



HAL
open science

Modélisation numérique de la turbulence et de la dispersion atmosphérique par faibles vents en milieu urbain

Boulos Alam

► **To cite this version:**

Boulos Alam. Modélisation numérique de la turbulence et de la dispersion atmosphérique par faibles vents en milieu urbain. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université Paris-Saclay, 2023. Français. NNT: 2023UPAST179 . tel-04721194

HAL Id: tel-04721194

<https://theses.hal.science/tel-04721194v1>

Submitted on 4 Oct 2024

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.

Modélisation numérique de la turbulence et de la dispersion atmosphérique par faibles vents en milieu urbain

*Numerical modeling of turbulence and atmospheric
dispersion in low wind-speed conditions and urban
environments*

Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay

École doctorale n° 579, Sciences Mécaniques et Énergétiques, Matériaux et
Géosciences (SMEMaG)

Spécialité de doctorat : Mécanique des Fluides

Graduate School : Sciences de l'ingénierie et des systèmes

Référent : Université d'Évry Val-d'Essonne

Thèse préparée dans l'unité de recherche **LMEE** (Université Paris-Saclay,
Univ Evry), sous la direction de **Amer CHPOUN**, Professeur-HDR, le
co-encadrement de **Amir-Ali FEIZ**, Maître de conférences, et de **Pierre
NGAE**, Maître de conférences

Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 18 décembre 2023, par

Boulos ALAM

Composition du jury

Membres du jury avec voix délibérative

Christian TENAUD

Directeur de recherche CNRS, CentraleSupélec - Université
Paris-Saclay

Président

Abdellah HADJADJ

Professeur, CORIA - INSA de Rouen

Rapporteur

Maithili SHARAN

Professeur émérite, Center for Atmospheric Sciences - Indian Ins-
titute of Technology Delhi

Rapporteur

Boris CONAN

Maître de conférences, LHEEA - École Centrale de Nantes

Examineur

Titre : Modélisation numérique de la turbulence et de la dispersion atmosphérique par faibles vents en milieu urbain

Mots clés : Modèles de turbulence anisotropes, Modèle CFD Code_Saturne, Milieu urbain, Dispersion atmosphérique, Modèle URANS, Vents faibles.

Résumé : Cette thèse se situe dans le contexte de la modélisation de la dispersion atmosphérique, en particulier en présence de vents faibles. Les sources de pollution atmosphérique, souvent situées près du sol et influencées par des obstacles complexes, engendrent des concentrations élevées de polluants à proximité, ce qui se traduit par des fluctuations significatives de ces concentrations. Les vents faibles, généralement associés à des conditions atmosphériques stables, posent un défi particulier en matière de modélisation de la dispersion des polluants, nécessitant une analyse approfondie des données météorologiques et une adaptation des modèles de prédiction. Afin de relever ce défi complexe, l'utilisation de la Dynamique des Fluides Numérique (CFD) est incontournable, même si des recherches supplémentaires sont nécessaires pour valider son efficacité dans le champ proche des sources et en présence de vents faibles. Le logiciel Code_Saturne® (EDF R&D) est sélectionné en raison de son efficacité avérée dans la simulation de la dispersion de polluants atmosphériques. Cette thèse se décompose en trois phases distinctes : la première phase se concentre sur les fondements de la dispersion atmosphérique, en explorant l'impact de différents paramètres tels que la structure de la couche limite atmosphérique, la turbulence atmosphérique et la

stabilité de l'atmosphère. Ces éléments jouent un rôle crucial dans la manière dont les polluants se dispersent dans l'air. La deuxième phase détaille la méthodologie utilisée dans Code_Saturne pour effectuer les simulations, notamment les modèles de turbulence utilisés et les critères d'évaluation de ces modèles. En plus des modèles isotropes classiques, cette recherche se penche sur l'utilisation de modèles de turbulence anisotropes pour étudier la dispersion dans divers contextes. La troisième phase de la thèse se concentre sur l'évaluation de différents modèles de turbulence et de corrélations vitesse-scalaire à l'aide d'observations effectuées en milieu urbain dans des conditions atmosphériques neutres et stables. Enfin, la dernière phase de la recherche explore les conditions de vent faible et stable, caractérisées généralement par des vitesses de vent inférieures à 2 m/s et des variations aléatoires du vent. Cette phase examine les méandres dans la dispersion des polluants et évalue les limites des modèles analytiques et CFD pour prédire la concentration dans de telles conditions. À cet effet, un modèle URANS est développé et évalué. Enfin, une méthode gaussienne segmentée est élaborée pour comparer les résultats aux prédictions CFD et aux observations sur le terrain.

Title : Numerical modeling of turbulence and atmospheric dispersion in low wind-speed conditions and urban environments.

Keywords : Anisotropic turbulence models, CFD model Code_Saturne, Urban environment, Atmospheric dispersion, URANS model, Low winds.

Abstract : This thesis is situated in the context of atmospheric dispersion modeling, particularly in the presence of low winds. Atmospheric pollution sources, often located near the ground and influenced by complex obstacles, generate high concentrations of pollutants nearby, resulting in significant concentration fluctuations. Low winds, typically associated with stable atmospheric conditions, pose a specific challenge in modeling pollutant dispersion, requiring a thorough analysis of meteorological data and adaptation of prediction models. To address this complex challenge, the use of Computational Fluid Dynamics (CFD) is necessary, although further research is needed to validate its effectiveness in the near-field and in the presence of low winds. The Code_Saturne® software (EDF R&D) is selected due to its proven efficiency in simulating atmospheric pollutant dispersion. This thesis is divided into three distinct phases : the first phase focuses on the fundamentals of atmospheric dispersion, exploring the impact of various parameters such as the atmospheric boundary layer structure, atmospheric turbulence, and atmospheric stability. These

elements play a crucial role in how pollutants disperse in the air. The second phase details the methodology used in Code_Saturne for conducting simulations, including the turbulence models employed and the criteria for evaluating these models. In addition to traditional isotropic models, this research investigates the use of anisotropic turbulence models to study dispersion in various contexts. The third phase of the thesis concentrates on the evaluation of different turbulence models and velocity-scalar correlations using observations conducted in urban environments under neutral and stable atmospheric conditions. Finally, the last phase of the research explores conditions of low and stable winds, typically characterized by wind speeds below 2 m/s and random wind variations. This phase examines the meandering patterns in pollutant dispersion and assesses the limitations of analytical and CFD models in predicting concentration in such conditions. To this end, a URANS model is developed and evaluated. Ultimately, a segmented Gaussian method is devised to compare the results with CFD predictions and field observations.

Remerciements

Pendant la réalisation de cette thèse, j'ai bénéficié d'un soutien considérable de la part de nombreuses personnes, notamment mes superviseurs, ma famille, mes amis et mes collègues.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers mon directeur de thèse, Amer CHPOUN, ainsi que mes co-encadrants, Amir-Ali FEIZ et Pierre NGAE. Travailler avec eux a été un réel plaisir, et leur réactivité, patience et disponibilité tout au long de ma thèse m'ont permis de bénéficier d'un encadrement exceptionnellement efficace. Leurs compétences scientifiques et leurs qualités humaines ont grandement contribué à la réussite de ce travail de recherche.

J'exprime également ma reconnaissance envers les membres du jury, en particulier le Professeur Maithili SHARAN et le Professeur Abdellah HADJADJ, qui ont consacré du temps à lire attentivement et à évaluer ma thèse en tant que rapporteurs. Leurs commentaires constructifs m'ont été d'une grande aide pour améliorer ce manuscrit. Je remercie également chaleureusement le Professeur Christian TENAUD (Directeur de recherche) et le Docteur Boris CONAN (MCF) pour avoir gracieusement accepté d'être examinateurs.

Je tiens à adresser mes sincères remerciements à la DGA (Direction Générale de l'Armement), Ministère des Armées, France, pour son soutien financier, qui a été essentiel pour la réalisation de cette thèse. Je suis particulièrement reconnaissant envers Stéphane BURKHART (DGA/MNRBC) et Rémi SIMONET (DGA/MNRBC) pour leurs nombreuses discussions enrichissantes.

J'aimerais également remercier mes collègues de bureau, en particulier Victor BOURGIN, et Rayan NKENFACK SOPPI, pour les moments agréables que nous avons partagés.

Je tiens à adresser un remerciement tout particulier à mes parents pour leur soutien inconditionnel. Les mots ne suffisent pas à exprimer la profonde gratitude que j'ai envers eux pour leur dévouement. Leur présence et leur soutien émotionnel et psychologique ont été d'une importance capitale tout au long de ces années, et je leur serai éternellement reconnaissant. Leur encouragement et leur amour ont été une source d'inspiration qui m'a permis de surmonter les défis et de persévérer dans mes études.

Enfin, je souhaite adresser mes remerciements chaleureux à mes amis pour leur soutien constant. Leurs encouragements et leur amitié ont été précieux et ont contribué à rendre cette aventure académique encore plus mémorable.

Table des matières

Table des figures	vi
Liste des tableaux	x
Liste des abréviations	xii
Liste des symboles	xiv
Introduction générale	1
1 Dynamique de l’atmosphère et dispersion atmosphérique	7
1.1 Structure de l’atmosphère	7
1.2 Équations de la couche limite atmosphérique	11
1.3 Turbulence atmosphérique	13
1.4 Stabilité de l’atmosphère	21
1.5 La dispersion atmosphérique : généralités	30
1.6 Approches pour la modélisation de la dispersion atmosphérique	34
1.7 Conclusions	43
2 Méthodologie CFD pour la simulation de la dispersion atmosphérique	44
2.1 Présentation du code CFD	45
2.2 Description du modèle Code_Saturne pour l’écoulement et la dispersion	46
2.3 Profils analytiques pour les conditions limites d’entrée	58
2.4 Méthodes statistiques pour l’évaluation des modèles	61
2.5 Mise en oeuvre des modèles RANS : Simulation d’un couche limite homogène	63
2.6 Conclusions	69
3 Simulation CFD de la dispersion d’un polluant dans un milieu urbain à l’aide de modèles anisotropes	74
3.1 Introduction	75
3.2 Description de l’expérience MUST	77
3.3 Caractéristiques des cas-tests sélectionnés	78
3.4 Domaine de calcul et maillage	80
3.5 Conditions limites et conditions de rejet	82
3.6 Aspects numériques	84
3.7 Analyse des résultats	85
3.8 Performance globale des modèles	95
3.9 Conclusions	98

4	État de l'art sur les vents faibles et leur impact sur la dispersion	100
4.1	Introduction	101
4.2	Contexte historique	101
4.3	Phénomène de méandres	103
4.4	Influence des méandres sur la dispersion atmosphérique	107
4.5	Limitations associées aux conditions de vent faible	108
4.6	Approches pour la prédiction de la dispersion en cas de vents faibles et variables	111
4.7	Conclusions	115
5	Modélisation de la dispersion atmosphérique dans des conditions de vents faibles : application à l'expérience d'Idaho Falls	116
5.1	Introduction	117
5.2	Description de l'expérience d'Idaho Falls	117
5.3	Résumé des performances des différents modèles	118
5.4	Modélisation de la dispersion en condition de vent faible avec un modèle URANS	119
5.5	Résultats et discussion	121
5.6	Amélioration des paramètres physiques et numériques	126
5.7	Cas d'amélioration des profils d'entrée	127
5.8	Cas d'amélioration du modèle de turbulence	131
5.9	Modélisation de la dispersion en condition de vent faible à l'aide d'un modèle gaussien	133
5.10	Conclusions	140
	Conclusions générales et perspectives	143
A	Résultats complémentaires	147
A.1	Maintien des profils dynamiques dans un domaine plat	147
A.2	Étude de sensibilité du maillage	154
A.3	Indicateurs statistiques évalués pour les cinq essais de l'expérience d'Idaho Falls.	155
A.4	Résultats complémentaires de la méthode MSTA	156
	Bibliographie	159

Table des figures

1	Cartographie des niveaux de NO ₂ dans l’atmosphère au-dessus de Beyrouth et de ses environs, avant et après une semaine de l’explosion [tiré de (Ali et al., 2022)] . . .	4
1.1	Structure verticale de l’atmosphère montrant quatre divisions basées sur la température [Adapté du site https://www.sciencelearn.org.nz]	9
1.2	Structure de la couche limite atmosphérique	10
1.3	Schéma de la couche limite urbaine avec ses couches verticales et ses échelles [Adapté de Piringer et al. (2002)]	11
1.4	Représentation schématique : (a) cascade d’énergie (b) spectre de l’énergie de turbulence [Tiré du site https://2021.help.altair.com/]	18
1.5	Simulation et modélisation du spectre de turbulence [Image de Beaubien, C.-A., Université Laval (2013)]	19
1.6	Classification des modèles de turbulence en fonction de leur ordre, du nombre d’équations, et de leur applicabilité proche de la paroi [Tiré de Manceau (2011)]	22
1.7	(a) Structure verticale de la CLA au cours du cycle diurne [Adapté de Stull (1988)]; (b) Variation des profils verticaux typiques de la température (T), de la température potentielle (θ), de l’humidité spécifique (q) et de la vitesse du vent (V) dans la partie inférieure de la troposphère. AL, atmosphère libre; CE, zone d’entraînement; CC, couche convective; CS, couche de surface; CI, couche d’inversion; CR, couche résiduelle; CLS, couche limite stable; z_i , hauteur de la couche d’inversion, qui correspond au sommet de la couche limite (BL); z_i , hauteur de l’inversion de la couche limite (CL); V_g , vitesse du vent géostrophique [Adapté de Wallace et Hobbs (2006)]	24
1.8	Relation entre les catégories de stabilité de Pasquill, la longueur de Monin-Obukhov et la rugosité de la surface [Adapté de Golder (1972)]	27
1.9	Modèles de dispersion idéalisés du panache instantané. (1) Un grand nuage dans un champ uniforme de petits tourbillons. (2) Un petit nuage dans un champ uniforme de grands tourbillons. (3) Un nuage dans un champ de tourbillons de même taille que le nuage. [Tiré de Slade (1968)]	32
1.10	Modèle conceptuel de dispersion du panache, démontrant les trois impacts distincts des tourbillons de taille caractéristique λ en corrélation avec la dimension relative de l’échelle de longueur instantanée du vent transversal du panache σ_i [Tiré de Mylne (1992)]	33
1.11	Différents types de schémas de panache de fumée observés dans l’atmosphère. Les abscisses des colonnes représentent la température, les écart-types des directions des vents horizontaux et verticaux (σ_θ et σ_ϕ). Les courbes en pointillés dans la colonne de gauche montrent le gradient adiabatique Γ , et les lignes continues représentent les profils observés [Adapté de Slade (1968)]	35

1.12	Représentation schématique : (a) Modèle de panache (<i>plume</i>) gaussien (b) Modèle de bouffée (<i>puff</i>) estimant une dispersion gaussienne, en tenant compte des variations temporelles et spatiales du vent [Tiré de Leelosy et al. (2014)]	36
2.1	Organigramme montrant les différentes étapes de la simulation de l'écoulement atmosphérique et de la dispersion d'un traceur dans Code_Saturne	47
2.2	Variation verticale de différentes variables dans l'atmosphère standard	49
2.3	Choix des modèles de turbulence pour les études actuelles	51
2.4	Schéma d'un domaine de calcul typique pour la simulation CFD de l'écoulement autour d'une zone urbaine dans la CLA, avec les conditions aux limites correspondantes. [Tiré de (Toparlar et al., 2019)]	64
2.5	Maillage 2-D du domaine numérique et conditions limites	66
2.6	A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d'ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité neutre à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l'axe de l'écoulement, par le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ LRR standard de Code_Saturne. A droite : L'erreur relative entre le profil injecté à l'entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l'ECT et la dissipation turbulente.	70
2.7	A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d'ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité stable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l'axe de l'écoulement, par le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ LRR standard de Code_Saturne. A droite : L'erreur relative entre le profil injecté à l'entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l'ECT et la dissipation turbulente.	71
2.8	A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d'ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité instable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l'axe de l'écoulement, par le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ LRR standard de Code_Saturne. A droite : L'erreur relative entre le profil injecté à l'entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l'ECT et la dissipation turbulente.	72
3.1	Photographie du site de la campagne expérimentale MUST [tiré de (Biltoft, 2001)]	78
3.2	Représentation schématique du site expérimentale de MUST : les triangles représentent les mâts A, B, C et D, le carré bleu représente le mât central de 32 m de hauteur. La position de la source pour les 4 cas-tests sélectionnés est représenté par une étoile jaune.	79
3.3	Représentation du domaine de calcul avec les conditions aux limites.	81
3.4	Maillage du domaine de calcul : (a) Vue externe (b) Vue interne.	81
3.5	Champs de vitesse du vent horizontal (gauche) et d'ECT(droite) à $z = 4m$ pour l'essai de stabilité atmosphérique neutre N°2681829 en utilisant le modèle $k - \varepsilon$ (a, b) et le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ (c, d).	86
3.6	Champs dynamiques latéraux à $x = 130m$ (a) vitesse du vent et (b) énergie cinétique turbulente pour le test de stabilité atmosphérique neutre N°2681829 avec les modèles $k - \varepsilon$ (gauche) et $R_{ij} - \varepsilon$ (droite).	87
3.7	Comparaison entre la vitesse observée et celle calculée à l'aide des modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ pour le cas neutre N°2681829 à la position du (a) Mât A (b) Mât B (c) Mât D et (d) Tour T.	88
3.8	Comparaison entre l'ECT observée et celle calculée à l'aide des modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ pour le cas neutre N°2681829 à la position du (a) Mât A (b) Mât B (c) Mât D et (d) Tour T.	89
3.9	Champ de concentration moyenne de polluant (kg/kg) à $z = 1.6m$, avec les modèles (a) $k - \varepsilon$ (b) $R_{ij} - \varepsilon$ (avec SGDh) pour l'essai N°2681829.	90
3.10	Comparaison entre le profil de concentration observé et celui calculé à l'aide des modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ sur l'ensemble des capteurs PID pour l'essai N°2681829.	90

3.11	Comparaison entre la vitesse observée et celle calculée à l'aide des modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$ pour le cas stable N°2692157 à la position du (a) Mât A (b) Mât B (c) Mât C et (d) Tour T.	91
3.12	Comparaison entre l'ECT observée et celle calculée à l'aide des modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$ pour le cas stable N°2692157 à la position du (a) Mât A (b) Mât B (c) Mât C et (d) Tour T.	92
3.13	Champ de concentration moyenne de polluant (kg/kg) à $z = 1.6m$, avec les modèles (a) $k-\varepsilon$ (avec SGDh) (b) $R_{ij}-\varepsilon$ (avec SGDh) (c) $R_{ij}-\varepsilon$ (avec GGDh) et (d) $R_{ij}-\varepsilon$ (avec DFM) pour l'essai N°2692157.	94
3.14	Comparaison entre le profil de concentration observé et celui calculé à l'aide des modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$ sur l'ensemble des capteurs PID pour l'essai N°2692157.	95
3.15	Diagrammes de dispersion (à gauche) et diagrammes q-q (à droite) illustrant les concentrations observées et prédites à l'aide du modèle $k-\varepsilon$ (a,b) et du modèle $R_{ij}-\varepsilon$ (c,d) pour les quatre essais.	97
4.1	Effet des mouvements <i>sub-meso</i> sur la dispersion du panache dans l'environnement : (a) Mouvements ondulatoires (<i>wave-like motions</i>) provoquant l'éjection de l'air de surface vers le haut (b) Mouvements de méandres à petite échelle (c) Microfronts (d) Modes solitaires (<i>Solitary Modes</i>) [Tiré du site : https://submeso.org/]	105
4.2	Iso-contours de la concentration horaire observée pour l'essai 8 de l'expérience d' <i>Idaho Falls</i> [tiré de (Sagendorf & Dickson, 1974)]	107
4.3	Échelles spatiales et temporelles de la turbulence [tiré de (Joseph et al., 2020), adapté de (Isaksen et al., 2009)]	108
5.1	(a) Vue du site expérimental d'Idaho Falls (b) Schéma du champ d'Idaho Fall avec localisation de la source et des capteurs de mesure	118
5.2	Maillage tridimensionnel du domaine numérique montrant la position de la source du rejet, la positions des capteurs de concentration et les conditions aux limites du domaine.	120
5.3	Champ horaire de la vitesse du vent, de la direction du vent, et de l'écart-type de la direction du vent pour l'essai 10, pris en compte à l'entrée du domaine. Les points rouges correspondent aux moyennes sur deux minutes.	121
5.4	Courbes de concentration au niveau du sol (m^{-2}) pour le test-10 montrant (a) la distribution de concentration observée (Sagendorf & Dickson, 1974) ; les valeurs sur les isolignes doivent être multipliées par 10^{-3} (b) la distribution de concentration modélisée obtenue à partir de la simulation CFD.	122
5.5	Comparaison entre la concentration de SF6 observée et prédite pour l'essai 10 à (a) 100 m , (b) 200 m et (c) 400 m. La courbe rouge représente les prédictions du modèle $R_{ij}-\varepsilon$. La courbe représente les prédictions du modèle $k-\varepsilon$	123
5.6	Comparaison entre les concentrations de SF6 observées et prédites pour l'essai 10 à (a) 100 m, (b) 200 m et (c) 400 m de la source de rejet. Les résultats prédits correspondent à ceux de la CFD avec le modèle $R_{ij}-\varepsilon$, ainsi qu'aux résultats des modèles gaussien AERMOD (LW1, LW3 et FASTALL) (Pandey & Sharan, 2019) et au modèle gaussien de Sagendorf et Dickson (1974).	126
5.7	Comparaison entre la concentration de SF6 observée et prédite pour le l'essai 10 à (a) 100 m , (b) 200 m et (c) 400m.	130
5.8	Comparaison entre la concentration au sol prédite et observée pour l'essai 6	133
5.9	Évolution des indicateurs statistiques obtenus pour l'ensemble des valeurs de concentrations en condition neutre sur les trois axes des capteurs. Les lignes pointillées rouges représentent les valeurs idéales des indicateurs statistiques.	134
5.10	Comparaison entre la concentration au sol prédite et observée pour l'essai 10	135

5.11	Évolution des indicateurs statistiques obtenus pour l'ensemble des valeurs de concentrations en condition stable sur les trois axes des capteurs. Les lignes pointillées rouges représentent les valeurs idéales des indicateurs statistiques.	136
A.1	A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d'ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité neutre à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l'axe de l'écoulement, par le modèle $k - \varepsilon$ calibré de Code_Saturne. A droite : L'erreur relative entre le profil injecté à l'entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l'ECT et la dissipation turbulente.	148
A.2	A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d'ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité stable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l'axe de l'écoulement, par le modèle $k - \varepsilon$ calibré de Code_Saturne. A droite : L'erreur relative entre le profil injecté à l'entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l'ECT et la dissipation turbulente.	149
A.3	A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d'ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité instable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l'axe de l'écoulement, par le modèle $k - \varepsilon$ calibré de Code_Saturne. A droite : L'erreur relative entre le profil injecté à l'entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l'ECT et la dissipation turbulente.	150
A.4	A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d'ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité neutre à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l'axe de l'écoulement, par le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ LRR calibré de Code_Saturne. A droite : L'erreur relative entre le profil injecté à l'entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l'ECT et la dissipation turbulente.	151
A.5	A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d'ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité stable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l'axe de l'écoulement, par le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ LRR calibré de Code_Saturne. A droite : L'erreur relative entre le profil injecté à l'entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l'ECT et la dissipation turbulente.	152
A.6	A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d'ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité instable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l'axe de l'écoulement, par le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ LRR calibré de Code_Saturne. A droite : L'erreur relative entre le profil injecté à l'entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l'ECT et la dissipation turbulente.	153
A.7	Sensibilité des profils variables dynamiques à la taille de la maille à la position du mât A	154
A.8	Sensibilité des profils variables dynamiques à la taille de la maille à la position du mât B	155

Liste des tableaux

1.1	Classes de stabilité de Pasquill. A : Très instable B : Instable C : Peu instable D : Neutre E : Peu stable F : Stable.	27
1.2	Relation entre la longueur de Monin-Obukhov et les catégories de stabilité de Pasquill	27
1.3	Classes de stabilité de Turner en fonction de ma vitesse du vent et de l'IRN. 1-très instable; 2-instable; 3-peu instable; 4-neutre 5-stable; 6-peu stable; 7-très stable . . .	28
1.4	Valeurs des constantes dans les equations 1.46 et 1.47	38
1.5	Fonctions sigma de Briggs (1973) pour les conditions rurales et urbaines	38
2.1	Constantes du modèle $k - \varepsilon$	52
2.2	Constantes du modèle $R_{ij} - \varepsilon LRR$	55
2.3	Paramètres physiques pour chaque cas de stabilité	65
3.1	Caractéristiques physiques des essais choisis, obtenues à une hauteur de référence de 4 m : U est la vitesse moyenne du vent, α est la direction du vent mesurée à partir du nord, k est l'énergie cinétique turbulente, Q est le débit de polluant, z_s est la hauteur de rejet, u_* est la vitesse de friction, L est la longueur d'Obukhov et ε est le taux de dissipation.	79
3.2	Détails des grilles de maillage utilisées pour l'étude de sensibilité. h est la hauteur de la première maille adjacente à la paroi du sol.	81
3.3	Profils d'entrée et modèles de turbulence utilisés pour toutes les simulations sur les essais sélectionnés de l'expérience MUST.	83
3.4	Valeurs des constantes A_1 et A_2 obtenues en ajustant les profils de k et ε aux mesures expérimentales pour les essais étudiés.	85
3.5	Mesures de performance statistique évaluées pour l'essai N°2692157.	96
3.6	Mesures de performance statistique évaluées pour tous les essais étudiés.	98
5.1	Mesures statistiques obtenues à partir de différents modèles pour les essais d'Idaho Falls.	119
5.2	Données de vent à moyenne horaire et caractéristiques de la source pour l'essai 10 .	120
5.3	Comparaison de la largeur observée du panache (en degrés) avec la largeur modélisée du panache sur les trois arcs de récepteurs.	122
5.4	Mesures de performance statistique évaluées pour les résultats des modèles CFD et gaussien pour l'essai 10	124
5.5	Comparaison entre les pics de concentration calculés et mesurés aux arcs de 100, 200 et 400 m pour l'essai 10. a = mesures; b = modèle $R_{ij} - \varepsilon$; c = modèle $k - \varepsilon$; d = modèle Gaussien (Sagendorf & Dickson, 1974)	125

5.6	Caractéristiques des tests simulés de l'expérience d'Idaho Falls : U est la vitesse moyenne du vent, Θ est la direction du vent, u^* est la vitesse de friction calculée, L est la longueur Monin-Obukhov calculée, T_0 est la température près du sol (à 2 m) et Q est le débit massique rejeté du polluant.	129
5.7	Indicateurs statistiques évalués pour l'essai n°10 de l'expérience d'Idaho Falls.	131
5.8	Caractéristiques du test 6 de l'expérience d'Idaho Falls : U est la vitesse moyenne du vent, α est la direction du vent, u^* est la vitesse de friction calculée, L est la longueur Monin-Obukhov calculée, T_0 est la température près du sol (à 2 m) et Q est le débit massique rejeté du polluant.	132
5.9	Indicateurs statistiques évalués pour les essais n°6 et 10 de l'expérience d'Idaho Falls, ainsi que le ratio évalué pour les concentrations maximales (prédiction/observation). Des critères de performance du modèle sont également donnés pour certains indicateurs selon Chang et Hanna (2004). Un seuil de 10^{-7} est appliqué aux concentrations numériques inférieures à cette valeur.	132
5.10	Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir du modèle CFD pour les essais n°6 et 10 de l'expérience d'Idaho Falls.	140
5.11	Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA pour l'essai n°6 de l'expérience d'Idaho Falls.	140
5.12	Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA pour l'essai n°10 de l'expérience d'Idaho Falls.	141
A.1	Indicateurs statistiques évalués pour l'essai n°9 de l'expérience d'Idaho Falls.	155
A.2	Indicateurs statistiques évalués pour l'essai n°11 de l'expérience d'Idaho Falls.	156
A.3	Indicateurs statistiques évalués pour l'essai n°12 de l'expérience d'Idaho Falls.	156
A.4	Indicateurs statistiques évalués pour l'essai n°13 de l'expérience d'Idaho Falls.	156
A.5	Indicateurs statistiques évalués pour l'essai n°14 de l'expérience d'Idaho Falls.	156
A.6	Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA pour tous les essais de l'expérience d'Idaho Falls.	156
A.7	Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA avec la paramétrisation de Luhar (2010).	157
A.8	Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA avec la paramétrisation de Cirillo et Poli (1992).	157
A.9	Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA avec la paramétrisation de Degrazia et al. (2005).	158
A.10	Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA avec la paramétrisation de Gryning et al. (1987).	158

Liste des abréviations

AERMOD	American Meteorological Society and U.S. Environmental Protection Agency Regulatory Model
CASES-99	Cooperative Atmosphere-Surface Exchange Study
CCT	Climate Change Tower
CCU	Couche de Canopée Urbaine
CLA	Couche Limite Atmosphérique
CLU	Couche Limite Urbaine
CLS	Couche Limite de Surface
COST	European Cooperation in Science and Technology
COR	Coefficient de Corrélation
CFD	Computational Fluid Dynamics
DPG	Dugway Proving Ground
DFM	Differential Flux Model
DNS	Direct Numerical Simulation
DRTA	Defence Threat Reduction Agency
EDF	Électricité de France
ECT	Énergie Cinétique Turbulente
FS	Écart-Type Fractionnaire
FAC2	Facteur de Deux
FB	Biais Fractionnel
GGDH	Generalized Gradient Diffusion Hypothesis
GNL	Gas Naturel Liquéfié
INEL	Idaho National Engineering Laboratory
IOA	Indice d'Accord
JORNADA	Joint Observational Research on Nocturnal Atmospheric Dispersion of Aerosols
LES	Large Eddy Simulation
LMEE	Laboratoire de Mécanique et d'Énergétique d'Evry
MG	Moyenne Biais Géométrique
MOST	Théorie de Similitude de Monin-Obukhov

MSTA	Meandering Short Term Average
MUST	Mock Urban Setting Test
NFPA	National Fire Protection Association
NMSE	Erreur Quadratique Moyenne Normalisée
NRBC	Nucléaire, Radiologique, Biologique, Chimique
NS	Navier-Stokes
PID	Détecteur à photoionisation
PISO	Pressure-Implicit with Splitting of Operators
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations
RMB-TT	Biais Moyen Relatif-dix premiers
RSM	Reynolds Stress Model
SABLES98	Stable Atmospheric Boundary-Layer Experiment in Spain
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
SIMPLEC	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations-Consistent
SIRTA	Site Instrumental de Recherche par Télédétection
SGDH	Simple Gradient Diffusion Hypothesis
STA	Short Term Average
TMI	Three Mile Island
UTP	Urban Turbulent Project
VG	Variance Géométrique
UTP	Urban Turbulent Project

Liste des symboles

Lettres latines

C	Concentration moyenne	kg/kg ou ppmv
C_D	Coefficient de traînée	Pa
C_p	Capacité thermique à pression constante	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
$C_\mu, C_1, C_2, C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, C_{\varepsilon 3}, C_L$	Constantes des modèle de turbulence	-
D_m	Coefficient de diffusion moléculaire	m ² .s ⁻¹
d_p	Diamètre de la particule	m
\vec{F}	Forces extérieures	N
f	paramètre de Coriolis (10 ⁻⁴)	s ⁻¹
F_b	Force de flottabilité	N
G_k, G_{ij}	Terme de production par flottabilité	W.kg ⁻¹
\vec{g}	Accélération de la pesanteur	m.s ⁻²
H_0	Flux de chaleur sensible à la surface	W.m ⁻²
I_v	Intensité de turbulence latérale	-
k	Energie cinétique turbulente	m ² .s ⁻²
K_{cx}, K_{cy}	Coefficients de dispersion longitudinale et transversale	m ² .s ⁻¹
L	Longueur Monin-Obukhov	m
L_{ii}	Échelle de longueur integrale	m
L_{MBL}	Échelle de longueur dans la couche moyenne de la CLA	m
m_p	Masse de la particule	kg
N	Fréquence de Brunt-Vaisala	rad.s ⁻¹
P	Pression	Pa
P_0	Pression de référence	Pa
P_k, P_{ij}	Terme de production par cisaillement	W.kg ⁻¹
Pr_t	Nombre de Prandtl turbulent	-
q	Humidité spécifique	g/kg
Q	Débit du polluant	L.s ⁻¹ ou kg.s ⁻¹
R	Constante de gaz pour l'air sec (287)	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
Ra	Nombre de Rayleigh $\left(Ra = \frac{g\beta\Delta TL_c^3}{\nu\alpha_t}\right)$	-
Re	Nombre de Reynolds $\left(Re = \frac{U\delta}{\nu}\right)$	-
Re_p	Nombre de Reynolds particulaire	-
R_f	Ratio des échelles de temps thermique et dynamique	-
Ri_f	Nombre de Richardson de flux	-
Ri_g	Nombre de Richardson de gradient	-
R_{ii}	Fonction d'autocorrélation	-

Ro	Nombre de Rossby ($Ro = \frac{U}{fL}$)	-
S_{ij}	Tenseur de déformation des vitesses	m^{-1}
S_p	Surface de la particule	m^2
Sc_t	Nombre de Schmidt turbulent (0,7)	-
T	Température	K
T_v	Température virtuelle	K
T_0	Température de référence	K
T_{ii}	Échelle de temps intégrale	s
T_L	Échelle de temps lagrangienne	s
U_i	Vitesse du vent pour la composante i	$m.s^{-1}$
U_p	Vitesse de la particule	$m.s^{-1}$
U_s	Vitesse du fluide vue par la particule	$m.s^{-1}$
u^*	Vitesse de friction à la paroi	$m.s^{-1}$
v_p	Volume de la particule	m^3
V	Composante horizontale de la vitesse du vent	$m.s^{-1}$
W	Composante verticale de la vitesse du vent	$m.s^{-1}$
x, y, z	Coordonnées cartésiennes	m
z_i	hauteur de la limite supérieure de la CLA	m
z_0	Rugosité aérodynamique	m
Lettres grecques		
α	Direction du vent	Degrés ($^\circ$)
β	Coefficient de flottabilité	$m.s^{-2}.K^{-1}$
Γ	Taux de dérapage adiabatique (-9,766)	$^\circ C.Km^{-1}$
δ_{ij}	Symbole de Kronecker, valant 1 si $i = j$ et 0 sinon	-
ε	Taux de dissipation turbulente	$m^2.s^{-3}$
ε_{ij}	Terme de dissipation turbulente	$m^2.s^{-3}$
ε_{ijk}	Tenseur de Levi-Civita	-
ζ	Indice de Monin-Obukhov (z/L)	-
Θ	Température potentielle	K
Θ_v	Température potentielle virtuelle	K
κ	Constante de Von Kármán (0,42)	-
λ	Conductivité thermique	$W.m^{-1}.K^{-1}$
μ	Viscosité dynamique	Pa.s
ν	Viscosité cinématique	$m^2.s^{-1}$
ν_t	Viscosité cinématique turbulente	$m^2.s^{-1}$
ρ	Masse volumique	$kg.m^{-3}$
ρ_0	Masse volumique de référence	$kg.m^{-3}$
$\sigma_u, \sigma_v, \sigma_w$	Écart-types des trois composantes de la vitesse du vent	$m.s^{-1}$
σ_x	Écart-type horizontal	m
σ_z	Écart-type vertical	m
τ_{ij}	Composante (i, j) du tenseur des contraintes visqueuses.	Pa
τ_s	Contrainte de cisaillement du vent à la surface	Pa
Φ_{ij}	Terme de contrainte de pression	$m^2.s^{-3}$
ϕ_m, ψ_m	Fonctions universelles de la vitesse du vent	-
ϕ_h, ψ_h	Fonctions universelles de la température	-
Ω_j	Vecteur de vitesse angulaire	$rad.s^{-1}$

Introduction générale

Les menaces NRBC (Nucléaire, Radiologique, Biologique, Chimique) se définissent essentiellement comme l'intention de nuire aux personnes et à l'environnement en les exposant à des substances hautement nocives, notamment des agents radiologiques, des agents pathogènes ou des produits chimiques toxiques. Elles sont souvent associées à des actes terroristes perpétrés avec l'utilisation offensive d'armes, mais peuvent également résulter d'accidents, en particulier lorsqu'ils impliquent la libération d'agents potentiels provenant d'un usage industriel ou domestique. C'est le cas, par exemple, des gaz stockés à l'état liquéfié à température ambiante et dans des conteneurs hautement pressurisés. Une fuite soudaine du gaz stocké entraîne un jet composé d'une phase gazeuse et d'une phase liquide contenant des gouttelettes de particules mélangées à de l'air (Kisa & Jelemensky, 2009). Dans le cas des gaz denses, qui sont plus lourds que l'air, les forces de gravité poussent ces gaz à s'enfoncer d'abord, puis à se répandre sur le sol après une fuite, ce qui favorise leur dispersion transversale. Ces gaz dangereux, caractérisés par leur toxicité inhérente et leur haute inflammabilité, peuvent menacer les êtres humains et l'environnement dans les zones touchées. Leur influence devient plus grave lorsque la concentration est plus importante et que le temps d'exposition est plus long (Liu & Wei, 2017). Quelle que soit la nature de la menace, accidentelle ou intentionnelle, son traitement en termes de caractérisation, de moyens de détection, de protection, de contrôle, etc. est très spécifique et dépend du type de menace et de la nature de l'agent rejeté.

L'histoire a été marquée par de nombreuses menaces NRBC, dont la plupart ont été dévastatrices pour l'humanité et l'environnement. Nous énumérons ci-dessous les plus célèbres d'entre elles, en nous concentrant davantage sur les principaux accidents survenus au cours des cinquante dernières années, tout en sachant qu'il y a eu de nombreuses menaces de nature terroriste. Le 10 juillet 1976, la surchauffe d'un réacteur de l'usine chimique ICMESA, située dans la commune de Meda en Italie, a provoqué l'émission d'un nuage contenant plusieurs produits toxiques, dont l'agent principal est le 2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-p-dioxin (TCDD), connu sous le nom de dioxine de Seveso. Ce nuage de dioxine est à l'origine des cas de chloracné (ou acné chlorique) observés chez environ 200 personnes (Eskenazi et al., 2018), notamment des enfants, dans les zones touchées par ce produit. Le bilan de cet accident a également révélé les conséquences catastrophiques sur le plan écologique, notamment : le jaunissement des feuilles des arbres peu après l'accident, l'intoxication et la mort de milliers d'animaux. De plus, de nombreuses habitations et terres agricoles ont nécessité de lourds travaux de contamination. Depuis cet accident, le nom de "Seveso" est attribué à tout site européen

de production et d'activités industrielles présentant un risque ou un danger, en particulier dans les zones urbaines.

Le 28 mars 1979, à la centrale nucléaire de Three Mile Island (TMI) *, en Pennsylvanie (États-Unis), un dysfonctionnement du système de refroidissement lié à l'interruption de l'alimentation normale en eau des générateurs de vapeur, a provoqué la fusion d'une partie du cœur du réacteur N° 2 et la destruction du réacteur. Quelques jours après l'accident, malgré le faible rejet de gaz radioactifs quelques jours après l'accident, les doses détectées n'ont pas dépassé les niveaux de fond pour les résidents locaux. Dans l'ensemble, cet accident n'a pas eu d'effets néfastes sur la santé ou l'environnement.

Le 2 décembre 1984, l'un des pires accidents de l'industrie chimique s'est produit à Bhopal, en Inde, et même après 30 ans, cette tragédie reste inégalée dans l'histoire des accidents chimiques. L'accident a été provoqué par un déversement massif d'environ 40 tonnes d'isocyanate de méthyle (MIC) stockées à l'état liquide dans un réservoir en acier inoxydable presque plein (Palazzi et al., 2015). La cause immédiate du déversement est une réaction d'emballement déclenchée par l'entrée d'eau dans le réservoir, qui a conduit à l'ébullition et à la surpression du réservoir. Une soupape conçue pour empêcher la rupture du réservoir s'est ouverte et a libéré dans l'atmosphère de la vapeur de MIC n'ayant pas réagi. 520 000 personnes ont été exposées aux gaz et on estime que 8 000 d'entre elles sont mortes dans les premières semaines. 100 000 personnes ou plus ont été blessées de façon permanente (Eckerman, 2005).

L'accident de Tchernobyl*(Ukraine), qui s'est produit le 26 avril 1986, est le résultat d'une conception défectueuse du réacteur, exploité par un personnel insuffisamment formé. L'explosion de vapeur et les incendies qui en ont résulté ont libéré au moins 5% du cœur radioactif du réacteur dans l'environnement, ce qui a entraîné le dépôt de matières radioactives dans de nombreuses régions d'Europe. Deux travailleurs de la centrale de Tchernobyl sont décédés à la suite de l'explosion survenue la nuit de l'accident, et 28 autres personnes sont décédées dans les semaines qui ont suivi, victimes du syndrome d'irradiation aiguë. Le Comité Scientifique des Nations Unies pour l'étude des effets des rayonnements ionisants (UNSCEAR) a conclu que, mis à part quelque 5 000 cas de cancers de la thyroïde (ayant entraîné 15 décès), rien ne prouve que l'exposition aux radiations ait eu un impact majeur sur la santé publique 20 ans après l'accident. Quelque 350 000 personnes ont été évacuées à la suite de l'accident, mais la réinstallation des personnes déplacées est en cours.

Le 11 mars 2011, à la suite d'un important tremblement de terre, un tsunami de 15 mètres a interrompu l'alimentation électrique et le refroidissement des trois réacteurs de Fukushima Daiichi au Japon, provoquant un accident nucléaire. Les trois cœurs ont largement fondu au cours des trois premiers jours. L'accident a été classé au niveau 7 de l'échelle internationale des événements nucléaires et radiologiques, en raison des importants rejets radioactifs des jours 4 à 6, totalisant

*. Les informations sur les accidents nucléaires proviennent des sites web "World Nuclear Association" (<https://world-nuclear.org/>) et de l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (<https://www.irsn.fr/>)

environ 940 PBq. Les quatre réacteurs de Fukushima Daiichi ont été mis hors service en raison des dommages causés par l'accident. Les trois réacteurs (unités 1 à 3) ont été refroidis après l'accident, puis arrêtés après quelques mois. En outre, des travaux sont menés depuis août 2013 pour empêcher le rejet de matières radioactives, y compris dans l'eau contaminée qui s'échappe des trois réacteurs. Plus de 100 000 personnes ont été évacuées de leur domicile à la suite de l'accident. Aucun décès ou maladie n'a été causé par les radiations. Toutefois, les chiffres officiels indiquent que l'opération d'évacuation a entraîné plus de 2 000 décès, qui s'ajoutent à ceux provoqués par le tremblement de terre et le tsunami.

Le 21 septembre 2001, l'usine de fabrication d'engrais industriels et de nitrates AZF explose à Toulouse. La gigantesque explosion causée par plus de 300 tonnes de nitrate d'ammonium (Dechy et al., 2004) a provoqué une onde de choc qui s'est propagée sur 3 km, dévastant de nombreux quartiers de la ville rose. Cette explosion a fait 30 morts et des milliers de blessés et constitue la pire catastrophe industrielle du XXI^e siècle en France.

Le 4 août 2020, environ 2 700 tonnes de nitrate d'ammonium (AN) stockées dans le port de Beyrouth ont explosé, provoquant une destruction massive qui s'est étendue à 20 km du port. L'explosion a eu un impact sur les quartiers résidentiels et commerciaux voisins, entraînant plus de 150 décès, plus de 5 000 blessés, et laissant plus de 300 000 personnes sans logement (Ali et al., 2022). De plus, elle a engendré des perturbations tant sur terre que sur mer. Outre les dégâts structurels infligés à la ville de Beyrouth, l'explosion a entraîné la libération de polluants dans l'atmosphère, y compris des particules et des oxydes d'azote (NO_x), ce qui a entraîné une dégradation de la qualité de l'air à l'intérieur et à l'extérieur des constructions. Le dioxyde d'azote (NO_2), naturellement présent dans l'atmosphère, a atteint des niveaux plus élevés qu'avant l'explosion au-dessus de Beyrouth et de ses environs (Figure 1). L'étude numérique de Broomandi et al. (2021) a montré que les concentrations de NO_2 à l'extérieur ont dépassé le niveau AEGL-3 dans les quartiers proches de 8 et 10 minutes de l'explosion, respectivement. Les résultats de la même étude ont également montré que plusieurs pays du Moyen-Orient et d'Asie centrale ont été touchés par le nuage toxique (Broomandi et al., 2021).

Par conséquent, en cas d'accidents dus à des fuites, l'établissement de plans d'urgence pour le sauvetage et l'évacuation rapide est une question cruciale. Pour surmonter ce problème, il est nécessaire de commencer par prédire la dispersion des gaz libérés à l'aide de divers modèles et les valeurs de concentration qui en résultent sont utilisées dans les études d'évaluation des risques (Li et al., 2015). Plusieurs modèles ont été utilisés pour prévoir la dispersion des gaz et leur influence sur le milieu environnant. Beaucoup de ces modèles sont basés sur une distribution gaussienne et sont souvent utilisés avec succès dans des configurations d'écoulement simplifiées. Ces modèles numériques, qui nécessitent une paramétrisation empirique ou semi-empirique dérivée des observations, considèrent la dispersion des polluants sur un champ plat, sans tenir compte de la présence d'obstacles dans le milieu dispersant (Lateb et al., 2016).

Des outils plus avancés basés sur l'approche de la dynamique des fluides numérique (CFD) se

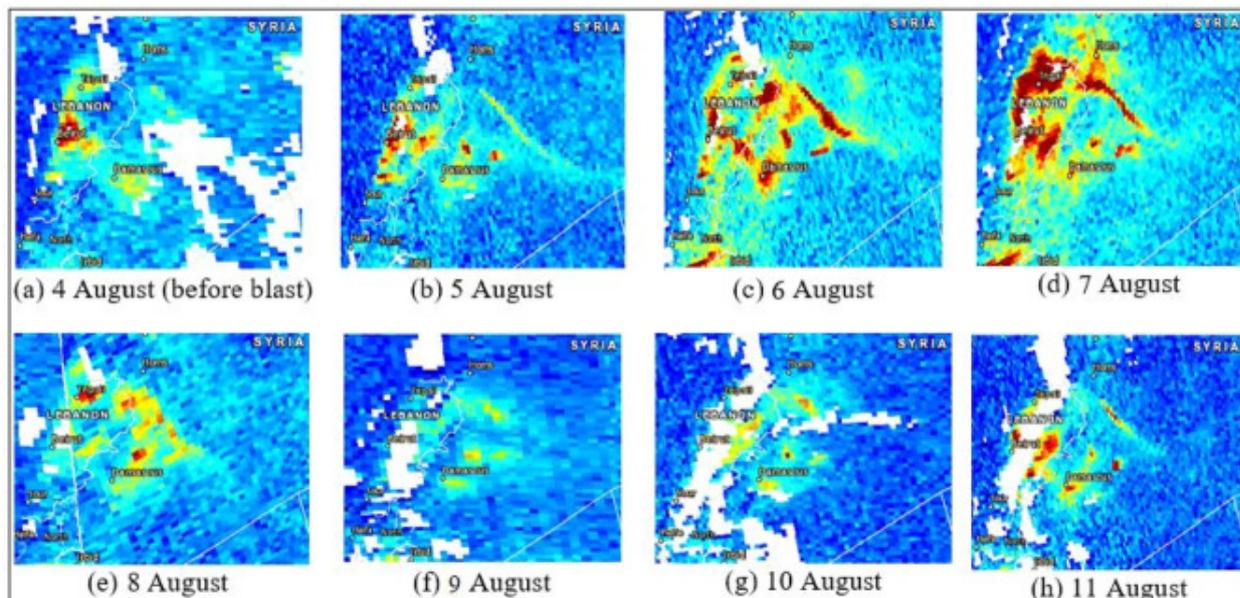


FIGURE 1 – Cartographie des niveaux de NO_2 dans l’atmosphère au-dessus de Beyrouth et de ses environs, avant et après une semaine de l’explosion [tiré de (Ali et al., 2022)]

sont avérés efficaces pour prédire la dispersion de polluants dans des environnements complexes en prenant en considération l’effet de la rugosité de la surface et des obstacles présents dans le domaine de dispersion. Cependant, la production de résultats détaillés à l’aide d’une simulation CFD nécessite souvent de longues heures de calcul, ce qui limite leur application dans les cas d’intervention d’urgence (Wang et al., 2015).

Au cours des dernières années, les simulations CFD ont été largement utilisées dans la modélisation de la dispersion des polluants et des progrès significatifs ont été réalisés pour augmenter la précision des simulations en optimisant les profils de vent verticaux et en choisissant des modèles de turbulence appropriés (Voir par exemple Fiates et al. (2016), Moen et al. (2019), Pontiggia et al. (2011), Siddiqui et al. (2012), B. Sun et al. (2020), Tan et al. (2019) et Vázquez-Román et al. (2016), etc.).

L’objectif principal de cette thèse est de modéliser de manière opérationnelle la dispersion atmosphérique en milieu urbain, y compris dans des conditions de vents faibles. Par "opérationnelle", nous entendons une mise en œuvre rapide, généralement en moins de 24 heures, avec une exigence de robustesse. Cette étude utilise le code tridimensionnel (3D) CFD Code_Saturne, développé par EDF R&D, qui a été validé et utilisé pour simuler la dispersion atmosphérique dans des situations complexes, telles que des terrains difficiles, des zones urbaines et des conditions météorologiques variables. Pour cette étude, nous nous concentrerons sur des terrains académiques où il est possible de définir un flux de chaleur significatif.

Les problèmes liés aux vents faibles et aux atmosphères stables sont cruciaux pour l’analyse des risques, car ils peuvent rendre l’évaluation des distances de danger plus complexe. Plus spécifiquement, les conditions atmosphériques stables et les faibles vitesses du vent posent des défis à la

modélisation de la dispersion des polluants en dynamique des fluides numérique (CFD). Ces défis incluent un mélange vertical limité, des inversions de température, des faibles vitesses du vent, des schémas d'écoulement complexes et des effets locaux.

Pour relever ces défis, la modélisation CFD de la dispersion des polluants dans des conditions stables et à faible vent nécessite souvent des techniques de modélisation plus sophistiquées, y compris l'utilisation de modèles de turbulence complexes et la prise en compte de facteurs météorologiques à l'échelle micro. Les modèles de turbulence anisotropes offrent des avantages dans la modélisation des conditions atmosphériques stables et de faibles vents, car ils peuvent capturer les effets directionnels, améliorer les prédictions près de la surface, gérer le comportement complexe de la couche limite, prendre en compte la stratification thermique, prédire avec précision les effets locaux et offrir des représentations plus réalistes des structures de turbulence. C'est pourquoi, ces modèles font l'objet d'une phase spécifique de cette étude.

En plus des effets à l'échelle micro, l'exactitude des données d'entrée, telles que les données météorologiques et les caractéristiques des sources d'émission, est cruciale pour améliorer la fiabilité des prédictions CFD dans de telles conditions.

À long terme, cette étude pourrait aider les experts en "Maîtrise NRBC" à améliorer la caractérisation des zones de danger en modélisant la dispersion des agents B et C en fonction des conditions météorologiques variables et complexes, telles que les vents faibles.

Sur cette base, la thèse a été construite en cinq chapitres :

- Le **chapitre 1** porte sur l'élaboration d'une bibliographie traitant des aspects de la dynamique atmosphérique et de la turbulence appliquée à la dispersion atmosphérique de manière générale. Une attention particulière est accordée à la bibliographie axée sur les modèles de turbulence RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*).
- Le **chapitre 2** expose la méthodologie utilisée dans le Code_Saturne pour mener les simulations. Nous abordons les équations résolues, les modèles de turbulence adoptés et leurs paramétrisations, ainsi que les profils dynamiques employés. Une attention particulière est accordée aux modèles anisotropes qui seront mis en œuvre. En outre, nous présentons les différents critères utilisés pour évaluer les modèles testés.
- Le **chapitre 3** porte sur la modélisation des rejets de polluants dans un environnement urbain et pour différentes conditions atmosphériques. L'étude numérique de la dispersion est réalisée dans le cadre de la campagne expérimentale MUST (*Mock Urban Setting Test*). Dans ce chapitre, nous calculons le champ de dispersion d'un polluant pour certains essais de la campagne MUST en utilisant des modèles RANS de premier et second ordre (modèles anisotropes). Les modèles sont soumis à une évaluation à la fois qualitative et quantitative afin de déterminer lequel (ou lesquels) d'entre eux fournissent les résultats les plus précis. Une attention particulière est accordée aux essais réalisés dans des conditions atmosphériques stables et extrêmement stables, qui constituent toujours un défi pour la modélisation numérique.

- Le **chapitre 4** présente une bibliographie concernant les caractéristiques des conditions de vent faible, ainsi qu'un résumé des principales campagnes et des résultats obtenus par les modèles traitant de ces conditions. De plus, nous aborderons les différentes méthodologies identifiées dans la littérature pour évaluer le problème des prédictions de concentration impactées par des variations de vent.
- Le **chapitre 5** aborde les résultats numériques obtenus à l'aide des simulations effectuées avec le logiciel Code_Saturne en utilisant certains essais de l'ensemble de données INEL d'Idaho Falls. Les résultats numériques sont comparés aux observations expérimentales, et le comportement du modèle est évalué par le biais d'une approche d'évaluation quantitative. Une nouvelle approche gaussienne est utilisée, où la concentration est moyennée sur l'ensemble des sous-intervalles tout en prenant en compte les directions du vent responsables du phénomène de méandres (oscillations du vent à basse fréquence) associé à chaque sous-intervalle. Les résultats obtenus avec cette méthode sont comparés à ceux de la méthode de la CFD.

Dynamique de l'atmosphère et dispersion atmosphérique

Résumé du chapitre

La dispersion de nuages de gaz est le résultat de nombreuses interactions. L'évolution spatio-temporelle de ces corps est conditionnée par les paramètres initiaux liés au rejet et aux caractéristiques de leur environnement proche. Le chapitre vise à définir les limites de l'étude et à expliquer les processus physiques qui influencent la forme des panaches de gaz.

Le chapitre commence par explorer la structure de la couche limite atmosphérique, cruciale pour la dispersion des polluants, en examinant les spécificités de l'environnement urbain. Les équations de la couche limite atmosphérique sont présentées, suivies de concepts de turbulence atmosphérique. Les principaux modèles de simulation numérique de la turbulence sont introduits, tout comme la stabilité atmosphérique. Le second volet examine comment la turbulence et la stabilité affectent la dispersion des polluants, en explorant différentes approches pour calculer leur concentration. L'ensemble jette les bases nécessaires à la compréhension de la dispersion atmosphérique, cruciale pour évaluer les risques liés à la pollution atmosphérique.

1.1 Structure de l'atmosphère

La couche gazeuse qui entoure la Terre et est maintenue en place par la gravité constitue son atmosphère. S'étendant généralement sur environ 600 km, plus de 99 % de sa masse se trouve dans les premiers 50 km à partir de la surface terrestre. Cette enveloppe gazeuse, appelée atmosphère, est principalement composée d'azote (78 %), ainsi que de dioxygène (21 %) et d'autres gaz tels

que l'argon, le xénon, mais en quantités très faibles. Les variations de densité et de température dans l'atmosphère présentent des changements irréguliers en fonction de l'altitude. Cette variation verticale, appelée stratification, est une caractéristique fondamentale de l'atmosphère et conduit à sa division en différentes couches distinctes :

- La troposphère représente la partie la plus proche de la Terre, influencée directement par sa surface et s'étendant jusqu'à environ 12 km d'altitude. Cette zone abrite la majeure partie des activités humaines et est le lieu où les masses d'air sont chauffées par le rayonnement infrarouge terrestre, entraînant des mouvements convectifs. L'élévation adiabatique des particules d'air dans cette couche entraîne une diminution de la température et de la pression avec l'altitude.
- La stratosphère se caractérise par une augmentation normale de la température pendant le cycle diurne et absorbe les rayons ultraviolets du soleil. Située au-dessus de la troposphère, elle s'étend sur une moyenne d'environ 40 km. La température y est généralement plus élevée que dans la troposphère, ce qui limite les mouvements verticaux des particules d'air de cette dernière.
- La mésosphère s'étend sur plus de 50 km et est marquée par une nouvelle diminution de la température en fonction de l'altitude.
- La thermosphère, la partie la plus éloignée de l'atmosphère terrestre, est caractérisée par une augmentation de la température des particules, pouvant atteindre 1500°C. Elle s'étend jusqu'à environ 800 km d'altitude. Au-delà de la thermosphère, se trouve l'exosphère, qui est en dehors de l'atmosphère et s'étend à l'infini. Elle se distingue par la faible densité des particules d'air qu'elle contient.

La répartition verticale de la température en relation avec l'altitude est illustrée dans la Figure 1.1.

1.1.1 Structure de la couche limite atmosphérique (CLA)

Le mouvement des masses d'air dans l'atmosphère, visant à équilibrer les gradients de pression résultant du réchauffement différencié de la Terre par le soleil, est ce que nous appelons le vent. La structure de ce mouvement peut être assimilée à un écoulement turbulent sur une surface rugueuse. Les éléments de rugosité englobent toutes les structures (bâtiments, végétation, ...) de taille inférieure à celle de l'écoulement, tandis que les éléments de plus grande taille sont plutôt considérés comme des obstacles. La couche limite associée à ce mouvement est appelée la couche limite atmosphérique (CLA), s'étendant jusqu'à la limite de l'influence des forces terrestres (Figure 1.2). Thermiquement parlant, elle correspond à la région proche de la Terre qui réagit assez rapidement au flux de chaleur terrestre, en comparaison avec le reste de l'atmosphère. Trois principales zones peuvent être distinguées dans la CLA :

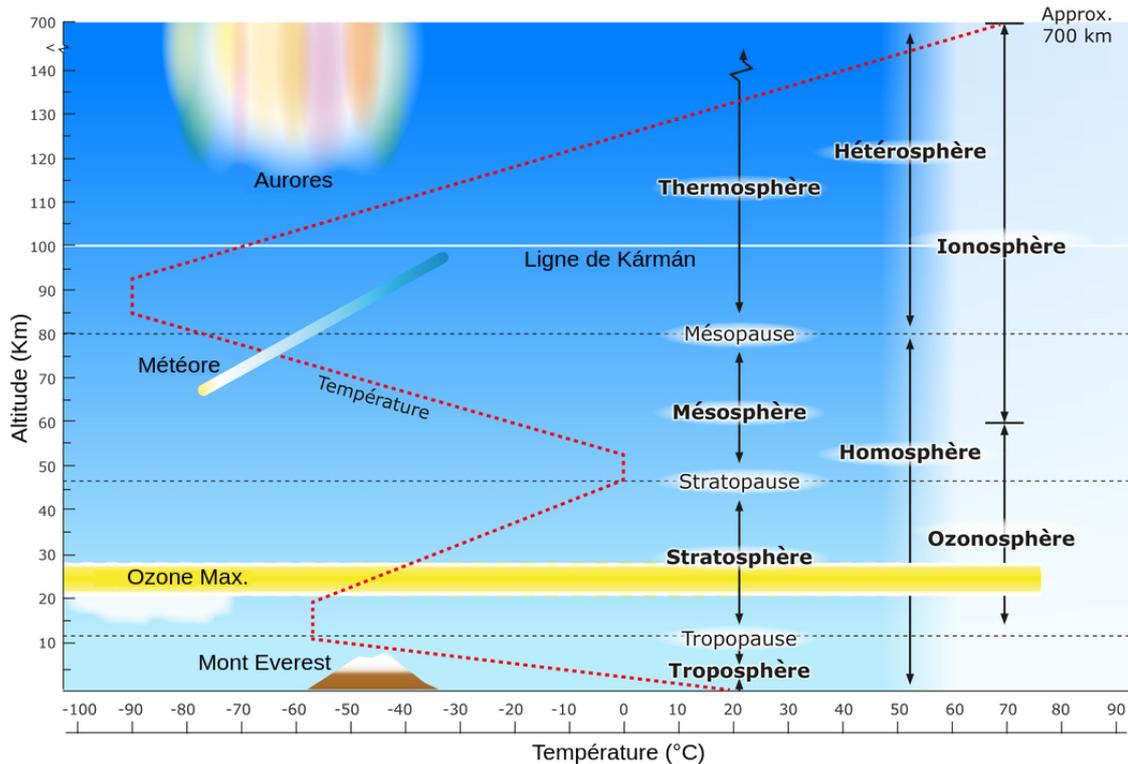


FIGURE 1.1 – Structure verticale de l'atmosphère montrant quatre divisions basées sur la température [Adapté du site <https://www.sciencelearn.org.nz>]

- La sous-couche rugueuse, située à proximité immédiate du sol et ayant une hauteur similaire à celle des obstacles de l'écoulement atmosphérique. Cette zone se caractérise par une importante hétérogénéité horizontale, et le champ des vitesses du vent y est non homogène et instationnaire.
- La couche de surface (CLS), dont l'épaisseur est d'environ un dixième de l'épaisseur de la CLA. Elle s'étend depuis le sol jusqu'à une altitude de 150 m (dans les zones de sol plat ou au-dessus d'un plan d'eau) jusqu'à 500 m voire 600 m dans les grandes villes. Cette couche est dominée par le frottement avec le sol, et elle présente un fort gradient vertical de vitesse du vent. La direction du vent (composante horizontale) ne varie pas avec l'altitude, et les flux de chaleur ainsi que la force de cisaillement sont supposés constants.
- La couche d'Ekman surplombe la couche limite de surface ; la force de cisaillement et les flux de chaleur décroissent avec l'altitude. À son niveau supérieur, les trajectoires des particules d'air tendent à être déviées par la force de Coriolis, qui commence à surpasser l'influence terrestre.

Au-delà de la CLA, nous trouvons l'atmosphère libre où l'effet de la rotation de la Terre devient prépondérant. Cette zone est caractérisée par la circulation géostrophique qui résulte de l'équilibre entre les forces de pression et la force de Coriolis. Les émissions habituelles ne persistent que pendant quelques minutes voire quelques heures, et elles ne se développent en moyenne que sur quelques kilomètres en altitude.

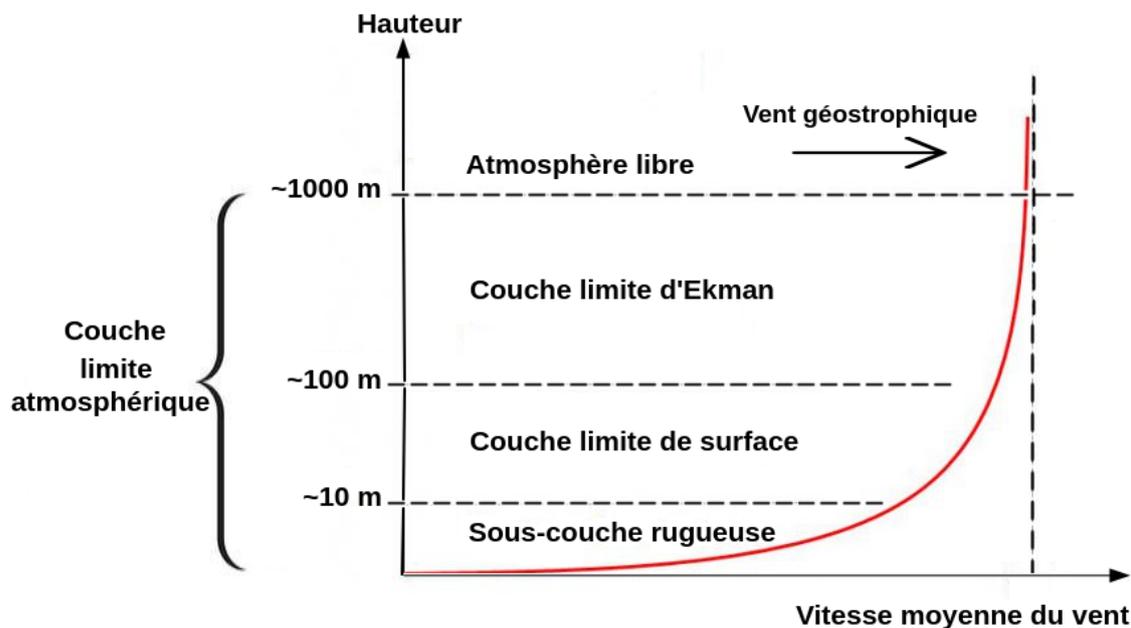


FIGURE 1.2 – Structure de la couche limite atmosphérique

1.1.2 Caractéristiques du milieu urbain

L'environnement urbain exerce une influence considérable sur le mouvement de l'air dans la basse atmosphère. En cas de vents forts, on peut assimiler l'environnement urbain à une surface rugueuse, engendrant ainsi une couche interne appelée la couche limite urbaine (CLU). En présence de vents faibles, l'environnement urbain est plutôt comparé à une surface chauffée, entraînant une convection thermique locale. L'environnement urbain comprend à la fois des zones rurales et urbaines (Figure 1.3). Contrairement à la couche limite dans les zones rurales, la couche limite urbaine (CLU) est plus complexe. Une sous-couche de rugosité verticalement étendue, bien plus que dans les zones rurales typiques, occupe les premières dizaines de mètres au-dessus de la surface, tandis que le reste de la couche de surface (c'est-à-dire la sous-couche inertielle) se situe à une altitude plus élevée (Piringer et al., 2002). La sous-couche rugueuse englobe la couche de canopée urbaine (CCU), constituée de canyons de rue individuels et d'autres éléments de rugosité formant des obstacles, et ayant une épaisseur de 2 à 5 fois la hauteur de la CCU.

D'autre part, la zone urbaine est assimilée à une surface morphologique tridimensionnelle composée de matériaux naturels et artificiels, possédant des caractéristiques thermo-radiatives spécifiques. Les émissions de chaleur d'origine humaine (chauffage en hiver, climatisation en été, etc.) dans cette zone créent une différence minimale de température (la nuit) entre les zones urbaines les plus chaudes et les zones rurales les plus froides. Cette différence devient encore plus marquée par temps clair et vent faible.

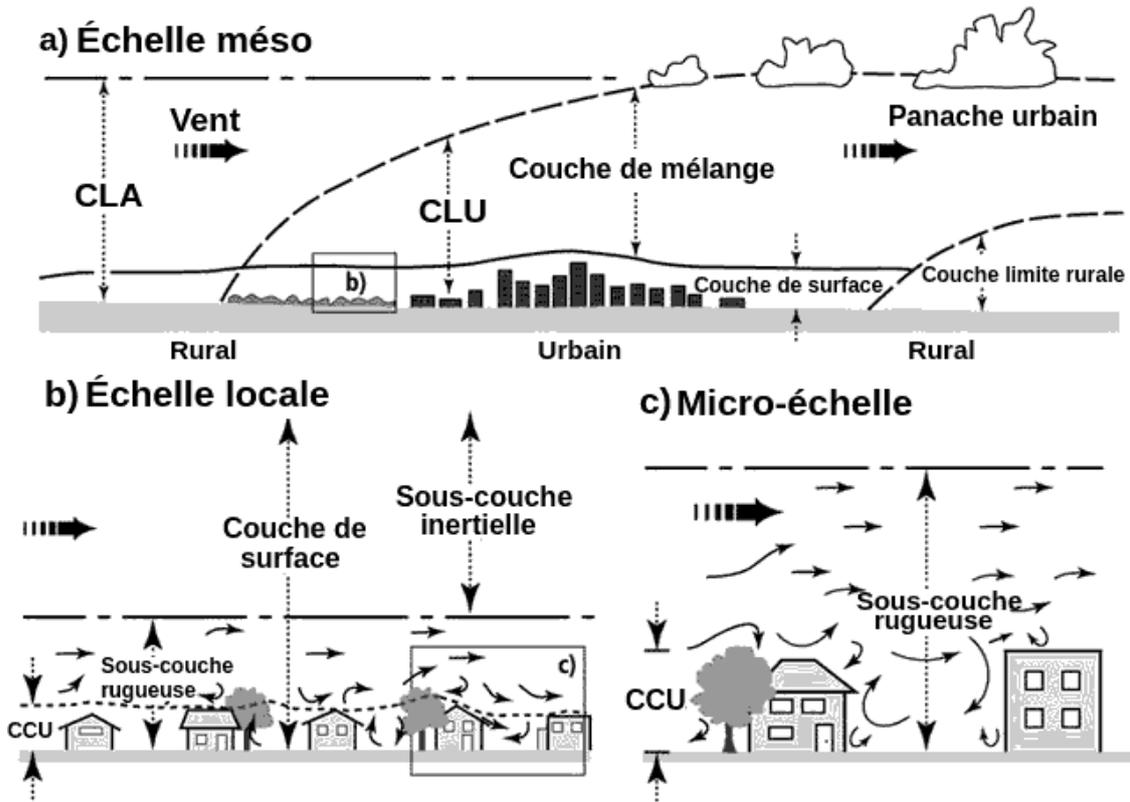


FIGURE 1.3 – Schéma de la couche limite urbaine avec ses couches verticales et ses échelles [Adapté de Piringler et al. (2002)]

1.2 Équations de la couche limite atmosphérique

Dans cette partie, nous présentons les équations et les critères qui permettent de caractériser la couche limite atmosphérique à travers les caractéristiques du vent et de la turbulence.

L'équation de conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.1)$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{d(\rho U_i)}{dt} = \underbrace{\rho \frac{\partial U_i}{\partial t}}_A + \underbrace{\rho U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j}}_B = \underbrace{-2\rho \epsilon_{ijk} \Omega_j U_k}_C - \underbrace{\rho g \delta_{i3}}_D - \underbrace{\frac{\partial P}{\partial x_i}}_E + \underbrace{\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}}_F \quad (1.2)$$

Où :

A : terme instationnaire

B : terme d'advection

C : terme de Coriolis

D : terme de gravité

E : terme de gradient de pression

F : terme de viscosité moléculaire. τ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses décrit à l'aide du tenseur de déformation des vitesses $\left(S_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \right)$ et de la viscosité moléculaire (μ) comme suit :

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (1.3)$$

L'air atmosphérique est assimilé à un gaz parfait dont l'équation d'état est $P = \rho RT$ où R est la constante des gaz parfaits ($= 287 \text{ J/kgK}$)

La température potentielle est la température que prendrait une particule d'air ramenée par transformation adiabatique de sa pression P à la pression de 1000hPa. L'expression de la température potentielle est la suivante :

$$\Theta = T \left(10^5 / P \right)^{R/C_p} \quad (1.4)$$

L'équation de conservation de l'énergie interne (bilan de température) est écrite en utilisant la température potentielle :

$$\frac{d\Theta}{dt} = \frac{\partial \Theta}{\partial t} + U_j \frac{\partial \Theta}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho C_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial \Theta}{\partial x_j} \right) + S_\theta \quad (1.5)$$

Où, λ est la conductivité thermique, C_p est la capacité calorifique massique à pression constante et S_θ est un terme source lié à la chaleur latente d'évaporation/condensation.

A noter que la température potentielle est utilisée dans la météorologie de la couche limite atmosphérique parce qu'elle est indépendante de la pression ou du volume et est conservée en mouvement vertical.

L'air humide est constitué d'air sec ajouté à de la vapeur d'eau à faible concentration ($< 6\%$) à la même température. La température virtuelle est la température que doit avoir une particule d'air sec pour que sa masse volumique soit la même que celle d'une particule d'air humide à la même pression. Elle est donnée par :

$$T_v = T(1 + 0.608q) \quad (1.6)$$

avec $P = \rho RT_v$ et $R = R_{\text{air}}$. q est l'humidité spécifique : $q = \rho_{\text{vapeur}} / \rho_{\text{total}}$ et $\rho_{\text{total}} = \rho_{\text{air sec}} + \rho_{\text{vapeur}}$.

La température potentielle virtuelle est écrite sous forme de :

$$\Theta_v = T_v \left(10^5 / P \right)^{R/C_p} \quad (1.7)$$

Où $\Theta_v = \Theta(1 + 0.608q)$.

En cas d'atmosphère humide, le bilan d'humidité spécifique (sans terme source/puits), s'exprime sous la forme :

$$\frac{\partial q}{\partial t} + U_i \frac{\partial q}{\partial x_i} = v_q \frac{\partial^2 q}{\partial x_i \partial x_i} \quad (1.8)$$

1.3 Turbulence atmosphérique

La turbulence atmosphérique présente une structure similaire à celle de la turbulence classique. Cependant, en fonction du mécanisme sous-jacent à sa génération, nous pouvons distinguer entre la turbulence thermique ou convective et la turbulence dynamique.

- Les écoulements turbulents issus de processus thermiques se distinguent par des instabilités thermo-convectives amplifiées par les forces d'Archimède ou de flottabilité. En conséquence, le nombre de Rayleigh (Ra) de la couche limite atmosphérique (CLA) ($Ra \approx 3 \times 10^8$) excède largement la valeur critique pour les écoulements turbulents ($Ra_{critique} > 50000$). La turbulence thermique est associée aux mouvements verticaux des cellules d'air chauffées par le flux thermique provenant de la Terre. L'air se réchauffant devient plus léger, ce qui permet des mouvements ascendants, suivis de descentes lorsque l'équilibre thermique est atteint et que les conditions environnementales le permettent. Dans la couche limite de surface, ces flux turbulents sont supposés constants.
- Les écoulements turbulents d'origine dynamique sont marqués par des instabilités mécaniques intensifiées par des forces d'inertie non linéaires. En conséquence, le nombre de Reynolds (Re) de la couche limite atmosphérique (CLA) ($Re \approx 10^9$) dépasse largement la valeur critique pour les écoulements turbulents ($Re_{critique} \approx 35000$). La turbulence dynamique englobe la partie de la turbulence atmosphérique qui n'est pas de nature thermique. Elle est générée par le cisaillement du vent avec le sol, les éléments de rugosité et les obstacles.

1.3.1 Description statistique de la turbulence atmosphérique

La turbulence atmosphérique est un phénomène complexe caractérisé par des variations chaotiques de la vitesse et d'autres propriétés dans un fluide en mouvement. Pour étudier et comprendre ce phénomène, nous utilisons des outils statistiques qui nous aident à traiter les données expérimentales, à modéliser les comportements turbulents, et à simplifier les équations qui les décrivent.

Dans cette optique, nous considérons un ensemble (E) de N réalisations de l'écoulement, soumises aux mêmes conditions initiales et limites. Cela nous permet de définir plusieurs grandeurs caractéristiques de la turbulence :

- La moyenne d'ensemble : cette grandeur, notée $\bar{U}(x, t)$, représente la valeur moyenne d'une variable U à un certain point x et à un instant t . Elle est exprimée comme suit :

$$\bar{U}(x, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N U^{(i)}(x, t) \quad (1.9)$$

avec $U^{(i)}$ la valeur de U (variable aléatoire) à la i ème réalisation, au point x et à l'instant t

- La moyenne statistique : cette grandeur, notée $\bar{U}(\vec{x}, t)$, est calculée en intégrant le produit de la variable ξ par sa probabilité $P(\xi)$ sur l'ensemble des valeurs possibles de ξ . Cette moyenne nous donne une vision statistique de la variable U au point \vec{x} et à l'instant t . Elle est définie comme suit :

$$\bar{U}(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \xi P(\xi) d\xi \quad (1.10)$$

où $P(\xi)d\xi = \text{Prob}(\xi \leq U < \xi + d\xi)$ au point \vec{x} et à l'instant t .

- Les fluctuations : notées U' , représentent les variations locales de la variable turbulente U par rapport à sa moyenne $\bar{U}(x, t)$. En d'autres termes, leur expression est déduite de la décomposition de Reynolds, comme suit :

$$U' = U - \bar{U} \quad (1.11)$$

La variable turbulente U est la somme de sa moyenne et de la fluctuation U'

Ces fluctuations sont essentielles pour comprendre comment la turbulence évolue dans l'écoulement.

- Le moment d'ordre n : Les moments d'ordre n de la variable U , notés \bar{U}^n , nous fournissent des informations sur la distribution des fluctuations. Par exemple, \bar{U}^2 représente la variance de U , tandis que \bar{U}^3 nous donne des informations sur les asymétries dans cette distribution. Il est exprimé comme suit :

$$\bar{U}^n = \int_{-\infty}^{\infty} (\xi - \bar{U})^n P(\xi) d\xi \quad (1.12)$$

Par conséquent, $\bar{U}^0 = 1$ et $\bar{U}^1 = 0$

- La variance ($n = 2$) : la variance de la variable U , notée σ_U , est la racine carrée de \bar{U}^2 . Elle mesure l'écart type des fluctuations et est une mesure de l'intensité de la turbulence. La variance est définie comme suit :

$$\sigma_U^2 = \bar{U}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (\xi - \bar{U})^2 P(\xi) d\xi \quad (1.13)$$

- La covariance : la covariance entre deux variables U et V , notée $\overline{U'V'}$, mesure comment elles varient ensemble dans le temps et l'espace. Cette grandeur est cruciale pour comprendre les interactions entre différentes grandeurs turbulentes. Son expression est :

$$\overline{U'V'} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (a - \bar{U})(b - \bar{V}) P(a, b) da db \quad (1.14)$$

avec $\text{Prob}(a \leq U < a + da \text{ et } b \leq V < b + db)$ au point \vec{x} et à l'instant t

1.3.1.1 Fonctions d'autocorrélation

Les fonctions d'autocorrélation sont essentielles pour étudier l'organisation spatiale de l'écoulement turbulent, ainsi que les échelles de temps et de longueur caractéristiques de ce phénomène. Nous distinguons plusieurs types d'autocorrélations :

- L'autocorrélation temporelle de la fluctuation U' : cette autocorrélation examine comment une variable à un instant t est corrélée avec elle-même à un instant ultérieur $t' = t + \tau$. Si la turbulence est statistiquement stationnaire, ce qui signifie que ses propriétés ne varient pas dans le temps, alors cette autocorrélation ne dépend que de la différence $\tau = t' - t$ entre les instants. Cette autocorrélation temporelle est essentielle pour comprendre les évolutions temporelles de la turbulence. L'autocorrélation temporelle est définie par :

$$R_{uu}(\vec{x}, t, t') = \overline{U'(\vec{x}, t)U'(\vec{x}, t')} = \overline{U'(\vec{x}, 0)U'(\vec{x}, t' - t)} = R_{uu}(\vec{x}, t - t') = R_{uu}(\vec{x}, -\tau) \quad (1.15)$$

- Le coefficient d'autocorrélation temporelle : ce coefficient nous permet de quantifier la corrélation temporelle entre deux instants. Il est défini comme le rapport de l'autocorrélation à un décalage temporel τ par rapport à l'autocorrélation à $\tau = 0$. IL est défini comme suit :

$$\frac{R_{uu}(\tau)}{R_{uu}(0)} = \frac{\overline{U'(\vec{x}, t)U'(\vec{x}, t + \tau)}}{\overline{U'(t)U'(t)}} \quad (1.16)$$

- L'échelle de temps intégrale : mesure sur quel intervalle de temps le processus turbulent est corrélé avec lui-même. Elle est calculée en intégrant l'autocorrélation temporelle par rapport au temps. Elle est donnée par :

$$T_{uu} = \int_0^\infty \frac{R_{uu}(\tau)}{R_{uu}(0)} d\tau \quad (1.17)$$

- L'autocorrélation spatiale de la fluctuation U' : cette autocorrélation explore comment les fluctuations en un point sont corrélées avec les fluctuations en un autre point de l'espace. Elle est cruciale pour comprendre la structure spatiale de la turbulence. Si nous supposons une turbulence statistiquement homogène, c'est-à-dire que les caractéristiques statistiques de translation ne varient pas dans la direction de l'homogénéité. Dans ce cas, les quantités ou moments statistiques en un point sont indépendants de la position \vec{x} . De même, les corrélations spatiales entre 2 points différents x et x' ne dépendent que de la distance $r = x - x'$ entre ces 2 points. Ainsi, l'autocorrélation spatiale s'exprime comme suit :

$$R_{uu}(\vec{x}, \vec{x}', t) = \overline{U'(\vec{x}, t)U'(\vec{x}', t)} = \overline{U'(0, t)U'(\vec{r} = \vec{x} - \vec{x}', t)} = R_{uu}(\vec{r}, t) = R_{uu}(-\vec{r}, t) \quad (1.18)$$

- Composantes du coefficient de corrélation spatiale : l'écoulement turbulent peut être caractérisé par les composantes du coefficient de corrélation spatiale, telles que R_{11} , R_{22} et R_{33} .

Ces composantes nous informent sur la corrélation spatiale de la turbulence dans différentes directions. Pour R_{11} , par exemple, l'expression est la suivante :

$$R_{11}(r_1) = \frac{\overline{U'(\vec{x}, t)U'(\vec{x} - r_1\vec{e}_1, t)}}{\overline{U'^2}} \quad (1.19)$$

- L'échelle de longueur intégrale (dans la direction e_1) : cette échelle mesure sur quelle distance spatiale l'écoulement est corrélé avec lui-même dans une direction donnée. Elle est calculée en intégrant l'autocorrélation spatiale par rapport à la distance. Elle est donnée par :

$$L_{11} = \int_0^\infty \frac{R_{11}(r_1)}{R_{11}(0)} dr_1 \quad (1.20)$$

En résumé, ces outils statistiques et ces fonctions d'autocorrélation sont essentiels pour caractériser et comprendre la turbulence atmosphérique, en examinant comment les propriétés de l'écoulement varient dans le temps et l'espace, ainsi que les échelles de temps et de longueur qui définissent la turbulence.

1.3.1.2 Échelles de turbulence et spectre d'énergie

La turbulence atmosphérique implique divers tourbillons turbulents de tailles différentes. À de grands nombres de Reynolds, il existe une distinction entre les plus grands et les plus petits tourbillons.

- Les plus grands tourbillons : Ceux-ci sont proches de la taille globale de l'écoulement et extraient de l'énergie cinétique de celui-ci. Ils jouent un rôle majeur dans le transport et le mélange et ne sont pas fortement influencés par la viscosité.
- Les plus petits tourbillons (échelles de Kolmogorov) : Ils sont caractérisés de manière universelle, reçoivent de l'énergie des tourbillons plus grands et dissipent l'énergie sous forme de chaleur en raison de la viscosité moléculaire. Ils sont isotropes par nature.
- Les tourbillons intermédiaires (tourbillons à l'échelle de Taylor) : Ils se trouvent dans la plage inertielle et sont isotropes. Ils ne dépendent ni des plus grands ni des plus petits tourbillons, mais peuvent être caractérisés par la dissipation turbulente ε et le nombre d'onde κ .

Kolmogorov (1968) a proposé une loi d'échelle qui relie l'énergie à une échelle de longueur particulière (généralement notée sous la forme du nombre d'onde κ) au nombre d'onde lui-même. Le spectre d'énergie est souvent exprimé sous la forme $E(\kappa) \sim \kappa^{(-5/3)}$, où $E(\kappa)$ représente l'énergie au nombre d'onde κ .

Le concept de "cascade d'énergie" implique que les plus grands tourbillons se fragmentent et transfèrent de l'énergie aux plus petits jusqu'à ce que la stabilité soit atteinte (Richardson, 1922). Cette cascade se poursuit jusqu'à ce que la taille la plus petite soit atteinte. La figure 1.4a montre le processus de la cascade d'énergie.

Le spectre d'énergie (Figure 1.4b) est un outil utile pour classer ces tourbillons en trois échelles de longueur représentatives :

- Échelle de longueur intégrale (A) : Ce sont les plus grands tourbillons et ils sont très anisotropes. Ils interagissent fortement avec l'écoulement moyen et sont sensibles aux conditions d'écoulement. Leur spectre est défini comme suit

$$\begin{cases} E \propto \nu^2 l \\ l = \frac{k^{(3/2)}}{\varepsilon} \\ t = \frac{k}{\varepsilon} \\ v = \sqrt{k} \end{cases} \quad (1.21)$$

- Micro-échelle de Taylor (B) : De taille intermédiaire, ils se trouvent dans la plage inertielle et jouent un rôle dans la cascade d'énergie. Leur taille est influencée par l'étirement des vortex. Le spectre d'énergie de la sous-gamme inertielle est obtenu par analyse dimensionnelle et montre que le spectre d'énergie est proportionnel au produit du nombre d'onde et du taux de dissipation, tel que :

$$E \propto \kappa^{-5/3} \varepsilon^{2/3} \quad (1.22)$$

- Échelle de longueur de Kolmogorov (C) : Ce sont les plus petits tourbillons et sont isotropes en raison de la forte viscosité. Ils dissipent l'énergie cinétique en chaleur. En utilisant l'analyse dimensionnelle, l'échelle de longueur de Kolmogorov, l'échelle de temps, l'échelle de vitesse et le spectre d'énergie sont respectivement donnés par :

$$\begin{cases} \eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} \\ \tau_\eta = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \\ v_\eta = (\nu\varepsilon)^{1/4} \\ E \propto \nu^{5/4} \varepsilon^{1/4} \end{cases} \quad (1.23)$$

Le rapport entre l'échelle de longueur intégrale et l'échelle de longueur de Kolmogorov augmente avec de plus grands nombres de Reynolds turbulents, indiquant que l'échelle de longueur de Kolmogorov devient beaucoup plus petite que l'échelle de longueur intégrale dans les écoulements très turbulents. Cela résume les aspects clés des échelles de turbulence et de la cascade d'énergie.

1.3.2 Principaux modèles de simulation numérique de la turbulence

Il existe trois principaux modèles de simulation numérique pour étudier la turbulence :

1. Simulation Numérique Directe (DNS) : La DNS, ou Simulation Numérique Directe, vise à résoudre de manière explicite toutes les échelles de la turbulence en utilisant des méthodes numériques pour résoudre les équations de Navier-Stokes. Aucune approximation ou modélisation n'est appliquée. Cependant, la turbulence étant tridimensionnelle et instationnaire, le

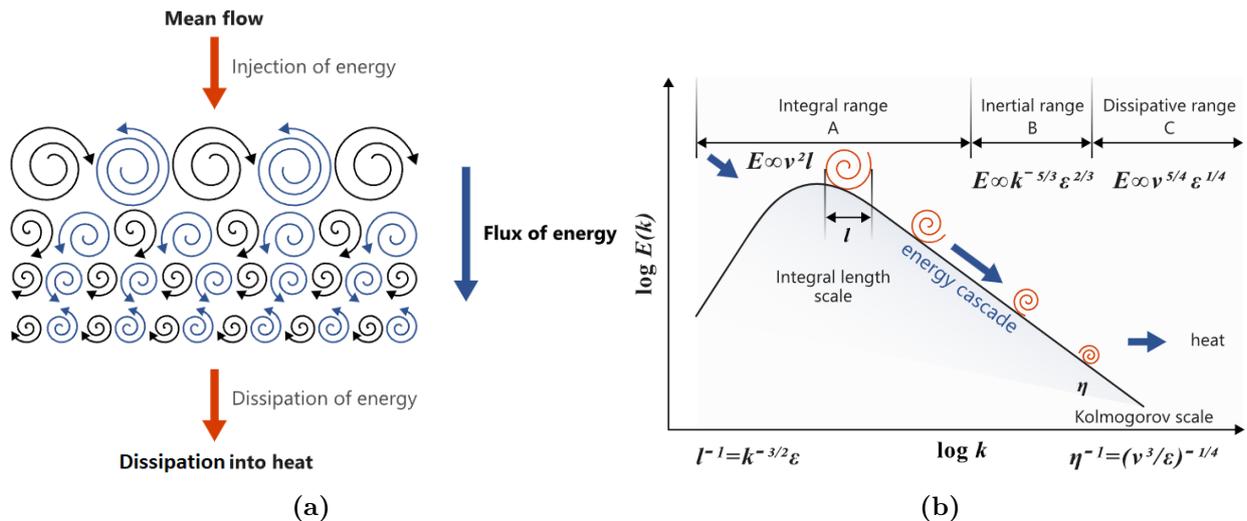


FIGURE 1.4 – Représentation schématique : (a) cascade d'énergie (b) spectre de l'énergie de turbulence [Tiré du site <https://2021.help.altair.com/>]

coût de calcul associé est proportionnel au cube du nombre de Reynolds (Re). Dans les environnements industriels, le nombre de Reynolds atteint souvent plusieurs millions, rendant la DNS actuellement hors de portée en termes de puissance de calcul et de capacité mémoire, et ce, pour les décennies à venir.

2. Simulation des Grandes Échelles (LES) : La LES, ou Simulation des Grandes Échelles, consiste à résoudre les équations filtrées de Navier-Stokes. Le champ résultant reste tridimensionnel et instationnaire, mais il se concentre uniquement sur la caractérisation des grandes structures tourbillonnaires. Les échelles plus petites, qui présentent un comportement plus universel, sont modélisées plutôt que résolues explicitement.
3. Modélisation Statistique de moyenne de Reynolds RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) : La modélisation statistique de la turbulence, réalisée à travers les équations RANS, considère la turbulence comme un processus purement stochastique. Toutes les échelles de la turbulence sont modélisées. Les grandeurs instantanées telles que la vitesse, la pression et la température sont décomposées en une partie moyenne et une partie fluctuante, suivant la décomposition proposée par Reynolds lui-même. Cette approche est encore largement utilisée pour les simulations d'écoulement atmosphérique en raison de son coût de calcul relativement faible, ce qui en fait un choix pertinent pour les écoulements à grand nombre de Reynolds.

La figure 1.5 illustre la manière dont le spectre énergétique est résolu ou modélisé en fonction de l'approche de simulation employée.

1.3.3 La modélisation RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*)

Cette approche est employée dans les travaux de cette thèse, où la turbulence est complètement modélisée. Son principe repose sur la décomposition des grandeurs instantanées telles que la vitesse, la pression, la température, et le scalaire en une composante moyenne et une composante fluctuante. Pour toute grandeur $A(\vec{x}, t)$ donnée, cette décomposition s'exprime comme suit :

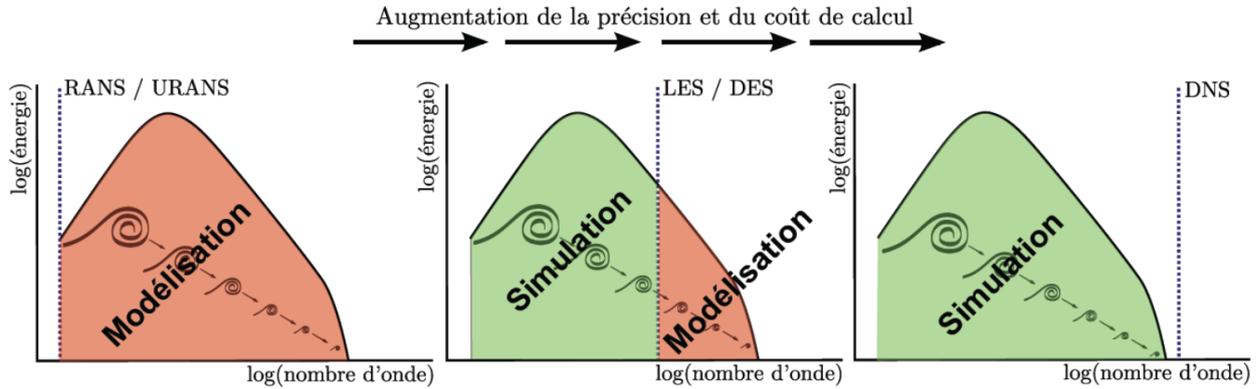


FIGURE 1.5 – Simulation et modélisation du spectre de turbulence [Image de Beaubien, C.-A., Université Laval (2013)]

$$A(\vec{x}, t) = \bar{A}(\vec{x}) + A'(t) \quad (1.24)$$

De manière analogue, les décompositions suivantes s'appliquent à la vitesse, la pression, la température potentielle et le scalaire :

$$\begin{cases} U(\vec{x}, t) = \bar{U}(\vec{x}) + U'(t) \\ P(\vec{x}, t) = \bar{P}(\vec{x}) + P'(t) \\ \Theta(\vec{x}, t) = \bar{\Theta}(\vec{x}) + \Theta'(t) \\ C(\vec{x}, t) = \bar{C}(\vec{x}) + C'(t) \end{cases} \quad (1.25)$$

L'opérateur de moyenne satisfait certaines propriétés bien connues, appelées axiomes de Reynolds. Pour deux grandeurs instantanées A et B , les relations suivantes s'appliquent :

$$\begin{cases} \overline{A'} = 0 \\ \overline{A + B} = \bar{A} + \bar{B} \\ \overline{AB} = \bar{A}\bar{B} + \overline{A'B'} \\ \overline{cA} = c\bar{A} \\ \overline{\left(\frac{\partial A}{\partial s}\right)} = \left(\frac{\partial \bar{A}}{\partial s}\right) \\ \overline{\int A ds} = \int \bar{A} ds \end{cases} \quad (1.26)$$

En substituant ces expressions dans les équations de Navier-Stokes (NS), nous obtenons les équations moyennées. Afin d'éviter les répétitions, la forme moyenne des équations NS résolues par le code CFD est présentée dans le chapitre suivant.

1.3.4 Modèles de turbulence

La modélisation RANS révèle l'existence de corrélations inconnues, à savoir les tenseurs de Reynolds. Pour obtenir les champs moyens, un modèle de fermeture pour ces corrélations est nécessaire. Les modèles de turbulence se divisent en deux grandes catégories : ceux basés sur l'hypothèse de la viscosité turbulente, également appelés modèles du premier ordre, et ceux qui résolvent les équations de transport des tensions de Reynolds, qualifiés de modèles aux tensions de Reynolds ou modèles du second ordre. La figure 1.6 présente un schéma illustratif classant ces différents modèles de turbulence en fonction de leur ordre, du nombre d'équations et de leur validité près de la paroi.

1.3.4.1 Modèles du premier ordre

Tous les modèles de viscosité turbulente, qu'ils soient linéaires ou non-linéaires, partagent le même principe : ils déterminent la viscosité turbulente en se basant sur deux variables indépendantes pour lesquelles les équations de transport sont résolues. Le modèle le plus célèbre, proposé par Launder et al. (1975), est le modèle linéaire $k - \varepsilon$, qui résout les équations de transport pour l'énergie cinétique turbulente et la dissipation visqueuse. Ce modèle reste largement utilisé dans l'industrie et la modélisation des écoulements cisailés en raison de sa robustesse et de sa simplicité. D'autres modèles, tels que les modèles $k - \omega$, $\bar{v}^2 - f$ etc., ont été développés par la suite. Cependant, les modèles linéaires présentent des limitations, notamment en ce qui concerne la prédiction de l'anisotropie de la turbulence et la surestimation de la production turbulente, ce qui entraîne une forte diffusivité turbulente et la dissipation rapide des structures cohérentes. De plus, ils sont insensibles aux rotations et aux courbures des écoulements. Pour résoudre ces limitations, des modèles de viscosité turbulente non-linéaires ont été développés, bien que ceux-ci soient sujets aux instabilités numériques.

1.3.4.2 Modèles du second ordre

Dans ces modèles, les tenseurs de Reynolds révèlent les mécanismes physiques régissant l'évolution de la turbulence, notamment la production, la dissipation, la redistribution de la pression, la diffusion moléculaire et turbulente, etc. Certains termes sont déterminés de manière exacte, tandis que d'autres nécessitent une modélisation. Ces modèles offrent une description plus complète et plus proche des mécanismes de la turbulence que les modèles du premier ordre. Ils permettent une prédiction plus précise des effets de courbure, de rotation, de l'anisotropie (dans les cas tels que les ondes de choc, les zones proches des parois, les décollements, etc.). Cependant, les modèles RSM sont plus coûteux en termes de calcul, car ils nécessitent la résolution de six équations de transport pour chaque composante du tenseur de Reynolds, par opposition à une seule pour l'énergie cinétique turbulente dans les modèles de viscosité turbulente. De plus, ils présentent également des problèmes potentiels liés à l'instabilité numérique.

Parmi les modèles de second ordre, on trouve le modèle haut-Reynolds $R_{ij} - \varepsilon$ *SSG* (Speziale et al., 1991), dont le champ d'application comprend les écoulements initialement isotropes soumis à un cisaillement brusque ainsi que les écoulements rotatifs. Cependant, ce modèle est basé sur

l'hypothèse de quasi-homogénéité, ce qui le rend invalide en région proche de la paroi. De plus, la résolution de l'équation de transport, notamment du terme de production, permet de s'affranchir de l'hypothèse d'instantanéité : le modèle est donc capable de reproduire l'effet mémoire de la turbulence.

On trouve également le modèle bas-Reynolds à pondération elliptique (*Elliptic Blending*) $R_{ij} - \varepsilon$ *EB-RSM* (Manceau, 2005 ; Manceau & Hanjalić, 2002), qui est basé sur la méthode de relaxation elliptique introduite par Durbin (1993). Ce modèle repose principalement sur une redistribution à la fois proche et éloignée de la paroi. Son champ d'application comprend des cas industriels tels que le refroidissement d'une paroi chaude par impact de jets multiples (Thielen et al., 2005), un canal en rotation (De Meux, 2012), un jet axisymétrique impactant un disque en rotation (Manceau et al., 2009 ; Minagawa & Obi, 2004), ainsi que des études appliquant les versions algébriques de ce modèle pour la modélisation des flux thermiques dans des cas de convection forcée, naturelle et mixte (Lecocq et al., 2008 ; Lecocq, 2008). Cependant, ce modèle n'est valable que pour des parois lisses, et son application n'est pas adaptée aux écoulements atmosphériques et aux phénomènes de dispersion turbulente dans la couche limite atmosphérique rugueuse. Un autre problème associé à ce modèle bas-Reynolds (et aux modèles à pondération elliptique pour les scalaires) est que ces modèles sont loin du cadre opérationnel nécessaire pour la robustesse et l'automatisation de certaines tâches. En effet, le nombre d'équations correspondant au modèle *EB-RSM* est assez élevé et nécessite de nombreuses heures de calcul pour un domaine tridimensionnel. Toutes ces considérations nous amènent, dans le cadre de notre étude, à prendre du recul par rapport aux modèles bas-Reynolds à pondération elliptique et à envisager d'autres modèles anisotropes de types $R_{ij} - \varepsilon$ *LRR* (Launder & Spalding, 1974) ou *SSG* (Speziale et al., 1991).

Une discussion plus détaillée sur le choix des modèles de turbulence pour les simulations se trouve dans le chapitre 2.

1.4 Stabilité de l'atmosphère

La stabilité de l'atmosphère peut être caractérisée par trois états qui décrivent le comportement adiabatique vertical d'une parcelle d'air par rapport à son état d'équilibre.

1. L'atmosphère est considérée comme stable lorsque le gradient vertical de température potentielle est positif. Dans cette situation, les masses d'air froides, étant plus denses, se situent en dessous des masses d'air chaudes, entraînant un transfert thermique de l'atmosphère vers la surface terrestre. En conséquence, la parcelle d'air a tendance à retourner à son état initial. Ce type de stabilité se manifeste généralement pendant la nuit, lorsque le sol se refroidit.
2. L'atmosphère est considérée comme neutre lorsque le gradient vertical de température potentielle est nul. Cela implique une uniformité de la température potentielle sur toute la verticale, entraînant une absence d'échanges thermiques entre l'atmosphère et la surface terrestre. Dans ce cas, la particule d'air reste à l'endroit où elle a été déplacée adiabatiquement.

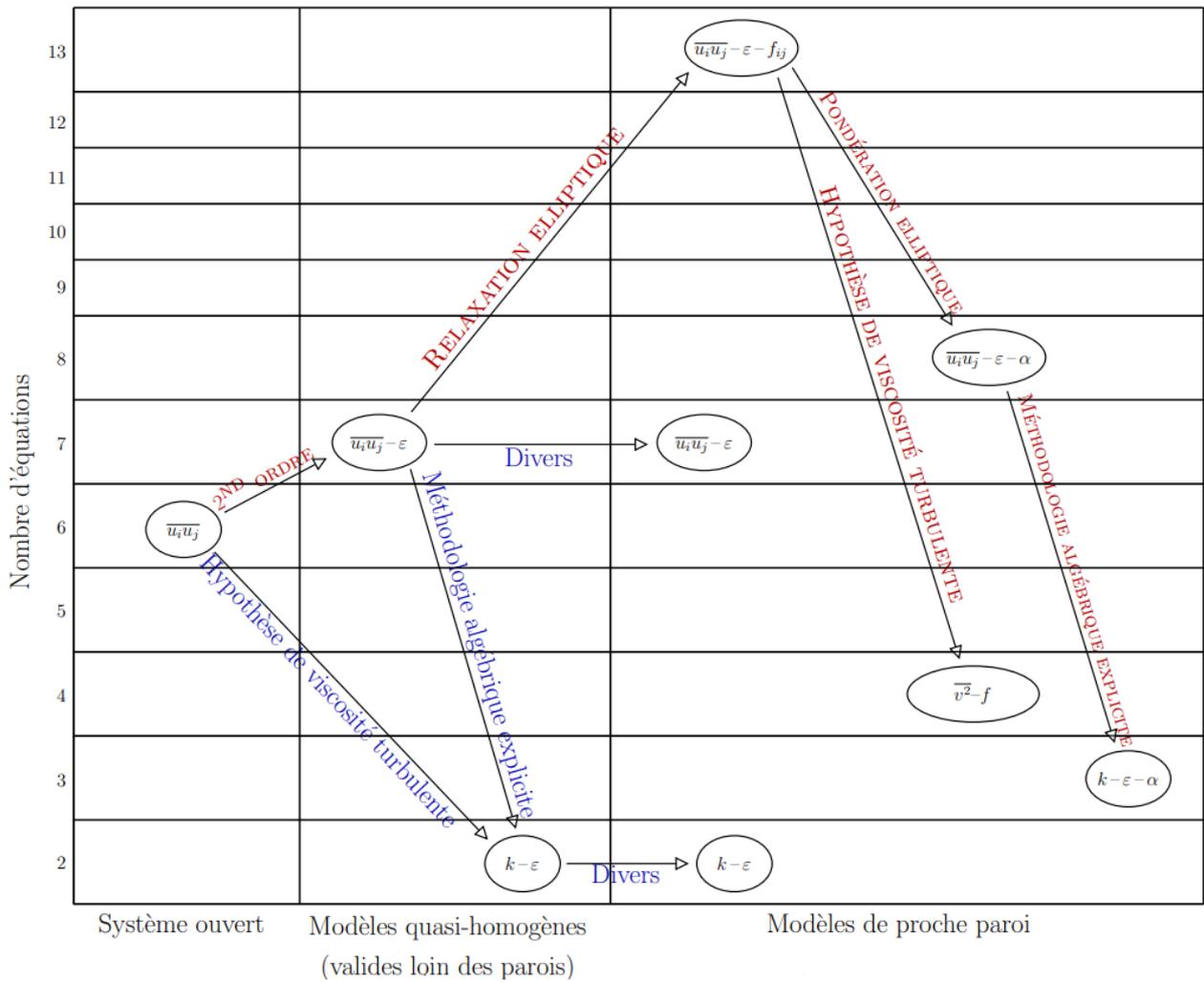


FIGURE 1.6 – Classification des modèles de turbulence en fonction de leur ordre, du nombre d'équations, et de leur applicabilité proche de la paroi [Tiré de Manceau (2011)]

3. L'atmosphère est jugée instable lorsque le gradient vertical de température potentielle est négatif. Dans ce scénario, les masses d'air chaudes, moins denses, se trouvent en dessous des masses d'air froides, ce qui conduit à des échanges thermiques de la surface terrestre vers l'atmosphère. Par conséquent, la parcelle d'air a tendance à s'éloigner de son état initial. Cette instabilité convective se manifeste principalement pendant la journée, lorsque les rayons lumineux réchauffent le sol.

1.4.1 Le cycle diurne

Le cycle diurne (Figure 1.7) découle du réchauffement et du refroidissement des surfaces. En l'absence d'irrégularités topographiques, les transferts verticaux sont plus prononcés. À un endroit donné et tout au long de la journée, la couche limite atmosphérique (CLA) peut être caractérisée par les profils verticaux de vitesse du vent, de température et d'humidité. Durant le cycle diurne, on distingue quatre niveaux de couche :

1. La couche de surface (CS) : C'est la partie de la CLA en contact avec la surface où se produisent les échanges entre la surface et l'atmosphère. Son épaisseur est généralement d'environ 10% de la hauteur de la CLA. Elle est présente en permanence, quelle que soit l'heure.
2. La couche d'entraînement (CE) pendant la journée ou la couche d'inversion (CI) la nuit : C'est une couche de transition entre la CLA est très stable. La hauteur de l'inversion z_i est définie au milieu de cette couche.
3. La couche convective mélangée (CC) : Elle se manifeste les jours d'été ensoleillés. Elle se forme environ une demi-heure après le lever du soleil, lorsque le sol se réchauffe. Sa hauteur maximale est atteinte en début d'après-midi (à une altitude de 1 à 2 km). Cette couche est caractérisée par une turbulence d'origine thermique, avec une atmosphère très instable. Elle se caractérise par des mouvements ascendants rapides (2-3 m/s) et des subsidences qui forment des cellules convectives.
4. La couche stable nocturne (ou couche limite stable, CLS) : Elle apparaît lorsque les surfaces se refroidissent. En raison de la stratification stable, la turbulence diminue, entraînant peu d'échanges verticaux. Bien qu'elle soit relativement mince (quelques centaines de mètres), estimer sa hauteur exacte est délicat. Cette couche est surmontée par la couche résiduelle (CR), qui est neutre et représente le résidu de la couche convective.

1.4.2 Méthodes pour déterminer la stabilité atmosphérique

Plusieurs paramètres permettent de définir la condition de stabilité :

1. Le paramètre de stabilité statique est une mesure quantitative de la stabilité ou de l'instabilité statique, basée sur les variations verticales de température dans l'atmosphère (Arya et al., 1999). Il est exprimé en termes de différence entre la température d'une parcelle d'air

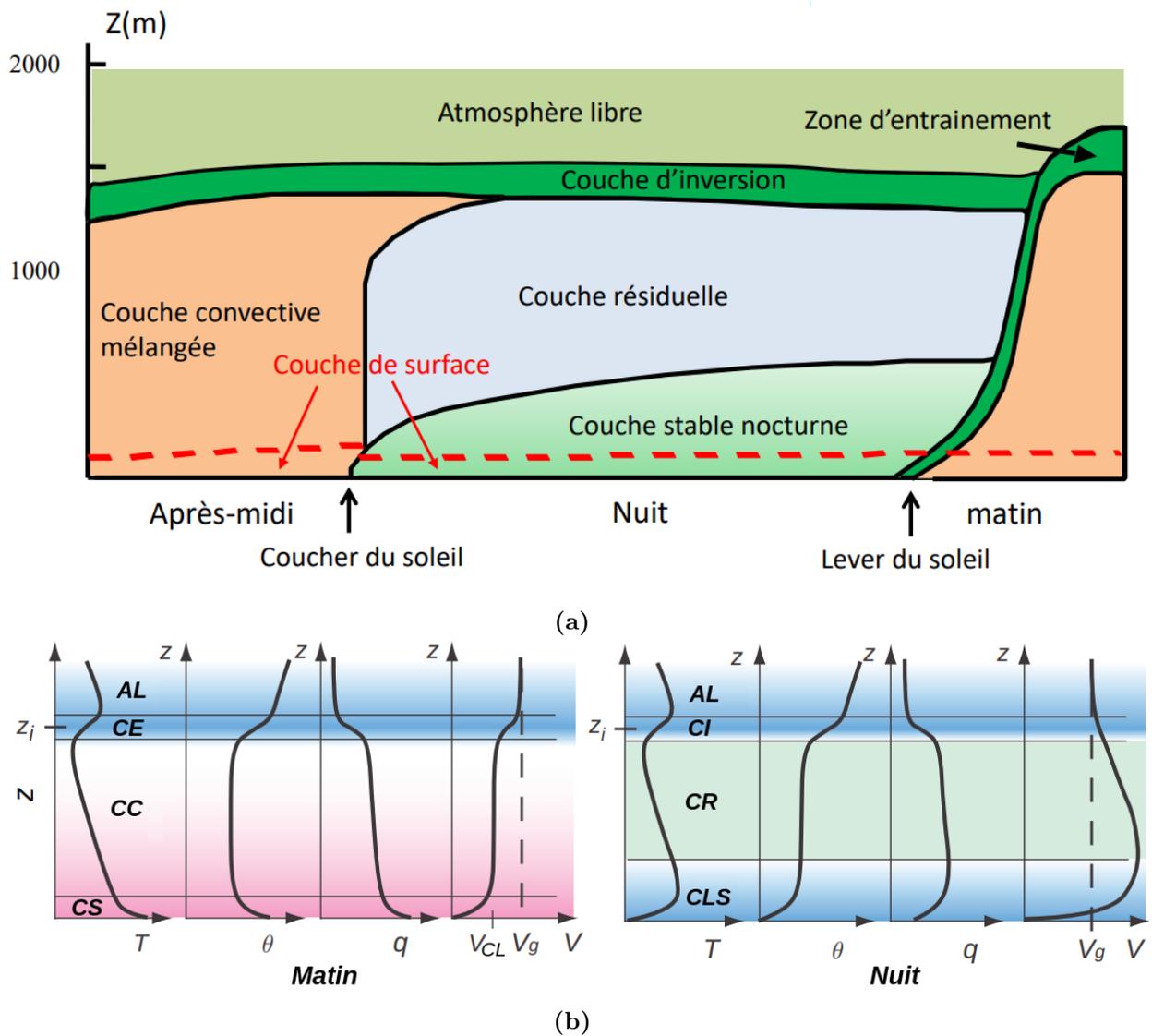


FIGURE 1.7 – (a) Structure verticale de la CLA au cours du cycle diurne [Adapté de Stull (1988)]; (b) Variation des profils verticaux typiques de la température (T), de la température potentielle (θ), de l'humidité spécifique (q) et de la vitesse du vent (V) dans la partie inférieure de la troposphère. AL, atmosphère libre; CE, zone d'entraînement; CC, couche convective; CS, couche de surface; CI, couche d'inversion; CR, couche résiduelle; CLS, couche limite stable; z_i , hauteur de la couche d'inversion, qui correspond au sommet de la couche limite (BL); z_i , hauteur de l'inversion de la couche limite (CL); V_g , vitesse du vent géostrophique [Adapté de Wallace et Hobbs (2006)]

en mouvement vertical) et la température de l'air environnant à une certaine altitude. Ce paramètre est défini par :

$$N = \sqrt{g\Theta^{-1} \frac{\partial \Theta}{\partial z}} \quad (1.27)$$

où N est la fréquence de Brunt-Vaisala ou fréquence de flottabilité.

2. La force de flottabilité F_b joue un rôle important dans la détermination de la stabilité atmosphérique. Elle est liée à la tendance verticale des particules d'air à se déplacer vers le haut ou vers le bas dans l'atmosphère, en fonction de leur densité par rapport à l'air environnant. La force de flottabilité est souvent exprimée en termes de différence de densité entre une parcelle d'air et son environnement. Supposons une parcelle d'air en mouvement vertical sur une distance Δz de sa position d'équilibre initiale, la force de flottabilité sur cette parcelle est donnée par :

$$F_b = -g\Theta \frac{\partial\Theta}{\partial z} \Delta z \quad (1.28)$$

Les critères de cette mesure pour caractériser la stratification sont les suivants :

- * L'atmosphère est stable si $\frac{\partial\Theta}{\partial z} > 0$ et $F_b < 0$.
- * L'atmosphère est neutre si $\frac{\partial\Theta}{\partial z} = 0$ et $F_b = 0$.
- * L'atmosphère est instable si $\frac{\partial\Theta}{\partial z} < 0$ et $F_b > 0$.

3. Nombre de Richardson de flux (bulk), noté Ri_f , est un nombre adimensionnel qui caractérise l'état de stratification de l'atmosphère et l'origine de la turbulence. C'est le rapport entre production ou destruction thermique G_k et production dynamique de la turbulence P_k . Mathématiquement, le nombre de Richardson de flux Ri_f est exprimé par :

$$Ri_f = \frac{g}{\Theta} \frac{\overline{W'\Theta'}}{\overline{U'W'} \left[\frac{\partial U}{\partial z} + \frac{\partial V}{\partial z} \right]} = -\frac{G_k}{P_k} \quad (1.29)$$

Les caractéristiques de la stratification ($P_k > 0$ en general), en se basant sur ce nombre, sont les suivants :

- * La CLA est stable si $\overline{W'\Theta'} < 0$; $B_k < 0$; $Ri_f > 0$.
- * La CLA est neutre si $\overline{W'\Theta'} = 0$; $P_k \neq 0$; $Ri_f = 0$.
- * La CLA est instable si $\overline{W'\Theta'} > 0$; $B_k > 0$; $Ri_f < 0$.

Il existe également le nombre de Richardson gradient, noté Ri_g , qui se concentre davantage sur les variations locales des gradients de vitesse et de température dans l'écoulement. Il évalue l'équilibre entre la stabilisation thermique et la perturbation due au cisaillement vertical du vent en termes de gradients locaux de vitesse et de température. Il est défini par :

$$Ri_g = \frac{g}{\Theta} \frac{\frac{\partial\Theta}{\partial z}}{\left[\frac{\partial\vec{U}}{\partial z} \cdot \frac{\partial\vec{V}}{\partial z} \right]^2} \quad (1.30)$$

4. La longueur de Monin-Obukhov (L) est une autre grandeur permettant de caractériser la stabilité atmosphérique (Obukhov, 1971). Il s'agit d'une échelle de longueur utilisée pour caractériser les échanges de chaleur et de quantité de mouvement dans la couche limite atmosphérique. Elle est définie comme le rapport entre la vitesse de frottement du vent et le taux de refroidissement de l'air près de la surface. Elle est définie par :

$$L = \frac{u_*^2}{\kappa\beta\theta_*} \quad (1.31)$$

Où :

- L'échelle de température θ_* est donnée par :

$$\theta_* = \frac{-H_0}{\rho_0 C_p u_*}$$

où H_0 est le flux de chaleur sensible dans la couche de surface.

- u_* est la vitesse de frottement donnée par :

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_s}{\rho_0}} = \left(\overline{U'W'^2} + \overline{V'W'^2} \right)^{1/4}$$

avec τ_s le flux de quantité de mouvement dans la couche limite de surface ou la contrainte de cisaillement de surface.

- κ est la constante de von Kármán.
- β est le coefficient de flottabilité : $\beta = g/T_0$

5. L'indice de Monin-Obukhov est un nombre adimensionnel qui mesure l'importance relative des forces de flottabilité par rapport aux contraintes de cisaillement dans une couche stratifiée. Il est exprimé par :

$$\zeta = \frac{z}{L} \quad (1.32)$$

Les caractéristiques de la stratification selon L et ζ :

- * La CLA est stable si $\theta_* > 0$; $L > 0$; $\zeta > 0$.
- * La CLA est neutre si $\theta_* = 0$; $L \rightarrow \infty$; $\zeta \rightarrow 0$.
- * La CLA est instable si $\theta_* < 0$; $L < 0$; $\zeta < 0$.

6. Les classes de stabilité de Pasquill se composent de sept états atmosphériques, allant du plus instable au plus stable (Pasquill, 1961). Cette méthode discrète permet de déterminer la stabilité atmosphérique, qui joue un rôle dans les processus turbulents, en se basant sur les valeurs de la vitesse du vent, du rayonnement solaire et de la nébulosité (comme présenté dans le Tableau 1.1).

La relation entre la longueur de Monin-Obukhov et les classes de stabilité de Pasquill est montrée dans le tableau 1.2 ci-dessous :

La figure ci-dessous (Figure 1.8) montre la relation entre la longueur de Monin-Obukhov, les classes de stabilité de Pasquill et la longueur de rugosité dynamique :

7. La méthode Turner (Turner, 1964) est une méthode indirecte qui permet de déterminer les catégories de stabilité de Pasquill-Gifford à partir des données régulièrement recueillies par les stations du National Weather Service (NWS). La méthode estime les effets du rayonnement net sur la stabilité à partir de l'altitude solaire (fonction de l'heure du jour et de la période de l'année), de la couverture nuageuse totale et de la hauteur du plafond. Le tableau 1.3

TABLE 1.1 – Classes de stabilité de Pasquill. A : Très instable B : Instable C : Peu instable D : Neutre E : Peu stable F : Stable.

Vitesse du vent à 10m [m/s]	Jour			Nuit	
	Rayonnement solaire incident		Faible	Nébulosité	
	Fort	Modéré		Entre 4/8 et 7/8	< 3/8
2	A	A-B	B	-	-
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

TABLE 1.2 – Relation entre la longueur de Monin-Obukhov et les catégories de stabilité de Pasquill

$L(m)$	Stabilité	Classe	$1/L(m^{-1})$
$-100 \leq L < 0$	Instable	A - B	$L^{-1} \leq -0.01$
$-10^5 \leq L < -100$	Peu instable	C	$-0.01 < L^{-1} \leq -10^{-5}$
$ L > 105$	Neutre	D	$-10^{-5} < L^{-1} < 10^{-5}$
$10 < L \leq 105$	Modérément stable	E	$10^{-5} \leq L^{-1} < 0.1$
$0 < L \leq 10$	Très stable	F	$0.1 \leq L^{-1}$

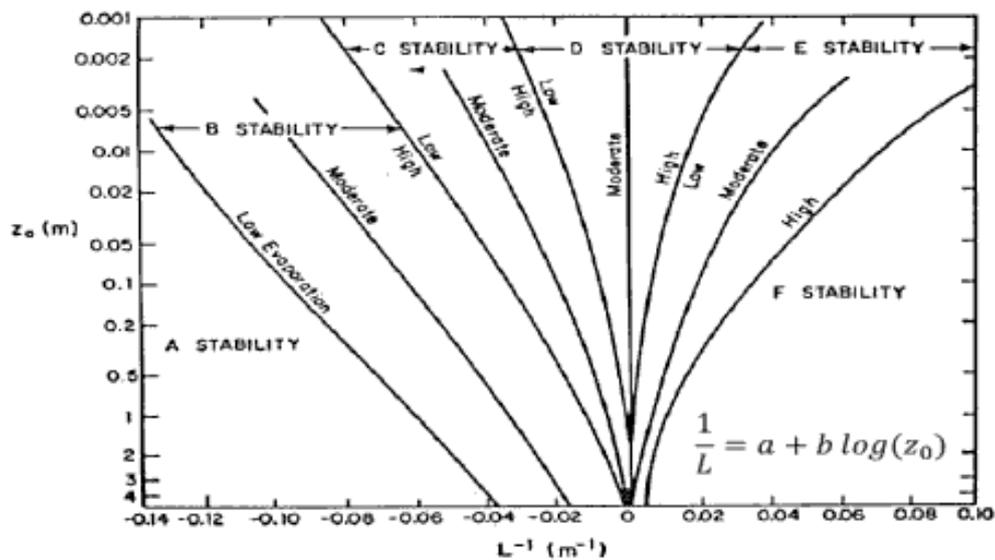


FIGURE 1.8 – Relation entre les catégories de stabilité de Pasquill, la longueur de Monin-Obukhov et la rugosité de la surface [Adapté de Golder (1972)]

présente la classe de stabilité (1=A, 2=B, 3=C, etc.) en fonction de la vitesse du vent et de l'indice de rayonnement net (IRN). Dans cette méthode, la vitesse du vent est exprimée en nœuds.

TABLE 1.3 – Classes de stabilité de Turner en fonction de la vitesse du vent et de l'IRN. 1-très instable; 2-instable; 3-peu instable; 4-neutre 5-stable; 6-peu stable; 7-très stable

Vitesse du vent au sol (m/s)	IRN						
	4	3	2	1	0	-1	-2
0-1	1	1	2	3	4	6	7
2-3	1	2	2	3	4	6	7
4-5	1	2	3	4	4	5	5
6	2	2	3	4	4	5	6
7	2	2	3	4	4	4	5
8-9	2	3	3	4	4	4	5
10	3	3	4	4	4	4	5
11	3	3	4	4	4	4	4
≥12	3	4	4	4	4	4	4

1.4.3 La théorie de similitude de Monin-Obukhov (MOST)

La Théorie de Similitude de Monin-Obukhov (MOST) énonce des lois universelles qui décrivent les profils de vent, de température et d'humidité au sein de la couche atmosphérique de surface, en fonction de la stratification thermique (Obukhov, 1971).

Cette théorie repose sur les hypothèses suivantes :

- * Les effets moléculaires sont négligeables à l'altitude z considérée.
- * L'atmosphère est considérée comme sèche.
- * Les gradients verticaux de vitesse et de température dépendent uniquement des échelles caractéristiques de la couche de surface, représentées par u^* et θ^* , ainsi que du paramètre de flottabilité $\beta = \frac{g}{T_0}$.
- * L'homogénéité horizontale est présumée.

En appliquant le théorème π de Vaschy-Buckingham et en introduisant le paramètre κ dans l'expression de L (equation 1.31), on peut dériver les gradients moyens de vitesse et de température en fonction de z , L , u^* et θ^* , comme suit :

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} = \left(\frac{u^*}{\kappa z} \right) \phi_m(\zeta) \quad (1.33)$$

$$\frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial t} = \left(\frac{u^*}{\kappa z} \right) \phi_h(\zeta) \quad (1.34)$$

Où ϕ_m et ϕ_h sont des fonctions universelles à déterminer expérimentalement. Les formulations proposées, selon la condition de stratification, sont de la forme suivante :

— Pour une stratification instable :

$$\begin{aligned}\phi_m(\zeta) &= (1 - \gamma_u \zeta)^{-1/4} \\ \phi_h(\zeta) &= \text{Pr}_t (1 - \gamma_\theta \zeta)^{-1/2}\end{aligned}$$

— Pour une stratification stable :

$$\begin{aligned}\phi_m(\zeta) &= 1 + \beta_u \zeta \\ \phi_h(\zeta) &= \text{Pr}_t (1 + \beta_\theta \zeta)\end{aligned}$$

Il existe dans la littérature de nombreux paramètres pour les valeurs des constantes impliquées dans les formulations ci-dessus (Businger et al., 1971 ; Dyer & Hicks, 1970 ; Hicks, 1976).

En intégrant les relations 1.33 et 1.34, respectivement, entre z et z_1 , on obtient :

$$\bar{U}(z) - \bar{U}(z_1) = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_1} \right) - \psi_m(\zeta) + \psi_m(\zeta_1) \right] \quad (1.35)$$

$$\bar{\Theta}(z) - \bar{\Theta}(z_1) = \frac{\text{Pr}_t \theta_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_1} \right) - \psi_h(\zeta) + \psi_h(\zeta_1) \right] \quad (1.36)$$

Les formulations des formes intégrées du profil dynamique ψ_m et thermique ψ_h , sont exprimées selon le régime de stratification atmosphérique :

— En régime instable ($\zeta < 0$) :

$$\psi_m(\zeta) = \ln \left(\frac{(1+x^2)(1+x)^2}{8} \right) - 2 \arctan(x) + \frac{\pi}{2} \quad (1.37)$$

$$\text{Avec } x = \frac{1}{\phi_m(\zeta)} = (1 - \gamma_u \zeta)^{1/4}$$

$$\psi_h(\zeta) = 2 \ln \left[\frac{(1+y)}{2} \right] \quad (1.38)$$

$$\text{Avec } y = \frac{\text{Pr}_t}{\phi_h(\zeta)} = (1 - \gamma_\theta \zeta)^{1/2}$$

— En régime stable ($\zeta > 0$) :

$$\psi_m(\zeta) = -\beta_u \zeta \quad (1.39)$$

$$\psi_h(\zeta) = -\beta_\theta \zeta \quad (1.40)$$

Par conséquent, on obtient les profils dynamiques et thermiques suivants :

$$\bar{U}(z) - \bar{U}(z_1) = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_1} \right) + \beta_u (\zeta - \zeta_1) \right] \quad (1.41)$$

$$\bar{\Theta}(z) - \bar{\Theta}(z_1) = \frac{Pr_t \theta_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_1} \right) + \beta_\theta (\zeta - \zeta_1) \right] \quad (1.42)$$

La théorie de similitude de Monin-Obukhov (MOST) assure une continuité entre les divers états atmosphériques. Ainsi, on observe que les profils neutres émergent des profils du régime stable précédent lorsque le paramètre de stabilité adimensionnel ζ tend vers zéro.

1.5 La dispersion atmosphérique : généralités

La dispersion atmosphérique implique la transformation d'un nuage de gaz à travers son transport et sa diffusion suite à son rejet dans l'atmosphère. La diffusion résulte en grande partie de la turbulence atmosphérique, tandis que le transport dépend de l'interaction entre la quantité de mouvement du gaz émis et l'écoulement atmosphérique local. La manière dont un rejet se disperse est essentiellement déterminée par les caractéristiques de la substance émise. On qualifie de rejets "lourds" les gaz ayant une densité supérieure à celle de l'air (comme le chlore, le xénon, l'hexafluorure de soufre, etc.), mais également les gaz plus légers que l'air émis à des températures assez faibles (gaz froids). À l'inverse, les nuages de gaz moins denses que l'air, très dilués, voire chauds (comme la fumée d'incendie), relèvent de la catégorie des gaz légers (comme l'hydrogène, le méthane, l'hélium).

La distinction entre les panaches de ces deux catégories de rejets découle de la capacité des agents impliqués à monter dans l'atmosphère, c'est-à-dire de leur propre panache. Les rejets denses subissent une plus grande influence de la gravité, ce qui les fait tendre à s'effondrer et à s'étaler par la suite. En revanche, les rejets légers sont davantage dominés par les effets de flottabilité.

Lorsque l'émission présente une faible quantité de mouvement ou est à la même densité et/ou température que l'air environnant, on parle de rejet "neutre". Les panaches associés à ce type de rejets évoluent selon la seule action de l'écoulement atmosphérique, sans le modifier notablement.

Selon que l'émission soit soudaine ou progressive, les rejets sont respectivement qualifiés d'instants, comme dans les situations explosives, ou de continus, principalement liés aux émissions industrielles et aux fuites durant le transport de gaz.

1.5.1 Interaction panaches atmosphère

L'évolution des panaches est influencée par les caractéristiques de leur émission (comme la hauteur de rejet, le diamètre de la source, le débit de fuite, ...) ainsi que, et surtout, par les conditions atmosphériques locales auxquelles ils sont soumis. Par conséquent, ils peuvent s'étirer et s'épaissir à des degrés divers avant de se dissiper, suivant une dynamique complexe et aléatoire. L'atmosphère

est le théâtre de nombreux processus physiques interdépendants. Bien que des hypothèses de découplage soient utilisées pour nous dégager de cette complexité de modélisation, elles permettent également de qualifier les rôles respectifs de ces mécanismes et de quantifier l'importance relative de leurs composantes dans la morphologie des panaches.

Les panaches évoluent au fur et à mesure de leur dispersion, dans une sorte de compétition entre l'émission et le champ de vent local. Pour les rejets à grande vitesse, c'est d'abord la quantité de mouvement du rejet qui domine, mais à mesure que l'on s'éloigne de la source d'émission, c'est la quantité de mouvement de l'air environnant qui prédomine.

1.5.1.1 Influence thermique

Une différence potentielle de température entre l'émission et l'environnement atmosphérique environnant entraîne une dilution plus ou moins prononcée du panache. Cela découle d'un processus de transfert de chaleur par convection qui se met en place en fonction de l'amplitude de ce gradient thermique. La diminution conséquente de la concentration dans cet état est indépendante de la direction du gradient, c'est-à-dire du sens du transfert d'énergie thermique.

1.5.1.2 Influence de la turbulence atmosphérique

À l'échelle atmosphérique, la diffusion due à la turbulence l'emporte sur la diffusion moléculaire [4]. Ce processus de mélange est assuré par les structures tourbillonnaires qui tendent à égaliser les zones de faible et de forte concentration dans le mélange émis et l'atmosphère environnante. Le mécanisme de diffusion turbulente opère différemment en fonction de la taille des structures tourbillonnaires présentes, par rapport à celle des éventuelles bouffées de gaz constituant le panache.

- ⊥ Si la taille des tourbillons dans l'air est inférieure aux dimensions de la bouffée, le panache se diffuse uniformément à travers eux, entraînant une expansion régulière de sa section.
- ⊥ Des tourbillons de taille supérieure aux dimensions de la bouffée ne contribuent pas à sa diffusion mais à son transport, la portant avec le mouvement global.
- ⊥ Dans le cas de tourbillons de taille de l'ordre de grandeur de la bouffée, celle-ci est fortement diffusée mais de manière non uniforme. Le panache oscille alors tout en s'élargissant.

Mylne (1992) présente également le modèle conceptuel de dispersion d'un panache : Le panache est influencé par des tourbillons turbulents de différentes échelles. Le modèle comprend trois régimes simultanés qui décrivent l'effet de ces tourbillons ayant une longueur caractéristique λ sur la longueur instantanée du panache σ_i :

- ⊥ Premier régime : $\sigma_i \ll \lambda$: Les tourbillons turbulents sont plus grands que le panache transversal instantané, près de la source. Le panache est principalement affecté par le vagabondage

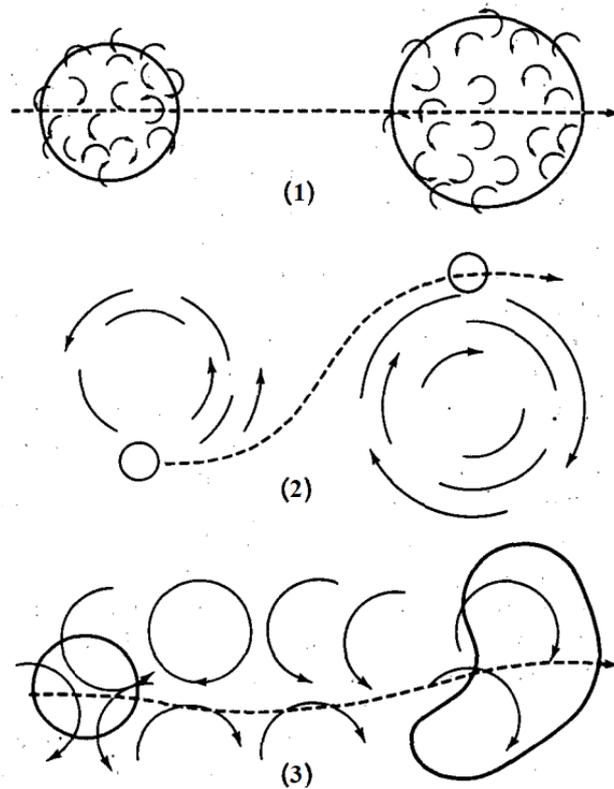


FIGURE 1.9 – Modèles de dispersion idéalisés du panache instantané. (1) Un grand nuage dans un champ uniforme de petits tourbillons. (2) Un petit nuage dans un champ uniforme de grands tourbillons. (3) Un nuage dans un champ de tourbillons de même taille que le nuage. [Tiré de Slade (1968)]

(ou méandres), induisant un effet d'intermittence*. La concentration intermittente est caractérisée par une fonction de densité exponentielle.

- ⊥ Deuxième régime : $\sigma_i \sim \lambda$: Le panache se déplace plus loin et se développe à une échelle comparable à celle des tourbillons turbulents. Des poches d'air pur sont générées dans le panache par les tourbillons. La variance de concentration est produite et maintenue dans le panache instantané.
- ⊥ Troisième régime : $\sigma_i \gg \lambda$: À des distances plus importantes, le panache est plus étendu que l'échelle des tourbillons, et le polluant est mélangé à l'intérieur du panache par les tourbillons. Les fluctuations de concentration ont des échelles plus petites, réduisant l'intermittence, et le panache instantané se rapproche du panache moyen. Dans ce cas, la concentration est mieux décrite par une fonction de densité gaussienne. En conditions stables, le deuxième régime est diminué et le panache passe directement au troisième régime.

*. Par intermittence du panache, on entend des fluctuations continues de concentrations non nulles pendant une période de temps prolongée (plusieurs minutes) et l'absence de concentrations pendant une autre période étendue, soit des fluctuations alternantes de concentrations non nulles pendant plusieurs minutes et de concentrations nulles pendant une autre période de plusieurs minutes.

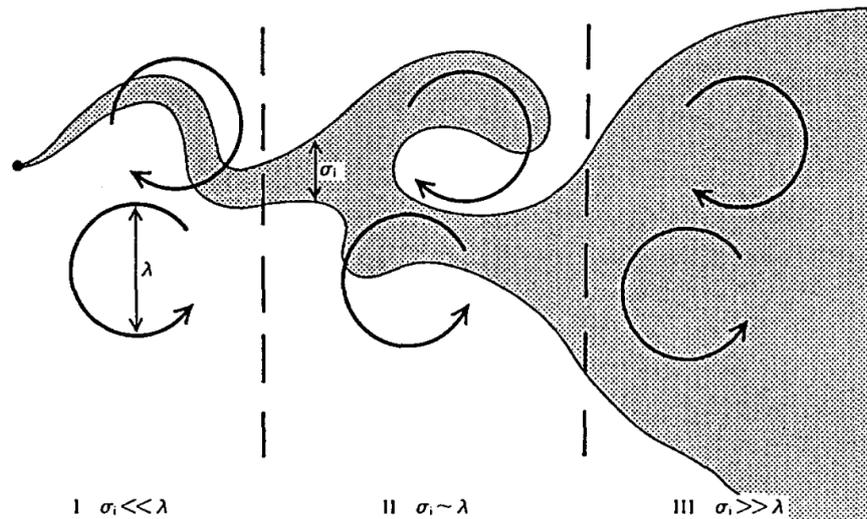


FIGURE 1.10 – Modèle conceptuel de dispersion du panache, démontrant les trois impacts distincts des tourbillons de taille caractéristique λ en corrélation avec la dimension relative de l'échelle de longueur instantanée du vent transversal du panache σ_i [Tiré de Mylne (1992)]

1.5.1.3 Influence de la stabilité atmosphérique

La stabilité atmosphérique locale au niveau du panache joue un rôle déterminant dans sa configuration verticale. Cette influence découle directement de l'impact de la stabilité sur le mouvement de l'air environnant.

Selon les conditions atmosphériques, différentes réactions sont observées dans le comportement des panaches :

- Lorsque l'atmosphère est instable, les fluctuations sont intensifiées, entraînant une expansion verticale irrégulière du panache. Il en résulte un flux thermique turbulent positif, une combinaison de turbulences d'origine dynamique et thermique, ainsi qu'une diffusion turbulente prononcée favorisant le mélange. Si la hauteur de l'émission est limitée, il se peut que le panache s'affaisse.
- En cas de stabilité atmosphérique, le panache présente une expansion verticale minimale, et les fluctuations verticales sont atténuées. Cela génère un flux thermique turbulent négatif, résultant de l'opposition entre la turbulence d'origine dynamique et thermique, conduisant à des mouvements verticaux réduits et à une capacité de mélange faible.
- Dans une atmosphère neutre, le panache s'étend de manière uniforme, sans amplification ni atténuation des fluctuations. Le flux thermique turbulent est nul, avec une turbulence d'origine dynamique comme facteur principal.

Les phénomènes d'inversion se manifestent par la présence de deux couches atmosphériques avec des stabilités différentes, l'une au-dessus de l'autre. Cette situation peut se produire pendant la nuit, où la couche près du sol est instable, ou en début de matinée, lorsque la couche plus élevée

est marquée par l'instabilité. La couche d'inversion, située à l'interface de ces couches, présente une résistance qui bloque les mouvements d'advection et les flux turbulents. En fonction de la position relative de la couche instable par rapport à la couche stable, on distingue :

- L'inversion défavorable (ou *fumigation*) : cette situation survient lorsque la couche stable surmonte la couche instable près du sol. Au-dessus de la couche d'inversion, la dispersion est limitée, bloquant les phénomènes d'ascendance.
- L'inversion favorable (ou *lofting*) : c'est l'inverse de la situation précédente. La majeure partie du panache est dispersée verticalement vers le haut, et la dispersion vers le sol est restreinte par la couche d'inversion. Cette configuration favorise les mouvements ascendants.

La figure 1.11 montre différents modèles de panaches en fonction des conditions de stabilité atmosphérique. L'évolution des panaches est intrinsèquement aléatoire, et d'autres configurations, difficiles à décrire, peuvent exister en plus de celles mentionnées ci-dessus. Un exemple frappant est celui d'un panache lourd près du sol dans une stratification atmosphérique instable.

1.6 Approches pour la modélisation de la dispersion atmosphérique

L'objectif central de la modélisation de la dispersion atmosphérique réside dans la compréhension de la manière dont la quantité de polluant émise évolue dans l'espace et dans le temps par rapport à l'air ambiant. Cette démarche cherche à répondre à des questions spécifiques telles que la détermination des limites d'explosivité pour les émissions de gaz inflammables ou l'impact de structures de protection sur le retard de dispersion d'un produit. Les modèles de dispersion atmosphérique, qu'ils soient simples ou complexes, sont conçus en fonction des objectifs visés et se distinguent par leur prise en compte ou non de différents processus physiques, ainsi que par les échelles spatiotemporelles qu'ils sont en mesure de représenter. En fin de compte, l'objectif majeur est de calculer les concentrations de polluants libérés dans l'atmosphère à partir de sources situées dans la couche limite atmosphérique.

Il existe plusieurs approches pour modéliser la dispersion atmosphérique, et le choix entre elles dépend de divers facteurs tels que l'application spécifique, l'échelle de l'étude, la complexité de l'environnement où se produit l'émission de polluants, les contraintes de temps de calcul, et bien d'autres.

En général, on peut distinguer trois approches principales : les modèles gaussiens, les modèles lagrangiens et les modèles eulériens basés sur la Dynamique des Fluides Numérique (CFD). Chacune de ces approches présente ses avantages et ses limites, et leur sélection dépend des besoins particuliers de chaque situation.

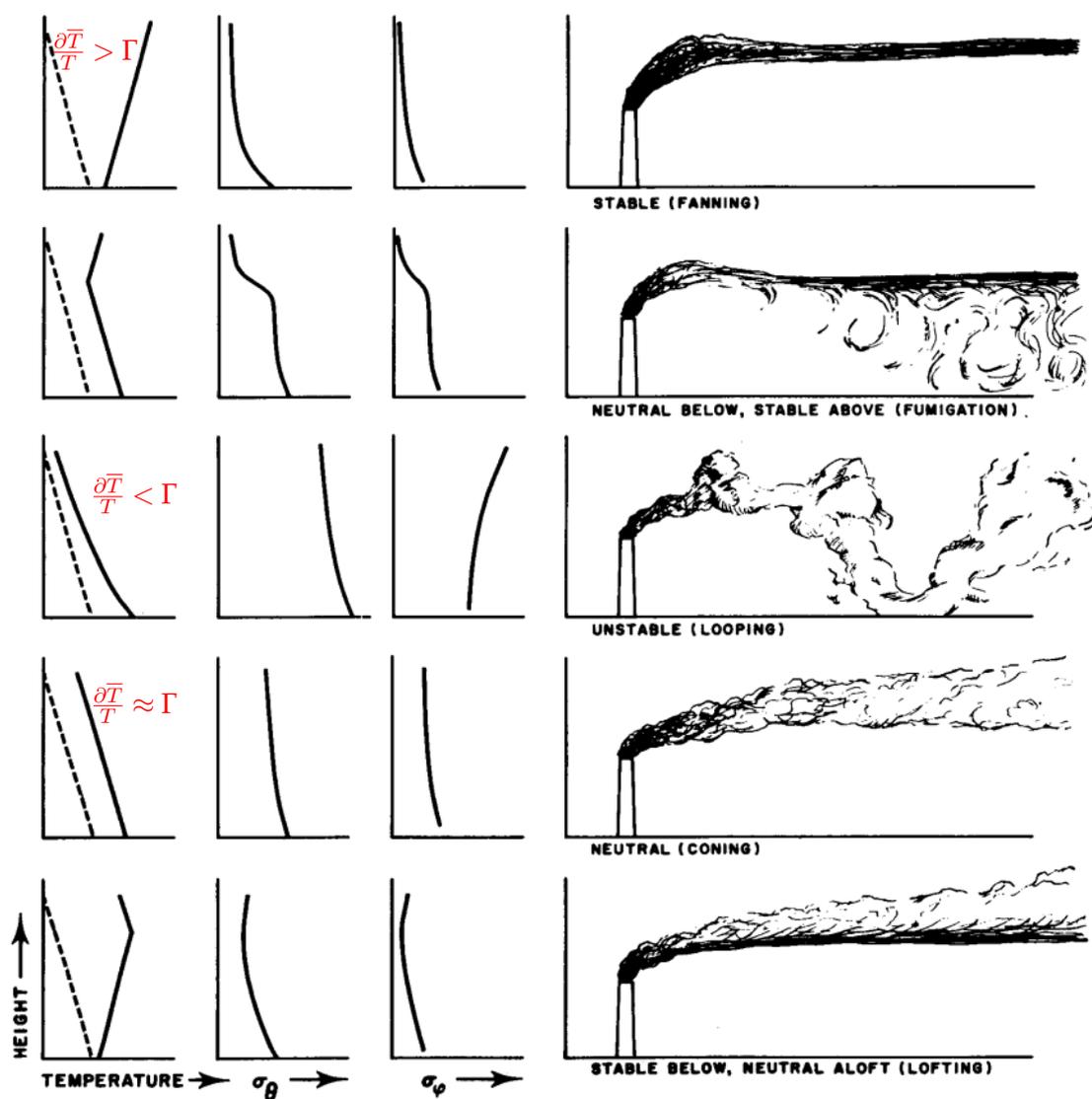


FIGURE 1.11 – Différents types de schémas de panache de fumée observés dans l'atmosphère. Les abscisses des colonnes représentent la température, les écart-types des directions des vents horizontaux et verticaux (σ_θ et σ_ϕ). Les courbes en pointillés dans la colonne de gauche montrent le gradient adiabatique Γ , et les lignes continues représentent les profils observés [Adapté de Slade (1968)]

1.6.1 Modèles gaussiens

Ces modèles fournissent une solution analytique à l'équation d'advection-diffusion, tout en incorporant des paramètres empiriques pour les grandeurs physiques. Ils permettent d'étudier la dilution d'un panache ou d'une bouffée, c'est-à-dire la diminution de la concentration à mesure que la distance par rapport à la source augmente. Les modèles gaussiens s'appliquent aux rejets neutres, également appelées rejets passifs, où l'évolution des panaches dépend uniquement du champ de vent local, supposé uniforme, qui les transporte. Dans ces situations, on suppose que les concentrations suivent une distribution gaussienne, et les calculs ne sont effectués que le long de l'axe du panache. Ce modèle néglige la diffusion moléculaire au profit de la diffusion turbulente, tout en tenant compte de la turbulence atmosphérique à travers les classes de stabilité. Il convient de noter que ces modèles sont appropriés uniquement pour des terrains plats et ne tiennent pas compte de la topographie, de la rugosité du sol et de la présence d'obstacles. Nous utiliserons ces modèles pour effectuer des comparaisons avec nos résultats numériques dans les prochains chapitres.

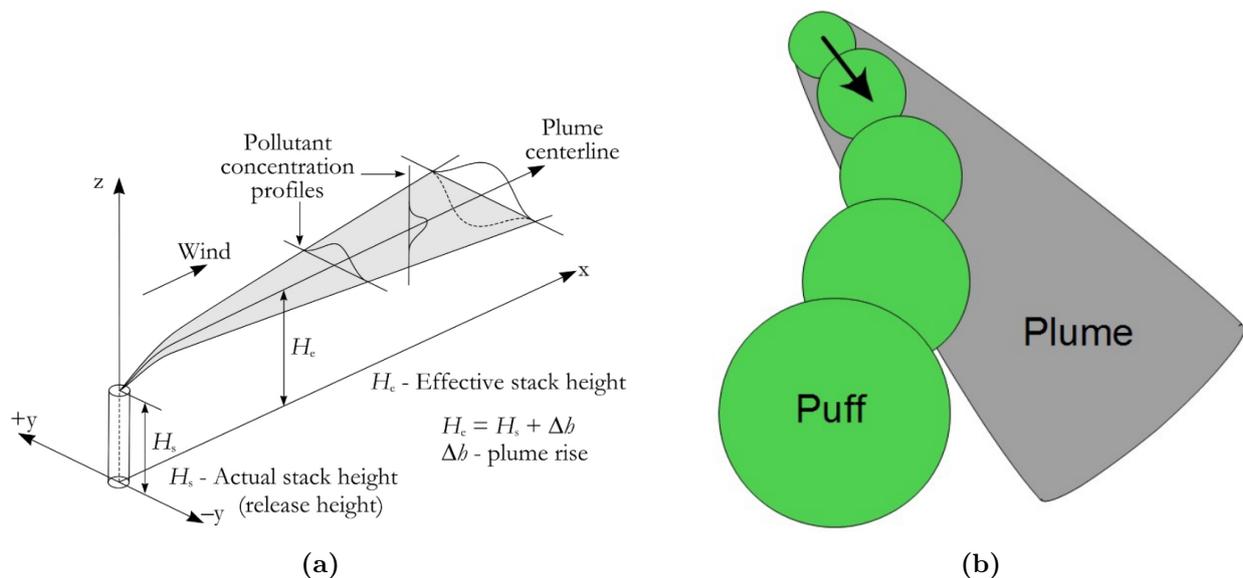


FIGURE 1.12 – Représentation schématique : (a) Modèle de panache (*plume*) gaussien (b) Modèle de bouffée (*puff*) estimant une dispersion gaussienne, en tenant compte des variations temporelles et spatiales du vent [Tiré de Leelosy et al. (2014)]

1.6.1.1 Modèle de panache gaussien (ou modèle gaussien rectiligne)

Il s'agit d'un rejet continu de polluant à partir d'une source ponctuelle située à (x_0, y_0, z_H) , qui est transporté par un vent moyen et diffusé par la turbulence. Le panache est défini par l'enveloppe conique qui contient le polluant (Figure 1.12a).

Pour simplifier le problème, certaines hypothèses sont considérées, telles que (i) le polluant ait la même masse volumique que l'air (scalaire passif), (ii) le domaine soit infini c'est à dire les coefficients de diffusion turbulente sont constants, (iii) le taux d'émission de polluant Q (Kg/s) soit constant dans le temps et (iv) le polluant soit transporté à vitesse constante dans la direction x par un écoulement homogène. La concentration du panache est donc une solution de l'équation :

$$\frac{\partial \bar{U} \bar{C}}{\partial x} = K_{cy} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + K_{cz} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} \quad (1.43)$$

$$\bar{C}(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi \bar{U} \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z - z_H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (1.44)$$

où σ_y et σ_z sont les coefficients de dispersion latéral et vertical, respectivement. La relation entre le coefficient de dispersion σ_i et le coefficient de diffusion turbulente K_{ci} s'écrit :

$$\sigma_i = \sqrt{2K_{ci}t} = \sqrt{2K_{ci} \frac{x}{\bar{U}}} \quad (1.45)$$

où x représente la distance depuis la source. Cette relation est seulement valable dans le champ lointain de la source, autrement dit lorsque la taille du panache couvre toute la gamme des tourbillons turbulents. Le coefficient de dispersion doit ainsi augmenter avec la distance de la source (ou le temps après rejet) et dépend de la turbulence (mélange) grâce à la stabilité atmosphérique.

Il existe plusieurs formulations pour déterminer les coefficients de dispersion. L'une des formulations établit une relation entre le coefficient de dispersion et l'écart type des fluctuations des vitesses latérale (σ_y) et verticale (σ_z) ou l'écart type de l'angle d'azimut (σ_Θ) et d'élévation (σ_e) des vecteurs du vent, en faisant intervenir l'échelle de temps lagrangien.

D'autres formulations sont basées sur les propriétés de la couche limite atmosphérique et la théorie de similitude et peuvent être utilisées lorsque des mesures détaillées sont effectuées ou en conjonction avec des modèles CFD qui résolvent les champs météorologiques. De nombreuses paramétrisations des coefficients de dispersion font référence aux classes de stabilité de Pasquill. La longueur de Monin-Obukhov ou le numéro de Richardson peuvent même être utilisés dans ces paramétrisations au lieu de classes de Pasquill afin d'obtenir une description continue de la stabilité atmosphérique.

Les paramétrisations de Pasquill-Grifford (Grifford, 1961) pour les écarts-types σ_y et σ_z , sont déduits à partir de mesures de dispersion moyennées sur 3 minutes, et sur un terrain plat avec une faible rugosité ($z_0 \approx 3$ cm) jusqu'à 800 m en aval de la source. Les écarts types sont présentés analytiquement par Green et al. (1980) comme suit :

$$\sigma_y(x) = \frac{k_1 x}{(1 + x/k_2)^{k_3}} \quad (1.46)$$

et

$$\sigma_z(x) = \frac{k_4 x}{(1 + x/k_2)^{k_5}} \quad (1.47)$$

Les constantes sont présentées dans le tableau 1.4 ci-dessous.

TABLE 1.4 – Valeurs des constantes dans les equations 1.46 et 1.47

	k_1	k_2	k_3	k_4	k_s
A	0,250	927	0,189	0,1020	-1,918
B	0,202	370	0,162	0,0962	-0,101
C	0,134	283	0,134	0,0722	0,102
D	0,0787	707	0,135	0,0465	0,465
E	0,0566	1070	0,137	0,0335	0,624
F	0,0370	1170	0,134	0,0220	0,700

Briggs (1973) a synthétisé diverses données expérimentales et a utilisé des concepts liés au comportement asymptotique des formules et à la théorie de Taylor, pour recommander en fin de compte des formulations pour σ_y et σ_z (valables pour $10^2 \text{ m} < x < 10^4 \text{ m}$).

TABLE 1.5 – Fonctions sigma de Briggs (1973) pour les conditions rurales et urbaines

Classe de stabilité de Pasquill	σ_y (m)	σ_z (m)
Conditions rurales		
A	$0,22x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,20x$
B	$0,16x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,12x$
C	$0,11x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,08x(1 + 0,0002x)^{-1/2}$
D	$0,08x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,06x(1 + 0,0015x)^{-1/2}$
E	$0,06x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,03x(1 + 0,0003x)^{-1}$
F	$0,04x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,016x(1 + 0,0001x)^{-1}$
Conditions urbaines		
A-B	$0,32x(1 + 0,0004x)^{-1/2}$	$0,24x(1 + 0,001x)^{-1/2}$
C	$0,22x(1 + 0,0004x)^{-1/2}$	$0,20x$
D	$0,16x(1 + 0,0004x)^{-1/2}$	$0,14x(1 + 0,0003x)^{-1/2}$
E-F	$0,11x(1 + 0,0004x)^{-1/2}$	$0,08x(1 + 0,0015x)^{-1/2}$

1.6.1.2 Principe de réflexion sur le sol et modèle multi-réflexions

Sous les mêmes hypothèses de base (conditions météorologiques stationnaires, panache sur une vaste surface plane et homogène, etc.), la concentration dans le panache peut être influencée par la réflexion sur le sol. Dans cette situation, la réflexion agit comme une source supplémentaire située à une hauteur de $z = -H$

Pour une réflexion totale au sol, la concentration est donnée à partir de l'équation d'advection-diffusion :

$$\bar{C}(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\bar{U}\sigma_y\sigma_z} \left[\exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \right] \left[\exp\left(\frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (1.48)$$

où H est défini comme la hauteur effective du panache, c'est-à-dire la hauteur au-dessus du sol à laquelle l'axe du panache devient horizontal.

Si une source virtuelle est placée à $H + z_i$, où z_i représente l'élévation de la couche d'inversion, la concentration dans le panache peut être influencée par la réflexion au sol et au sommet de la couche limite. Par conséquent, des réflexions multiples doivent être prises en compte si l'enveloppe du panache atteint le sol ($2\sigma_z > H$) et le sommet de la couche limite ($H + 2\sigma_z > z_i$).

1.6.1.3 Modèle de bouffée gaussien

Le modèle de panache à bouffée (*Gaussian Puff Model*) (Zannetti, 1990) permet de tenir compte de la variation des émissions et des champs météorologiques au fil du temps (Figure 1.12b). Les conditions météorologiques sont prises en considération au centre de la bouffée (x_c, y_c, z_c) et sont supposées constantes à l'intérieur de la bouffée. La vitesse du vent du polluant est égale à la vitesse du vent au point où la bouffée est positionnée.

Lorsque N bouffées sont émises à partir d'une source ponctuelle dans un intervalle de temps régulier Δt , chaque bouffée " i " correspond à une masse libérée $S_i = Q \times \Delta t$ (Kg). La concentration moyenne, qui représente la concentration du panache, est obtenue en sommant les contributions des N bouffées, comme suit :

$$\bar{C}(x, y, z) = \sum_{i=1}^N \frac{Q \times \Delta t}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x^i \sigma_y^i \sigma_z^i} \exp\left(-\frac{(x - x_c^i)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y - y_c^i)^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z - z_c^i)^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (1.49)$$

Où $x_c^i(t) = x_c + \bar{U} \times (t - t_i)$; $y_c^i(t) = y_c + \bar{V} \times (t - t_i)$; $z_c^i(t) = z_c + \bar{W} \times (t - t_i)$ avec $t_i = i\Delta t$, qui est le temps de déclenchement initial de la bouffée i ; $t - t_i$ représente le temps écoulé depuis l'émission de la bouffée, également appelé "âge" de la bouffée.

Les coefficients de dispersion à chaque nouvelle position (ou heure) sont déterminés pour les trois directions, c'est-à-dire $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, et sont calculés en utilisant les mêmes formulations que celles du modèle de panache. Il est essentiel d'avoir une connaissance des champs de vent et de température en trois dimensions dans la région pour déplacer correctement la bouffée et estimer les coefficients de dispersion.

1.6.2 Modèles Lagrangiens

Le formalisme Lagrangien, dans le contexte de la dispersion atmosphérique, revient à suivre le déplacement d'un nuage de gaz par rapport à son environnement atmosphérique. Pour ce faire, on utilise des particules fictives de taille mésoscopique, représentant des portions de fluide contenant la substance émise par une source particulière. À un instant donné, la concentration atmosphérique est obtenue en additionnant les contributions spatiales de ces particules à cet instant précis.

Les modèles lagrangiens offrent une efficacité computationnelle pour les simulations à courte portée, car leur coût ne dépend pas de la résolution de la grille de sortie. Cependant, pour les simulations à longue portée, la nécessité de calculer de nombreuses trajectoires augmente considérablement les coûts de calcul (Leelossy et al., 2014). De plus, il est important de noter que ce modèle peut avoir des limitations lorsqu'il s'agit de représenter précisément des phénomènes turbulents complexes, tels que la turbulence atmosphérique à grande échelle. Dans de tels cas, les modèles imbriqués combinent l'approche lagrangienne près de la source avec une interpolation vers une grille eulérienne à une distance spécifique pour capturer les phénomènes turbulents à plus grande échelle.

Dans ce modèle, on trace les trajectoires individuelles des "particules fluides" qui portent une masse constante de polluant gazeux ou qui représentent des "particules solides" au sein d'un écoulement turbulent. Les fluctuations de la concentration dans un volume de fluide donné résultent de la dispersion de ces particules dans l'écoulement. Pour déterminer la concentration de polluants dans un volume de fluide particulier, il est nécessaire de "comptabiliser" les particules présentes sur une période de temps 't', ce qui requiert la connaissance de la position de chaque particule à tout moment.

Le modèle dynamique de la phase fluide est régi par les équations de Navier-Stokes (NS) moyennées et un modèle de turbulence pour la modélisation du tenseur de Reynolds. La trajectoire d'une particule est calculée en résolvant son équation dynamique sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{U}_p(t) \\ m_p \frac{d\vec{U}_p}{dt} = \vec{F}(t) \\ m_p = \rho_p v_p \end{cases} \quad (1.50)$$

Ici, $x(t)$ représente la position de la particule, qui dépend de sa position initiale $x(t_0)$, $U_p(x, t)$ est la vitesse de la particule, m_p est la masse de la particule, ρ_p est la masse volumique de la particule et v_p est le volume de la particule (généralement le volume d'une particule solide sphérique dans un écoulement non-uniforme).

$F(t)$ représente la somme des forces exercées par l'écoulement porteur sur chaque particule, par hypothèse sphérique et indéformable. Elle est obtenue à partir des équations de Navier-Stokes (NS) pour une sphère en chute libre dans un fluide au repos (ou le bilan des forces) :

$$\vec{F}(t) = \vec{F}_{adv} + \vec{F}_{Bas} + \vec{F}_{Buo} + \vec{F}_{Drag} \quad (1.51)$$

En explicitant chaque terme, on obtient :

$$\vec{F}_{adv} = \rho v_p \left[\frac{d\vec{U}_s}{dt} + \frac{1}{2} \frac{d(\vec{U}_s - \vec{U}_p)}{dt} \right] \quad (1.52)$$

Ici, U_s est la vitesse du fluide vue par la particule. La première partie de ce terme représente la force gradient de pression à la surface de la particule. La deuxième partie est la force dite de "masse ajoutée", qui traduit le déplacement d'une parcelle d'air virtuelle en raison de l'accélération de la particule solide par rapport à la phase fluide.

$$\vec{F}_{Bas} = \frac{3}{2} d_p^2 \sqrt{\rho \pi \mu} \int_0^t \frac{1}{1-\tau} \left(\frac{d\vec{U}_s}{dt} - \frac{d\vec{U}_p}{dt} \right) d\tau \quad (1.53)$$

Ici, d_p est le diamètre de la particule et τ mesure l'inertie de la particule, qui correspond à son temps de relaxation, c'est-à-dire le temps nécessaire pour s'ajuster à la vitesse du fluide après perturbation. Le grand terme est appelé le terme d'histoire ou de Basset, résultant d'une instabilité de l'écoulement près de la particule.

$$\vec{F}_{Buo} = v_p (\rho - \rho_p) \vec{g} \quad (1.54)$$

Ici, cela représente le terme de flottabilité, qui comprend le poids et la poussée d'Archimède.

$$\vec{F}_{Drag} = -\frac{1}{2} \rho C_D S (\vec{U}_p - \vec{U}_s) |\vec{U}_p - \vec{U}_s| \quad (1.55)$$

Ici, cela représente la force de traînée, C_D est le coefficient de traînée, estimé via une corrélation empirique, en fonction du nombre de Reynolds particulaire Re_p et S_p est la surface de la particule.

$$\begin{cases} C_D = \frac{24}{Re_p} f(Re_p) \\ Re_p = \frac{|\vec{U}_p - \vec{U}_s| d_p}{\nu} \\ S_p = \frac{\pi d_p^2}{4} \end{cases} \quad (1.56)$$

Pour simplifier le problème, on peut faire l'hypothèse de particules lourdes ($\rho_p \gg \rho$) dont le diamètre est du même ordre de grandeur que l'échelle de longueur de Kolmogorov. Dans ce cas, les forces de masse ajoutée, de Basset ainsi que de gradient de pression peuvent être négligées.

La vitesse du fluide vue par la particule peut être déterminée en utilisant l'équation de Langevin. Cette équation est couramment utilisée pour modéliser le mouvement brownien de particules immergées dans un fluide. Elle est formulée de la manière suivante :

$$\frac{dU_s(t)}{dt} = \underbrace{-\gamma U_s(t)}_{\text{Terme déterministe}} + \underbrace{\xi(t)}_{\text{Terme stochastique}} \quad (1.57)$$

Le terme déterministe est constitué du coefficient de frottement (γ), qui représente l'interaction

de la particule avec le fluide. Le terme stochastique représente l'effet des collisions aléatoires de la particule avec les molécules du fluide. Ce terme est souvent modélisé comme un bruit blanc gaussien avec une moyenne nulle et une certaine variance, et est responsable du mouvement brownien de la particule (Leelossy et al., 2014).

1.6.3 Modèles eulériens tri-dimensionnels (3D)

Les modèles eulériens consistent en la résolution des écoulements par des méthodes numériques. Cette approche est la moins contraignante en ce qui concerne la prise en compte des processus physiques, permettant ainsi la simulation de la dispersion sur une large gamme d'échelles spatio-temporelles, même dans des configurations géométriques complexes. Il s'agit en fait de deux types de simulations : les simulations des grandes échelles (LES) ou les simulations numériques moyennes de Reynolds (RANS). L'étude de ces processus s'effectue dans un domaine fixe, avec un maillage discret. La concentration du polluant est déterminée en résolvant l'équation de transport-diffusion. Cependant, cette option nécessite la collecte de nombreuses données en entrée et un temps de calcul important selon les cas. La précision des calculs dépend fortement du maillage, des méthodes numériques et des modèles de turbulence utilisés.

La modélisation par la résolution statistique RANS de l'équation d'advection-diffusion fait l'objet d'études dans cette thèse. Si l'on considère un polluant, noté e , avec une concentration, C_e , sachant que $C_e = \frac{\rho_e}{\rho}$, l'équation instantanée d'advection-diffusion se formule comme suit :

$$\frac{\partial C_e}{\partial t} + U_j \frac{\partial C_e}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{me} \frac{\partial C_e}{\partial x_j} \right) + S_{ce} + R_{ce} \quad (1.58)$$

avec D_{me} qui représente la diffusivité moléculaire issue de la loi de Fick, S_{ce} est le terme source (positif pour un rejet, négatif pour un prélèvement) et R_{ce} le terme de production ou destruction de l'espèce chimique e par réaction chimique.

En supposant un polluant passif, sa dispersion résulte uniquement de l'action du fluide porteur (l'air). Par conséquent, nous ne prenons pas en compte les réactions chimiques qui pourraient se produire ($R_{ce} = 0$), et nous négligeons la diffusivité moléculaire ($D_{me} = 0$). L'équation moyennée de la conservation de la quantité scalaire de concentration, basée sur l'équation 1.58, s'exprime donc comme suit :

$$\frac{\partial \bar{C}_e}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{C}_e}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{me} \frac{\partial \bar{C}_e}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{C}_e \bar{U}_j + \bar{S}_{ce} \quad (1.59)$$

où $\bar{C}_e \bar{U}_j$ représente le flux turbulent de concentration du polluant e dans la direction j .

1.7 Conclusions

Ce chapitre débute en explorant la structure de la couche limite atmosphérique CLA, une région de l'atmosphère proche de la surface terrestre qui est essentielle pour la dispersion des polluants. Il examine également les caractéristiques spécifiques du milieu urbain, où la topographie et les bâtiments influencent la circulation de l'air. Les équations fondamentales de la CLA sont présentées, offrant un cadre mathématique pour comprendre les phénomènes atmosphériques. La description statistique de la turbulence atmosphérique est abordée à travers des concepts tels que les fonctions d'autocorrélation, les échelles de turbulence et le spectre d'énergie. Enfin, les principaux modèles de simulation numérique de la turbulence, tels que DNS, RANS et LES, sont introduits, ainsi que les modèles de turbulence associés aux simulations RANS de premier et de deuxième ordre. La stabilité atmosphérique est également discutée, y compris le cycle diurne et les méthodes pour évaluer la stabilité de l'atmosphère, en utilisant la théorie de similitude de Monin-Obukhov comme guide.

Le deuxième volet du chapitre se penche sur l'influence de la turbulence et de la stabilité atmosphérique sur la dispersion d'un polluant dans l'atmosphère. Il explore différentes approches pour déterminer la concentration d'un polluant, notamment les approches gaussiennes, lagrangiennes et eulériennes. Ces méthodes fournissent des outils pour prédire comment les polluants se dispersent dans l'air en fonction des conditions atmosphériques et des caractéristiques du polluant lui-même. Ce chapitre jette ainsi les bases nécessaires à la compréhension des processus de dispersion atmosphérique, ce qui est essentiel pour évaluer les risques environnementaux et sanitaires liés à la pollution atmosphérique.

Chapitre 2

Méthodologie CFD pour la simulation de la dispersion atmosphérique

Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, nous présentons la méthodologie utilisée dans Code_Saturne pour mener les simulations. Nous abordons les équations résolues, les modèles de turbulence adoptés et leurs paramétrisations, ainsi que les profils dynamiques utilisés. Une attention particulière est accordée aux modèles anisotropes qui seront mis en œuvre. De plus, nous présentons les différents critères utilisés pour évaluer les modèles testés.

Ensuite, des tests préliminaires ont été effectués sur un domaine bi-dimensionnel dans le but de vérifier si ce modèle était capable de maintenir les profils météorologiques imposés en entrée du domaine jusqu'aux zones d'intérêt, dans l'espace et dans le temps. Nous avons choisi de travailler sur des cas classifiés en conditions neutres, stables et instables, en utilisant le modèle $k - \varepsilon$ calibré ainsi que le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ avec ses versions standard et calibrée.

Les premiers résultats ont montré que le modèle est incapable de conserver les profils dynamiques injectés à l'entrée, peu importe le modèle de turbulence appliqué. Des erreurs significatives ont été détectées entre les profils injectés à l'entrée du domaine et les profils calculés en sortie de domaine, notamment pour les cas de stratification stable. Des pics de turbulence ainsi que des écarts importants au niveau du sol ou dans toute la zone homogène loin de la paroi ont été fréquemment observés.

2.1 Présentation du code CFD

2.1.1 Présentation du Code_Saturne

Code_Saturne (EDF R&D) est un code informatique parallélisé et vectorisé utilisé pour résoudre les équations de Navier-Stokes (NS) dans le cadre d'un algorithme stationnaire ou instationnaire (<https://www.code-saturne.org/cms/web/documentation/v6>). Il est conçu pour traiter des fluides incompressibles ou faiblement dilatables, isothermes ou non, en prenant en compte les scalaires passifs. Le code intègre plusieurs modèles de turbulence, notamment le modèle $k - \varepsilon$ standard (Launder & Spalding, 1974), le modèle de Spalart-Allmaras (Spalart & Allmaras, 1992), le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ *SSG* (Speziale et al., 1991), le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ *LRR* (Launder et al., 1975), les modèles bas-Reynolds à pondération elliptique, $k - \varepsilon - \overline{\nu^2}/k$ (Billard & Laurence, 2012) et $R_{ij} - \varepsilon$ *EB-RSM* (Manceau & Hanjalić, 2002), etc. , ainsi que différents modèles de LES tel que le modèle sous-maille du type Smagorinsky (Smagorinsky, 1963).

Le code permet également la modélisation du transport d'espèces ou de scalaires en utilisant l'équation de transport, ainsi que des modèles algébriques et leurs variantes à pondération elliptique. La discrétisation spatiale repose sur des volumes finis colocalisés appliqués à des maillages non structurés. Les cellules peuvent être polyédriques de forme quelconque, et toutes les variables (vitesse, pression, température, etc.) sont calculées au centre des cellules.

Code_Saturne a été utilisé à la fois pour des applications industrielles et des activités de recherche dans divers domaines liés à la production d'énergie, tels que l'énergie nucléaire, la thermohydraulique, la combustion de gaz et de charbon, les turbomachines, le réchauffement, la ventilation et la climatisation, etc. Les détails de la méthode numérique sont décrits en profondeur dans l'article de Archambeau et al., 2004.

2.1.2 Le module atmosphérique du Code_Saturne

Le module atmosphérique de Code_Saturne est utilisé pour modéliser la couche limite atmosphérique en prenant la température potentielle (Θ) comme variable thermodynamique. Cela est réalisé en résolvant l'équation de conservation de Θ conjointement avec les équations de masse, de quantité de mouvement et de quantité scalaire. La variation de la masse volumique de l'air en fonction des variations de pression et de la température potentielle est calculée verticalement. Il est également possible d'utiliser des profils analytiques déduits de la théorie de similitude de Monin-Obukhov pour définir les conditions aux limites.

Le module atmosphérique de Code_Saturne a été utilisé dans plusieurs études portant sur la dispersion atmosphérique. Par exemple, Demael et Carissimo (2008) ont comparé les performances de la simulation CFD avec des modèles de panache gaussien en utilisant des données expérimentales provenant du champ de dispersion *Prairie Grass* (Barad, 1958). Milliez et Carissimo (2007, 2008) ont étudié les écoulements turbulents et la dispersion des polluants dans des conditions de stabilité atmosphérique stable et neutre pour l'expérience *MUST* (Biltoft, 2001). Dans leur étude, Chahine

et al. (2015) ont utilisé le module atmosphérique pour modéliser la formation et la dispersion d'un panache dans des conditions atmosphériques réelles lors d'une opération de refroidissement dans une tour. Wei (2016) ont effectué des mesures expérimentales sur le site hétérogène SIRTa afin de valider et améliorer les simulations CFD de la turbulence et de la dispersion dans des conditions stables. M. Bahlali et al. (2019) et M. L. Bahlali (2018) a évalué les performances d'un modèle lagrangien stochastique pour la dispersion dans un environnement urbain (MUST), en le comparant à une approche eulérienne, dans des conditions météorologiques neutres et stables. Enfin, Gao et al. (2018) ont réalisé une simulation RANS instationnaire à haute résolution pour étudier le vent, les effets thermiques et la dispersion de polluants dans un quartier de Toulouse, etc. Les étapes à suivre pour modéliser la dispersion atmosphérique dans Code_Saturne sont présentées de façon générale dans la figure 2.1.

2.2 Description du modèle Code_Saturne pour l'écoulement et la dispersion

2.2.1 Équations principales

Dans cette étude, le module atmosphérique du code est utilisé en conjonction avec une approche RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes) pour résoudre la forme moyenne des équations pour l'écoulement turbulent et les scalaires. Les équations de conservation de la masse (continuité), de la quantité de mouvement, de la température potentielle et de la concentration des espèces sont les suivantes :

— *Équation de continuité (avec l'approximation anélastique) :*

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

— *Conservation de la quantité de mouvement :*

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \nu \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{(\bar{\rho} - \rho_{ref})}{\bar{\rho}} g \delta_{i3} - \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{U'_i U'_j} \quad (2.2)$$

— *Conservation de la température potentielle :*

$$\frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial x_j} = \frac{1}{\bar{\rho} C_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\Theta' U'_j} + \bar{S}_{\Theta} \quad (2.3)$$

— *Conservation de la concentration (équation d'advection-diffusion pour un scalaire) :*

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{C' U'_j} + \bar{S}_C + \bar{R}_C \quad (2.4)$$

où

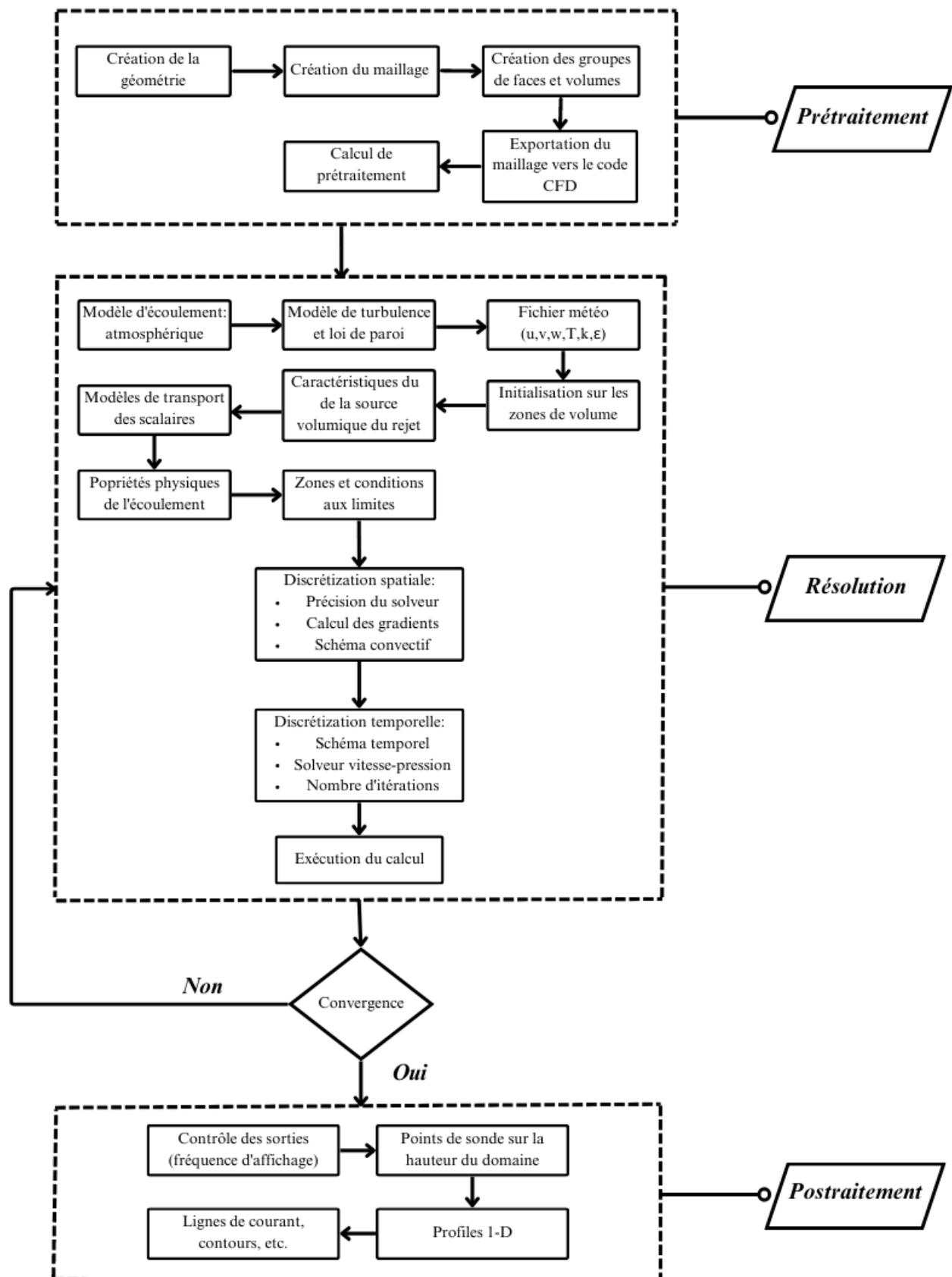


FIGURE 2.1 – Organigramme montrant les différentes étapes de la simulation de l'écoulement atmosphérique et de la dispersion d'un traceur dans Code_Saturne

- ρ est la densité de l'air,
- U est le vecteur de vitesse,
- P est la pression,
- Θ est la température potentielle,
- ρ_{ref} est la densité de référence de l'état hydrostatique,
- g est le vecteur d'accélération gravitationnelle,
- C_p est la chaleur spécifique à pression constante,
- λ est la conductivité thermique effective,
- D est le coefficient de diffusion moléculaire pour l'espèce,
- S_Θ est un terme source thermique,
- S_C est un terme source de l'espèce,
- R_C est le terme de production/destruction de l'espèce par réaction chimique.

Le tenseur de Reynolds $\overline{U'_i U'_j}$, le flux turbulent thermique $\overline{\Theta' U'_j}$ et le flux turbulent de concentration $\overline{C' U'_j}$ sont modélisés à l'aide de modèles de fermeture de la turbulence.

Pour résoudre les équations ci-dessus, les hypothèses suivantes sont prises en compte :

- L'hypothèse de l'anélasticité est adoptée. La dérivée temporelle $\left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial t}\right)$ est donc négligée devant les autres termes de l'équation de continuité. Cette hypothèse permet de supprimer les ondes acoustiques tout en maintenant l'hypothèse de compressibilité (Pielke, 1984).
- A petites échelles ($L \simeq 100\text{Km}$), les forces d'inertie sont plus importantes que les forces de Coriolis. Le terme de Coriolis est donc négligé dans l'équation de la quantité de mouvement, considérant que le nombre de Rossby $\left(Ro = \frac{\bar{U}}{fL}\right)$ est toujours supérieur à 1.
- Dans l'équation de la température potentielle, le terme de la source lié à la chaleur latente ($\overline{S_\Theta} = 0$) est négligé. Par ailleurs, nous supposons un traceur passif, de sorte que le polluant est dispersé uniquement par l'action du fluide porteur (air). Par conséquent, les réactions chimiques sont ignorées ($\overline{R_c} = 0$) et la diffusivité moléculaire est négligée ($D = 0$).
- Pour les écoulements atmosphériques, deux hypothèses sont généralement considérées : l'hypothèse d'incompressibilité et l'hypothèse de Boussinesq :
 - * Hypothèse d'incompressibilité : En général, pour les faibles vitesses de Mach et les mouvements dont les échelles verticales sont de l'ordre de la centaine de mètres, on peut supposer approximativement que la densité est constante (Figure 2.2), sauf lorsque les effets thermiques sont importants. Cette relation peut être exprimée comme suit : $\frac{\Delta \rho}{\bar{\rho}} \approx \frac{\Delta \Theta}{\Theta}$.
 - * Hypothèse de Boussinesq : Les effets de compressibilité étant relativement faibles dans les basses couches de l'atmosphère, l'hypothèse de Boussinesq est valable. Ainsi, les équations de Navier-Stokes peuvent être décrites en supposant que $\bar{\rho} = \rho_{ref}$ pour tous les termes, à l'exception du terme gravitationnel.

* Dans toutes nos simulations réalisées avec le Code_Saturne, bien que nos domaines ne dépassent pas une altitude de 100 mètres, nous ne prenons pas en compte l'approximation de Boussinesq et le terme de flottabilité dans l'équation de la quantité de mouvement est exprimé dans sa forme par défaut : $(\bar{\rho} - \rho_{ref})\vec{g}$.

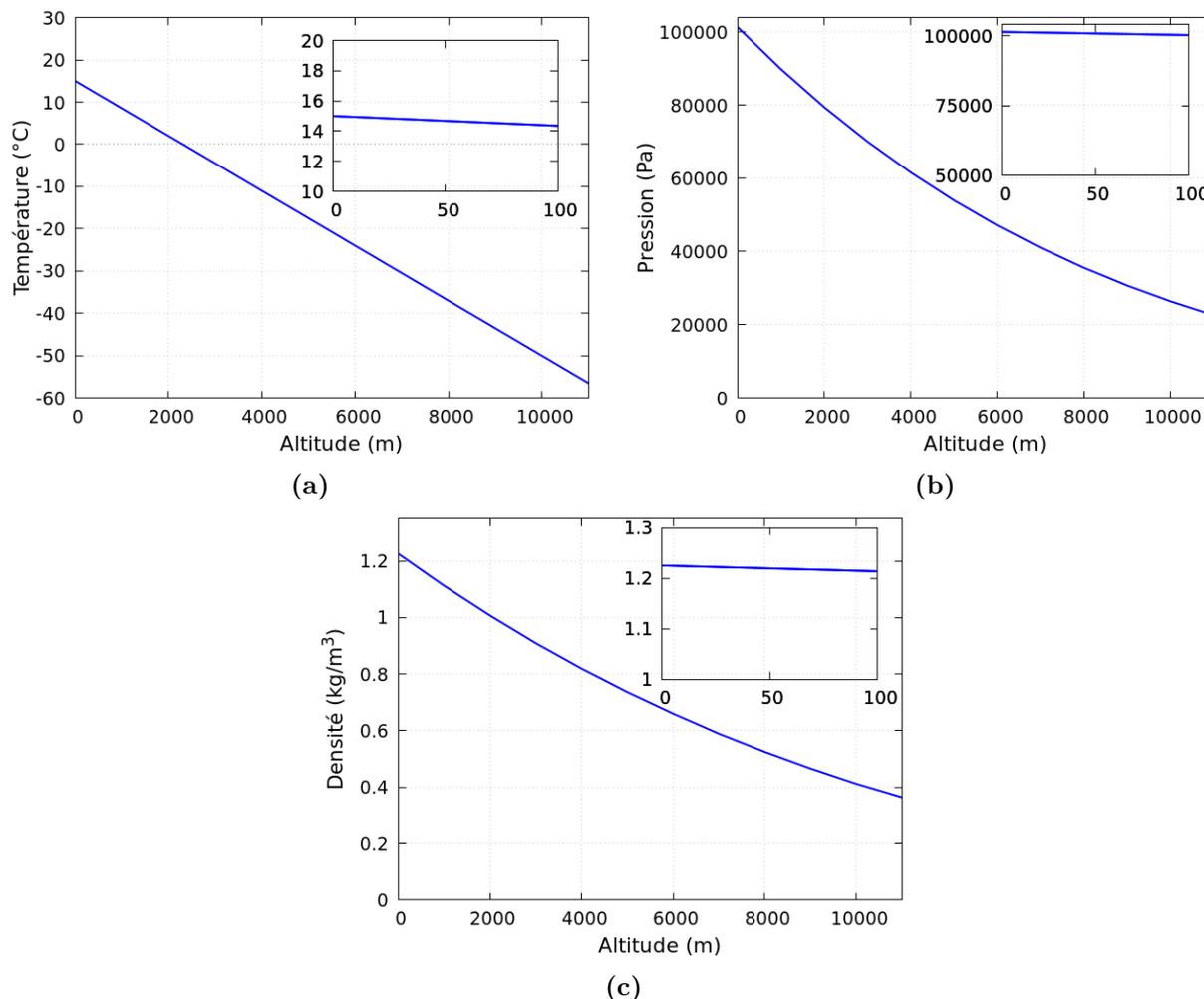


FIGURE 2.2 – Variation verticale de différentes variables dans l'atmosphère standard

2.2.2 Modèles de turbulence

2.2.2.1 Le choix des modèles

Le traitement des flux turbulents présents dans les équations de quantité de mouvement, d'énergie et d'advection-diffusion est effectué à l'aide de modèles de fermeture, qui ont été l'objet de nombreuses recherches et formulations.

Conformément aux exigences de cette étude, nous utiliserons principalement un modèle isotrope et un modèle anisotrope pour la modélisation dynamique de l'écoulement. Le modèle isotrope est celui de $k - \varepsilon$ adapté à l'origine dans le module atmosphérique de Code_Saturne. Quant au modèle anisotrope, le choix s'est initialement porté sur un modèle de type RSM (Reynolds Stress Model) de second ordre. Comme nous l'avons déjà mentionné, plusieurs modèles de turbulence RANS sont

proposés dans le Code_Saturne, dont les modèles RSM suivants : $R_{ij} - \varepsilon$ *SSG*, $R_{ij} - \varepsilon$ *LRR* et $R_{ij} - \varepsilon$ *EB-RSM*. Ce dernier est un modèle à faible taux de Reynolds qui résout la sous-couche visqueuse. La rugosité ne peut donc pas être imposée pour les conditions aux limites de la paroi avec le modèle *EB-RSM*. Cela soulève deux questions importantes. La première concerne le cadre opérationnel et la seconde la validation. Comme le modèle *EB-RSM* nécessite un maillage très fin près de la paroi (de l'ordre de $y^+ = 1$), son utilisation est limitée en mode opérationnel, où le temps de calcul doit être réduit pour l'évaluation du risque (délai de 24 heures). En ce qui concerne la validation, la couche atmosphérique est similaire à un régime dynamiquement rugueux, de sorte qu'il serait difficile de récupérer des campagnes de mesures dans des champs dynamiquement lisses où les irrégularités du sol sont "noyées" dans la sous-couche visqueuse.

Compte tenu de ce qui précède, une meilleure option consisterait à utiliser un modèle RSM de second ordre au lieu de la version à pondération elliptique. La version *SSG* est plus complète que la version *LRR* et a été calibrée sur un plus grand nombre de cas industriels. Par rapport à la version *LRR*, cette dernière semble mieux adaptée aux écoulements atmosphériques et a donné de meilleurs résultats en ce qui concerne le maintien du profil d'entrée sur l'ensemble du domaine, en particulier dans des conditions stables. Nous avons donc choisi de travailler avec ce modèle en particulier, pour la validation des tests et les campagnes expérimentales.

Par conséquent, nous utilisons principalement les modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ *LRR* pour la modélisation du flux dynamique. Quant à la modélisation des flux turbulents scalaires, nous utilisons l'équation de transport ainsi que les modèles algébriques correspondants (Figure 2.3).

2.2.2.2 Le modèle $k - \varepsilon$

Ce modèle est basé sur l'hypothèse de Boussinesq qui suppose un alignement entre le tenseur de taux de déformation moyen et la partie anisotrope du tenseur de Reynolds (Launder & Spalding, 1974). Sa formulation est donnée par la relation suivante :

$$\overline{U'_i U'_j} = \nu_t \left(\frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (2.5)$$

Les équations de transport pour l'énergie cinétique (k) et le taux de dissipation (ε) sont écrites comme suit :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{U}_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mathcal{P}_t + \mathcal{G} - \varepsilon \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \overline{U}_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} (\mathcal{P}_t + C_{\varepsilon 3} \mathcal{G}) - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.7)$$

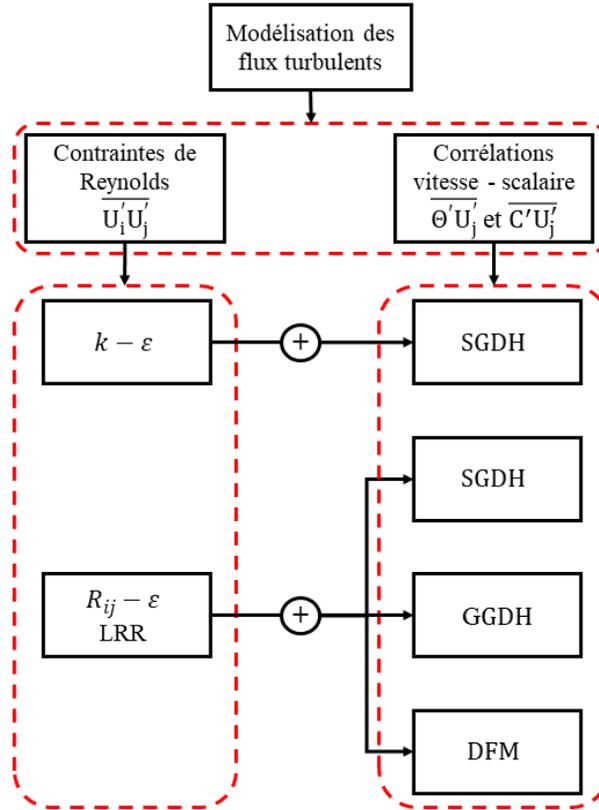


FIGURE 2.3 – Choix des modèles de turbulence pour les études actuelles

$$\mathcal{P}_t = -\overline{U'_i U'_j} \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i}, \quad \mathcal{G} = -g_i \beta \frac{\nu_t}{\sigma_t \bar{\rho}} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j}, \quad \nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.8)$$

Comme mentionné précédemment, l'hypothèse d'incompressibilité est valable dans l'atmosphère adiabatique, où la densité de l'air diminue légèrement avec l'altitude. Par conséquent, le terme de production de turbulence par flottabilité peut être approximé par la formule suivante :

$$\mathcal{G} = -g_i \beta \frac{\nu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{\Theta}}{\partial x_j} \quad (2.9)$$

où \mathcal{P}_t et \mathcal{G} sont respectivement le taux de production mécanique et de flottabilité de k , ν_t est la viscosité cinématique turbulente, $\beta \sim \frac{1}{\Theta}$ est le coefficient de dilatation thermique, σ_k , σ_ϵ et σ_t sont les nombres de Prandtl turbulents. $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, $C_{\epsilon 3}$ et C_μ sont des constantes empiriques. La constante $C_{\epsilon 3}$ est fixée à zéro pour une stratification instable et à 1 pour une stratification stable.

Il est connu que les constantes du modèle standard peuvent ne pas être adaptées pour reproduire la turbulence de l'écoulement atmosphérique, car elles ont été initialement calibrées pour des écoulements industriels (Sadek et al., 2013). Par conséquent, un nouveau modèle avec un ensemble de constantes calibrées, proposé par Duynkerke (1988), est utilisé dans nos calculs et comparé au modèle avec la paramétrisation standard. Les constantes du modèle sont données dans le Tableau

2.1. Nous désignons par [LA83] le modèle standard $k-\varepsilon$ de Launder et Spalding (1974), tandis que par [DU88], le modèle calibré de Duynkerke (1988).

TABLE 2.1 – Constantes du modèle $k-\varepsilon$

	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε	C_μ
$k-\varepsilon$ [LA83]	1,44	1,92	1,0	1,3	0,09
$k-\varepsilon$ [DU88]	1,44	1,92	1,0	2,38	0,033

En fait, le gradient vertical de la température potentielle $\partial\bar{\Theta}/\partial z$ est négatif ($\mathcal{G} \geq 0$) dans des conditions atmosphériques instables, ce qui signifie que la stratification thermique a un effet de production de turbulence. En revanche, dans des conditions stables, $\partial\bar{\Theta}/\partial z$ est positif ($\mathcal{G} \leq 0$), ce qui indique que la stratification thermique a un effet de destruction de la turbulence.

2.2.2.3 Le modèle $R_{ij}-\varepsilon$ **LRR**

Ce modèle de second-ordre résout six équations de transport pour les tenseurs de Reynolds ($R_{ij} = \overline{U'_i U'_j}$) et une équation pour le taux de dissipation ε (Launder et al., 1975). Cette dernière est très similaire à celle du modèle $k-\varepsilon$, seules la viscosité turbulente et les termes de gravité changent (Launder et al., 1975). Pour chaque composante R_{ij} , l'équation de transport suivante est résolue :

$$\frac{\partial \overline{U'_i U'_j}}{\partial t} + C_{ij} = \mathcal{P}_{ij} + \mathcal{G}_{ij} + \Phi_{ij} + D_{ij}^v + D_{ij}^t - \varepsilon_{ij} \quad (2.10)$$

où :

- C_{ij} est le terme de convection.
- \mathcal{P}_{ij} est le terme de production par cisaillement moyen.
- \mathcal{G}_{ij} est le terme de production/destruction par les effets thermiques.
- Φ_{ij} est le terme de pression-déformation.
- D_{ij}^v est le terme de diffusion moléculaire.
- D_{ij}^t est le terme de diffusion turbulente.
- ε_{ij} est le terme de dissipation.

Ci-dessous, nous présentons la modélisation des différents termes inconnus dans l'équation de transport des tensions de Reynolds. Nous notons que les termes \mathcal{P}_{ij} , C_{ij} et D_{ij}^v sont connus avec exactitude, tandis que les termes \mathcal{G}_{ij} , ε_{ij} , $D_{T,ij}$ et Φ_{ij} ne sont pas fermés et nécessitent donc d'être modélisés. Les expressions des termes C_{ij} , \mathcal{P}_{ij} et D_{ij}^v sont respectivement les suivantes :

$$C_{ij} = \overline{U_k} \frac{\partial \overline{U'_i U'_j}}{\partial x_k} \quad (2.11)$$

$$\mathcal{P}_{ij} = - \left[\overline{U'_i U'_k} \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_k} + \overline{U'_j U'_k} \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_k} \right] \quad (2.12)$$

$$D_{ij}^v = \nu \frac{\partial^2 \overline{U'_i U'_j}}{\partial x_k^2} \quad (2.13)$$

Le terme \mathcal{G}_{ij} est modélisé en utilisant une fermeture thermique similaire à celle du modèle $k - \varepsilon$. Il est modélisé comme suit :

$$\mathcal{G}_{ij} = \left[G_{ij} - C_3 \left(G_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} G_{kk} \right) \right] \quad (2.14)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{G}_{ij} = -\frac{3}{2} \frac{C_\mu}{\sigma_t} \frac{k}{\varepsilon} (r_i g_j + r_j g_i) \\ k = \frac{1}{2} \overline{U'_l U'_l} \\ r_i = \overline{U'_i U'_k} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_k} \end{array} \right.$$

k représente l'énergie cinétique turbulente (trace du tenseur de Reynolds), g_i est la composante de gravité dans la $i^{\text{ème}}$ direction, σ_t est le nombre de Prandtl turbulent et C_μ , C_3 sont des constantes définies dans le tableau 2.2.

Notons que sous l'hypothèse de Boussinesq, c'est-à-dire lorsque ρ varie uniquement dans le terme de flottabilité de l'équation de la quantité de mouvement de façon linéaire par rapport à Θ , la corrélation de \mathcal{G}_{ij} ci-dessus devient : $G_{ij} = -\beta \left(g_i \overline{U'_j \Theta'} + g_j \overline{U'_i \Theta'} \right)$

Φ_{ij} est le terme de corrélations pression-déformation. Selon Chou (1945), le terme de redistribution est la somme d'un terme "lent" noté $\phi_{ij,1}$ qui est un terme d'interaction de la turbulence sur elle-même et indépendant de la vitesse moyenne et d'un terme "rapide" noté $\phi_{ij,2}$, qui dépend du gradient de vitesse moyenne et réagit instantanément à ses variations. Il est modélisé comme suit :

$$\Phi_{ij} = \phi_{ij,1} + \phi_{ij,2} + \phi_{ij,w} \quad (2.15)$$

La forme linéaire et réduite du terme "lent" a été proposée par Rotta (1951). Ce terme est exprimé en fonction du tenseur d'anisotropie $b_{ij} = \frac{\overline{U'_i U'_j}}{2k} - \frac{1}{3} \delta_{ij}$, qui joue le rôle de ramener la turbulence, initialement anisotrope, vers un état isotrope tout en redistribuant l'énergie entre ses composantes. Ce terme est modélisé de la manière suivante :

$$\phi_{ij,1} = -C_1 \frac{\varepsilon}{k} \left(\overline{U'_i U'_j} - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \right) \quad (2.16)$$

Le terme "rapide" de la production isotrope, noté $\phi_{ij,2}$, est donné par :

$$\phi_{ij,2} = -C_2 \left(\mathcal{P}_{ij} - \frac{2}{3} \mathcal{P} \delta_{ij} \right) \quad (2.17)$$

avec,

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2} \mathcal{P}_{kk} \quad (2.18)$$

où \mathcal{P} est le terme de production de cisaillement, calculé à partir demi-trace du tenseur défini par l'équation de la production.

$\phi_{ij,w}$ est appelé "terme d'écho de paroi", il est donné par :

$$\begin{aligned} \phi_{ij,w} = & C_1' \frac{\varepsilon}{k} \left[\overline{U_k' U_m'} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \overline{U_k' U_i'} n_k n_j - \frac{3}{2} \overline{U_k' U_j'} n_k n_i \right] f \left(\frac{l}{z} \right) \\ & + C_2' \left[\phi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \phi_{ki,2} n_k n_j - \frac{3}{2} \phi_{kj,2} n_k n_i \right] f \left(\frac{l}{z} \right) \end{aligned} \quad (2.19)$$

où f est une fonction d'amortissement construite de manière à être égale à 1 au niveau du mur et à tendre vers 0 à mesure que l'on s'éloigne des parois. La variable z représente la distance par rapport à la paroi.

La longueur l représente $\frac{k^{3/2}}{\varepsilon}$, caractéristique de la turbulence. Nous prenons :

$$f \left(\frac{l}{z} \right) = \min \left(1, C_\mu^{0,75} \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon \kappa z} \right) \quad (2.20)$$

où κ est la constante de von-Kármán ($\approx 0,42$). Nous remarquons qu'en divisant $C_\mu^{0,75}$ par κ , nous obtenons la valeur de la constante C_L mentionnée dans le tableau 2.2.

Le terme de diffusion turbulente D_{ij}^t est exprimé de la manière suivante à l'aide du modèle à gradient généralisé, également connu sous le nom de modèle de Darly-Harlow (Daly & Harlow, 1970) :

$$D_{ij}^t = C_S \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{k}{\varepsilon} \overline{U_k' U_m'} \frac{\partial \overline{U_i' U_j'}}{\partial x_m} \right) \quad (2.21)$$

Ce terme représente la divergence des corrélations triples de vitesse. Ici, le coefficient C_S est égal à 0,18.

Dans la littérature, différentes formulations du terme de diffusion turbulente D_{ij}^t ont été proposées, notamment celles utilisées dans les codes CFD Fluent et OpenFoam (Lien & Leschziner, 1994) (voir aussi Sadek (2013)). Cependant, pour les besoins de ce travail, nous utiliserons la formulation actuelle de Daly et Harlow (1970) sans chercher à ajuster la constante C_S .

Le terme de dissipation ε_{ij} représente la dissipation des contraintes de Reynolds par la viscosité.

Il est modélisé en utilisant sa demi-trace, c'est-à-dire le taux de dissipation d'énergie cinétique turbulente ε . Pour cette quantité, on résout une équation de transport similaire à celle utilisée dans le modèle k - ε . Le tenseur de dissipation est ainsi exprimé sous une forme isotrope :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3}\delta_{ij}\varepsilon \quad (2.22)$$

Nous résolvons une équation de convection/diffusion pour la dissipation ε . Ainsi, nous cherchons à résoudre l'équation suivante :

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \overline{U_i} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + d_\varepsilon + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} (\mathcal{P} + \mathcal{G}_\varepsilon) - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.23)$$

où d_ε est le terme de diffusion turbulente, qui est donné par :

$$d_\varepsilon = C_\varepsilon \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{k}{\varepsilon} \overline{U'_k U'_m} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_m} \right) \quad (2.24)$$

où \mathcal{G}_ε est le terme de production des effets de gravité pour la variable ε . Il est donné par :

$$\mathcal{G}_\varepsilon = \max \left(0, \frac{1}{2} \mathcal{G}_{kk} \right) \quad (2.25)$$

De même que pour le modèle k - ε , la plupart des constantes empiriques standard du modèle R_{ij} - ε ont été calibrées pour reproduire les niveaux de turbulence atmosphérique des expériences sur le terrain. La méthodologie pour fixer les valeurs des constantes est présentée par Sadek et al. (2013), qui s'appuie également sur les travaux de Duynkerke (1988), Panofsky et Dutton (1984) et Rodi (1993). Le nouveau modèle calibré R_{ij} - ε est donc utilisé dans cette étude, en plus de la forme standard. Les coefficients du modèle R_{ij} - ε pour les versions standard [LA75] et calibrée [SA13] sont présentés dans le Tableau 2.2.

TABLE 2.2 – Constantes du modèle R_{ij} - ε LRR

	σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_1	C_2	C'_1	C'_2	C_L	C_μ
R_{ij} - ε [LA75]	0,82	1,0	1,44	1,92	1,8	0,6	0,5	0,3	0,39	0,09
R_{ij} - ε [SA13]	1,0	2,01	1,44	1,92	1,8	0,6	0,94	0,03	0,19	0,033

2.2.2.4 Modèles pour les flux turbulents scalaires

En moyennisant les équations de transport pour la température et la concentration, nous obtenons le flux turbulent de chaleur et le flux turbulent de concentration. Ces termes doivent maintenant être modélisés soit par une équation de transport, soit par des modèles algébriques (GGDH et SGDH). Les deux derniers termes sont obtenus à partir de l'équation de transport initiale en supposant que

la turbulence est en équilibre, de telle sorte que : $P_k + G_k = \varepsilon$ et $P_{ss} = \varepsilon_{ss}$, où $P_k = \frac{1}{2}P_{jj}$ correspond à la moitié de la trace du tenseur de production, tandis que $G_k = \frac{1}{2}G_{jj}$ fait référence à la moitié de la trace du tenseur de production résultant des forces volumétriques. De plus, P_{ss} représente le terme de production de la variance $\overline{S'^2}$ de la grandeur scalaire S , et ε_{ss} désigne la dissipation de la variance de la même grandeur scalaire. Dans ce qui suit, nous désignons par \bar{S} la forme moyenne du scalaire, qu'il s'agisse de la température Θ ou de la concentration C , et par S' la quantité fluctuante équivalente (S' peut être Θ' ou C'). L'équation de transport du flux scalaire s'écrit :

— Modèle de Flux Différentiel (DFM) :

Cette approche est la plus adaptée pour représenter les mécanismes physiques conduisant aux flux turbulents (Dehoux, 2012a ; Lecocq et al., 2008 ; Lecocq, 2008). L'équation de transport pour le flux scalaire est écrite comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{D\overline{U'_j S'}}{Dt} = & \underbrace{-\overline{U'_i S'} \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i}}_{P_{js}^U} - \underbrace{\overline{U'_i U'_j} \frac{\partial \bar{S}}{\partial x_i}}_{P_{js}^S} - \underbrace{\beta g_j \overline{S'^2}}_{G_{js}} - \underbrace{\frac{\overline{P'}}{\rho} \frac{\partial \overline{S'}}{\rho x_j}}_{\phi_{js}} - \underbrace{(D + \nu) \frac{\partial \overline{S'}}{\partial x_i} \frac{\partial \overline{U'_j}}{\partial x_i}}_{\varepsilon_{js}} \\ & + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\overline{S' U'_i U'_j} \right)}_{D_{js}^t} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial \overline{S'}}{\partial x_i} \overline{U'_j} + \nu \overline{S'} \frac{\partial \overline{U'_j}}{\partial x_i} \right)}_{D_{js}^\nu} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\overline{S' p'}}{\rho} \delta_{ij} \right)}_{D_{js}^p} \end{aligned} \quad (2.26)$$

où P' est la fluctuation de la pression et D la diffusivité de la température ou de la concentration. P_{js}^U et P_{js}^S sont respectivement les termes de production dus au gradient de vitesse et au gradient de scalaire. G_{js} est le terme de production dû à la flottabilité. ϕ_{js} est la corrélation pression/gradient de scalaire (également appelé "terme de brouillage" ou "*scrambling term*" en anglais). ε_{js} est le terme de dissipation. D_{js}^t , D_{js}^ν et D_{js}^p sont respectivement les termes de diffusion turbulente, de diffusion moléculaire et de diffusion par la pression. Il est évident que les termes de production sont exacts et n'ont pas besoin d'être modélisés. En revanche, les termes de brouillage, de diffusion et de dissipation nécessitent d'être modélisés. La modélisation de ces termes ainsi que le jeu des constants relatifs au terme de brouillage sont répertoriés dans les travaux de Dehoux (2012b).

Cette approche est la plus convenable pour représenter les mécanismes physiques conduisant aux flux thermiques turbulents. Cependant, des modèles simplifiés sont utilisés dans l'industrie ; ce sont les modèles algébriques standards : GGDH (Hypothèse de Diffusion du Gradient Généralisée) et SGDH (Hypothèse de Diffusion du Gradient Simple). Ces modèles sont obtenus à partir de l'équation initiale en considérant deux hypothèses importantes : la première est celle d'équilibre faible qui suppose l'équilibre de l'anisotropie le long d'une trajectoire et la deuxième suppose l'équilibre entre les termes de diffusion des tensions de Reynolds et d'énergie cinétique turbulente.

Nous présentons par la suite les versions réduites de ces deux modèles haut Reynolds en supposant que la turbulence est en équilibre ($\mathcal{P}_k + \mathcal{G}_k = \varepsilon$ et $\mathcal{P}_{ss} = \varepsilon_{ss}$).

- Hypothèse de Diffusion du Gradient Généralisée (GGDH) :

Le modèle GGDH (Daly & Harlow, 1970) est obtenu à partir du modèle de flux algébrique en supprimant les termes de production dus aux gradients de vitesse et de flottabilité. Ainsi, l'équation du flux scalaire turbulent (en négligeant la diffusion moléculaire) s'écrit comme suit :

$$\overline{S'U_j'} = -C_s \frac{k}{\varepsilon} \left(\overline{U_i'U_j'} \frac{\partial \overline{S}}{\partial x_k} \right) \quad (2.27)$$

où $C_s = 0.3$ (Daly & Harlow, 1970 ; Dehoux, 2012a).

- Hypothèse de Diffusion du Gradient Simple (SGDH) :

Le modèle SGDH considère que le flux turbulent du scalaire est proportionnel au gradient du scalaire, selon la loi de Fick (la diffusion moléculaire est négligée). Il est donné par :

$$\overline{S'U_j'} = -\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \overline{S}}{\partial x_j} \quad (2.28)$$

où Sc_t est le nombre de Schmidt turbulent ($Sc_t = 0,7$).

2.2.2.5 Equation de la variance du scalaire $\overline{S'^2}$

L'équation de transport du flux turbulent de scalaire nécessite la résolution d'une équation de transport pour la variance de la fluctuation du scalaire ($\overline{S'^2}$) qui apparaît dans le terme de flottabilité. La partie de l'équation qui suit l'égalité, est composée des termes de production P_{ss} et de diffusion moléculaire D_s' qui sont exactes, ainsi que des termes de diffusion turbulente D_s^t et de la dissipation ε_{ss} qui ont besoin d'être modélisés. Pour le terme de la diffusion turbulente, le modèle GGDH de Daly et Harlow (1970) est utilisé si les tenseurs de Reynolds sont résolus. L'équation de la variance devient ainsi :

$$\frac{\partial \overline{S'^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{U_j S'^2}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(D \delta_{kl} + C_{ss} \overline{U_k'U_l'} \tau_u \right) \frac{\partial \overline{S'^2}}{\partial x_l} \right] + P_{ss} - \varepsilon_{ss} \quad (2.29)$$

où le terme de production P_{ss} s'écrit :

$$P_{ss} = -2 \overline{U_j' S'} \frac{\partial \overline{S}}{\partial x_j} \quad (2.30)$$

Il existe deux méthodes pour modéliser le terme ε_{ss} : la première grâce à une équation de transport et la deuxième grâce au ratio des échelles de temps thermique et dynamique R_f , tel que :

$$R_f = \frac{\tau_s}{\tau_u} = \frac{\overline{S'^2} \varepsilon}{\varepsilon_{ss} k} \quad (2.31)$$

d'où :

$$\varepsilon_{ss} = \frac{\overline{S'^2} \varepsilon}{R_f k} \quad (2.32)$$

Par défaut, une équation du modèle SGDh est résolue avec $R_f = 0,8$. Pour les modèles RSM, l'hypothèse de Daly et Harlow (1970) est utilisée avec $R_f = 0,5$.

2.3 Profils analytiques pour les conditions limites d'entrée

Dans cette thèse, des simulations sont réalisées sur des essais choisis en utilisant le module atmosphérique de Code_Saturne. Les profils de vitesse du vent, de température et de turbulence sont spécifiés à la face d'entrée du domaine.

2.3.1 Profils de vitesse et de température

La vitesse du vent à l'entrée est décrite de manière précise par un profil vertical logarithmique dérivé de la théorie de similitude Monin-Obukhov MOST (Stull, 1988). Ce profil est utilisé pour déterminer la vitesse moyenne dans la couche de surface. Il est représenté par l'équation suivante :

$$U(z) = \frac{u^*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_m(\zeta) + \psi_m(\zeta_0) \right] \quad (2.33)$$

où κ (0.42) est la constante de von-Kármán (Dyer, 1974) ; ζ (z/L) est le paramètre de stabilité de Monin-Obukhov ; ψ_m est la fonction de correction de la stabilité de la quantité de mouvement.

- En régime de stabilité neutre, $\psi_m = 0$;
- En régime stable, $\psi_m(\zeta) = -5\zeta$ pour $0 < \zeta_0 < \zeta < 0.5$ (Businger et al., 1971 ; Dyer & Hicks, 1970 ; Hicks, 1976).

Une autre forme de profil de vitesse utilisée en condition stable pour $0.5 < \zeta < 10$ s'écrit comme suit :

$$U(z) = \frac{u^*}{\kappa} \left[c_{1m} \log(2\zeta) + \frac{4,25}{\zeta} - \frac{0,5}{\zeta^2} - \log(2\zeta_0) - b_m \zeta_0 - c_{2m} \right] \quad (2.34)$$

où $b_m = 4,7, c_{1m} = 7,85, c_{2m} = 4,15$ (Businger et al., 1971, Hicks, 1976).

Pour les essais menés dans des conditions stables, les profils de vitesse du vent suivants sont également utilisés :

— Profil de Gryning et al. (2007) :

$$\frac{U(z)}{u_*} = \frac{1}{\kappa} \left(\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) + \frac{5z}{L} \left(1 - \frac{z}{2z_i} \right) + \frac{z}{L_{MBL}} - \frac{z}{z_i} \left(\frac{z}{2L_{MBL}} \right) \right) \quad (2.35)$$

avec :

$$\frac{u_*}{fL_{MBL}} = \left(-2 \ln \left(\frac{u_*}{fz_0} \right) + 55 \right) \exp \left(-\frac{(u_*/fL)^2}{400} \right)$$

— Profil de Peña et al. (2009) (voir aussi Konow (2014)) :

$$U(z) = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) + b \frac{z}{L} \left(1 - \frac{z}{2z_i} \right) + \frac{1}{d} \left(\frac{\kappa z}{\eta} \right)^d - \left(\frac{1}{1+d} \right) \frac{z}{z_i} \left(\frac{\kappa z}{\eta} \right)^d - \frac{z}{z_i} \right] \quad (2.36)$$

avec :

$$\eta = \frac{\kappa z_i}{[d(1+d)^{1/d}]} \left[\left(\left[\ln \left(\frac{u_*}{fz_0} \right) - A \right]^2 + B^2 \right)^{1/2} + \ln \left(\frac{z_i}{z_0} \right) \right]^{-1/d}$$

$A = 1,5$, $B = 5,2$ et $d = 1,25$

— Profil de Beljaars et Holtslag (1991) :

$$U(z) = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right] \quad (2.37)$$

avec :

$$\Psi_m = -a \left(\frac{z - z_0}{L} \right) - b \left(\frac{z}{L} - \frac{c}{d} \right) e^{-d \frac{z}{L}} + b \left(\frac{z_0}{L} - \frac{c}{d} \right) e^{-d \frac{z_0}{L}}$$

$a = 1$, $b = 0,667$, $c = 5$ et $d = 0,35$

où L_{MBL} est l'échelle de longueur dans la couche moyenne de la CLA, $f = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ est le paramètre de Coriolis, $z_i \approx 0,1u_*/f$ est la hauteur de la CLA (Zilitinkevich & Baklanov, 2002).

Dans toutes les simulations, le profil de température vertical de Monin-Obukhov est défini comme condition limite thermique d'entrée :

$$T(z) = \Theta(z) + z\Gamma \quad (2.38)$$

avec :

$$\Theta(z) = \Theta(z_0) + \frac{\Theta^*}{\kappa} \left[\sigma_n \ln \left(\frac{z}{z_r} \right) - \psi_h(\zeta) + \psi_h(\zeta_0) \right]$$

où Γ ($-0,009766^\circ\text{C}/\text{m}$) est le taux de dérapage adiabatique (*lapse rate* en anglais); z_r est le niveau de référence (anémomètre) auquel Θ est déterminé; Θ^* est l'échelle de température; ψ_h

est la fonction de correction de la stabilité pour la température potentielle. En régime de stabilité neutre, $\Theta^* = 0$; en régime stable, $\sigma_n = 0,74$ et $\psi_h = -5\zeta$ (Businger et al., 1971; Dyer & Hicks, 1970; Hicks, 1976).

2.3.2 Profils des variables de turbulence

Pour l'énergie cinétique turbulente (ECT) k et son taux de dissipation ε , les profils suivants sont utilisés :

— Profils de Gorlé et al. (2009) :

L'évolution de $k(z)$ avec l'altitude z est modélisée par une relation mathématique de racine carrée dont les paramètres A_1 et A_2 sont déterminés par une méthode des moindres carrés (Gorlé et al., 2009). Le profil d'entrée de la dissipation turbulente est ensuite déduit du lissage de $k(z)$. Les expressions de k et ε sont les suivantes :

$$k(z) = \sqrt{A_1 \ln(z + z_0) + A_2} \quad (2.39)$$

$$\varepsilon(z) = \frac{\sqrt{C_\mu} u_*}{\kappa(z + z_0)} \sqrt{A_1 \ln(z + z_0) + A_2} \quad (2.40)$$

— Profils de Kerschgens et al., 2000

Ces profils sont utilisés pour modéliser la turbulence dans la CLA dans des conditions atmosphériques stables. Dans ces conditions, leurs expressions analytiques sont données par les relations suivantes :

$$k(z) = \frac{1}{2} (\overline{U'^2} + \overline{V'^2} + \overline{W'^2}) = \frac{1}{2} (\sigma_u^2 + \sigma_v^2 + \sigma_w^2) \quad (2.41)$$

$$\varepsilon(z) = \frac{u_*^3}{\kappa z} \left(1 + 4 \frac{z}{L} \right) \quad (2.42)$$

avec :

$$\begin{aligned} \sigma_u &= 2,4 u_* \exp\left(-0,3 \frac{z}{z_i}\right), \\ \sigma_v &= 2,0 u_* \exp\left(-0,3 \frac{z}{z_i}\right), \\ \sigma_w &= 1,3 u_* \exp\left(-0,3 \frac{z}{z_i}\right) \end{aligned}$$

où z_i est la limite supérieure de la couche limite (Van Dop & Steyn, 2012) :

$$z_i = \max \left[250 \text{ m}, \min \left(800 \text{ m}, C_2 \sqrt{\frac{u_* L}{f}} \right) \right] \quad (2.43)$$

avec $C_2 = 0,7$ et le coefficient de Coriolis $f = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$.

2.4 Méthodes statistiques pour l'évaluation des modèles

La validation des performances du modèle CFD est réalisée en analysant les résultats et en comparant directement les résultats numériques avec les observations expérimentales. Cette validation s'effectue à la fois de manière qualitative et quantitative en utilisant divers outils tels que les diagrammes de dispersion, les diagrammes quantile-quantile (QQ) et des mesures statistiques de performance.

Dans le diagramme de dispersion, les observations appariées et les concentrations prédites sont représentées l'une par rapport à l'autre, permettant ainsi une inspection visuelle pour évaluer l'étendue des sur- ou sous-prédictions du modèle. En revanche, le diagramme QQ utilise les mêmes données appariées que le diagramme de dispersion, mais il classe chaque donnée observée et prédite séparément, du plus faible au plus élevé (Chang & Hanna, 2004). Ce type de graphique est souvent utile pour déterminer si le modèle peut générer une distribution de concentration similaire à la distribution observée. Les biais concernant les valeurs de concentration faibles ou élevées deviennent rapidement évidents dans les tracés QQ.

Pour valider le modèle, différentes mesures de performance statistique standard sont calculées et analysées, dont l'Erreur Quadratique Moyenne Normalisée (NMSE), le Biais Fractionnaire (FB), le Facteur de Deux (FAC2), le Coefficient de Corrélation de Pearson (COR), le Biais Moyen Géométrique (MG), la Variance Géométrique (VG) et l'Indice d'Accord (IOA). Ces mesures permettent d'évaluer l'accord entre les concentrations prédites par le modèle et les observations expérimentales (Chang & Hanna, 2004). L'expression de chacun de ces indicateurs est donnée ci-dessous :

— L'Erreur Quadratique Normalisée (NMSE) :

$$\text{NMSE} = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{C_o C_p} \quad (2.44)$$

— Le Biais Fractionnaire (FB) :

$$\text{FB} = \frac{(\overline{C_o} - \overline{C_p})}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})} \quad (2.45)$$

— Le Facteur de Deux FAC2 correspond au nombre de valeurs calculées vérifiant la relation :

$$0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2,0 \quad (2.46)$$

— Le Coefficient de Corrélation (COR) :

$$\text{COR} = \frac{\overline{(C_{o,i} - \overline{C_o}) \cdot (C_{p,i} - \overline{C_p})}}{\sigma_p \sigma_o} = \frac{\sum_{i=1}^N (C_{o,i} - \overline{C_o}) \cdot (C_{p,i} - \overline{C_p})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (C_{o,i} - \overline{C_o})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^N (C_{p,i} - \overline{C_p})^2}} \quad (2.47)$$

— Le Biais Géométrique Moyen (MG) :

$$MG = \exp\left(\overline{\ln C_o} - \overline{\ln C_p}\right) \quad (2.48)$$

— La Variance Géométrique (VG) :

$$VG = \exp\left[\overline{(\ln C_o - \ln C_p)^2}\right] \quad (2.49)$$

— L'Indice d'Accord (IOA) :

$$IOA = 1 - \left[\frac{\overline{(C_p - C_o)^2}}{\left(\overline{|C_p - C_o|} + \overline{|C_o - C_p|}\right)^2} \right] \quad (2.50)$$

où C_o et C_p représentent respectivement la concentration observée et la concentration prédite. σ_o et σ_p sont respectivement les écarts-types sur l'ensemble des concentrations observées et prédites.

L'indicateur NMSE évalue le degré de dispersion dans l'échantillon. Des valeurs positives et négatives de FB indiquent respectivement une sous-estimation et une surestimation des concentrations simulées par rapport aux observations. L'indicateur FAC2 est une mesure robuste, moins sensible aux valeurs aberrantes des concentrations observées et prédites. FAC2 donne la proportion de valeurs calculées comprises à au moins un facteur de 2 de la valeur observée, c'est-à-dire comprises entre la moitié et le double de la valeur observée. Étant donné que la distribution des concentrations de polluants atmosphériques est généralement proche de la log-normale, les mesures linéaires FB et NMSE peuvent être fortement influencées par les concentrations observées et/ou prédites élevées et peu fréquentes. En comparaison, les mesures logarithmiques MG et VG permettent un traitement plus équilibré des concentrations extrêmes, à la fois élevées et faibles, ainsi que des cas de surestimation des concentrations simulées par rapport aux observations. Cependant, les mesures logarithmiques MG et VG peuvent être excessivement influencées par les valeurs très faibles ou nulles, ce qui n'est pas rare lors de la modélisation de la dispersion. Le COR reflète la relation linéaire entre deux variables mais peut être sensible à quelques paires de données aberrantes. Il convient donc d'être attentif à ces cas particuliers lors de l'analyse des résultats.

Pour un modèle idéal, on a : $FB = NMSE = 0$ et $VG = FAC2 = COR = IOA = 1$. Pour certains indicateurs, Chang et Hanna (2004) ont défini les limites acceptables qui permettent de considérer un modèle comme performant, telles que : $-0,3 < FB < 0,3$, $0,7 < MG < 1,3$, $NMSE < 4$, $VG < 1,6$ et $FAC2 > 0,5$

En plus des mesures statistiques mentionnées précédemment, d'autres indicateurs sont utilisés dans l'évaluation de certains cas de test, tels que l'Écart-Type Fractionnel FS et Le Biais Moyen Relatif-dix premiers RMB-TT, qui sont définis comme suit :

— L'Écart-Type Fractionnel (FS) :

$$FS = \frac{2(\sigma_o - \sigma_p)}{\sigma_o + \sigma_p} \quad (2.51)$$

— Le Biais Moyen Relatif- dix premiers (RMB-TT) :

$$RMB - TT = \frac{\overline{C_{p,10}} - \overline{C_{o,10}}}{\overline{C_{o,10}}} \quad (2.52)$$

Le calcul de ces mesures de performance suppose que l'ensemble de données de validation contient des paires de concentrations prévues et observées. Dans le cas d'un rejet continu et constant pendant une période expérimentale, la distribution des concentrations modélisées atteint un état d'équilibre dans le domaine de calcul, ce qui signifie que les valeurs moyennes des concentrations de simulation à la fin de la période expérimentale sont identiques aux valeurs moyennes des concentrations observées. Ainsi, les résultats obtenus à partir des calculs RANS et URANS (instationnaire) représentent la valeur moyenne dans le temps des concentrations à la fin des simulations. Dans les jeux de données étudiés dans cette thèse, les observations de concentration disponibles représentent les valeurs moyennes sur la durée de l'expérience en régime permanent. Cela signifie que l'appariement utilisé pour la validation est uniquement dans l'espace, c'est-à-dire que les valeurs simulées sont comparées aux valeurs observées spatialement pour tous les capteurs.

Pour évaluer le modèle en comparant les observations avec les simulations, il est recommandé de remplacer les valeurs de concentration inférieures à la limite de détection des capteurs par le seuil de détection (Chang & Hanna, 2004). Cependant, d'autres méthodes ont également été utilisées pour traiter ces concentrations inférieures à la limite de détection (Donnelly et al., 2009 ; Kumar et al., 2015 ; Milliez & Carissimo, 2007). Selon Donnelly et al. (2009), si les deux valeurs de concentration dans une paire de concentrations simulées et observées sont inférieures à la limite de détection, elles sont toutes les deux mises à zéro et retirées de l'ensemble de données. Si l'une des valeurs de concentration d'une paire est supérieure à la limite de détection et que l'autre est inférieure, la valeur de concentration la plus faible est fixée à la limite de détection. Cela permet de gérer les cas où une des valeurs est mesurable tandis que l'autre ne l'est pas, en évitant de surestimer la comparaison entre les observations et les prédictions.

2.5 Mise en oeuvre des modèles RANS : Simulation d'un couche limite homogène

2.5.1 Introduction

La problématique consiste à établir et maintenir dans l'espace et dans le temps les profils météorologiques définis à l'entrée du domaine jusqu'aux zones d'intérêt plus complexes (terrains urbains, avec reliefs, avec végétation, avec points d'eau). La figure 2.5 montre un exemple de maintien des profils

décrivant l'écoulement atmosphérique en amont de la zone d'intérêt représentée explicitement par un petit groupe de bâtiments modélisés.

Dans un premier temps, notre objectif sera de représenter la couche limite de surface (CLS) sous forme d'un domaine plat afin de garantir la continuité des caractéristiques physiques en amont et en aval du modèle numérique de la CLS. Cette méthodologie développée ici servira de référence pour les futures modélisations de la CLS dans des cas pratiques impliquant des obstacles.

Pour cette étude, nous nous sommes appuyés sur les travaux réalisés par Vendel (2011). Dans son étude, il a modélisé la couche limite en utilisant une approche de type RANS $k-\varepsilon$ et a utilisé les profils issus de la théorie de similitude de Monin-Obukhov (MOST). Ses résultats ont montré que le modèle standard de Launder et al. (1975) est insatisfaisant pour la modélisation de la couche limite de surface, car il conduit à un profil de turbulence qui se déstabilise en fonction de la distance. En réponse à cela, Vendel (2011) a proposé un autre modèle $k-\varepsilon$ basé sur les constantes de Duynkerke (1988) (voir Table 2.1) ainsi qu'une adaptation de σ_k et σ_ε permettant aux profils de la théorie de similitude d'être une solution des équations de transport de l'énergie cinétique et du taux de dissipation. Par conséquent, le modèle de $k-\varepsilon$ avec le jeu de constants de Duynkerke est utilisé dans le cas d'une couche atmosphérique adiabatique ou neutre. En revanche, dans le cas d'une couche atmosphérique diabatique (stable et instable), une paramétrisation non constante de σ_k et σ_ε est utilisée en plus (Vendel, 2011).

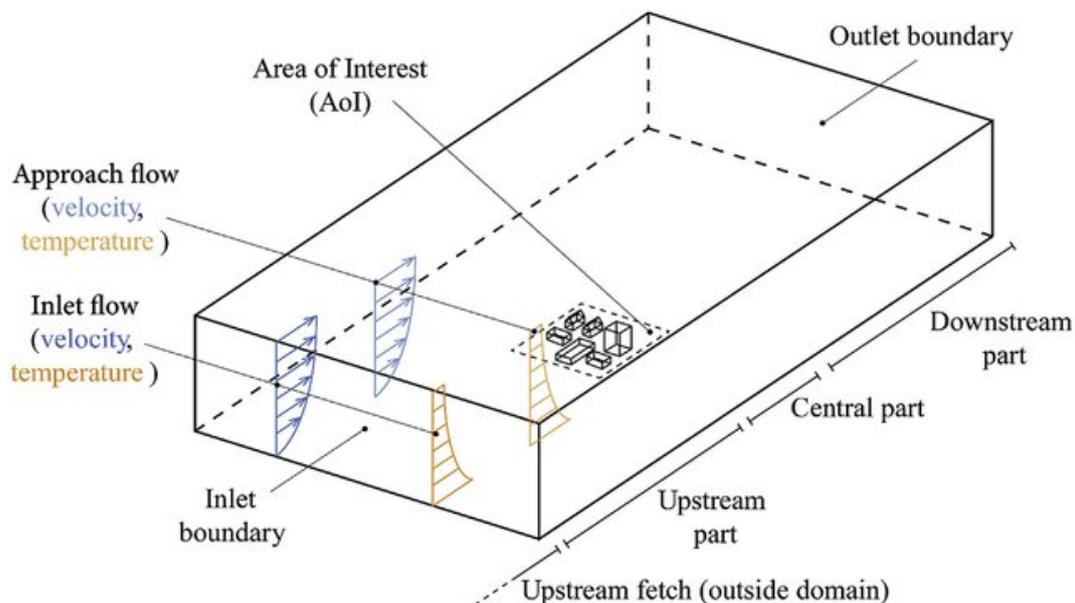


FIGURE 2.4 – Schéma d'un domaine de calcul typique pour la simulation CFD de l'écoulement autour d'une zone urbaine dans la CLA, avec les conditions aux limites correspondantes. [Tiré de (Toparlar et al., 2019)]

2.5.2 Procédure de simulation

Nous avons choisi de travailler sur les cas-tests proposés par Vendel (2011). Ces cas-tests consistent en la simulation d'une couche limite homogène bidimensionnelle dans des conditions de stabilité neutre, stable et instable. Pour cela, nous avons utilisé le module atmosphérique implémenté dans le code `_Saturne`. Il est important de noter que, pour la classe de stabilité neutre, un modèle d'écoulement "densité constante" (*constant density*) doit être activé, tandis que pour les cas diabatiques (stable et instable), il est nécessaire d'utiliser un modèle d'écoulement "air sec" (*dry atmosphere*) qui active par défaut le scalaire de température potentielle. Ce modèle sera ainsi couplé à des modèles algébriques haut-Reynolds de type SGDH pour simuler le champ de scalaire de température.

TABLE 2.3 – Paramètres physiques pour chaque cas de stabilité

Cas de stabilité	u_* (m/s)	H_0 (W/m ²)	θ_* (K)	L (m)
Neutre	0,7	0	0	-
Stable	0,3	-20	-0,05415	124
Instable	0,4	10	0,027076	589

2.5.3 Modèle numérique et maillage

Le modèle numérique utilisé est un domaine bidimensionnel (2-D) de 2 km de long, 310 m de haut et 10 m d'épaisseur. Le maillage total comprend environ 40700 mailles. À noter que les travaux de Vendel ont utilisé un domaine plus long de 20 km (Vendel, 2011).

Le maillage adopté est hexaédrique et structuré, avec une hauteur de maille adjacente à la paroi fixée à 1 m. Il est également plus fin dans les premières centaines de mètres à partir de l'entrée du domaine. En s'éloignant du sol et de l'entrée, le maillage devient progressivement plus grossier.

La hauteur de la maille adjacente à la paroi est de 1 m, avec un centre de gravité à $z_p = 0.5\text{m}$, conformément à la taille de rugosité ($z_0 = 1\text{m}$). Il est important de noter que dans les travaux de Vendel, la première maille adjacente au sol mesure 4 m. Cela est dû au fait que la rugosité dynamique n'est pas directement utilisée par le code FLUENT. Au lieu de cela, elle est dérivée d'une longueur de rugosité équivalente k_s , où la relation est donnée par : $k_s = \frac{9.793z_0}{C_s}$ où $C_s = 0.5$, avec $C_s = 0.5$. Cette formulation garantit que la condition $z_0 < z_p$ est satisfaite (Blocken et al., 2007; Vendel, 2011).

2.5.4 Conditions initiales et limites

Les conditions initiales permettent de reconstituer l'état physique de l'atmosphère au moment où les calculs commencent. Pour chaque cas de stabilité atmosphérique, les conditions initiales sont remplies par défaut à partir des données météorologiques.

Quant aux conditions limites, elles sont définies comme suit :

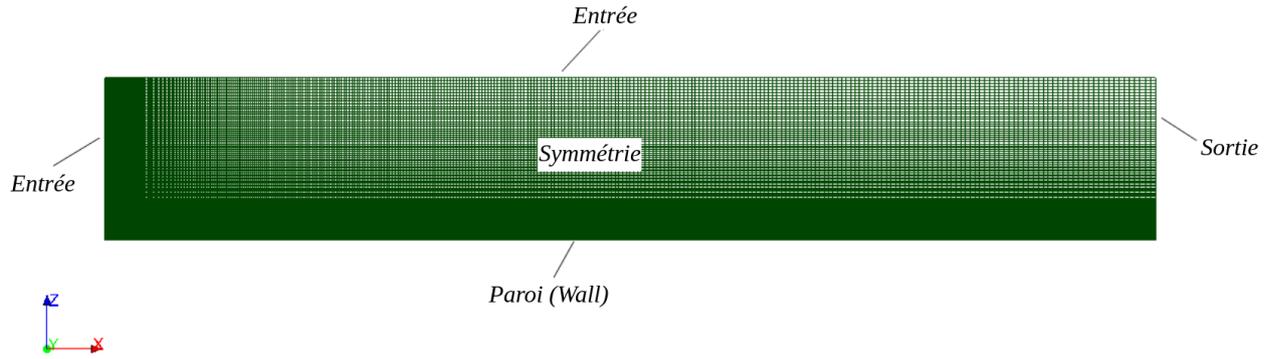


FIGURE 2.5 – Maillage 2-D du domaine numérique et conditions limites

1. Conditions d'entrée : Type Dirichlet pour les variables de vitesse, de température et de turbulence. Il s'agit des profils établis dans des CLS homogènes à l'aide de la théorie de similitude de Monin-Obukhov (MOST) (Garratt, 1994; Vendel, 2011). Les profils verticaux pour chaque classe de stabilité sont générés dans un fichier météorologique, en utilisant les paramètres de référence du tableau 2.3. Les profils adoptés pour la vitesse moyenne, la température potentielle moyenne, l'ECT et la dissipation turbulente sont définis comme suit :

Pour la vitesse :

$$\bar{U}(z) = \begin{cases} \frac{u_*}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right), & \text{Neutre} \\ \frac{u_*}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) + 5\zeta, & \text{Stable} \\ \frac{u_*}{\kappa} \left\{ \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \ln\left[\frac{(1+x^2)(1+x)^2}{8}\right] + 2 \tan^{-1}\left(\frac{x-\pi}{2}\right) \right\} \text{ avec } x = (1-16\zeta)^{\frac{1}{4}}, & \text{Instable} \end{cases} \quad (2.53)$$

Pour la température potentielle :

$$\bar{\Theta}(z) = \begin{cases} \Theta_0, & \text{Neutre} \\ \Theta_0 + \frac{\theta_*}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{z}{z_t}\right) + 5\zeta \right], & \text{Stable} \\ \Theta_0 + \frac{\theta_*}{\kappa} \left\{ \ln\left(\frac{z}{z_t}\right) - 2 \ln\left[\frac{(1-16\zeta)^{\frac{1}{2}} + 1}{2}\right] \right\}, & \text{Instable} \end{cases} \quad (2.54)$$

Pour l'ECT :

$$k(z) = \begin{cases} \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}}, & \text{Neutre} \\ \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}} \sqrt{\frac{1+4\zeta}{1+5\zeta}}, & \text{Stable} \\ \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}} \sqrt{1-\zeta}, & \text{Instable} \end{cases} \quad (2.55)$$

Pour la dissipation turbulente :

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} \frac{u_*^3}{\kappa z}, & \text{Neutre} \\ \frac{u_*^3}{\kappa z} (1-4\zeta), & \text{Stable} \\ \frac{u_*^3}{\kappa z} (1-16\zeta)^{-\frac{1}{4}} (1-\zeta), & \text{Instable} \end{cases} \quad (2.56)$$

2. Conditions de symétrie : les faces latérales du domaine sont définies par des conditions de symétrie, ce qui implique des conditions de flux nuls pour les scalaires (conditions de type Neumann homogène) et une vitesse normale nulle.
3. Conditions au sol : le sol est caractérisé par une rugosité aérodynamique z_0 , dont la valeur est directement utilisée par la loi de paroi imposée. Pour représenter le comportement du sol, nous utilisons une loi de paroi logarithmique de premier ordre en accord avec les profils d'entrée est utilisée.

Concernant les conditions imposées, nous appliquons une condition de Dirichlet pour k , de sorte que $k = u^2 / \sqrt{C_\mu}$, sauf dans la sous-couche visqueuse où $k = 0$. Pour ε , une condition de Neumann est appliquée, avec $\varepsilon = u^3 / \kappa z$, sauf dans la sous-couche visqueuse où un flux nul est imposé. En plus de la rugosité aérodynamique, la paroi est caractérisée par sa rugosité thermique z_t , qui est définie comme une échelle surfacique de longueur pour la température. Dans notre étude, nous considérons z_t égale à la rugosité dynamique.

Enfin, nous imposons un flux de chaleur H_0 au niveau de la paroi. En cas de stratification neutre, ce flux de chaleur est nul.

4. Conditions au sommet du domaine : pour le sommet du domaine, nous imposons les mêmes conditions d'entrée qu'au sol en fixant une vitesse maximale au centre de la maille la plus élevée. Dans ce cas, une condition de symétrie n'est pas envisageable, car les flux de chaleur et de quantité de mouvement non nuls créés au niveau du sol tendent à diminuer vers une valeur nulle au sommet. Ce comportement est en contradiction avec la physique de la couche limite de surface CLS, qui exige une constance de ces flux dans la direction verticale.
5. Conditions de sortie : le bord en aval de l'écoulement est traité comme une face de sortie du domaine, où le flux de masse est dirigé vers l'extérieur. Dans les cas diabatiques, une condition de flux nul est appliquée pour la température, tandis qu'une condition de Dirichlet est utilisée pour la pression, avec une valeur égale à la pression de référence.

2.5.5 Paramètres physiques et résolution numérique

Les propriétés physiques caractéristiques de l'atmosphère sont prises en compte dans le code CFD. Il s'agit de :

- La pression atmosphérique de référence : $P_0 = 101325$ Pa ;
- La température de référence de l'air : $T_0 = 293$ K ;
- La masse volumique de l'air : $\rho_0 = 1,225$ kg/m³ ;
- La capacité thermique spécifique de l'air : $C_p = 1005$ J/kgK ;
- La viscosité cinématique de l'air : $\nu = 1,7894 \times 10^{-5}$ m²/s ;
- Les composantes de gravité : $g_x = g_y = 0$; $g_z = -9,81$ m/s²

En ce qui concerne la résolution numérique, nous utilisons un algorithme instable avec un pas de temps constant de 0,1 secondes. Le nombre d'itérations est fixé à 500. La discrétisation temporelle des équations de NS est obtenue par une méthode de projection, associée à l'algorithme SIMPLEC.

2.5.6 Analyse des résultats

En guise de comparaison entre les différents modèles, nous avons choisi d'effectuer les simulations en utilisant les versions standard et calibrées du modèle $R_{ij} - \varepsilon$ LRR, ainsi que la version calibrée du modèle $k - \varepsilon$. Le comportement de la version standard de ce dernier dans le maintien des profils en domaine plat a été largement étudié dans la littérature (Blocken et al., 2007), par conséquent, nous ne le présentons pas ici.

Pour améliorer la quantification des résultats obtenus, nous avons choisi de représenter l'erreur relative entre les profils d'entrée et de sortie pour chacune des variables dynamiques (vitesse, énergie cinétique, dissipation). L'erreur relative est calculée à l'aide de la formule suivante :

$$\%Erreur = \left| \frac{\phi_{\text{entrée}} - \phi_{\text{sortie}}}{\phi_{\text{entrée}}} \right| \quad (2.57)$$

où ϕ désigne la variable calculée (c'est-à-dire la vitesse, l'ECT et la dissipation). Cette mesure nous permet d'évaluer la précision de nos résultats en comparant les valeurs des profils d'entrée avec celles des profils de sortie. De plus, l'erreur est calculée entre chaque point des profils d'entrée et de sortie, étant donné que ces points correspondent aux centres de chaque maille du sol jusqu'au sommet du domaine.

Les figures 2.6 à 2.8 présentent les variations des profils dynamiques, notamment la vitesse, l'énergie cinétique turbulente (ECT) et la dissipation turbulente, le long de la direction longitudinale du domaine numérique pour les cas de stabilité neutre, instable et stable, respectivement, en utilisant le modèle $R_{ij} - \varepsilon$. En parallèle, ces mêmes figures affichent l'erreur relative entre le profil injecté à l'entrée ($x = 0$ m) et celui obtenu à la sortie du domaine ($x = 2000$ m) pour chaque variable, permettant ainsi de vérifier le degré de maintien du profil dynamique sur l'ensemble du domaine. Les résultats obtenus pour le modèle calibré $k - \varepsilon$ et le modèle calibré $R_{ij} - \varepsilon$ sont présentés dans les figures A.1 à A.3 et A.4 à A.6, respectivement.

Les résultats montrent que le modèle numérique n'est pas capable de conserver parfaitement le profil d'entrée injecté. En effet, l'erreur peut être significative, dépassant parfois 100%, en particulier pour les profils d'énergie cinétique turbulente (ECT) et de dissipation. L'erreur maximale est principalement localisée près du sol, au centre de la première cellule adjacente à la paroi.

Plus précisément, un pic de turbulence apparaît souvent au niveau du sol du domaine et est significatif pour les cas de stratification stable. Ce pic a tendance à surestimer la turbulence près du sol, notamment dans des conditions de couche limite stables. En revanche, nous avons remarqué que pour le même cas, les profils le long du domaine sont éloignés les uns des autres au fur et à mesure que l'altitude augmente. De plus, au sommet du domaine, une légère déformation est constatée avec une augmentation légère de l'énergie de turbulence et du taux de dissipation. Ce comportement n'est pas observé pour les couches limites neutres et instables.

Il est à noter que dans des conditions atmosphériques stables, la couche limite de surface CLS se rétrécit pour atteindre une hauteur inférieure à 100 m en raison de l'absence des effets de flottabilité. Par conséquent, les profils dérivés de la théorie de la similarité, qui sont limités à la CLS, peuvent être incapables de reproduire les niveaux de turbulence au-dessus de la hauteur de la CLS. Une meilleure approche consisterait à appliquer des profils analytiques plus cohérents avec l'intégralité de la couche limite atmosphérique.

Il est également important de noter que les profils sont presque parfaitement conservés au-delà de 1000 m.

Parmi les trois modèles testés, le modèle RSM standard $R_{ij} - \varepsilon$ présente une performance relativement meilleure, suivi du modèle calibré $k - \varepsilon$ et du modèle calibré $R_{ij} - \varepsilon$. Cependant, la dernière solution conduit à certains points où la différence approche ou dépasse 100%, notamment pour les profils d'énergie cinétique turbulente et de dissipation.

2.6 Conclusions

L'objectif de ce chapitre était de présenter la méthodologie adoptée dans le module atmosphérique de Code_Saturne pour la simulation des écoulements atmosphériques et du phénomène de dispersion dans différentes conditions de stabilité atmosphérique. Une attention particulière a été portée sur les modèles de turbulence utilisés, ainsi que sur leur calibration.

Outre le modèle $k - \varepsilon$, le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ LRR a également été choisi pour simuler l'écoulement dans la couche limite atmosphérique dans différentes conditions de stabilité. Ce modèle se distingue par sa capacité à prédire l'effet rugueux de la couche limite de surface et à modéliser l'anisotropie de la turbulence. Il a été préalablement calibré par de nombreux chercheurs pour être mieux adapté aux écoulements en soufflerie et en atmosphère libre.

La turbulence en aval des obstacles est prédite localement par le modèle de turbulence. Les profils d'entrée atmosphérique sont déterminés en fonction de la classe de stabilité. Cependant, la préservation de ces profils à travers un domaine plat en amont de la zone d'intérêt reste complexe pour la modélisation numérique, en raison de plusieurs paramètres influents tels que les erreurs numériques, les lois de paroi, la paramétrisation des profils d'entrée dynamiques et le modèle de turbulence utilisé.

L'étude de conservation des profils d'entrée à travers le domaine plat a révélé des erreurs significatives entre les profils injectés à l'entrée du domaine et ceux calculés en sortie. Ces erreurs peuvent être importantes, atteignant quelques mètres d'altitude. De plus, les résultats des modèles calibrés testés dans Code_Saturne ne sont pas nécessairement meilleurs que ceux du modèle standard, notamment en ce qui concerne le maintien des profils d'entrée. C'est pourquoi, la calibration des

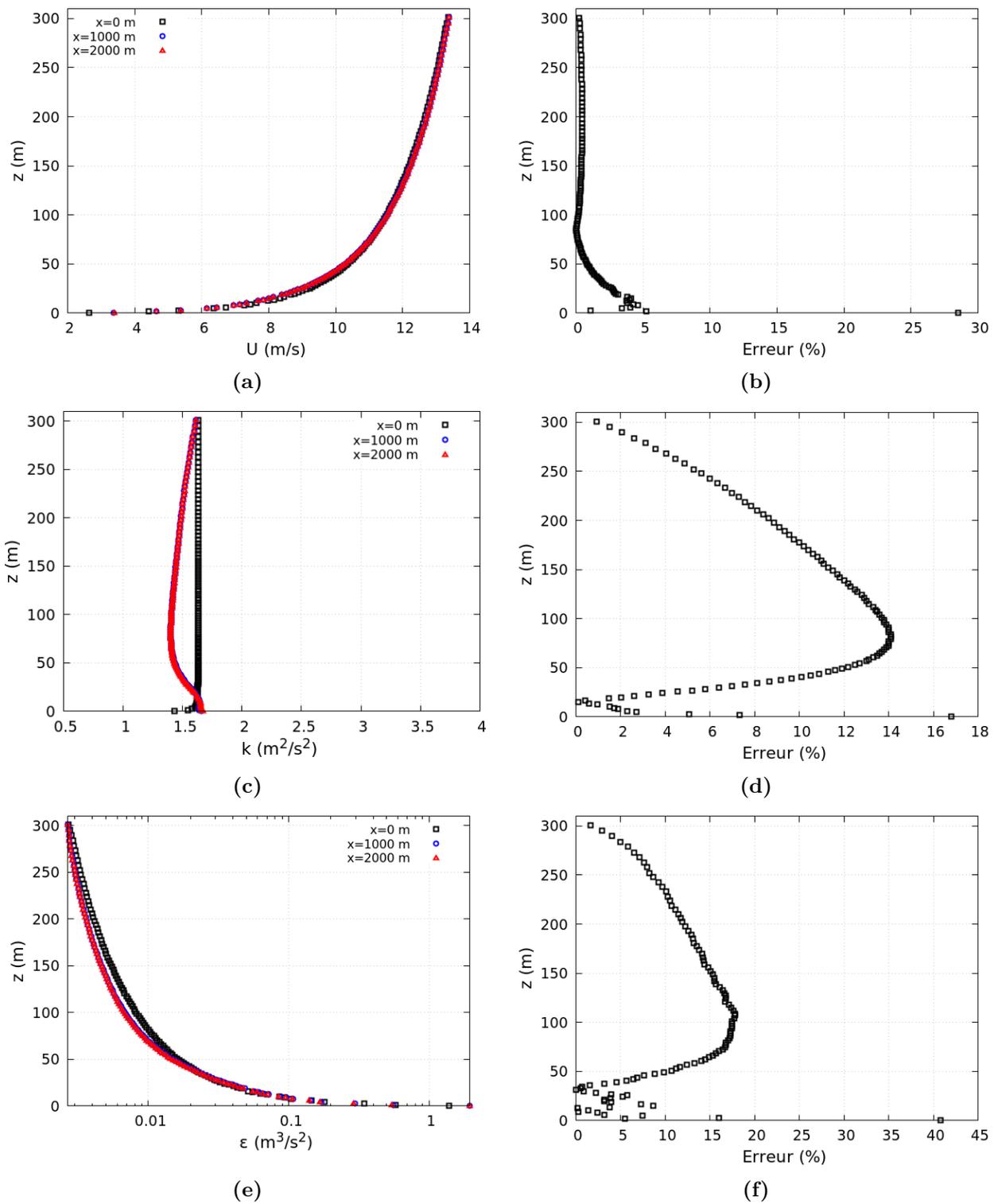


FIGURE 2.6 – A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d’ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité neutre à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l’axe de l’écoulement, par le modèle $R_{ij} - \epsilon$ LRR standard de Code_Saturne. A droite : L’erreur relative entre le profil injecté à l’entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l’ECT et la dissipation turbulente.

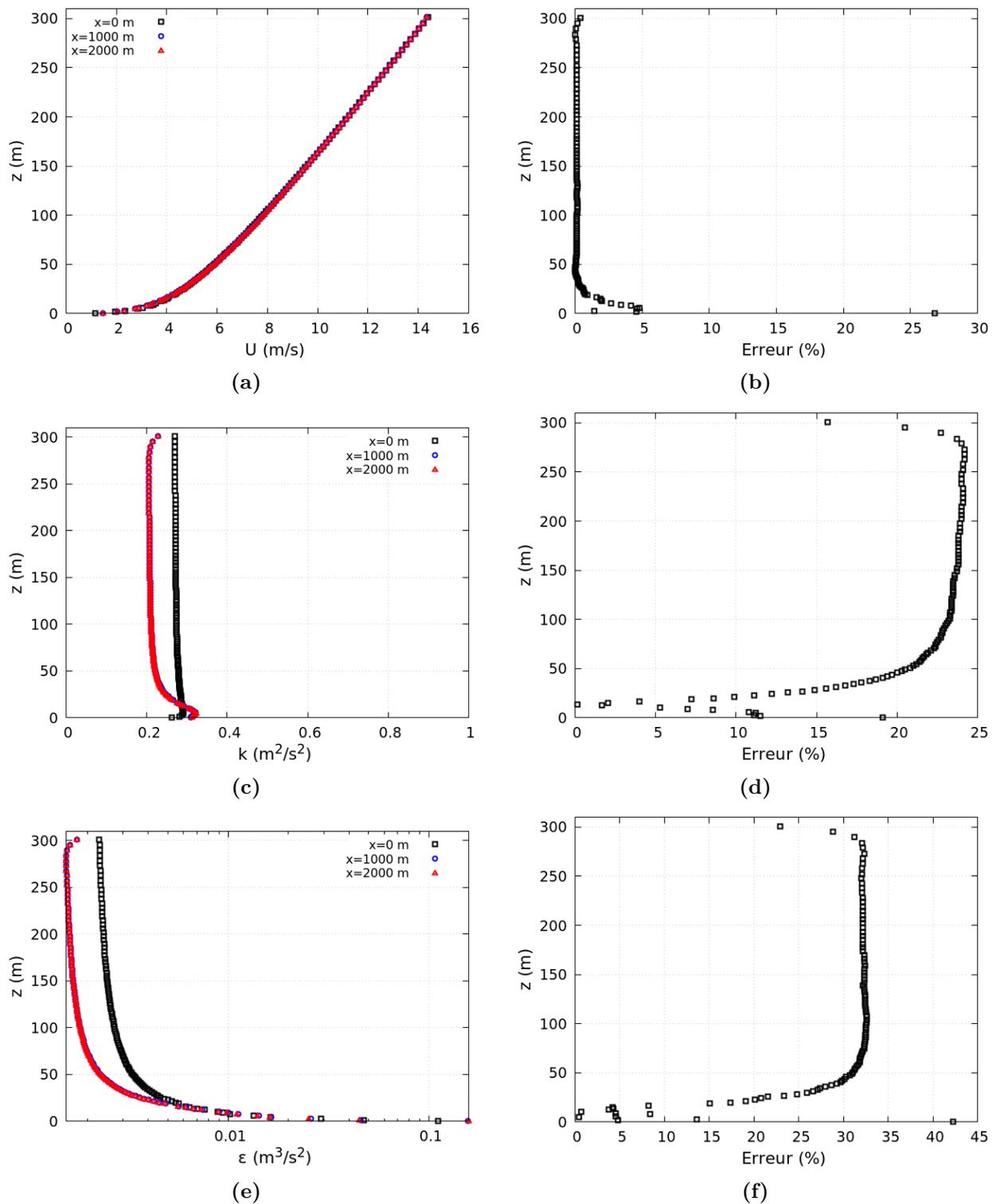


FIGURE 2.7 – A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d’ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité stable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l’axe de l’écoulement, par le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ LRR standard de Code_Saturne. A droite : L’erreur relative entre le profil injecté à l’entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l’ECT et la dissipation turbulente.

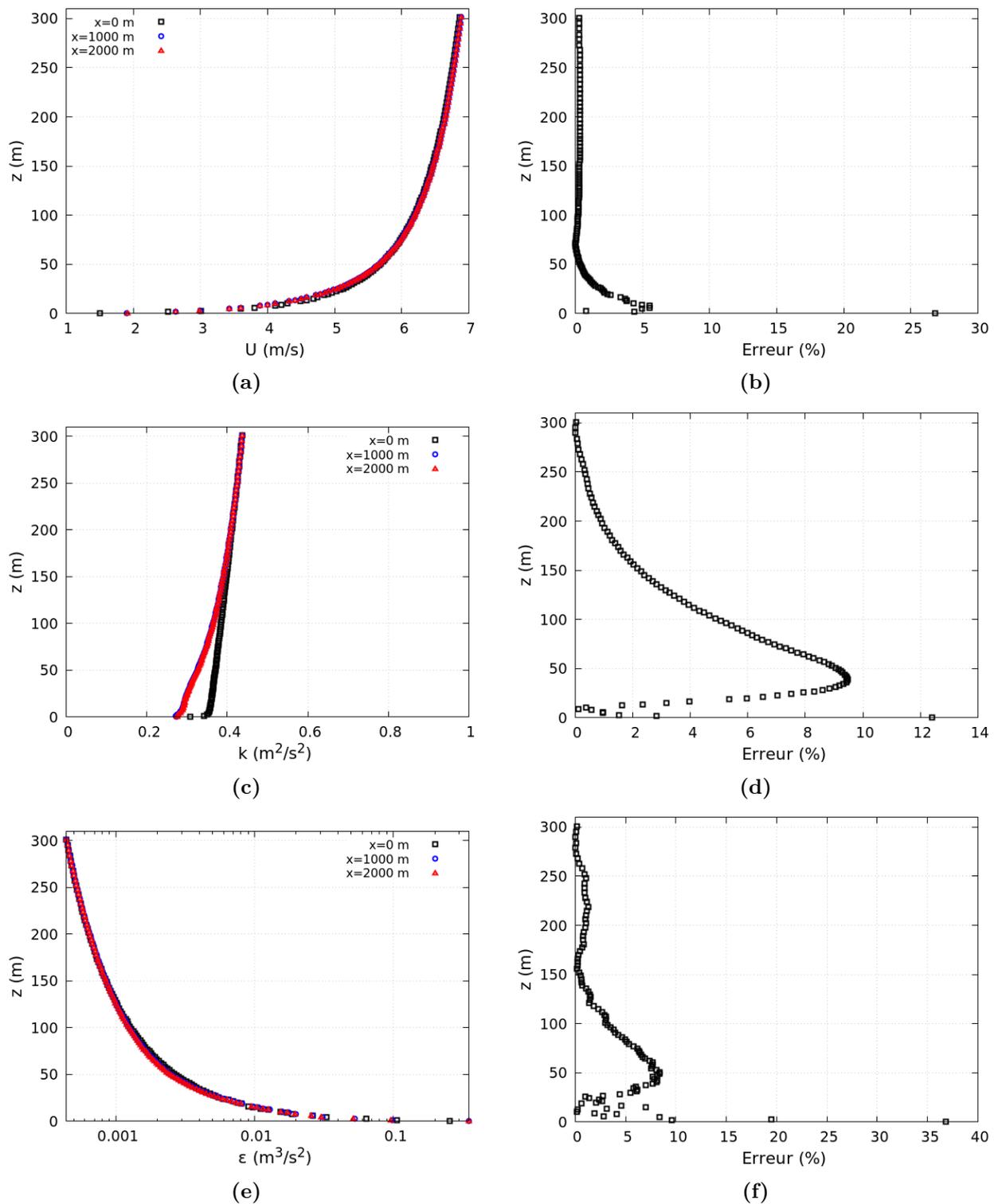


FIGURE 2.8 – A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d’ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité instable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l’axe de l’écoulement, par le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ LRR standard de Code_Saturne. A droite : L’erreur relative entre le profil injecté à l’entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l’ECT et la dissipation turbulente.

modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ sera davantage étudiée dans les chapitres 3 et 5, en portant une attention particulière aux conditions stables avec vent faible, dans des configurations de terrains plats ou semi-urbains.

Chapitre 3

Simulation CFD de la dispersion d'un polluant dans un milieu urbain à l'aide de modèles anisotropes

Résumé du chapitre

La modélisation de la dispersion atmosphérique des polluants émis par différents types de sources dans diverses conditions atmosphériques est une démarche préalable essentielle pour les études d'évaluation des risques et la préparation aux situations d'urgence. Dans cette étude, nous évaluons la performance de différents modèles de turbulence et des modèles de corrélations vitesse-scalaire implémentés dans le code CFD Code_Saturne. L'évaluation est faite avec des observations de quatre cas test de la campagne Mock Urban Setting Test (MUST) dans un environnement de type urbain et des conditions atmosphériques neutre et stable. Pour tous les essais étudiés, le modèle CFD avec un modèle de fermeture du 1^{er} ordre ($k-\varepsilon$) prédit 61,1% des concentrations à un facteur de deux des observations, ce qui est plus élevé que le pourcentage de points prédits (58,8%) lorsqu'un modèle de fermeture du 2^{ème} ordre ($R_{ij}-\varepsilon$) est utilisé. Pour l'essai avec des conditions légèrement stables, les résultats montrent que le modèle $k-\varepsilon$ associé à un modèle SGDH algébrique prédit 75% des concentrations dans un facteur de deux des observations. Les performances du modèle $k-\varepsilon$ sont comparées à celles du modèle $R_{ij}-\varepsilon$ lorsqu'il est utilisé avec les modèles algébriques SGDH, GGDH et avec l'équation de transport de flux scalaire DFM. Le modèle DFM est prometteur pour la prédiction des concentrations maximales dans des conditions atmosphériques légèrement stables, malgré son coût de calcul relativement élevé. Ce modèle prédit 69% des concentrations dans un facteur de deux des observations, et est donc plus efficace que les modèles SGDH et GGDH.

3.1 Introduction

La dispersion des polluants gazeux et des particules fines dans une zone urbaine est caractérisée par des phénomènes de turbulence complexes, tels que le détachement du flux et les zones de cisaillement élevé (Yu & Thé, 2017). En plus de cette turbulence dynamique, la turbulence thermique de l'air tend à atténuer les fluctuations turbulentes résultant du cisaillement de l'écoulement dans des conditions de stratification stable ou très stable, réduisant ainsi la dispersion des polluants. La complexité des phénomènes physiques impliqués dans ces conditions résulte en une forte anisotropie de la couche limite atmosphérique (CLA), ce qui limite la capacité des modèles isotropes standard à prédire correctement le champ de dispersion. Les modèles de dynamique des fluides computationnels (CFD) sont l'un des outils les plus prometteurs pour décrire la dispersion des polluants dans le champ proche des obstacles.

Les approches CFD utilisées pour résoudre les équations d'écoulement turbulent dans la plupart des études impliquent principalement la simulation des grandes échelles (LES) et les méthodes de Navier-Stokes moyennées (RANS). Les simulations des grandes échelles (LES) sont considérées comme une étape prometteuse dans les écoulements atmosphériques, car elles fournissent une meilleure compréhension des différents phénomènes d'écoulement qui se produisent autour des obstacles (voir par exemple (Salim et al., 2011 ; Tominaga & Stathopoulos, 2010, 2011, 2012)). Cependant, ce type de simulation nécessite une puissance de calcul plus élevée en raison de la dépendance temporelle des simulations et des grilles plus fines qui doivent être utilisées (Lateb et al., 2016).

Les simulations de Navier-Stokes moyennées (RANS) utilisent la décomposition de Reynolds pour filtrer les fluctuations turbulentes du champ d'écoulement moyen (M. Bahlali et al., 2019 ; Kaviani Nezhad et al., 2022 ; Kumar & Feiz, 2016 ; Kumar et al., 2015 ; Milliez & Carissimo, 2007, 2008 ; Tominaga & Stathopoulos, 2017, 2018 ; Yu & Thé, 2017). La turbulence dans le champ d'écoulement moyen est entièrement prise en compte par un modèle de turbulence et a un effet à la fois sur les champs dynamiques et scalaires. Par conséquent, l'exactitude et la fiabilité des résultats de modélisation des champs dépendent fortement de la qualité du modèle de turbulence appliqué. Les chercheurs investissent constamment dans les simulations RANS pour modéliser les écoulements atmosphériques et améliorer les sous-modèles inclus. Dans la plupart des simulations de dispersion atmosphérique en milieu urbain, le modèle standard $k - \varepsilon$ (Launder & Spalding, 1974) est le plus largement utilisé. Ce modèle standard est généralement modifié ou calibré pour s'adapter aux problèmes de dispersion dans différentes topographies du terrain et de stabilité atmosphérique (voir par exemple (Alinot & Masson, 2005 ; Kumar et al., 2015 ; Milliez & Carissimo, 2007), etc.). De plus, le modèle de contraintes de Reynolds (RSM) a été utilisé dans de nombreux cas de test pour la dispersion des polluants dans les villes et les zones urbaines. Ce modèle, initialement développé pour les écoulements à grand nombre de Reynolds, s'est parfois avéré plus performant que le modèle isotrope standard $k - \varepsilon$. Par exemple, Knaus et al. (2018) ont comparé trois modèles de turbulence - le modèle standard $k - \varepsilon$, le modèle $k - \varepsilon$ de groupe de renormalisation (RNG) et le modèle RSM - pour simuler l'écoulement du vent sur un terrain complexe ; seul le modèle RSM s'est avéré capable de prédire avec précision l'intensité de la turbulence. De même, M. Bahlali et al. (2019) ont montré

que l'utilisation du modèle de turbulence $R_{ij} - \varepsilon$ développé par Launder et al. (1975) donne une représentation plus physique de l'influence des obstacles sur les profils de concentration.

Concernant le flux turbulent dans l'équation de transport scalaire, il est souvent résolu en utilisant l'hypothèse de diffusion de gradient simple (SGDH). Il existe cependant d'autres modèles, tels que l'hypothèse de diffusion de gradient généralisée (GGDH) (Daly & Harlow, 1970), le modèle de flux différentiel (DFM), etc., plus couramment utilisés dans un contexte industriel. Pour les problèmes de dispersion atmosphérique, Rossi et Iaccarino (2009) ont montré que les modèles de transport de gradient sont améliorés par l'utilisation de fermetures algébriques (GGDH et HOGGDH) et prédisent mieux la dispersion atmosphérique dans les écoulements complexes que le modèle standard de diffusivité turbulente (voir aussi Rossi et al. (2009)).

L'objectif de ce travail est de réaliser une étude de validation approfondie de différents modèles de turbulence anisotropes pour les champs d'écoulement et scalaires. Les résultats de simulation sont évalués à l'aide des observations de la campagne expérimentale MUST (*Mock Urban Setting Test*) (Biltoft, 2001; Yee & Biltoft, 2004), qui est une expérience quasi-urbaine impliquant la libération d'un gaz neutre depuis une source ponctuelle à l'intérieur d'un ensemble de conteneurs rectangulaires. Quatre essais ont été choisis pour simuler les écoulements et les motifs de dispersion près de la source et à des distances plus éloignées. Les conditions de stabilité dans ces essais varient de neutre à extrêmement stable. Les simulations numériques sont effectuées à l'aide du code tridimensionnel *Code_Saturne*. Les modèles $k - \varepsilon$ (Launder & Spalding, 1974) et $R_{ij} - \varepsilon LRR$ (Launder et al., 1975) sont utilisés et comparés pour prédire le champ d'écoulement, tandis que les modèles SGDH et GGDH sont initialement adoptés pour relier le flux scalaire aux gradients moyens du champ de concentration. Une analyse supplémentaire de la fermeture pour le flux scalaire turbulent basée sur l'équation de transport du modèle de flux différentiel (DFM) est également présentée, et les résultats sont comparés aux prédictions fournies par les modèles algébriques SGDH et GGDH. Les capacités et les limites des modèles testés pour les champs de vent et de concentration sont rigoureusement évaluées à l'aide de plusieurs métriques de validation.

Le chapitre est organisé comme suit : les sections 3.2 et 3.3 décrivent respectivement les jeux de données expérimentales et les essais sélectionnés pour les simulations numériques. La section 3.4 présente le maillage du domaine numérique, tandis que les sections 3.5 et 3.6 exposent les équations résolues et les modèles de turbulence utilisés dans cette étude. La section 3.7 présente les schémas de discrétisation numérique, spatiale et temporelle, utilisés dans les simulations dans le code. Les sections 3.8 et 3.9 présentent respectivement les résultats numériques des simulations et l'analyse qualitative et quantitative des prédictions par rapport aux observations expérimentales. Enfin, la section 3.10 résume les conclusions de cette étude.

3.2 Description de l'expérience MUST

La campagne expérimentale MUST (*Mock Urban Setting Test*) (Biltoft, 2001 ; Yee & Biltoft, 2004) a été menée sur le site d'essai de l'US Army Dugway Proving Ground (DPG), dans le désert de l'Utah, à l'ouest des Etats-Unis (40°12,606'N-113°10,635'W) du 6 au 27 septembre 2001 par l'agence DRTA (*Defence Threat Reduction Agency*). L'objectif principal de cette campagne était d'obtenir une base de données expérimentale sur la dispersion d'un polluant à l'échelle d'une "pseudo-ville" afin de l'exploiter pour développer de nouveaux modèles ou valider des modèles numériques existants. La figure 3.1 montre une photographie du site de l'expérience.

Pour mettre en évidence la présence d'obstacles dans le paysage urbain (bâtiments, arbres, etc.), les expérimentateurs ont assimilé les bâtiments à des conteneurs parallélépipédiques de dimensions 12,2 m × 2,42 m × 2,54 m. La canopée urbaine est ainsi formée de 120 conteneurs uniformément répartis en 10 rangées de 12 conteneurs. Le terrain du site expérimental était essentiellement plat, avec une longueur de rugosité moyenne de 0,045±0,0005m (Yee & Biltoft, 2004).

Les capteurs sont placés entre les rangées de conteneurs sur quatre mâts, une tour centrale et quatre lignes d'échantillonnage afin de recueillir des informations sur les champs dynamiques et de concentration des polluants, ainsi qu'à l'extérieur de la canopée pour mesurer le champ de vitesse et la température. La figure 3.2 montre la position des conteneurs, de la source de polluants et des dispositifs de mesure.

L'expérience consistait à réaliser 63 rejets continus d'un gaz non réactif dans l'air, dans différentes conditions météorologiques et de stratification atmosphérique (stable, instable et neutre). Le gaz libéré ici est le propylène (C_3H_6) et chaque rejet dure 15 minutes, dont les périodes quasi-stationnaires de 200 secondes ont été extraites et utilisées pour évaluer les résultats de la dispersion simulée dans chaque essai de l'expérience (Yee & Biltoft, 2004). Le champ de concentration est principalement mesuré à l'aide de 40 PID (*Photoionization Detectors*) placés à 1,6m du sol et disposés horizontalement le long de 4 rangées. D'après la figure 3.2, les lignes d'échantillonnage pour les mesures de concentration sont définies comme suit :

1. Ligne 1 : capteurs 1 à 12,
2. Ligne 2 : capteurs 13 à 21,
3. Ligne 3 : capteurs 22 à 30,
4. Ligne 4 : capteurs 31 à 40.

Les concentrations ont également été mesurées à 8 niveaux (1, 2, 4, 6, 8, 10, 12 et 16 m) verticalement sur la tour de 32 m au-dessus de la surface du sol, et à 6 niveaux sur les mâts A, B, C et D.

Des informations plus détaillées sur l'expérience, notamment le type d'équipement, les fréquences d'échantillonnage, la position exacte des capteurs, les conditions météorologiques, etc. figurent dans

le rapport de (Biltoft, 2001).



FIGURE 3.1 – Photographie du site de la campagne expérimentale MUST [tiré de (Biltoft, 2001)]

3.3 Caractéristiques des cas-tests sélectionnés

Pour le présent travail, 4 tests sont sélectionnés pour la validation du modèle de dispersion. Les caractéristiques de chaque essai, utilisées comme données d'entrée pour les simulations du modèle, sont résumées dans le tableau 3.1. La vitesse et la direction moyennes du vent sont prises à une hauteur de 4 m au-dessus de la surface du sol à partir de la tour sud en amont de la canopée urbaine (Yee & Biltoft, 2004). Les observations de la vitesse de friction de surface (u^*), de la longueur d'Obukhov (L) et de l'ECT (k) sont prises à une hauteur de 4m depuis une tour de 32m (tour T) au centre du domaine. Les cas-tests sélectionnés sont les suivants :

- Essai N°2681829 : Cet essai a été réalisé dans des conditions atmosphériques neutres, c'est-à-dire avec un gradient vertical de température potentiel nul pour une valeur très élevée de la longueur Monin-Obukhov ($L = 28000$ m). La couche limite atmosphérique dans ce cas-test a une classe de stabilité D selon la classification de Pasquill (Pasquill, 1972 ; Pasquill, 1961). La direction de vent moyen est de -41° par rapport à l'axe x et est orienté du sud-ouest au nord-est (Figure 3.2). Parmi les vingt essais de la campagne expérimentale, qui sont souvent utilisés pour valider les modèles, cet essai a enregistré le vent le plus fort.
- Essai N°2692157 : Cet essai a été effectué dans des conditions atmosphérique faiblement stables, avec une amplitude de vent modéré ($2.1 < U < 5$ m/s). Il est de classe de stabilité F conformément à la classification de (Pasquill, 1972) ($100 \text{ m} < L < 200 \text{ m}$). Dans cet essai, le vent souffle du sud-est au nord-ouest avec un angle de direction de 43° par rapport à l'axe x (Figure 3.2).
- Essai N°2672033 : Cet essai a été effectué en conditions atmosphériques fortement stables, avec des vents modérés ($2,1 < U < 5$ m/s). Il est de classe de stabilité F conformément à

TABLE 3.1 – Caractéristiques physiques des essais choisis, obtenues à une hauteur de référence de 4 m : U est la vitesse moyenne du vent, α est la direction du vent mesurée à partir du nord, k est l'énergie cinétique turbulente, Q est le débit de polluant, z_s est la hauteur de rejet, u_* est la vitesse de friction, L est la longueur d'Obukhov et ε est le taux de dissipation.

N° essai	U (m s ⁻¹)	α (°)	k (m ² s ⁻²)	Q (L min ⁻¹)	z_s (m)	u_* (m s ⁻¹)	L (m)	ε (m ² s ⁻³)
2671934	1,63	-48	0,148	200	1,8	0,08	5,8	0,0013
2672033	2,69	-26	0,251	200	1,8	0,17	4,8	0,012
2681829	7,93	-41	1,46	225	1,8	1,1	28000	0,8
2692157	2,98	43	0,505	225	2,7	0,39	130	0,042

la classification de (Pasquill, 1972) ($0 < L < 10$ m). Parmi tous les essais de la campagne expérimentale, la plus faible valeur de longueur Monin-Obukhov a été obtenue pour cet essai. Dans cet essai, le vent souffle du sud-ouest au nord-est avec un angle de direction de 26° par rapport à l'axe x (Figure 3.2).

- Essai N°2671934 : Cet essai a été effectué en conditions atmosphériques très stables, avec des vents faibles ($U < 2,1$ m/s). Il est de classe de stabilité F conformément à la classification de (Pasquill, 1972) ($0 < L < 10$ m). C'est pour cet essai que la plus faible valeur de vitesse a été observée. Dans cet essai, le vent souffle du sud-ouest au nord-est avec un angle de direction de 48° par rapport à l'axe x (Figure 3.2). Dans ces conditions, la CLA a un comportement analogue à celui observé dans le cas-test N°2672033.

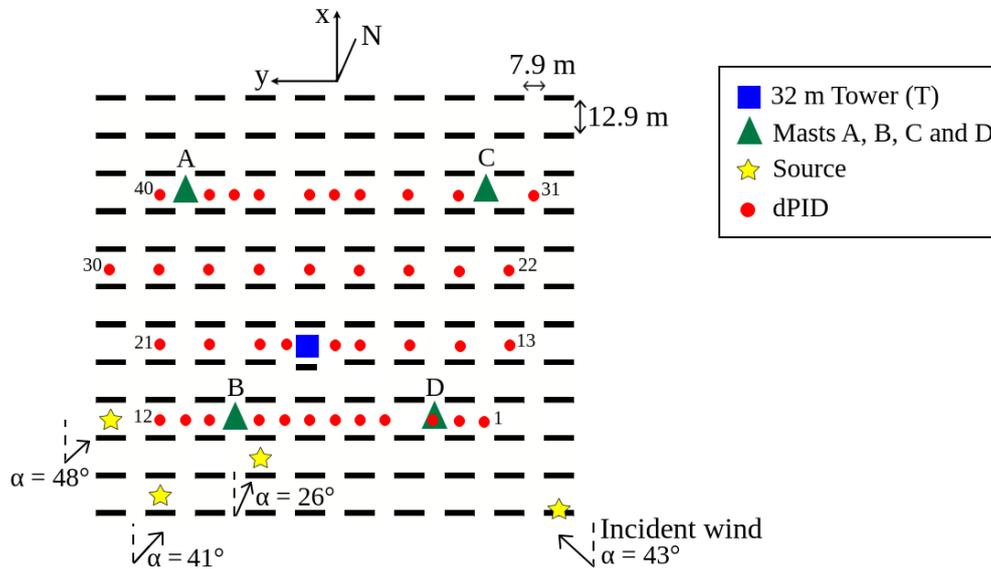


FIGURE 3.2 – Représentation schématique du site expérimentale de MUST : les triangles représentent les mâts A, B, C et D, le carré bleu représente le mât central de 32 m de hauteur. La position de la source pour les 4 cas-tests sélectionnés est représenté par une étoile jaune.

3.4 Domaine de calcul et maillage

3.4.1 Géométrie du domaine de calcul

Pour modéliser la site expérimentale, nous avons d’abord créé la géométrie à l’aide du logiciel de conception *Salome* (www.salome-platform.org), dans le but de reproduire le plus fidèlement possible le champ expérimental ainsi que les conteneurs présents. La figure 3.3 montre une illustration du domaine de calcul. La grille de conteneurs occupant une surface au sol de 193 m x 171 m, nous avons utilisés un domaine ayant une surface au sol de 240 m x 240 m de façon à respecter les règles de bonnes pratiques proposées dans le guide COST Action 732 (Franke et al., 2007 ; Schatzmann et al., 2010) pour la modélisation de la dispersion atmosphérique en environnement urbain. En particulier, le rapport de (Franke et al., 2007) mentionne qu’une distance minimale de $5H_{\max}$ à $15H_{\max}$ (où H_{\max} est la hauteur du plus haut bâtiment du domaine, ici égale à 2,54 m) entre les limites du domaine et la zone d’intérêt doit être considérée, selon le type de la face de délimitation (entrée, sortie, face supérieure ou latérale). En ce qui concerne la hauteur du domaine, d’autres études, telles que celle menée par Reiminger (2020), ont proposé une hauteur minimale de 96 m à utiliser en l’absence d’obstacles, cette distance minimale est donc également nécessaire pour la modélisation en échelle réelle en présence d’obstacles. La hauteur du domaine dépend également de la stratification thermique de l’atmosphère et de la position de la source de polluants. Dans ce travail, nous ne traiterons que des cas de dispersion en atmosphère neutre, stable et très stable avec une source située à une hauteur inférieure à deux mètres du sol. Etant donné la position de la source (assez proche du sol), et puisque dans ces conditions atmosphériques la dispersion verticale du polluant n’est pas aussi forte qu’en atmosphère instable, une hauteur de domaine de 50 m est suffisante pour reproduire complètement le panache de polluant. Les dimensions du domaine de calcul sont donc de 240 m x 240 m x 50 m.

3.4.2 Caractéristiques du maillage

Afin de permettre la résolution numérique des équations de Navier-Stokes NS et de transport de la concentration sur le domaine créé, il est impératif de discrétiser le domaine. Pour ce faire, nous avons utilisé l’algorithme *NETGEN-2D* du logiciel *salome* (www.salome-platform.org) pour générer un maillage non structuré dans le plan du sol, avec des mailles de plus en plus fines à proximité des conteneurs et des mailles de moins en moins fines à mesure que l’on s’éloigne de la grille des conteneurs. Par la suite, ce maillage plan bidimensionnel a été extrudé dans le sens de la hauteur avec un facteur de croissance de façon à obtenir une hauteur de maille de 0,25 m près du sol et de 5.5 m au sommet du domaine. Le nombre total de mailles dans le domaine est de 1 210 582. La figure 3.4 montre une représentation 3D du maillage du domaine de calcul. Le maillage est choisi après une étude de sensibilité réalisée sur trois tailles de grille sur le test N°2692157. Le tableau 3.2 résume les détails de chacun des trois maillages. Les résultats montrant la sensibilité des variables dynamiques à la taille du maillage sont présentés dans la section A.2 de l’Annexe A. Les figures A.7 et A.8 montrent la comparaison entre les profils des variables dynamiques obtenus en testant trois

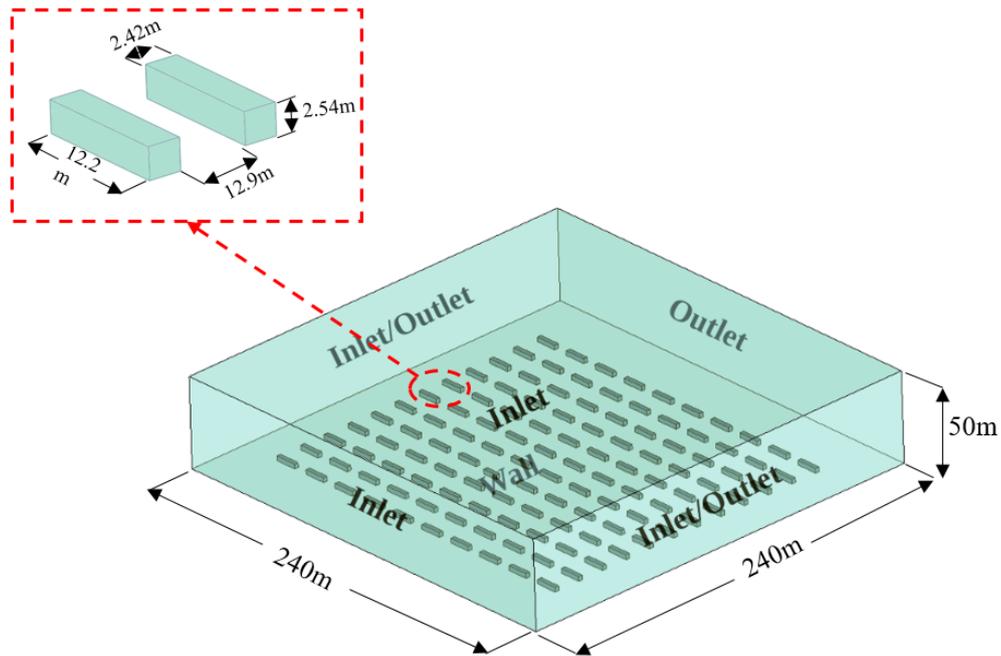


FIGURE 3.3 – Représentation du domaine de calcul avec les conditions aux limites.

tailles de grilles différentes. A première vue, les résultats ne montrent pas de différence, sauf pour les premiers mètres près du sol. Pour cette raison, la maillage de référence (Mesh2) a été choisi pour l'étude.

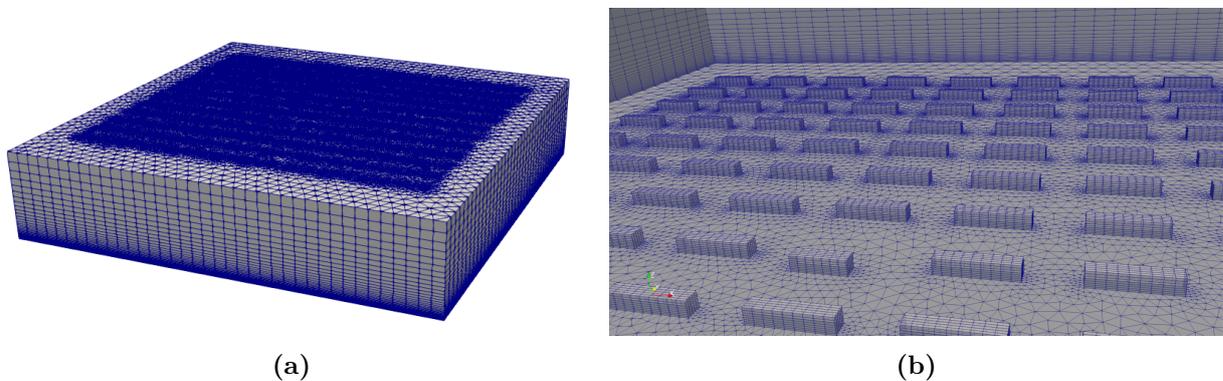


FIGURE 3.4 – Maillage du domaine de calcul : (a) Vue externe (b) Vue interne.

TABLE 3.2 – Détails des grilles de maillage utilisées pour l'étude de sensibilité. h est la hauteur de la première maille adjacente à la paroi du sol.

Maillage	Nombre total de mailles	h (m)
Mesh1	1 095 052	0,15
Mesh2	1 210 582	0,25
Mesh3	1 095 052	0,35

3.5 Conditions limites et conditions de rejet

En principe, la CLA s'étend sur toute la surface de la terre. Cependant, pour des raisons pratiques de coût de calcul et eu égard au caractère local du champ d'expérimentation, nous avons réduit l'étendue du domaine de calcul à une surface de quelques centaines de mètres carrés. Ce domaine de calcul fait donc partie intégrante de la CLA et par conséquent, les conditions appliquées à ses frontières doivent assurer une continuité avec la CLA environnante. Pour s'en assurer, nous imposerons les conditions limites suivantes :

- À l'entrée du domaine : une condition de type Dirichlet est appliquée, basée sur les profils de vitesse, de température et de turbulence dont les expressions sont développées dans le chapitre précédent.
- À la sortie du domaine : une condition de type Neumann est appliquée, sauf pour la pression (sortie libre).
- Sur le sol et les conteneurs : une fonction de paroi rugueuse logarithmique avec une rugosité aérodynamique de 0,04 m est appliquée.
- Sur les faces latérales : une condition d'entrée ou de sortie automatique est appliquée en fonction de la direction du vent.
- Au sommet du domaine : une condition d'entrée (Dirichlet) est imposée, permettant de maintenir une vitesse de vent maximale au centre de la maille la plus élevée du domaine. Une condition de symétrie est inappropriée dans ce cas, car les flux de chaleur et de quantité de mouvement non nuls créés au niveau du sol vont tendre vers une valeur nulle au sommet. Par conséquent, ce comportement est en désaccord avec la physique de la couche limite de surface (CLS) qui nécessite une constance de l'écoulement avec l'altitude. La Figure 3.3 montre le type de conditions aux limites sur chaque face du domaine.

3.5.1 Profils d'entrée et modèles de turbulence

La présence d'un flux de chaleur variable à la surface terrestre confère à la CLA une dynamique évolutive dans le temps. Cependant, le fait que l'échelle de temps d'un essai (de l'ordre de quelques dizaines de minutes) soit très petite devant l'échelle temps de variation de la CLA (quelques heures selon le cycle diurne) nous permet d'imposer à l'entrée du domaine des conditions stationnaires. Pour ce travail, un ensemble de simulations a été réalisé sur les essais choisis en utilisant le module atmosphérique de Code_Saturne. Le tableau 3.3 représente les profils dynamiques d'entrée ainsi que les modèles utilisés pour chacune des simulations retenues.

Pour la plupart des essais simulés, l'évolution de $k(z)$ avec l'altitude z est modélisée par une relation mathématique de racine carrée dont les paramètres A_1 et A_2 sont déterminés par une méthode des moindres carrés (Gorlé et al., 2009), comme mentionné dans le chapitre précédent. Les mesures expérimentales auxquelles le profils $k(z)$ est ajusté sont celles prises par trois anémomètres

soniques horizontaux bidimensionnels (2-D) aux niveaux 4, 8 et 16 m à partir d'un mât pneumatique télescopique de 16 m situé à 30,5 m en amont du réseau d'obstacles. Le profil d'entrée de la dissipation turbulente est ensuite déduit du lissage de $k(z)$. Les valeurs de A_1 et A_2 , obtenues pour chaque essai, sont indiquées dans le tableau 3.4.

TABLE 3.3 – Profils d'entrée et modèles de turbulence utilisés pour toutes les simulations sur les essais sélectionnés de l'expérience MUST.

N° Essai	Condition de stabilité	de	Profils de vitesse	de	Profils de température	de	Profils de turbulence	Modèles de turbulence	Modèles des flux scalaires turbulents
2671934	Très stable		Eqn (2.35)		Eqn (2.38)		Eqn (2.41 & 2.42)	$k-\varepsilon$ [DU88]	SGDH
			Eqn (2.37)				Eqn (2.39 & 2.40)	$R_{ij}-\varepsilon$ [SA13]	
2672033	Fortement stable		Eqn (2.35)		Eqn (2.38)		Eqn (2.41 & 2.42)	$k-\varepsilon$ [DU88]	SGDH
			Eqn (2.37)				Eqn (2.39 & 2.40)	$R_{ij}-\varepsilon$ [SA13]	
2681829	Neutre		Eqn (2.33)		Eqn (2.38)		Eqn (2.39 & 2.40)	$k-\varepsilon$ [DU88]	SGDH
								$R_{ij}-\varepsilon$ [LA75]	
2692157	Faiblement stable		Eqn (2.33)		Eqn (2.38)		Eqn (2.39 & 2.40)	$k-\varepsilon$ [DU88]	SGDH
								$R_{ij}-\varepsilon$ [LA75]	
2692157	Faiblement stable		Eqn (2.36)		Eqn (2.38)		Eqn (2.41 & 2.42)	$R_{ij}-\varepsilon$ [SA13]	GGDH
2692157	Faiblement stable		Eqn (2.35)		Eqn (2.38)		Eqn (2.41 & 2.42)	$R_{ij}-\varepsilon$ [SA13]	DFM

Quant aux modèles de turbulence utilisés pour les simulations, le modèle $k-\varepsilon$ est appliqué avec l'approche SGDH. En outre, le modèle $R_{ij}-\varepsilon$ est appliqué avec les approches SGDH et GGDH ainsi qu'avec le modèle DFM.

L'essai N°2692157 a été choisi pour évaluer les performances de différents modèles algébriques pour la modélisation du flux scalaire. Pour chaque modèle de turbulence utilisé, nous avons effectué de nombreuses simulations en modifiant la paramétrisation des profils dynamiques (vitesse du vent et variables turbulentes) à l'entrée du domaine à chaque fois. Les combinaisons qui donnent les meilleurs résultats de prédiction sont présentées dans cette étude (Tableau 3.3). Par exemple, le profil de Businger et al. (1971) est appliqué avec les modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$ (tous deux avec SGDH). Les profils de Na et al. (2009) et Gryning et al. (2007) sont appliqués avec le modèle $R_{ij}-\varepsilon$ (avec GGDH et DFM, respectivement). Quant aux variables turbulentes, elles sont calculées à partir des

profils de Gorlé et al. (2009) pour les modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$ (tous deux avec SGDH), et à partir des profils de Kerschgens et al. (2000) pour le $R_{ij}-\varepsilon$ (avec GGDH et DFM). Dans ce qui suit, l'analyse des résultats de la simulation sera basée uniquement sur les modèles de turbulence utilisés dans chaque simulation.

Remarques :

- Indépendamment du type de modèle de turbulence (isotrope ou anisotrope) utilisé dans les simulations, les profils d'entrée de turbulence météorologique décrivent l'évolution de l'énergie cinétique de manière isotrope avec l'altitude. En d'autres termes, dans le cas du modèle $R_{ij}-\varepsilon$, seules les composantes diagonales des tenseurs R_{ij} sont prises en compte pour construire l'énergie cinétique turbulente (ECT), tandis que les autres termes sont considérés comme nuls. Nous supposons que cette hypothèse est raisonnable pour des applications opérationnelles.
- Pour les essais impliquant des conditions atmosphériques stables, le flux turbulent thermique est toujours modélisé en utilisant l'hypothèse SGDH, tandis que le flux turbulent de concentration est modélisé à l'aide de différents modèles algébriques (SGDH ou GGDH) ou de l'équation de transport scalaire de concentration (modèle DFM). Par conséquent, seule l'influence du modèle du point de vue de la dispersion est étudiée, en mettant l'accent sur le scalaire passif, et l'étude exclut l'influence du flux turbulent thermique.

3.5.2 Condition de rejet

En ce qui concerne la condition de rejet, le polluant est injecté par un terme source scalaire. Dans la cellule d'injection, le débit de polluant en $\text{L}\cdot\text{min}^{-1}$ (Tableau 3.1) est imposé pour les essais étudiés.

3.6 Aspects numériques

Les simulations sont effectuées en mode stationnaire afin de résoudre le champ de vent et la dispersion dans le domaine. Ainsi, deux calculs ont été mis en place. Le premier calcul sert à déterminer le champ dynamique, c'est-à-dire uniquement l'écoulement du vent. Une fois le régime stationnaire atteint, ce calcul est arrêté. Le second calcul sert à calculer la dispersion des polluants, au sein de cet écoulement de vent pré-calculé. Ainsi, le second calcul se fait sur la base du redémarrage du premier calcul, à champs de vitesse, pression et température figés. Pour assurer la convergence des résultats, la précision du solveur est fixée à 10^{-4} pour toutes les variables calculées. Le schéma numérique spatial pour chaque variable (*convection scheme*) est réglé automatiquement par le solveur. L'algorithme SIMPLE est utilisé pour le couplage pression-vitesse avec une réduction du coefficient de relaxation.

TABLE 3.4 – Valeurs des constantes A_1 et A_2 obtenues en ajustant les profils de k et ε aux mesures expérimentales pour les essais étudiés.

N° Essai	Condition de stabilité	A_1	A_2
2671934	Très stable	$3,71 \times 10^{-2}$	$-4,34 \times 10^{-2}$
2672033	Fortement stable	$-9,18 \times 10^{-5}$	$3,39 \times 10^{-3}$
2681829	Neutre	$-1,95 \times 10^{-1}$	1,52
2692157	Faiblement stable	$-1,21 \times 10^{-2}$	$1,56 \times 10^{-1}$

3.7 Analyse des résultats

3.7.1 Comparaison entre les modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$: champ dynamique en condition neutre

La figure 3.5 illustre les champs de vitesse et d'ECT obtenus à l'aide des modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ à $z = 4m$. La figure 3.6 montre les champs de vitesse latérale et d'énergie cinétique turbulente, obtenus avec les modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ à $x = 130m$. Nous constatons que la présence des conteneurs influence considérablement l'écoulement, même à des hauteurs supérieures à la hauteur d'un conteneur ($H = 2,54$ m). La grille des conteneurs agit comme une surface rugueuse, provoquant une décélération de l'écoulement en aval et amplifiant la génération de turbulences par le cisaillement de l'écoulement moyen et l'interférence du sillage produit derrière chaque conteneur.

En comparant les deux modèles de turbulence, nous remarquons que le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ génère des niveaux de turbulence relativement faibles dans le champ proche de la grille de conteneurs ainsi que dans le champ lointain (3.6b). L'analyse des résultats numériques pour le champ dynamique a également permis de visualiser les phénomènes de recirculation dans l'écoulement que les deux modèles ($k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$) parviennent à capturer à l'arrière des conteneurs. Cependant, la longueur de la recirculation ainsi que la taille des bulbes de recirculation sont plus importantes avec le modèle $k - \varepsilon$ (résultat non montré ici).

Les figures 3.7 et 3.8 montrent les profils de vitesse et d'ECT, respectivement, sur les mâts A, D, et T. Sur les mâts A et D, les profils de vitesses et d'ECT sont sensiblement identiques entre les modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ et en accord avec les points de mesures expérimentales disponibles. Le pic de production de l'ECT à quelques mètres au-dessus de la canopée est cohérent avec les contours de l'ECT observés dans la figure 3.6b, pour les deux modèles de turbulence. Cependant, le faible nombre de points de mesure (deux) ne permet pas de garantir une bonne corrélation entre les profils numériques et expérimentaux sur toute la hauteur du domaine de calcul. Sur le mât central pour lequel on dispose de quatre points de mesure, nous observons une surestimation de la vitesse par les modèles numériques et une sous estimation de l'ECT par rapport aux données expérimentales.

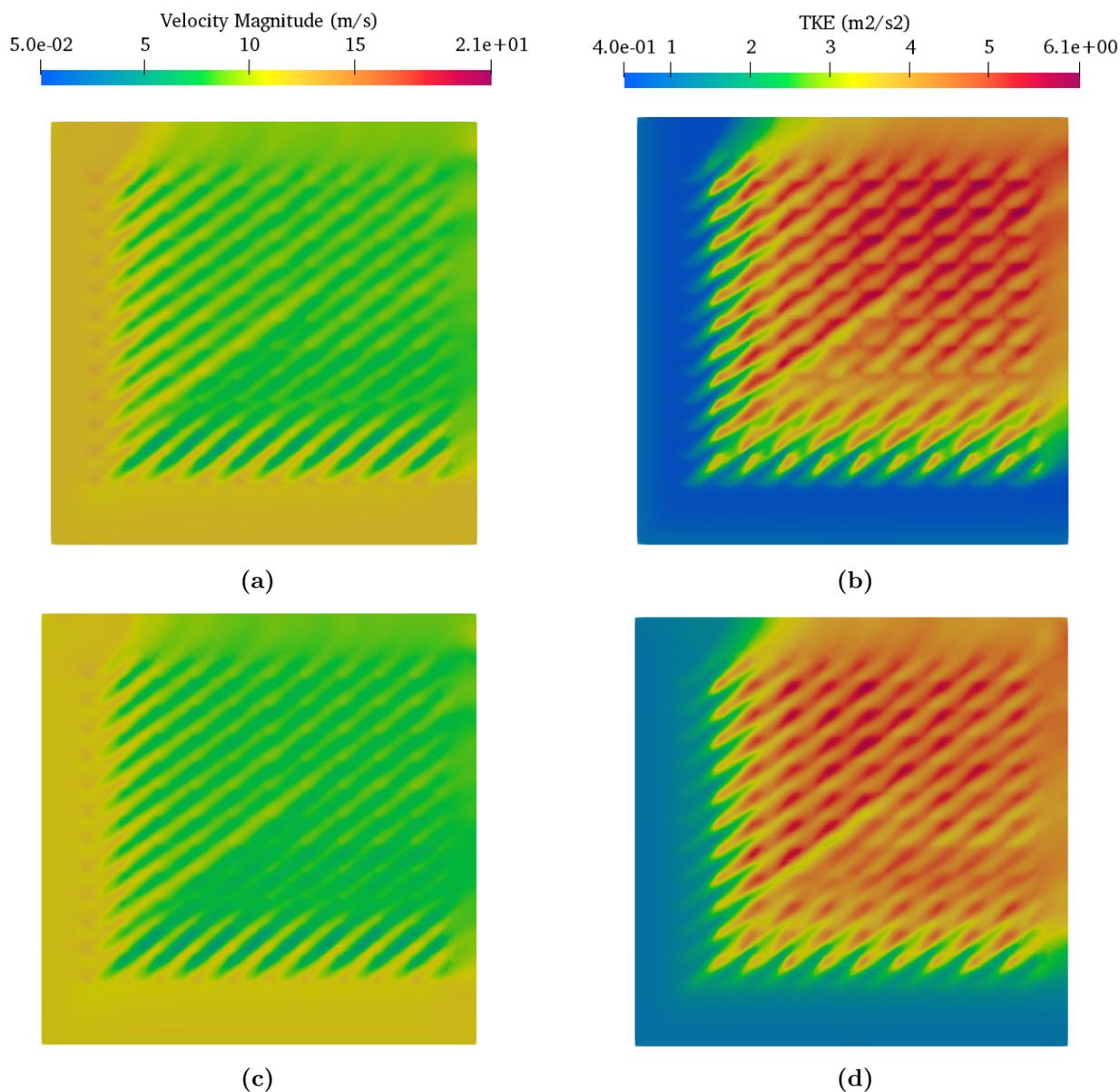


FIGURE 3.5 – Champs de vitesse du vent horizontal (gauche) et d'ECT(droite) à $z = 4m$ pour l'essai de stabilité atmosphérique neutre N°2681829 en utilisant le modèle $k-\varepsilon$ (a, b) et le modèle $R_{ij}-\varepsilon$ (c, d).

3.7.2 Comparaison entre les modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$: champ de polluant en condition neutre

Le rejet du polluant dans cet essai provient d'une source de 1,8 m de haut avec un débit de 225 L.min⁻¹. La figure 3.9 représente le champ de concentration du polluant à 1,6 m au-dessus du sol pour les modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$. D'un point de vue purement qualitatif, nous avons noté un impact mineur du modèle de turbulence sur la dispersion des polluants. Le panache décrit par le modèle $k-\varepsilon$ apparaît légèrement plus large que celui prédit par le modèle $R_{ij}-\varepsilon$. Cette distinction est principalement due à la légère surestimation de l'ECT par le modèle $k-\varepsilon$, comme le montre la figure 3.8. Comme les fluctuations turbulentes sont plus importantes, le flux de concentration

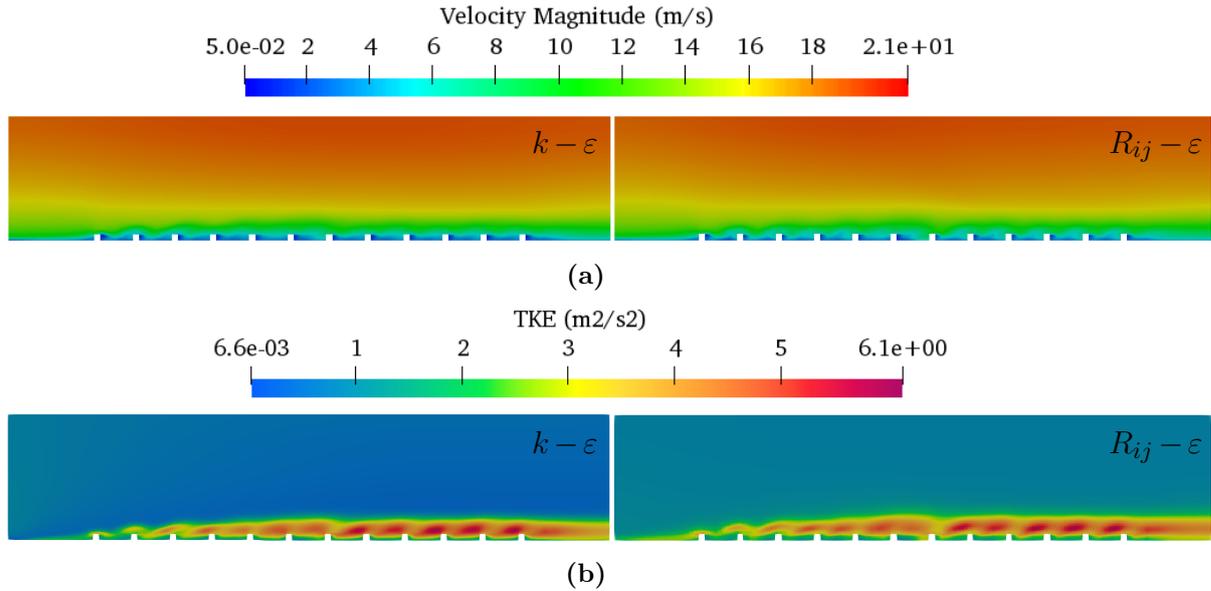


FIGURE 3.6 – Champs dynamiques latéraux à $x = 130m$ (a) vitesse du vent et (b) énergie cinétique turbulente pour le test de stabilité atmosphérique neutre N°2681829 avec les modèles $k-\varepsilon$ (gauche) et $R_{ij}-\varepsilon$ (droite).

turbulente est également plus important. On observe donc un panache plus étendu avec le modèle $k-\varepsilon$. Nous pouvons également noter que la ligne directrice du panache ne coïncide pas avec la direction du vent (-41° par rapport à l'axe x). Ceci est dû à la présence d'un effet de canalisation imposé par les conteneurs sur le panache, le faisant dévier de la direction du vent. Ce phénomène de déviation du panache a également été observé par M. Bahlali et al. (2019), Kumar et al. (2015) et Milliez et Carissimo (2007) qui l'expliquent par l'effet de canalisation que les conteneurs imposent au panache, le faisant ainsi dévier de la direction du vent. En d'autres termes, le rapport d'aspect (longueur-largeur) des conteneurs influence également la dispersion du panache.

En revanche, la figure 3.10 montre le profil de concentration sur l'ensemble des 48 capteurs, les huit derniers (41 à 48) étant placés verticalement sur le tour central. Pour les deux modèles, nous observons un pic de concentration principal mesuré au niveau du capteur 8, suivi de quatre pics secondaires enregistrés par les capteurs placés dans la direction du panache. Au fur et à mesure que le panache s'éloigne de la source, il est diffusé et sa concentration diminue. C'est la raison pour laquelle la concentration au niveau des pics secondaires évolue de manière décroissante. Ce phénomène est également observé dans l'expérience, mais avec un pic principal situé plutôt au niveau du capteur 9, suivi de quatre pics secondaires. La correspondance entre les résultats numériques et expérimentaux est globalement satisfaisante pour la position des pics. Cependant, on peut noter que la sous-estimation de la concentration augmente avec la distance de la source.

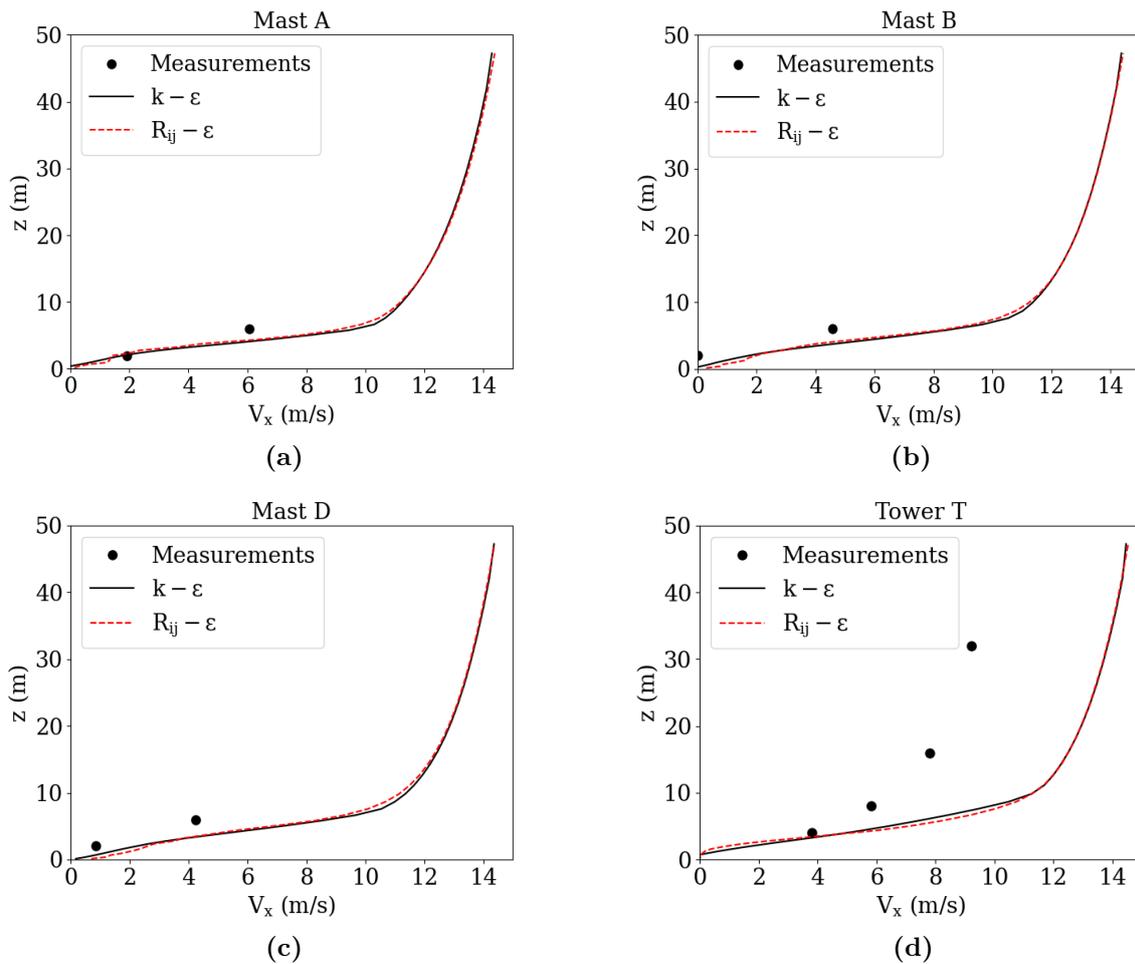


FIGURE 3.7 – Comparaison entre la vitesse observée et celle calculée à l’aide des modèles $k-\epsilon$ et $R_{ij}-\epsilon$ pour le cas neutre N°2681829 à la position du (a) Mât A (b) Mât B (c) Mât D et (d) Tour T.

3.7.3 Evaluation des modèles anisotropes pour le cas stable

3.7.3.1 Champ dynamique

La figure 3.11 montre les profils de vitesse calculés à différents mâts à l’aide du code CFD et comparés aux observations expérimentales. Nous remarquons que les profils de vitesses aux mâts varient très peu lorsqu’on fait varier les profils d’entrée de vitesse et de turbulence. Cependant, la modification des modèles de turbulence entraîne des variations des profils de vitesses plus perceptibles notamment dans les cinq premiers mètres au-dessus du sol, où le modèle $R_{ij}-\epsilon$ ressort une variation du signe du gradient vertical de vitesse. Ce modèle étant anisotrope, il est plus à même de rendre compte des phénomènes physiques présents en proche paroi (sol et conteneurs). Mais à cause du faible nombre de mesures expérimentales entre 0 et 6 mètres du sol, il n’est pas possible de savoir si ce changement du signe du gradient capté par le modèle $R_{ij}-\epsilon$ traduit effectivement la réalité de l’expérience.

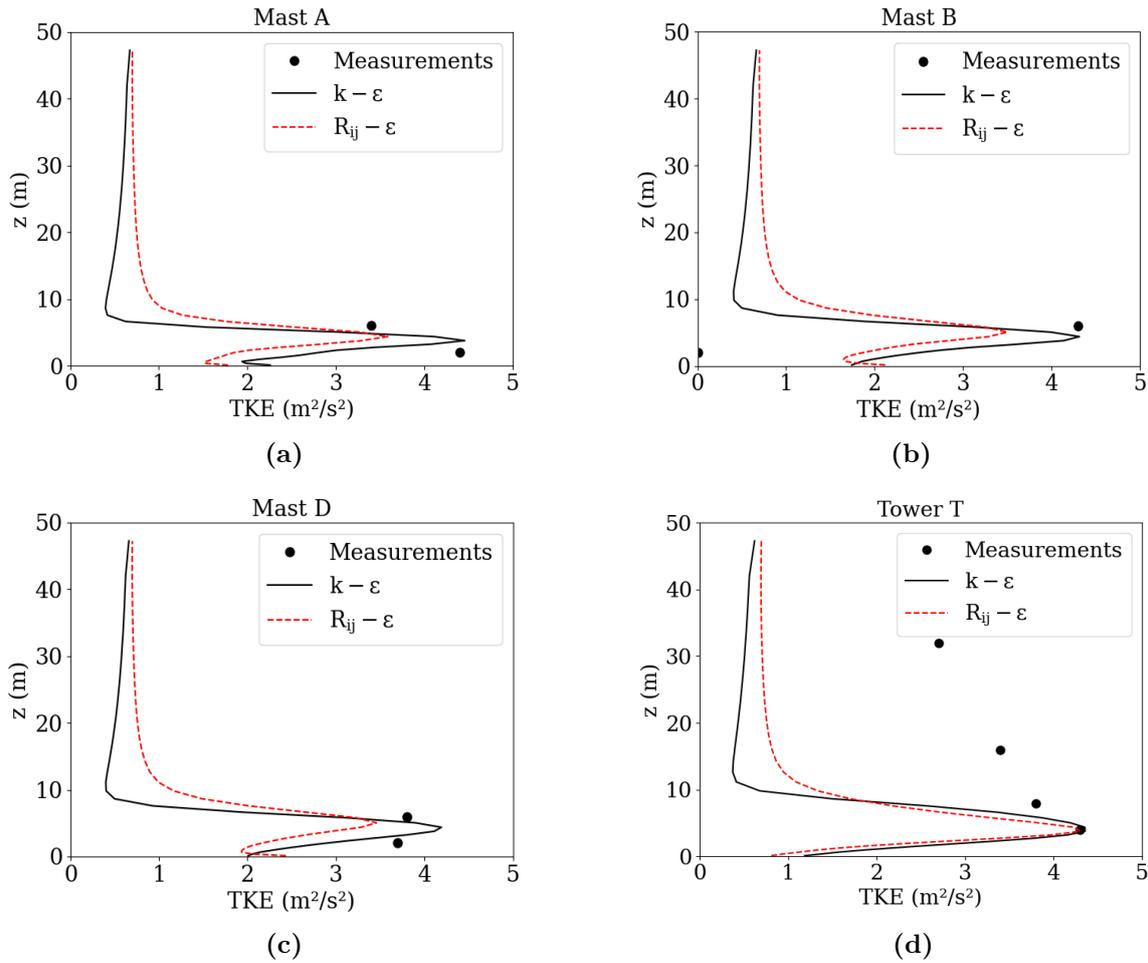


FIGURE 3.8 – Comparaison entre l’ECT observée et celle calculée à l’aide des modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$ pour le cas neutre N°2681829 à la position du (a) Mât A (b) Mât B (c) Mât D et (d) Tour T.

La figure 3.12 montre les profils d’ECT calculés à différents mâts à l’aide du code CFD, en comparaison avec les mesures expérimentales. Un premier constat peut être fait sur l’allure des profils qui est sensiblement la même, d’un point de vue qualitatif. Les profils montrent la présence de trois grandes zones dans l’écoulement :

- De 0 m à environ 5 m du sol (presque 2 fois la hauteur des containers) : Le gradient vertical d’ECT est positif, la turbulence est générée par cisaillement de l’écoulement sur les parois du sol et des containers, c’est donc une zone de production de la turbulence.
- De 5 m à 20 m : Le gradient vertical d’ECT est négatif, l’énergie cinétique turbulente diminue progressivement sous l’action de la viscosité de l’air. C’est donc une zone de dissipation de l’ECT.
- De 20 m à 50 m : Le gradient vertical d’ECT est très faible (quasiment nul dans certains cas). La production et dissipation de la turbulence se compensent mutuellement, la turbulence est en équilibre.

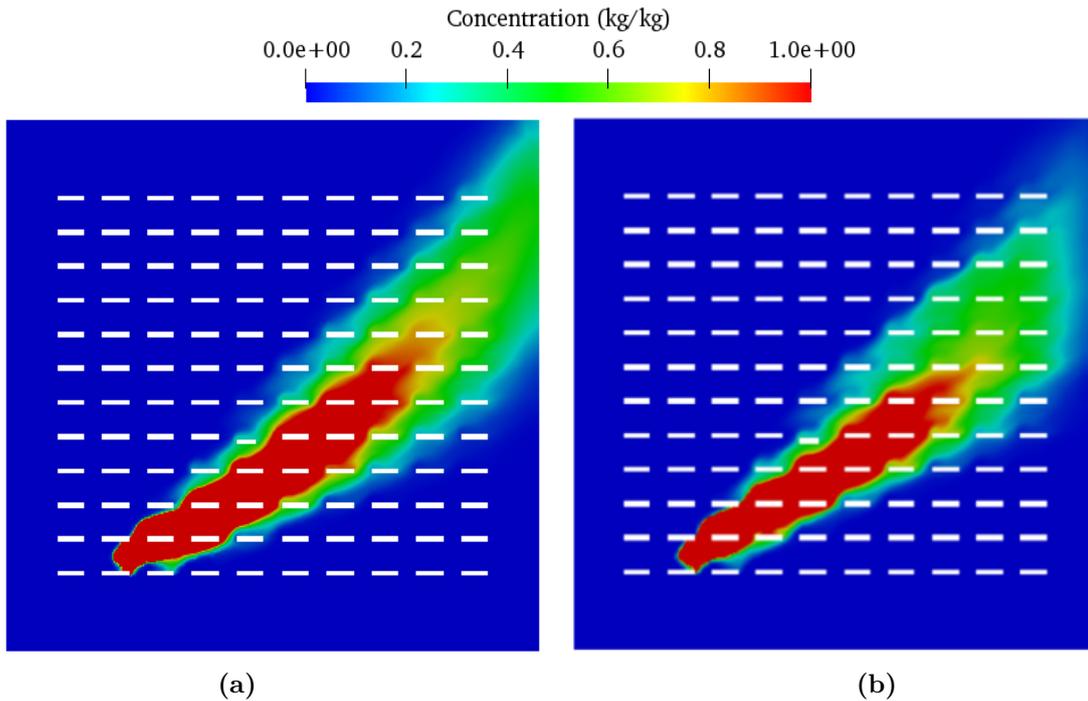


FIGURE 3.9 – Champ de concentration moyenne de polluant (kg/kg) à $z = 1.6m$, avec les modèles (a) $k - \varepsilon$ (b) $R_{ij} - \varepsilon$ (avec SGD) pour l'essai N°2681829.

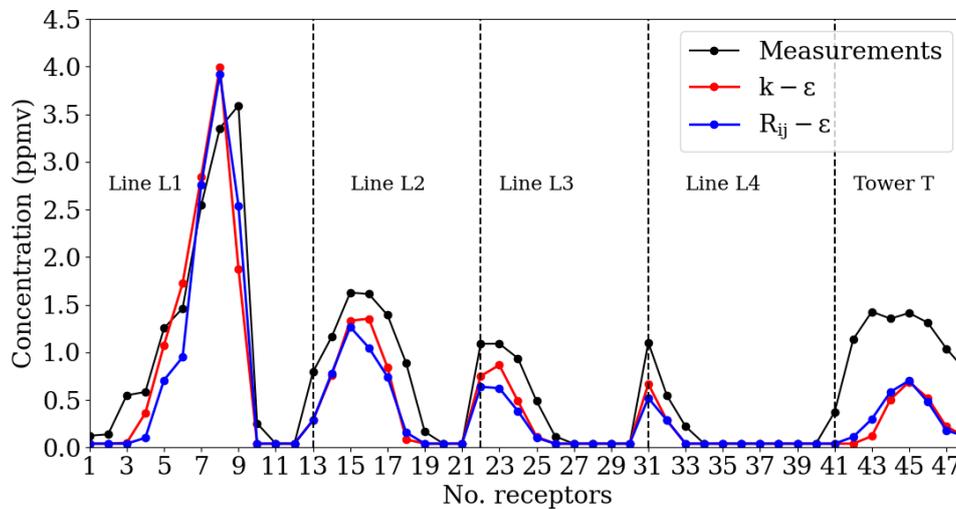


FIGURE 3.10 – Comparaison entre le profil de concentration observé et celui calculé à l'aide des modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ sur l'ensemble des capteurs PID pour l'essai N°2681829.

Par ailleurs, nous remarquons que le modèle $k - \varepsilon$ a tendance à prédire une surproduction de la turbulence. Pour ce modèle, le pic de turbulence sur tous les mâts est le plus élevé ainsi que le gradient vertical d'ECT dans la zone de production (pente plus forte que celle du modèle $R_{ij} - \varepsilon$). Ce résultat permet de mettre en évidence la difficulté du modèle $k - \varepsilon$ à prédire l'anisotropie de la turbulence. Le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ étant anisotrope, prend mieux en compte la présence du sol et des containers et permet d'obtenir un profil d'ECT qui se rapproche des mesures expérimentales.

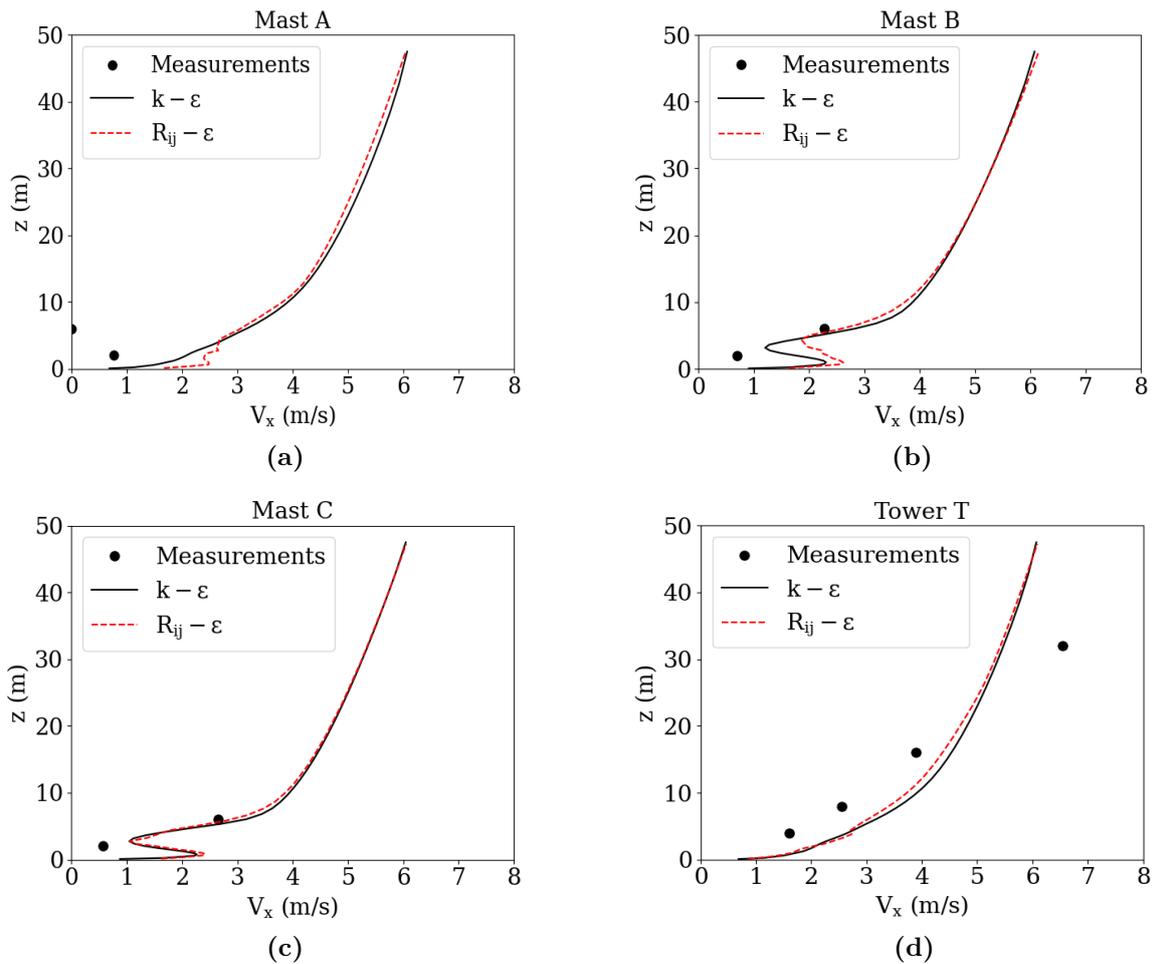


FIGURE 3.11 – Comparaison entre la vitesse observée et celle calculée à l’aide des modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$ pour le cas stable N°2692157 à la position du (a) Mât A (b) Mât B (c) Mât C et (d) Tour T.

3.7.3.2 Champ de dispersion

La figure 3.13 montre le champ de concentration moyen prédit à 1,6 m au-dessus du sol avec les modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$. Il est à noter que la taille du panache est nettement plus importante lorsque l’on utilise le modèle $k-\varepsilon$, sauf dans le cas du modèle $R_{ij}-\varepsilon$ combiné au modèle DFM. Ceci peut être expliqué par le fait que le modèle $k-\varepsilon$ prédit une surproduction de turbulence (figure 3.12) proche du sol qui augmente le flux de transport turbulent et conduit ainsi à une plus grande diffusion latérale du polluant sur l’étendue de la grille. Comme dans le cas de la stratification neutre, nous observons que la ligne directionnelle du panache ne coïncide pas avec la direction du vent (43° du l’axe x).

La figure 3.14 montre la comparaison entre les concentrations observées et prédites au niveau des récepteurs en utilisant différents modèles de turbulence. Nous observons un pic principal suivi de quatre pics secondaires. Nous constatons également que l’intensité de la concentration au pic principal (7 ppmv) est environ deux fois plus élevée que le pic principal observé dans l’essai N°2681829

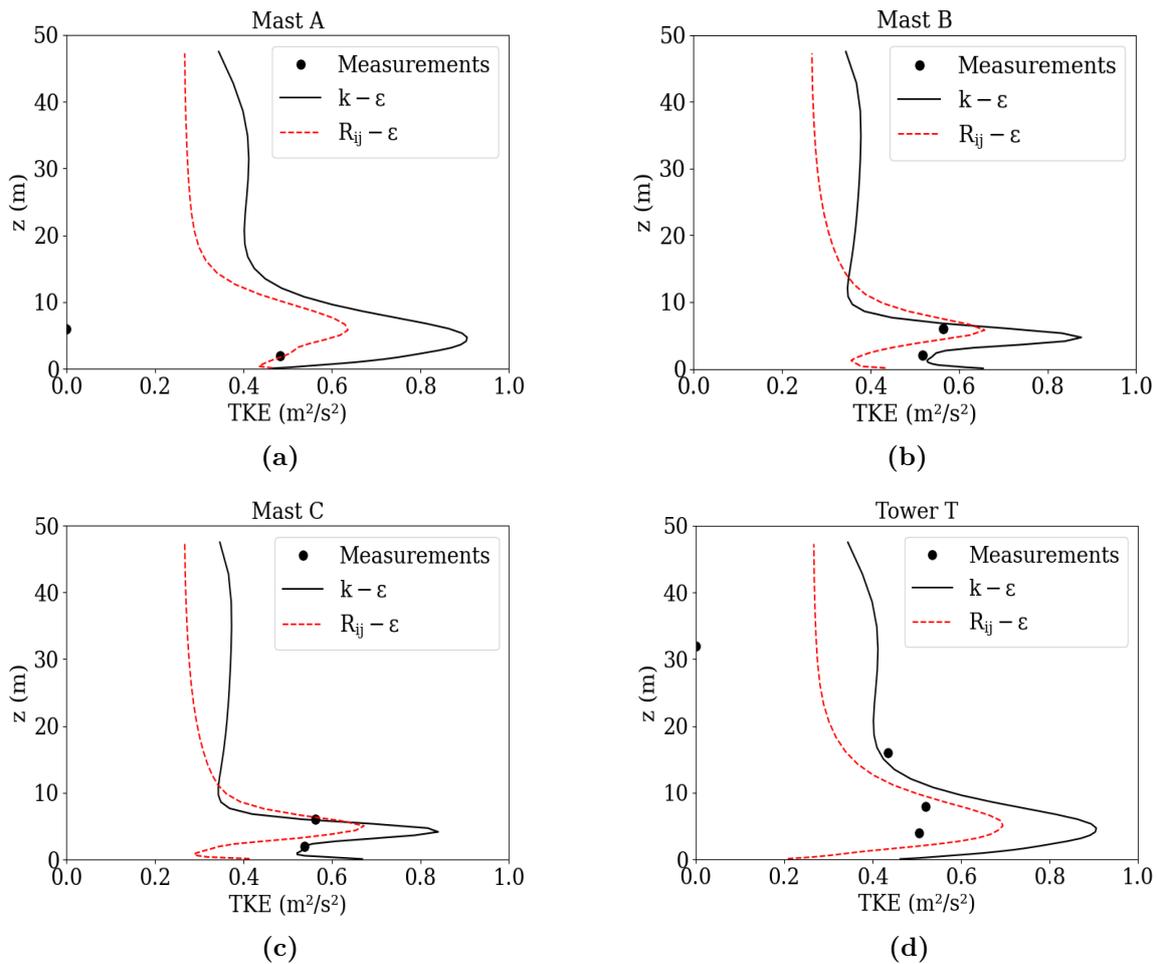


FIGURE 3.12 – Comparaison entre l’ECT observée et celle calculée à l’aide des modèles $k-\epsilon$ et $R_{ij}-\epsilon$ pour le cas stable N°2692157 à la position du (a) Mât A (b) Mât B (c) Mât C et (d) Tour T.

avec une condition de stabilité neutre (3,5 ppmv). Cette augmentation de la concentration est principalement due aux conditions atmosphériques dans lesquelles l’essai a été mené. Comme l’essai N°2692157 a été réalisé dans des conditions atmosphériques modérément stables, la génération de turbulence est atténuée par la stratification thermique de l’CLA, ce qui réduit le transport turbulent du polluant ; les concentrations sont donc localement plus élevées. Nous observons également dans ce cas une bonne correspondance entre les résultats numériques et les mesures concernant la position des pics.

Quant à la magnitude du pic le plus élevé, tous les modèles utilisés la surestiment, sauf le modèle $R_{ij}-\epsilon$ (avec GGDH) qui est le seul à prédire la concentration maximale mesurée par le troisième capteur. Par contre, en s’éloignant de la source, ce même modèle semble sous-estimer la concentration le plus parmi les autres modèles. En général, les prédictions obtenues par tous les modèles sont proches des mesures expérimentales lorsqu’on s’éloigne de la source.

Par ailleurs, aucun modèle n’est capable de reproduire correctement le profil vertical de concentration (profil correspondant aux récepteurs 41 à 48).

L'évaluation statistique porte sur les concentrations mesurées pour 40 récepteurs répartis le long de quatre lignes d'échantillonnage, ainsi que pour huit récepteurs supplémentaires situés sur la tour centrale T, et sur les concentrations moyennes correspondantes prévues par les simulations. Les mesures de performance calculées dans cette étude sont les erreurs quadratiques moyennes normalisées (NMSE), le biais fractionnaire (FB), le coefficient de corrélation (COR), le biais géométrique moyen (MG), la variance géométrique (VG) et le facteur de précision fractionnaire 2 (FAC2), qui est la fraction des prédictions se situant dans un facteur de deux par rapport aux mesures sur le terrain. Les résultats de l'étude statistique permettant d'évaluer la précision de chaque modèle sont présentés dans le tableau 3.5. Toutes les valeurs de FB sont positives, ce qui indique que tous les modèles ont en moyenne tendance à sous-prédire la concentration, le modèle $k-\varepsilon$ étant le modèle le moins sous-prédictif. L'examen des valeurs MG dans le tableau 3.5 montre qu'aucun modèle ne parvient à satisfaire le critère d'acceptation, le modèle $k-\varepsilon$ étant le plus proche de la plage tolérable. Il en va de même pour les valeurs VG. Quant aux valeurs NMSE, elles se situent toutes dans la plage acceptée. Par conséquent, tous les modèles donnent de bons résultats pour les indicateurs statistiques linéaires (FB et NMSE), mais semblent avoir un biais systématique à de faibles concentrations sur la base des valeurs pour les indicateurs statistiques logarithmiques (MG et VG). Tous les modèles réussissent à avoir plus de 50% de la concentration dans un facteur de deux (FAC2) des observations. Le modèle $k-\varepsilon$ est le plus performant avec 75% des prédictions dans un facteur de deux des observations. Quant au modèle $R_{ij}-\varepsilon$, il est nettement moins performant avec environ 63%, 60% et 69% avec les modèles SGD, GGDH et DFM, respectivement.

Enfin, de bonnes corrélations biunivoques peuvent être observées pour tous les modèles à travers les valeurs élevées du coefficient de corrélation, dont la plus élevée est pour le modèle $R_{ij}-\varepsilon$ (avec GGDH et DFM) ($COR = 0.92$). En comparant les modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$, nous constatons que le second, dit anisotrope, n'améliore pas forcément les prédictions par rapport au premier, quel que soit le modèle de flux turbulent scalaire auquel il est associé. Cependant, une étude réalisée par M. Bahlali et al. (2019) montre que l'utilisation du modèle $R_{ij}-\varepsilon$ permet une représentation plus physique de l'influence des obstacles sur les profils de concentration. Les trois modèles de corrélation vitesse-scalaire (SGD, GGDH et DFM), lorsqu'ils sont utilisés avec le modèle $R_{ij}-\varepsilon$, obtiennent un score de trois (indiquant que trois mesures statistiques répondent à leurs critères) dans l'évaluation statistique, et par conséquent, les trois modèles peuvent être considérés comme retenus. L'hypothèse GGDH, qui utilise le tenseur des contraintes de Reynolds, n'améliore pas les prédictions par rapport au modèle SGD isotrope (FAC2 plus faible et davantage de sous-prédictions). En fait, le modèle GGDH est obtenu en considérant des hypothèses d'équilibre faible ($\frac{D\overline{U}_i'\theta'}{Dt} = 0$) et d'équilibre dynamique et thermique de la turbulence, par rapport au modèle DFM. De plus, les termes de production dus au gradient de vitesse $\overline{U}_j'\theta'\frac{\partial\overline{U}_i}{\partial x}$ et à la flottabilité $g_i\overline{\Theta}'^2$ (se référer à l'Équation 2.26) sont supprimés dans la formulation de Daly et Harlow (1970). Ce modèle n'est pas adapté aux écoulements avec convection naturelle et flottabilité, et ne donne pas de résultats satisfaisants dans le cas d'une stratification très forte (Dehoux, 2012a). Par analogie, cela s'applique également aux écoulements atmosphériques sous stratification stable.

Le modèle DFM, en revanche, est plus adapté aux flux atmosphériques stratifiés et donne de

meilleurs résultats que le modèle GGDH (moins de sous-prédictions). adéquate pour les flux atmosphériques stratifiés et donne de meilleurs résultats que le modèle GGDH (moins de sous-prédiction et FAC2 plus élevé). Ceci est probablement dû à la présence d'un terme de gravité avec une variance scalaire dans l'équation de transport de la turbulence de scalaire .

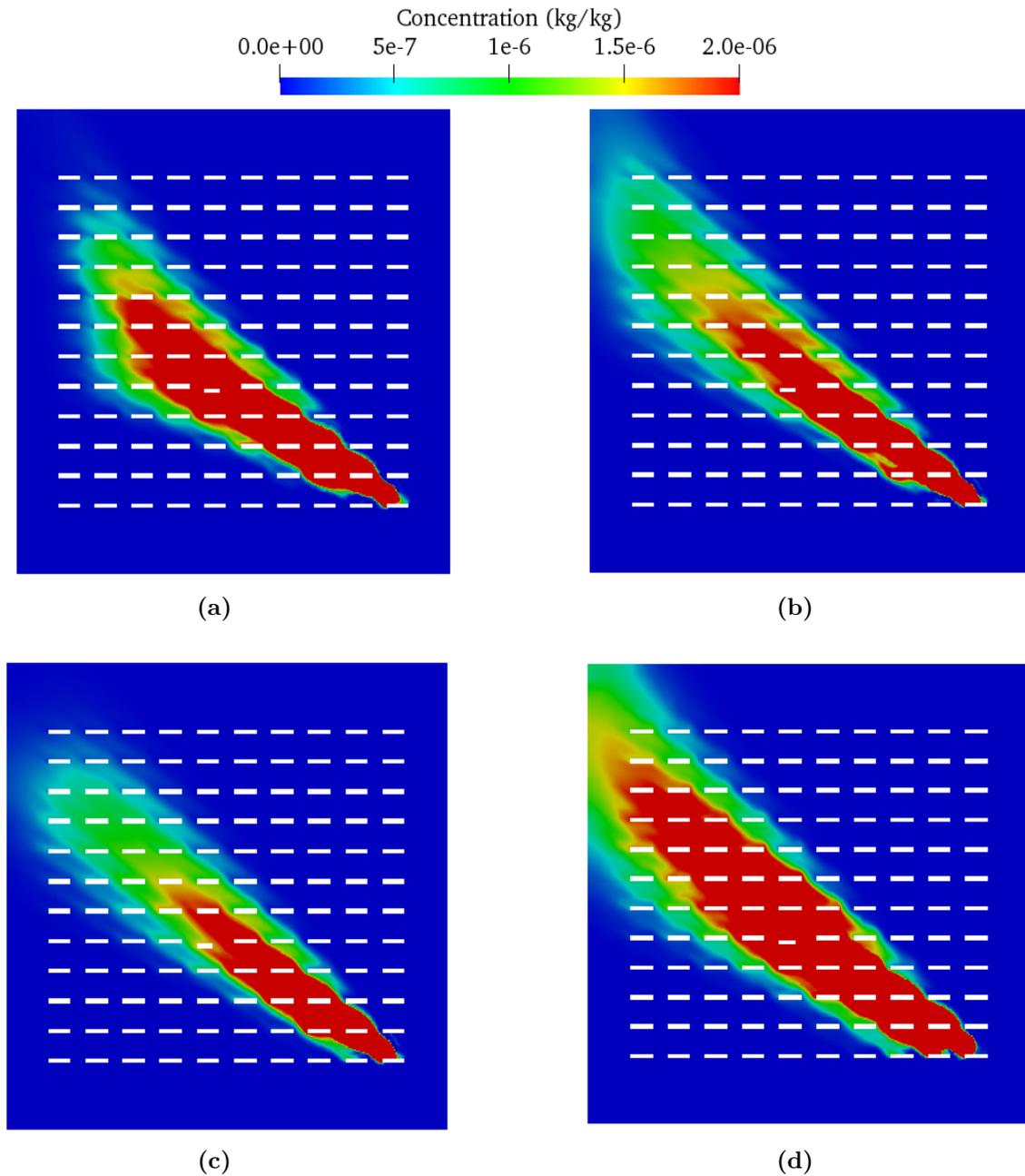


FIGURE 3.13 – Champ de concentration moyenne de polluant (kg/kg) à $z = 1.6m$, avec les modèles (a) $k-\varepsilon$ (avec SGDh) (b) $R_{ij}-\varepsilon$ (avec SGDh) (c) $R_{ij}-\varepsilon$ (avec GGDH) et (d) $R_{ij}-\varepsilon$ (avec DFM) pour l'essai N°2692157.

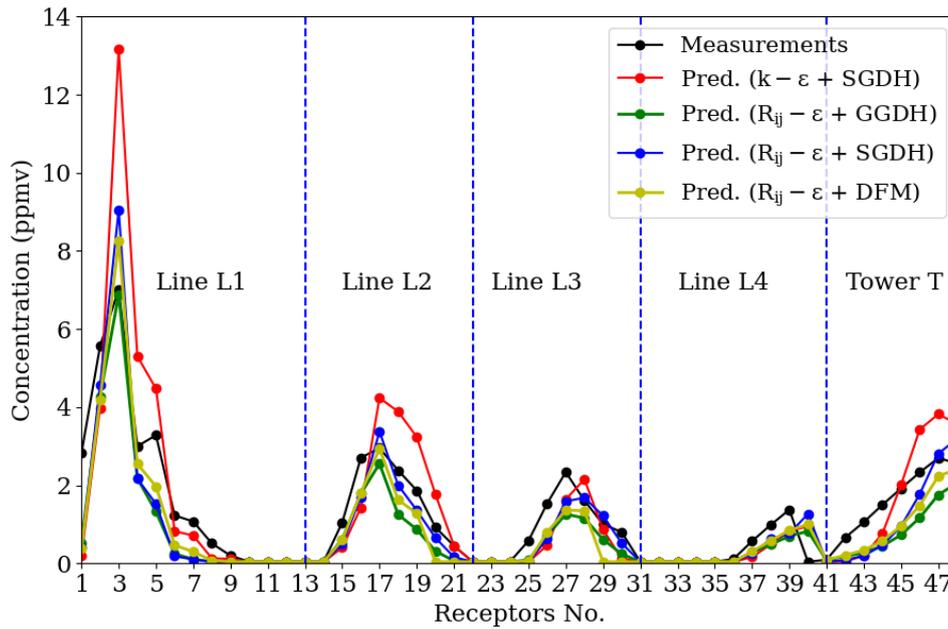


FIGURE 3.14 – Comparaison entre le profil de concentration observé et celui calculé à l’aide des modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$ sur l’ensemble des capteurs PID pour l’essai N°2692157.

3.8 Performance globale des modèles

3.8.1 Évaluation quantitative des modèles de Code_Saturne

Dans cette section, nous présentons une étude d’évaluation statistique du modèle pour l’ensemble des essais sélectionnés. La figure 3.15 montre les diagrammes de dispersion des concentrations observées et prédites à l’aide des modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$. Le tableau 3.6 présente les valeurs des indicateurs statistiques évalués pour tous les essais avec les modèles $k-\varepsilon$ et $R_{ij}-\varepsilon$.

En général, le modèle CFD sous-estime les observations, cette sous-estimation étant légèrement plus prononcée lorsque le modèle anisotrope est utilisé. Cette sous-estimation est illustrée par les valeurs de FB dans le tableau 3.6 et est clairement mise en évidence dans la figure 3.15 qui montre que le nuage de points tend à s’étaler en dessous de la zone acceptable de FAC2.

Au regard des indicateurs statistiques présentés dans le tableau, nous pouvons dire que les calculs numériques effectués modélisent avec une bonne précision (corrélation supérieure à 0,8) les phénomènes physiques présents au cours de ces essais expérimentales. Quant aux valeurs moyennes de MG et VG, elles dépassent les marges acceptables quel que soit le modèle de turbulence utilisé. Cependant, leurs valeurs restent proches du seuil lorsqu’un $k-\varepsilon$ est utilisé. Le modèle $R_{ij}-\varepsilon$, bien qu’étant un modèle de second ordre, ne présente pas de différences significatives avec le modèle $k-\varepsilon$ (de premier ordre) dans la modélisation de la dispersion pour ce test. Les deux modèles obtiennent un score de 3, ce qui signifie que le critère pour seulement trois des six mesures statistiques est

satisfait.

L'analyse des résultats des essais stables, en particulier les deux essais N°2671934 (avec une longueur de Monin-Obukhov $L=5,8$ m) et N°2672033 ($L=4,8$ m), permet de faire plusieurs observations :

- Pour l'essai N°2671934, aucun modèle de turbulence n'est capable de prédire parfaitement la position et l'amplitude des pics, même si la forme du profil de concentration à la position des 48 capteurs est similaire à celle observée dans l'essai (profil non montré ici). Par conséquent, aucun modèle utilisé ne permet d'atteindre des performances acceptables (score ≥ 3). Globalement, un décalage de la position des pics et une sous-estimation de la concentration mesurée par les capteurs sont observés à travers ce profil, comme le montre la figure 3.15. Ce décalage des valeurs de concentration n'est pas détecté avec l'essai N°2672033 bien qu'il présente une stabilité atmosphérique plus stable que celle caractérisant l'essai N°2671934. Or, ce dernier s'est déroulé en présence de vent à une vitesse (1,6 m/s) inférieure à celle du premier (2.69 m/s) à l'entrée du domaine. Ce constat confirme les conclusions de (Degrazia et al., 2011) selon lesquelles les modèles de dispersion RANS eulériens ne sont pas adaptés aux conditions atmosphériques très stables pour deux raisons principales : (i) ces modèles ont des limites en termes de modélisation lorsque la vitesse d'advection dans l'équation de transport approche des valeurs très faibles ($U < 2$ m/s) en raison du phénomène de méandres ; (ii) ces modèles prennent en compte le transport du polluant par convection, diffusion moléculaire et turbulente, mais pas les phénomènes à grande échelle qui sont largement dominants lors des séquences de vents faibles. Ceci peut justifier la forte sous-estimation observée pour les capteurs placés loin de la source .
- Il ressort des prédictions de l'essai N°2672033 que l'utilisation des constantes proposées par (Sadek, 2013) pour le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ (retenues comme résultat) modifie significativement le profil de concentration obtenu avec le modèle standard et permet d'obtenir des résultats plus proches des mesures expérimentales.

TABLE 3.5 – Mesures de performance statistique évaluées pour l'essai N°2692157.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2(%)	COR
$k - \varepsilon + \text{SGDH}$	0,13	1,39	0,37	2,23	75	0,91
$R_{ij} - \varepsilon + \text{SGDH}$	0,27	1,66	0,45	3,3	62,5	0,90
$R_{ij} - \varepsilon + \text{GGDH}$	0,5	1,81	0,59	2,98	60,4	0,92
$R_{ij} - \varepsilon + \text{DFM}$	0,37	1,86	0,45	4,47	68,8	0,92
Fluidyn-Panache	0,2	1,28	0,34	1,5	87,5	0,91

3.8.2 Comparaison avec les résultats numériques du code Fluidyn-Panache

Dans une autre étude, Kumar et al. (2015) ont réalisé une évaluation de l'expérience de terrain MUST avec les résultats de simulation du modèle numérique Fluidyn-Panache (Fluidyn-Panache,

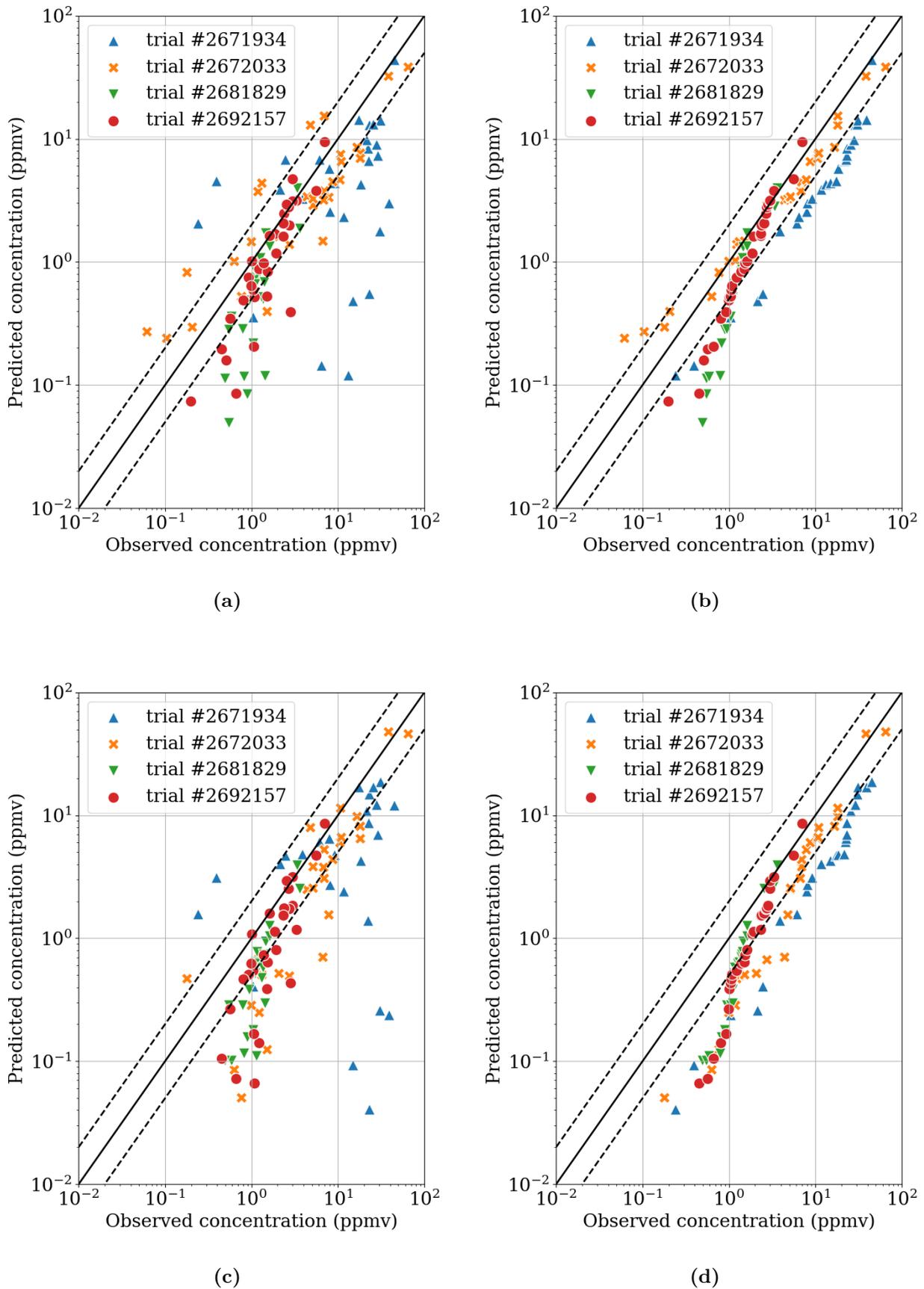


FIGURE 3.15 – Diagrammes de dispersion (à gauche) et diagrammes q-q (à droite) illustrant les concentrations observées et prédites à l'aide du modèle $k - \varepsilon$ (a,b) et du modèle $R_{ij} - \varepsilon$ (c,d) pour les quatre essais.

2010), un modèle d'écoulement tridimensionnel et un modèle de dispersion eulérien. Les 20 essais ont été simulés par (Kumar et al., 2015). De nombreuses combinaisons des profils de vent et de turbulence aux limites du domaine ont été prises en compte pour les simulations.

Le modèle de turbulence utilisé dans les simulations est le modèle isotrope $k - \varepsilon$, qui comprend une valeur modifiée du coefficient $C_{\varepsilon 3}$ pour tenir compte des effets de flottabilité dans des conditions atmosphériques stables. Afin de comparer les résultats de l'évaluation de la présente étude, des mesures statistiques de performance sont calculées pour l'essai N°2692157 (Tableau 3.5) ainsi que pour les 4 essais en moyenne (Tableau 3.6). Seules les combinaisons les plus performantes, c'est-à-dire les simulations ayant le score le plus élevé, sont prises en compte dans cette étude statistique.

Pour l'essai N°2692157, nous constatons que le modèle Fluidyn-Panache offre des prévisions aussi bonnes que le modèle Code_Saturne et que les critères des six indicateurs statistiques sont satisfaits. Cependant, un pourcentage encore plus élevé de concentrations prédites (87.5%) se situe dans un facteur de deux par rapport aux observations (tableau 3.5).

Pour l'ensemble des essais, le modèle Fluidyn-Panache prédit 77,1% des points d'un FAC2 des observations, tandis que le présent modèle simule 61,6%, 58,8% des points d'un FAC2 des observations avec les modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$, respectivement. Quant aux valeurs de FB, seul le modèle Fluidyn-Panache satisfait le critère (0,138) alors que le modèle actuel sous-estime les valeurs de concentration avec une valeur de 0,473 avec le modèle $k - \varepsilon$ et 0,528 avec $R_{ij} - \varepsilon$. Les valeurs de NMSE pour les concentrations simulées au niveau de tous les récepteurs pour les quatre cas sont respectivement de 1,513 et 1,493 avec les modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$. Ces valeurs sont presque 3,75 fois plus élevées que la valeur (0,41) rapportée par (Kumar et al., 2015) avec le modèle Fluidyn-Panache.

TABLE 3.6 – Mesures de performance statistique évaluées pour tous les essais étudiés.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2(%)	COR
Code_Saturne, $k - \varepsilon$	0,473	1,815	1,513	30,92	61,6	0,833
Code_Saturne, $R_{ij} - \varepsilon$	0,528	2,215	1,493	106	58,8	0,835
Fluidyn-Panache, $k - \varepsilon$	0,138	1,118	0,41	1,895	77,1	0,933

3.9 Conclusions

Cette étude présente des simulations 3-D de la dispersion d'un polluant dans des conditions atmosphériques neutres et stables. Le modèle *Code_Saturne* est évalué à l'aide de mesures de concentration obtenues à partir de quatre essais de la campagne expérimentale MUST dans un environnement urbain complexe. Un de ces essais est réalisé dans des conditions neutres, tandis que les autres essais sont réalisés dans des conditions atmosphériques relativement stables à très stables. Les simulations sont effectuées en utilisant deux modèles de turbulence, $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ LRR, et les flux turbulents de scalaires sont évalués à l'aide des modèles algébriques SGDH et GGDH, ainsi que de l'équation de transport scalaire différentiel (DFM). Les analyses qualitative et quantitative montrent que les

performances des modèles sont raisonnablement acceptables en termes de capture de multiples pics de concentration et de distribution de la concentration moyenne horaire.

Les résultats numériques des simulations pour l'essai modérément stable montrent que les modèles de turbulence sous-estiment globalement la concentration moyenne. La comparaison entre les modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ montre que le premier a tendance à générer une surproduction de turbulence près du sol, ce qui se traduit par un panache beaucoup plus étendu. Le modèle isotrope ($k - \varepsilon$) prédit environ 75 % des valeurs de concentration avec un facteur de deux, alors que le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ prédit 62,5 % et 60,4 % lorsqu'il est utilisé avec les modèles SGDH et GGDH, respectivement. L'utilisation de l'équation de transport scalaire différentiel (DFM) pour résoudre les flux turbulents de scalaires améliore les prédictions avec près de 69% des valeurs de concentration dans un facteur de deux (FAC2) des observations. Il offre également une meilleure corrélation avec les mesures expérimentales, par rapport aux modèles algébriques tels que SGDH et GGDH. Indépendamment de son coût de calcul, ce modèle s'avère très approprié pour étudier la dispersion atmosphérique en terrain complexe avec des conditions de stabilité modérée à faible.

Dans tous les cas de simulation, le modèle CFD sous-estime de manière constante les observations. Globalement, lors de l'utilisation du modèle $k - \varepsilon$ isotrope de premier ordre, le modèle CFD prédit un pourcentage légèrement plus élevé de concentrations dans un facteur deux (FAC2) par rapport aux observations. De plus, il est notable que les performances du modèle ont tendance à décliner à des vitesses de vent plus faibles, quel que soit le degré de stabilité atmosphérique.

Pour compléter ces études sur les différents modèles algébriques et sur l'équation de transport scalaire, il s'avère nécessaire de réaliser des études supplémentaires afin d'évaluer plus efficacement ces modèles, notamment dans des conditions atmosphériques extrêmement stables. Il pourrait également être bénéfique d'ajuster finement les différentes constantes utilisées dans la formulation de ces modèles afin d'améliorer leur compatibilité avec les défis liés à la dispersion atmosphérique. Étant donné que nous avons utilisé l'approche du modèle de gradient simple (SGDH) pour représenter le flux turbulent thermique, il serait essentiel d'envisager des tests avec d'autres modèles algébriques ou même l'équation de transport, afin d'évaluer l'impact de l'anisotropie du flux turbulent thermique sur le flux turbulent du scalaire de concentration.

Chapitre 4

État de l'art sur les vents faibles et leur impact sur la dispersion

Résumé du chapitre

Le chapitre commence par fournir une revue bibliographique sur les caractéristiques des conditions de vent faible, ainsi qu'un résumé des principales campagnes et des résultats des modèles traitant de ces conditions. Dans ce chapitre, nous aborderons les questions suivantes :

1. Pourquoi observe-t-on davantage de méandres dans des conditions stables que dans des conditions neutres ou instables ?
2. Comment se manifeste le phénomène de méandres dans la dispersion du panache ?
3. Quelles sont les limites associées aux observations et à l'analyse théorique des conditions de vent faible stable ?
4. Quelles sont les limites des modèles analytiques/semi-analytiques ainsi que des modèles CFD pour prédire le champ de concentration d'une particule polluante dans des conditions de vent faible ?

La deuxième partie du chapitre présente les différentes méthodologies identifiées dans la littérature pour évaluer le problème des prédictions de concentration influencées par l'anisotropie de la turbulence et la variabilité du vent.

4.1 Introduction

Les vents faibles se produisent lorsque la vitesse du vent est inférieure à 2m/s environ. Ils sont associés à une grande stabilité ambiante dans la couche limite nocturne, à une faible turbulence intermittente (J. Sun et al., 2004) dans les niveaux verticaux ainsi qu'à des mouvements sinueux de faible fréquence dans les niveaux horizontaux. (Deaves & Lines, 1998 ; Mahrt, 1998) définissent les conditions de faible vitesse du vent comme les cas où la vitesse moyenne du vent est inférieure ou égale à la moyenne quadratique de l'écart type de la vitesse horizontale de la turbulence. Cela correspond généralement à une vitesse du vent inférieure à 1m/s dans des conditions convectives et à 0.5m/s dans des conditions neutres et stables. Dans des conditions de faible vitesse du vent, la dispersion des polluants est réduite, ce qui entraîne des concentrations atmosphériques plus élevées (Sharan & Modani, 2005 ; Singh, Yadav et al., 1996).

4.2 Contexte historique

Il existe de nombreux ensembles de données dans la littérature, avec et sans rejet de traceur, dans des conditions de champ libre et de soufflerie, avec différents régimes de vent et conditions de stabilité et une géométrie de terrain variable. Sapolin (2011) a répertorié 41 ensembles de données de terrain, comprenant des informations sur les conditions météorologiques, les rejets et le terrain, couvrant une grande variété d'échelles et de configurations (rurales, semi-urbaines, urbaines, plates, montagneuses, marines). De nombreux ensembles de données provenant d'expériences antérieures sur le terrain portant sur la libération de traceurs et la météorologie ont été rassemblés par John Irwin et sont consultables sur le site : www.harmo.org/jsirwin. Ces ensembles de données contiennent plus ou moins des mesures dans des conditions de vent faible. D'autres jeux de données pour les gaz denses et les GNL sont fournis par la fondation NFPA (Ivings et al., 2007 ; Stewart et al., 2016). Ils comprennent cinq expériences de terrain (*Maplin Sands, Burro, Coyote, Falcon et Thorney Island*) et trois séries d'expériences en soufflerie (*CHRC, BA-Hamburg et BA-TNO*) utilisées pour valider les modèles de dispersion du GNL (Ivings et al., 2007 ; Stewart et al., 2016).

En général, Il y a un manque de données expérimentales pour les conditions de faible vitesse du vent, ce qui rend difficile le développement, l'évaluation et l'amélioration des modèles. La majorité des données se présentent sous forme de séquences dans l'ensemble des jeux de données obtenus lors des campagnes expérimentales.

4.2.1 Jeux de données avec rejet de traceur

La plupart des données actuellement utilisées ont été recueillies il y a plus de 40 ans dans le cadre de projets tels que *Prairie Grass, Green Glow, Dry Gulch, Ocean Breeze*, etc. (S. Hanna et al., 1991) et *67-Series* (Nickola, 1977).

De nombreux modèles actuels font référence à l'ensemble de données de l'expérience *Prairie Grass* (Arya et al., 1999; Barad, 1958) comme étant l'une des rares expériences de terrain largement publiées avec des données dans le régime de transport à faible vitesse du vent. Seulement six des essais de rejets dans l'expérience *Prairie Grass* ont été réalisés avec des vitesses de vent inférieures à 2 m/s, et seuls quatre de ces six essais disposent de données valides.

L'expérience de *Idaho Falls* (Sagendorf & Dickson, 1974) fait également référence à une expérience de diffusion d'un gaz neutre largement utilisée et citée. Cette expérience sera largement détaillée dans le chapitre 5.

S. R. Hanna et Chowdhury (2014) ont mentionné l'expérience d'*Oak Ridge* (Wilson et al., 1976) qui est une expérience de terrain menée également à Idaho dans les années soixante-dix. Similaire à l'expérience de *Idaho Falls*, elle implique un rejet ponctuel et continu de traceur passif près du sol (à 1 m de hauteur) avec des conditions stables et des vitesses de vent faibles. Des mesures de concentration ont été réalisées à 100, 200 et 300 m de distance. Contrairement à l'expérience d'*Idaho Falls* qui s'est déroulée sur un terrain relativement plat avec une végétation limitée, l'expérience d'*Oak Ridge* s'est déroulée sur un terrain vallonné avec des variations d'altitude d'environ 30 m et comprenait à la fois des arbres et des zones dégagées. De plus, les vitesses du vent étaient en moyenne trois à quatre fois inférieures à celles d'*Idaho Falls*. Les données d'*Idaho Falls* et d'*Oak Ridge* ont été utilisées pour développer et tester des corrections pour les courbes de dispersion en conditions stables (Wannberg et al., 2010).

Parmi les autres expériences de dispersion en conditions de faible vitesse du vent mentionnées dans la littérature, on trouve l'expérience *Hanford-67* (de l'ensemble de données *67-Series*), menée sur le site de Hanford entre 1967 et 1968. Cette expérience consistait à libérer en continu du sulfure de zinc (ZnS) dans une large vallée peu profonde, dans des conditions nocturnes stables, à une hauteur de 2 m au-dessus du sol pendant 30 minutes (Nickola, 1977; Sandeepan et al., 2013).

Une expérience plus récente est celle de *Graz*, dont les données sont utilisées pour la première fois par (Anfossi et al., 2005) pour évaluer un nouveau modèle stochastique lagrangien prenant en compte l'effet de méandres. Cette expérience a été menée en 2003 par l'Université de Technologie de Graz et le CNR-Torino près de Graz. Elle comprenait six tests, dont cinq ont été réalisés dans des conditions de faible vitesse du vent. Le terrain était décrit comme étant inhomogène, avec la présence de bâtiments, d'arbres et de buissons, et une longueur de rugosité moyenne d'environ 0,01 m. Le traceur SF₆ a été libéré à une hauteur de 0,3 m et chaque test a duré 30 minutes.

Un autre jeu de données est celui de l'expérience de *Salt Lake City*, Utah (Wannberg et al., 2010), au cours de laquelle un traceur SF₆ a été libéré au niveau du sol pendant une heure. Une observation intéressante des données de *Salt Lake City* suggère que pour des vitesses de vent inférieures à 1,5 m/s et des distances supérieures à 100 m, les concentrations maximales sont indépendantes de la vitesse du vent (S. R. Hanna et al., 2003).

Wannberg et al. (2010) ont présenté une étude de validation basée sur un ensemble de données visant à aider à la compréhension et au développement de modèles de dispersion. Les données proviennent d'une expérience de terrain menée sur le site d'essai du Nevada (NTS) dans des conditions de faible vitesse du vent (<2 m/s). Trois composés chimiques de densités différentes ont été libérés : l'ammoniac (gaz léger), l'éthylène (gaz neutre) et le propylène (gaz dense) (Wannberg et al., 2010).

Parmi les études spécifiques liant la dynamique de la couche limite stable aux mesures de transport et de diffusion des panaches, on cite la campagne *JORNADA* (Nappo et al., 2010). D'autres données utilisées pour évaluer les modèles de dispersion dans des conditions de vent faible sont mentionnées dans l'étude de Cuculeanu et al. (2019). Il s'agit de rejets dans la centrale nucléaire de Cernavodă (NPP) (Cuculeanu et al., 2019). Le pourcentage des états atmosphériques caractérisés par un vent faible et calme était d'environ 36-40% .

Okamoto et al. (2001) ont effectué une étude de validation d'un modèle de dispersion sur deux expériences menées dans des conditions de vent très faible avec des vitesses de vent inférieures à 1m/s : l'une était une expérience de source linéaire pour analyser la dispersion horizontale et l'autre est une expérience de source ponctuelle pour analyser la dispersion verticale.

4.2.2 Jeux de données météorologiques

Un certain nombre d'études numériques ont modélisé l'écoulement et la turbulence dans la couche limite stable nocturne sans tenir compte de la dispersion. Les campagnes expérimentales comprennent l'ensemble de données de *Cardington* (disponible sur <http://badc.nerc.ac.uk/data/cardington>) et l'ensemble de données *CASES-99*, voir (Poulos et al., 2002)). Pour les heures de données valides de Cardington, environ 21% correspondaient à des conditions stables de vent faible. Pour *CASES-99*, environ 7% du nombre total d'heures de données valides correspondaient à des heures de vents faibles et stables (Luhar et al., 2009).

Nous trouvons également de nombreuses références dans la littérature à des campagnes utilisées pour l'analyse des données de vents faibles et de phénomènes de méandres, telles que les jeux de données *SABLES98* (Cuxart et al., 2000; Yagüe et al., 2006), *UTP* (Mortarini et al., 2013; Trini Castelli et al., 2014), *Santa Maria* (Roberti et al., 2012), *Cabauw* (Van Ulden & Wieringa, 1996; Verkaik & Holtslag, 2007), *CCT* (Mazzola et al., 2016), *Evry-LMEE* (Balde, 2011) etc.

4.3 Phénomène de méandres

Les méandres (*meandering* en anglais) désignent les grandes variations de la direction du vent dues à l'apparition de mouvements de méso-échelle, souvent appelés mouvements *sub-meso* (Belušić & Güttler, 2010; Belušić & Mahrt, 2008; Mahrt, 2014). Ces mouvements se produisent entre les tourbillons turbulents majeurs et les mouvements plus petits à méso-échelle, traditionnellement

spécifiés à une échelle horizontale de 2 km (Mahrt, 2014). Les mouvements de *sub-meso* peuvent prendre différentes formes, notamment des oscillations de la direction du vent, des structures de micro-front (*micro-front structures*) ou de changements brusques du vent. Ces méandres du vent sont causés par divers phénomènes tels que les ondes de gravité internes (*gravity waves*) (Meillier et al., 2008), les variations de pression (Cuxart et al., 2002), les jets de bas niveau (Cuxart & Jiménez, 2007), les mouvements de crêpes quasi-2D (*pancake motions*), le drainage d'air froid (Elder et al., 2009), les solitons, les tourbillons (*vortices*) à axe horizontal ou vertical, et d'autres facteurs [voir aussi (Mahrt, 2007)]. Les mouvements "*sub-meso*" sont également caractérisés dans la littérature comme des fluctuations non turbulentes avec des échelles temporelles plus grandes que la turbulence. Ils sont classés en échelles micro α , micro β et méso γ (Hiscox et al., 2010; Orlandi, 1975). Figure 4.1 montre la dispersion d'un panache de traceur rejeté dans l'atmosphère, affecté par divers phénomènes *sub-méso*.

De nombreuses études ont analysé des ensembles de données météorologiques pour examiner les relations entre les méandres du vent et d'autres paramètres physiques tels que la vitesse du vent, la turbulence, la stabilité atmosphérique et la géométrie du terrain. Les principaux résultats de ces études sont présentés dans les sections suivantes.

4.3.1 Relation entre la vitesse du vent, la turbulence et les méandres

Le phénomène de méandres est souvent associé aux conditions de vent faible. Mortarini et al. (2016) a démontré une corrélation entre la diminution de la vitesse du vent et l'augmentation du pourcentage de méandres. Cependant, d'autres études indiquent que les mouvements de *sub-meso* responsables des méandres ne se produisent pas uniquement dans des conditions de vent faible, et sont indépendants des paramètres locaux (Belušić & Güttler, 2010; Vickers & Mahrt, 2007).

En ce qui concerne la relation entre les méandres et les paramètres de turbulence, les séquences où les méandres prédominent présentent une valeur élevée de l'écart type de la vitesse du vent σ_h et une vitesse moyenne du vent \bar{U} basse (Mortarini et al., 2016). Dans les cas de vents faibles et d'une turbulence très faible, l'échelle de longueur du cisaillement local est petite (souvent plus petite que la hauteur des mesures anémométriques), ce qui signifie que ces tourbillons ne sont pas en interaction avec le sol. Ainsi, la composante verticale de l'écart type de la vitesse σ_w devient plus petite et les tourbillons verticaux n'interfèrent pas avec les mouvements à méso-échelle (J. Sun et al., 2012). L'échelle de longueur des tourbillons verticaux est plus petite dans les cas de méandres par rapport aux cas sans méandres (Mortarini et al., 2016). En d'autres termes, lorsque l'anémomètre est très proche du sol, les mesures sont moins affectées par les tourbillons verticaux, ce qui réduit l'effet des méandres. Dans les cas sans méandres, les tourbillons verticaux interagissent avec le sol et cette interaction joue un rôle dans la propagation des mouvements à grande échelle.

Les méandres sont considérés comme une propriété intrinsèque des écoulements atmosphériques à

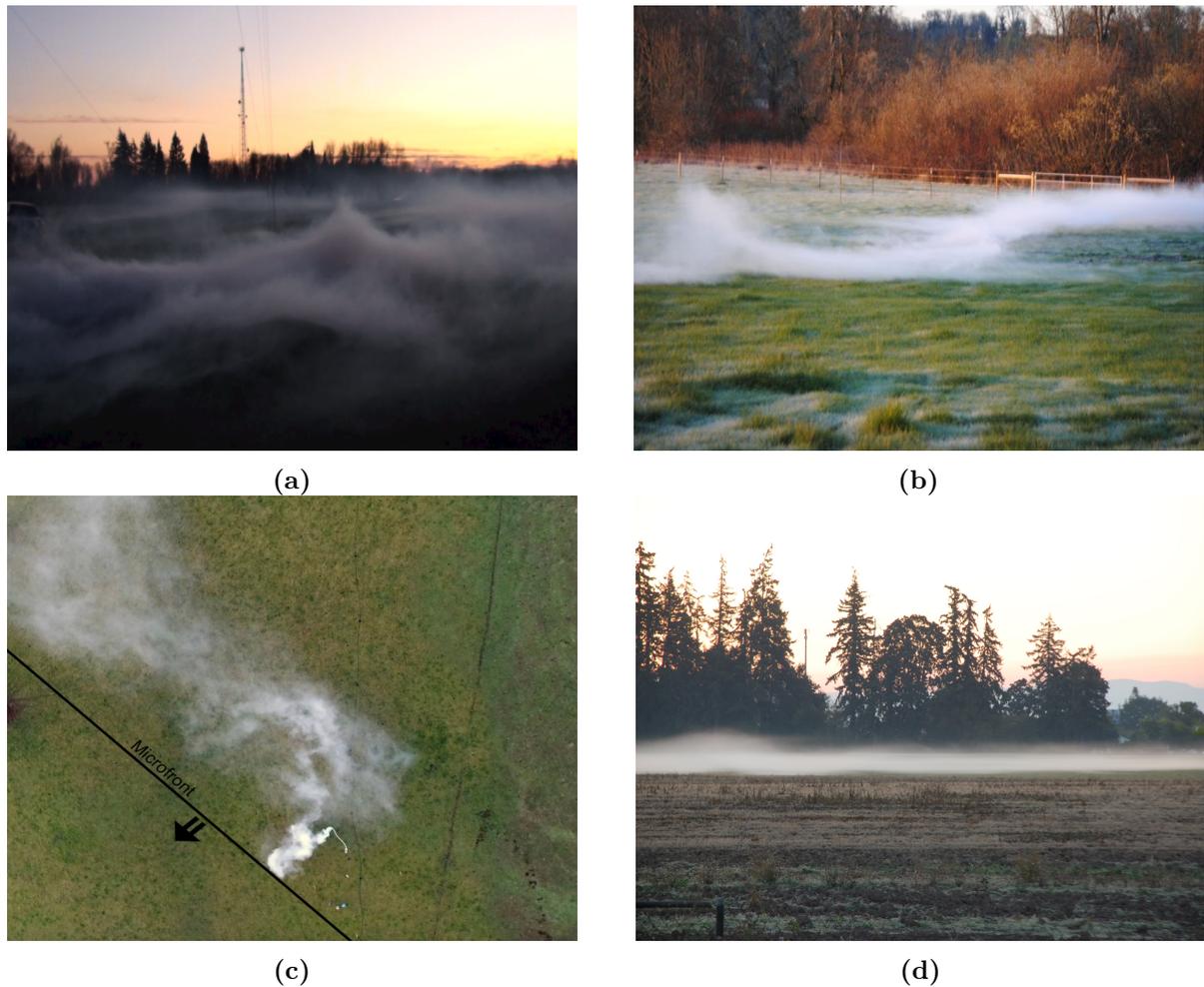


FIGURE 4.1 – Effet des mouvements *sub-meso* sur la dispersion du panache dans l’environnement : (a) Mouvements ondulatoires (*wave-like motions*) provoquant l’éjection de l’air de surface vers le haut (b) Mouvements de méandres à petite échelle (c) Microfronts (d) Modes solitaires (*Solitary Modes*) [Tiré du site : <https://submeso.org/>]

faible vitesse de vent, se manifestant lorsque l’écoulement 2D approche de l’équilibre géostrophique* (Goulart et al., 2007; Öttl et al., 2005). Cela se produit lorsque les contraintes de Reynolds sont faibles, c’est-à-dire lorsque la vitesse de frottement u^* , associée aux termes non diagonaux du tenseur de Reynolds est faible (Öttl et al., 2005). Mortarini et al. (2016) a également confirmé ce comportement, mais uniquement pour des vitesses de vent supérieures à 0,9 m/s. En revanche, les méandres s’amortissent et disparaissent lorsque les contraintes de Reynolds deviennent plus importantes. Schiavon et al. (2019) ont observé qu’aux faibles vitesses de vent, les mouvements *sub-méso* ont un effet croissant sur la turbulence de la couche de surface. Cela se traduit par une augmentation de la dispersion des données mesurées, une tendance générale à l’isotropie horizontale et à la turbulence 2D, ainsi qu’une diminution de l’efficacité du transport vertical de la quantité de mouvement.

*. Le vent géostrophique est le vent qui résulte de l’équilibre entre forces de Coriolis et forces de pression

4.3.2 Effet de la géométrie du terrain sur les méandres

Les méandres sont observés dans la CLA sur différents sites, indépendamment du degré de planéité et d'uniformité de la surface (Agarwal et al., 1995 ; Anfossi et al., 2005 ; S. R. Hanna, 1983 ; Mortarini et al., 2013 ; Sharan et al., 1995). Plusieurs études ont confirmé que les méandres ne dépendent pas des sites de mesure (S. Hanna, 1990 ; S. R. Hanna, 1983 ; Joffre & Laurila, 1988). Cependant, Hoover et al. (2015) a observé des influences de la topographie sur les mouvements locaux dans des conditions de vent faible et très stable.

Mortarini et al. (2016) a démontré que les méandres sont moins importants en milieu urbain en raison de la présence de bâtiments qui inhibent la propagation des mouvements de *sub-meso* le long de la direction du vent ou réduisent les oscillations du vent dans la direction transversale. Pour étudier davantage l'influence des bâtiments, Mortarini et al. (2016) a constaté que les secteurs angulaires dépourvus de bâtiments présentent une fréquence plus élevée de méandres par rapport à ceux avec des bâtiments. De plus, les méandres sont moins fréquents dans la sous-couche inertielle urbaine que dans la sous-couche rugueuse.

4.3.3 Effet des conditions de stabilité sur les méandres

Bien que les méandres de l'écoulement soient plus fréquents dans des conditions stables, ils peuvent également se produire dans des conditions neutres et instables, en particulier en champ ouvert (Anfossi et al., 2005 ; Mahrt, 2011 ; Mortarini & Anfossi, 2015 ; Mortarini et al., 2013 ; Mortarini et al., 2016 ; Sharan et al., 2003). La plupart des études partent du principe qu'une stratification stable dans la CLA est une condition nécessaire à l'observation d'un écoulement sinueux, quels que soient les processus possibles qui l'initient (Mahrt, 2014 ; Mortarini et al., 2016).

Mortarini et al. (2016) a affirmé que le nombre de cas de méandres est plus faible en journée et augmente dans les périodes de transition. Ce mécanisme est cependant plus faible pendant la journée, car le mélange convectif réduit l'impact de l'hétérogénéité de surface à petite échelle, ce qui entraîne une réduction du pourcentage de cas de méandres (Mortarini et al., 2016).

Aucune différence significative n'a été trouvée entre le jour et la nuit en ce qui concerne les échelles de temps des méandres, ce qui indique que la nature du phénomène de méandres est la même pendant la journée et la nuit. D'autres chercheurs ont également constaté qu'aucun effet de la stabilité n'a été observé sur les méandres (Davies & Thomson, 1999).

Anfossi et al. (2005) ont souligné que les méandres existent dans toutes les conditions météorologiques, indépendamment de la stabilité, de la vitesse du vent, des caractéristiques topographiques et de la saison. Bien qu'une limite inférieure soit fixée pour les variances des composantes horizontales du vent, leur influence est masquée par une forte turbulence et devient plus significative lorsque la turbulence diminue dans des conditions très stables.

4.4 Influence des méandres sur la dispersion atmosphérique

Dans une stratification stable, les mouvements verticaux sont supprimés par les forces de flottabilité, ce qui réduit la génération de l'ECT. Par conséquent, le taux de diffusion turbulente est faible et le panache instantané se développe relativement lentement (Mylne, 1992). Cependant, les mouvements horizontaux à grande échelle ne sont pas supprimés par les forces de stabilité verticale et peuvent persister pendant de longues périodes car la friction turbulente est réduite. Ainsi, la dispersion en méandres du panache pourrait être plus facilement observée dans des conditions stables que dans des conditions neutres ou convectives.

Les méandres entraînent une augmentation de l'écart type horaire de la direction du vent, σ qui devient particulièrement significatif pour les faibles vitesses de vent (moins de 2 m/s) (Davies & Thomson, 1999 ; S. Hanna, 1990). En conséquence, il n'y a pas de direction unique et précise du panache, et les concentrations observées au niveau du sol peuvent être réparties autour de 360° dans des conditions stables et instables (Anfossi et al., 2006 ; Brusasca et al., 1992 ; Sagendorf & Dickson, 1974 ; Sharan et al., 1996). Figure 4.2 illustre clairement le méandre du panache dans l'essai 8 de l'expérience d'*Idaho Falls*, dans lequel le traceur couvre presque les 360°, dans des conditions de vent stable et faible.

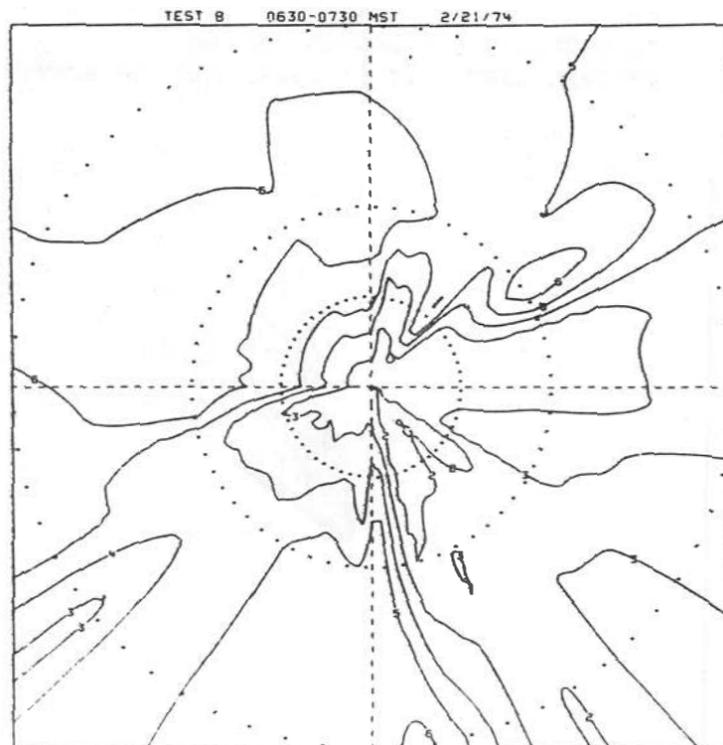


FIGURE 4.2 – Iso-contours de la concentration horaire observée pour l'essai 8 de l'expérience d'*Idaho Falls* [tiré de (Sagendorf & Dickson, 1974)]

4.5 Limitations associées aux conditions de vent faible

Pendant une nuit claire avec des vents légers, le sol se refroidit rapidement, ce qui rend la couche limite nocturne très stable. Cette couche limite très stable est généralement accompagnée d'une turbulence très faible et d'autres caractéristiques qui ne sont pas prises en compte par les modèles existants. Dans de telles conditions, la turbulence ne communique plus de manière significative avec la surface, et il existe une forte évidence de la stratification appelée "*z-less*", dans laquelle les gradients moyens de turbulence deviennent indépendants de la hauteur verticale z au-dessus de la surface (Hong, 2010; Mahrt & Vickers, 2006; Nieuwstadt, 1984; Pahlow et al., 2001) etc.

Le régime de faible vent associé à une faible turbulence est mal modélisé et mal compris, en partie parce que les flux et autres quantités de turbulence sont considérés comme trop petits pour être mesurés et sont donc généralement exclus de l'analyse. Avec une turbulence faible, le transport turbulent peut être principalement confiné à des échelles de temps inférieures à 10 secondes (Mahrt & Vickers, 2006). Les modèles de dispersion utilisent des données météorologiques d'entrée qui sont généralement moyennées sur des échelles de temps allant de plusieurs minutes à une heure. En observant le graphique de la Figure 4.3, on constate que la turbulence à l'échelle micro est caractérisée par des échelles de temps et de longueur inférieures à 50 minutes et 50 mètres, respectivement. Par conséquent, la propagation latérale du panache, pour ces échelles moyennes, est influencée par des flux à l'échelle méso et parfois synoptique, qui sont moins organisés et ne sont pas directement liés aux gradients verticaux à travers la couche limite. En excluant soigneusement les mouvements à l'échelle méso par un temps de moyennage dépendant de l'enregistrement, on parvient à isoler la turbulence extrêmement faible à petite échelle, réduisant ainsi les erreurs aléatoires pour les flux systématiques.

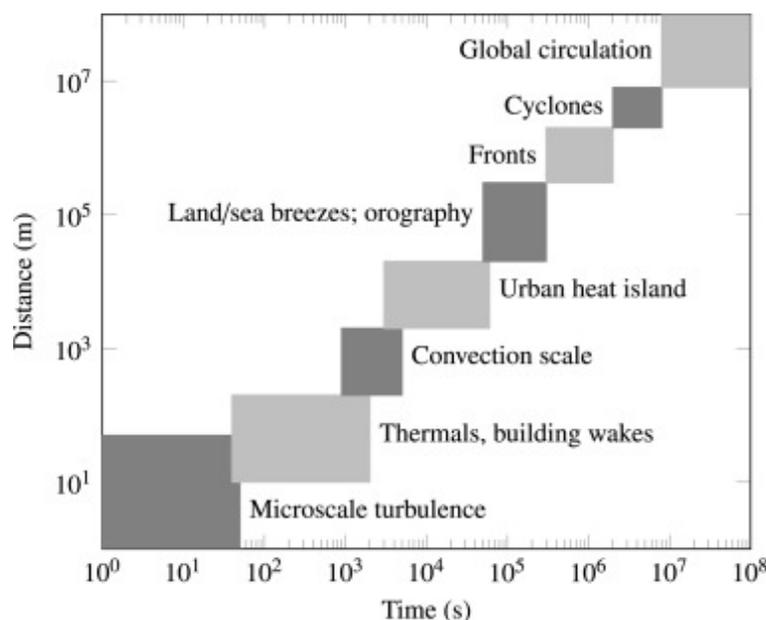


FIGURE 4.3 – Échelles spatiales et temporelles de la turbulence [tiré de (Joseph et al., 2020), adapté de (Isaksen et al., 2009)]

4.5.1 Limites associées aux profils de vent

Une autre limite associée aux conditions de vent faible et stable est la validité de la théorie de la similitude de MOST (A. S. Monin & Obukhov, 1954; A. Monin & Yaglom, 1971; Obukhov, 1971). Il est bien connu que cette théorie n'est pas valable dans des conditions très stables, car la partie méso-échelle de l'écoulement, qui est largement variable, est nécessaire pour prédire les flux ((Sharan & Kumar, 2011) et les références qui y figurent). Lorsqu'on applique la relation de similitude dans ces conditions, il est essentiel d'éliminer toutes les contributions non turbulentes aux écoulements.

Dans des conditions de vent faible et de stratification neutre ou stable, où la turbulence à petite échelle est faible et intermittente, les conditions d'applicabilité de la théorie de MOST deviennent critiques (J. Sun et al., 2012). En d'autres termes, les hypothèses de cette théorie, pour un écoulement horizontalement homogène et stationnaire, ne s'appliquent pas aux vents faibles, souvent non stationnaires, hétérogènes, et avec des oscillations à basse fréquence produites par des phénomènes atmosphériques à méso-échelle (Grachev et al., 2013; Liang et al., 2014; Schiavon et al., 2019; Troen & Mahrt, 1986).

La théorie de la similitude repose sur le paramètre de stabilité de Obukhov ζ , utilisé dans les expressions des fonctions de stabilité. Ce paramètre est basé sur les flux de quantité de mouvement ($\overline{U'W'}$ et $\overline{V'W'}$) et de température ($\overline{U'\Theta'}$), qui, selon Schiavon et al. (2019), sont faibles et mal déterminés dans des conditions quasi-neutres (autour de $\zeta = 0$, allant de faiblement instable à faiblement stable) accompagnées de vents faibles et de turbulences intermittentes. Sharan et Kumar (2011) ont proposé une analyse mathématique systématique pour estimer la limite supérieure du nombre de Richardson bulk Ri_b et le paramètre de stabilité ζ pour l'applicabilité des formes non-linéaires des fonctions de similitude Φ_m et Φ_h dans des conditions très stables. Schiavon et al. (2019) a confirmé que Ri_b (basé sur le gradient vertical de la vitesse du vent et de la température) ainsi que ζ donnent une indication cohérente de la stabilité dans les plages quasi-neutres.

Malgré les problèmes posés par la théorie de MOST, celle-ci est encore largement utilisée pour le calcul des flux de surface dans des conditions stables et de vents faibles. Par exemple, Pandey et Sharan (2019) ont utilisé, afin de définir les conditions météorologiques d'entrée dans AERMOD, une procédure d'optimisation pour estimer le flux turbulent dynamique u^* et la longueur d'Obukhov L en utilisant la fonction de stabilité obtenue par (Businger et al., 1971) et en prenant en compte la vitesse moyenne du vent mesurée à différents niveaux.

Luhar et Hurley (2012), ont utilisé une méthode d'assimilation de données quadridimensionnelle, appelée "*nudging*", pour ajuster les données de vent d'entrée (vitesse et direction de vent) du modèle de prévision à l'échelle locale aux observations expérimentales à différents niveaux de mesure. Cette méthode consiste à ajouter un terme de forçage aux équations de la quantité de mouvement horizontale, avec un coefficient de réglage (*tuning coefficient*) représentant l'échelle de temps de la

relaxation, afin d'améliorer les prédictions du modèle et réduire la sous-estimation de la concentration.

4.5.2 Le choix de l'échelle temporelle moyenne

Comme mentionné précédemment, le méandres correspond à des mouvements dont l'échelle de temps varie de quelques secondes (échelle de temps de la turbulence dans la couche limite stable) à typiquement une heure. D'après Schiavon et al. (2019), l'écart spectral observé entre les mouvements *sub-méso* et la turbulence à petite échelle rend le choix du temps de moyennage quelque peu arbitraire.

Sharan et al. (2003) ont confirmé que les oscillations du vent doivent être prises en compte pour les cas de vent faible, sinon la concentration près de la source serait fortement surestimée. La décomposition multi-résolution est souvent utilisée pour séparer les structures de turbulence (moins de 90 secondes) des mouvements à plus long terme de sub-mésoéchelle (plus de 90 secondes). Ces derniers sont responsables des méandres du panache dans les vents faibles et variables, ainsi que dans les conditions de forte stabilité (Hiscox et al., 2010; Vickers & Mahrt, 2003).

4.5.3 Limites de l'applicabilité des modèles analytiques et numériques

La diffusion des polluants émis par les différentes sources d'émission est irrégulière et indéfinie dans des conditions de vent faible et variable. Aucune ligne centrale du panache n'est clairement identifiable, et la distribution de la concentration observée présente plusieurs pics et n'est pas gaussienne, surtout dans des conditions stables où la turbulence est générée à la fois par le cisaillement de friction et le flux thermique vertical. Les conditions de vent léger et stable ont été exclues par Pasquill (1961) de la classification originale de la stabilité, car il est peu probable que le panache diffusant présente un déplacement définissable.

Les modèles de panache gaussiens peuvent ne pas être applicables aux conditions de vent faible pour les raisons suivantes : (1) la diffusion est négligée par rapport à l'advection ; (2) la concentration est inversement proportionnelle à la vitesse du vent, ce qui signifie que la concentration tend vers l'infini lorsque la vitesse du vent tend vers zéro ; (3) les conditions moyennes sont stationnaires et les paramètres de dispersion ne sont pas disponibles par vent faible. En résumé, ces modèles sont limités à deux niveaux lorsqu'il s'agit de prédire le champ de concentration dans des conditions de vent faible : premièrement, la formulation du modèle qui implique des approximations et des hypothèses, et deuxièmement, l'indisponibilité des paramètres de dispersion (Kumar & Sharan, 2009).

D'autres modèles de dispersion, tels que le modèle Lagrangien stochastique, peuvent également ne pas être adaptés pour représenter le phénomène de méandres, bien qu'ils puissent être supérieurs

aux modèles d'advection-diffusion et aux modèles gaussiens. Dans le modèle stochastique, les interactions entre les particules et les tourbillons sont influencées par l'échelle de temps intégrale $\tau_y = c_L \frac{k}{\varepsilon}$ et la constante c_L qui doit être soigneusement ajustée pour une meilleure prédiction de l'amplitude et de la localisation des pics de concentration (Joseph et al., 2020).

En ce qui concerne les modèles CFD, il n'existe toujours pas de mécanisme explicite et clair pour générer le méandres horizontaux d'échelle de temps d'intérêt dans un modèle moyenné par Reynolds. Luhar et Hurley (2012) font référence à plusieurs études qui ont utilisé des hypothèses simplifiées dans les équations de Navier-Stokes (NS) 3-D telles que l'introduction de très faibles niveaux de turbulence par la limite asymptotique de l'absence de termes de contrainte de Reynolds et la suppression ou la réduction de la diffusion horizontale en diminuant la diffusivité horizontale des tourbillons (K_H), etc. Cependant, certaines de ces hypothèses demeurent ambiguës et nécessitent une étude approfondie. Bien que les modèles CFD soient très populaires dans les applications de dispersion atmosphérique impliquant une topographie complexe, ils sont encore presque incapables de produire la propagation latérale du panache du polluant libéré dans des conditions de vent faible avec une variabilité directionnelle. Ceci est dû au fait qu'ils ne prennent pas en compte les caractéristiques de la turbulence et les effets de méso-échelle responsables du phénomène de méandres (Joseph et al., 2020), en plus d'autres limitations telles que le coût des calculs et les défis liés au maintien de la vitesse du vent, de la turbulence et de la température homogènes dans le domaine de calcul.

4.6 Approches pour la prédiction de la dispersion en cas de vents faibles et variables

Il est bien établi dans la littérature que les modèles de Navier-Stokes (NS) moyennés par Reynolds RANS, utilisés pour simuler la dispersion atmosphérique, surestiment les concentrations maximales et sous-estiment la propagation latérale du panache lorsqu'ils considèrent uniquement la direction du vent moyen (Huber, 2004). La variabilité du vent observée à des échelles de temps allant de quelques secondes à un quart d'heure est due en partie à la turbulence tridimensionnelle de la couche limite atmosphérique, caractérisée par des échelles proportionnelles à la profondeur de la couche limite. Une autre partie de la variabilité peut être attribuée à des dynamiques à plus grande échelle, telles que les ondes gravitationnelles internes et les effets de température dans la troposphère, etc. Lors des simulations de dispersion avec des domaines typiques de l'ordre du kilomètre, l'effet de la turbulence tridimensionnelle est inclus dans le modèle de simulation, mais la dynamique des échelles plus grandes n'est pas prise en compte et doit être considérée dans les conditions aux limites.

Dans la suite, nous présentons les différentes méthodologies trouvées dans la littérature pour évaluer le problème des prédictions de concentration affectées par la variabilité du vent.

1. Joseph et al. (2020) (voir aussi (Joseph et al., 2013; Joseph et al., 2018)) ont calculé l'écart-type de la variabilité du vent en utilisant la généralisation de Moore (1976), la même que

celle utilisée dans le code UK-ADMS :

$$\sigma_\alpha = 0,065 \sqrt{\frac{7T_A}{U_{10}}} \quad (4.1)$$

Où T_A est l'échelle temporelle moyenne de calcul. Ainsi, l'écart type σ_{wd} de la direction du vent dû à la variabilité à méso-échelle est assimilé à σ_α et la limite maximale $-\pi/6 \leq \sigma_\alpha \leq \pi/6$ utilisée dans UK-ADMS est également appliquée.

Il a été constaté que lorsque la vitesse du vent de référence U_{10} augmente au-delà de 5 m/s, il n'y a pas de diminution significative de la variabilité du vent, σ_{wd} est donc fixée à 5°.

La fonction de densité de probabilité (PDF) de la variabilité de la direction du vent est supposée gaussienne et la variabilité du vent se situe entre $\mu_{wd} - 3\sigma_{wd}$ et $\mu_{wd} + 3\sigma_{wd}$, où μ_{wd} est la direction moyenne du vent ; $\mu_{wd} = 0$ pour un écoulement homogène sur un terrain plat. Le taux moyen pondéré (accrétion ou concentration) est donné par :

$$\bar{A} = \frac{\sum_{i=0}^n p_i A_i}{\sum_{i=0}^n p_i} \quad (4.2)$$

Où i est l'indice de la simulation et n est le nombre total de simulations ; p_i est la probabilité d'occurrence avec $\sum p_i = 1$ de la $i^{\text{ème}}$ variation de la direction du vent. $p(\alpha)$ est calculé comme suit :

$$p(\alpha) = \frac{1}{\sigma_{wd} \sqrt{2\pi}} \int_{\alpha - \sigma_{wd}/4}^{\alpha + \sigma_{wd}/4} \exp \left[-\frac{(\alpha - \mu_{wd})^2}{2\sigma_{wd}^2} \right] d\alpha \quad (4.3)$$

L'étude de sensibilité donne des incréments de direction du vent de $\sigma_{wd}/2$, soit un total de 13 simulations,

$$\mu_{wd} - 3\sigma_{wd}, \mu_{wd} - \frac{5\sigma_{wd}}{2}, \dots, \mu_{wd}, \dots, \mu_{wd} + \frac{5\sigma_{wd}}{2}, \mu_{wd} + 3\sigma_{wd} \quad (4.4)$$

2. Vervecken et al. (2013) ont proposé une approche simple pour estimer le niveau approprié de variabilité de la direction du vent à prendre en compte en tant que condition limite dans les simulations CFD. Cette approche est pertinente uniquement pour les expériences en champ libre, où la variance totale de la direction du vent est approximativement donnée par

$$\sigma_\alpha^2 \approx \frac{\langle v_e'^2 \rangle}{\langle u \rangle^2} + \frac{\langle v_m'^2 \rangle}{\langle u \rangle^2} = \sigma_e^2 + \sigma_m^2 \quad (4.5)$$

Ici, σ_α^2 représente la variance moyenne de la direction du vent obtenue à partir des expériences (variabilité totale du vent) ; σ_m^2 est la partie de la variance prise en compte dans le modèle CFD, en supposant une turbulence isotrope, et σ_e^2 est la partie externe de la variance prise en compte dans les conditions aux limites.

Ensuite, une approche pondérée a été utilisée en calculant la moyenne des concentrations à l'aide d'un ensemble de simulations RANS en régime stationnaire, en considérant une gamme d'angles de direction du vent externe avec une distribution gaussienne. Les chercheurs ont

constaté que la solution pondérée, prenant en compte la variabilité effective du vent (σ_e), produisait des prévisions nettement meilleures que les résultats non pondérés (utilisant la variabilité à pleine échelle σ_α). Une approche similaire à celle-ci a été utilisée par Quinn et al., 2001.

3. L'isotropie de la turbulence conduit à une sous-estimation de la diffusion turbulente horizontale par rapport à l'advection par l'écoulement dans le champ proche, ce qui entraîne des pics de concentration plus élevés, en particulier près de la source.

Pour tenter de valider le modèle Code_Saturne par rapport aux données de l'expérience *Prairie Grass*, Demael et Carissimo (2008) ont envisagé d'introduire une valeur arbitraire (K_{oh}) pour les composantes horizontales de la diffusivité scalaire effective dans l'équation d'advection-diffusion :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{v_t}{S_{ct}} + K_{oh} \right) \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{v_t}{S_{ct}} + K_{oh} \right) \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{v_t}{S_{ct}} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right] \quad (4.6)$$

Ils ont constaté initialement les points suivants :

- Pour une stabilité atmosphérique neutre, le modèle surestimait les concentrations maximales de l'arc, indépendamment de la distance par rapport à la source. Ces surestimations étaient liées à une sous-estimation de la dispersion horizontale par rapport au transport advectif.
- Pour une stabilité atmosphérique stable, la dispersion atmosphérique était fortement atténuée, ce qui entraînait des concentrations de polluants plus élevées que celles observées dans des conditions de stratification neutre. En particulier, la dispersion latérale prédite par le code était cohérente avec l'expérience. Cependant, les pics de concentration étaient difficiles à reproduire avec Code_Saturne : ils étaient surestimés près de la source (ce qui sous-estimait la dispersion horizontale) et constamment sous-estimés au-delà.

Cette méthode dite "anisotrope" était appliquée aux cas neutres et stables en augmentant "artificiellement" la diffusivité horizontale. Cependant, elle semblait moins nécessaire pour les cas stables que pour les cas de stratification neutre.

Avec l'introduction de la correction du coefficient de diffusion horizontal, les résultats globaux semblaient plus améliorés et l'estimation globale des pics de concentration semblait meilleure, surtout pour les cas neutres.

Cependant, cette approche présente plusieurs inconvénients qui la rendent non opérationnelle pour une utilisation générale. Tout d'abord, le choix du coefficient K_{oh} était effectué par tâtonnement, dans le but d'optimiser la concordance des prédictions avec les observations, en se basant notamment sur le paramètre FAC2. Cela signifie que la correction apportée peut varier d'une version du code à l'autre. Par exemple, si une version du code a un nombre de Schmidt plus élevé et une diffusivité scalaire plus faible, cela impliquerait une dispersion moins importante, nécessitant ainsi une augmentation de la valeur de la diffusivité scalaire

ajoutée.

De plus, les coefficients ajoutés aux diffusivités turbulentes axiale et latérale étaient déterminés par ajustement empirique, ce qui rendait impossible l'automatisation de la méthode pour les études d'impact réalisées. Cette dépendance des ajustements empiriques rendait la méthode moins robuste et moins transférable à d'autres cas ou conditions atmosphériques. En résumé, les principaux inconvénients de cette approche sont la dépendance aux ajustements empiriques, la variabilité des corrections entre les versions du code et l'absence de possibilité d'automatisation pour les études d'impact. Ces limitations rendent cette méthode peu pratique et non recommandée pour une utilisation opérationnelle généralisée.

4. Tang (2005) ont utilisé une méthode de lissage afin de convertir la solution RANS en régime stationnaire en une solution de vent moyennée dans le temps et variable.
5. Labovský et Jelemenský (2011) ont utilisé des conditions limites d'entrée non stationnaires en imposant les données atmosphériques mesurées à l'entrée. S. R. Hanna et al. (2004) a employé des conditions limites d'entrée non stationnaires afin de prendre en compte l'effet des méandres du champ de vent. Sa méthode pour considérer l'anisotropie de la turbulence lors de la simulation des essais de l'expérience *Prairie Grass* impliquait la décomposition des composantes verticales et horizontales de la turbulence dans les profils de turbulence d'entrée, de la manière suivante :

$$\begin{cases} \sigma_U = 2,4u^* \\ \sigma_V = 1,9u^* \\ \sigma_W = 1,3u^* \end{cases} \quad (4.7)$$

Luhar et Hurley (2012) ont paramétré les conditions limites de turbulence d'entrée d'un modèle pronostique en se basant sur l'expérience menée sur le site de *Cardington*. Ceci a été réalisé de manière à ce que :

$$\begin{cases} \sigma_{av} = 2,1[1 + (z/L)^{4/3}]^{1/2} \\ \sigma_W = 1,3u^* \end{cases} \quad (4.8)$$

$\sigma_{av} = [(\sigma_U^2 + \sigma_V^2)/2]^{1/2}$; où σ_{av} et σ_W représentent respectivement l'écart type horizontal et vertical des fluctuations de la vitesse du vent. Leur modèle a été utilisé pour simuler les essais de l'expérience de rejet de traceurs d'*Idaho Falls*.

6. Effet du nombre de Schmidt turbulent Sc_t :

L'ajustement de la valeur de Sc_t est une approche couramment utilisée dans de nombreuses études de dispersion atmosphérique par CFD (Bernardino et al., 2019 ; Blocken et al., 2008 ; Brereton et al., 2020 ; Tominaga & Stathopoulos, 2007 ; Vervecken et al., 2013) dans le but d'améliorer les concentrations en champ proche, que ce soit au sein d'une canopée urbaine ou au niveau du sol. Par exemple, Vervecken et al., 2013 ont observé une augmentation de la concentration maximale avec l'augmentation de Sc_t lors d'un essai de l'expérience *Prairie Grass*, et ont déterminé que la meilleure valeur de Sc_t pour prédire les concentrations au

niveau du sol était la plus basse (0,3) ; cependant, l'extension horizontale du panache n'était pas satisfaisante.

4.7 Conclusions

Les conclusions suivantes peuvent être tirées :

- Les conditions de vent faible sont définies comme des périodes où la vitesse du vent au-dessus du sol est inférieure ou égale à 2 m/s.
- Les méandres se réfèrent à des mouvements avec une échelle de temps allant de quelques secondes (échelle de temps de la turbulence dans la couche limite stable) à typiquement 1 heure (période de moyennage du modèle).
- Dans des conditions de vent faible, l'état de la couche limite atmosphérique n'est pas bien défini, ce qui entraîne une propagation accrue du panache (largeur du panache) dans la direction horizontale en raison des méandres.
- Le manque de données expérimentales pour les conditions de faible vitesse du vent rend difficile le développement, l'évaluation et l'amélioration des modèles.
- Les limites des modèles analytiques sont liées à la paramétrisation des diffusions turbulentes (diffusivités turbulentes), à la paramétrisation des paramètres de dispersion et à l'incorporation d'un profil de vent réaliste.
- Il n'existe toujours pas de mécanisme explicite et clair pour générer des méandres horizontaux avec les échelles de temps d'intérêt dans un modèle de moyenne de Reynolds.
- Il est nécessaire de mener une vaste campagne de mesures sur le terrain comprenant des mesures de diffusion, des mesures météorologiques (y compris des observations de la surface et de l'écoulement atmosphérique au-dessus du sol) ainsi que des mesures de turbulence dans des conditions de vent faible et stable.
- Dans un régime de vent faible et variable, étant donné que la variabilité du vent englobe à la fois les effets de la turbulence et les phénomènes à grande échelle, il serait possible de déterminer la composante directionnelle du vent associée à ces phénomènes. Cette composante directionnelle devrait être utilisée pour définir les conditions météorologiques aux limites du domaine. La littérature propose plusieurs méthodologies visant à améliorer la prédiction des pics de concentration et l'extension du panache dans de telles conditions, où le vent est faible et variable. Jusqu'ici, les approches mentionnées ont été élaborées dans le contexte de simulations RANS pour étudier la dispersion d'un traceur dans un écoulement moyen unidirectionnel. Dans le prochain chapitre, nous développons un modèle URANS qui tient compte des conditions limites d'entrée variables dans le temps, afin de modéliser la dispersion dans des conditions de vent faible.

Chapitre 5

Modélisation de la dispersion atmosphérique dans des conditions de vents faibles : application à l'expérience d'Idaho Falls

Résumé du chapitre

L'évaluation et le contrôle des risques opérationnels lors d'un scénario de rejet de polluants nécessitent, comme préalable, une simulation précise des phénomènes de dispersion atmosphérique. Dans ce contexte, la question de la faible vitesse du vent et des conditions atmosphériques stables reste un défi pour la modélisation numérique des écoulements turbulents et de la dispersion à l'échelle locale. Ce chapitre présente une étude sur la modélisation de la dispersion de polluants en conditions de vent faible et stable, en utilisant la simulation CFD (Dynamique des Fluides Numérique) avec le logiciel Code_Saturne. L'analyse met en évidence des divergences entre les données de concentration numériques et observées, remettant en question l'adéquation du modèle et la précision des paramètres d'entrée, en particulier dans des conditions de vent faible avec une variabilité significative de la direction du vent. Des ajustements de modèles de turbulence et des profils d'entrée sont proposés pour améliorer les prédictions. De plus, une nouvelle méthode analytique appelée MSTA, prenant en compte les effets de méandres, est présentée et montre des résultats prometteurs. Cependant, des incertitudes subsistent, notamment liées à la direction du vent, nécessitant une recherche de méthodologies pour mieux comprendre leur impact sur le modèle d'écoulement.

5.1 Introduction

Le phénomène de méandres (*meandering* en anglais), caractérisé par d'importantes variations spatiales et temporelles de la direction du vent à basse fréquence, se produit chaque fois que la vitesse du vent est inférieure à environ 2 m/s. Lorsque ces conditions de vent faible sont associées à une forte stabilité atmosphérique, les tourbillons longitudinaux dans l'axe horizontal, responsables de l'effet de méandres, deviennent plus prononcés, car le mouvement vertical est supprimé par les effets de flottabilité (Etling, 1990). Du point de vue de la dispersion des polluants, ces conditions sont particulièrement contraignantes, car des niveaux de concentration anormalement élevés peuvent persister au niveau du sol, s'étendant sur plusieurs kilomètres en aval de la source (Boyer et al., 1970). Plusieurs modèles analytiques de dispersion ont été utilisés pour aborder les phénomènes de dispersion dans des conditions de vent faible et variable. On peut citer les modèles gaussiens de bouffées/panaches (Luhar, 2011 ; Sagendorf & Dickson, 1974), ainsi que l'approche lagrangienne des particules (Anfossi et al., 2006 ; Brusasca et al., 1992 ; Carvalho & de Vilhena, 2005 ; Oettl et al., 2001), entre autres.

Cependant, la plupart de ces modèles reposent sur des hypothèses physiques différentes, ce qui rend la modélisation de l'effet de méandres moins réaliste. Par exemple, les modèles gaussiens classiques largement utilisés sont des modèles en régime stationnaire qui supposent un champ de vent homogène pendant la période d'échantillonnage, prédisant ainsi une concentration au sol très faible (Pandey & Sharan, 2019). Les modèles CFD, qui résolvent les équations de Navier-Stokes (NS) à l'aide de maillages de petite taille, se sont avérés capables de fournir des prédictions efficaces des champs de vent et de dispersion, indépendamment de la configuration géométrique, des conditions atmosphériques et des régimes de vent. Cependant, des recherches supplémentaires sont encore nécessaires pour développer une solution CFD qui tienne compte d'une grande variabilité dans la configuration du vent, ce qui peut avoir un impact significatif sur les phénomènes de dispersion.

L'objectif de cette étude est d'évaluer un modèle CFD, Code_Saturne® (EDF R&D), en le comparant aux observations de l'expérience de traçage d'Idaho Falls (Sagendorf & Dickson, 1974). Le choix de ce jeu de données repose principalement sur le critère qu'il contient suffisamment d'instances de faible vitesse du vent et de fortes conditions de stabilité.

5.2 Description de l'expérience d'Idaho Falls

L'expérience d'Idaho Falls (Sagendorf & Dickson, 1974) s'est déroulée au laboratoire national d'ingénierie de l'Idaho (INEL), situé dans le sud-est de l'Idaho (États-Unis), en 1974. L'expérience a été menée sur un terrain vaste et relativement plat, dans des conditions de faible vitesse du vent et de forte inversion (Figure 5.1a). Des mesures du vent, comprenant la vitesse et la direction du vent, ainsi que l'écart-type de la direction horizontale du vent, ont été prises à six niveaux (2, 4, 8, 16, 32 et 61 m) sur une tour de 61 mètres de hauteur. Le profil de température a également été mesuré à ces hauteurs, ainsi qu'à 1 mètre au-dessus du sol. Un traceur d'hexafluorure de soufre

(SF6) a été libéré à une hauteur de 1,5 mètre au-dessus du sol. Les concentrations ont été mesurées à l'aide de capteurs placés sur trois arcs de cercle de rayon 100, 200 et 400 mètres de la source, à une hauteur de 0,76 mètre au-dessus du sol. En raison de la variabilité de la direction du vent, les capteurs ont été positionnés à des intervalles de 6 degrés sur chaque arc, formant ainsi une grille d'échantillonnage de 360 degrés avec 180 positions (Figure 5.1b). Les données de terrain indiquent également la présence de huit tours de concentration positionnées le long d'un arc de 200 mètres, couvrant les angles de 47° à 187° dans le sens horaire à partir du nord, avec des intervalles de 20° (Luhar & Hurley, 2012).

Un total de onze essais (test-4 à test-14) a été réalisé au cours de la campagne expérimentale. Parmi ces essais, un seul a été réalisé dans des conditions de stabilité neutre, tandis que dix essais ont été menés dans des conditions de stabilité stable. La durée de tous les essais était d'une heure, à l'exception de l'essai 10 qui a duré 49 minutes.

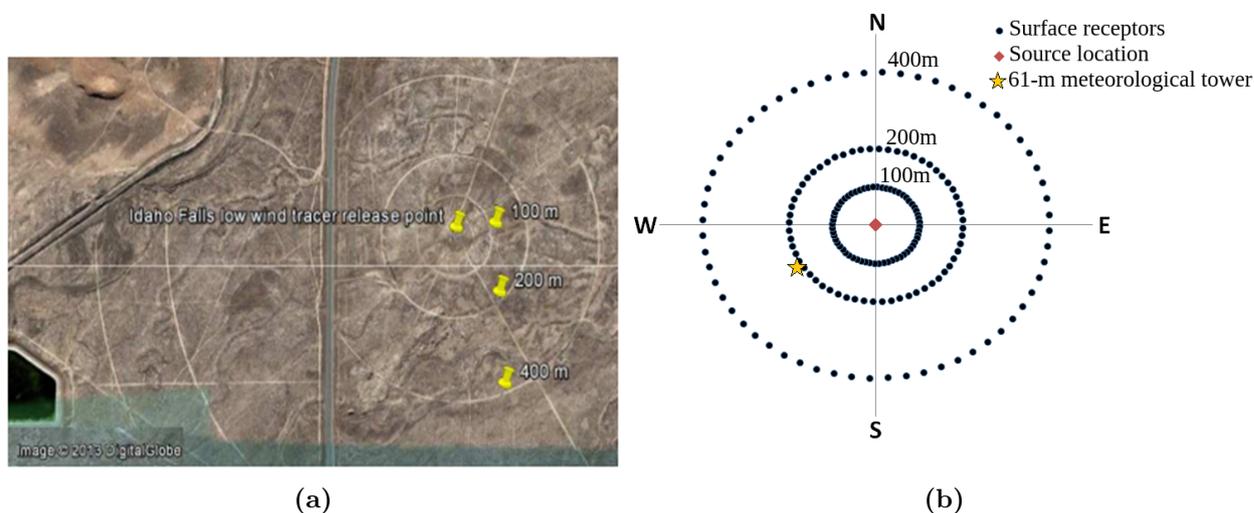


FIGURE 5.1 – (a) Vue du site expérimental d'Idaho Falls (b) Schéma du champ d'Idaho Fall avec localisation de la source et des capteurs de mesure

5.3 Résumé des performances des différents modèles

Comme précédemment mentionné, plusieurs modèles analytiques et numériques ont été utilisés pour modéliser la dispersion dans des conditions de vent faible à partir de l'ensemble de données d'Idaho Falls : la théorie de la diffusion turbulente (*K-theory*) (Sharan & Yadav, 1998), les approches gaussiennes (Luhar, 2011 ; Pandey & Sharan, 2019 ; Sagendorf & Dickson, 1974), les modèles lagrangiens (Anfossi et al., 2006 ; Luhar & Hurley, 2012 ; D. M. Moreira et al., 2005 ; Oettl et al., 2001), etc. Le tableau 5.1 résume les résultats les plus significatifs de ces études en termes de performance quantitative, en utilisant des mesures statistiques. Il convient de noter que toutes les études mentionnées ne tiennent pas compte de la variabilité de la direction du vent, qui est responsable de l'effet de méandres. De plus, les valeurs indiquées dans le tableau représentent les concentrations moyennes normalisées $\bar{C}\bar{U}/Q$ (m^{-2}) près du sol pour l'ensemble des essais de l'expérience d'Idaho Falls (10

essais), où \bar{C} est la concentration en unités dimensionnelles (gm^{-3}), Q est le taux d'émission en (gs^{-1}) et \bar{U} est la vitesse du vent à 4 mètres au-dessus du sol.

On peut constater que les modèles lagrangiens surpassent les modèles gaussiens et la théorie de la diffusion turbulente, confirmant ainsi ce qui a été mentionné précédemment. Les résultats montrent un meilleur accord avec les observations, avec des valeurs plus élevées du coefficient de corrélation (COR) se rapprochant de l'unité, et un plus grand nombre de valeurs de concentration normalisée prédites dans un intervalle de facteur de deux (FAC2) par rapport aux observations.

TABLE 5.1 – Mesures statistiques obtenues à partir de différents modèles pour les essais d'Idaho Falls.

Référence de l'étude	Modèle utilisé	COR	NMSE	FB	IOA	FAC2	FS
Pandey et Sharan (2019)	Modèle du panache gaussien (approche segmentée)	0,54	2,90	-0,28	0,77	0,38	-
V. S. Moreira et al. (2013)	Modèle lagrangien stochastique	0,94	0,20	0,30	0,77	0,17	-
(Luhar & Hurley, 2012)	Modèles à particules lagrangiennes	0,77	0,68	0,01	0,82	-	-
Luhar (2011)	Modèle gaussien analytique à bouffée	0,84	0,22	0,06	0,06	-	-
Ucker Timm et al. (2009)	Modèles à particules lagrangiennes	0,88	0,19	-0,054	-	0,89	-0,21
Degrazia et al. (2007)	Modèle semi-analytique à particules lagrangiennes	0,93	0,14	0,08	-	0,73	-0,23
da Costa Carvalho et al. (2006)	Modèle itératif de Langevin pour les vents faibles	0,94	0,14	0,08	-	0,77	-0,26
D. M. Moreira et al. (2005)	Modèle de diffusion turbulente	0,79	0,25	0,02	-	0,79	0,08
Carvalho et de Vilhena (2005)	Modèle semi-analytique à particules lagrangiennes	0,93	0,11	0,02	-	0,83	-0,18
Oettl et al. (2001)	Modèles à particules lagrangiennes	0,86	0,21	-0,13	-	0,87	-
Sharan et Yadav (1998)	Modèle de diffusion turbulente	0,55	0,53	-0,02	-	0,60	-
Sagendorf et Dickson (1974)	Modèle du panache gaussien (approche segmentée)	0,42	0,60	0,06	-	0,80	-

5.4 Modélisation de la dispersion en condition de vent faible avec un modèle URANS

5.4.1 Essai choisi pour la simulation

Dans la première partie, un seul essai de l'expérience a été sélectionné pour évaluer la capacité de ce code à simuler les modèles d'écoulement et de dispersion, non seulement près de la source, mais aussi à des distances plus éloignées. Nous avons donc choisi le test-10 afin de simuler l'écoulement du vent et la dispersion du traceur passif. Ce test se caractérise par une stratification extrêmement stable. Selon Carvalho et de Vilhena (2005), la longueur de Monin-Obukhov (L) est égale à 5,93 mètres. L'ensemble des données expérimentales brutes pour la vitesse moyenne du vent (U) et la direction du vent (α), ainsi que l'écart-type (σ_α), a été enregistré à une hauteur de référence (z_r) de 4 mètres toutes les deux minutes, pour une durée totale de 49 minutes. Les valeurs moyennes horaires de ces paramètres sont rapportées dans Sagendorf et Dickson (1974). La longueur de la rugosité aérodynamique (z_0) a été estimée à 0,005 mètre (Brusasca et al., 1992). Les caractéristiques de cet essai sont résumées dans le tableau 5.2.

TABLE 5.2 – Données de vent à moyenne horaire et caractéristiques de la source pour l’essai 10

t (min)	z_r (m)	z_0 (m)	U(m/s)	α (°)	σ_α (°)	T (°C)	u_* (m/s)	L(m)	Q(g/s)
49	4	0,005	1,66	196,8	21,7	-2,8	0,0995	10,8	0,032

5.4.2 Méthodologie numérique

Dans cette section, nous présentons la méthodologie des simulations numériques URANS pour le test-10 réalisé dans Code_Saturne. La grille tridimensionnelle du domaine numérique est illustrée à la figure 5.2. Les dimensions du maillage sont de 900 m en longueur et en largeur, et de 60 m en hauteur. Le maillage est composé d’un total de 400 000 cellules. Près du point d’émission, les cellules ont des dimensions de 0,72 m \times 0,72 m \times 1,2 m. Le maillage est raffiné près du sol, avec une résolution verticale variant de 0,5 m à 7 m.

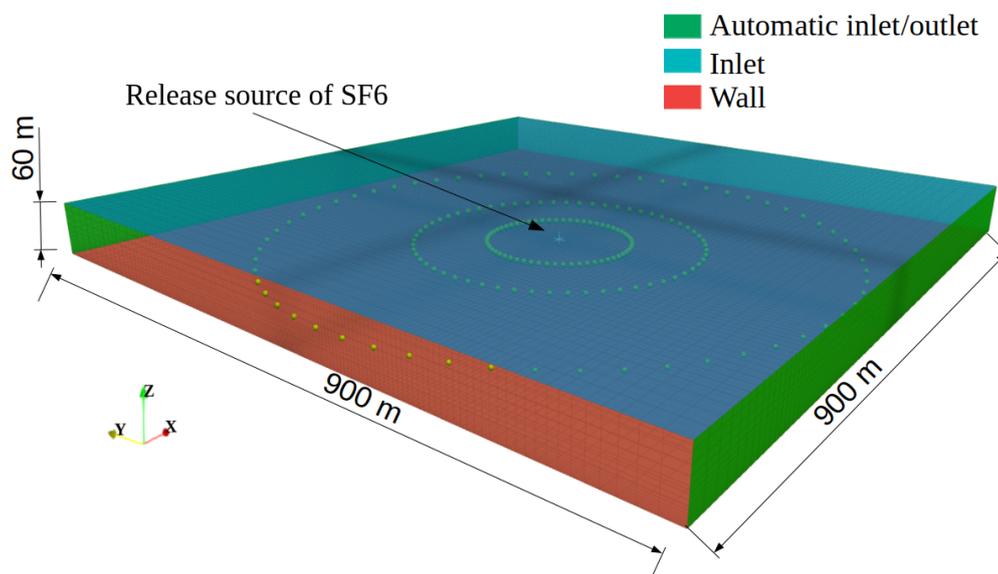


FIGURE 5.2 – Maillage tridimensionnel du domaine numérique montrant la position de la source du rejet, la positions des capteurs de concentration et les conditions aux limites du domaine.

Pour la phase fluide continue, le modèle de turbulence utilisé est le modèle RANS $R_{ij} - \varepsilon$ LRR de second ordre [LA75] (Launder et al., 1975) qui simule l’anisotropie de la turbulence. Des conditions aux limites sont imposées sur les faces du domaine (Figure 5.2). Une condition automatique d’entrée/sortie est établie pour les limites latérales du domaine car les profils dynamiques varient avec le temps. La figure 5.3 montre le champ horaire de la vitesse du vent, de la direction du vent, et de l’écart-type de la direction du vent pour cet essai, pris en considération à l’entrée du domaine. Les points rouges représentent les moyennes sur deux minutes. Pour l’écoulement d’entrée, une condition limite de Dirichlet est appliquée pour la vitesse, la température et les variables turbulentes avec des profils analytiques basés sur la théorie de similitude de Monin-Obukhov (MOST). Les fonctions de stabilité de Businger et al. (1971) sont utilisées pour calculer la vitesse et la température moyenne du vent. Les variables de turbulence, c’est-à-dire l’énergie cinétique et le taux

de dissipation, sont obtenues en utilisant la paramétrisation de Dyer (1974). Pour l'écoulement à la sortie du domaine, une condition de type Neumann est automatiquement imposée aux variables transportées, sauf pour la pression. Une condition limite d'entrée est fixée pour le haut du domaine afin de maintenir un profil de vitesse continu. Le sol est traité comme une paroi rugueuse et une longueur de rugosité de 0,005 m est imposée.

Le rejet du traceur passif est modélisé par un terme de source massique. Un débit de 0,032 g/s est injecté dans une cellule près de la hauteur de rejet expérimentale (1,5 m) (Figure 5.2). Selon Luhar (2011), la direction du vent ($\alpha = 196,8^\circ$) est en fait la valeur moyenne brute sur la durée de 48 min du test, décalée d'un angle de $45,2^\circ$. Cette valeur est cohérente avec l'emplacement angulaire des maxima observés dans les courbes de concentration. Le flux de concentration turbulent est modélisé par le modèle algébrique GGDH (Daly & Harlow, 1970). La simulation de l'écoulement est réalisée à l'aide d'un algorithme en temps instationnaire. Les phases continue et dispersée sont calculées simultanément sur un nombre d'itérations dépendant de la durée du fichier météorologique variable à l'entrée du domaine. Ainsi, les simulations réalisées comportent 29400 itérations pour un pas de temps moyen d'environ 0,1 s.

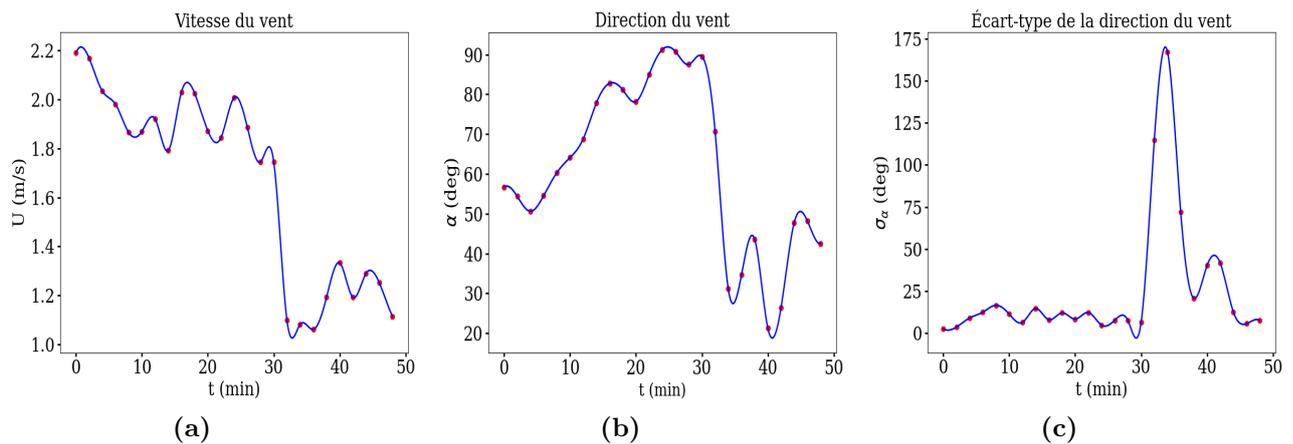


FIGURE 5.3 – Champ horaire de la vitesse du vent, de la direction du vent, et de l'écart-type de la direction du vent pour l'essai 10, pris en compte à l'entrée du domaine. Les points rouges correspondent aux moyennes sur deux minutes.

5.5 Résultats et discussion

5.5.1 Résultats avec le modèle $R_{ij} - \varepsilon$

Les contours de concentration au sol (\overline{CU}/Q) observés et prédits sont présentés dans la figure 5.4. Les lignes de contour montrent clairement l'effet de méandres du panache en raison de la variabilité du vent. La distribution de la concentration pour les deux isolignes de contour varie entre $3 \times 10^{-6} \text{ m}^{-2}$ et $0,001 \text{ m}^{-2}$. Qualitativement, les contours modélisés sont assez similaires à ceux observés.

Cependant, la propagation latérale du panache (*plume spread*), qui définit la largeur de la zone où le traceur SF6 est détecté, est plus importante pour le contour modélisé que pour le contour

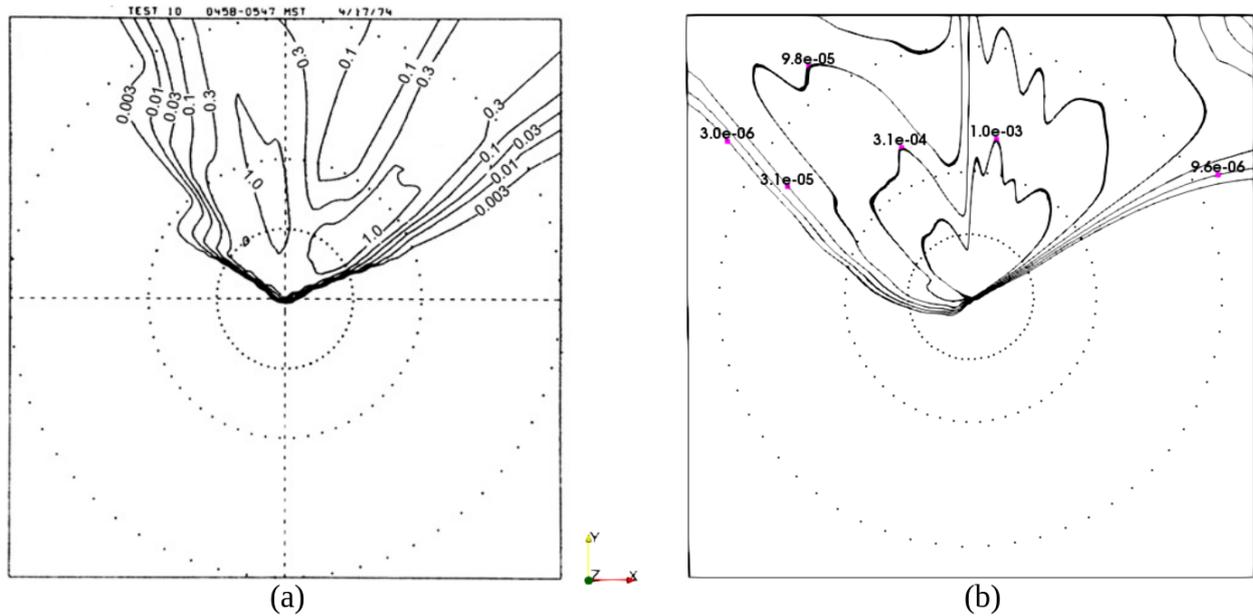


FIGURE 5.4 – Courbes de concentration au niveau du sol (m^{-2}) pour le test-10 montrant (a) la distribution de concentration observée (Sagendorf & Dickson, 1974); les valeurs sur les isolignes doivent être multipliées par 10^{-3} (b) la distribution de concentration modélisée obtenue à partir de la simulation CFD.

observé. Le table 5.3 présente les valeurs de la largeur du panache pour les contours observés et modélisés sur les trois arcs de mesure. Le modèle CFD prédit une concentration au niveau de sept récepteurs supplémentaires situés sur les arcs de 100 et 200 m, ainsi qu'au niveau de six récepteurs supplémentaires situés sur l'arc de 400 m.

TABLE 5.3 – Comparaison de la largeur observée du panache (en degrés) avec la largeur modélisée du panache sur les trois arcs de récepteurs.

Rayon de l'arc (m)	100	200	400
Largeur observée du panache ($^{\circ}$)	132	102	90
Largeur modélisée du panache ($^{\circ}$)	174	144	126

La figure 5.5 présente les profils de concentration observés (en noir) et prédits (en rouge, avec le modèle $R_{ij} - \varepsilon$) sur les trois arcs de mesure. Comme indiqué précédemment dans l'analyse qualitative, la distribution de la concentration se répartit sur plusieurs récepteurs, ce qui conduit à un profil prédit plus large que le profil observé du côté gauche du graphique. Il est également remarquable que le modèle CFD parvient à prédire presque exactement les pics de concentration malgré un déphasage entre le profil prédit et observé. Des phases de sous- et de sur-prédiction de la concentration mesurée alternent le long du profil sur les trois arcs. Ce comportement est attendu dans le cadre d'une simulation impliquant un phénomène de dispersion dans des conditions de vent faible et variable.

Pour évaluer la performance du modèle CFD, nous avons utilisé plusieurs mesures statistiques. Dans cette démarche, nous avons éliminé toutes les paires de concentrations pour lesquelles les valeurs mesurées, prédites, ou les deux, étaient inférieures à la limite de détection ($10^{-7} m^{-2}$). Il est

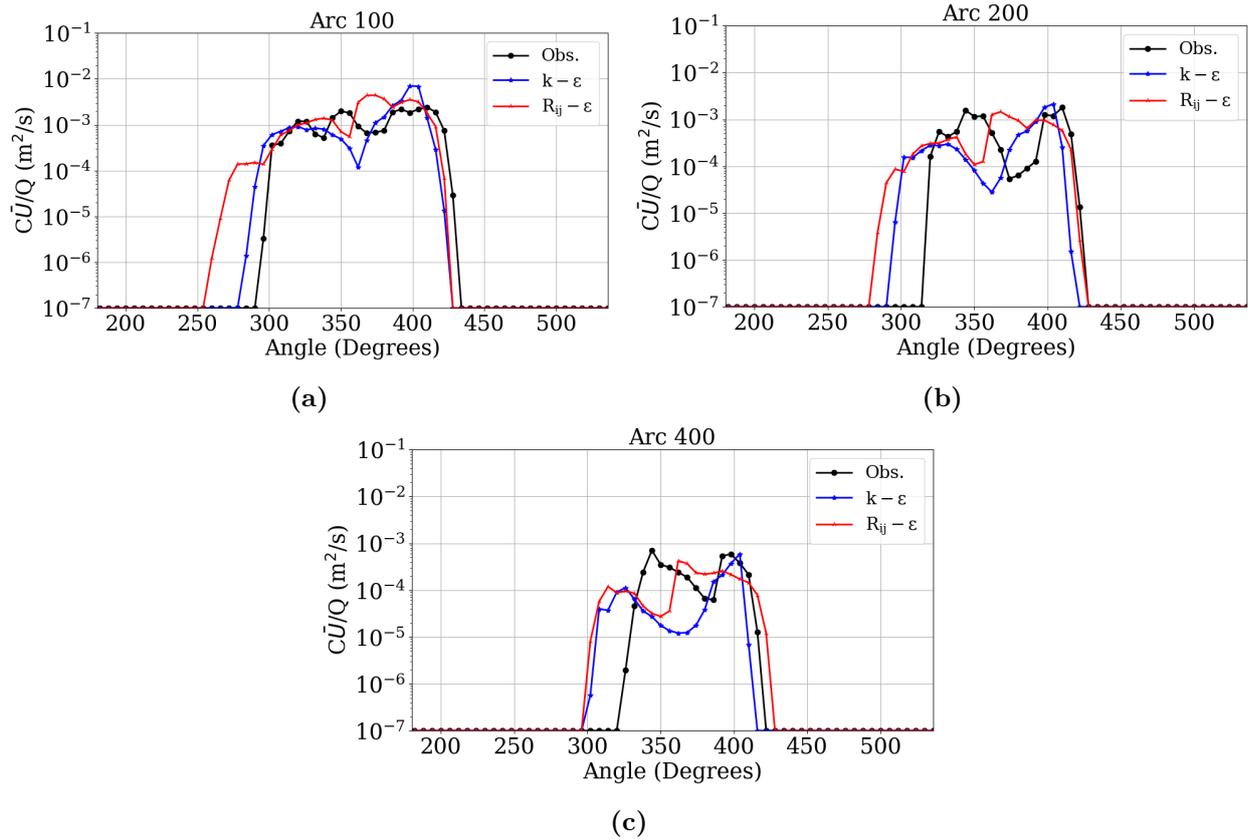


FIGURE 5.5 – Comparaison entre la concentration de SF6 observée et prédite pour l’essai 10 à (a) 100 m , (b) 200 m et (c) 400 m. La courbe rouge représente les prédictions du modèle $R_{ij} - \epsilon$. La courbe représente les prédictions du modèle $k - \epsilon$.

important de noter que le modèle CFD a tendance à surestimer ou sous-estimer considérablement la concentration mesurée, en particulier à une certaine distance de la source (sur l’arc de 400 m).

Les résultats des mesures de performance statistique sont présentés dans le tableau 5.4. Conformément aux critères de performance, un modèle serait considéré comme parfait si les valeurs de RMB-TT, NMSE, FB, FS, et COR étaient toutes égales à zéro, tandis que FAC2, IOA, et VG seraient égales à un, comme défini par Chang et Hanna (2004).

Selon nos résultats, le modèle CFD prédit correctement la concentration pour 37,5% des points avec un facteur de deux. Cependant, la valeur négative de FB (-0,24) indique une légère sur-prédiction globale par rapport aux observations. En outre, les valeurs de MG (=0,88) et VG (=11,1, bien que non mentionnée dans le tableau) révèlent une grande dispersion des points.

5.5.2 Comparaison avec les modèles gaussiens et le modèle $k - \epsilon$

Dans la phase de validation des observations d’Idaho Falls, l’une des méthodes employées par Sagendorf et Dickson (1974) consiste à calculer la concentration à chaque position de capteur le long du segment de panache pendant des intervalles de 2 minutes, puis à additionner les résultats

pour déterminer la concentration totale. Cette méthode est connue sous le nom d'approche du "panache segmenté". L'intervalle de temps de 2 minutes a été considéré comme suffisamment court pour décrire le schéma d'écoulement tourbillonnant et sinueux, tout en fournissant un nombre de points de données suffisant pour calculer des moyennes et des écarts-types raisonnables.

Dans les conditions d'écoulement stables, la diffusion verticale est limitée, ce qui signifie que les concentrations au niveau du sol peuvent être très sensibles à la hauteur de la source. Le rapport technique de Sagendorf et Dickson (1974) mentionne également qu'un nuage de brouillard d'huile a été libéré en même temps que le traceur SF6, afin de permettre une observation visuelle du panache. Cependant, il a été démontré que le panache de brouillard s'incline à mesure qu'il s'éloigne de la source. Par conséquent, une hauteur d'émission effective moyenne de 3 mètres a été considérée comme appropriée.

En parallèle, une étude de sensibilité menée par Luhar (2011), en prenant en compte des rejets à différentes hauteurs (de 1,5 mètre à 4 mètres, par incréments de 0,5 mètre), a montré que leur modèle gaussien fonctionnait mieux à 3 mètres et 3,5 mètres, avec de meilleures prédictions obtenues à $z=3$ mètres (où FB était relativement plus faible).

La concentration calculée à partir de l'approche du panache segmenté est tracée et comparée à la concentration modélisée et à la concentration expérimentale dans la figure 5.6. Les résultats statistiques du modèle gaussien sont résumés dans le tableau 5.4. Le modèle gaussien sous-estime la concentration, en particulier à proximité de la source. Il prédit correctement 39,3% des points à un facteur de deux près. La valeur de FB du modèle gaussien indique une sous-prédiction par rapport aux observations.

TABLE 5.4 – Mesures de performance statistique évaluées pour les résultats des modèles CFD et gaussien pour l'essai 10

	NMSE	COR	FAC2	IOA	FS	FB	RMB-TT	MG
Modèle CFD	1,63	0,41	0,375	0,57	-0,52	-0,24	0,59	0,88
Modèle gaussien (Sagendorf & Dickson, 1976)	1,98	0,43	0,393	0,59	0,61	0,71	-0,51	4,34
Valeurs idéales pour un modèle parfait	0	1	1	1	0	0	0	1

Le modèle $k-\varepsilon$ standard (Launder & Spalding, 1974) est utilisé pour calculer le champ dynamique, tandis que le modèle algébrique à hypothèse de gradient simple (SGDH) est utilisé pour la concentration. Le profil de concentration est comparé à celui obtenu par la simulation du modèle $R_{ij}-\varepsilon$ (Figure 5.5). Le déphasage entre les profils de concentration mesurés et modélisés semble être moins important avec le modèle $k-\varepsilon$, notamment au voisinage de la source (Arc 100).

L'évaluation quantitative a montré que le modèle $k-\varepsilon$ prédit environ 41% des valeurs de concentration totales observées dans la gamme de FAC2, ce qui est un pourcentage légèrement plus élevé que celui obtenu avec le modèle $R_{ij}-\varepsilon$. En analysant les valeurs expérimentales de concentration,

nous constatons que les valeurs maximales sont obtenues à 410° (récepteur n°39), 410° (récepteur n°39) et 344° (récepteur n°28) sur les arcs de 100 m, 200 m et 400 m, respectivement.

Par contre, les prédictions des trois modèles gaussiens dans AERMOD (LW1, LW3 et FASTALL) (Pandey & Sharan, 2019) sont situées au 31^{ème} récepteur (362°) sur chaque arc. Un comportement similaire est observé avec le modèle gaussien de Sagendorf et Dickson (1974), où le pic de concentration aux trois arcs est obtenu au 38^{ème} capteur (404°).

Selon Sagendorf et Dickson (1974), le modèle suppose que le segment du panache continue dans la direction où il a commencé et traverse les trois arcs. En revanche, les résultats numériques des simulations, utilisant soit $R_{ij} - \varepsilon$ soit $k - \varepsilon$, montrent que le panache ne suit pas une trajectoire uniforme, ainsi, les valeurs maximales de concentration sont obtenues à des positions variables des récepteurs sur chaque arc. Par exemple, en utilisant le modèle $R_{ij} - \varepsilon$, les pics de concentration sont déterminés à : 374° (récepteur n°33) à 100 m ; 368° (récepteur n°32) à 200 m et 362° (récepteur n°31) à 400 m. Ceux obtenus avec un modèle $k - \varepsilon$ sont situés à : 398° (récepteur n°37) à 100 m et 404° (récepteur n°38) à 200 et 400 m.

Les profils de concentration résultant des modèles gaussiens sont présentés dans la figure 5.6 et comparés au profil de concentration observé ainsi qu'à la prédiction du modèle $k - \varepsilon$. Les rapports des pics de concentration entre les valeurs mesurées et calculées sont présentés dans le tableau 5.5. Les concentrations maximales obtenues par le modèle AERMOD ne sont pas indiquées dans le tableau car elles ne sont pas disponibles dans l'article de Pandey et Sharan (2019) pour chaque test à part. À l'exception de l'approche gaussienne, qui donne des résultats relativement acceptables, il est difficile de juger quel modèle de turbulence prédit le mieux les maxima de concentration, d'autant que les modèles algébriques utilisés diffèrent d'un modèle à l'autre. Cependant, il semble que le modèle $k - \varepsilon$ avec le modèle SGDH isotrope utilisé pour calculer le flux de concentration turbulent a tendance à surestimer les pics de concentration, surtout sur l'arc proche de la source. Le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ avec le modèle algébrique GGDH donne des ratios relativement plus raisonnables sur les trois arcs, avec toujours une surestimation du pic de concentration à 100 m de la source.

TABLE 5.5 – Comparaison entre les pics de concentration calculés et mesurés aux arcs de 100, 200 et 400 m pour l'essai 10. a = mesures ; b = modèle $R_{ij} - \varepsilon$; c = modèle $k - \varepsilon$; d = modèle Gaussien (Sagendorf & Dickson, 1974)

Distance de la source (m)	a	b	c	d	b/a	c/a	d/a
100	2,41E-03	4,42E-03	7,04E-03	1,60E-03	1,84	2,93	0,66
200	1,80E-03	1,46E-03	2,13E-03	1,27E-03	0,81	1,18	0,71
400	7,08E-04	4,24E-04	5,91E-04	5,60E-04	0,60	0,83	0,79

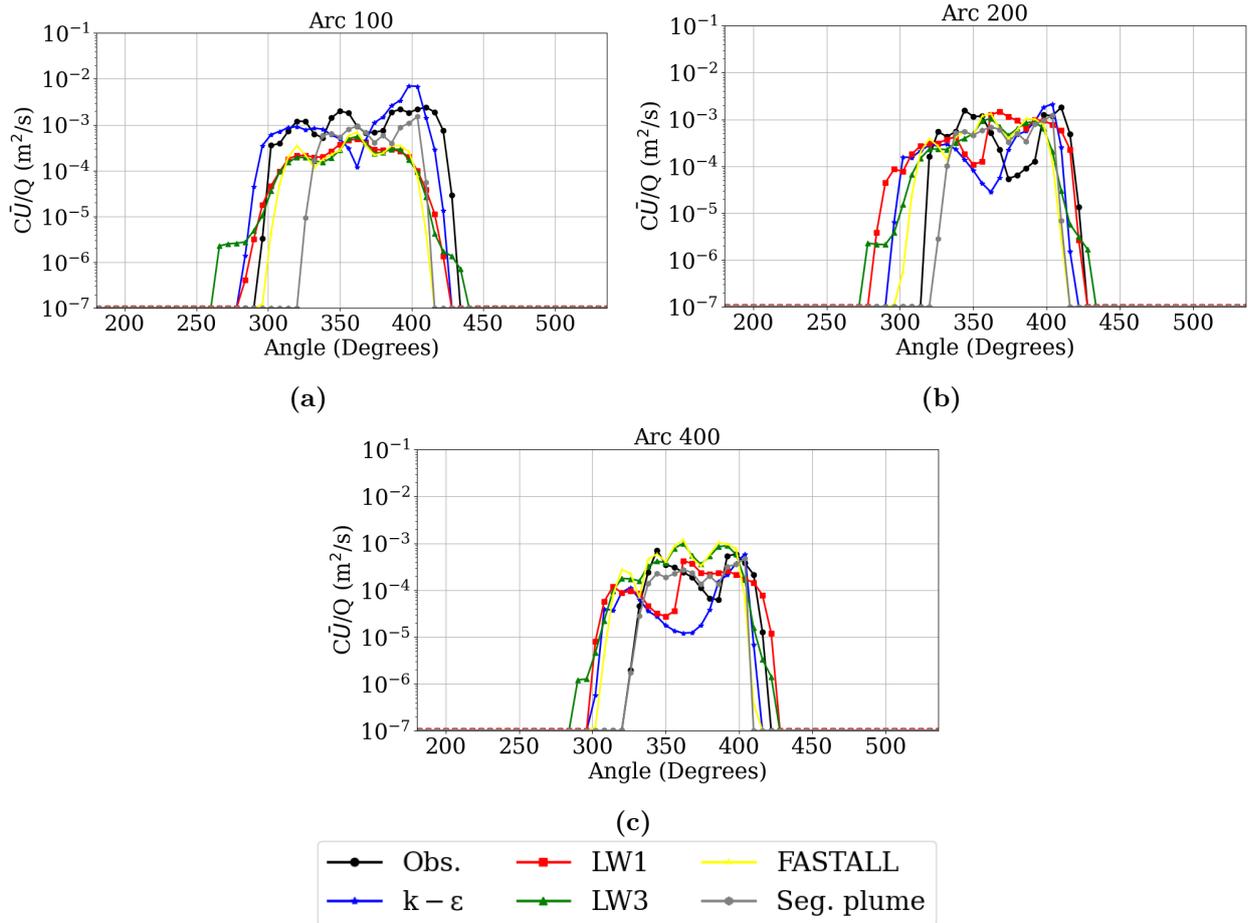


FIGURE 5.6 – Comparaison entre les concentrations de SF6 observées et prédites pour l’essai 10 à (a) 100 m, (b) 200 m et (c) 400 m de la source de rejet. Les résultats prédits correspondent à ceux de la CFD avec le modèle $R_{ij} - \varepsilon$, ainsi qu’aux résultats des modèles gaussien AERMOT (LW1, LW3 et FASTALL) (Pandey & Sharan, 2019) et au modèle gaussien de Sagendorf et Dickson (1974).

5.6 Amélioration des paramètres physiques et numériques

L’étude précédente a été menée en se basant sur plusieurs hypothèses, mais il existe des possibilités d’amélioration pour obtenir de meilleures prédictions dans les simulations ultérieures. Voici brièvement quelques domaines dans lesquels des améliorations peuvent être apportées concernant certains paramètres numériques et physiques de la modélisation :

5.6.1 Amélioration des profils d’entrée

Il est bien connu que la théorie de similarité de Monin-Obukhov (MOST) a une applicabilité limitée dans des conditions très stables en raison de la turbulence faible et intermittente, ainsi que d’autres facteurs complexes tels que les effets de la pente du terrain, les tourbillons à méso-échelle et les ondes de gravité dans la couche de surface relativement peu profonde, etc. (Voir Chapitre 4).

De plus, les valeurs de u^* et L n'étant pas disponibles pour les données d'INEL, elles ont été estimées grossièrement en utilisant une formulation empirique : $L = 1100u^{*2}$, où u^* est déduit du profil de vitesse en condition atmosphérique neutre : $u^* = \kappa U(z) / \ln(z_r/z_0)$ (Brusasca et al., 1992 ; Carvalho & de Vilhena, 2005 ; Zannetti, 2013). Cependant, cette approximation peut conduire à de grandes incohérences. Une meilleure approche, adoptée par Pandey et Sharan (2019), consiste à ajuster le profil de vitesse en fonction de la stabilité choisie aux mesures expérimentales de la vitesse du vent à différents niveaux, en utilisant une méthode de régression non linéaire, afin de trouver les valeurs optimales de u^* et L .

En ce qui concerne les profils de l'énergie cinétique et du taux de dissipation, il est recommandé d'utiliser, dans ce cas, des profils de turbulence qui utilisent des expressions non uniformes des tenseurs de contrainte de Reynolds (σ_U , σ_V et σ_W) pour un écoulement anisotrope.

5.6.2 Amélioration du modèle de turbulence

Le modèle $R_{ij} - \varepsilon LRR$ testé précédemment est le modèle standard [LA75] dans Code_Saturne. Ce modèle est capable de simuler l'anisotropie de la turbulence en résolvant des équations pour tous les termes du tenseur de Reynolds $U'_i U'_j$. La version standard du modèle peut être particulièrement intéressante pour étudier les phénomènes à forçage complexe au sol, tels que les zones de recirculation derrière les obstacles de géométrie complexe, qui induisent généralement une forte anisotropie de l'écoulement. Cependant, elle peut être remise en question dans des conditions de vents très faibles. Comme nous l'avons montré dans les chapitres précédents, il existe d'autres versions de ce modèle dans la littérature, y compris la version calibrée utilisée par Sadek (2013) et Sadek et al. (2013) [SA13], avec des coefficients calibrés adaptés aux flux atmosphériques dans l'atmosphère libre. C'est donc cette version [SA13] que nous adoptons dans les calculs suivants.

5.7 Cas d'amélioration des profils d'entrée

Dans cette section, nous présenterons les résultats numériques tenant compte des modifications mentionnées ci-dessus, concernant l'amélioration des profils d'entrée. Nous avons donc répété la simulation de l'essai 10 et effectué des simulations pour cinq autres essais : les essais 9, 11, 12, 13 et 14. Pour ces nouvelles simulations, nous avons utilisé des valeurs actualisées de L et u^* obtenues en ajustant des profils analytiques aux mesures de la vitesse du vent dans chaque essai. Tous ces essais ont été réalisés dans des conditions atmosphériques stables, allant de modérément stables à extrêmement stables, et caractérisées par un faible vent.

Les résultats de l'essai 10 sont présentés ci-dessous. Tout comme pour les autres essais, le modèle a été évalué quantitativement en utilisant des indicateurs statistiques. Les détails de cette évaluation se trouvent dans l'Annexe A.

5.7.1 Méthodologie

Voici un récapitulatif des paramètres utilisés pour la simulation du champ de vent et de la dispersion dans Code_Saturne :

1. Module physique : Module atmosphérique (air sec).
2. Maillage : Dimensions du domaine ($900 \times 900 \times 60$)m³ avec des cellules plus fines au niveau du sol et la source de rejet.
3. Modèle de turbulence : Modèle $R_{ij} - \varepsilon LRR$ [LA75].
4. Modèle algébrique pour le calcul des flux turbulents de température et concentration : Modèle GGDH (*Generalized Gradient Diffusion Hypothesis*).
5. Conditions initiales : conditions dynamiques et thermique correspondant à la première échéance du fichier météorologique variable.
6. Conditions aux limites :
 - Conditions d'entrée/sortie automatique imposées aux faces latérales du domaine. Les profils sont dérivés de la théorie MOST. Les expressions des fonctions de similarité utilisées pour la vitesse et la température sont présentées ci-dessous :
 - * Pour la vitesse : profils de Businger et al. (1971) et Hicks (1976) des équations 2.33 et 2.34. Pour chaque essai, les profils de vitesse sont ajustés à la vitesse moyenne du vent mesurée à 5 niveaux (2, 4, 6, 8 et 32 m au-dessus du sol) à l'aide d'une méthode de régression non linéaire. Cette méthode permet de calculer L et u^* non fournis par les mesures INEL. Leurs valeurs correspondant à chaque essai sont listées dans le tableau 5.6 , ainsi que d'autres grandeurs moyennées. La fonction de similarité la plus appropriée est sélectionnée en fonction de l'erreur quadratique moyenne minimale.
 - * Pour la température : profil de Businger et al. (1971) de l'équation 2.38
 - Les profils d'entrée de la turbulence, c'est-à-dire l'énergie cinétique k et le taux de dissipation ε , sont calculés à partir des profils de Kerschgens et al. (2000) (équations 2.41 et 2.42).
Les conditions d'entrée sont obtenues à partir du fichier météorologique dans lequel les profils dynamiques et thermiques sont calculés par rapport à la hauteur du domaine. Étant donné que la direction du vent varie considérablement, les vitesses et les directions du vent observées sont moyennées sur une période de 2 minutes dans les essais 9 et 10, et sur une période de 1 minute 20 secondes dans les essais 11, 12, 13 et 14, selon la méthode de Pandey et Sharan (2019). Par conséquent, les séries temporelles sont divisées en 30 sous-intervalles de 2 minutes ou 45 sous-intervalles de 1 minute 20 secondes chacun, selon les essais.
 - Conditions au sommet du domaine : conditions d'entrée simple.
 - Conditions au sol : loi de rugosité logarithmique avec une longueur de rugosité égale à 0,005m.

7. Terme source : pour chaque essai, un terme source de masse est défini, la volume de la source étant celui de la cellule proche du point de rejet du polluant. Le débit massique du polluant pour chaque essai est donné dans le tableau 5.6.
8. Paramètres numériques : les simulations sont effectuées en mode instationnaire pour résoudre le champ de vent variable et la dispersion dans le domaine. Le pas de temps est constant pendant la simulation ($\Delta t = 0.1s$). Pour garantir la convergence des calculs, un critère de convergence d'ordre minimum de 10^{-5} est fixé pour toutes les variables calculées. La méthode de reconstruction du gradient utilisée est la méthode des moindres carrés. L'algorithme PISO (*Pressure-Implicit with Splitting of Operators*) est utilisé pour le couplage pression-vitesse.

TABLE 5.6 – Caractéristiques des tests simulés de l'expérience d'Idaho Falls : U est la vitesse moyenne du vent, Θ est la direction du vent, u^* est la vitesse de friction calculée, L est la longueur Monin-Obukhov calculée, T_0 est la température près du sol (à 2 m) et Q est le débit massique rejeté du polluant.

N° d'essai	U (m/s)	α (°)	u^* (m/s)	L (m)	T_0 (°C)	Q (g/s)
9	0,80	339,7	0,032	7,772	-11,4	0,032
10	1,66	196,8	0,071	8,42	-3,9	0,032
11	1,93	270,9	0,035	0,534	1,4	0,031
12	1,08	277,6	0,016	0,318	-1,4	0,032
13	1,61	4,9	0,075	11,093	-3,7	0,033
14	1,47	37,4	0,059	5,69	-1,2	0,032

5.7.2 Analyse des résultats

Les résultats de la simulation pour l'essai 10 sont présentés dans la figure 5.7 et dans le tableau 5.7. Quant aux résultats des cinq autres essais (9, 11, 12, 13 et 15), ils sont disponibles dans la section A.3 de l'annexe A. Ces résultats comprennent uniquement les valeurs des mesures statistiques calculées entre les concentrations normalisées prédites et observées sur chacun des trois arcs de récepteurs. Les indicateurs statistiques évalués sont les suivants : l'erreur quadratique moyenne normalisée (NMSE), le biais fractionnel (FB), le biais moyen géométrique (MG), la fraction en facteur deux (FAC2), l'indice de concordance (IOA) et le coefficient de corrélation (COR).

Lorsqu'il s'agit de modéliser la dispersion de polluants en cas de vent faible, il est souvent difficile d'obtenir des résultats fiables, surtout lorsque la direction du vent change fréquemment. Par conséquent, la prédiction des pics de concentration dans le temps et dans l'espace devient un défi. En effet, la comparaison entre les résultats des modèles et les données mesurées s'avère ardue, car les modèles fournissent une moyenne d'ensemble, tandis que les observations résultent d'une unique réalisation (Wannberg et al., 2010). Cette difficulté est particulièrement marquée dans les conditions de dispersion en champ proche et de vent de faible vitesse. Malgré ces défis, nous présentons ces comparaisons dans le but d'évaluer le modèle aux fins d'analyses de sécurité. En contexte de sécurité, il est préférable que le modèle surestime les concentrations plutôt que de les sous-estimer.

En examinant les résultats, nous pouvons constater que, pour tous les essais, à l'exception de l'essai n°12 qui présente une grande variabilité dans la direction du vent tout en étant très stable, les valeurs de FAC2 sont supérieures à 50%, ce qui les rend acceptables. Cependant, en ce qui concerne la précision du modèle, nous observons un écart significatif entre les concentrations prédites et observées. Cela se reflète dans les valeurs élevées de NMSE, en particulier à des distances importantes de la source. De plus, la concordance entre les concentrations numériques et les concentrations mesurées est relativement faible, comme en témoignent les fréquentes valeurs faibles de COR.

En ce qui concerne l'indicateur FB, il est important de noter que les valeurs négatives indiquent une sur-prédiction, tandis que les valeurs positives suggèrent une sous-prédiction. À première vue, il pourrait sembler que le modèle tend à sous-estimer les concentrations, étant donné que les valeurs positives de FB l'emportent sur les valeurs négatives. Cependant, il convient de noter que le calcul du FB repose sur la moyenne des données observées et prédites, ce qui signifie que les données du FB sont influencées par la nature logarithmique des données. En conséquence, bien que de nombreuses prédictions puissent impliquer des valeurs légèrement surestimées, le calcul global du FB à partir des valeurs moyennes révèle un biais de sous-prédiction, principalement en raison des petites valeurs de concentration. Cela explique pourquoi l'indicateur FB semble indiquer une tendance à la sous-prédiction.

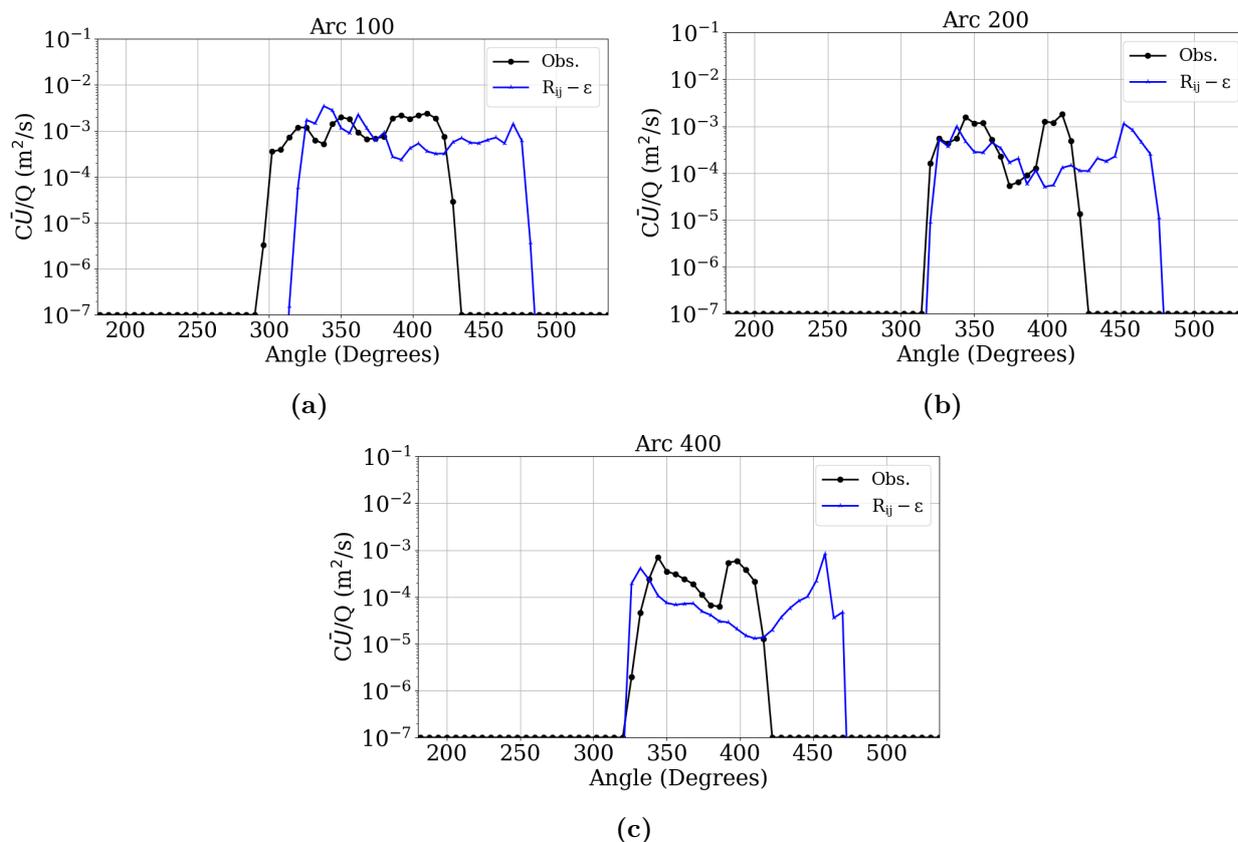


FIGURE 5.7 – Comparaison entre la concentration de SF6 observée et prédite pour le l'essai 10 à (a) 100 m , (b) 200 m et (c) 400m.

Les deux derniers tests 13 et 14 ont conduit à un écart significatif entre les concentrations prédites et observées (Tableaux A.4 et A.5). Les mesures statistiques calculées pour ces deux tests ne montrent pratiquement aucune concordance entre les valeurs de concentration observées et les valeurs numériques (comme en témoignent les valeurs très faibles du coefficient de corrélation, COR). Tout cela est lié à la mauvaise prédiction de la largeur du panache (*plume spread*) par le modèle, ce qui est probablement dû à un moyennage incorrect ou insuffisant des conditions aux limites.

TABLE 5.7 – Indicateurs statistiques évalués pour l'essai n°10 de l'expérience d'Idaho Falls.

Rayon d'arc (m)	NMSE	FB	MG	FAC2	IOA	COR
100	3,1	0,11	0,21	0,57	0,59	0,36
200	5,24	0,28	0,18	0,55	0,61	0,46
400	11	0,70	0,32	0,52	0,38	0,23

5.8 Cas d'amélioration du modèle de turbulence

5.8.1 Méthodologie

Dans cette partie, nous abordons la modélisation de la dispersion du traceur pour l'essai 10 de l'expérience d'Idaho Falls en utilisant le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ calibré [SA13]. Nous avons également choisi de présenter les résultats numériques des simulations URANS pour l'essai n°6 de la campagne expérimentale. Les caractéristiques du vent et de la source de rejet pour l'essai 10 et 6 sont présentées dans le tableau 5.6 et 5.8, respectivement.

Pour rappel, la vitesse du vent pendant ces essais est faible, et la stabilité atmosphérique est neutre et extrêmement stable pour les essais 6 et 10, respectivement. Les angles de la direction du vent ($25,1^\circ$ et $196,8^\circ$) rapportés par Luhar (2011) correspondent à la direction moyenne mesurée et décalée de $15,4^\circ$ et $45,2^\circ$ pour les essais 6 et 10, respectivement. Ces valeurs représentent les positions angulaires des maxima observés dans les profils de concentration pour chaque essai.

Pour les essais actuels, comme pour ceux simulés auparavant, nous simulons le champ de vent variable en considérant la vitesse et la direction du vent à une échéance de 2 minutes afin de vérifier si le modèle peut prédire les pics de concentration près et loin de la source ainsi que la largeur du panache.

En ce qui concerne la configuration numérique dans Code_Saturne, nous avons suivi les mêmes étapes que dans la partie précédente (propriétés physiques, conditions initiales, conditions aux limites, etc.). Cependant, la version du modèle de turbulence $R_{ij} - \varepsilon$ utilisée cette fois-ci est celle de Sadek (2013) [SA13]. Il est à noter que, dans le cas d'un profil d'entrée météorologique variable, un schéma numérique temporel pseudo-stationnaire (variant dans l'espace et le temps) est utilisé car il assure la convergence des résultats numériques.

TABLE 5.8 – Caractéristiques du test 6 de l'expérience d'Idaho Falls : U est la vitesse moyenne du vent, α est la direction du vent, u^* est la vitesse de friction calculée, L est la longueur Monin-Obukhov calculée, T_0 est la température près du sol (à 2 m) et Q est le débit massique rejeté du polluant.

N° d'essai	U (m/s)	α (°)	u^* (m/s)	L (m)	T_0 (°C)	Q (g/s)
6	1,29	25,1	0,075	533,395	Non renseigné	0,031

Dans la section suivante, nous présenterons les résultats qualitatifs et quantitatifs de la dispersion du traceur dans un environnement caractérisé par des vents faibles et des conditions atmosphériques neutres et stables. Nous examinerons comment la dispersion du traceur évolue dans un champ de vent variable dans ces conditions spécifiques.

5.8.2 Analyse des résultats numériques

Les résultats, montrant les profils de concentrations mesurés et prédits sur chaque arc de mesure, sont présentés dans les figures 5.8 et 5.10 pour les essais 6 et 10, respectivement. Des indicateurs statistiques sont calculés pour chaque essai, et les résultats sont présentés dans les figures 5.9 et 5.11, ainsi que dans le tableau 5.9.

On peut remarquer que le modèle fonctionne bien avec un écoulement stratifié neutre, même lorsque la vitesse du vent est inférieure à celle de l'essai en stratification stable. Les valeurs des mesures statistiques se situent dans la fourchette des critères acceptables pour les concentrations à 100 et 200 m, à l'exception des valeurs de VG. À mesure que l'on s'éloigne de la source (à 400 m), le profil de concentration devient légèrement plus large que celui mesuré, et le modèle prédit moins de valeurs de concentration dans une marge de facteur de deux par rapport aux observations. Dans l'ensemble, le modèle surestime légèrement les concentrations pour cet essai.

En ce qui concerne l'essai n°10, la combinaison de conditions de vent stables et faibles rend toujours difficile la prédiction efficace du profil de concentration observé, ce qui se traduit par des valeurs de coefficient de corrélation (COR) plus faibles. Les résultats obtenus à 200 m et 400 m de la source sont meilleurs que ceux obtenus à proximité de la source, avec des valeurs de FAC2 plus élevées.

TABLE 5.9 – Indicateurs statistiques évalués pour les essais n°6 et 10 de l'expérience d'Idaho Falls, ainsi que le ratio évalué pour les concentrations maximales (prédiction/observation). Des critères de performance du modèle sont également donnés pour certains indicateurs selon Chang et Hanna (2004). Un seuil de 10^{-7} est appliqué aux concentrations numériques inférieures à cette valeur.

N° essai	Arc (m)	NMSE $x < 4$	FB $-0,3 < x < 0,3$	VG $x < 1,6$	MG $0,7 < x < 1,3$	FAC2 $x > 0,5$	IOA -	COR -	$(C_p/C_o)_{max}$ -
6	100	3,82	-0,17	3,37	1,01	0,85	0,91	0,85	1,10
	200	3,28	-0,32	2,47	0,83	0,90	0,93	0,90	1,10
	400	12,05	-0,16	25,38	0,80	0,88	0,68	0,51	0,51
10	100	6,69	0,84	53704,46	4,19	0,68	0,59	0,40	1,15
	200	13,03	0,95	668,72	2,33	0,75	0,49	0,38	0,63
	400	11,28	0,91	26,59	1,87	0,83	0,58	0,53	0,62

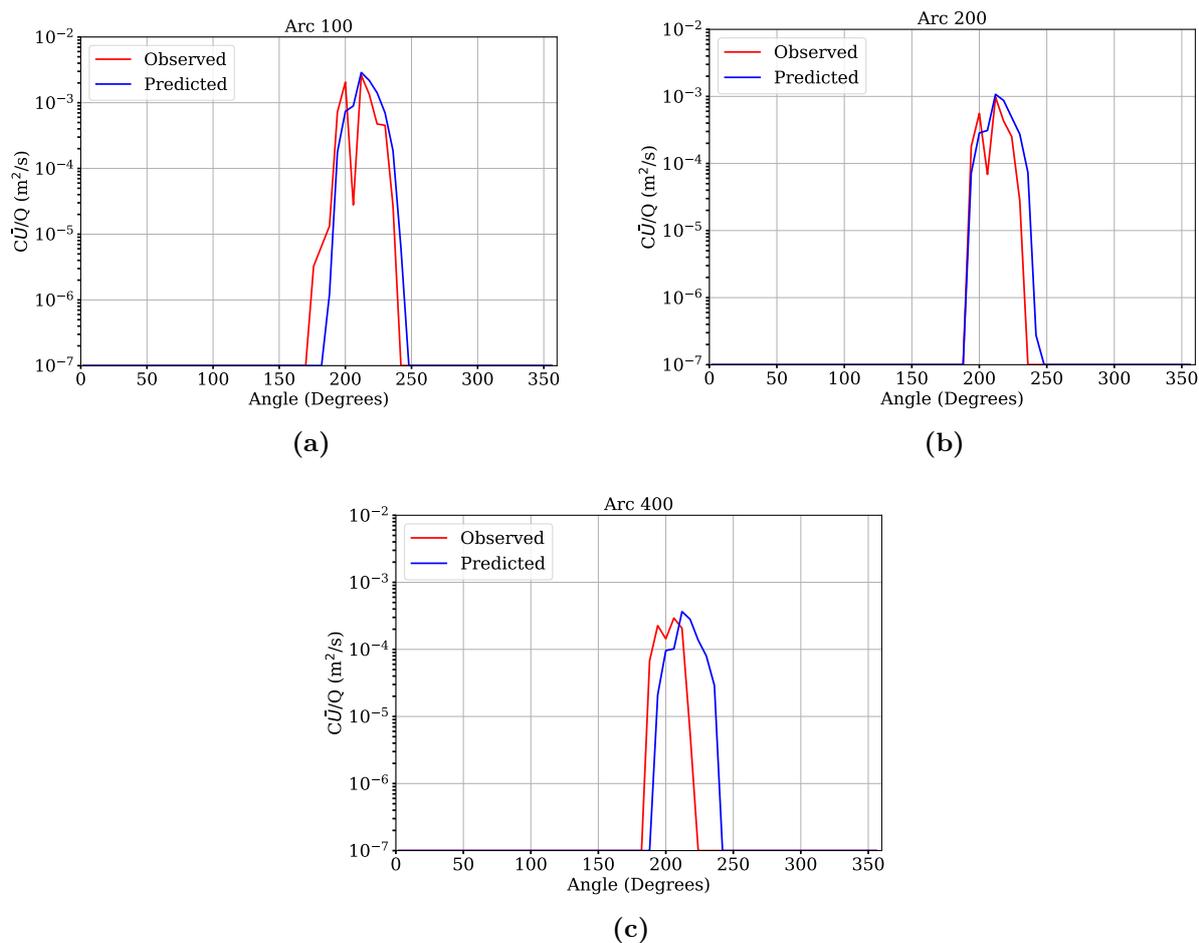


FIGURE 5.8 – Comparaison entre la concentration au sol prédite et observée pour l'essai 6

5.9 Modélisation de la dispersion en condition de vent faible à l'aide d'un modèle gaussien

Nous avons comparé dans les sections précédentes les résultats CFD aux résultats issus des modèles gaussiens de Sagendorf et Dickson (1974) et Pandey et Sharan (2019)). Une autre méthode de type gaussien a été développée au sein du laboratoire LMEE. Cette méthode, appelée MSTA (*Meandering Short Term Average*), est initialement basée sur la méthode STA (*Short Term Average*) développée par Sharan et al. (1995). Cette dernière consiste à découper la période d'intégration en plusieurs sous intervalles compatibles en fonction du temps de parcours des particules. La concentration est ainsi calculée pour chaque sous-intervalle puis moyennée sur l'ensemble de la période d'intégration. Pour chaque sous-intervalle, les paramètres météorologiques (écarts types et directions du vent) sont estimés à petite échelle. Ce processus conduit souvent à des biais dans le calcul des concentrations, notamment lorsque les effets de méandres sont forts.

Très souvent, dans de tels écoulements, deux échelles se superposent : l'échelle de turbulence (petite échelle), responsable du mélange, et l'échelle de méandres (grande échelle), qui régit le transport et

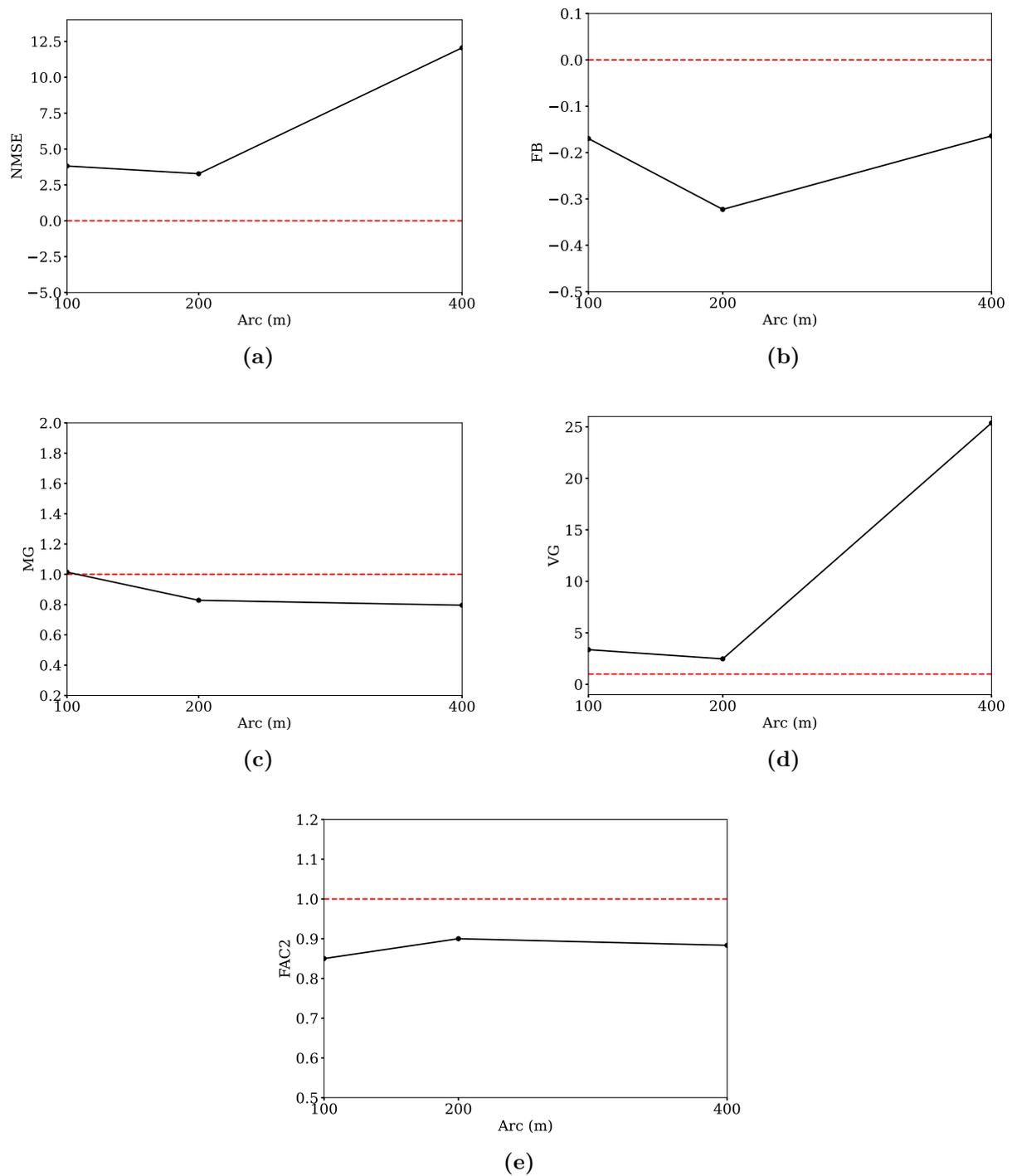


FIGURE 5.9 – Évolution des indicateurs statistiques obtenus pour l'ensemble des valeurs de concentrations en condition neutre sur les trois axes des capteurs. Les lignes pointillées rouges représentent les valeurs idéales des indicateurs statistiques.

l'advection. Dans le cadre du MSTa, pour chaque sous-intervalle, les écarts types de la vitesse du vent sont calculés à la micro-échelle de turbulence tandis que les directions du vent ne sont prises en compte qu'à l'échelle de méandres. De plus, plusieurs directions du vent peuvent être associées à chaque sous-intervalle ; dans ces conditions, les concentrations sont calculées pour chaque direction

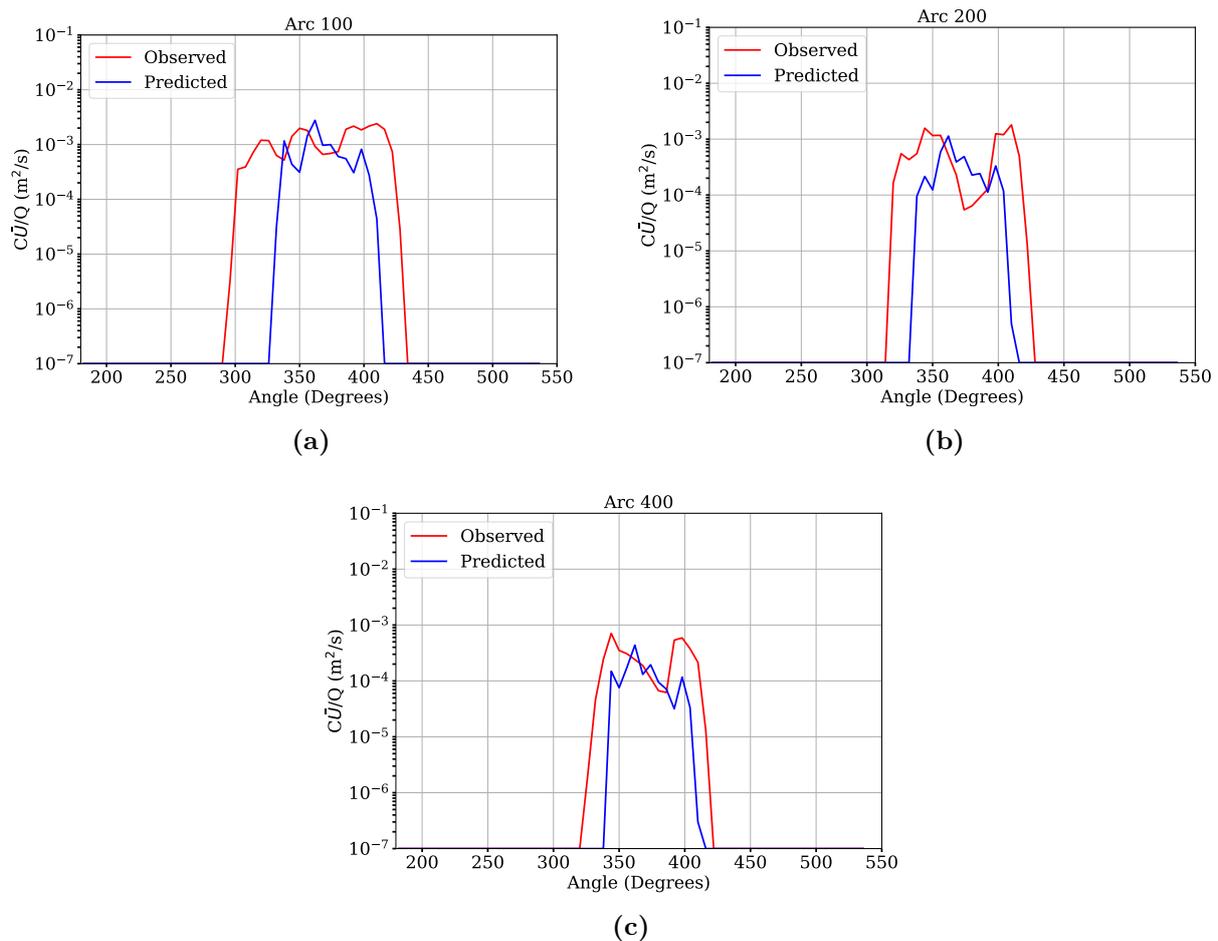


FIGURE 5.10 – Comparaison entre la concentration au sol prédite et observée pour l'essai 10

du sous-intervalle et ensuite moyennées sur la période d'intégration. La méthode MSTA couplée à l'équation de dispersion (Sharan et al., 1995) est évaluée en utilisant les données de l'expérience inel à faible vent (Idaho Falls). Elle montre une amélioration de l'estimation de la concentration des particules par rapport à la méthode STA classique. La MSTA tend vers des valeurs asymptotiques, lorsque le nombre de directions augmente dans chaque sous-intervalle.

Dans la section suivante, nous exposons le formalisme mathématique de la méthode MSTA, suivi des résultats statistiques quantitatifs obtenus en l'appliquant à l'expérience de rejet de traceur menée à Idaho Falls.

5.9.1 Rappel de la théorie

Dans un repère cartésien, soit :

- S une source ponctuelle de coordonnées (x_s, y_s, z_s) ;
- R un récepteur de coordonnées (x_r, y_r, z_r) ;
- \vec{SR} le vecteur partant du point S vers le point R ;

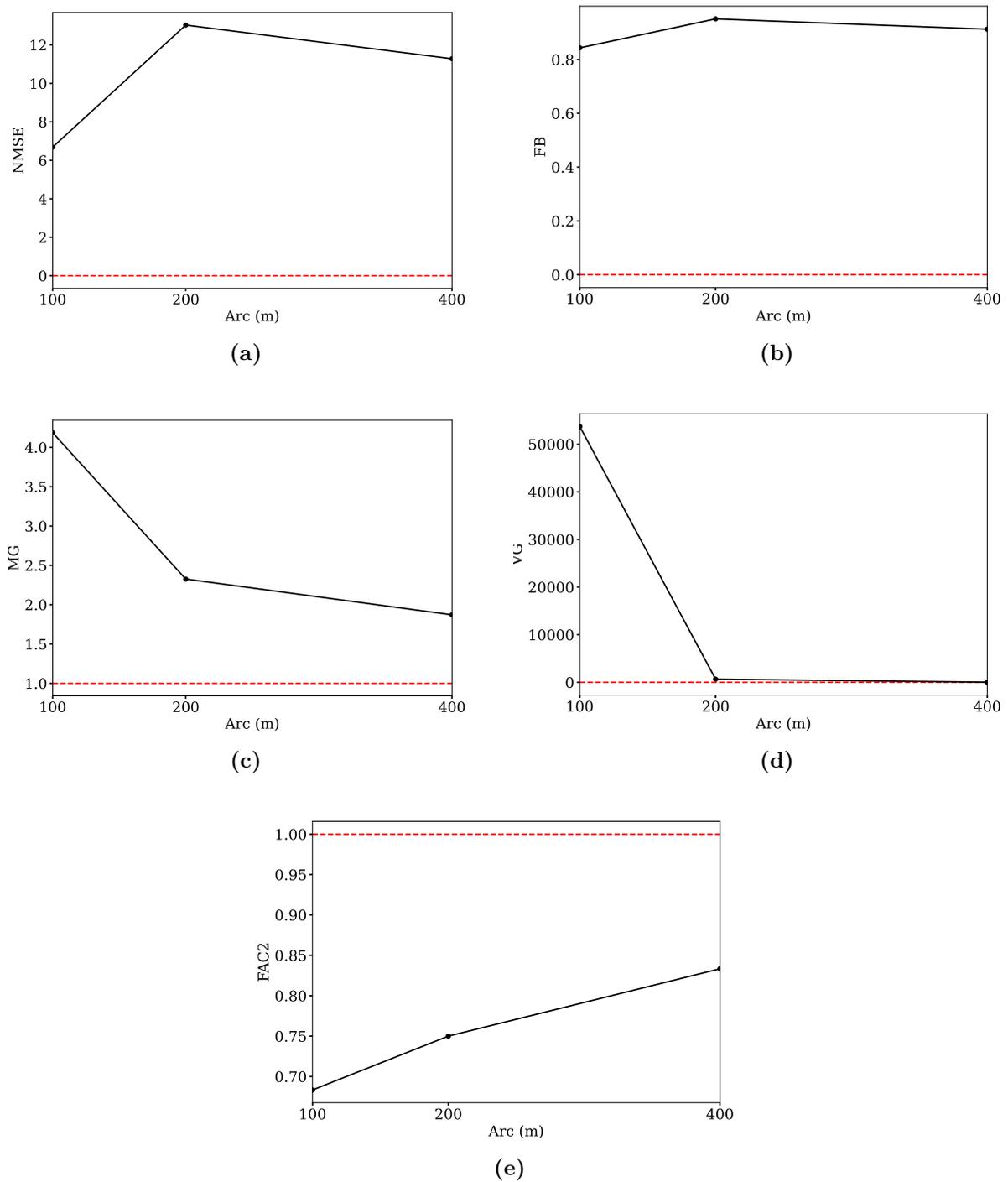


FIGURE 5.11 – Évolution des indicateurs statistiques obtenus pour l'ensemble des valeurs de concentrations en condition stable sur les trois axes des capteurs. Les lignes pointillées rouges représentent les valeurs idéales des indicateurs statistiques.

- $\vec{1}_{WD}$ le vecteur unitaire de la direction du vent ;
- $\vec{1}_{WDT}$ le vecteur unitaire orthogonal à la direction du vent ;
- α l'angle entre le vecteur unitaire $\vec{1}_{WD}$ et le vecteur \vec{SR} ;

La distance longitudinale entre la source et le récepteur est définie comme x avec :

$$x = \overrightarrow{1_{WD}} \times \overrightarrow{SR} = \|\overrightarrow{SR}\| \times \cos(\alpha) \quad (5.1)$$

La distance transversale entre la source et le récepteur est définie comme y avec :

$$y = \overrightarrow{1_{WDT}} \times \overrightarrow{SR} = \|\overrightarrow{SR}\| \times \sin(\alpha) \quad (5.2)$$

Soit U la vitesse moyenne du vent, σ_x , σ_y et σ_z les écarts type dans la direction x , y et z , respectivement. Dans le cas des vents faibles, Sharan et al. (1995) ont proposé la formule suivante pour calculer la concentration moyenne sur chaque capteur (récepteur) R dans l'espace, résultant d'une source avec un débit massique Q située à une hauteur H au-dessus du sol :

$$C(x, y, z, H) = \frac{Qx e^{-x^2/\sigma_x^2}}{2\pi U \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \left[\frac{e^{-(x/\sigma_x)p}}{p} + \frac{e^{-(x/\sigma_x)q}}{q} \right] \quad (5.3)$$

Où :

$$p = \left[\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{(z+H)^2}{\sigma_z^2} \right]^{1/2}$$

$$q = \left[\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{\sigma_z^2} \right]^{1/2}$$

Les distances longitudinale et transversale entre la source et le récepteur pour chaque sous-intervalle, sont définies comme suit :

$$x_k = \|\overrightarrow{SR}\| \times \cos(\alpha_k) \quad (5.4)$$

$$y_k = \|\overrightarrow{SR}\| \times \sin(\alpha_k) \quad (5.5)$$

où α_k est l'angle entre la direction moyenne du vent et le vecteur \overrightarrow{SR} durant $k^{\text{ième}}$ le temps d'intégration à courte durée T_n . Ainsi, dans le cadre de la moyenne à court terme, on peut calculer la concentration moyenne à tout emplacement de récepteur, en utilisant la concentration moyenne calculée pour chaque sous-intervalle $C_k(x_k, y_k, z_k, H)$, tel que :

$$C(x, y, z, H) = \sum_{k=1}^n \frac{C_k(x_k, y_k, z_k, H)}{n} \quad (5.6)$$

5.9.2 Description de la méthode MSTA (*Meandering Short Time Average*)

La méthode proposée tente de construire un compromis entre la bonne représentation du processus de mélange et la bonne représentation des caractéristiques des méandres dans le cas d'une dispersion dans des conditions de vent faible. La structure de la méthode MSTA est basée sur celle de la STA, les principales différences sont les angles associés au $k^{\text{ième}}$ sous-intervalle particulier de T (le temps d'intégration). ψ_k est alors considéré à la place du α_k .

Soit $\alpha(t)$ la variation de direction pendant la période T , $\alpha_f(t)$ la direction filtrée à la fréquence des méandres $f = 1/T^*$. ψ_k est égal à la valeur de la direction filtrée au centre du $k^{\text{ième}}$ sous-intervalle. Le $k^{\text{ième}}$ sous-intervalle a les caractéristiques suivantes :

- seuil inférieur : $lb_k = \frac{k-1}{n}T$;
- seuil supérieur : $ub_k = \frac{k}{n}T$;
- centre : $ce_k = \frac{2k-1}{2n}T$

Donc, $\psi_k = \alpha_f\left(\frac{2k-1}{2n}T\right)$. Dans certaines conditions, la valeur $\sigma(\psi_k)$ peut être grande, reflétant de grandes fluctuations de la direction du vent pendant la période T_n , dans de telles conditions, ψ_k peut être représenté par plus d'un angle pour optimiser la modélisation de la dispersion (détection des pics). La concentration moyenne $C_k(x_k, y_k, z_k, H)$ est la moyenne de la concentration moyenne calculée pour chaque direction de l'ensemble $\psi_k = (\psi_{k1}, \psi_{k2}, \dots, \psi_{km})$:

$$C_k(x_k, y_k, z_k, H) = \frac{Qx_{ki}e^{-x_{ki}^2/\sigma_{xk}^2}}{2\pi U\sigma_{xk}\sigma_{yk}\sigma_{zk}} \left[\frac{e^{-(x_{ki}/\sigma_{xk})p_{ki}}}{p_{ki}} + \frac{e^{-(x_{ki}/\sigma_{xk})q_{ki}}}{q_{ki}} \right] \quad (5.7)$$

Où :

$$p_{ki} = \left[\frac{x_{ki}^2}{\sigma_{xk}^2} + \frac{y_{ki}^2}{\sigma_{yk}^2} + \frac{(z_{ki}+H)^2}{\sigma_{zk}^2} \right]^{1/2}$$

$$q_{ki} = \left[\frac{x_{ki}^2}{\sigma_{xk}^2} + \frac{y_{ki}^2}{\sigma_{yk}^2} + \frac{(z_{ki}-H)^2}{\sigma_{zk}^2} \right]^{1/2}$$

$$x_{ki} = \|\vec{SR}\| \times \cos(\psi_{ki}) \quad (5.8)$$

$$y_{ki} = \|\vec{SR}\| \times \sin(\psi_{ki}) \quad (5.9)$$

Si l'on considère le sous-intervalle $k^{\text{ième}}$, l'ensemble des angles m (directions) représentent les valeurs de $\alpha_f(t)$ uniformément réparties dans le sous-intervalle. Le sous-intervalle $k^{\text{ième}}$ est ensuite divisé en m segments. Chacun des $j^{\text{ième}}$ segments inclus dans le $k^{\text{ième}}$ sous-intervalle a les caractéristiques suivantes :

- limite inférieure, $lb_i = \frac{i-1}{m}.T_n$;
- limite supérieure : $ub_i = \frac{i}{m}.T_n$;

— centre, $ce_j = \frac{2j-1}{2m}T_n$. Donc, $\psi_{ki} = \alpha_f \left(\frac{2i-1}{2m}T_n \right)$.

5.9.3 Évaluation de la méthode MSTA

La méthode MSTA a été appliquée dans le cadre de l'expérience Inel à Idaho Falls. La première étape de sa mise en œuvre consiste à sélectionner une courte période d'intégration, notée T_n , en fonction du temps de parcours du fluide. Ce temps de parcours est calculé en prenant le rapport entre la distance entre la source et le récepteur, et la vitesse moyenne du vent. Ainsi, chaque scénario d'essai de l'expérience nécessite sa propre période d'intégration.

5.9.3.1 Paramètres de dispersion

La performance de la méthode MSTA est évaluée en utilisant les quatre paramètres de dispersion suivants pour les écarts types :

— Paramètres de Cirillo et Poli (1992) :

$$\sigma_x = x \times \sqrt{\cosh(\sigma_\theta^2) - 1} \quad (5.10)$$

$$\sigma_y = x \times \sqrt{\sinh(\sigma_\theta^2)} \quad (5.11)$$

— Paramètres de Luhar (2010) :

$$\sigma_x = x \times \sqrt{\left[1 + \left(\frac{\sigma_U}{U} \right)^2 \times \exp(-\sigma_\theta^2) \right] \times \cosh(\sigma_\alpha^2) - 1} \quad (5.12)$$

$$\sigma_y = x \times \sqrt{\left[1 + \left(\frac{\sigma_U}{U} \right)^2 \times \exp(-\sigma_\theta^2) \right] \times \sinh(\sigma_\alpha^2)} \quad (5.13)$$

— Paramètres de Degrazia et al. (2005) :

$$\sigma_x = \sigma_V t \sqrt{2} \left[\frac{T_{Ly}}{t} - \left(\frac{T_{Ly}}{t} \right)^2 (1 - e^{-t/T_{Ly}}) \right]^{1/2} \quad (5.14)$$

$$\sigma_y = I_V x \sqrt{2} \left[\frac{UT_{Ly}}{x} - \left(\frac{UT_{Ly}}{x} \right)^2 (1 - e^{-x/UT_{Ly}}) \right]^{1/2} \quad (5.15)$$

— Paramètres de Gryning et al. (1987) :

$$\sigma_y = \sigma_V \times \left(\frac{x}{U} \right) \times \frac{1}{1 + \sqrt{0,5 \frac{x}{U} \frac{1}{T_{Ly}}}} \quad (5.16)$$

$$\sigma_z = \sigma_W \times \left(\frac{x}{U} \right) \times \frac{1}{1 + \sqrt{0,5 \frac{x}{U} \frac{1}{T_{Lz}}}} \quad (5.17)$$

Où, I_V (σ_V/U) est l'intensité de turbulence latérale ; T_{Ly} est l'échelle de temps lagrangienne pour la dispersion latérale ($T_{Ly} = 200$ s pour des sources de rejet au niveau du sol) ; T_{Lz} est l'échelle de temps lagrangienne pour la dispersion verticale ($T_{Lz} = 30$ s pour $L > 0$) ;

5.9.3.2 Analyse des résultats

Pour la comparaison, cette section inclut les résultats de la CFD de la section précédente pour les essais 6 et 10. Le tableau 5.10 présente les valeurs moyennes des indicateurs statistiques pour les essais 6 et 10 obtenues à partir des résultats de la CFD. Les tableaux 5.11 et 5.12 montrent les valeurs moyennes des indicateurs statistiques pour les essais 6 et 10, respectivement, en utilisant la méthode MSTA avec différentes paramétrisations. D'autres résultats de l'évaluation quantitative de l'ensemble des 10 essais INEL (de 4 à 14, à l'exception de l'essai 5) sont présentés dans l'annexe A (du tableau A.6 au tableau A.10).

Comme on peut le constater, la méthode MSTA a été évaluée pour chaque essai individuellement en utilisant différentes paramétrisations des écarts types. Pour chaque essai et paramètre de dispersion, des résultats sont obtenus en déterminant le nombre optimal d'angles de direction (m) dans le sous-intervalle. Dans l'ensemble, les résultats obtenus par cette méthode sont très acceptables, avec une bonne corrélation (COR) par rapport aux observations et une bonne valeur de FAC2. Cependant, il convient de noter que la concentration moyenne normalisée calculée par cette méthode semble globalement surestimer les profils de concentration observés (Tableau A.6).

TABLE 5.10 – Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir du modèle CFD pour les essais n°6 et 10 de l'expérience d'Idaho Falls.

N° essai	NMSE $x < 4$	FAC2 $x > 0,5$	IOA -	FB $-0,3 < x < 0,3$	MG $0,7 < x < 1,3$	VG $x < 1,6$	COR -
6	6,4	0,88	0,75	-0,22	0,88	10,41	0,84
10	10,33	0,75	0,44	0,9	2,80	18133,26	0,55

TABLE 5.11 – Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA pour l'essai n°6 de l'expérience d'Idaho Falls.

Paramètres	Angles (m)	NMSE	FAC2	IOA	FB	MG	VG	COR
Luhar (2010)	3	22,56	0,80	0,52	-0,47	1,09	2,58	0,62
Cirillo et Poli (1992)	2	0,00	1,00	1,00	0,00	1,00	1,00	1,00
Degrazia et al. (2005)	6	9,47	0,91	0,85	-0,49	0,80	2,42	0,78
Gryning et al. (1987)	5	11,77	0,90	0,81	-0,50	0,68	4,42	0,72

5.10 Conclusions

Cette étude présente la simulation URANS de la dispersion d'un polluant dans des conditions de vent faible et stable. Le modèle CFD utilisé est Code_Saturne, et il est évalué à l'aide des mesures de concentration obtenues lors des essais de rejet de traceur sur un terrain plat à Idaho Falls.

TABLE 5.12 – Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA pour l’essai n°10 de l’expérience d’Idaho Falls.

Paramètres	Angles (m)	NMSE	FAC2	IOA	FB	MG	VG	COR
Luhar (2010)	5	7,79	0,83	0,86	-0,49	0,57	7,76	0,78
Cirillo et Poli (1992)	1	85,00	0,70	0,14	-1,67	0,54	14,97	0,63
Degrazia et al. (2005)	3	294,69	0,72	0,04	-1,70	1,23	33,42	0,30
Gryning et al. (1987)	2	436,87	0,74	0,02	-1,62	1,53	27,47	0,16

Lorsqu’il s’agit de conditions de vent faible avec une variabilité significative de la direction du vent, les divergences entre les données de concentration numériques et observées, en ce qui concerne la propagation du panache et l’amplitude des pics de concentration, remettent en question l’adéquation du modèle et/ou la précision des paramètres d’entrée. Il est essentiel de distinguer la variabilité du vent dans le modèle de turbulence de la couche limite, associée à la fermeture de la turbulence, de celle causée par des facteurs externes, tels que les mouvements atmosphériques à plus grande échelle.

Dans le travail de ce chapitre, notre stratégie consiste à améliorer le modèle en ajustant les différents paramètres liés aux modèles de turbulence utilisés ainsi que les conditions aux limites.

Dans un premier temps, nous avons étudié l’effet du modèle de turbulence. Nous avons donc modélisé l’essai 10 de la campagne expérimentale en utilisant les modèles $R_{ij} - \varepsilon$ et $k - \varepsilon$. L’analyse qualitative et quantitative montre que les performances du modèle, utilisé dans le cas de conditions météorologiques non-homogènes, sont raisonnablement acceptables en termes de capture des multiples pics de concentration et de l’étalement du panache en moyenne horaire de la distribution de la concentration. Les deux modèles prédisent un pourcentage des valeurs de concentration totales observées dans la gamme de $k - \varepsilon$ proche de celui obtenu avec le modèle $R_{ij} - \varepsilon$. Il en résulte que le modèle $k - \varepsilon$ avec le modèle SGDH isotrope utilisé pour calculer le flux de concentration turbulent a tendance à surestimer les pics de concentration, surtout sur l’arc proche de la source. Le modèle $R_{ij} - \varepsilon$, quant à lui, donne des ratios relativement plus raisonnables sur les trois arcs, avec toujours une surestimation du pic de concentration près de la source.

Ensuite, nous avons présenté les derniers résultats obtenus à partir des simulations de Code_Saturne en utilisant le jeu de données d’Idaho Falls (essais 9, 10, 11, 12, 13 et 14), pour lesquels nous disposons des données d’entrée complètes (vitesse du vent, direction du vent et température). Tous les essais sont réalisés dans des conditions atmosphériques stables (modérément à extrêmement stables) et de vent faible. Les profils de vitesse utilisés à l’entrée du domaine sont ajustés aux observations de vitesse moyenne durant la réalisation de l’essai, donc ils sont plus réalistes. Les valeurs de FAC2 sont généralement supérieures à la valeur 50% et sont donc considérées comme acceptables. Il y a un écart significatif et souvent une faible concordance entre les concentrations prédites et celles observées, puisque les valeurs de NMSE sont élevées et les valeurs de COR sont souvent faibles. À noter que, dans les évaluations de la sécurité, il est préférable que le modèle surestime les valeurs de concentration plutôt qu’il ne les sous-estime. Comme les valeurs négatives et positives de FB

sont presque proportionnelles, il est encore assez difficile de décider si le modèle est conservateur ou non.

De plus, des tentatives d'amélioration de la fermeture de la turbulence dans le module atmosphérique du Code_Saturne seront testées, principalement en calibrant les coefficients du modèle de turbulence $R_{ij} - \varepsilon$. Les simulations et l'analyse sont effectuées sur l'essai n°10, ainsi que l'essai n°6 de l'expérience caractérisé par une condition de stabilité neutre. Les résultats sont plus améliorés en termes de concordance entre les prédictions et les observations, et plus de points sont prédits dans la gamme de facteur de deux des observations.

Également dans ce chapitre, une nouvelle méthode analytique de calcul de la concentration moyenne prenant en compte les effets de méandres a été présentée. Cette méthode, appelée MSTA, consiste à diviser la période d'intégration en plusieurs sous-intervalles en considérant les angles de direction du vent associés à chaque sous-intervalle. La concentration est ensuite calculée pour chaque sous-intervalle et la moyenne est calculée sur l'ensemble de la période d'intégration. Cette méthode montre une amélioration des prédictions par rapport à la méthode classique (STA). Cette méthode donne d'aussi bons résultats que la CFD et pourrait probablement être prise en compte dans de futures études d'évaluation des risques en cas de dispersion de polluants dans des conditions de vent faible en terrain plat.

Cependant, l'optimisation du modèle de turbulence et des profils d'entrée pourrait ne pas être suffisante pour améliorer la performance du modèle CFD. Il convient de noter que nous avons utilisé des données expérimentales moyennes pour les paramètres U , α et σ_α , en divisant les mesures horaires en sous-intervalles de 1 à 2 minutes selon la méthodologie de Pandey et Sharan (2019) et Sharan et al. (1995). La sélection de ces sous-intervalles est basée sur la nécessité d'assurer un rejet continu, avec une condition $t_s > t_t$ (où t_s représente le temps pendant lequel le polluant source est rejeté et t_t le temps de trajet de la source au récepteur). Cependant, il est à noter que cette approche de moyennage des données de vitesse et de direction de vent pourrait ne pas être la meilleure solution pour générer notre fichier météorologique dans le code CFD, et il pourrait être nécessaire d'ajuster le nombre d'échéances en fonction des conditions de l'essai étudié. De nombreuses méthodologies existent dans la littérature (voir Chapitre 4) dont le but est d'améliorer la prédiction des pics de concentration et la largeur du panache. Il est donc nécessaire de trouver une méthodologie à la fois opérationnelle et automatique pour étudier l'impact des incertitudes des paramètres d'entrée, en particulier ceux liés à la direction du vent, sur le champ d'écoulement.

Conclusions générales et perspectives

Conclusions

En conclusion, cette thèse a poursuivi l'objectif fondamental de développer une modélisation opérationnelle pour la dispersion atmosphérique en milieu urbain, en particulier dans des conditions de vents faibles. Cette modélisation s'est appuyée sur le code CFD tridimensionnel Code_Saturne, développé par EDF R&D. Au fil de cette étude, nous avons exploré divers environnements complexes, dont des zones urbaines et des situations météorologiques variables. Notre attention s'est portée sur des terrains académiques où un flux de chaleur significatif est observé.

Les défis liés aux vents faibles et aux atmosphères stables ont été rigoureusement analysés, soulignant leur impact sur l'analyse des risques en raison de la complexité accrue de l'évaluation des zones de danger. En définitive, cette recherche a le potentiel d'apporter une contribution significative à l'amélioration de la caractérisation des zones de danger. Elle envisage notamment la modélisation de la dispersion des agents de type B et C en fonction de conditions météorologiques variables et complexes, avec une attention particulière portée aux vents faibles.

Cette thèse a ainsi mis en lumière l'importance de prendre en compte les conditions météorologiques spécifiques, en particulier les vents faibles, dans la modélisation de la dispersion atmosphérique en milieu urbain. Les modèles de turbulence anisotropes se sont révélés être des outils précieux pour mieux appréhender les phénomènes de dispersion dans de telles conditions. L'exactitude des données d'entrée demeure cruciale pour des prédictions CFD fiables.

Le premier chapitre s'attache à fournir les bases théoriques nécessaires à la compréhension des processus de dispersion atmosphérique. Il explore en détail la structure de la couche limite atmosphérique (CLA), essentielle pour la dispersion des polluants, ainsi que les caractéristiques spécifiques des environnements urbains. Les équations fondamentales de la CLA, la description statistique de la turbulence atmosphérique et les modèles de simulation numérique de la turbulence sont présentés. La stabilité atmosphérique est également discutée, offrant un cadre complet pour l'évaluation des risques environnementaux liés à la pollution atmosphérique.

Le deuxième chapitre se concentre sur la méthodologie utilisée pour simuler les écoulements atmosphériques et la dispersion des polluants dans différentes conditions de stabilité atmosphérique. Les modèles de turbulence, notamment le modèle anisotrope $R_{ij} - \varepsilon LRR$, sont mis en avant pour simuler l'écoulement dans la couche limite atmosphérique. Cependant, des défis persistent, notamment en ce qui concerne la conservation des profils d'entrée à travers le domaine de simulation.

Le troisième chapitre présente des simulations de dispersion de polluants dans des conditions atmosphériques neutres et stables, évaluant le modèle Code_Saturne à l'aide des observations de la campagne MUST. Les résultats montrent des écarts entre les prédictions du modèle et les observations, en particulier dans des conditions de vent faible. Des ajustements sont nécessaires pour améliorer la précision des prédictions.

Le quatrième chapitre se penche sur les conditions de vent faible et leurs effets sur la dispersion atmosphérique. Les méandres horizontaux, la variabilité de la direction du vent et les limites des modèles analytiques sont discutés. Les difficultés de modélisation dans ces conditions sont mises en évidence.

Le cinquième chapitre se concentre sur l'amélioration du modèle CFD dans des conditions de vent faible et stable, en utilisant les mesures expérimentales de la campagne d'Idaho Falls. Cela est réalisé en ajustant les paramètres des modèles de turbulence et des profils, ainsi qu'en explorant une méthode analytique alternative appelée MSTA. Des améliorations significatives sont obtenues, bien que certaines incertitudes subsistent.

En résumé, cette étude vise à utiliser des modèles de simulation de dispersion atmosphérique dans des situations complexes, en se penchant particulièrement sur les défis associés aux vents faibles et aux variations atmosphériques. Elle met en évidence l'importance de l'adaptation des modèles et de l'exploration de nouvelles approches pour améliorer la précision des prédictions dans de telles conditions.

Perspectives

Cette étude ouvre la voie à des améliorations potentielles dans la caractérisation des zones de danger, offrant ainsi des perspectives importantes pour l'analyse des risques et la gestion des situations d'urgence. Par conséquent, des recherches futures seront indispensables pour résoudre les incertitudes persistantes et pour affiner la modélisation de la dispersion atmosphérique, notamment en conditions atmosphériques stables avec des vents faibles. Ces travaux à venir permettront de renforcer notre compréhension des phénomènes de dispersion et d'améliorer la fiabilité des outils de prédiction, contribuant ainsi à une meilleure préparation et réactivité en cas de situations d'urgence. Voici quelques perspectives à envisager pour les travaux à venir :

- Le module atmosphérique de Code_Saturne exige un profil d'énergie cinétique qui varie avec

l'altitude, quelle que soit la modélisation de turbulence utilisée ($k - \varepsilon$ ou $R_{ij} - \varepsilon$). Seule l'énergie cinétique k et la dissipation turbulente ε sont définies à travers un profil météorologique. L'utilisation d'autres modèles de turbulence (par exemple, le modèle $k-\omega$ SST) peut introduire des incohérences et entraîner des écarts plus importants par rapport aux données expérimentales. Par conséquent, la définition d'autres types de profils turbulents en conditions limites n'est généralement pas associée au module atmosphérique du logiciel. Bien que nous ayons confiance en l'adéquation continue des modèles $k - \varepsilon$ et $R_{ij} - \varepsilon$ par rapport aux observations dans les cas étudiés et pour une utilisation opérationnelle, nous suggérons, pour les travaux futurs, de réexaminer les calculs en utilisant d'autres modèles de turbulence tout en incorporant correctement les profils turbulents dans les conditions aux limites. Cela inclut le modèle $k-\omega$ SST, qui fonctionne bien en proche paroi (Yu & Thé, 2017). Par conséquent, il convient d'adapter le module atmosphérique pour permettre l'imposition d'une énergie cinétique turbulente (k) et d'un taux de dissipation spécifique (ω) aux limites d'entrée du domaine.

De plus, il sera possible d'utiliser d'autres approches telles que la LES, qui est censée mieux représenter la turbulence à petite échelle que la modélisation RANS (stationnaire et instationnaire), ce qui peut être bénéfique pour la modélisation de la dispersion en conditions stables. La LES a la capacité de capturer les structures de turbulence anisotropes et les phénomènes de tourbillon plus petits. De même, les modèles Lagrangiens (ou hybrides) pourraient être particulièrement utiles pour représenter des phénomènes de dispersion dans des conditions où le mélange vertical est faible, car ils considèrent le mouvement des particules en fonction de leur trajectoire individuelle.

- Des études supplémentaires pourraient être menées sur les différents modèles algébriques et sur l'équation de transport scalaire, dans le but d'évaluer plus efficacement ces modèles, en particulier dans des conditions atmosphériques extrêmement stables. Il pourrait également être bénéfique de minutieusement ajuster les différentes constantes utilisées dans la formulation de ces modèles pour les rendre plus adaptés aux défis liés à la dispersion atmosphérique. Étant donné que le modèle de gradient simple (SGDH) est utilisé pour modéliser le flux turbulent thermique, il sera nécessaire d'explorer d'autres modèles algébriques ou même l'équation de transport pour évaluer l'effet de l'anisotropie du flux turbulent thermique sur le flux turbulent du scalaire de concentration.
- De nombreuses méthodologies existent dans la littérature dans le but d'améliorer la prédiction des pics de concentration et la largeur du panache (Voir Chapitre 4). Par conséquent, il est impératif de sélectionner une méthodologie à la fois opérationnelle et automatisée pour examiner l'impact des incertitudes des paramètres d'entrée, en particulier ceux liés à la direction du vent pour le champ d'écoulement. Une méthode plus sophistiquée de quantification de l'incertitude des déviations de la direction du vent, telle que la méthode *c-APK (anchored-ANOVA-POD/Kriging)* proposée par Margheri et Sagaut (2016), peut également s'avérer utile.
- Connaissant que les expériences sur le terrain en conditions de vent faible, accompagnées de

rejet de traceurs, telles que l'expérience INEL, sont relativement anciennes et manquent d'instruments expérimentaux avancés, de nombreuses incertitudes peuvent survenir concernant les observations. Par conséquent, une récente campagne de mesures sur le terrain s'avère nécessaire, comprenant des observations météorologiques (y compris des données de surface et des données sur l'écoulement atmosphérique au-dessus du sol) ainsi que des mesures de concentrations dans des conditions de vent faible et stable. Cette campagne contribuera davantage à la validation et à l'amélioration des différents modèles de dispersion atmosphérique. À notre connaissance, des campagnes de mesures ont débuté depuis 2020 sur le site expérimental SIRTA (Site Instrumental de Recherche par Télédétection Atmosphérique) près de Paris en France. Ces campagnes sont menées par les centres de recherche CEREAs (EDF R&D) et IRSN. Le site comprend des zones avec des bâtiments et de la végétation. La fréquence de conditions de vent faible est de 20 % sur 20 mois à une hauteur de 30 m. Des mesures de vitesse de vent et de turbulence ont été effectuées, ainsi que des mesures de concentrations issues de la libération de gaz traceur (hélium). Les premiers résultats de validation des observations à l'aide du code CFD Code_Saturne sont disponibles dans l'étude de Bounouas et al. (2022).

- Couplage de la CFD avec la météo réelle : Nous proposons d'effectuer le même type de simulations sur un site complexe réel (terrain bâti ou entouré de bâtiments), pour lequel nous disposons de fichiers météorologiques provenant de la Publithèque Météo-France. Ces fichiers contiennent les sorties nécessaires au modèle CFD, issues des modèles AROME ou ARPEGE*. Ils comprennent des informations sur la vitesse du vent, la température en fonction de l'altitude, le flux de chaleur sensible au sol et la pression au sol, pour chaque échéance horaire prédéfinie. Les périodes d'atmosphère stratifiée (souvent des conditions nocturnes) ou de vent faible sont inévitablement incluses parmi les échéances considérées. De plus, des données provenant de stations locales pourraient être utilisées pour caractériser les périodes de vent faible, qui sont a priori indépendantes de la stabilité atmosphérique. Les spectres à lobes négatifs en fréquences permettent de déduire les amplitudes des méandres. Enfin, les calculs CFD effectués sur les champs de vent et de dispersion de traceurs devraient permettre de caractériser les périodes présentant le plus grand danger sur le site ou à proximité (sur quelques kilomètres, en fonction de l'agent concerné).

*. AROME (Applications de la Recherche à l'Opérationnel à Mésos-Échelle) et ARPEGE (Action de Recherche Petite Échelle Grande Échelle) sont deux modèles de prévision numérique opérationnelle utilisés en météorologie. AROME se concentre sur des prévisions météorologiques à court terme avec une résolution spatiale fine, tandis qu'ARPEGE est axé sur des prévisions à plus long terme avec une couverture géographique plus large.

Résultats complémentaires

A.1 Maintien des profils dynamiques dans un domaine plat

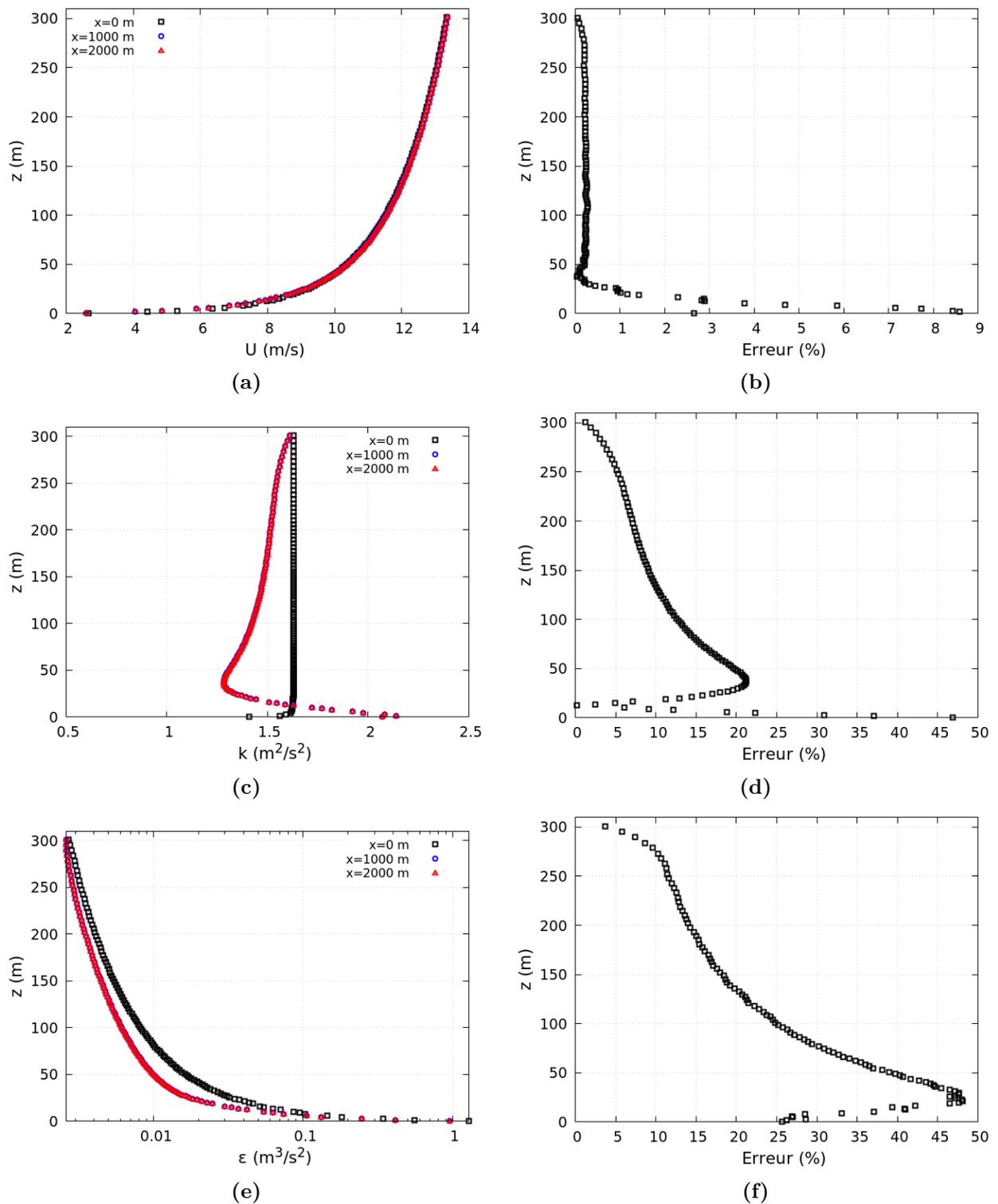


FIGURE A.1 – A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d’ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité neutre à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l’axe de l’écoulement, par le modèle $k - \epsilon$ calibré de Code_Saturne. A droite : L’erreur relative entre le profil injecté à l’entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l’ECT et la dissipation turbulente.

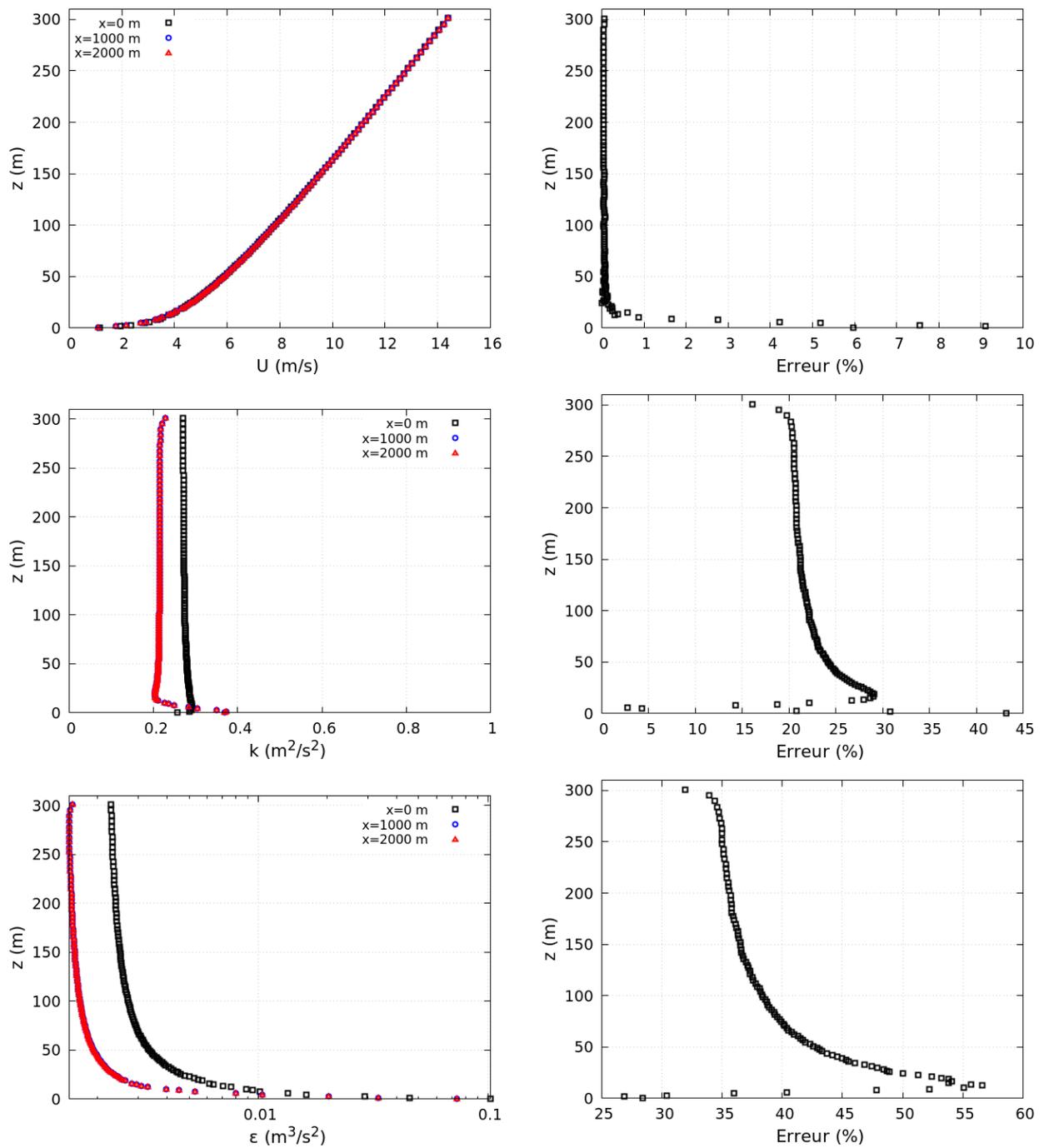


FIGURE A.2 – A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d’ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité stable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l’axe de l’écoulement, par le modèle $k - \varepsilon$ calibré de Code_Saturne. A droite : L’erreur relative entre le profil injecté à l’entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l’ECT et la dissipation turbulente.

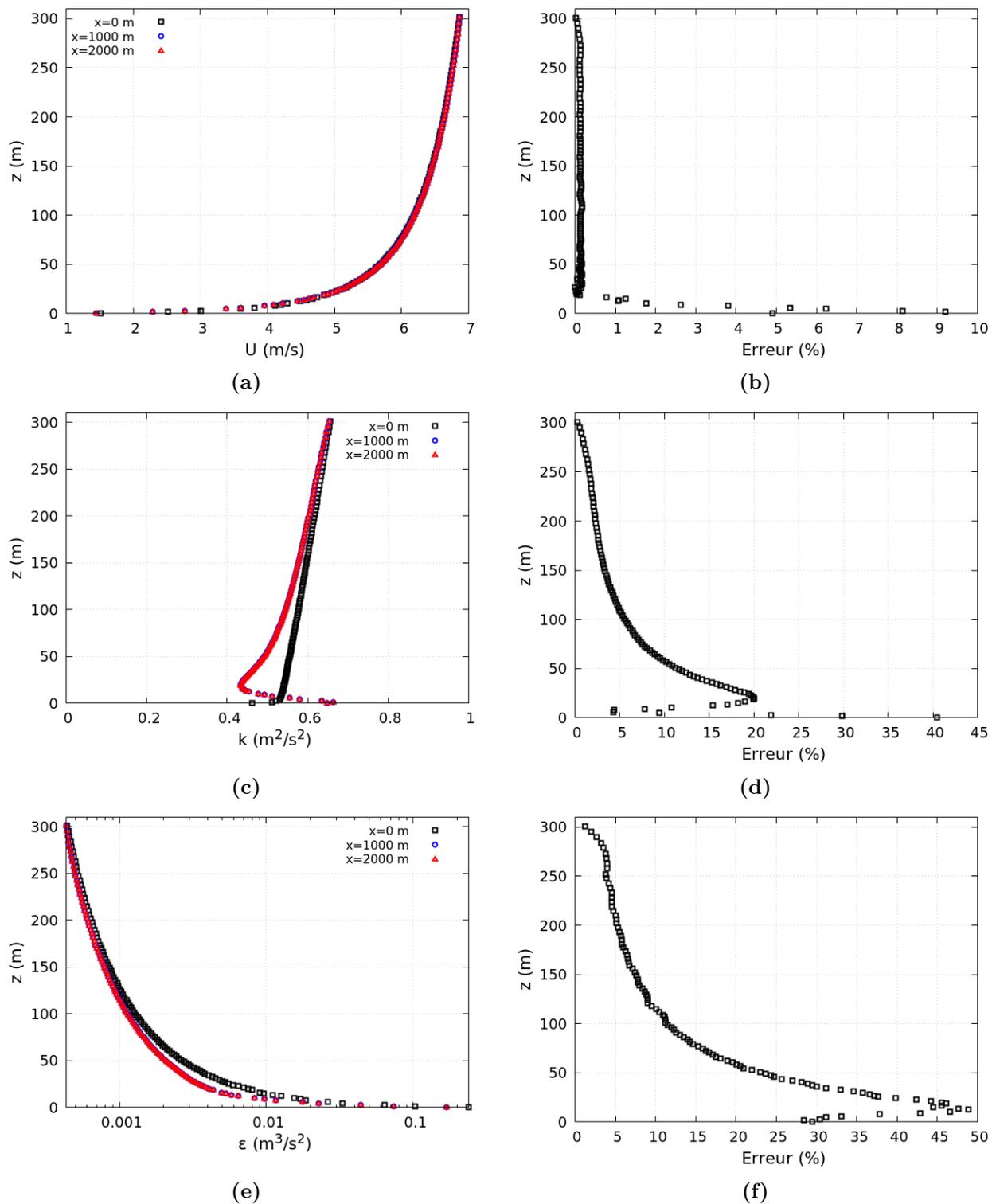


FIGURE A.3 – A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d’ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité instable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l’axe de l’écoulement, par le modèle $k - \epsilon$ calibré de Code_Saturne. A droite : L’erreur relative entre le profil injecté à l’entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l’ECT et la dissipation turbulente.

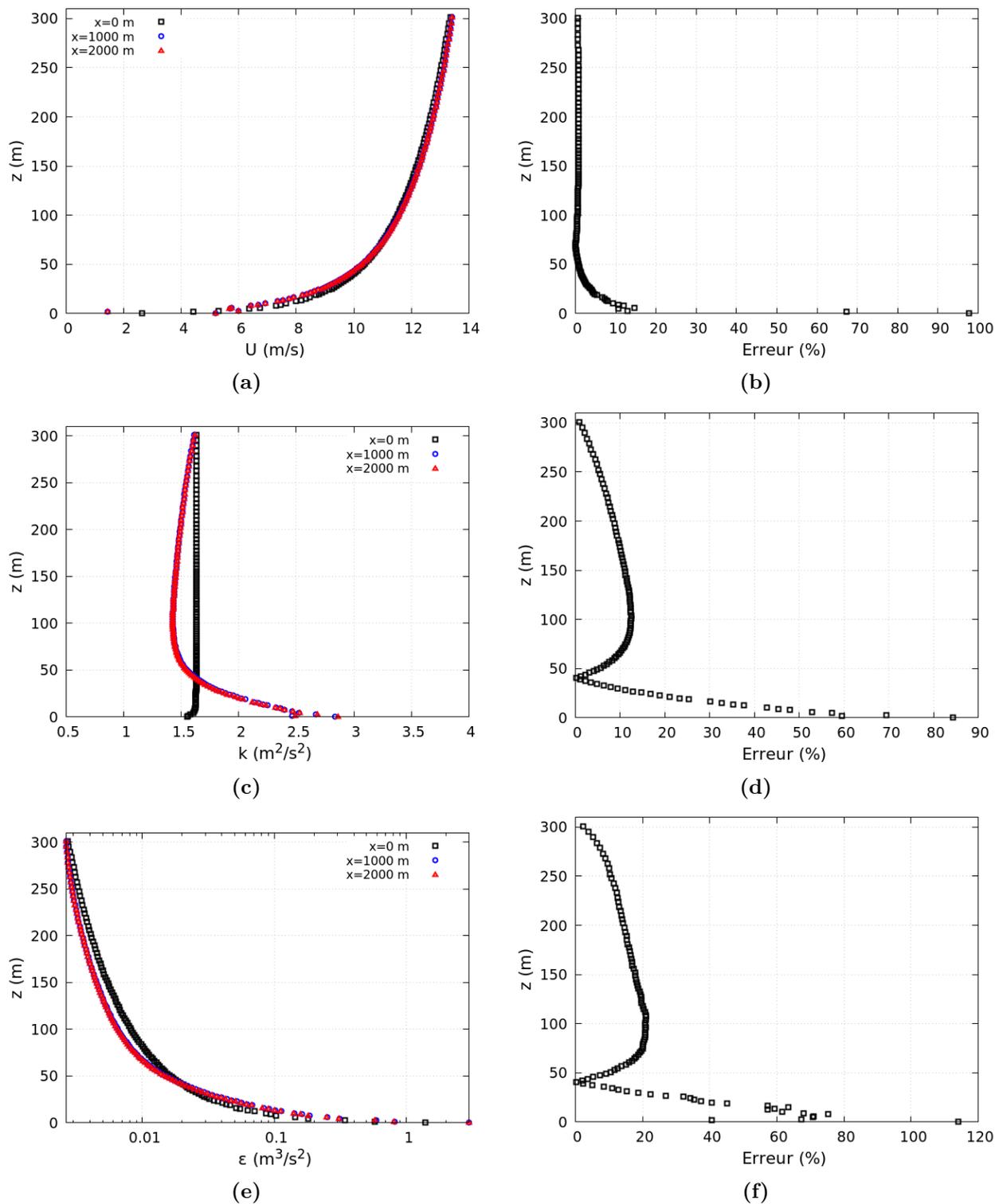


FIGURE A.4 – A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d’ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité neutre à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l’axe de l’écoulement, par le modèle $R_{ij} - \epsilon$ LRR calibré de Code_Saturne. A droite : L’erreur relative entre le profil injecté à l’entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l’ECT et la dissipation turbulente.

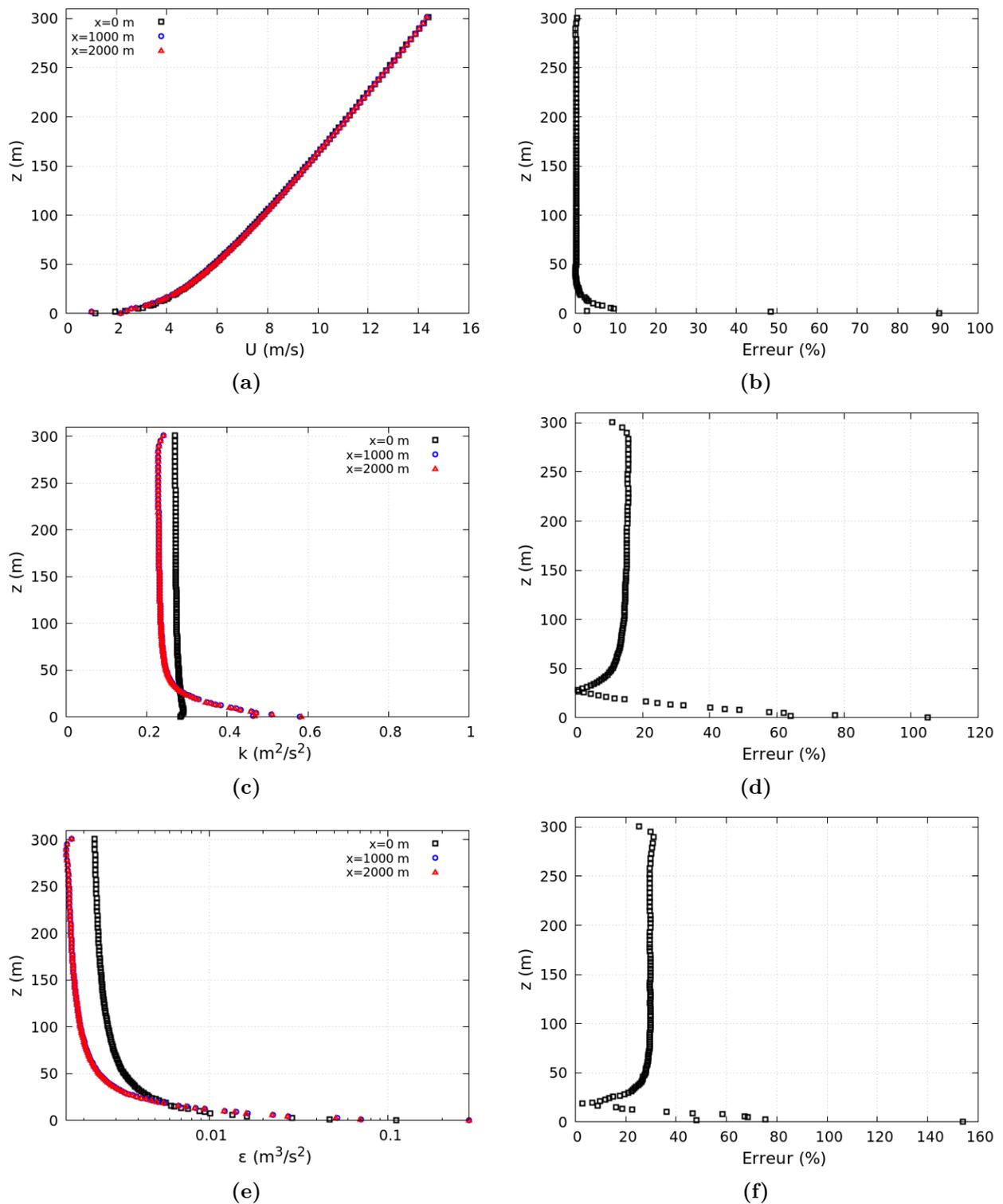


FIGURE A.5 – A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d’ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité stable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l’axe de l’écoulement, par le modèle $R_{ij} - \epsilon$ LRR calibré de Code_Saturne. A droite : L’erreur relative entre le profil injecté à l’entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l’ECT et la dissipation turbulente.

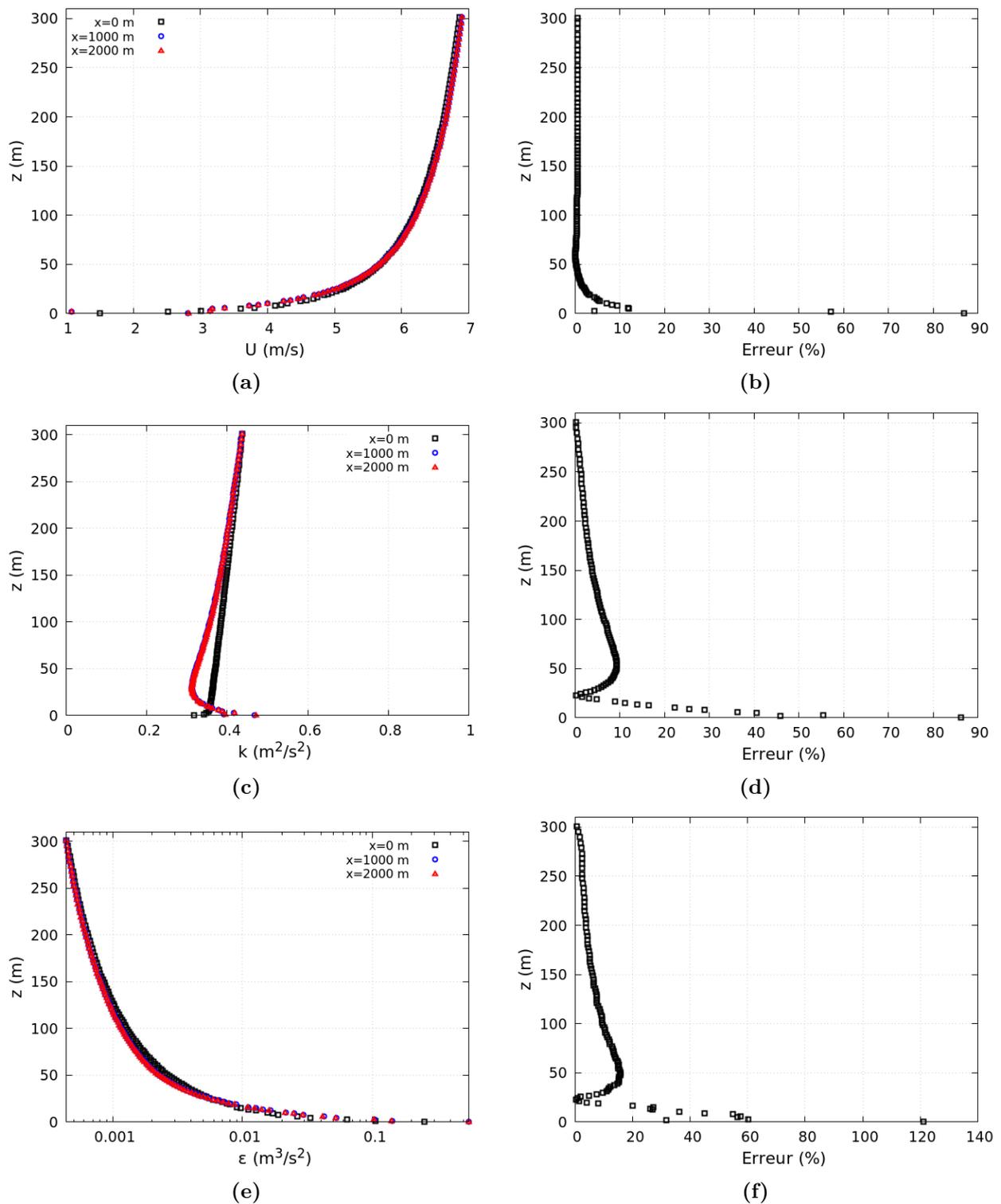


FIGURE A.6 – A gauche : Profils verticaux de vitesse (a), d’ECT(b) et de dissipation turbulente (c), obtenus pour le cas de stabilité instable à différentes distances de la source ($x = 0, 1$ et 2 km), le long de l’axe de l’écoulement, par le modèle $R_{ij} - \epsilon$ LRR calibré de Code_Saturne. A droite : L’erreur relative entre le profil injecté à l’entrée et celui à la sortie du domaine, pour la vitesse, l’ECT et la dissipation turbulente.

A.2 Étude de sensibilité du maillage

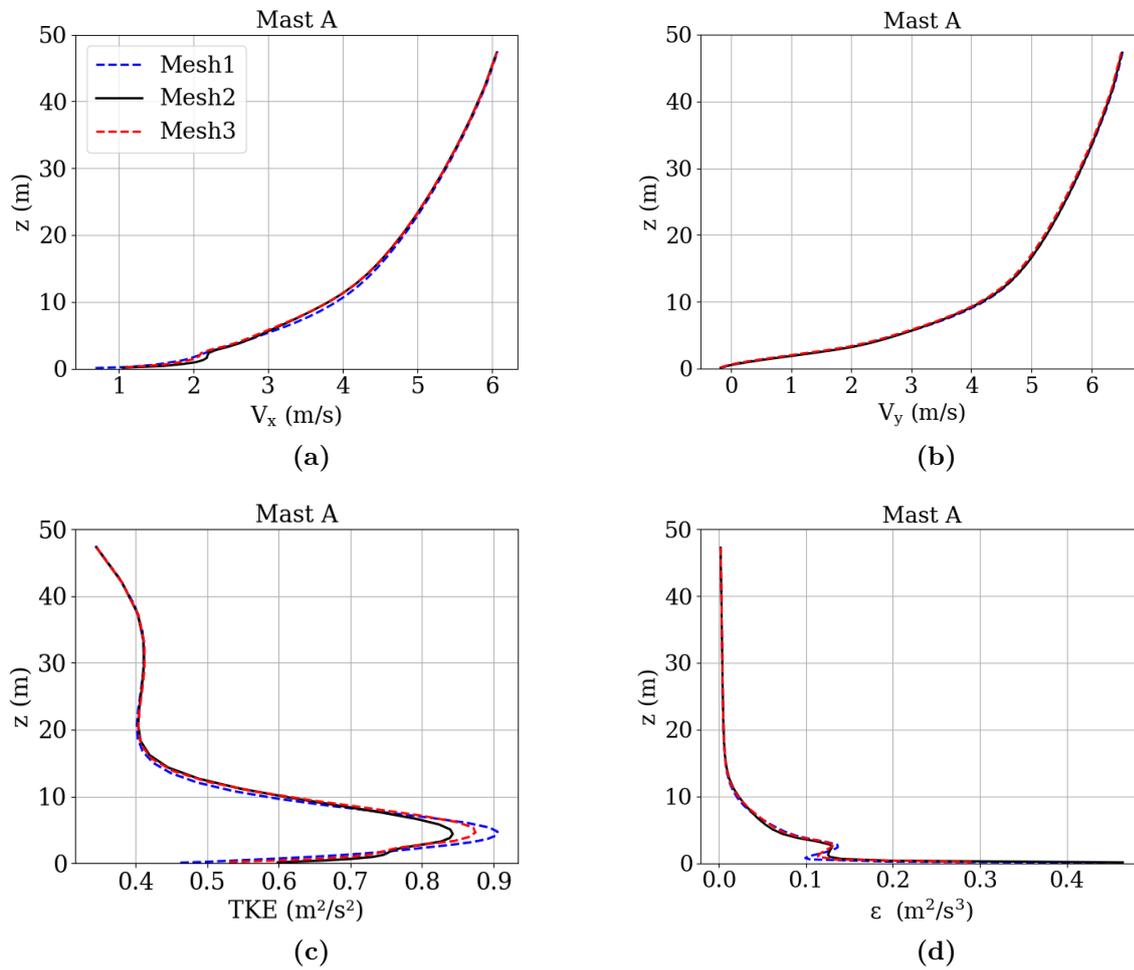


FIGURE A.7 – Sensibilité des profils variables dynamiques à la taille de la maille à la position du mât A

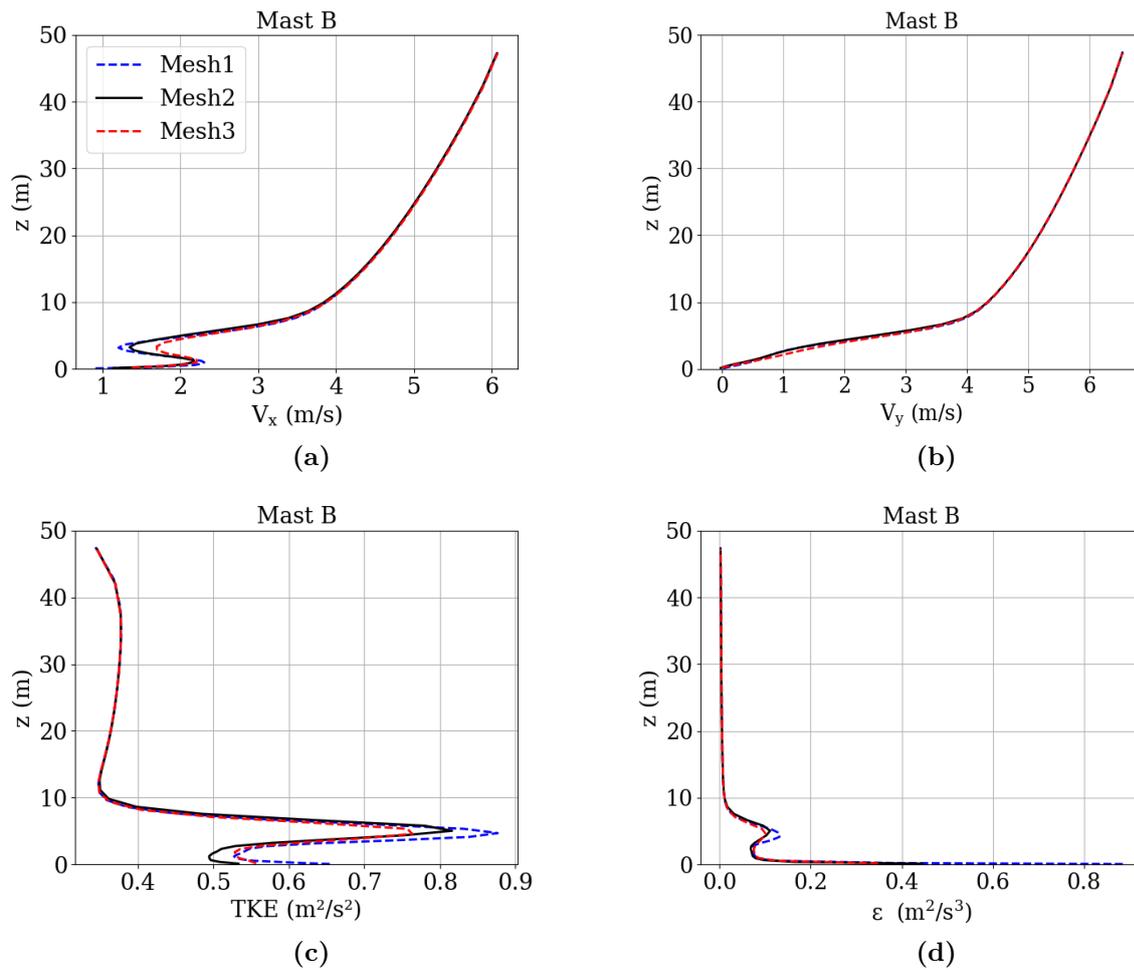


FIGURE A.8 – Sensibilité des profils variables dynamiques à la taille de la maille à la position du mât B

A.3 Indicateurs statistiques évalués pour les cinq essais de l'expérience d'Idaho Falls.

TABLE A.1 – Indicateurs statistiques évalués pour l'essai n°9 de l'expérience d'Idaho Falls.

Rayon d'arc (m)	NMSE	FB	MG	FAC2	IOA	COR
100	15,14	-0,82	0,33	0,73	0,34	0,23
200	15,06	-0,23	0,68	0,78	0,24	0,09
400	25,24	0,78	1,02	0,83	0,27	0,08

TABLE A.2 – Indicateurs statistiques évalués pour l’essai n°11 de l’expérience d’Idaho Falls.

Rayon d’arc (m)	NMSE	FB	MG	FAC2	IOA	COR
100	6,84	0,27	0,78	0,55	0,40	0,16
200	9,29	0,79	1,24	0,55	0,45	0,17
400	30,66	1,45	1,78	0,62	0,35	0,07

TABLE A.3 – Indicateurs statistiques évalués pour l’essai n°12 de l’expérience d’Idaho Falls.

Rayon d’arc (m)	NMSE	FB	MG	FAC2	IOA	COR
100	4,21	-0,79	0,17	0,32	0,76	0,89
200	4,51	-0,44	0,20	0,33	0,76	0,68
400	6,97	0,08	1,44	0,57	0,60	0,41

TABLE A.4 – Indicateurs statistiques évalués pour l’essai n°13 de l’expérience d’Idaho Falls.

Rayon d’arc (m)	NMSE	FB	MG	FAC2	IOA	COR
100	13,11	0,19	0,67	0,48	0,18	-0,12
200	21,94	1	0,83	0,52	0,26	-0,13
400	46,65	1,40	0,88	0,52	0,26	-0,14

TABLE A.5 – Indicateurs statistiques évalués pour l’essai n°14 de l’expérience d’Idaho Falls.

Rayon d’arc (m)	NMSE	FB	MG	FAC2	IOA	COR
100	11,57	-0,19	0,38	0,60	0,21	0
200	13,52	0,09	0,47	0,65	0,21	-0,02
400	16,42	-0,31	0,72	0,63	0,10	-0,14

A.4 Résultats complémentaires de la méthode MSTA

TABLE A.6 – Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA pour tous les essais de l’expérience d’Idaho Falls.

Paramétrisation	NMSE	FAC2	IOA	FB	FS	MG	VG	COR
Gryning et al. (1987)	61,52	0,84	0,74	-0,17	-0,43	1,41	70,88	0,72
Cirillo et Poli (1992)	21,29	0,87	0,79	0,06	0,03	1,08	8,12	0,87
Luhar (2010)	9,37	0,82	0,83	-0,06	-0,18	1,01	9,04	0,80
Degrazia et al. (2005)	41,06	0,85	0,78	-0,15	-0,37	1,44	44,29	0,77

TABLE A.7 – Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA avec la paramétrisation de Luhar (2010).

Essais d'INEL	Angles	NMSE	FAC2	IOA	FB	FS	MG	VG	COR
Essai 4	MSTA2	9,35	0,83	0,83	0,66	0,65	0,93	1,90	0,90
Essai 6	MSTA5	7,79	0,83	0,86	-0,49	-0,21	0,57	7,76	0,78
Essai 7	MSTA4	1,48	0,82	0,92	-0,06	-0,05	0,71	4,87	0,86
Essai 8	MSTA4	9,35	0,33	0,33	-0,58	-0,88	0,89	32,09	0,24
Essai 9	MSTA7	17,57	0,77	0,67	-0,80	-0,91	0,59	5,96	0,78
Essai 10	MSTA3	22,56	0,80	0,52	-0,47	-1,06	1,09	2,58	0,62
Essai 11	MSTA4	2,83	0,76	0,80	0,43	0,45	0,96	4,87	0,75
Essai 12	MSTA1	3,15	0,59	0,89	0,53	0,23	1,23	9,38	0,83
Essai 13	MSTA8	6,46	0,81	0,78	0,42	0,09	1,47	8,24	0,63
Essai 14	MSTA8	3,85	0,84	0,90	-0,20	0,10	0,67	3,73	0,82
Moyenne		9,37	0,82	0,83	-0,06	-0,18	1,01	9,04	0,80

TABLE A.8 – Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA avec la paramétrisation de Cirillo et Poli (1992).

Essais d'INEL	Angles	NMSE	FAC2	IOA	FB	FS	MG	VG	COR
Essai 4	MSTA3	79,80	0,81	0,33	1,50	1,55	1,08	4,05	0,73
Essai 6	MSTA2	0,00	1,00	1,00	0,00	-0,09	1,00	1,00	1,00
Essai 7	MSTA4	1,36	0,86	0,94	-0,09	-0,17	0,80	2,53	0,90
Essai 8	MSTA8	3,55	0,32	0,59	0,31	0,28	1,45	9,39	0,39
Essai 9	MSTA5	10,36	0,82	0,74	-0,81	-0,73	0,58	10,59	0,78
Essai 10	MSTA1	85,00	0,70	0,14	-1,67	-1,75	0,54	14,97	0,63
Essai 11	MSTA2	5,25	0,73	0,65	0,52	0,41	1,40	18,84	0,50
Essai 12	MSTA4	6,27	0,57	0,73	0,76	0,87	0,86	9,70	0,87
Essai 13	MSTA1	0,00	1,00	1,00	0,00	-0,11	1,00	1,00	1,00
Essai 14	MSTA3	0,00	1,00	1,00	0,00	0,03	1,00	1,00	1,00
Moyenne		21,286	0,867	0,79	0,058	0,031	1,08	8,118	0,866

TABLE A.9 – Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA avec la paramétrisation de Degrazia et al. (2005).

Essais d'INEL	Angles	NMSE	FAC2	IOA	FB	FS	MG	VG	COR
Essai 4	MSTA5	6,79	0,87	0,90	0,70	0,56	1,10	2,09	0,96
Essai 6	MSTA6	9,47	0,91	0,85	-0,49	-0,31	0,80	2,42	0,78
Essai 7	MSTA4	1,62	0,84	0,93	-0,05	-0,18	0,97	4,34	0,88
Essai 8	MSTA7	17,35	0,32	0,16	-0,25	-0,95	1,63	45,36	0,06
Essai 9	MSTA7	8,34	0,88	0,81	-0,72	-0,70	0,73	3,35	0,89
Essai 10	MSTA3	294,69	0,72	0,04	-1,70	-1,87	1,23	33,42	0,30
Essai 11	MSTA4	3,77	0,79	0,79	0,37	0,21	1,40	12,36	0,67
Essai 12	MSTA5	2,58	0,66	0,90	0,54	0,37	1,45	13,54	0,90
Essai 13	MSTA4	19,73	0,81	0,73	0,32	-0,59	2,55	278,55	0,67
Essai 14	MSTA7	5,20	0,86	0,88	-0,02	0,10	1,10	3,21	0,79
Moyenne		41,06	0,85	0,78	-0,15	-0,37	1,44	44,29	0,77

TABLE A.10 – Les valeurs moyennes des indicateurs statistiques évalués à partir de la méthode MSTA avec la paramétrisation de Gryning et al. (1987).

Essais d'INEL	Angles	NMSE	FAC2	IOA	FB	FS	MG	VG	COR
Essai 4	MSTA2	9,57	0,89	0,87	0,72	0,57	1,20	2,08	0,92
Essai 6	MSTA5	11,77	0,90	0,81	-0,50	-0,32	0,68	4,42	0,72
Essai 7	MSTA3	1,66	0,82	0,91	-0,06	-0,06	0,79	8,01	0,84
Essai 8	MSTA8	51,36	0,28	0,04	-0,49	-1,39	1,69	56,63	-0,01
Essai 9	MSTA7	18,08	0,87	0,68	-0,74	-0,90	0,73	2,86	0,79
Essai 10	MSTA2	436,87	0,74	0,02	-1,62	-1,88	1,53	27,47	0,16
Essai 11	MSTA5	4,22	0,74	0,74	0,42	0,19	1,31	5,45	0,59
Essai 12	MSTA5	2,28	0,68	0,92	0,46	0,36	1,10	4,35	0,92
Essai 13	MSTA4	14,5	0,78	0,75	0,41	-0,51	2,90	524,23	0,67
Essai 14	MSTA8	3,29	0,86	0,92	-0,15	0,07	0,77	2,43	0,86
Moyenne		61,52	0,84	0,74	-0,17	-0,43	1,41	70,88	0,72

Bibliographie

- Agarwal, P., Yadav, A. K., Gulati, A., Raman, S., Rao, S., Singh, M., Nigam, S., & Reddy, N. (1995). Surface layer turbulence processes in low wind speeds over land. *Atmospheric Environment*, 29(16), 2089-2098.
- Ali, T., Abouleish, M., Gawai, R., Hamdan, N., & Elaksher, A. (2022). Ammonium nitrate explosion at the main port in Beirut (Lebanon) and air pollution : an analysis of the spatiotemporal distribution of nitrogen dioxide. *Euro-Mediterranean Journal for Environmental Integration*, 7. <https://doi.org/10.1007/s41207-022-00296-5>
- Alinot, C., & Masson, C. (2005). k- ϵ Model for the Atmospheric Boundary Layer Under Various Thermal Stratifications. *Journal of Solar Energy Engineering-transactions of The Asme - J SOL ENERGY ENG*, 127. <https://doi.org/10.1115/1.2035704>
- Anfossi, D., Alessandrini, S., Trini Castelli, S., Ferrero, E., Oetl, D., & Degrazia, G. (2006). Tracer dispersion simulation in low wind speed conditions with a new 2D Langevin equation system. *Atmospheric Environment*, 40(37), 7234-7245. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.05.081>
- Anfossi, D., Öttl, D., Degrazia, G., & Goulart, I. (2005). An analysis of sonic anemometer observations in low wind speed conditions. *Boundary-Layer Meteorology*, 114(1), 179-203.
- Archambeau, F., Méchitoua, N., & Sakiz, M. (2004). Code_Saturne : A Finite Volume Code for the computation of turbulent incompressible flows - Industrial Applications. *International Journal on Finite Volumes*, 1(1). <https://hal.science/hal-01115371>
- Arya, S. P., et al. (1999). *Air pollution meteorology and dispersion* (T. 310). Oxford University Press New York.
- Bahlali, M., Dupont, E., & Carissimo, B. (2019). Atmospheric dispersion using a Lagrangian stochastic approach : Application to an idealized urban area under neutral and stable meteorological conditions. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 193. <https://doi.org/10.1016/j.jweia.2019.103976>
- Bahlali, M. L. (2018). *Adaptation de la modélisation hybride eulérienne/lagrangienne stochastique de Code_Saturne à la dispersion atmosphérique de polluants à l'échelle*

- micro-météorologique et comparaison à la méthode eulérienne* (Theses). Université Paris-Est. <https://theses.hal.science/tel-01908553>
- Balde, H. (2011). *Modélisation de la pollution atmosphérique de scalaires passifs par faibles vents* (thèse de doct.) [2011EVR0001]. <http://www.theses.fr/2011EVR0001/document>
- Barad, M. L. (1958). *Project Prairie Grass, a Field Program in Diffusion. Volume 1* (rapp. tech.). Air Force Cambridge Research Labs Hanscom Afb MA.
- Beljaars, A., & Holtslag, B. (1991). Flux Parameterization over Land Surfaces for Atmospheric Models. *J. Appl. Meteor.*, *30*, 327-341. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1991\)030<0327:FPOLSF>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(1991)030<0327:FPOLSF>2.0.CO;2)
- Belušić, D., & Güttler, I. (2010). Can mesoscale models reproduce meandering motions? *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society : A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography*, *136*(648), 553-565.
- Belušić, D., & Mahrt, L. (2008). Estimation of length scales from mesoscale networks. *Tellus A : Dynamic Meteorology and Oceanography*, *60*(4), 706-715.
- Bernardino, A. D., Monti, P., Leuzzi, G., & Querzoli, G. (2019). Turbulent Schmidt Number Measurements Over Three-Dimensional Cubic Arrays. *Boundary-Layer Meteorology*, *174*, 231-250. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:204542852>
- Billard, F., & Laurence, D. (2012). A robust $k - \varepsilon - \overline{\nu^2}/k$ elliptic blending turbulence model applied to near-wall, separated and buoyant flows. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, *33*(1), 45-58. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2011.11.003>
- Biltoft, C. A. (2001). Customer report for mock urban setting test. *DPG Document*, (8-CO), 160-000.
- Blocken, B., Stathopoulos, T., Saathoff, P., & Wang, X. (2008). Numerical evaluation of pollutant dispersion in the built environment : Comparisons between models and experiments [4th International Symposium on Computational Wind Engineering (CWE2006)]. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, *96*(10), 1817-1831. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jweia.2008.02.049>
- Blocken, B., Stathopoulos, T., & Carmeliet, J. (2007). CFD simulation of the atmospheric boundary layer : wall function problems. *Atmospheric Environment*, *41*(2), 238-252. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.08.019>
- Bounouas, H., Rousard, P., Dupont, E., Roustan, Y., Chardeur, J., Connan, O., Hebert, D., Laguionie, P., Maro, D., Renard, H., Rozet, M., Regi, T., Carissimo, B., Fauchoux, A., & Lefranc, Y. (2022). Study of atmospheric dispersion under low wind conditions in an urban environment, first results. *21st International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*. <https://irsn.hal.science/irsn-03994349>

- Boyer, P., Masson, O., Carissimo, B., & Anselmef, F. (1970). Study of Atmospheric Dispersion under Low Wind Speed Conditions. *WIT Transactions on Ecology and the Environment*, 9.
- Brereton, C. A., Campbell, L. J., & Johnson, M. R. (2020). Influence of turbulent Schmidt number on fugitive emissions source quantification. *Atmospheric Environment : X*, 7, 100083. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.aeaoa.2020.100083>
- Briggs, G. A. (1973). Diffusion estimation for small emissions. Preliminary report. <https://doi.org/10.2172/5118833>
- Broomandi, P., Jahanbakhshi, A., Nikfal, A., Kim, J. R., & Karaca, F. (2021). Impact assessment of Beirut explosion on local and regional air quality. *Air Quality, Atmosphere & Health*, 14, 1911-1929.
- Brusasca, G., Tinarelli, G., & Anfossi, D. (1992). Particle model simulation of diffusion in low wind speed stable conditions. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 26(4), 707-723.
- Businger, J. A., Wyngaard, J. C., Izumi, Y., & Bradley, E. F. (1971). Flux-Profile Relationships in the Atmospheric Surface Layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 28(2), 181-189. [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1971\)028%3C0181:FPRITA%3E2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1971)028%3C0181:FPRITA%3E2.0.CO;2)
- Carvalho, J. C., & de Vilhena, M. T. M. (2005). Pollutant dispersion simulation for low wind speed condition by the ILS method. *Atmospheric Environment*, 39(34), 6282-6288. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.07.007>
- Chahine, A., Matharan, P., Wendum, D., Musson-Genon, L., Bresson, R., & Carissimo, B. (2015). Modelling atmospheric effects on performance and plume dispersal from natural draft wet cooling towers. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 136, 151-164. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jweia.2014.11.007>
- Chang, J., & Hanna, S. (2004). Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 87, 167-196. <https://doi.org/10.1007/s00703-003-0070-7>
- Chou, P. Y. (1945). On velocity correlations and the solutions of the equations of turbulent fluctuation. *Quarterly of Applied Mathematics*, 3, 38-54.
- Cirillo, M. C., & Poli, A. A. (1992). An intercomparison of semiempirical diffusion models under low wind speed, stable conditions. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 26(5), 765-774.
- Cuculeanu, V., Lupu, A., Georgiana, G., Popescu, I., & Toma, A. (2019). Dispersion model for low wind and atmospheric calm – Part II : Evaluation experiment at a nuclear power plant in Romania. *Romanian Reports in Physics*, 71, 718.
- Cuxart, J., & Jiménez, M. (2007). Mixing processes in a nocturnal low-level jet : An LES study. *Journal of the atmospheric sciences*, 64(5), 1666-1679.

- Cuxart, J., Morales, G., Terradellas, E., & Yagüe, C. (2002). Study of coherent structures and estimation of the pressure transport terms for the nocturnal stable boundary layer. *Boundary-layer meteorology*, *105*, 305-328.
- Cuxart, J., Yagüe, C., Morales, G., Terradellas, E., Orbe, J., Calvo, J., Fernández, A., Soler, M., Infante, C., Buenestado, P., et al. (2000). Stable atmospheric boundary-layer experiment in Spain (SABLES 98) : a report. *Boundary-layer meteorology*, *96*, 337-370.
- da Costa Carvalho, J., Degrazia, G. A., de Vilhena, M. T., Magalhães, S. G., Goulart, A. G., Anfossi, D., Acevedo, O. C., & Moraes, O. L. (2006). Parameterization of meandering phenomenon in a stable atmospheric boundary layer. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, *368*(1), 247-256. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.physa.2005.11.060>
- Daly, B. J., & Harlow, F. H. (1970). Transport Equations in Turbulence. *The Physics of Fluids*, *13*(11), 2634-2649. <https://doi.org/10.1063/1.1692845>
- Davies, B. M., & Thomson, D. J. (1999). Comparisons of some parametrizations of wind direction variability with observations. *Atmospheric Environment*, *33*(29), 4909-4917.
- De Meux, B. d. L. (2012). *Modélisation des écoulements turbulents en rotation et en présence de transferts thermiques par approche hybride RANS/LES zonale* (thèse de doct.). ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique-Poitiers.
- Deaves, D., & Lines, I. (1998). The nature and frequency of low wind speed conditions. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, *73*(1), 1-29.
- Dechy, N., Bourdeaux, T., Ayrault, N., Kordek, M.-A., & Le Coze, J.-C. (2004). First lessons of the Toulouse ammonium nitrate disaster, 21st September 2001, AZF plant, France [A Selection of Papers from the JRC/ESReDA Seminar on Safety Investigation Accidents, Petten, The Netherlands, 12-13 May, 2003]. *Journal of Hazardous Materials*, *111*(1), 131-138. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2004.02.039>
- Degrazia, G., Acevedo, O., Carvalho, J., Goulart, A., Moraes, O., & Campos Velho, H. (2005). On the universality of the dissipation rate functional form and of the autocorrelation function exponential form. *Atmospheric Environment*, *39*, 1917-1924. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2004.12.011>
- Degrazia, G., Goulart, A., Carvalho, J., Szinvelski, C., Buligon, L., & Timm, A. (2007). Turbulence dissipation rate derivation for meandering occurrences in a stable planetary boundary layer. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, *8*. <https://doi.org/10.5194/acpd-7-15251-2007>
- Degrazia, G., Timm, A., Moreira, V., & Roberti, D. (2011). Meandering Dispersion Model Applied to Air Pollution. <https://doi.org/10.5772/16892>
- Dehoux, F. (2012a). *Modélisation statistique des écoulements turbulents en convection forcée, mixte et naturelle* (thèse de doct.). Université de Poitiers. <http://www.theses.fr/2012POIT2276>

- Dehoux, F. (2012b). *Modélisation statistique des écoulements turbulents en convection forcée, mixte et naturelle* (thèse de doct.). Poitiers.
- Demaël, E., & Carissimo, B. (2008). Comparative Evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian Plume Models Based on Prairie Grass Dispersion Experiment. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 47, 888-900.
- Donnelly, R., Lyons, T., & Flassak, T. (2009). Evaluation of results of a numerical simulation of dispersion in an idealised urban area for emergency response modelling. *Atmospheric Environment*, 43, 4416-4423. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.05.038>
- Durbin, P. (1993). Application of a near-wall turbulence model to boundary layers and heat transfer. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 14(4), 316-323. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0142-727X\(93\)90004-7](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0142-727X(93)90004-7)
- Duykerke, P. G. (1988). Application of the E- ϵ Turbulence Closure Model to the Neutral and Stable Atmospheric Boundary Layer. *Journal of Atmospheric Sciences*, 45(5), 865-880. [https://doi.org/https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1988\)045<0865:AOTTCM>2.0.CO;2](https://doi.org/https://doi.org/10.1175/1520-0469(1988)045<0865:AOTTCM>2.0.CO;2)
- Dyer, A. J. (1974). A review of flux-profile relationships. *Boundary-Layer Meteorology*, 7(3), 363-372. <https://doi.org/10.1007/BF00240838>
- Dyer, A. J., & Hicks, B. B. (1970). Flux-gradient relationships in the constant flux layer. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 96(410), 715-721. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/qj.49709641012>
- Eckerman, I. (2005). The Bhopal gas leak : Analyses of causes and consequences by three different models. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 18, 213-217. <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2005.07.007>
- Elder, K., Goodbody, A., Cline, D., Houser, P., Liston, G. E., Mahrt, L., & Rutter, N. (2009). NASA Cold Land Processes Experiment (CLPX 2002/03) : Ground-based and near-surface meteorological observations. *Journal of Hydrometeorology*, 10(1), 330-337.
- Eskenazi, B., Warner, M., Brambilla, P., Signorini, S., Ames, J., & Mocarrelli, P. (2018). The Seveso accident : A look at 40 years of health research and beyond. *Environment International*, 121, 71-84. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.envint.2018.08.051>
- Etling, D. (1990). On plume meandering under stable stratification [Proceedings of the 2nd International Conference on Atmospheric Sciences and Application to Air Quality]. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, 24(8), 1979-1985. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0960-1686\(90\)90232-C](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0960-1686(90)90232-C)
- Fiates, J., Santos, R. R. C., Neto, F. F., Francesconi, A. Z., Simoes, V., & Vianna, S. S. V. (2016). An alternative CFD tool for gas dispersion modelling of heavy gas. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 44, 583-593. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0950423016302091>

- Fluidyn-Panache. (2010). *User Manual* (7^e éd.) [versio 4.0]. Fluidyn France/TRANSOFT International.
- Franke, J., Hellsten, A., Schlünzen, H., & Carissimo, B.-t. (2007). COST Action 732 quality assurance and improvement of microscale meteorological models. *COST Action*, 732.
- Gao, Z., Bresson, R., Qu, Y., Milliez, M., Munck, C. D., & Carissimo, B. (2018). High resolution unsteady RANS simulation of wind, thermal effects and pollution dispersion for studying urban renewal scenarios in a neighborhood of Toulouse. *Urban Climate*, 23, 114-130. <https://doi.org/10.1016/j.uclim.2016.11.002>
- Garratt, J. R. (1994). The atmospheric boundary layer. *Earth-Science Reviews*, 37(1-2), 89-134.
- Gifford, F. A. (1961). Use of routine meteorological observations for estimating atmospheric dispersion. *Nuclear safety*, 2, 47-51. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:131484284>
- Golder, D. (1972). Relations among stability parameters in the surface layer. *Boundary-Layer Meteorology*, 3, 47-58.
- Gorlé, C., Beeck, J., Rambaud, P., & van Tendeloo, G. (2009). CFD modelling of small particle dispersion : The influence of the turbulence kinetic energy in the atmospheric boundary layer. *Atmospheric Environment*, 43, 673-681. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.09.060>
- Goulart, A. G., Degrazia, G. A., Acevedo, O. C., & Anfossi, D. (2007). Theoretical considerations of meandering winds in simplified conditions. *Boundary-layer meteorology*, 125(2), 279-287.
- Grachev, A. A., Andreas, E. L., Fairall, C. W., Guest, P. S., & Persson, P. O. G. (2013). The critical Richardson number and limits of applicability of local similarity theory in the stable boundary layer. *Boundary-layer meteorology*, 147, 51-82.
- Green, A. E. S., Singhal, R. P., & Venkateswar, R. (1980). Analytic Extensions of the Gaussian Plume Model. *Journal of the Air Pollution Control Association*, 30(7), 773-776. <https://doi.org/10.1080/00022470.1980.10465108>
- Gryning, S.-E., Batchvarova, E., Brümmner, B., Jørgensen, H., & Larsen, S. (2007). On the extension of the wind profile over homogeneous terrain beyond the surface boundary layer. *Boundary-layer meteorology*, 124(2), 251-268.
- Gryning, S.-E., Holtslag, B., Irwin, J., & Sivertsen, B. (1987). Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. *Atmospheric Environment (1967)*, 21, 79-89. [https://doi.org/10.1016/0004-6981\(87\)90273-3](https://doi.org/10.1016/0004-6981(87)90273-3)
- Hanna, S. (1990). Lateral dispersion in light-wind stable conditions. *Il Nuovo Cimento C*, 13(6), 889-894.
- Hanna, S., Strimaitis, D., & Chang, J. (1991). Hazard Response Modeling Uncertainty (A Quantitative Method). User's guide for software for evaluating hazardous gas dispersion models. *Final Report*, 1.

- Hanna, S. R. (1983). Lateral turbulence intensity and plume meandering during stable conditions. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 22(8), 1424-1430.
- Hanna, S. R., Britter, R., & Franzese, P. (2003). A baseline urban dispersion model evaluated with Salt Lake City and Los Angeles tracer data. *Atmospheric Environment*, 37(36), 5069-5082.
- Hanna, S. R., & Chowdhury, B. (2014). Minimum turbulence assumptions and u^* and L estimation for dispersion models during low-wind stable conditions. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 64(3), 309-321.
- Hanna, S. R., Hansen, O. R., & Dharmavaram, S. (2004). FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations. *Atmospheric Environment*, 38(28), 4675-4687. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2004.05.041>
- Hicks, B. (1976). Wind profile relationships from the 'Wangara' experiment. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 102(433), 535-551.
- Hiscox, A. L., Miller, D. R., & Nappo, C. J. (2010). Plume meander and dispersion in a stable boundary layer. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 115(D21).
- Hong, J. (2010). Note on turbulence statistics in z-less stratification. *Asia-Pacific Journal of Atmospheric Sciences*, 46, 113-117.
- Hoover, J. D., Stauffer, D. R., Richardson, S. J., Mahrt, L., Gaudet, B. J., & Suarez, A. (2015). Submeso motions within the stable boundary layer and their relationships to local indicators and synoptic regime in moderately complex terrain. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 54(2), 352-369.
- Huber, A. H. (2004). Development and applications of CFD simulations in support of air quality studies involving buildings.
- Isaksen, I. S., Granier, C., Myhre, G., Berntsen, T., Dalsøren, S. B., Gauss, M., Klimont, Z., Benestad, R., Bousquet, P., Collins, W., et al. (2009). Atmospheric composition change : Climate-Chemistry interactions. *Atmospheric Environment*, 43(33), 5138-5192.
- Ivings, M., Jagger, S., Lea, C., & Webber, D. (2007). Evaluating vapor dispersion models for safety analysis of LNG facilities. *The Fire Protection Research Foundation*.
- Joffre, S. M., & Laurila, T. (1988). Standard deviations of wind speed and direction from observations over a smooth surface. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 27(5), 550-561.
- Joseph, G., Hargreaves, D., & Lowndes, I. (2013). A CFD methodology to incorporate wind direction variability in discrete phase modeling of small particle dispersion.
- Joseph, G., Hargreaves, D., & Lowndes, I. (2020). Reconciling Gaussian plume and Computational Fluid Dynamics models of particulate dispersion. *Atmospheric Environment : X*, 5, 100064. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.aeaoa.2020.100064>

- Joseph, G., Lowndes, I., & Hargreaves, D. (2018). A computational study of particulate emissions from Old Moor Quarry, UK. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, *172*, 68-84. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jweia.2017.10.018>
- Kavian Nezhad, M. R., Lange, C., & Fleck, B. (2022). Performance Evaluation of the RANS Models in Predicting the Pollutant Concentration Field within a Compact Urban Setting : Effects of the Source Location and Turbulent Schmidt Number. *Atmosphere*, *13*, 1013. <https://doi.org/10.3390/atmos13071013>
- Kerschgens, M. J., Nölle, C., & Martens, R. (2000). Comments on turbulence parameters for the calculation of dispersion in the atmospheric boundary layer. *Meteorologische Zeitschrift*, 155-163.
- Kisa, M., & Jelemensky, L. (2009). CFD dispersion modelling for emergency preparedness. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, *22*(1), 97-104. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0950423008001320>
- Knaus, H., Hofsäß, M., Rautenberg, A., & Bange, J. (2018). Application of Different Turbulence Models Simulating Wind Flow in Complex Terrain : A Case Study for the Wind-ForS Test Site. *Computation*, *6*(3). <https://doi.org/10.3390/computation6030043>
- Kolmogorov, A. N. (1968). Local structure of turbulence in an incompressible fluid at very high Reynolds numbers. *Soviet Physics Uspekhi*, *10*(6), 734. <https://doi.org/10.1070/PU1968v010n06ABEH003710>
- Konow, H. (2014). *Tall Wind Profiles in Heterogeneous Terrain* (thèse de doct.).
- Kumar, P., & Feiz, A.-A. (2016). Performance analysis of an air quality CFD model in complex environments : Numerical simulation and experimental validation with EMU observations. *Building and Environment*, *108*, 30-46. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2016.08.013>
- Kumar, P., Feiz, A.-A., Ngae, P., Singh, S. K., & Issartel, J.-P. (2015). CFD simulation of short-range plume dispersion from a point release in an urban like environment. *Atmospheric Environment*, *122*, 645-656. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.10.027>
- Kumar, P., & Sharan, M. (2009). Analytical models for the dispersion of pollutants in low wind conditions. In *Air Pollution and Turbulence* (p. 157-178). CRC Press.
- Labovský, J., & Jelemenský, L. (2011). Verification of CFD pollution dispersion modelling based on experimental data. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, *24*(2), 166-177. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jlp.2010.12.005>
- Lateb, M., Meroney, R., Yataghene, M., Fellouah, H., Saleh, F., & Boufadel, M. (2016). On the use of numerical modelling for near-field pollutant dispersion in urban environments - A review [Special Issue : Urban Health and Wellbeing]. *Environmental Pollution*, *208*, 271-283. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.envpol.2015.07.039>

- Launder, B., Reece, G., & Rodi, W. (1975). Progress in the Development of a Reynolds Stress Turbulence Closure. *Journal of Fluid Mechanics*, *68*, 537-566. <https://doi.org/10.1017/S0022112075001814>
- Launder, B., & Spalding, D. (1974). The Numerical Computation of Turbulent Flow Computer Methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *3*, 269-289. [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(74\)90029-2](https://doi.org/10.1016/0045-7825(74)90029-2)
- Lecocq, Y., Manceau, R., Bournaud, S., & Brizzi, L.-E. (2008). Modelling of the turbulent heat fluxes in natural, forced and mixed convection regimes. *7th ERCOFTAC Int. Symp. on Eng. Turb. Modelling and Measurements, Limassol, Cyprus, 2008*. <https://hal.science/hal-00406130>
- Lecocq, Y. (2008). *Contribution à l'analyse et à la modélisation des écoulements turbulents en régime de convection mixte - Application à l'entreposage des déchets radioactifs* (Ph.D. thesis). Université de Poitiers. <https://theses.hal.science/tel-00375441>
- Leelossy, A., Molnár, F., Izsák, F., Havasi, Á., Lagzi, I., & Mészáros, R. (2014). Dispersion modeling of air pollutants in the atmosphere : a review. *Central European Journal of Geosciences*, *6*, 257-278. <https://doi.org/10.2478/s13533-012-0188-6>
- Li, Y., Chen, D., Cheng, S., Xu, T., Huang, Q., Guo, X., Ma, X., Yang, N., & Liu, X. (2015). An improved model for heavy gas dispersion using time-varying wind data : Mathematical basis, physical assumptions, and case studies. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, *36*, 20-29. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S095042301500131X>
- Liang, J., Zhang, L., Wang, Y., Cao, X., Zhang, Q., Wang, H., & Zhang, B. (2014). Turbulence regimes and the validity of similarity theory in the stable boundary layer over complex terrain of the Loess Plateau, China. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, *119*(10), 6009-6021.
- Lien, F., & Leschziner, M. (1994). Assessment of turbulence-transport models including non-linear rng eddy-viscosity formulation and second-moment closure for flow over a backward-facing step. *Computers & Fluids*, *23*(8), 983-1004. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0045-7930\(94\)90001-9](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0045-7930(94)90001-9)
- Liu, D., & Wei, J. (2017). Modelling and simulation of continuous dense gas leakage for emergency response application. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, *48*, 14-20. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0950423017302541>
- Luhar, A. K. (2010). Estimating Variances of Horizontal Wind Fluctuations in Stable Conditions. *Boundary-Layer Meteorology*, *135*(2), 301-311. <https://doi.org/10.1007/s10546-010-9480-5>
- Luhar, A. K. (2011). Analytical puff modelling of light-wind dispersion in stable and unstable conditions. *Atmospheric Environment*, *45*(2), 357-368. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.10.005>

- Luhar, A. K., & Hurley, P. J. (2012). Application of a coupled prognostic model to turbulence and dispersion in light-wind stable conditions, with an analytical correction to vertically resolve concentrations near the surface. *Atmospheric Environment*, *51*, 56-66. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.01.046>
- Luhar, A. K., Hurley, P. J., & Rayner, K. N. (2009). Modelling near-surface low winds over land under stable conditions : sensitivity tests, flux-gradient relationships, and stability parameters. *Boundary-layer meteorology*, *130*(2), 249-274.
- Mahrt, L. (1998). Stratified atmospheric boundary layers and breakdown of models. *Theoretical and computational fluid dynamics*, *11*(3), 263-279.
- Mahrt, L. (2007). Weak-wind mesoscale meandering in the nocturnal boundary layer. *Environmental Fluid Mechanics*, *7*(4), 331-347.
- Mahrt, L. (2011). The near-calm stable boundary layer. *Boundary-layer meteorology*, *140*(3), 343-360.
- Mahrt, L. (2014). Stably stratified atmospheric boundary layers. *Annu. Rev. Fluid Mech*, *46*(1), 23-45.
- Mahrt, L., & Vickers, D. (2006). Extremely weak mixing in stable conditions. *Boundary-layer meteorology*, *119*(1), 19-39.
- Manceau, R. (2005). An improved version of the Elliptic Blending Model. Application to non-rotating and rotating channel flows. *4th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, *1*. <https://doi.org/10.1615/TSFP4.440>
- Manceau, R. (2011). *Modélisation de la turbulence* (Habilitation à diriger des recherches) [CLASSACAD]. Université de Poitiers. <https://hal.science/tel-02130223>
- Manceau, R., & Hanjalić, K. (2002). Elliptic blending model : A new near-wall Reynolds-stress turbulence closure. *Physics of Fluids*, *14*(2), 744-754. <https://doi.org/10.1063/1.1432693>
- Manceau, R., Perrin, R., Hadžiabdić, M., Fourment, P., & Benhamadouche, S. (2009). Turbulent jet impinging onto a rotating disc : a collaborative evaluation of RANS models. *6th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer*. <https://doi.org/10.1615/ICHMT.2009.TurbulHeatMassTransf.1390>
- Margheri, L., & Sagaut, P. (2016). A hybrid anchored-ANOVA-POD/Kriging method for uncertainty quantification in unsteady high-fidelity CFD simulations. *Journal of Computational Physics*, *324*, 137-173.
- Mazzola, M., Viola, A. P., Lanconelli, C., & Vitale, V. (2016). Atmospheric observations at the Amundsen-Nobile climate change tower in Ny-Ålesund, Svalbard. *Rendiconti Lincei*, *27*, 7-18.
- Meillier, Y., Frehlich, R., Jones, R., & Balsley, B. (2008). Modulation of small-scale turbulence by ducted gravity waves in the nocturnal boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, *65*(4), 1414-1427.

- Milliez, M., & Carissimo, B. (2007). Numerical simulations of pollutant dispersion in an idealized urban area, for different meteorological conditions. *Boundary-Layer Meteorology*, *122*, 321-342. <https://doi.org/10.1007/s10546-006-9110-4>
- Milliez, M., & Carissimo, B. (2008). Computational Fluid Dynamical Modelling of Concentration Fluctuations in an Idealized Urban Area. *Boundary-Layer Meteorology*, *127*, 241-259. <https://doi.org/10.1007/s10546-008-9266-1>
- Minagawa, Y., & Obi, S. (2004). Development of turbulent impinging jet on a rotating disk [Selected papers from the 4th International Symposium on Turbulence Heat and Mass Transfer]. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, *25*(5), 759-766. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2004.05.013>
- Moen, A., Mauri, L., & Narasimhamurthy, V. D. (2019). Comparison of $k - \varepsilon$ models in gaseous release and dispersion simulations using the CFD code FLACS. *Process Safety and Environmental Protection*, *130*, 306-316. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957582018309807>
- Monin, A. S., & Obukhov, A. M. (1954). Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. *Contrib. Geophys. Inst. Acad. Sci. USSR*, *151*(163), e187.
- Monin, A., & Yaglom, A. M. (1971). Statistical fluid mechanics, vols. 1 and 2. *MIT Press, Cambridge, MA, 1975*, 11.
- Moreira, D. M., Tirabassi, T., & Carvalho, J. C. (2005). Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers. *Atmospheric Environment*, *39*(20), 3643-3650. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.03.004>
- Moreira, V. S., Degrazia, G. A., Timm, A. U., Robérti, D. R., & Maldaner, S. (2013). Connecting Turbulence and Meandering Parameterization to Describe Passive Scalars Dispersion in Low Wind Speed Conditions. *International Scholarly Research Notices*, *2013*, 1-8. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:56624051>
- Mortarini, L., & Anfossi, D. (2015). Proposal of an empirical velocity spectrum formula in low-wind speed conditions. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *141*(686), 85-97.
- Mortarini, L., Ferrero, E., Falabino, S., Trini Castelli, S., Richiardone, R., & Anfossi, D. (2013). Low-frequency processes and turbulence structure in a perturbed boundary layer. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, *139*(673), 1059-1072.
- Mortarini, L., Stefanello, M., Degrazia, G., Roberti, D., Trini Castelli, S., & Anfossi, D. (2016). Characterization of wind meandering in low-wind-speed conditions. *Boundary-layer meteorology*, *161*(1), 165-182.
- Mylne, K. R. (1992). Concentration fluctuation measurements in a plume dispersing in a stable surface layer. *Boundary-Layer Meteorology*, *60*(1), 15-48.
- Na, A., Gryning, S.-E., Hasager, C., & Courtney, M. (2009). Extending the wind profile much higher than the surface layer. *European Wind Energy Conference and Exhibition 2009, EWEC 2009*, *2*.

- Nappo, C. J., Hiscox, A. L., & Miller, D. R. (2010). A note on turbulence stationarity and wind persistence within the stable planetary boundary layer. *Boundary-layer meteorology*, 136, 165-174.
- Nickola, P. (1977). *Hanford 67-series : a volume of atmospheric field diffusion measurements* (rapp. tech.). Battelle Pacific Northwest Labs., Richland, WA (USA).
- Nieuwstadt, F. (1984). Some aspects of the turbulent stable boundary layer. *Boundary Layer Structure : Modeling and Application to Air Pollution and Wind Energy*, 31-55.
- Obukhov, A. (1971). Turbulence in an atmosphere with a non-uniform temperature. *Boundary layer meteorology*, 2(1), 7-29.
- Oettl, D., Almbauer, R., & Sturm, P. (2001). A New Method to Estimate Diffusion in Stable, Low-Wind Conditions. *Journal of Applied Meteorology - J APPL METEOROL*, 40, 259-268. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(2001\)040<0259:ANMTED>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(2001)040<0259:ANMTED>2.0.CO;2)
- Okamoto, S., Ohnishi, H., Yamada, T., Mikami, T., Momose, S., Shinji, H., & Itohiya, T. (2001). A model for simulating atmospheric dispersion in low-wind conditions. *Int. J. of Environment and Pollution*, 16, 69-79. <https://doi.org/10.1504/IJEP.2001.000607>
- Orlanski, I. (1975). A rational subdivision of scales for atmospheric processes. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 527-530.
- Öttl, D., Goulart, A., Degrazia, G., & Anfossi, D. (2005). A new hypothesis on meandering atmospheric flows in low wind speed conditions. *Atmospheric Environment*, 39(9), 1739-1748.
- Pahlow, M., Parlange, M. B., & Porté-Agel, F. (2001). On Monin–Obukhov similarity in the stable atmospheric boundary layer. *Boundary-layer meteorology*, 99, 225-248.
- Palazzi, E., Currò, F., & Fabiano, B. (2015). A critical approach to safety equipment and emergency time evaluation based on actual information from the Bhopal gas tragedy [Bhopal 30th Anniversary]. *Process Safety and Environmental Protection*, 97, 37-48. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.psep.2015.06.009>
- Pandey, G., & Sharan, M. (2019). Accountability of wind variability in AERMOD for computing concentrations in low wind conditions. *Atmospheric Environment*, 202, 105-116. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2019.01.017>
- Panofsky, H. A., & Dutton, J. A. (1984). Atmospheric turbulence. Models and methods for engineering applications. *New York : Wiley*.
- Pasquill, F. (1972). Some aspects of boundary layer description. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 98(417), 469-494. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/qj.49709841702>
- Pasquill, F. (1961). The estimation of the dispersion of windborne material. *Meteoro. Mag.*, 90, 20-49.
- Peña, A., Gryning, S.-E., & Hasager, C. (2009). Comparing mixing-length models of the diabatic wind profile over homogeneous terrain. *Theoretical and Applied Climatology*, 100, 325-335. <https://doi.org/10.1007/s00704-009-0196-8>

- Pielke, R. (1984). *Mesoscale Meteorological Modeling* Academic Press, 612. *New York, NY, USA*.
- Piringer, M., Grimmond, C., Joffre, S., Mestayer, P., Middleton, D., Rotach, M., Baklanov, A., De Ridder, K., Ferreira, J., Guilloteau, E., Karppinen, A., Martilli, A., Masson, V., & Tombrou, M. (2002). Investigating the Surface Energy Budget in Urban Areas - Recent Advances and Future Needs. *Water, Air, & Soil Pollution : Focus*, 2, 1-16. <https://doi.org/10.1023/A:1021302824331>
- Pontiggia, M., Landucci, G., Busini, V., Derudi, M., Alba, M., Scaioni, M., Bonvicini, S., Cozzani, V., & Rota, R. (2011). CFD model simulation of LPG dispersion in urban areas. *Atmospheric Environment*, 45(24), 3913-3923. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231011004602>
- Poulos, G. S., Blumen, W., Fritts, D. C., Lundquist, J. K., Sun, J., Burns, S. P., Nappo, C., Banta, R., Newsom, R., Cuxart, J., et al. (2002). CASES-99 : A comprehensive investigation of the stable nocturnal boundary layer. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 83(4), 555-582.
- Quinn, A., Wilson, M., Reynolds, A., Couling, S., & Hoxey, R. (2001). Modelling the dispersion of aerial pollutants from agricultural buildings — an evaluation of computational fluid dynamics (CFD). *Computers and Electronics in Agriculture*, 30(1), 219-235. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0168-1699\(00\)00166-6](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0168-1699(00)00166-6)
- Reiminger, N. (2020). *3D Modelling of Air Pollution at Urban Scale* (thèse de doct.). <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.10037.91366>
- Richardson, L. F. (1922). *Weather prediction by numerical process*. University Press.
- Roberti, D. R., Acevedo, O. C., & Moraes, O. L. (2012). A brazilian network of carbon flux stations.
- Rodi, W. (1993). *Turbulence models and their application in hydraulics*. CRC Press.
- Rossi, R., & Iaccarino, G. (2009). Numerical simulation of scalar dispersion downstream of a square obstacle using gradient-transport type models. *Atmospheric Environment*, 43(16), 2518-2531. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.02.044>
- Rossi, R., Philips, D. A., & Iaccarino, G. (2009). Numerical simulation of scalar dispersion in separated flows using algebraic flux models. *Turbulence Heat and Mass Transfer 6. Proceedings of the Sixth International Symposium On Turbulence Heat and Mass Transfer*.
- Rotta, J. C. (1951). Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz. *Zeitschrift für Physik*, 129, 547-572.
- Sadek, R. (2013). *Modélisation de l'écoulement atmosphérique à l'échelle hectométrique* (thèse de doct.). Ecully, Ecole centrale de Lyon.
- Sadek, R., Souhac, L., Brocheton, F., & Buisson, E. (2013). Adaptation of the Reynolds Stress Turbulence Model for Atmospheric Simulations. *HARMO 15 conference*.

- Sagendorf, J., & Dickson, C. (1974). *Diffusion under low windspeed, inversion conditions.* [Sulfur fluoride gaseous tracer] (rapp. tech.). National Oceanic et Atmospheric Administration, Idaho Falls, Idaho (USA).
- Salim, S. M., Buccolieri, R., Chan, A., & Di Sabatino, S. (2011). Numerical simulation of atmospheric pollutant dispersion in an urban street canyon : Comparison between RANS and LES. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 99(2), 103-113. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jweia.2010.12.002>
- Sandeepan, B., Rakesh, P., & Venkatesan, R. (2013). Numerical simulation of observed submesoscale plume meandering under nocturnal drainage flow. *Atmospheric Environment*, 69, 29-36.
- Sapolin, B. (2011). *Construction d'une méthodologie d'évaluation statistique des logiciels de dispersion atmosphérique utilisés en évaluation de risque NRBC et développement d'un modèle d'estimation de l'incertitude des résultats* (Theses). Université Paris Diderot - Paris 7.
- Schatzmann, M., Olesen, H., & Franke, J. (2010). *COST 732 model evaluation case studies : approach and results.*
- Schiavon, M., Tampieri, F., Bosveld, F., Mazzola, M., Castelli, S. T., Viola, A., & Yagüe, C. (2019). The share of the mean turbulent kinetic energy in the near-neutral surface layer for high and low wind speeds. *Boundary-Layer Meteorology*, 172, 81-106.
- Sharan, M., Modani, M., & Yadav, A. (2003). Atmospheric dispersion : An overview of mathematical modelling framework. *Proceedings-Indian National Science Academy Part A*, 69(6), 725-744.
- Sharan, M., & Kumar, P. (2011). Estimation of upper bounds for the applicability of non-linear similarity functions for non-dimensional wind and temperature profiles in the surface layer in very stable conditions. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 467(2126), 473-494.
- Sharan, M., & Modani, M. (2005). An analytical study for the dispersion of pollutants in a finite layer under low wind conditions. *pure and applied geophysics*, 162(10), 1861-1892.
- Sharan, M., & Yadav, A. k. (1998). Simulation of diffusion experiments under light wind, stable conditions by a variable K-theory model. *Atmospheric Environment*, 32(20), 3481-3492. [https://doi.org/10.1016/S1352-2310\(98\)00048-X](https://doi.org/10.1016/S1352-2310(98)00048-X)
- Sharan, M., Yadav, A. K., & Singh, M. (1995). Comparison of sigma schemes for estimation of air pollutant dispersion in low winds. *Atmospheric environment*, 29(16), 2051-2059.
- Sharan, M., Yadav, A. K., Singh, M., Agarwal, P., & Nigam, S. (1996). A mathematical model for the dispersion of air pollutants in low wind conditions. *Atmospheric Environment*, 30(8), 1209-1220.
- Siddiqui, M., Jayanti, S., & Swaminathan, T. (2012). CFD analysis of dense gas dispersion in indoor environment for risk assessment and risk mitigation. *Journal of Hazardous*

- Materials*, 209-210, 177-185. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304389412000234>
- Singh, M., Yadav, A. K., et al. (1996). Mathematical model for atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. *Atmospheric Environment*, 30(7), 1137-1145.
- Slade, D. H. (1968). METEOROLOGY AND ATOMIC ENERGY, 1968. <https://doi.org/10.2172/4492043>
- Smagorinsky, J. (1963). General circulation experiments with the primitive equations : I. The basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91(3), 99-164. [https://doi.org/https://doi.org/10.1175/1520-0493\(1963\)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2](https://doi.org/https://doi.org/10.1175/1520-0493(1963)091<0099:GCEWTP>2.3.CO;2)
- Spalart, P., & Allmaras, S. (1992). A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows. *AIAA*, 439. <https://doi.org/10.2514/6.1992-439>
- Speziale, C., Sarkar, S., & Gatski, T. (1991). Modelling the pressure-strain correlation of turbulence - An invariant dynamical systems approach. *Journal of Fluid Mechanics*, 227. <https://doi.org/10.1017/S0022112091000101>
- Stewart, J., Coldrick, S., Lea, C., Gant, S., & Ivings, M. (2016). Validation Database for Evaluating Vapor Dispersion Models for Safety Analysis of LNG Facilities Guide to the LNG Model.
- Stull, R. B. (1988). *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Springer Netherlands.
- Sun, B., Wong, J., Wadnerkar, D., Utikar, R. P., Pareek, V. K., & Guo, K. (2020). Multiphase simulation of LNG vapour dispersion with effect of fog formation. *Applied Thermal Engineering*, 166, 114671. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431119325050>
- Sun, J., Lenschow, D. H., Burns, S. P., Banta, R. M., Newsom, R. K., Coulter, R., Frasier, S., Ince, T., Nappo, C., Balsley, B. B., et al. (2004). Atmospheric disturbances that generate intermittent turbulence in nocturnal boundary layers. *Boundary-layer meteorology*, 110, 255-279.
- Sun, J., Mahrt, L., Banta, R. M., & Pichugina, Y. L. (2012). Turbulence regimes and turbulence intermittency in the stable boundary layer during CASES-99. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 69(1), 338-351.
- Tan, W., Li, C., Wang, K., Zhu, G., & Liu, L. (2019). Geometric effect of buildings on the dispersion of carbon dioxide cloud in idealized urban street canyons. *Process Safety and Environmental Protection*, 122, 271-280. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957582018305342>
- Tang, W. (2005). Application of CFD simulations for short-range atmospheric dispersion over the open fields of project prairie grass. *Air and Waste Management Association 98th Annual Conference, June 21-23, Minn., MN, 2005*.
- Thielen, L., Hanjalic, K., Jonker, H., & Manceau, R. (2005). Predictions of flow and heat transfer in multiple impinging jets with an elliptic-blending second-moment closure.

- International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48, 1583-1598. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2004.10.025>
- Tominaga, Y., & Stathopoulos, T. (2007). Turbulent Schmidt numbers for CFD analysis with various types of flowfield. *Atmospheric Environment*, 41, 8091-8099. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2007.06.054>
- Tominaga, Y., & Stathopoulos, T. (2010). Numerical simulation of dispersion around an isolated cubic building : Model evaluation of RANS and LES. *Building and Environment*, 45(10), 2231-2239. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2010.04.004>
- Tominaga, Y., & Stathopoulos, T. (2011). CFD modeling of pollution dispersion in a street canyon : Comparison between LES and RANS [The Fifth International Symposium on Computational Wind Engineering]. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 99(4), 340-348. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jweia.2010.12.005>
- Tominaga, Y., & Stathopoulos, T. (2012). CFD Modeling of Pollution Dispersion in Building Array : Evaluation of turbulent scalar flux modeling in RANS model using LES results [13th International Conference on Wind Engineering]. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 104-106, 484-491. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jweia.2012.02.004>
- Tominaga, Y., & Stathopoulos, T. (2017). Steady and unsteady RANS simulations of pollutant dispersion around isolated cubical buildings : Effect of large-scale fluctuations on the concentration field. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 165, 23-33. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jweia.2017.02.001>
- Tominaga, Y., & Stathopoulos, T. (2018). CFD simulations of near-field pollutant dispersion with different plume buoyancies. *Building and Environment*, 131, 128-139. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2018.01.008>
- Toparlar, Y., Blocken, B., Maiheu, B., & Heijst, G. (2019). CFD simulation of the near-neutral atmospheric boundary layer : New temperature inlet profile consistent with wall functions. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 191, 91-102. <https://doi.org/10.1016/j.jweia.2019.05.016>
- Trini Castelli, S., Falabino, S., Mortarini, L., Ferrero, E., Richiardone, R., & Anfossi, D. (2014). Experimental investigation of surface-layer parameters in low wind-speed conditions in a suburban area. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140(683), 2023-2036.
- Troen, I., & Mahrt, L. (1986). A simple model of the atmospheric boundary layer ; sensitivity to surface evaporation. *Boundary-Layer Meteorology*, 37(1-2), 129-148.
- Turner, D. B. (1964). A Diffusion Model for an Urban Area. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 3(1), 83-91. [https://doi.org/https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1964\)003<0083:ADMFAU>2.0.CO;2](https://doi.org/https://doi.org/10.1175/1520-0450(1964)003<0083:ADMFAU>2.0.CO;2)

- Ucker Timm, A., Degrazia, G. A., Roberti, D. R., & Anfossi, D. (2009). Employing turbulent and meandering time scales to modeling the contaminants enhanced horizontal dispersion. *Atmospheric Research*, *93*(4), 811-817. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2009.03.016>
- Van Dop, H., & Steyn, D. G. (2012). *Air pollution modeling and its application VIII* (T. 15). Springer Science & Business Media.
- Van Ulden, A., & Wieringa, J. (1996). Atmospheric boundary layer research at Cabauw. *Boundary-Layer Meteorology 25th Anniversary Volume, 1970–1995 : Invited Reviews and Selected Contributions to Recognise Ted Munn's Contribution as Editor over the Past 25 Years*, 39-69.
- Vázquez-Román, R., Díaz-Ovalle, C., Quiroz-Pérez, E., & Mannan, M. S. (2016). A CFD-based approach for gas detectors allocation. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, *44*, 633-641. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0950423016300596>
- Vendel, F. (2011). *Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes : application à l'étude de sites industriels* (thèse de doct.) [2011ECDL0011]. <http://www.theses.fr/2011ECDL0011/document>
- Verkaik, J., & Holtslag, A. (2007). Wind profiles, momentum fluxes and roughness lengths at Cabauw revisited. *Boundary-layer meteorology*, *122*, 701-719.
- Vervecken, L., Camps, J., & Meyers, J. (2013). Accounting for wind-direction fluctuations in Reynolds-averaged simulation of near-range atmospheric dispersion. *Atmospheric Environment*, *72*, 142-150. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2013.03.005>
- Vickers, D., & Mahrt, L. (2007). Observations of the cross-wind velocity variance in the stable boundary layer. *Environmental Fluid Mechanics*, *7*(1), 55-71.
- Vickers, D., & Mahrt, L. (2003). The cospectral gap and turbulent flux calculations. *Journal of atmospheric and oceanic technology*, *20*(5), 660-672.
- Wallace, J., & Hobbs, P. (2006). *Atmospheric Science : An Introductory Survey : Second Edition*.
- Wang, B., Chen, B., & Zhao, J. (2015). The real-time estimation of hazardous gas dispersion by the integration of gas detectors, neural network and gas dispersion models. *Journal of Hazardous Materials*, *300*, 433-442. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304389415005658>
- Wannberg, V. E., Williams, G., Sawyer, P., & Venedam, R. (2010). An Experimental Field Dataset with Buoyant, Neutral, and Dense Gas Atmospheric Releases and Model Comparisons in Low-Wind Speed (Diffusion) Conditions. *Journal of applied meteorology and climatology*, *49*(9), 1805-1817.
- Wei, X. (2016). Experimental and numerical study of atmospheric turbulence and dispersion in stable conditions and in near field at a complex site.

- Wilson, R. B., Start, G., Dickson, C., & Ricks, N. R. (1976). Diffusion under low windspeed conditions near Oak Ridge, Tennessee. *Unknown*.
- Yagüe, C., Viana, S., Maqueda, G., & Redondo, J. M. (2006). Influence of stability on the flux-profile relationships for wind speed, Φ_m , and temperature, Φ_h , for the stable atmospheric boundary layer. *Nonlinear Processes in Geophysics*, *13*(2), 185-203.
- Yee, E., & Biltoft, C. (2004). Concentration Fluctuation Measurements in a Plume Dispersing Through a Regular Array of Obstacles. *Boundary-Layer Meteorology*, *111*, 363-415. <https://doi.org/10.1023/B:BOUN.0000016496.83909.ee>
- Yu, H., & Thé, J. (2017). Simulation of gaseous pollutant dispersion around an isolated building using the $k-\omega$ SST (Shear Stress Transport) turbulence model. *Journal of the Air & Waste Management Association*, *67*, 517-536. <https://doi.org/10.1080/10962247.2016.1232667>
- Zannetti, P. (1990). Gaussian Models. In *Air Pollution Modeling : Theories, Computational Methods and Available Software* (p. 141-183). Springer US. https://doi.org/10.1007/978-1-4757-4465-1_7
- Zannetti, P. (2013). *Air pollution modeling : theories, computational methods and available software*. Springer Science & Business Media.
- Zilitinkevich, S., & Baklanov, A. (2002). Calculation Of The Height Of The Stable Boundary Layer In Practical Applications. *Boundary-Layer Meteorology*, *105*, 389-409. <https://doi.org/10.1023/A:1020376832738>