globalement, l'ajout d'un coefficient K_{0h} compris entre 0.25 et 2.5 m^2/s , améliore nettement les prédictions du modèle Code_Saturne. En particulier, le FAC2 atteint plus de 70% lorsque l'étude est focalisée sur les pics de concentration, pour l'ensemble des arcs de mesure (Tab.11).

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Global	0.215	1.0167	1.1481	1.7941	0.4152	0.5876
Cmax	0.0717	0.701	0.4174	2.1592	0.7091	0.9091

Tableau 11 : Paramètres statistiques obtenus pour l'ensemble des résultats et pour les maximums de concentration en condition de stratification neutre, par le modèle Code_Saturne en condition de dispersion anisotrope

Une comparaison de ces résultats statistiques à ceux obtenus par Emmanuel Demaël est effectuée pour l'ensemble des cas neutres étudiés, en configuration de dispersion anisotrope (Tab.12). Les coefficients ajoutés aux diffusivités turbulentes horizontales ne sont cependant plus les mêmes, en partie à cause d'un nombre de Schmidt différent.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Global	-0,018	0.692	1.62	2.324	0.384	0.651
Cmax	0.473	0.807	1.685	2.78	0.552	0.891

Tableau 12 : Paramètres statistiques obtenus pour l'ensemble des résultats et pour les maximums de concentration en condition de stratification neutre, par le modèle d'Emmanuel Demaël en condition de dispersion anisotrope

Bien que l'on puisse difficilement comparer ces résultats aux nôtres, compte tenu des nombreuses différences existant entre nos deux études (versions de Code_Saturne, hauteurs des maillages ou coefficients K_{0h}), on peut toutefois affirmer que les performances du logiciel ne sont en rien dégradées dans la version la plus récente, voire qu'elles sont améliorées.

c. Conclusion

L'étude des cas répertoriés neutres de la campagne Prairie Grass a été menée avec un relatif succès. En effet, si les analyses statistiques portant sur l'ensemble des résultats s'avèrent fragiles (FAC2 = 15%), celles focalisées sur les maximums de concentration sont plus satisfaisantes (FAC2 = 46%). Cette conclusion concernant les pics de concentration se confirme lorsque l'anisotropie de la dispersion turbulente est considérée, avec une amélioration du FAC2 global (FAC2 = 70%).

2. Conditions de stratification stable

En condition de stratification stable, les effets thermiques influencent grandement le phénomène de dispersion de polluants. La densité de l'atmosphère et la température varient avec l'altitude, stratifiant ainsi l'atmosphère. La turbulence est détruite par la stratification et l'énergie cinétique de turbulence décroît globalement avec l'altitude. Les variables de l'écoulement (vitesse, énergie cinétique de turbulence, dissipation de la turbulence, viscosité turbulente, température, masse volumique) sont régies par la théorie de Monin-Obukhov en condition de stratification stable.

Sur les 68 expériences réalisées lors de la campagne Prairie Grass, seules 12 sont répertoriées comme stables, appartenant à la classe F de Pasquill.

a. Présentation d'un cas stable : l'expérience 59

L'expérience 59 se déroula le 25 août 1956, en pleine nuit. Avec une vitesse horizontale mesurée à 2m de 2.61 m/s, on illustre ici un cas relativement classique en conditions de stratification stable. On modélise l'injection du traceur passif avec un débit de 40.2 g/s, correspondant aux données expérimentales.

Dynamique de l'écoulement

La dynamique de l'écoulement simulé par Code_Saturne est satisfaisante et s'éloigne peu des observations expérimentales. Le profil vertical de vitesse horizontale u , de type logarithmique puis linéaire selon la théorie de Monin-Obukhov, se conserve bien tout le long du domaine (Fig.14a).

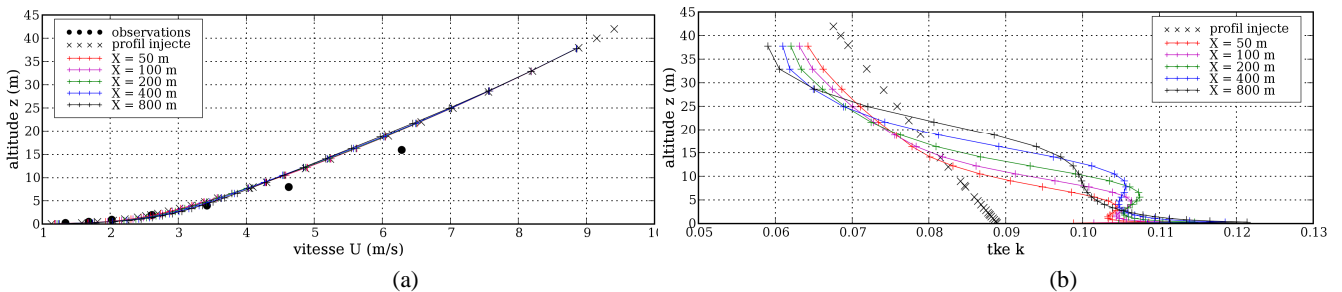


Figure 14 : Profils verticaux (a) de vitesse (m/s), (b) d'énergie cinétique de turbulence (m^2/s^2) obtenus pour l'expérience 59 à différentes distances de la source, suivant l'axe de l'écoulement, par le modèle Code_Saturne

Le profil d'énergie cinétique de turbulence k est moins bien conservé sur toute la longueur du domaine (Fig.14b). De la même façon qu'en condition de stratification neutre, un pic de turbulence est observé sur le deuxième niveau de la verticale, vers $z = 0.5m$. Celui-ci est légèrement réduit lorsque la température au sol est abaissée. Si les écarts restent toutefois raisonnables, ces écarts révèlent les difficultés souvent rencontrées lors de la modélisation de cas stable.

Dispersion des polluants

La dispersion atmosphérique est fortement atténuée en condition de stratification stable. On s'attend donc à des teneurs en polluant supérieures à celles obtenues précédemment en condition de stratification neutre.

L'établissement des profils latéraux de concentration en ppm (Fig.15), à différentes distances de la source suivant l'axe de l'écoulement et à 1.5 m du sol, permet la comparaison, par rapport aux observations, des prévisions obtenues par Code_Saturne et les deux modèles gaussiens de Briggs et Doury.

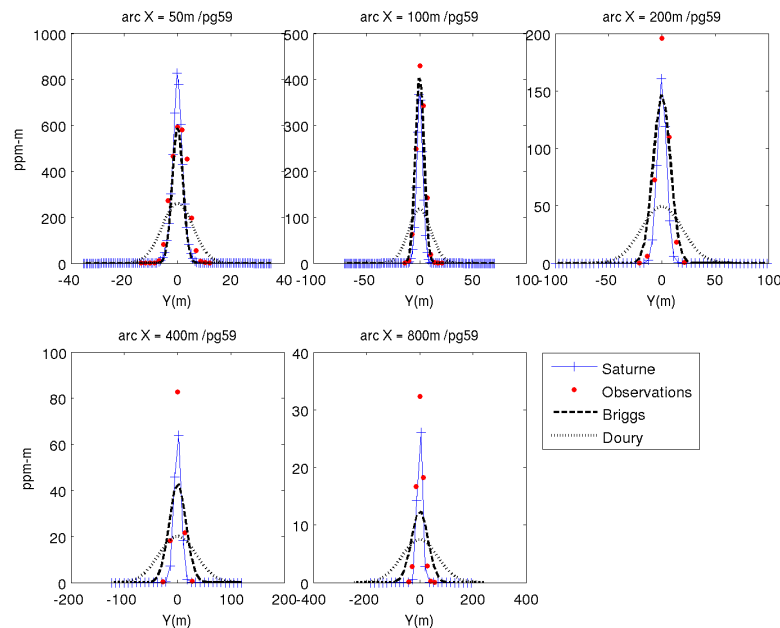


Figure 15 : Profils latéraux de concentration obtenus pour l'expérience 59 à différentes distances de la source et à 1.5m du sol, par les modèles Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury

Plusieurs commentaires peuvent être faits de ces résultats.

Concernant le [modèle Code_Saturne](#), les profils obtenus sont globalement en adéquation avec les observations. En particulier, on note que la dispersion latérale est plutôt conforme à l'expérience. Augmenter 'artificiellement' la diffusivité horizontale apparaît donc moins nécessaire que pour les cas de stratification neutre. La méthode anisotrope sera cependant appliquée à l'expérience 59 ainsi qu'à tous les cas répertoriés stables.

Les pics de concentration sont néanmoins difficilement reproduits par Code_Saturne: surestimés à 50m de la source, ils sont constamment sous-estimés au-delà. Ces figures témoignent ainsi d'une sous-estimation de la dispersion horizontale en champ proche, suivie par une surestimation au-delà de 100m du point d'injection.

Le [modèle gaussien de type Briggs](#) est satisfaisant, particulièrement en champ proche. Les pics de concentration sont cependant sous-estimés, témoignant d'une surestimation de la dispersion.

Le modèle gaussien de type Doury est quant à lui assez peu concluant, caractérisé par une dispersion d'écart-type latéral largement surestimé.

L'ensemble de ces analyses peut être illustrée par les diagrammes de dispersion suivants, comparant en échelle logarithmique les observations aux prévisions, pour l'ensemble des mesures (Fig.16).

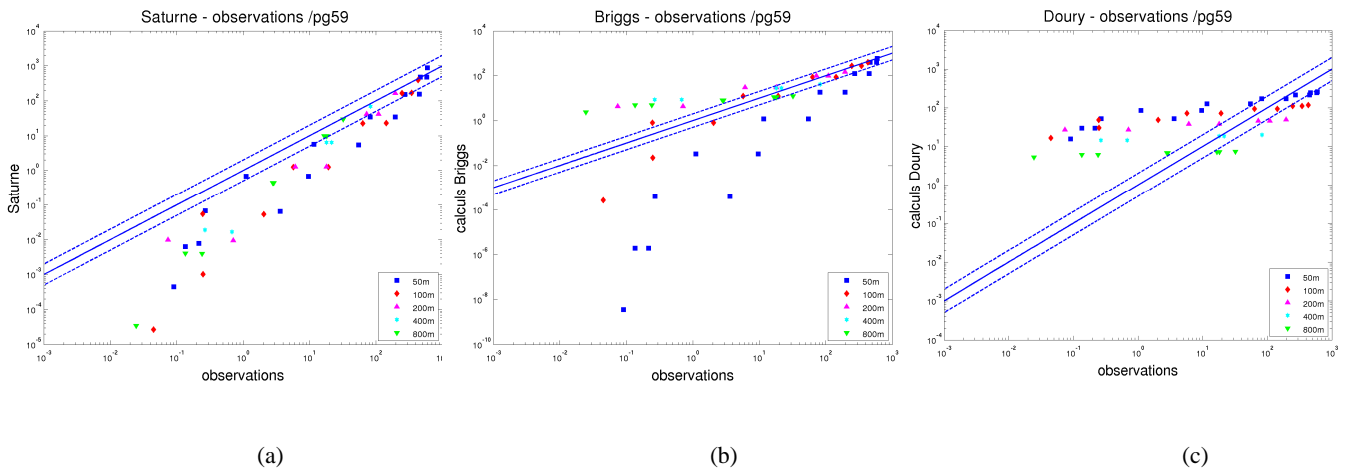


Figure 16. : Diagramme de dispersion de l'expérience 59 obtenus pour l'ensemble des résultats, par les modèles (a) Code_Saturne, (b) Briggs, (c) Doury

Le nuage de points correspondant aux prévisions de Code_Saturne présente une allure relativement parallèle à la première bissectrice. Sa partie gauche, située sous la borne inférieure de la zone du FAC2 idéal, révèle néanmoins une sous-estimation des concentrations par le modèle, en particulier dans la direction latérale. Ces écarts ne sont pas visibles dans les profils latéraux précédemment présentés car ils surviennent près du sol.

Le nuage de points relatifs aux prévisions du modèle de Briggs présente une sous-estimation des concentrations latérales à proximité de la source, tendance qui s'inverse en champ éloigné. Le diagramme du modèle de Doury témoigne quant à lui d'une surestimation des concentrations dans la direction latérale à l'écoulement.

Les diagrammes de dispersion suivants confirment ces analyses, en se focalisant sur les maximums de concentration (Fig.17).

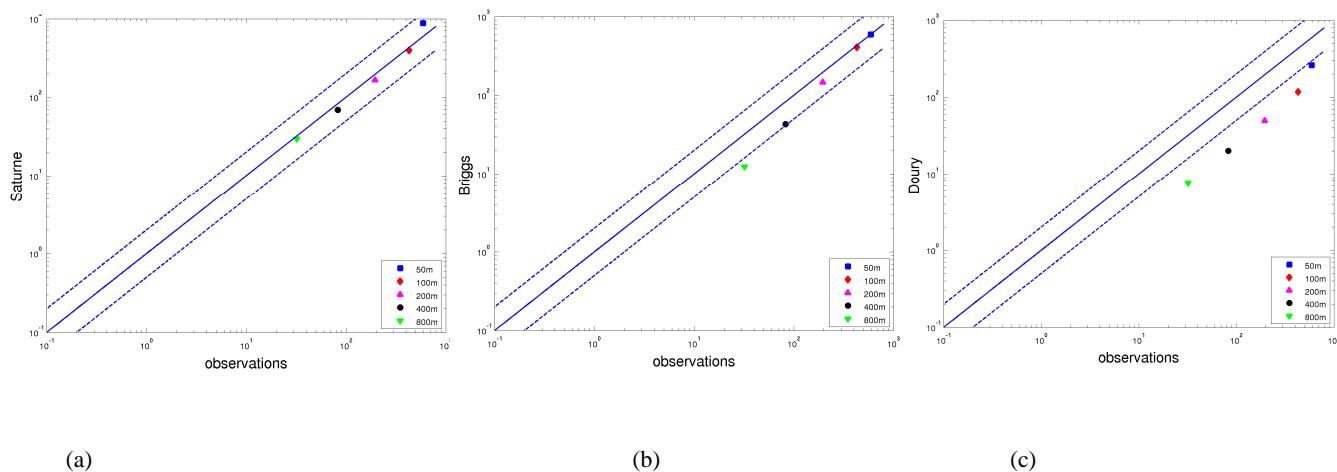


Figure 17: Diagramme de dispersion de l'expérience 59 obtenus pour les maximums de concentration, par les modèles (a) Code_Saturne isotrope, (b) Briggs, (c) Doury

Les pics de concentrations obtenus avec Code_Saturne sont très proches des observations, les cinq points appartenant à la zone de FAC2 idéal. Seul le profil établi à 50m de la source fait part d'une surestimation du maximum de concentration.

Le modèle gaussien de Briggs est aussi satisfaisant en termes de maximum de concentration quoique légèrement en deçà des observations à plus de 200m du point d'injection. Enfin, le modèle de Doury sous-estime les pics de concentration, comme l'illustraient les profils latéraux.

Paramètres statistiques

Une étude statistique est menée, permettant d'évaluer plus objectivement les modèles eulériens et gaussiens de Code_Saturne, Briggs et Doury. Les résultats propres à l'expérience 59, pour l'ensemble des prévisions, et sur l'ensemble de ces arcs sont regroupés dans le tableau suivant (Tab.13).

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Code_Saturne	0.2986	1.8940	0.8699	2.0438	0.2766	0.5319
Briggs	0.2784	1.1940	0.6397	2.0104	0.3830	0.5745
Doury	0.3012	1.2861	1.8003	2.3638	0.1702	0.5532

Tableau 13: Paramètres statistiques de l'expérience59 obtenus pour l'ensemble des résultats, sur les 5 arcs de mesures, par les modèles Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury

En tenant compte principalement du critère relatif au FAC2, le modèle Code_Saturne apparaît comme moyennement satisfaisant sur l'expérience 59 puisque seuls 27,66 % des résultats se situent à moins d'un facteur 2 des observations. Le modèle de Briggs donne globalement de meilleurs résultats. Le modèle gaussien de Doury est quant à lui en-dessous des performances atteintes par les deux autres modèles, le facteur 2 dépassant à peine 17%.

La même étude est menée sur les seuls maximums de concentration, les résultats statistiques sur l'ensemble des arcs étant seulement présentés (Tab.14).

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Code_Saturne	-0,1419	1.0248	0.2024	1.0464	1	1
Briggs	0.1031	1.4742	0.0152	1.3257	0.8	1
Doury	0.9817	3.5724	1.9238	5.3384	0	1

Tableau 14 : Paramètres statistiques de l'expérience 59 obtenus pour les maximums de concentration, sur les 5 arcs de mesures, par les modèles Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury

Comme le figurait le diagramme de dispersion précédemment présenté, l'estimation par Code_Saturne des pics de concentration de l'expérience 59 est statistiquement très satisfaisante, tous les critères de performance étant vérifiés et le FAC2 atteignant en particulier 100%.

Le modèle de Briggs reste quant à lui satisfaisant lorsque le modèle de Doury n'apparaît pas adapté à reproduire les maximums de concentration sur cette expérience.

Anisotropie de la dispersion turbulente

Nous appliquons à l'expérience 59 la méthode de dispersion turbulente anisotrope, pour laquelle les coefficients ajoutés aux termes de diffusivités turbulentes horizontales sont plus faibles que ceux nécessaires pour les cas de stratification neutre. Ceci tient au fait qu'en stratification stable, la dispersion, qu'elle soit horizontale ou verticale, étant atténuée par les effets thermiques, est globalement plus faible.

En particulier, dans la configuration Code_Saturne de l'expérience 59, un coefficient de 0.1 m²/s a été ajouté aux diffusivités turbulentes axiale K_x et latérale K_y , la diffusivité turbulente verticale K_z n'étant pas modifiée.

Les profils latéraux ainsi obtenus par chaque modèle (Fig.18) illustrent une meilleure reproduction par Code_Saturne de l'écart-type latéral, tout le long du domaine. A proximité de la source de polluant, on constate désormais une sous-estimation du pic de concentration.

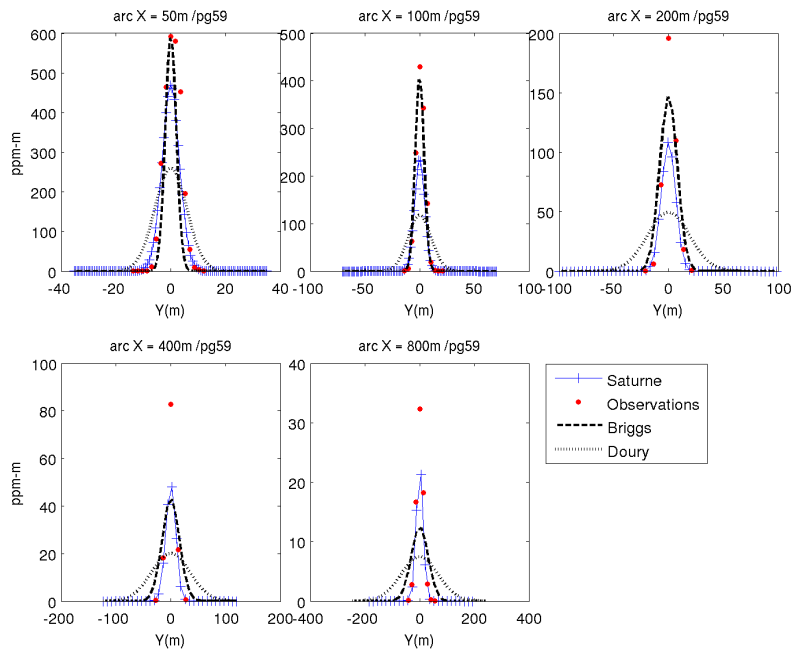


Figure 18: Profils latéraux de concentration de l'expérience 59 obtenus à différentes distances de la source et à 1.5m du sol, par les modèles Code_Saturne en condition de dispersion anisotrope, Briggs et Doury

Les résultats statistiques suivants témoignent ainsi d'une nette amélioration des performances du modèle Code_Saturne, en ce qui concerne l'étude de l'ensemble des prévisions sur tout le domaine (Tab.15). En particulier, le FAC2 est passé d'environ 28% en dispersion isotrope à près de 75% en dispersion anisotrope. Les résultats propres à l'étude des maximums de concentration, sur l'ensemble des arcs de mesures, diffèrent cependant peu.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Global	0.3097	1.322	0.5607	1.1823	0.7447	0.8723
Cmax	0.3902	1.5672	0.2441	1.249	1	1

Tableau 15: Paramètres statistiques de l'expérience 59 obtenus pour l'ensemble des résultats et pour les maximums de concentration, par le modèle Code_Saturne en condition de dispersion anisotrope

b. Etude globale des cas stables

Les 12 expériences répertoriées stables de la campagne Prairie Grass sont simulées et analysées de façon analogue à l'étude précédemment menée sur le cas 59.

Il s'agit d'estimer les performances du logiciel Code_Saturne sur la modélisation de la dispersion en condition de stratification stable, par comparaison aux relevés expérimentaux et aux résultats obtenus

par les modèles gaussien de Briggs et de Doury. Les résultats statistiques atteints par Code_Saturne sont détaillés par arc de mesure, dans l'Annexe B.

Ensemble des résultats

On présente ici les résultats statistiques obtenus sur l'ensemble des cas de stratification stable, en particulier les variations des paramètres en fonction de l'éloignement à la source, pour chacun des trois modèles et pour l'ensemble des prévisions (Fig.19).

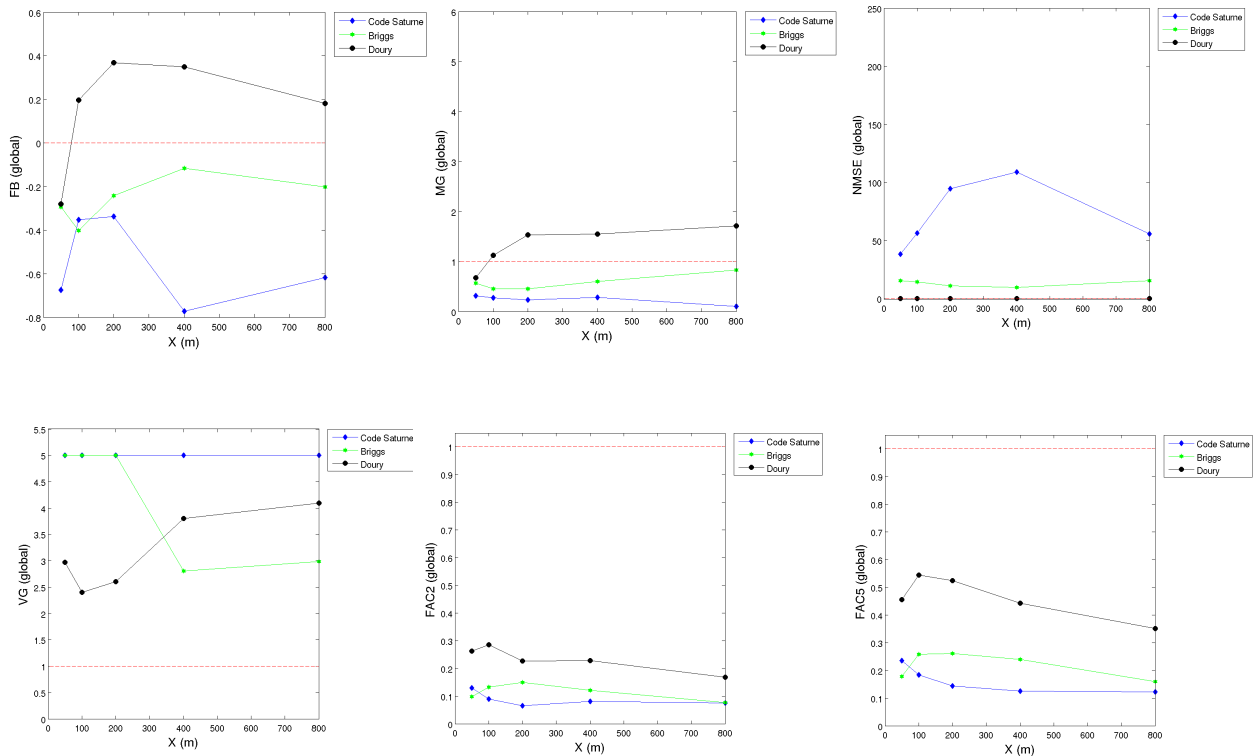


Figure 19: Evolution des paramètres statistiques obtenus pour l'ensemble des résultats en condition de stratification stable, le long de l'axe de l'écoulement, par les modèles Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury. Les lignes tiretées rouges représentent les valeurs idéales des paramètres statistiques.

Les résultats donnés par Code_Saturne pour l'ensemble des résultats en condition de stratification stable s'avèrent ainsi peu concluants, quelque soit la distance à la source. Si les indicateurs statistiques donnés par notre modèle sont constamment éloignés de leur valeur cible, ceux relatifs aux modèles gaussiens sont aussi au-delà des critères de performances considérés.

Les statistiques globales, calculées pour l'ensemble des résultats en cas de stratification stable et sur l'ensemble des arcs de mesures, illustrent encore cette analyse (Tab.16).

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Code_Saturne	-0,5535	0.2697	71.3818	47.1587	0.0925	0.1725
Briggs	-0,3134	0.553	24.918	6.5509	0.1118	0.2131
Doury	-0,0505	1.1681	3.2349	2.9949	0.2316	0.4567

Tableau 16: Paramètres statistiques obtenus pour l'ensemble des résultats en condition de stratification stable, sur les 5 arcs de mesures, par les modèles de Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury

Maximums de concentration

On restreint l'étude des résultats en condition de stratification stable aux seuls maximums de concentration, notamment à travers les diagrammes de dispersion suivants (Fig.20).

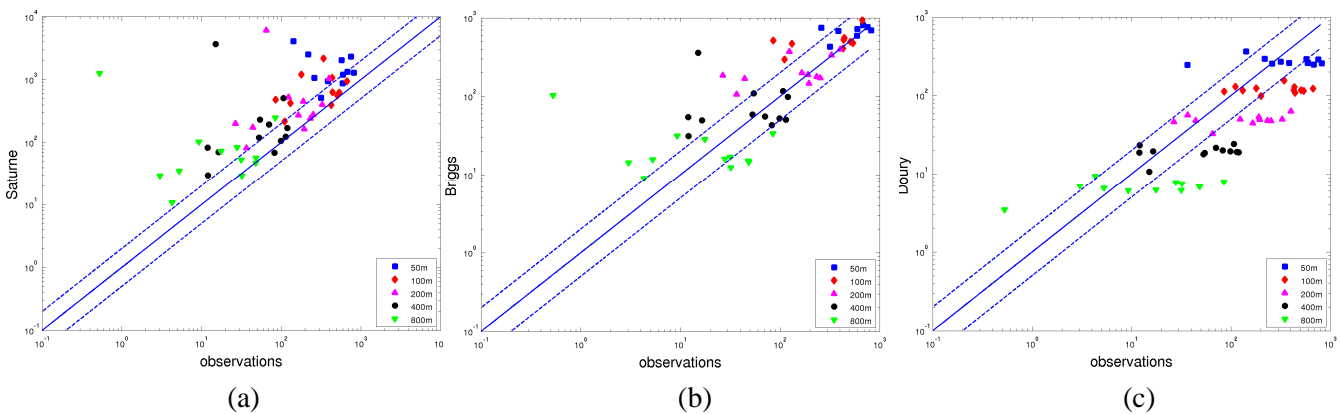


Figure 20 : Diagramme de dispersion obtenus pour les maximums de concentration en condition de stratification stable, par les modèles (a) Code_Saturne isotrope, (b) Briggs, (c) Doury

Une tendance à la surestimation des pics de concentration est ainsi révélée pour le modèle Code_Saturne, en particulier en champ lointain. Le nuage de points est toutefois relativement concentré autour de la zone de validation vérifiant $0.5 < FAC2 < 2$.

Au contraire, les modèles de Briggs et de Doury présentent des nuages de points plus dispersés, avec une tendance à la surestimation des maximums de concentration pour le premier modèle et à la sous-estimation pour le second.

La capacité de chaque modèle à reproduire les pics de concentration pour l'ensemble des cas de stratification stable est de nouveau évaluée à travers les indicateurs statistiques précédemment décrits, soit en fonction de la distance à la source (Fig.21), soit de façon globale sur tout le domaine (Tab.17).

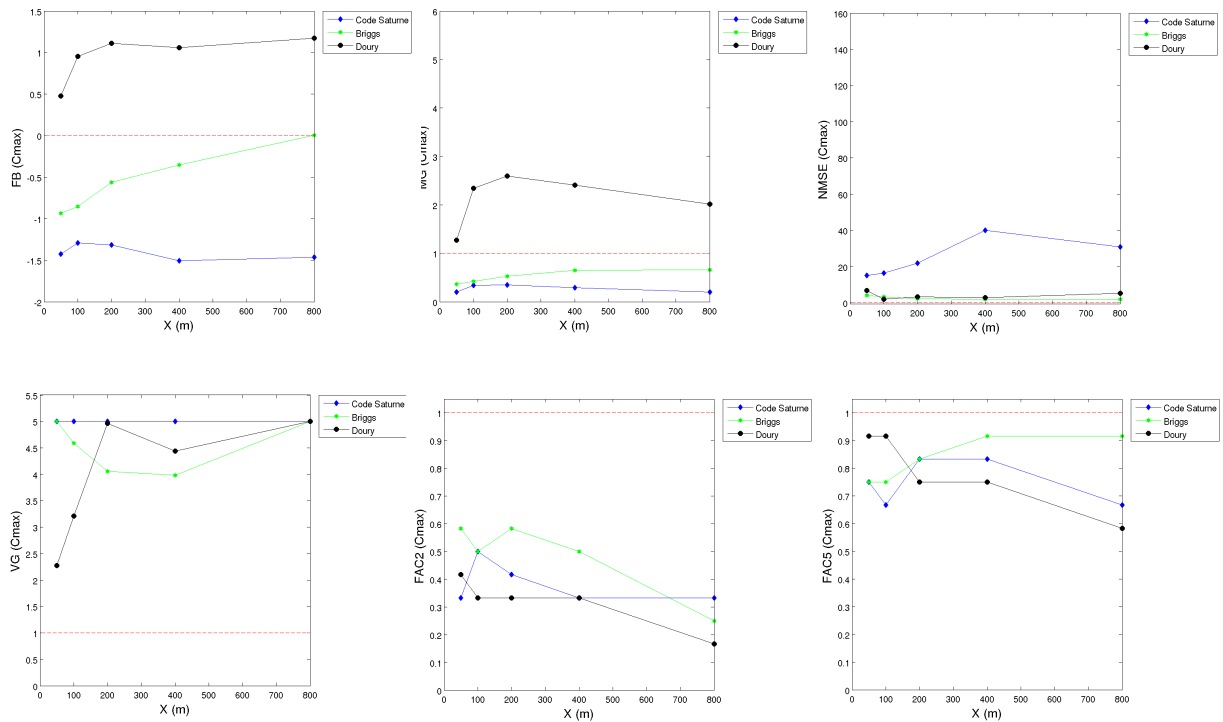


Figure 21: Evolution des paramètres statistiques obtenus pour les maximums de concentration en condition de stratification stable, le long de l'axe de l'écoulement, par les modèles Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury. Les lignes tiretées rouges représentent les valeurs idéales des paramètres statistiques.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Code_Saturne	-1,3783	0.2666	26.1183	57.8488	0.3833	0.75
Briggs	-0,8191	0.511	6.653	8.2546	0.4833	0.8333
Doury	0.7600	2.0634	2.1114	4.2494	0.3167	0.7833

Tableau 18: Paramètres statistiques obtenus pour les maximums de concentration en condition de stratification stable, sur les 5 arcs de mesures, par les modèles de Code_Saturne isotrope, Briggs et Doury

Si les facteurs 2 et 5 obtenus par Code_Saturne pour l'ensemble des pics de concentrations des expériences stables s'avèrent bons, il n'en est pas de même des autres paramètres statistiques, qui se trouvent bien en-dehors des zones de validation proposées. Ces remarques s'appliquent cependant aussi aux modèles gaussiens de Briggs et Doury.

Anisotropie de la dispersion turbulente

De la même façon que pour l'expérience 59, nous implémentons dans le modèle Code_Saturne une dispersion turbulente anisotrope, en augmentant les diffusivités turbulentes axiale K_x et latérale K_y . Pour chaque simulation en condition de stratification stable, un coefficient compris entre 0.05 et 0.2 m^2/s est ajouté. On notera que ces coefficients sont inférieurs à ceux utilisés pour les expériences en conditions de stratification neutre.

Si les critères de performance ne sont pas toujours atteints, la modélisation d'une dispersion turbulente anisotrope permet toutefois de s'en rapprocher (Tab.19). En particulier, le FAC2 a doublé par rapport aux résultats en dispersion isotrope, que ce soit pour l'ensemble des mesures (passant de 9% à 22%) ou seulement pour les pics de concentration (passant de 38% à 62%).

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
Global	-0,4536	0.5031	12.3804	7.6891	0.2233	0.3533
Cmax	-0,5757	0.5158	3.7192	8.6546	0.6167	0.8333

Tableau 19: Paramètres statistiques obtenus pour l'ensemble des résultats et pour les maximums de concentration en condition de stratification stable, par le modèle Code_Saturne en condition de dispersion anisotrope

c. Conclusion

La modélisation par Code_Saturne des expériences de la campagne Prairie Grass en condition de stratification stable revêt plus de difficultés à concorder aux observations. Les résultats statistiques présentent dans leur ensemble des lacunes, autant sur l'ensemble des mesures que sur les maximums de concentration. L'ajout d'un coefficient supplémentaire, relativement faible, à la diffusivité turbulente latérale améliore cependant les performances du modèle, en particulier en termes de maximums de concentration.

A la difficulté de maintenir sur tout le domaine les profils verticaux régis par la théorie de Monin-Obukhov en condition de stratification stable, s'ajoute le peu d'expériences répertoriées stables réellement exploitables. En effet, sur les 12 cas de figure considérés, près de la moitié présentent des relevés expérimentaux erronés : manque de données, apparition de pics secondaires ou encore variation importante de la direction du vent. Les paramètres statistiques, basés sur une comparaison à ces observations, en sont donc impactés.

3. Conclusions de l'étude et perspectives

L'évaluation du modèle Code_Saturne sur terrain plat, en condition de stabilité atmosphérique neutre et stable, a été effectuée par comparaison aux observations de la campagne Prairie Grass et aux résultats des modèles gaussiens de Briggs et de Doury. Sur les 68 expériences répertoriées, 45 ont ainsi été modélisées et analysées statistiquement.

Il ressort de cette étude que les cas de stabilité neutre sont mieux reproduits par Code_Saturne, notamment lorsqu'on considère la dispersion turbulente comme anisotrope, près de 71% des maximums de concentration modélisés étant alors à moins d'un facteur 2 des observations. En particulier, les résultats obtenus avec la version précédente de Code_Saturne n'ont pas été dégradés, voire même, ont été améliorés.

La modélisation des cas stables s'est avérée plus délicate, ce qui pourrait expliquer que peu d'études s'y consacrent. En particulier, les profils verticaux donnés par la théorie de Monin-Obukhov se stabilisent plus difficilement le long du domaine et les échanges thermiques entre le sol et

l'atmosphère restent encore complexes à modéliser, notamment en ce qui concerne la température au sol. Les résultats statistiques n'en sont pas pour autant alarmants et sont nettement meilleurs en considérant la dispersion turbulente anisotrope, pour laquelle un FAC2 de 62% est atteint pour les pics de concentration.

Certaines difficultés rencontrées se doivent cependant d'être soulignées dans cette partie, sans pour autant nuire aux résultats obtenus.

Tout d'abord, concernant les données nécessaires aux modélisations, le nombre de sources bibliographiques différentes a parfois rendu délicate la répartition des expériences de Prairie Grass dans les classes de stabilité de Pasquill. Un critère basé sur la longueur de Monin-Obukhov a été utilisé mais cette donnée, issue de l'exploitation des mesures expérimentales, variait parfois selon les sources bibliographiques utilisées. Dans ces cas de figure, nous avons privilégié les résultats issus de la méthode itérative précédemment évoquée (Musson-Genon, 2007). Cette classification parfois mal définie des expériences de Prairie Grass rend malheureusement la comparaison des performances de Code_Saturne avec d'autres modèles difficile. Peu d'études spécifient en effet les expériences considérées et leur classe de Pasquill pour l'établissement des résultats statistiques.

D'autre part, comme nous l'avons souligné pour l'étude en stratification stable, certaines expériences présentent des relevés inexploitable. Ceci explique que sur les 25 cas non modélisés dans cette étude, certains traitent de conditions de stratification instable et d'autres ont probablement été écartés d'office, par manque d'exploitation possible, y compris lors des études précédentes.

Concernant l'emploi des paramètres statistiques, il est important de souligner la difficulté de l'étude. Selon le critère considéré, un modèle apparaît en effet satisfaisant ou non et l'évaluation statistique doit être menée en fonction des besoins de l'étude. Pour une étude d'impact, considérer en priorité le FAC2 semble être suffisant et couramment employé.

Enfin, l'analyse menée en dispersion anisotrope a été effectuée en complément de l'étude de validation et n'était pas à priori envisagée en début de stage. Si les résultats statistiques sont conformes à nos espérances, au regard du FAC2, il est important de souligner le défaut majeur de cette entreprise : les coefficients ajoutés aux diffusivités turbulentes axiale et latérale ont été fixés par ajustement, rendant ainsi impossible l'automatisation de la méthode pour les études d'impacts réalisées par EDF. Néanmoins, les valeurs utilisées restent dans des fourchettes raisonnables et l'analyse aura eu l'intérêt d'insister sur l'importance d'une modélisation anisotrope de la dispersion dans Code_Saturne.

Pour conclure sur cette étude, nous pouvons avancer que Code_Saturne a réussi son étape de validation sur terrain plat, en condition de stratification neutre et stable. A l'avenir, certains points restent cependant à éclaircir. L'anisotropie de la dispersion doit-elle être implémentée dans le modèle et si oui, comment systématiser le choix du coefficient ajouté à la diffusivité turbulente latérale ? Les performances obtenues par Code_Saturne peuvent-elles se retrouver en terrain complexe ? en condition de stratification instable ? Autant de questions sur lesquelles l'équipe « Environnement Atmosphérique » ne manquera pas de se pencher.

Conclusion générale

Durant ce travail de fin d'études, il m'a été donné de mener à terme une étude de validation du modèle Code_Saturne, du choix des données de référence à la comparaison statistique des résultats, en passant par la mise en place des simulations. Les enjeux de l'étude, importants pour l'utilisation du logiciel, n'ont fait que stimuler mon envie de parvenir à des résultats.

De très nombreux enseignements, tant techniques qu'humains, m'ont été apportés durant ces six mois de stage au sein d'EFF R&D-CEREA.

L'utilisation d'un modèle de mécanique des fluides numériques adapté à l'atmosphère, m'a permis de mettre à profit les connaissances acquises lors de ma double-formation à l'Ecole Centrale de Nantes, des rouages de la modélisation numérique, découverts en option disciplinaire 'Hydrodynamique et Génie Océanique', à la physique de l'atmosphère turbulente, appréciée lors des cours de la spécialité 'Atmosphère, Eau et Environnements Urbains' du Master Recherche 'Sciences et Techniques des Environnements Urbains'.

Si mon précédent stage en bureau d'études hydrodynamiques m'avait donné l'occasion d'utiliser un logiciel commercial plutôt intuitif, la prise en main de Code_Saturne s'est avérée plus subtile. D'architecture assez complexe, composée d'une multitude de routines Fortran imbriquées, le logiciel dispose néanmoins d'une interface graphique agréable. La paramétrisation de la source massique ou encore celle l'anisotropie de la dispersion turbulente ont notamment nécessité la modification de certaines de ces routines utilisateur.

Première expérience au sein d'un département de Recherche et Développement, ce travail de fin d'études m'aura aussi donné la chance de découvrir le monde de la recherche appliquée, ses enjeux et surtout son mode de fonctionnement. J'ai rapidement compris qu'échanger ses expériences et ses difficultés avec les autres chercheurs était indispensable au bon déroulement de mon travail. La passion scientifique et le dévouement des membres de l'équipe « Environnement Atmosphérique » ont donc beaucoup contribué à cette étude.

Enfin, cette expérience marque le début de ma carrière dans un domaine qui me tient à cœur, celui de l'environnement atmosphérique. Un poste d'ingénieur de recherche m'a en effet été attribué au sein du CEREA, à compter d'octobre 2010. J'aurais notamment pour mission des études d'impacts réalisées avec Code_Saturne, orientées sur la micro-physique de l'eau.

Bibliographie

- Archambeau, F., & al. (2003). Code_Saturne: a Finite Volume Code for the Computation of Turbulent Incompressible Flows - Industrial Applications, *Internation Journal on Finite Volumes*.
- Barad, M. (1958). Project Prairie Grass, a Fiel Program in Diffusion . *Geopys. Res. Papers, vol. I-II, Air Force Cambridge Research Center* .
- Briggs, G. (1973). Diffusion estimation of small emissions. *Tech. rept. Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory, Oak Ridge, TN.1* .
- Chang, J. H. (2004). Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics* , 167-196.
- Demaël, E. &. (2007). Comparative evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian Plule models based on Prairie Grass dispersion experiment . *Journal of Applied Meteorology and Climatology* , 888-900.
- Demaël, E. (2007). Modélisation de la dispersion atmosphérique en milieu complexe et incertitudes associées. *Ph.D. thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, CEREAs, Centre de Recherche et d'Enseignement en Environnement Atmosphérique* .
- Doury, A. (1983). Une méthode d'approximation instantanée de la dispersion atmosphérique. *Tech. rept. SR-85. CEA/IPSN/IAEA* .
- Hanna, S. (2010). A history of classic atmospheric dispersion field experiments. *AMS Annual Meeting*.
- Hanna, S. (1982). Handbook on Atmospheric Diffusion. *Technical Information Center, U.S. Departement of Energy* .
- Hargreaves, D. &. (2006). On the use of the k-e model in commercial cfd software to model the neutral atmospheric boundary layer. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* , 213-228.
- Milliez, M. (2006). Modélisation micro-météorologique en milieu urbain : dispersion des polluants et prise en compte des effets radiatifs. *Ph.D. thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, CEREAs, Centre de Recherche et d'Enseignement en Environnement Atmosphérique* .
- Musson-Genon, L. e. (2007). Reconstruction of the surface-layer vertical structure from measurements of wind, temperature and humidity at two levels. *Boundary-Layer Meteorol.*
- Pasquill, F. (1961). The Estimation of Dispersion of wind-borne Material. *Meteorological Magazine, Vol.90, No.1063* , 33-49.
- Reynolds, O. (1894). On the dynamical theory of turbulent incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*

Annexes

A. Conditions de simulation Code_Saturne des expériences Prairie Grass

Le tableau suivant regroupe l'ensemble des données nécessaire à la mise en place des simulations sous Code_Saturne.

Pour chaque expérience ou 'cas' de la campagne expérimentale, on caractérise son état de stratification atmosphérique à travers sa classe de stabilité au sens de Pasquill et sa longueur de Monin-Obukhov L_{MO} . Les données météorologiques expérimentales de vitesse et de température, en deux altitudes, sont nécessaires à l'établissement des profils verticaux, régis par la théorie de Monin-Obukhov et injectés comme conditions d'entrée. Enfin, la donnée du débit de rejet est essentielle à la modélisation du rejet de traceur passif. La dernière colonne renseigne les coefficients K_{0h} ajoutés aux diffusivités turbulentes axiale K_x et latérale K_y dans les simulations sous configuration anisotrope de Code_Saturne.

Le jeu de couleurs permet de distinguer les cas simulés dans notre étude, référencés neutres (couleur orange) et stables (couleur bleue). Les cas non traités correspondent à des stratifications instables.

Cas N°	Classe de Pasquill	L_{MO} (m)	Profil météo				Débit de rejet (g/s)	K_{0h} (m ² /s)
			Vitesse U (m/s)		Température T (°C)			
			z=2m	z=8m	z=2m	z=8m		
1								
2								
3	F	1,4	0,44	2,11	19,83	22,41	56,3	0,05
4	F	6,2	1,29	3,04	17,5	20,09	50,5	0,1
5								
6								
7								
8	C	- 16,7	4,52	5,4	31,1	30,15	91,1	1,5
9	C	- 33,3	6,9	8,42	27,39	26,25	92	1,5
10								
11								
12								
13	F	3,4	1,46	2,64	20,39	21,64	61,1	0,2
14	F	8,4	1,39	3,48	16,25	19,76	49,1	0,1
15								
16								
17	D	50,0	3,41	4,55	27,44	27,83	56,5	0,25
18	E	25,0	3,22	4,88	23,52	24,3	57,6	0,25
19	C	- 25,0	5,8	7,21	28,59	27,77	101,8	1,5
20	D	- 50,0	9,38	11,3	32,49	30,88	101,2	1,5
21	D	100,0	6,11	7,72	28,6	28,84	50,9	1,5
22	D	204,1	7,39	9,33	26,42	26,7	48,4	0,6

23	D	100,0	6,05	7,84	23,4	23,52	40,9	0,7
24	D	250,0	5,86	7,64	21,89	21,99	41,2	0,8
25								
26								
27								
28	E	25,0	2,55	3,88	24,27	24,76	41,7	0,4
29	D	33,3	3,94	5,29	25,36	25,81	41,5	0,5
30								
31								
32	F	8,3	2,13	4,12	22,93	25,33	41,4	0,2
33	D	- 50,0	7,56	9,55	28,73	27,88	94,7	0,5
34	D	- 100,0	9,2	11,28	30,19	29,21	97,4	2,5
35 S	F	79,7	3,73	5,2	22,28	22,68	41,8	0,2
35								
36	F	7,7	1,86	3,42	18,94	19,81	40	0,1
37	D	100,0	4,59	6,08	20,65	20,9	40,3	1
38	D	100,0	4,28	5,85	19,82	19,93	45,4	0,25
39	F	14,9	2,29	4,19	20,47	22,39	40,7	0,1
40	F	12,7	2,08	3,43	20,29	21,11	40,5	0,05
41	E	33,3	3,69	5,5	20,2	20,82	39,9	0,1
42	D	100,0	5,94	7,51	21,49	21,68	56,4	0,5
43	C	- 16,7	5,22	6,06	33,05	32,07	98,9	0,5
44	C	- 25,0	5,71	7,19	35,43	34,37	100,7	1
45	D	- 100,0	6,02	7,35	35,04	34,75	100,8	1,5
46	D	100,0	5,56	7,07	32,74	33,01	99,7	0,5
47								
48 S								
48	D	- 50,0	7,84	9,61	18,4	17,7	104,1	1
49	C	- 25,0	6,74	8,02	23,29	21,94	102	1,5
50	C	- 25,0	6,73	7,96	28,64	27,68	102,8	0,5
51	D	- 33,3	6,82	8,04	29,8	29,13	102,4	0,5
52								
53	F	10,0	2,28	4,46	17,39	20,26	45,2	0,1
54	D	33,3	3,94	5,37	18,68	19,31	43,4	0,2
55	D	100,0	5,94	7,55	16,75	17,08	45,3	0,8
56	D	100,0	4,75	6,19	15,29	15,7	45,9	0,8
57	D	- 100,0	7,2	8,79	34,11	33,76	101,5	1
58	F	6,3	2,24	4,33	23,64	28,49	40,5	0,1
59	F	11,1	2,61	4,62	23,6	25,34	40,2	0,1
60	D	50,0	4,57	5,95	25,75	26,17	38,5	0,2
61	D	- 33,3	7,82	9,26	31,63	30,41	102,1	1
62	C	- 33,3	5,18	6,03	30,75	30	102,1	1,5
65								
66								
67								
68								

	Stratification neutre
	Stratification stable
	Stratification instable

B. Résultats des simulations Code_Saturne détaillés par arc de mesure

On trouvera ci-après les résultats statistiques relatifs aux simulations Code_Saturne, détaillés par arc de mesure, établis pour l'ensemble des expériences répertoriées neutres et stables, en condition de dispersion isotrope et anisotrope.

1. Pour l'ensemble des expériences en condition de stratification neutre

a. En condition de dispersion isotrope

Pour l'ensemble des résultats

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
50m	0.2253	1.2084	2.0265	1.9812	0.1629	0.2938
100m	0.1303	0.9274	2.6131	1.9578	0.1351	0.2674
200m	0.0609	0.9192	3.1202	2.6088	0.1298	0.2681
400m	-0.0427	0.7297	3.4093	3.7190	0.1459	0.2812
800m	-0.1456	0.6403	2.9972	5.0437	0.1865	0.3715
Global	0.1885	0.8777	4.3896	2.8300	0.1530	0.2967

Pour les maximums de concentration

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
50m	-0.6533	0.5004	0.6689	1.8887	0.5455	1.0000
100m	-0.7601	0.4225	0.9598	2.7747	0.4545	0.9091
200m	-0.8028	0.3873	1.1198	3.6061	0.4242	0.8182
400m	-0.8206	0.3349	1.3259	7.0436	0.4545	0.6667
800m	-0.7287	0.2959	1.2661	16.7254	0.4242	0.6061
Global	-0.6957	0.3818	1.7310	4.6722	0.4606	0.8000

b. En condition de dispersion anisotrope

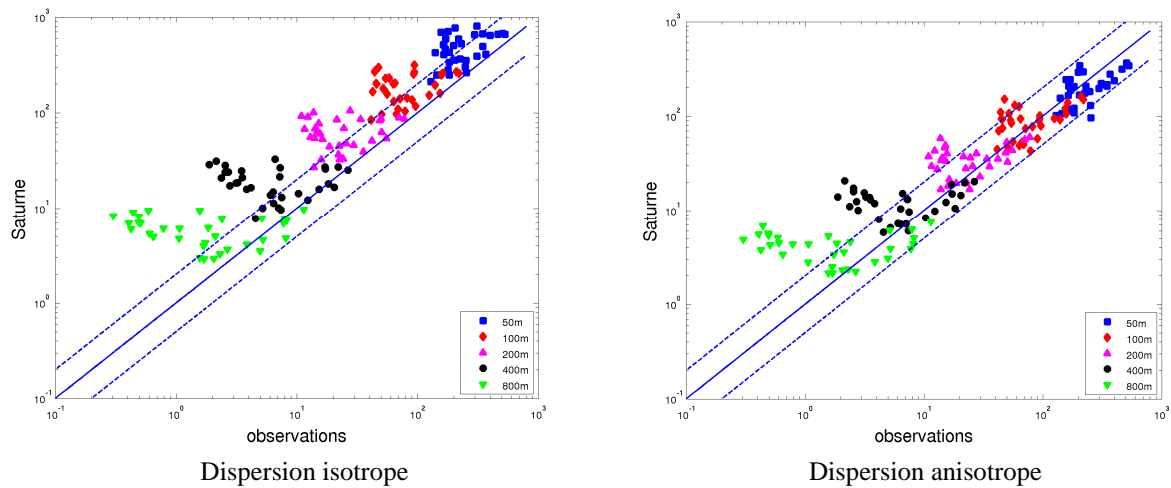
Pour l'ensemble des résultats

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
50m	0.2555	1.2628	0.5329	1.3909	0.5262	0.6640
100m	0.1511	1.1357	0.6456	1.3804	0.4930	0.6407
200m	0.0724	1.0423	1.0098	1.6516	0.3693	0.5717
400m	-0.0314	0.8431	1.6236	2.2211	0.3044	0.4968
800m	-0.1332	0.6929	2.0941	3.5035	0.2994	0.5047
Global	0.2150	1.0167	1.1481	1.7941	0.4152	0.5876

Pour les maximums de concentration

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
50m	0.1926	1.2018	0.1719	1.1681	0.9697	1.0000
100m	-0.0537	0.8940	0.2138	1.2546	0.7879	1.0000
200m	-0.2441	0.7086	0.3194	1.5261	0.6667	1.0000
400m	-0.4081	0.5263	0.5958	2.8853	0.6061	0.8788
800m	-0.3981	0.4225	0.8487	7.2726	0.5152	0.6667
Global	0.0717	0.7010	0.4174	2.1592	0.7091	0.9091

Les effets de la dispersion anisotrope implémentée dans Code_Saturne apparaissent plus clairement dans les diagrammes de dispersion suivants, établis pour les maximums de concentration de l'ensemble des expériences répertoriées neutres, en condition de dispersion isotrope et anisotrope.



L'anisotropie de la diffusivité turbulente impacte en particulier les maximums de concentration obtenus à proximité de la source, jusqu'à 200m environ. Les nuages de points relatifs à ces arcs de mesure se concentrent en effet davantage dans la zone du facteur 2 idéale, par comparaison au diagramme de dispersion obtenu pour une configuration isotrope de la dispersion.

2. Pour l'ensemble des expériences en condition de stratification stable

a. En condition de dispersion isotrope

Pour l'ensemble des résultats

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
50m	-0.6758	0.3166	38.3926	24.2026	0.1299	0.2356
100m	-0.3524	0.2706	56.4149	56.4871	0.0899	0.1835
200m	-0.3380	0.2296	94.4066	191.8449	0.0658	0.1440
400m	-0.7722	0.2831	108.8928	14.2959	0.0813	0.1250
800m	-0.6187	0.0982	55.5959	1114.2165	0.0745	0.1223
Global	-0.5535	0.2697	71.3818	47.1587	0.0925	0.1725

Pour les maximums de concentration

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
50m	-1.4250	0.2021	15.0371	145.2708	0.3333	0.7500
100m	-1.2920	0.3392	16.4978	10.6019	0.5000	0.6667
200m	-1.3155	0.3470	21.8954	13.6478	0.4167	0.8333
400m	-1.5079	0.2864	40.1592	37.2124	0.3333	0.8333
800m	-1.4659	0.1976	30.7705	828.2548	0.3333	0.6667
Global	-1.3783	0.2666	26.1183	57.8488	0.3833	0.7500

b. En condition de dispersion anisotrope

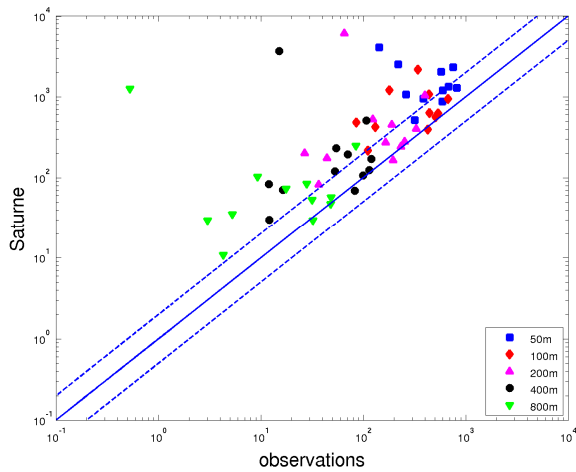
Pour l'ensemble des résultats

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
50m	-0.6142	0.4553	7.2258	8.2884	0.3112	0.4592
100m	-0.2619	0.5635	8.5520	7.3490	0.2554	0.4029
200m	-0.1528	0.5013	12.8786	11.8384	0.1646	0.2881
400m	-0.3185	0.6130	13.0589	2.9636	0.1688	0.2938
800m	-0.4603	0.4401	10.6902	7.8939	0.1436	0.2287
Global	-0.4536	0.5031	12.3804	7.6891	0.2233	0.3533

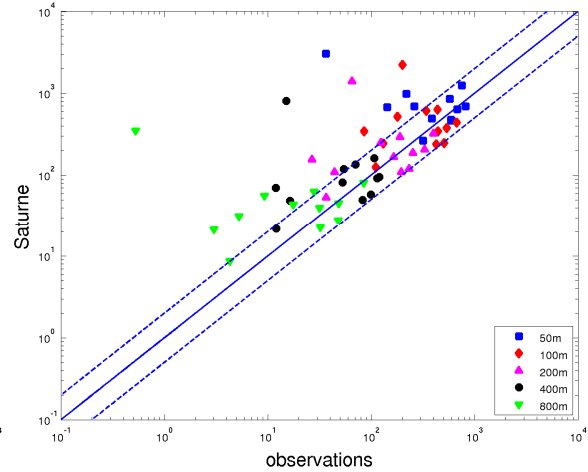
Pour les maximums de concentration

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
50m	-0.6494	0.4824	2.2322	8.6583	0.6667	0.9167
100m	-0.4292	0.7096	2.1210	2.4759	0.6667	0.9167
200m	-0.4844	0.6584	3.2651	3.5761	0.6667	0.8333
400m	-0.7884	0.5054	5.9412	6.5361	0.6667	0.8333
800m	-0.8643	0.3204	6.2059	96.9012	0.4167	0.6667
Global	-0.5757	0.5158	3.7192	8.6546	0.6167	0.8333

Les diagrammes de dispersion suivants sont établis pour les maximums de concentration obtenus par Code_Saturne, sur l'ensemble des expériences répertoriées stables, en condition de dispersion isotrope et anisotrope.



Dispersion isotrope



Dispersion anisotrope

Les effets de l'anisotropie de la dispersion sont moins nets que pour l'étude sur l'ensemble des expériences répertoriées neutres. Néanmoins l'ajout d'un coefficient supplémentaire aux diffusivités turbulentes axiale et latérale rend le nuage de points moins dispersé, avec davantage de points dans la zone idéale du facteur 2 et ce, sur tout le domaine.