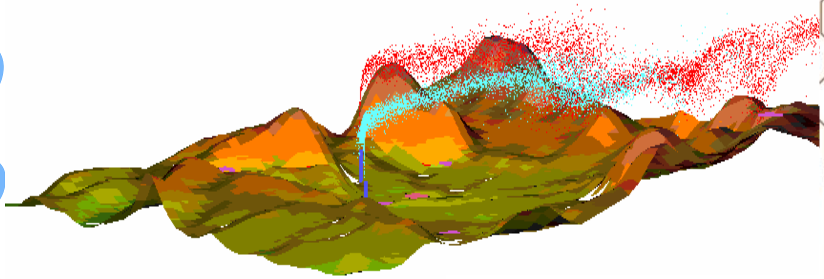
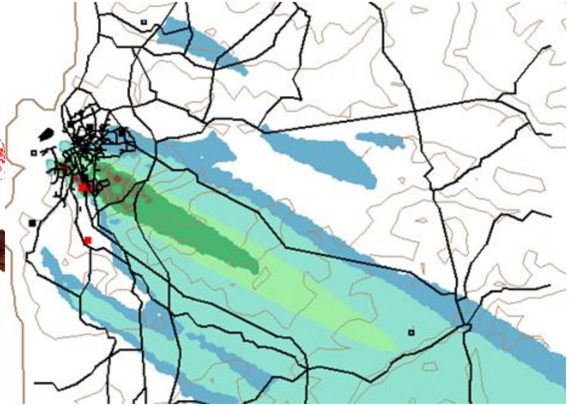
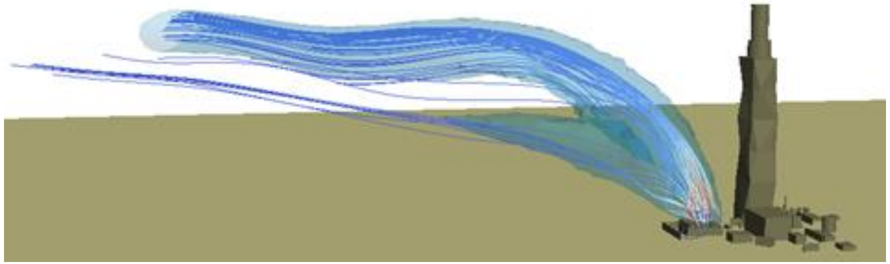
Modélisation numérique de
la dispersion des polluants dans l'atmosphère







Bruno Ribstein

Modélisation numérique de la dispersion des polluants dans l'atmosphère

POURQUOI MODÉLISER ?

TRANSPORT DE MATIÈRE DANS L'ATMOSPHERE

DYNAMIQUE DE L'ATMOSPHÈRE

- **Equation d'état**
- **Approximation hydrostatique**
- **Equation thermodynamique**
- **Stabilité de l'atmosphère**

LES DIFFÉRENTS MODÈLES

- **Modèle Lagrangien**
- **Modèle Eulérien**
- **Modèle Gaussien**

Pourquoi modéliser la dispersion des polluants dans l'atmosphère ?

- **Modélisation diagnostique :**
  - **Que se passe t-il ?**
  - Etablir des relations de causes à effets sur un site donné
  - Interpréter des données de terrain

- **Modélisation pronostique :**
  - **Qu'est ce qui va se passer ?**
  - **Que se passerait-il si ?**
  - Etablir des prévisions
  - Evaluer des scénario
  - Développer des stratégies de réduction de la pollution
  - Effectuer des études d'impact

Fondamentale (diagnostique) comprendre — Identification des mécanismes / Quantification des contributions relatives

↓

Appliquée (pronostique) prévoir — Prévision des pics de pollution / Stratégies d'abattement des émissions

↓

Décisionnelle Agir — Comment améliorer la qualité de l'air ?

Pourquoi modéliser : exemple industriel

Implantation industrielle et environnement atmosphérique

Impact des rejets à long terme

- Comprendre et prévenir : *<u>étude d'impact</u>*
- Suivre et agir : *<u>réseau de surveillance</u>*

Rejets accidentels

- Comprendre et prévenir : *<u>étude de danger</u>*
- Suivre et agir : *<u>système d'alerte</u>*

Un même modèle de dispersion sera utiliser différemment pour répondre à ces questions.

Modélisation numérique de la dispersion des polluants dans l'atmosphère

POURQUOI MODÉLISER ?

TRANSPORT DE MATIÈRE DANS L'ATMOSPHERE

DYNAMIQUE DE L'ATMOSPHÈRE

- **Equation d'état**
- **Approximation hydrostatique**
- **Equation thermodynamique**
- **Stabilité de l'atmosphère**

LES DIFFÉRENTS MODÈLES

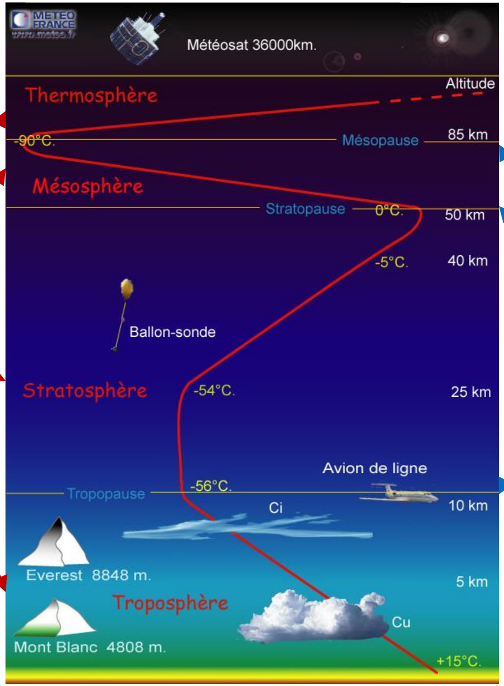
- **Modèle Lagrangien**
- **Modèle Eulérien**
- **Modèle Gaussien**

Les grandes couches de l’atmosphère

L’atmosphère est séparée en **3 couches**, se distinguant l’une de l’autre par le signe de la variation verticale de la température.

Les 3 grandes couches de l’atmosphère sont :

- **la mésosphère**
- **la stratosphère**
- **la troposphère**



On considère habituellement que la limite supérieure de l’atmosphère *météorologique* se situe vers 80 km (**mésopause**).

Les limites respectives de ces couches sont :

- **la mésopause**
- **la stratopause**
- **la tropopause**

La couche limite atmosphérique (CLA)

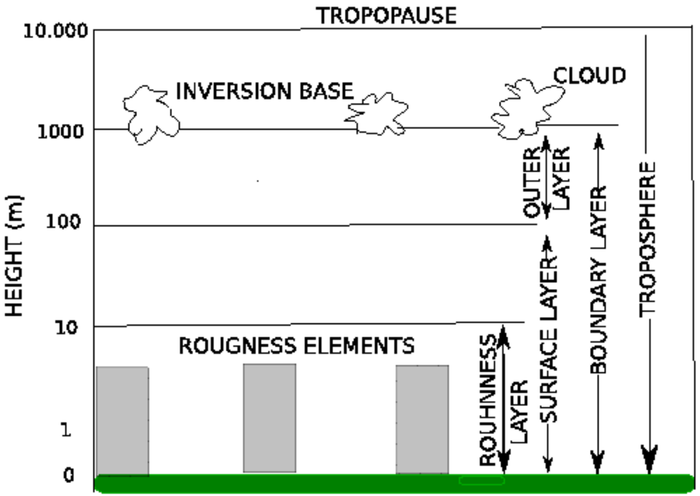
- La couche limite atmosphérique (CLA) est la partie basse de la troposphère, environ 10% de sa hauteur. La CLA est la seule couche peuplée d'être vivant dans l'atmosphère.

- La CLA présente de fortes interactions entre l'atmosphère et la surface terrestre, sur des échelles de temps de l'ordre de quelques heures à la journée :

    - Effets mécaniques dus au forçage exercé par le sol sur la couche d'air,

    - Effets thermiques correspondant aux échanges de chaleur entre le sol et la couche d'air.

Les échanges de quantité de mouvement et de chaleur se transmettent efficacement et rapidement à l'ensemble de la CLA par transfert *turbulent* et *mélange*.

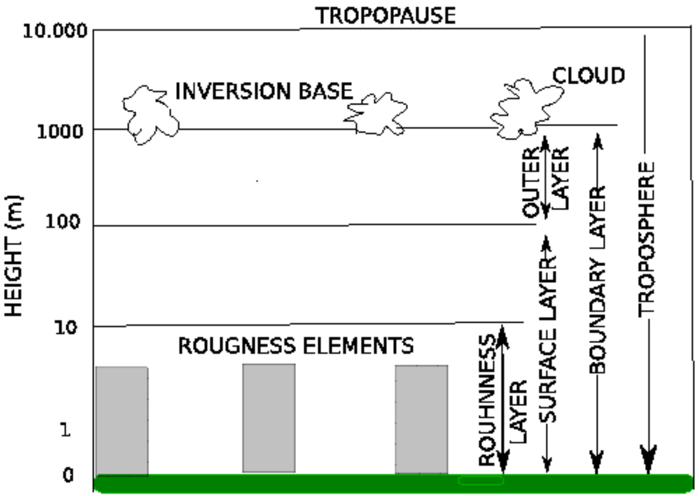


La couche limite atmosphérique (CLA)

- **<u>Couche de surface:</u>** partie inférieure de la CLA dénommée aussi couche limite superficielle (CLS). Les gradients verticaux sont importants et les flux varient peu avec l'altitude. Le gradient de température est négatifs (forte instabilité due aux discontinuités sol/atmosphère), le gradient de vent est élevé (vitesse nulle en surface) et les concentrations des gaz émis au sol décroissent avec l'altitude.

- **<u>Couche mélangée:</u>** où les différents paramètres moyens varient peu avec l'altitude et donc, l'existence de flux verticaux importants responsables de cette homogénéisation.

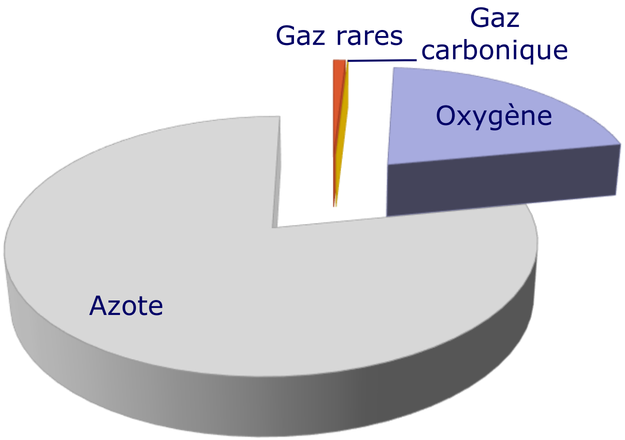
- **<u>Couche d'Ekman:</u>** partie supérieure de la CLA. L'influence de la surface se fait faiblement sentir.
  Les effets de Coriolis dus à la rotation de la Terre sont prépondérants. On retrouve des gradients importants au sommet de la couche mélangée. Cette couche dépendra fortement de l'interaction avec l'atmosphère libre au-dessus. L'existence d'in gradient positif de température potentielle couplé à l'évolution temporelle de la couche de mélange pourra induire un flux de chaleur négatif.



Gaz constituants l'atmosphère

- Sur une épaisseur d'environ 80 km, l'atmosphère est un **<u>mélange</u>** de divers gaz, certains en **<u>proportions quasiment invariables.</u>**

- **Au dessus de 80 km, les gaz se séparent et s'étagent par ordre de masse volumique décroissante.**



Azote : 78%

Oxygène : 21%

Gaz rares :

Argon : 0,9 %

Et Xénon, Néon, Hélium à l'état de « traces »

Gaz carbonique : 0,035%

Autres constituants

- L'atmosphère contient également un certain nombre d'autres constituants **permanents** en proportions **faibles**, mais **très variables.**

- Ce sont justement ces composés, dits « minoritaires », qui jouent un rôle très important dans certains phénomènes météorologiques : nuages et précipitations, effet de serre…

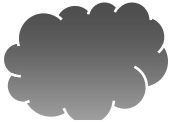
De l'**eau**, sous ses trois « phases » :

Vapeur d'eau

Glace

Eau liquide

Des traces de gaz :



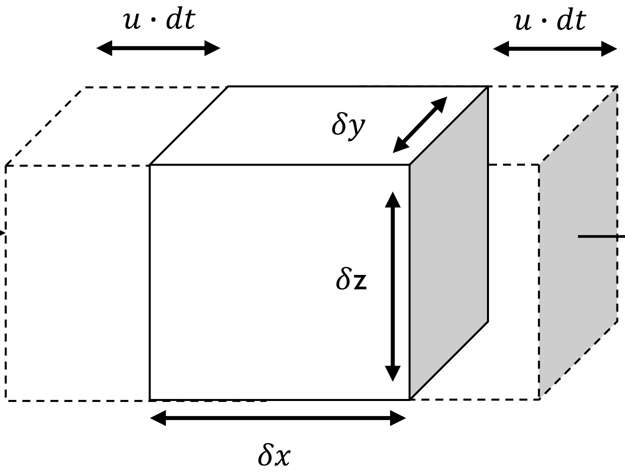
O3, H2,CH4, etc.

Des particules solides :

pollens, suies, poussières, cristaux de sel, etc

Conservation de la masse

- Pas de source
- Pas de puit
- Pas de diffusion



Masse entrante

Masse sortante

Masse à t + dt :

$$\rho(x, t+dt) \cdot \delta x \cdot \delta y \cdot \delta z = \rho(x,t) \cdot \delta x \cdot \delta y \cdot \delta z$$

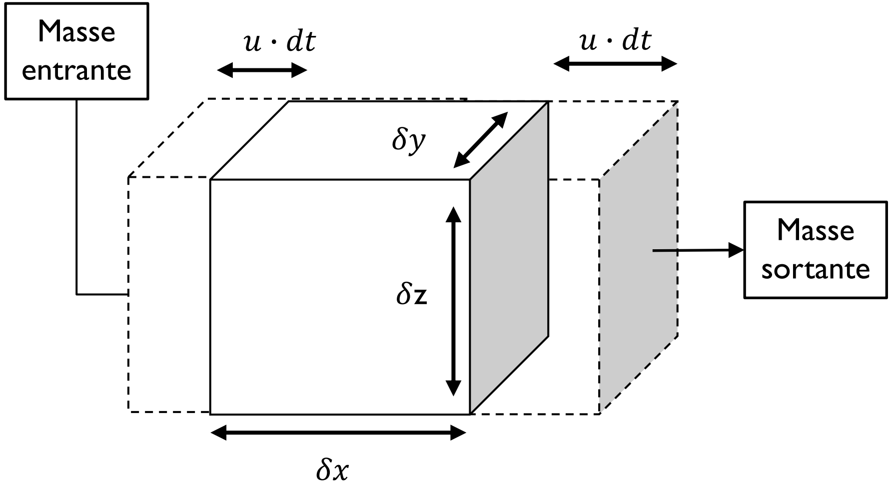
$$+ \; \textit{Masse entrante}$$

$$- \; \textit{Masse sortante}$$

$$\rho(x + \delta x/2, t) \cdot \delta y \cdot \delta z \cdot u(x + \delta x/2, t) \cdot dt$$

$$\rho(x - \delta x/2, t) \cdot \delta y \cdot \delta z \cdot u(x - \delta x/2, t) \cdot dt$$

Conservation de la masse



Masse (t + dt) = Masse (t)

+ *Masse entrante*

- *Masse sortante*

$$\frac{\rho(x,t+dt)-\rho(x,t)}{dt} + u(x+\delta x/2\,,t)\,\frac{\rho(x+\delta x/2\,,t)-\rho(x-\delta x/2\,,t)}{\delta x} + \rho(x-\delta x/2\,,t)\,\frac{u(x+\delta x/2\,,t)-u(x-\delta x/2\,,t)}{\delta x} = 0$$

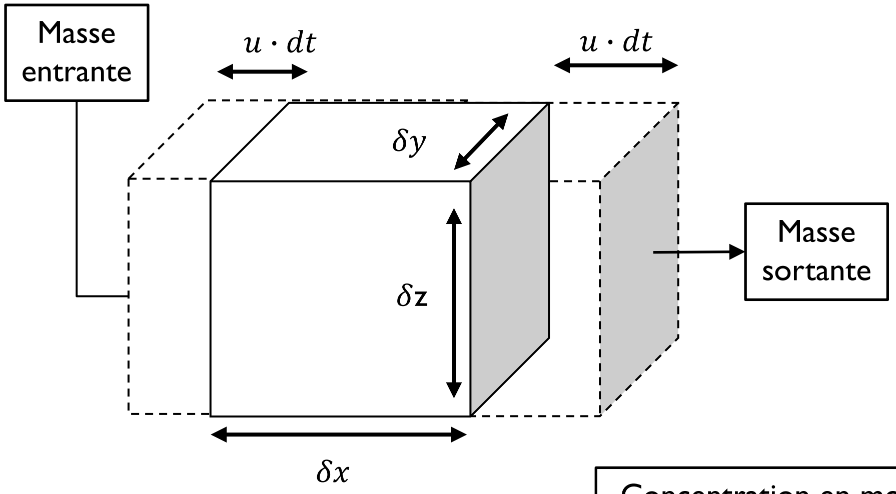
Conservation de la masse 1d:

- Pas de source
- Pas de puit
- Pas de diffusion

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial\big(\rho(x,t)u(x,t)\big)}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + u(x,t)\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial x} + \rho(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = 0$$

Conservation de la masse



$$\text{Masse } (t + dt) = \text{Masse } (t)$$
+ Masse entrante
- Masse sortante

Concentration en mcg/m3 :
$c(\vec{x}, t)$

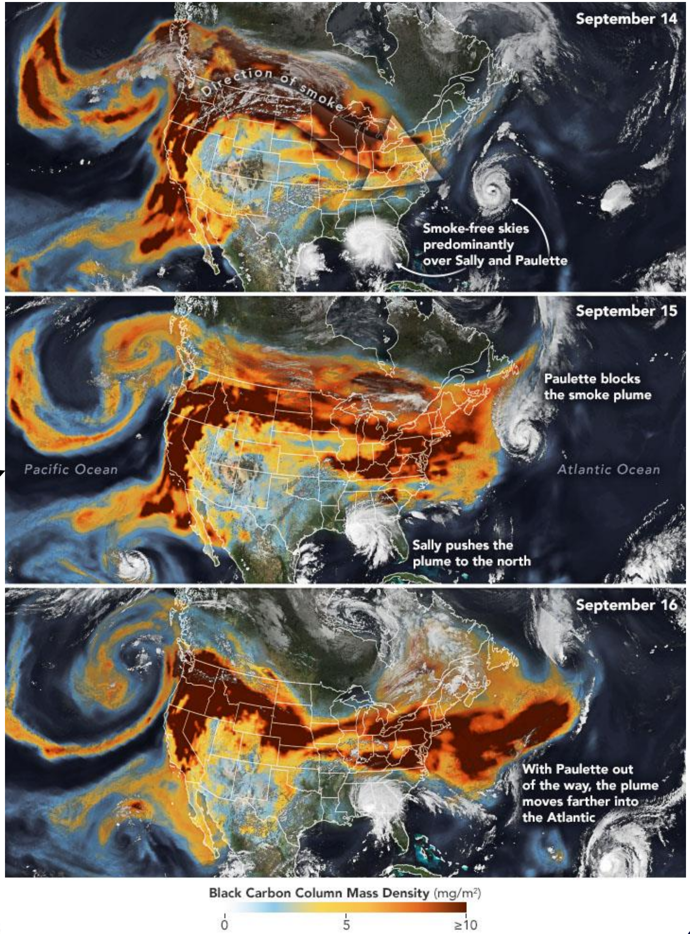
Equation de transport d'un scalaire:

- Source : $S(\vec{x}, t)$
- Puit : $P(\vec{x}, t)$
- Diffusion : $D(\vec{x}, t)$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (c\vec{v}) = S + P + D$$

- Pour évaluer le transport d'un polluant il est important l'état de l'atmosphère.
- Il est supposé dans la suite que le transport du polluant n'influence pas l'état de l'atmosphère.

Conservation de la masse

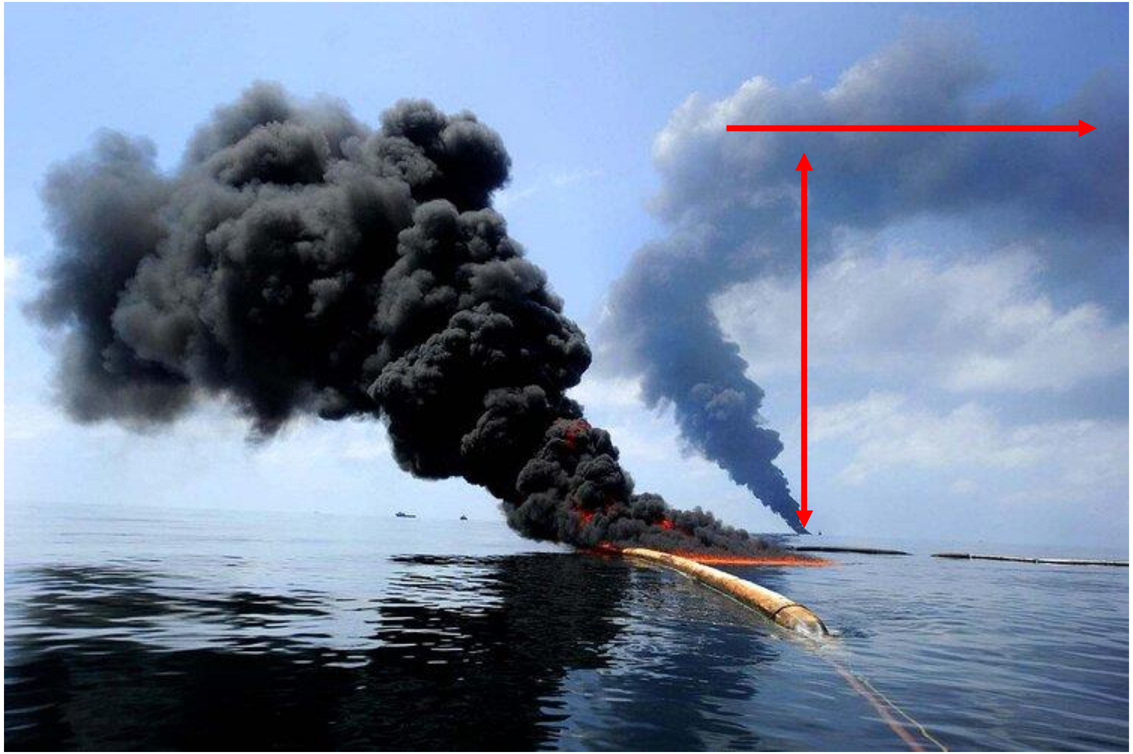


- <u>Chaleur dégagée par l'incendie</u> : mouvement ascendant d'air chaud entrainant les fumées en altitudes puis sur une grande distance.

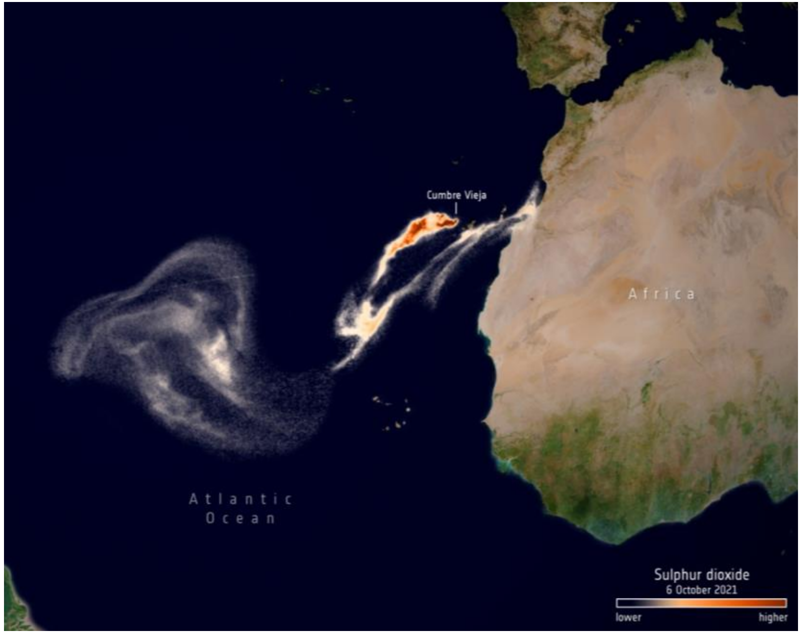
Conservation de la masse

- <u>Chaleur dégagée par l'incendie</u> : mouvement ascendant d'air chaud entrainant les fumées en altitudes puis sur une grande distance.

- Dans la pratique ceci sera modélisé en paramétrant l'altitude d'entrée des fumées dans l'atmosphère.



Conservation de la masse



- Eruption volcanique sur l'ile de La Palma, le 6 et 10 octobre 2021, vu par Sentinel-2 (ESA)

Modélisation numérique de la dispersion des polluants dans l'atmosphère

POURQUOI MODÉLISER ?

TRANSPORT DE MATIÈRE DANS L'ATMOSPHERE

DYNAMIQUE DE L'ATMOSPHÈRE

- **Equation d'état**
- **Approximation hydrostatique**
- **Equation thermodynamique**
- **Stabilité de l'atmosphère**

LES DIFFÉRENTS MODÈLES

- **Modèle Lagrangien**
- **Modèle Eulérien**
- **Modèle Gaussien**

Equation d'état

- A un très bon degré d'approximation, le gaz atmosphérique peut être assimilé à un <u>gaz parfait</u>.

$$P = \rho R T$$

$R \approx 287 J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$ est la constante du gaz atmosphérique. R est relié à la constante universelle des gaz parfait $R^* = 8.314\, J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$ par la relation $R = R^*/\mu$ où $\mu \approx 29 g \cdot mol^{-1}$ est la masse molaire du gaz.

- L'eau est le seul constituant qui fait varier la masse molaire de l'atmosphère dans la troposphère de façon significative.

- La masse molaire de la troposphère varie $\approx 0.5\%$ suivant le point (x, y, z, t) considéré du à la présence (ou à l'absence) d'eau.

Equation d'état & équilibre hydrostatique

- A un très bon degré d'approximation, le gaz atmosphérique peut être assimilé à un gaz parfait.

$$P = \rho R T$$

$R \approx 287 J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$ est la constante du gaz atmosphérique. R est relié à la constante universelle des gaz parfait $R^* = 8.314\, J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$ par la relation $R = R^*/\mu$ où $\mu \approx 29 g \cdot mol^{-1}$ est la masse molaire du gaz.

- La masse molaire de la troposphère varie $\approx 0.5\%$ suivant le point (x, y, z, t) considéré du à la présence (ou à l'absence) d'eau.

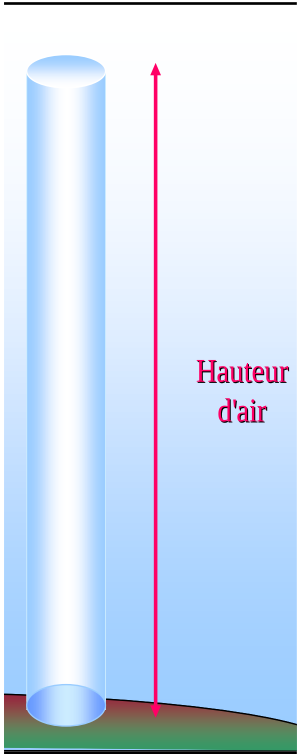
- Equilibre hydrostatique : équilibre entre gravité et force de pression.

$$\frac{\partial P}{\partial z} + \rho g = 0$$

- Au niveau du sol, la pression atmosphérique représente le poids de la colonne d'air de section unité et s'appuyant sur le sol.

- Dans les fluides géophysique en mouvement, l'expérience montre que la variation verticale de pression est régie par l'équilibre hydrostatique.

- *Dans le cours, on s'intéresse à des fluides en équilibre hydrostatique, ce qui ne veut pas dire que le fluide ne bouge pas !*



Equation d'état & équilibre hydrostatique

- Equilibre hydrostatique & Gaz parfait :

$$\frac{1}{P}\frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{g}{RT}$$

- Plus l'altitude est élevée, plus le poids de la colonne d'air qui le surmonte est faible ⇒ plus la pression est faible.

- On néglige les variations verticales de g (*ici et dans la suite du cours*).
- Atmosphère supposée isotherme : $\mathrm{T} = T_0$
- Pression P_0 à $\mathrm{z} = 0$

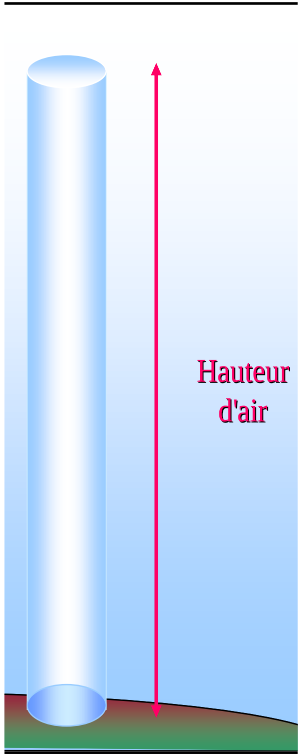
$$P(z) = P_0 \cdot \exp(-\frac{zg}{RT_0})$$

- L'échelle d'altitude $\mathrm{H} = RT_0/g$ représente la hauteur où la pression est divisée par un facteur $\mathrm{e} \approx 2.7$.

- Pour l'atmosphère, $T_0 = 250K$ et $R = 287{,}06\,\mathrm{J/(kg \cdot K)}$ est une bonne approximation, soit $\mathrm{H} \approx 7.3km$.

$$Masse\ au\ dessus\ de\ z_0 \Big/ Masse\ de\ la\ colonne\ d'air = \int_{z_0}^{\infty} \rho(z)dz \Big/ \int_0^{\infty} \rho(z)dz = P(z_0) \big/ P_0$$

63% de l'atmosphère est contenu dans les premiers $1 \cdot \mathrm{H} \approx 7.3\mathrm{km}$
87% de l'atmosphère est contenu dans les premiers $2 \cdot \mathrm{H} \approx 14{,}6\mathrm{km}$
95% de l'atmosphère est contenu dans les premiers $3 \cdot \mathrm{H} \approx 22{,}0\mathrm{km}$

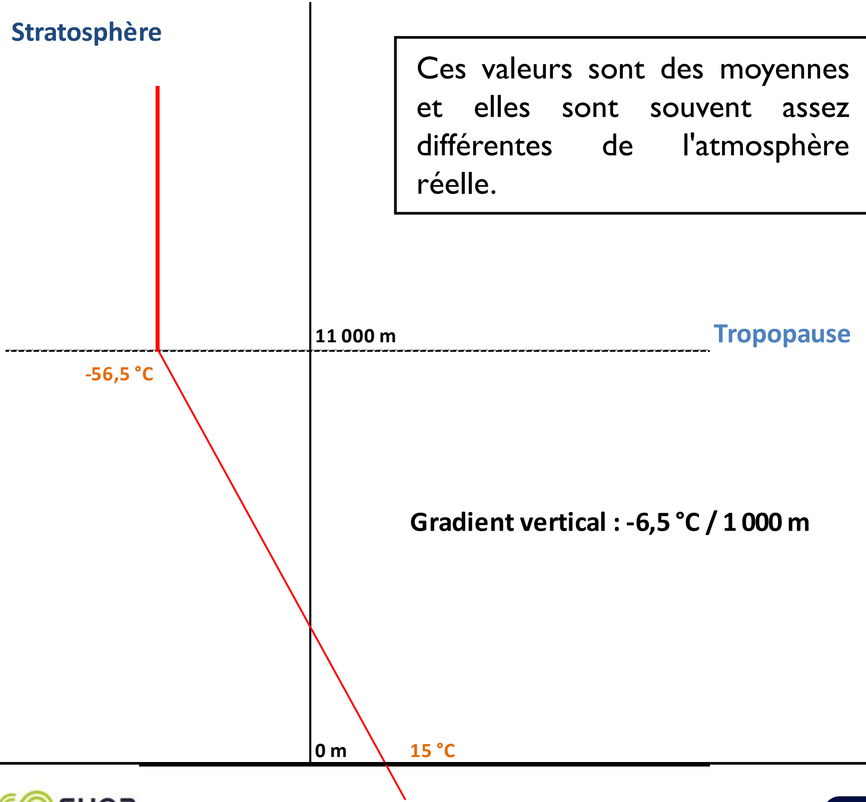


L'atmosphère standard

On définit une **atmosphère « standard »** dont les caractéristiques sont les suivantes :

- Air « sec »
- T(z) linéaire dans la troposphère
  - Température à 0 m : 15°C
  - Tropopause à 11 000 m à –56,5°C
  - Gradient vertical: -6,5°C / 1 000 m
  - Isothermie au-delà de la tropopause
- Gaz parfait
- Atmosphère hydrostatique
- Atmosphère stable
- Accélération de la pesanteur constante

Ces valeurs sont des moyennes et elles sont souvent assez différentes de l'atmosphère réelle.



TD

- ❑ Définir les caractéristiques d'une atmosphère « standard ».

- ❑ Vérifier que pour une atmosphère « standard » la pression diminue approximativement de moitié tous les 5km.

- ❑ Vérifier que la pression diminue d'1hPa tous les 8.5m dans les basses couches de l'atmosphère.

- Vérifier que pour une atmosphère « standard » la pression diminue approximativement de moitié tous les 5km.

- Equilibre hydrostatique & Gaz parfait : $\frac{1}{P}\frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{g}{RT}$

- Dans la troposphère, pour une atmosphère « standard », le profil de température s'écrit :

$$T = T_0 + z * \partial_z T$$

Avec $T_0 = 288.15K$ et $\partial_z T{=}6.5 \cdot 10^{-3}\ {}^{\circ}\mathrm{C}/m$

$$ln(P(z)/P_0) = -\,g/RT_0 \int_0^z \frac{da}{1+a*\partial_z T/T_0} = -\,g/R_d\partial_z T\; ln(1 + z * \partial_z T/T_0)$$

- L'altitude z_0 où la pression diminue de moitié vérifie :

$$ln(2) = g/R\partial_z T\; ln(1 + z_0 * \partial_z T/T_0)$$

$$z_0 = T_0/\partial_z T \left(2^{R\partial_z T/g} - 1\right) \sim 5.47\ km$$

- Pour une atmosphère isotherme $\langle T\rangle_{h=11km} = T_0 + \partial_z T \cdot h/2 = 252{,}4K$, l'altitude z_0 où la pression diminue de moitié vérifie :

$$ln(P(z)/P_0) = -\,gz/R\langle T\rangle_{h=11km}$$

- L'altitude z_0 où la pression diminue de moitié vérifie :

$$z_0 = \frac{R\langle T\rangle_{h=11km}}{g}\ln(2) \sim 5.12\ km$$

- Vérifier que la pression diminue d'1hPa tous les 8.5m dans les basses couches de l'atmosphère.

- Dans les basses couches de l'atmosphère, on peut faire l'hypothèse d'une densité constante $\rho = \rho_0$

- L'équilibre hydrostatique $\partial_z p = -\rho_0 g$ implique qu'une différence de pression ΔP équivaut à une différence d'altitude Δz :

$$\Delta z = - \Delta P / \rho_0 g$$

- La pression atmosphérique au niveau de la mer vaut Patm = 101325 Pa.

- Pour une température de $T_0 = 15°C$, on obtient :

$$\Delta z = - RT_0 \Delta P / P_{atm} g \sim 8.3m$$

- La densité de l'air au sol égale :

$$\rho_{air}(sol) = P_{atm} / RT_0 \sim 1.23\ kg/m^3$$

Equation thermodynamique

- 1er principe de la thermodynamique sur un volume d'air (gaz parfait) d'1kg:

$$\begin{aligned}\delta Q &= dU - \delta W \\ &= c_v dT + p d\alpha\end{aligned}$$

dU : Echange de chaleur
δQ : Variation d'énergie interne
δW : Travail des forces de pression
c_v / c_p : Chaleur massique spécifique à volume / pression constant. $c_p = 1004 J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$
$\alpha = {}^{1}/_{\rho}$: volume spécifique de l'air

Equation thermodynamique

- 1[er] principe de la thermodynamique sur un volume d'air (gaz parfait) d'1kg:

$$\begin{aligned}\delta Q &= dU - \delta W \\ &= c_v dT + p d\alpha \\ &= c_p dT - \alpha dp\end{aligned}$$

- Relation de Mayer : $\mathrm{R} = c_p - c_v$

- Loi des gaz parfait : $P\alpha = RT$

δQ : Echange de chaleur

δQ : Variation d'énergie interne

δW : Travail des forces de pression

c_v / c_p : Chaleur massique spécifique à volume / pression constant.

$$c_p = 1004 J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$$

$\alpha = {}^{1}/_{\rho}$: volume spécifique de l'air

Equation thermodynamique

- 1^{er} principe de la thermodynamique sur un volume d'air (gaz parfait) d'1kg:

$$\delta Q = dU - \delta W$$
$$= c_v dT + p d\alpha$$
$$= c_p dT - \alpha dp$$

- Relation de Mayer : $\mathrm{R} = c_p - c_v$
- Loi des gaz parfait : $P\alpha = RT$

δQ : Echange de chaleur

δQ : Variation d'énergie interne

δW : Travail des forces de pression

c_v / c_p : Chaleur massique spécifique à volume / pression constant.
$c_p = 1004 J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$

$\alpha = {}^{1}/_{\rho}$: volume spécifique de l'air

- Le mouvement est adiabatique ($\delta Q = 0$) si aucun échange de chaleur n'a lieu avec l'extérieur.

$$\delta Q = 0 \Rightarrow \frac{dT}{T} = \frac{\mathrm{R}}{c_p} \cdot \frac{dP}{P} \Rightarrow \theta = T(P_o) = T(P)\left(\frac{P_o}{P}\right)^{\frac{\mathrm{R}}{c_p}}$$

- La quantité $\theta = T(P_o/P)^{R/c_p}$ est appelée **température potentielle**. C'est la température qu'aurait le volume d'air une fois ramenée à la pression P_o de référence.

Adiabatique ≠ Isotherme

- **Équilibre adiabatique & hydrostatique : refroidissement adiabatique**

Une parcelle d'air qui s'élève voit sa température diminuer proportionnellement à P^{R/c_p}: $T(P) = T(P_o)\left(\frac{P}{P_o}\right)^{\frac{R}{c_p}}$

$$\begin{cases} \dfrac{dT}{T} = \dfrac{R}{c_p} \cdot \dfrac{dP}{P} \\ \dfrac{1}{P}\dfrac{\partial P}{\partial z} = -\dfrac{g}{RT} \end{cases} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{g}{c_p} \approx -10°/_{1000m} < -6.5°/_{1000m} = \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{Std}$$

- **Importance de l'eau :**

La vapeur d'eau joue un rôle important dans les problèmes de stabilité verticale de l'atmosphère.
La quantité de vapeur d'eau va limiter le gradient vertical de température.

  - L'eau est le seul constituant faisant varier la masse molaire de l'atmosphère dans la troposphère de façon significative.

  - L'effet le plus important est le dégagement de chaleur latente lors de la condensation de la vapeur d'eau. Par exemple, dans une ascendance d'air saturé, l'air se refroidit limitant considérablement sa capacité à contenir de la vapeur d'eau (via la relation de Clausius-Clapeyron). La vapeur d'eau condense et réchauffe ainsi la particule d'air.

Adiabatique ≠ Isotherme

- **Équilibre adiabatique & hydrostatique : refroidissement adiabatique**

Une parcelle d'air qui s'élève voit sa température diminuer proportionnellement à P^{R/c_p}: $T(P) = T(P_o)\left(\frac{P}{P_o}\right)^{\frac{\mathrm{R}}{c_p}}$

$$\begin{cases} \dfrac{dT}{T} = \dfrac{\mathrm{R}}{c_p} \cdot \dfrac{dP}{P} \\ \dfrac{1}{P}\dfrac{\partial P}{\partial z} = -\dfrac{g}{RT} \end{cases} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{g}{c_p} \approx -10°/_{1000m} < -6.5°/_{1000m} = \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{Std}$$

- **Stabilité de l'atmosphère :**

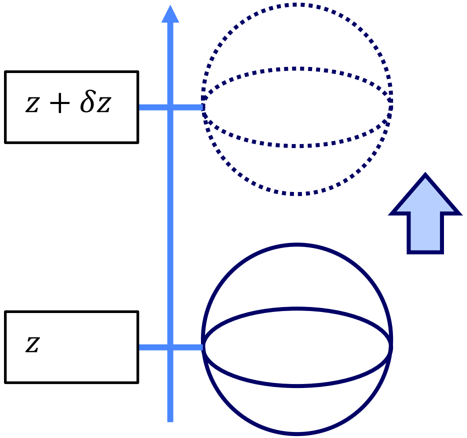
Une parcelle d'air qui s'élève dans l'atmosphère voit sa température diminuer proportionnellement à P^{R/c_p}, on parle de refroidissement adiabatique.

- Si une parcelle d'air en s'élevant devient *plus froide*, et donc *plus dense*, que l'air qui l'entoure, elle retournera vers sa position de départ.

- Si une parcelle d'air en s'élevant devient *plus chaude*, et donc *plus légère*, que l'air qui l'entoure, la résultante des forces de pression sera plus forte que le poids de la parcelle. La parcelle sera entrainée vers le haut, s'éloignant de sa position de départ.

Cette dernière situation, *instable*, se produit si la température décroît plus vite que le refroidissement adiabatique. Dit autrement, l'atmosphère est instable quand le gradient vertical de température potentielle est négatif.

Gradient adiabatique et stabilité



Équilibre adiabatique & hydrostatique : refroidissement adiabatique

Une parcelle d'air qui s'élève voit sa température diminuer proportionnellement à P^{R/c_p}.

$$\begin{cases} \dfrac{dT}{T} = \dfrac{\mathrm{R}}{c_p} \cdot \dfrac{dP}{P} \\ \dfrac{1}{P}\dfrac{\partial P}{\partial z} = -\dfrac{g}{RT} \end{cases} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{g}{c_p} \approx -10°/_{1000m} < -6.5°/_{1000m} = \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{Std}$$

Stabilité d'une parcelle d'air initialement à l'équilibre :

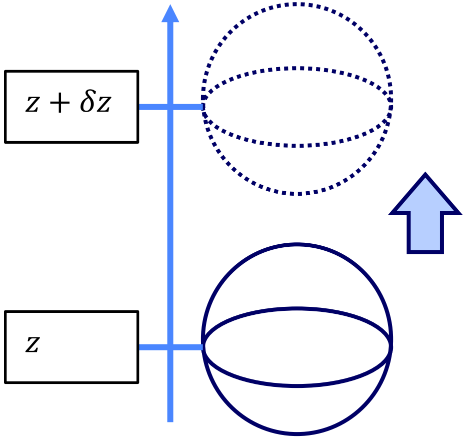
Hypothèse forte

- Elévation à iso-densité de la particule : $\rho(z+\delta z) = \rho(z) = \bar{\rho}(z)$
- On suppose que la pression s'ajuste « instantanément » celle de l'environnement.

$$P(z+\delta z) = \bar{P}(z+\delta z)$$

- Parcelle :
  - Densité : ρ
  - Pression : P
- Environnement :
  - Densité : $\bar{\rho}$
  - Pression : $\bar{P}$

Gradient adiabatique et stabilité



Équilibre adiabatique & hydrostatique : refroidissement adiabatique

Une parcelle d'air qui s'élève voit sa température diminuer proportionnellement à P^{R/c_p}.

$$\begin{cases} \dfrac{dT}{T} = \dfrac{\mathrm{R}}{c_p} \cdot \dfrac{dP}{P} \\ \dfrac{1}{P}\dfrac{\partial P}{\partial z} = -\dfrac{g}{RT} \end{cases} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{g}{c_p} \approx -\,{}^{10°}\!/_{1000m} < -\,{}^{6.5°}\!/_{1000m} = \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{Std}$$

Stabilité d'une parcelle d'air initialement à l'équilibre :

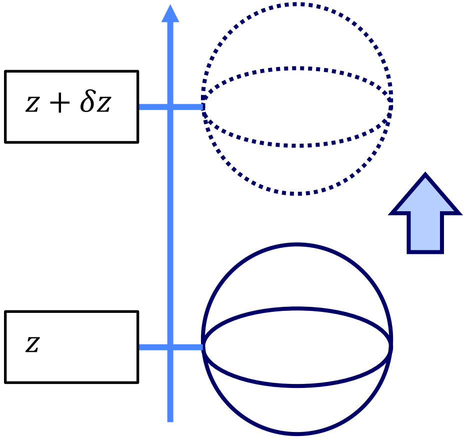
Hypothèse forte

- Elévation à iso-densité de la particule : $\rho(z+\delta z) = \rho(z) = \bar{\rho}(z)$
- On suppose que la pression s'ajuste « instantanément » celle de l'environnement.
  $P(z+\delta z) = \bar{P}(z+\delta z)$
- Equilibre hydrostatique : $\partial_z \bar{P}(z+\delta z) = -\bar{\rho}(z+\delta z)g$

Parcelle :
- Densité : ρ
- Pression : P

Environnement :
- Densité : $\bar{\rho}$
- Pression : $\bar{P}$

Gradient adiabatique et stabilité



Équilibre adiabatique & hydrostatique : refroidissement adiabatique

Une parcelle d'air qui s'élève voit sa température diminuer proportionnellement à P^{R/c_p}.

$$\begin{cases} \dfrac{dT}{T} = \dfrac{\mathrm{R}}{c_p} \cdot \dfrac{dP}{P} \\ \dfrac{1}{P}\dfrac{\partial P}{\partial z} = -\dfrac{g}{RT} \end{cases} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{g}{c_p} \approx -10° /_{1000m} < -6.5° /_{1000m} = \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{Std}$$

Stabilité d'une parcelle d'air initialement à l'équilibre :

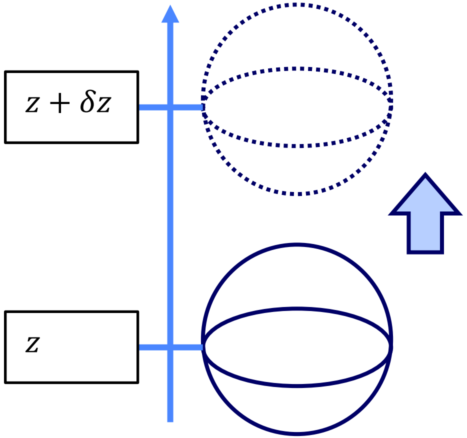
Hypothèse forte

- Elévation à iso-densité de la particule : $\rho(z+\delta z) = \rho(z) = \bar{\rho}(z)$
- On suppose que la pression s'ajuste « instantanément » celle de l'environnement.
  $P(z+\delta z) = \bar{P}(z+\delta z)$
- Equilibre hydrostatique : $\partial_z \bar{P}(z+\delta z) = -\bar{\rho}(z+\delta z)g$
- Résultante des forces de pression :

$$F(z+\delta z) = -\rho(z+\delta z)g - \partial_z P(z+\delta z)$$
$$= -g\big(\rho(z+\delta z) - \bar{\rho}(z+\delta z)\big) = g \cdot \delta z \cdot \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial z}$$

- Parcelle :
  - Densité : ρ
  - Pression : P
- Environnement :
  - Densité : $\bar{\rho}$
  - Pression : $\bar{P}$

Gradient adiabatique et stabilité



- **Équilibre adiabatique & hydrostatique : refroidissement adiabatique**

Une parcelle d'air qui s'élève voit sa température diminuer proportionnellement à P^{R/c_p}.

$$\begin{cases} \dfrac{dT}{T} = \dfrac{\mathrm{R}}{c_p} \cdot \dfrac{dP}{P} \\ \dfrac{1}{P}\dfrac{\partial P}{\partial z} = -\dfrac{g}{RT} \end{cases} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{g}{c_p} \approx -\,{}^{10°}\!/_{1000m} < -\,{}^{6.5°}\!/_{1000m} = \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{Std}$$

- **Stabilité d'une parcelle d'air initialement à l'équilibre :**

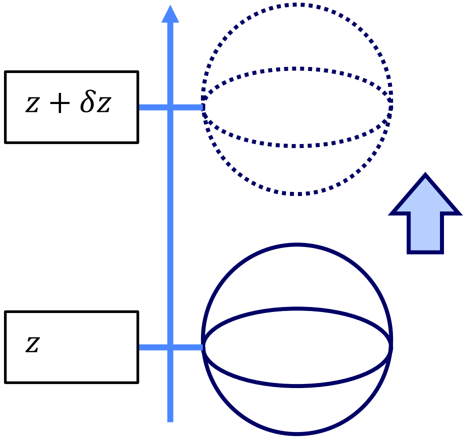
Hypothèse forte

- Parcelle :
  Densité : ρ
  Pression : P
- Environnement :
  Densité : $\bar{\rho}$
  Pression : $\bar{P}$

  - Elévation à iso-densité de la particule : $\rho(z+\delta z) = \rho(z) = \bar{\rho}(z)$
  - On suppose que la pression s'ajuste « instantanément » celle de l'environnement.
    $$P(z+\delta z) = \bar{P}(z+\delta z)$$
  - Equilibre hydrostatique : $\partial_z \bar{P}(z+\delta z) = -\bar{\rho}(z+\delta z)g$
  - Résultante des forces de pression :
    $$\begin{aligned} F(z+\delta z) &= -\rho(z+\delta z)g - \partial_z P(z+\delta z) \\ &= -g\big(\rho(z+\delta z) - \bar{\rho}(z+\delta z)\big) = g \cdot \delta z \cdot \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial z} \end{aligned}$$
  - 2nd loi de Newton :
    $$\rho(z+\delta z)\frac{\partial^2 \delta z}{\partial^2 t} = F(z+\delta z) \Rightarrow \frac{\partial^2 \delta z}{\partial^2 t} = \frac{g}{\bar{\rho}}\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial z}\delta z = -N^2 \delta z$$

- La quantité $N^2 = -\dfrac{g}{\bar{\rho}}\dfrac{\partial \bar{\rho}}{\partial z}$ est appelée fréquence Brunt-Väisälä.

Gradient adiabatique et stabilité



- **Équilibre adiabatique & hydrostatique : refroidissement adiabatique**

Une parcelle d'air qui s'élève voit sa température diminuer proportionnellement à P^{R/c_p}.

$$\begin{cases} \dfrac{dT}{T} = \dfrac{\mathrm{R}}{c_p} \cdot \dfrac{dP}{P} \\ \dfrac{1}{P}\dfrac{\partial P}{\partial z} = -\dfrac{g}{RT} \end{cases} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{g}{c_p} \approx -{}^{10°}/_{1000m} < -{}^{6.5°}/_{1000m} = \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{Std}$$

Atmosphère stable

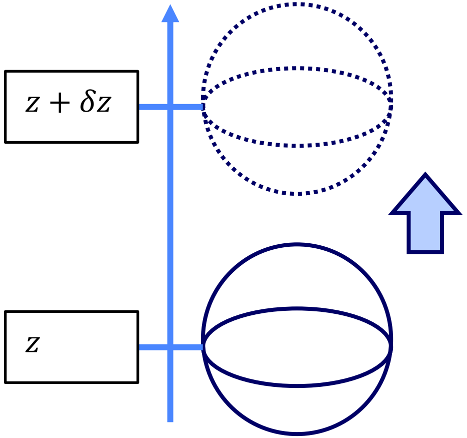
- **Stabilité d'une parcelle d'air initialement à l'équilibre :**

  - Pour une élévation adiabatique, la fréquence de fréquence Brunt-Väisälä devient $N^2 = \frac{g}{\bar{\theta}}\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z}$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial z} &= -\rho g \\ \theta &= T\left(\frac{P_o}{P}\right)^{\frac{R}{c_P}} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{T}{\theta}\frac{\partial \theta}{\partial z} - \frac{g}{c_P}$$

  - Stratification stable : $N^2 > 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} > 0 \Leftrightarrow -{}^{10°}/_{1000m} \approx -\frac{g}{C_P} < \frac{\partial T}{\partial z}$
  - Stratification neutre : $N^2 = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} = 0 \Leftrightarrow -{}^{10°}/_{1000m} \approx -\frac{g}{C_P} \approx \frac{\partial T}{\partial z}$
  - Stratification instable : $N^2 < 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} < 0 \Leftrightarrow -{}^{10°}/_{1000m} \approx -\frac{g}{C_P} > \frac{\partial T}{\partial z}$

Gradient adiabatique et stabilité



- **Équilibre adiabatique & hydrostatique : refroidissement adiabatique**

Une parcelle d'air qui s'élève voit sa température diminuer proportionnellement à P^{R/c_p}.

$$\begin{cases} \frac{dT}{T} = \frac{R}{c_p}\cdot\frac{dP}{P} \\ \frac{1}{P}\frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{g}{RT} \end{cases} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{g}{c_p} \approx -\,{}^{10°}/_{1000m} < -\,{}^{6.5°}/_{1000m} = \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{Std}$$

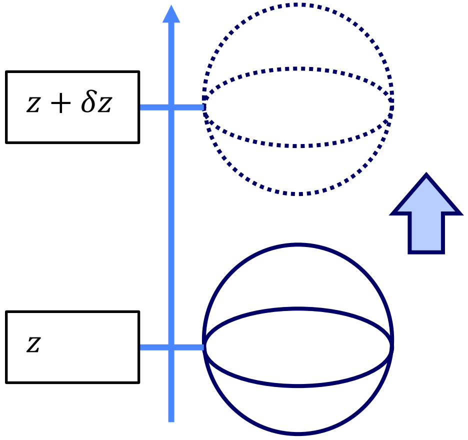
Atmosphère stable

- **Stabilité d'une parcelle d'air initialement à l'équilibre :**
  - Pour une élévation adiabatique, la fréquence de fréquence Brunt-Väisälä devient $N^2 = \frac{g}{\bar\theta}\frac{\partial\bar\theta}{\partial z}$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial z} &= -\rho g \\ \theta &= T\left(\frac{P_o}{P}\right)^{\frac{R}{c_P}} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{T}{\theta}\frac{\partial\theta}{\partial z} - \frac{g}{c_P}$$

  - Stratification stable : $N^2 > 0 \Leftrightarrow \frac{\partial\bar\theta}{\partial z} > 0 \Leftrightarrow -\,{}^{10°}/_{1000m} \approx -\frac{g}{C_P} < \frac{\partial T}{\partial z}$
  - Stratification neutre : $N^2 = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial\bar\theta}{\partial z} = 0 \Leftrightarrow -\,{}^{10°}/_{1000m} \approx -\frac{g}{C_P} \approx \frac{\partial T}{\partial z}$
  - Stratification instable : $N^2 < 0 \Leftrightarrow \frac{\partial\bar\theta}{\partial z} < 0 \Leftrightarrow -\,{}^{10°}/_{1000m} \approx -\frac{g}{C_P} > \frac{\partial T}{\partial z}$

Gradient adiabatique et stabilité



Équilibre adiabatique & hydrostatique : refroidissement adiabatique

Une parcelle d'air qui s'élève voit sa température diminuer proportionnellement à P^{R/c_p}.

$$\begin{cases} \dfrac{dT}{T} = \dfrac{\mathrm{R}}{c_p} \cdot \dfrac{dP}{P} \\ \dfrac{1}{P}\dfrac{\partial P}{\partial z} = -\dfrac{g}{RT} \end{cases} \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{g}{c_p} \approx -{}^{10°}/_{1000m} < -{}^{6.5°}/_{1000m} = \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{Std}$$

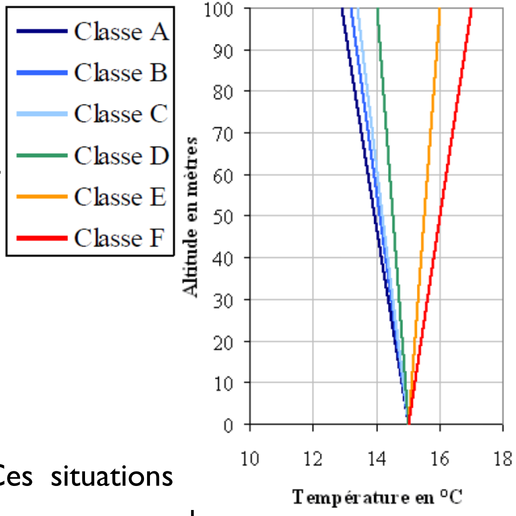
Atmosphère stable

Stabilité d'une parcelle d'air initialement à l'équilibre :

- Pour une élévation adiabatique, la fréquence de fréquence Brunt-Väisälä devient $N^2 = \frac{g}{\bar{\theta}}\frac{\partial\bar{\theta}}{\partial z}$
- Stratification stable : $N^2 > 0 \Leftrightarrow \frac{\partial\bar{\theta}}{\partial z} > 0 \Leftrightarrow -{}^{10°}/_{1000m} \approx -\frac{g}{C_P} < \frac{\partial T}{\partial z}$
- Stratification neutre : $N^2 = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial\bar{\theta}}{\partial z} = 0 \Leftrightarrow -{}^{10°}/_{1000m} \approx -\frac{g}{C_P} \approx \frac{\partial T}{\partial z}$
- Stratification instable : $N^2 < 0 \Leftrightarrow \frac{\partial\bar{\theta}}{\partial z} < 0 \Leftrightarrow -{}^{10°}/_{1000m} \approx -\frac{g}{C_P} > \frac{\partial T}{\partial z}$

Pour une stratification stable $N^2 > 0 \Leftrightarrow -\frac{g}{C_P} < \frac{\partial T}{\partial z}$, une parcelle d'air en s'élevant adiabatiquement devient *plus froide*, et donc *plus dense*, que l'air qui l'entoure. La parcelle d'air rejoint sa position de départ avec une vitesse non nulle. Elle est entrainée vers le bas au-delà de cette position. La particule devient alors moins dense que le milieu environnant et est à nouveau entrainée vers le haut. La parcelle entre en oscillation autour de sa position d'équilibre à fréquence de fréquence Brunt-Väisälä.

Classification de stabilité atmosphérique



La stabilité de l'atmosphère est répertoriée en **6 classes selon Pasquill** :

	A Très instable	**B Instable**	**C Peu instable**	**D Neutre**	**E Stable**	**F Très stable**
Gradient thermique en °C/100m	- 2,1	- 1,8	- 1,6	- 1,0	1,0	2,0

- **Atmosphère instable (classes A, B et C) :** La **dispersion** des polluants est **facilitée**. Ces situations apparaissent par **fort réchauffement du sol**. Elles se retrouvent principalement le jour en absence de vent fort.

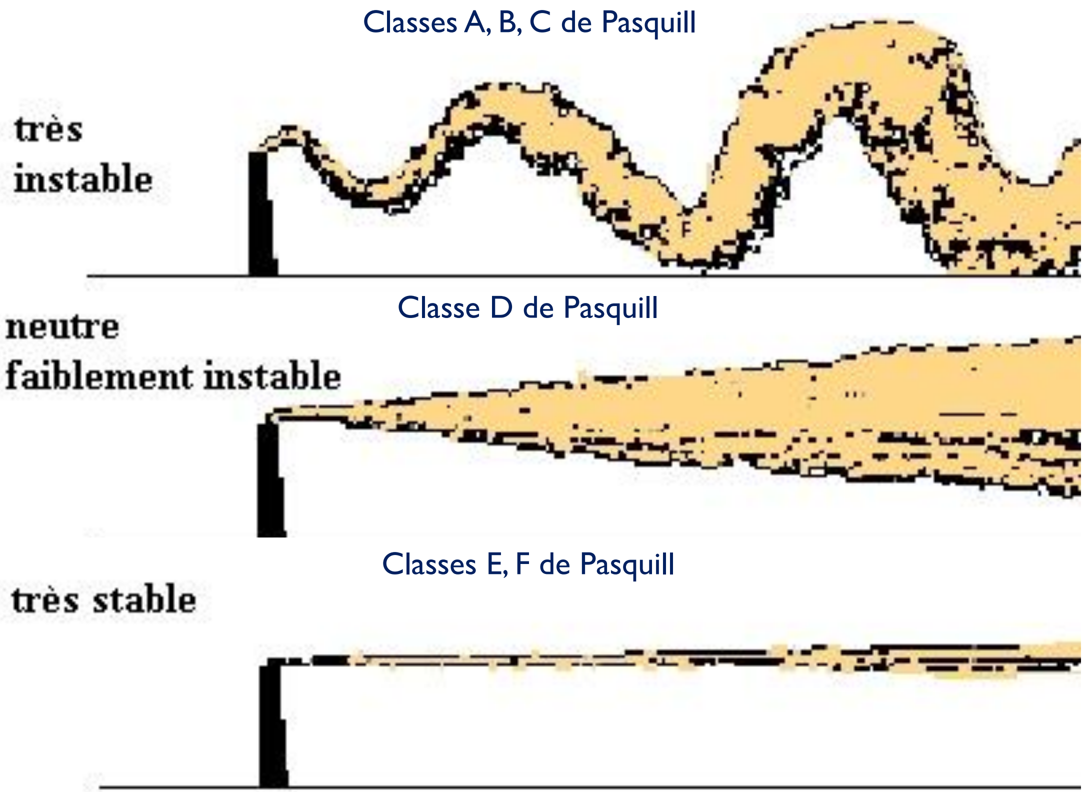
- **Atmosphère neutre (classe D) :** Ces situations permettent la **dispersion des polluants**. Elles correspondent aux situations de vents modérés ou à des situations de ciel couvert. Il s'agit de la **situation la plus fréquente en zone tempérée**.

- **Atmosphère stable (classes E et F) :** De telles situations **freinent la dispersion des masses d'air**. Elles sont induites par des **inversions thermiques** près du sol, ce qui limite la dispersion des polluants. Ces situations se retrouvent principalement la nuit par vent faible.

Les panaches et la stabilité thermique

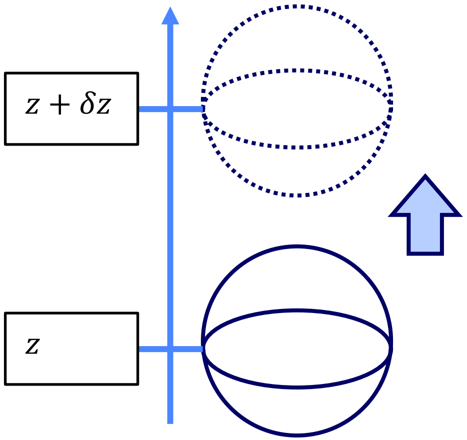
Smoke plume - Borex dispersion experiment

https://envs.au.dk/en/research-areas/air-pollution-emissions-and-effects/the-monitoring-program/air-pollution-models/background-info/borex

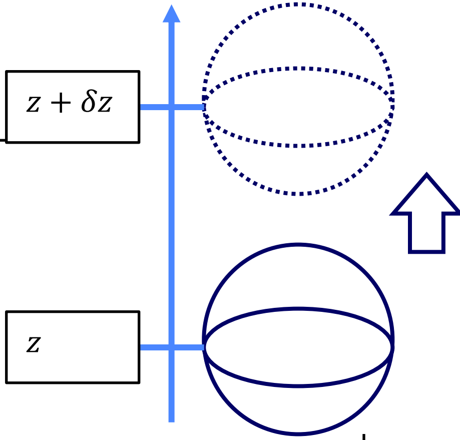


TD

- Etudier la stabilité d'une parcelle d'air pour une élévation adiabatique, sachant que la pression s'équilibre instantanément.



- Etudier la stabilité d’une parcelle d’air pour une élévation adiabatique, sachant que la pression s’équilibre instantanément.



Stabilité d’une parcelle d’air initialement à l’équilibre :

- Elévation adiabatique de la particule : $\theta(z+\delta z) = \theta(z) = \bar{\theta}(z)$
- On suppose que la pression s’ajuste « instantanément » celle de l’environnement.
  $$P(z+\delta z) = \bar{P}(z+\delta z)$$
- Equilibre hydrostatique : $\partial_z \bar{P}(z+\delta z) = -\bar{\rho}(z+\delta z)g$
- Densité du milieu environnant :
  $$\bar{\rho}\,(z+\delta z) = \frac{P_o}{R\bar{\theta}(z+\delta z)}\left(\frac{P(z+\delta z)}{P_o}\right)^{1-\frac{R}{c_P}}$$
- Densité de la parcelle *en conservant* θ :
  $$\rho(z+\delta z) = \frac{P_o}{R\bar{\theta}(z)}\left(\frac{P(z+\delta z)}{P_o}\right)^{1-\frac{R}{c_P}}$$
- Résultante des forces de pression :
  $$\begin{aligned} F(z+\delta z) &= -\rho(z+\delta z)g - \partial_z P(z+\delta z) \\ &= -g\big(\rho(z+\delta z) - \bar{\rho}(z+\delta z)\big) \\ &= g\frac{P_o}{R}\left(\frac{P(z+\delta z)}{P_o}\right)^{1-\frac{R}{c_P}}\left(\frac{1}{\bar{\theta}(z+\delta z)} - \frac{1}{\bar{\theta}(z)}\right) = g\bar{\theta}(z+\delta z)\cdot\bar{\rho}\,(z+\delta z)\left(\frac{1}{\bar{\theta}(z+\delta z)} - \frac{1}{\bar{\theta}(z)}\right) \end{aligned}$$
- 2nd loi de Newton :
  $$\frac{\partial^2 \delta z}{\partial^2 t} = \frac{F(z+\delta z)}{\rho(z+\delta z)} \Rightarrow \frac{\partial^2 \delta z}{\partial^2 t} = -\frac{g}{\bar{\theta}}\frac{\partial\bar{\theta}}{\partial z}\delta z = -N^2\delta z$$

- Parcelle :
  - Densité : ρ
  - Pression : P
- Environnement :
  - Densité : $\bar{\rho}$
  - Pression : $\bar{P}$

- Etudier la stabilité d'une parcelle d'air pour une élévation adiabatique, sachant que la pression s'équilibre instantanément.

$$\boxed{\theta = T\left(\frac{P_0}{P}\right)^{R/C_p}} \longrightarrow T = \theta\left(\frac{P}{P_0}\right)^{R/C_p}$$

$$\boxed{\rho = \frac{P}{RT}} = \frac{P}{R} * \frac{1}{\theta\left(\frac{P}{P_0}\right)^{R/C_p}} = \frac{P_0}{R\theta} * \frac{P}{P_0} * \frac{1}{\left(\frac{P}{P_0}\right)^{R/C_p}}$$

$$\rho = \frac{P_0}{R\theta} * \frac{P}{P_0} * \left(\frac{P}{P_0}\right)^{-R/C_p} \boxed{= \frac{P_0}{R\theta} * \left(\frac{P}{P_0}\right)^{1-R/C_p}}$$

Modélisation numérique de
la dispersion des polluants dans l'atmosphère

POURQUOI MODÉLISER ?

TRANSPORT DE MATIÈRE DANS L'ATMOSPHERE

DYNAMIQUE DE L'ATMOSPHÈRE

- **Equation d'état**
- **Approximation hydrostatique**
- **Equation thermodynamique**
- **Stabilité de l'atmosphère**

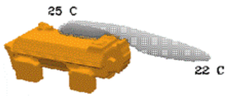
LES DIFFÉRENTS MODÈLES

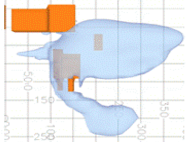
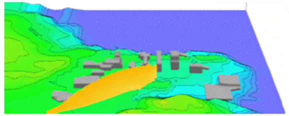
- **Modèle Lagrangien**
- **Modèle Eulérien**
- **Modèle Gaussien**

Les échelles spatio-temporelles (1/2)

ESPACE	Rejets continus	Rejets instantanés	TEMPS
> 1 000 km	• Pollution transfrontière Ex: éruption volcanique (Eyjafjöll)	• Accident "international" majeur Ex: Tchernobyl, Feux en Californie	10 jours
100 – 1 000 km	• Région industrielle étendue • Réseau régional ou national de surveillance	• Accident "national" majeur Ex: incendie Lubrizol (Rouen)	1 – 2 jours
Prépondérance des phénomènes locaux			
10 – 100 km	• Impact de complexes industriels et de hautes cheminées • Concentrations moyennes et exceptionnelles, Dépôts	• Accident régional • Anticipation Ex: incendie Lubrizol, Notre Dame	Qqs heures
1 – 10 km	• Impact de petites et moyennes cheminées • Concentrations moyennes et exceptionnelles, Dépôts	• Accident chimique • Zones à risques	1 heure
< 1 km	• Rejets "intra-muros" • Doses aux travailleurs	• Accident chimique • Étude de dimensionnement	Qqs minutes

Les échelles spatio-temporelles (2/2)



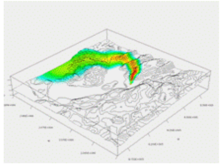
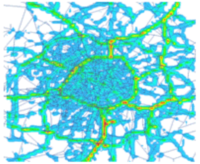
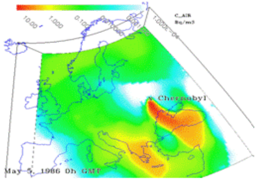
10 m | 100 m | 1 km

Seconde | 10 secondes | Minute

ECHELLE LOCALE

<u>Echelles caractéristiques</u>

- Longueur : L=1km
- Vent : U=10m/s
- Temps caractéristique d'advection des structures de grande échelle :
  L/U=100s

10 km | 100 km | 1000 km

10 minutes | Heures | Jours

ECHELLE REGIONALE

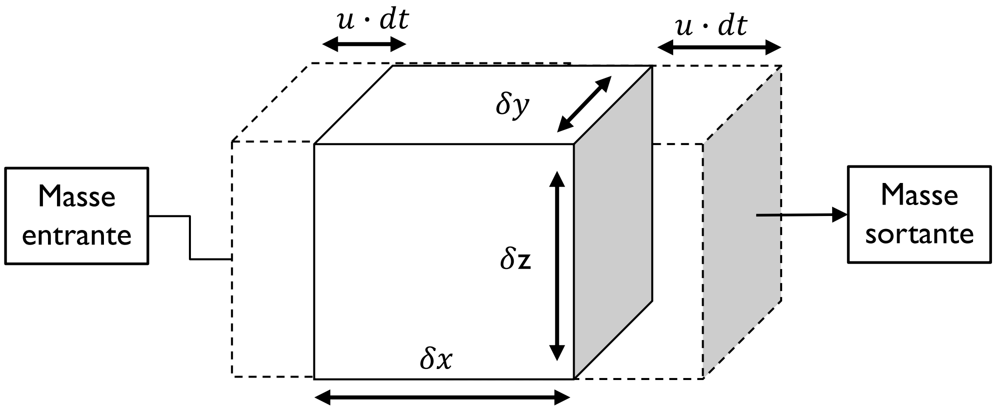
Point de vue Eulérien et Lagrangien

On distingue 2 grandes façons de suivre l'évolution d'un panache, et de repérer la position de parcelles. Les points de vue **Eulérien** et **Lagrangien** correspondent à différentes familles d'instruments de mesure : stations d'observation, capteurs fixes ou satellites dans le premier cas, bouées dérivantes ou particules marquées dans le second.

- **Eulérien :**

  Le point de vue Eulérien considère l'évolution en un point fixé, c'est-à-dire à (x, y, z) constants. On lui associe également les notions de contour, surface ou volume géométrique : la position des points composant le contour (par exemple) est constante dans le temps, et il y a en général un écoulement à travers (sauf dans le cas d'une paroi fixe).

  L'évolution temporelle en point de vue Eulérien est une évolution locale, qui s'exprime donc à l'aide de la dérivée partielle à (x, y, z) fixés $(\partial/\partial t)$. Les lois de conservation prennent la forme d'un bilan en entrée-sortie d'un volume géométrique.

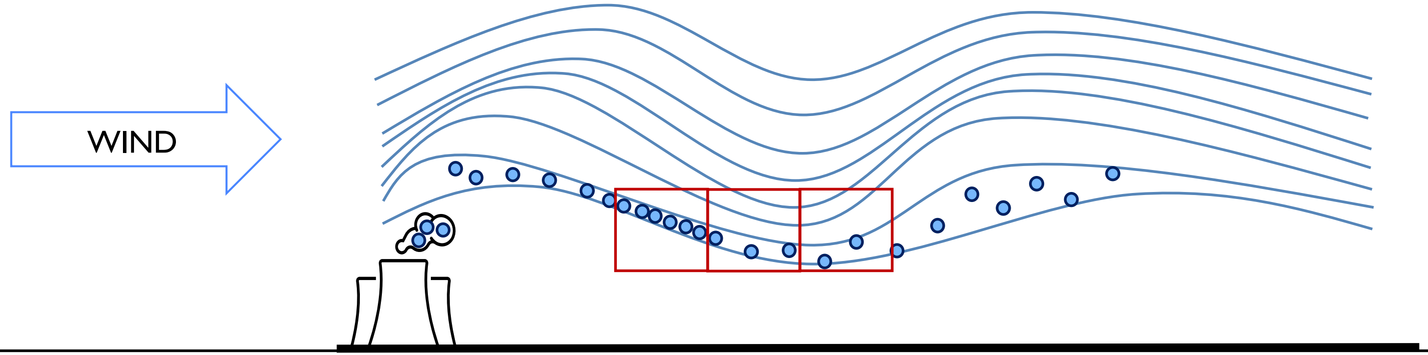


Point de vue Eulérien et Lagrangien

On distingue 2 grandes façons de suivre l'évolution d'un panache, et de repérer la position de parcelles. Les points de vue **Eulérien** et **Lagrangien** correspondent à différentes familles d'instruments de mesure : stations d'observation, capteurs fixes ou satellites dans le premier cas, bouées dérivantes ou particules marquées dans le second.

- **Lagrangien :**

  Le point de vue Lagrangien suit une parcelle de fluide dans son déplacement. La position n'est donc pas fixe dans le temps, mais chaque parcelle parcourt sa trajectoire. Un contour, surface ou volume matériel regroupe le même ensemble de molécules de fluide au cours du temps. Il n'y a pas de flux de masse à travers un contour matériel, puisque le contour se déplace lui-même à la vitesse de l'écoulement. Les lois de conservation s'écrivent en considérant un volume matériel.

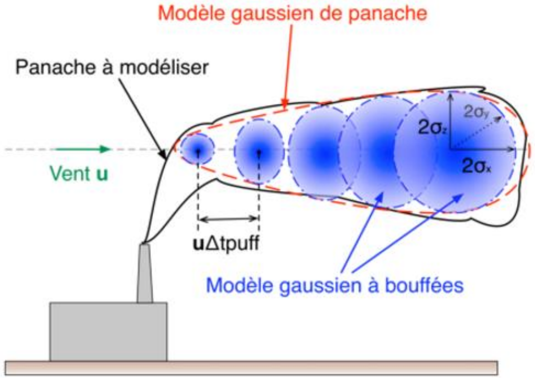


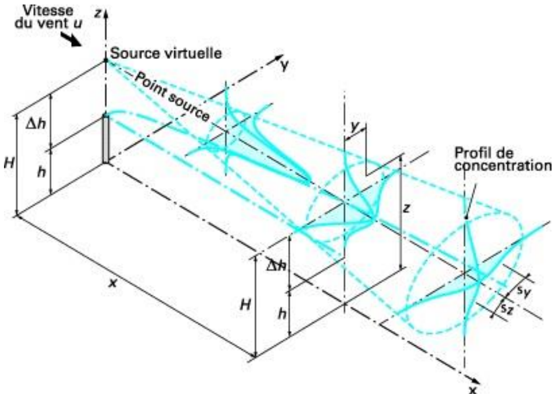
Modèles gaussiens

Les modèles gaussiens permettent de simuler la dispersion atmosphérique de polluants non-réactifs à proximité de la source.

- **Hypothèse d'une distribution gaussienne autour du centre du panache**
- **Stationnaire :** les conditions des variables d'entrée (émission, météorologie) sont constantes dans le temps (rejet continu) et dans l'espace (pour la météorologie).
- **Conservation de la masse :** l'intégrale de la concentration sur un plan transversal du panache multipliée par la vitesse du vent doit être égale au taux d'émission de la source.

- On distingue :
  - les modèles de panache stationnaires
  - les modèles de bouffées non-stationnaires (modèle lagrangien de dispersion)





Modélisation numérique de la dispersion des polluants dans l'atmosphère

POURQUOI MODÉLISER ?

TRANSPORT DE MATIÈRE DANS L'ATMOSPHERE

DYNAMIQUE DE L'ATMOSPHÈRE

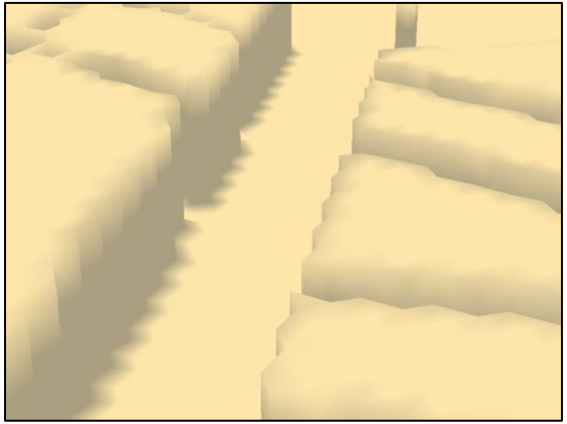
- **Equation d'état**
- **Approximation hydrostatique**
- **Equation thermodynamique**
- **Stabilité de l'atmosphère**

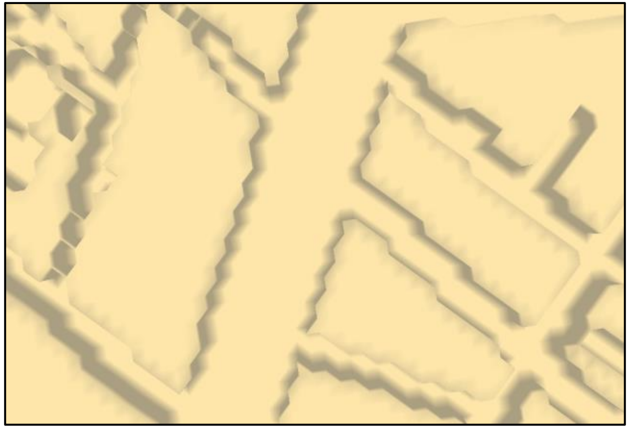
LES DIFFÉRENTS MODÈLES

- **Modèle Lagrangien**
- **Modèle Eulérien**
- **Modèle Gaussien**

Modèle tridimensionnel lagrangien à particules

- Un modèle lagrangien de dispersion calcule les trajectoires des panaches de polluants à partir des champs de vent.
- La dispersion est effectuée par l'intermédiaire de particules émises à chaque pas de temps. Une partie du déplacement est aléatoire.
  - Possibilité de calcul des concentrations, des dépôts sec et humides.
  - Prise en compte de pertes de masses dues aux dépôts sec et humide
- Les cisaillements du vent sont très bien pris en compte par ce type de modèle, et il n'y a pas de limitations pour les petites échelles.
- Les temps de calculs dépendent linéairement du nombre de particules suivies et du vent dans le domaine.





Modèle tridimensionnel lagrangien à particules

Principe :

1) **Discrétisation du panache en particules virtuelles où chacune transporte une fraction de la masse émise**

2) Advection des particules grâce au champ de vent moyen

3) Diffusion turbulente « stochastique » à partir du temps lagrangien et des écarts-types de vitesse

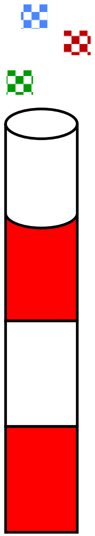
4) Projection de la masse des particules lagrangiennes sur le maillage eulérien pour obtenir la concentration

$$\overline{X_0}(t+dt) = X_0(t) + \overline{U}(X_0(t), t)dt + U'(X_0(t), t)dt$$

$$\overline{X_1}(t+dt) = X_1(t) + \overline{U}(X_1(t), t)dt + U'(X_1(t), t)dt$$

$$\overline{X_2}(t+dt) = X_2(t) + \overline{U}(X_2(t), t)dt + U'(X_2(t), t)dt$$

Position initiale



Modèle tridimensionnel lagrangien à particules

Principe :

1) **Discrétisation du panache en particules virtuelles où chacune transporte une fraction de la masse émise**
2) **Advection des particules grâce au champ de vent moyen**
3) Diffusion turbulente « stochastique » à partir du temps lagrangien et des écarts-types de vitesse
4) Projection de la masse des particules lagrangiennes sur le maillage eulérien pour obtenir la concentration

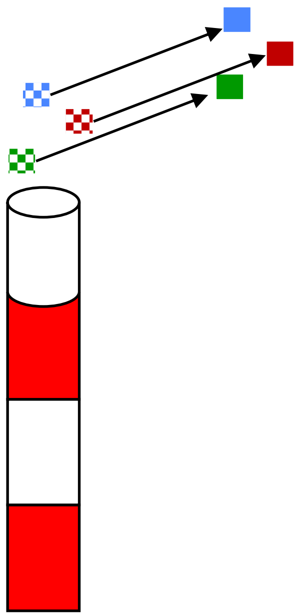
$$\overline{X_0}(t+dt) = X_0(t) + \overline{U}(X_0(t),t)dt + U'(X_0(t),t)dt$$

$$\overline{X_1}(t+dt) = X_1(t) + \overline{U}(X_1(t),t)dt + U'(X_1(t),t)dt$$

$$\overline{X_2}(t+dt) = X_2(t) + \overline{U}(X_2(t),t)dt + U'(X_2(t),t)dt$$

Position initiale

Composante locale du vent moyen



Modèle tridimensionnel lagrangien à particules

Principe :

1) **Discrétisation du panache en particules virtuelles où chacune transporte une fraction de la masse émise**
2) **Advection des particules grâce au champ de vent moyen**
3) **Diffusion turbulente « stochastique » à partir du temps lagrangien et des écarts-types de vitesse**
4) Projection de la masse des particules lagrangiennes sur le maillage eulérien pour obtenir la concentration

$$\overline{X_0}(t+dt) = X_0(t) + \overline{U}(X_0(t),t)dt + U'(X_0(t),t)dt$$

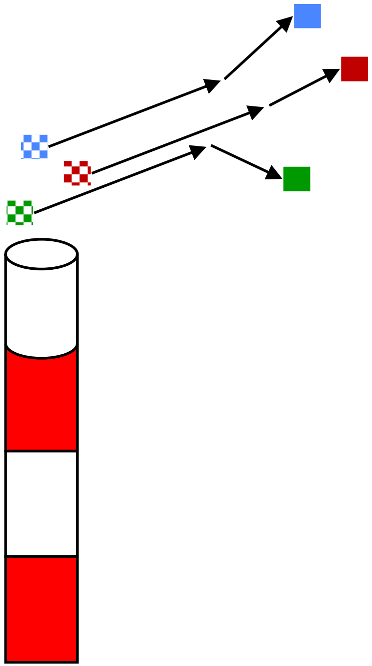
$$\overline{X_1}(t+dt) = X_1(t) + \overline{U}(X_1(t),t)dt + U'(X_1(t),t)dt$$

$$\overline{X_2}(t+dt) = X_2(t) + \overline{U}(X_2(t),t)dt + U'(X_2(t),t)dt$$

Position initiale

Composante locale du vent moyen

Composante locale turbulente



Modèle tridimensionnel lagrangien à particules

Principe :

1) **Discrétisation du panache en particules virtuelles où chacune transporte une fraction de la masse émise**
2) **Advection des particules grâce au champ de vent moyen**
3) **Diffusion turbulente « stochastique » à partir du temps lagrangien et des écarts-types de vitesse**
4) **Projection de la masse des particules lagrangiennes sur le maillage eulérien pour obtenir la concentration**

$$\overline{X_0}(t+dt) = X_0(t) + \overline{U}(X_0(t),t)dt + U'(X_0(t),t)dt$$

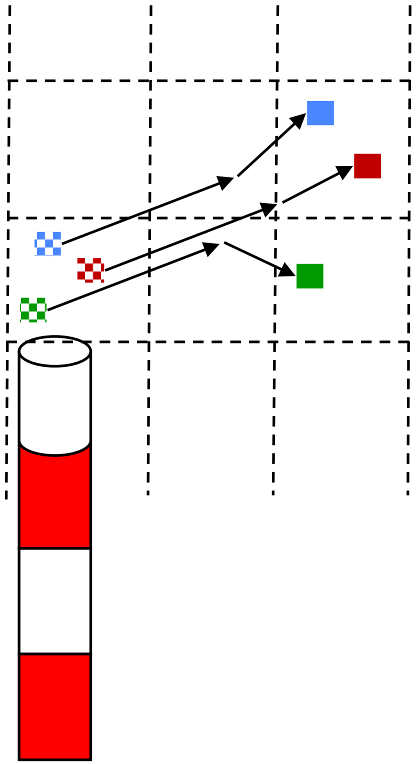
$$\overline{X_1}(t+dt) = X_1(t) + \overline{U}(X_1(t),t)dt + U'(X_1(t),t)dt$$

$$\overline{X_2}(t+dt) = X_2(t) + \overline{U}(X_2(t),t)dt + U'(X_2(t),t)dt$$

Position initiale

Composante locale du vent moyen

Composante locale turbulente



Modèle tridimensionnel lagrangien à particules

- **Equation de transport :**

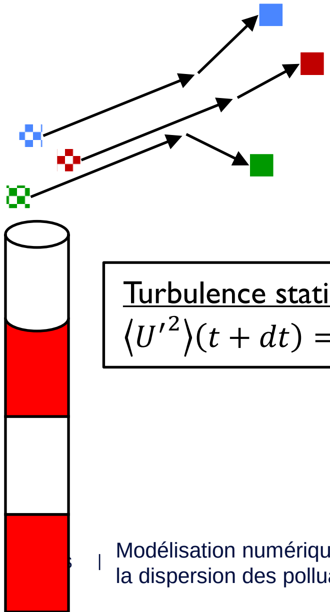
$$\overline{X_0}(t+dt) = X_0(t) + \overline{U}(X_0(t),t)dt + U'(X_0(t),t)dt$$

Position initiale

Composante locale du vent moyen

Composante locale turbulente

- **Diffusion stochastique :**



$$U'(t+dt) = rU'(t) + \mu\sigma\sqrt{1-r^2}$$

$$r = e^{-dt/T_L}$$

$\sigma^2 = \langle U'^2 \rangle$: écart-type des vitesses

μ est une variable aléatoire choisie suivant une loi normale centrée réduite

T_L est un temps lagrangien, il représente la « mémoire turbulente » des particules.

Turbulence stationnaire et homogène:
$\langle U'^2 \rangle (t+dt) = r^2 \cdot \langle U'^2 \rangle (t) + \langle \mu^2 \rangle \cdot \sigma^2(t) \cdot (1-r^2) = \sigma^2(t)$

Retro-dispersion

- **Equation de transport :**

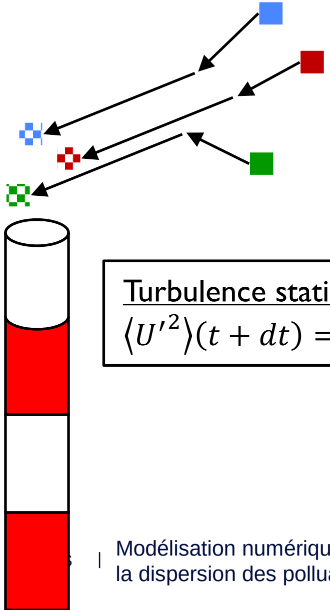
$$\overline{X_0}(t-dt) = X_0(t) - \overline{U}(X_0(t),t)dt - U'(X_0(t),t)dt$$

Position initiale

Composante locale du vent moyen

Composante locale turbulente

- **Diffusion stochastique :**



$$U'(t-dt) = rU'(t) + \mu\sigma\sqrt{1-r^2}$$

$$r = e^{dt/T_L}$$

$\sigma^2 = \langle U'^2 \rangle$: écart-type des vitesses

μ est une variable aléatoire choisie suivant une loi normale centrée réduite

T_L est un temps lagrangien, il représente la « mémoire turbulente » des particules.

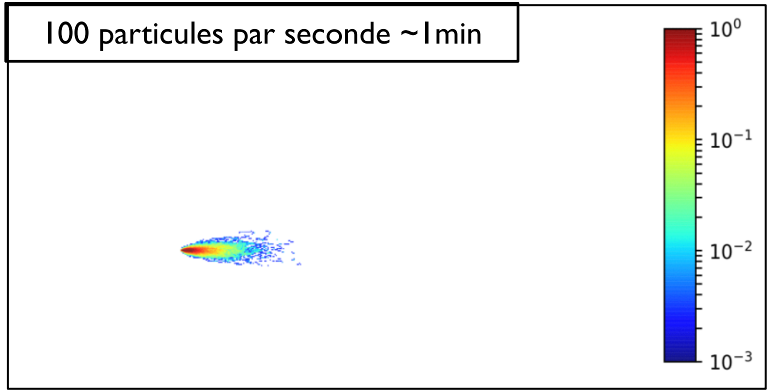
Turbulence stationnaire et homogène:

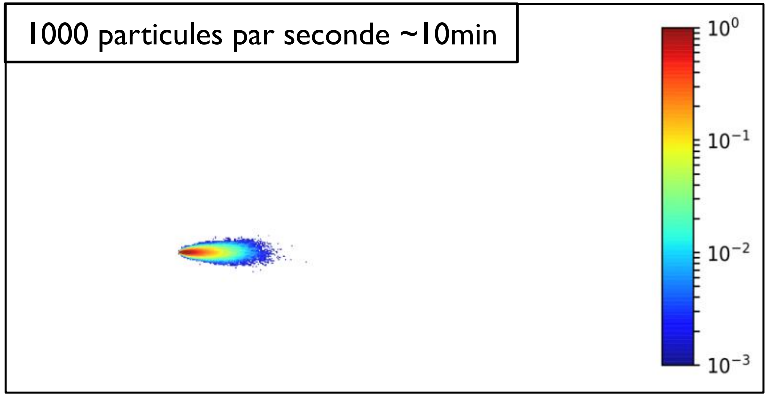
$$\langle U'^2 \rangle(t+dt) = r^2 \cdot \langle U'^2 \rangle(t) + \langle \mu^2 \rangle \cdot \sigma^2(t) \cdot (1-r^2) = \sigma^2(t)$$

Limite : *La retro-dispersion n'est pas en mesure de déterminer si les polluants ont été injectés dans l'atmosphère à une certaine altitude, ni la contribution des autres effets paramétrés.*

Influence du nombre de particules émises

- Augmenter le nombre de particules se traduit par une augmentation des temps de calcul.
- Puisque chaque particule transporte alors une masse plus faible, augmenter le nombre de particules améliore aussi la précision des résultats.





TD

Modèle lagrangien de dispersion:

- Flux de polluant de $Q = 0{,}1\, kg/h$
- Pas de temps d'émission $dt_{min} = 10s$
- Nombre de particules émises à chaque dt_{min} : $N_{par} = 100$
- Grille de projection uniforme $dx = dy = dz = 10m$

- Quelle est la masse transportée par chaque particule ?
- Quelle est le nombre de particules à émettre pour une précision de 1mcg/m3 dans l'estimation des concentrations ?

- Le domaine de calcul fait $1km$ de coté. Le vent dominant est supposée uniforme et égale à $10m/s$. Les particules sont émises à une extrémité du domaine de calcul. Estimer le temps nécessaire à une particule pour sortir du domaine de calcul.
- En supposant un rejet continue de particules, déduire de la question précédente le nombre moyen de particules à déplacer à chaque pas de temps par le modèle lagrangien. Comment varie ce nombre pour un vent de $1m/s$?

- Quelle est la masse transportée par chaque particule ?
- Quelle est le nombre de particules à envoyer pour une précision de $1\mu g/m^3$ dans l'estimation des concentrations ?

Modèle lagrangien de dispersion:

- Flux de polluant de $Q = 0{,}1\, kg/h$
- Pas de temps d'émission $dt_{min} = 10s$
- Nombre de particules émises à chaque dt_{min} : $N_{par} = 100$
- Grille de projection uniforme $dx = dy = dz = 10m$

- Chaque particule transport une quantité $Q \cdot dt_{min}/N_{par} = 10^5/36\, \mu g{\sim}2{,}777 \cdot 10^3 \mu g$

- La présence d'une particule dans une maille du domaine est associée à une concentration $Q \cdot dt_{min}/(N_{par} \cdot dx \cdot dy \cdot dz) = 100/36\, \mu g/m^3 \sim 2{,}777\, \mu g/m^3$

  - Masse minimale m_1 *souhaitée* sur une maille : $m_1 = 1\, \mu g/m^3$
  - Masse minimale m_2 *avec* $N_{par} = 100$ sur une maille : $m_2 = 100/36\, \mu g/m^3$

Le nombre de particule à émettre est donc $N_{par} \cdot m_2/m_1 = 10^4/36 \sim 278$ pour que la présence d'une particule soir associée à une concentration de $1\mu g/m^3$

- Le domaine de calcul fait $L = 1km$ de coté. Le vent dominant est supposée uniforme et égale à $U = 10m/s$. Les particules sont émises à une extrémité du domaine de calcul. Estimer le temps nécessaire à la particule pour sortir du domaine de calcul.
- En supposant un rejet continue de particules, déduire de la question précédente le nombre moyen de particules à déplacer à chaque pas de temps par le modèle lagrangien. Comment varie ce nombre pour un vent faible de $U = 0{,}1m/s$?

Modèle lagrangien de dispersion:

- Flux de polluant de $Q = 0{,}1\,kg/h$
- Pas de temps d'émission $dt_{min} = 10s$
- Nombre de particules émises à chaque Dtmin : $N_{par} = 100$
- Grille de projection uniforme $dx = dy = dz = 10m$

- En négligeant la turbulence, chaque particule est transportée à une vitesse U.
- Une particule met un temps $T = L/U = 10^2 s$ à traverser le domaine de calcul.

- A l'état stationnaire, le nombre moyen de particules dans le domaine de calcul est

$$N_{par} \cdot T/dt_{min} = 10^3$$

- Pour un vent de $U = 0{,}1m/s$, ce nombre augmente à $N_{par} \cdot T/dt_{min} = 10^5$
- Les temps de calcul augmentent dans les même proportions

Modélisation numérique de
la dispersion des polluants dans l'atmosphère

POURQUOI MODÉLISER ?

TRANSPORT DE MATIÈRE DANS L’ATMOSPHERE

DYNAMIQUE DE L’ATMOSPHÈRE

- **Equation d’état**
- **Approximation hydrostatique**
- **Equation thermodynamique**
- **Stabilité de l’atmosphère**

LES DIFFÉRENTS MODÈLES

- **Modèle Lagrangien**
- **Modèle Eulérien**
- **Modèle Gaussien**

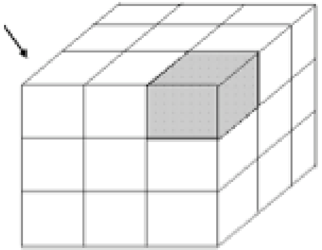
Modèles Eulériens

- Equation de chimie-transport ⇔ Eq. de diffusion atmosphérique ⇔ Eq. de conservation de la masse

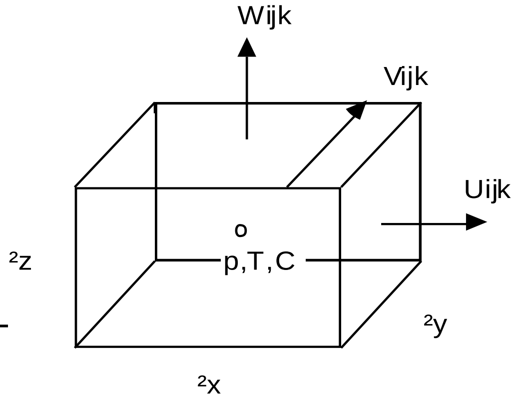
$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (c\vec{\boldsymbol{v}}) = \mathrm{S} + \mathrm{P}$$

- Il n'y a pas de solution analytique sauf dans des cas très simples (modèles gaussiens) non représentatifs de l'atmosphère à des échelles régionales à globales.

Discrétisation 3D



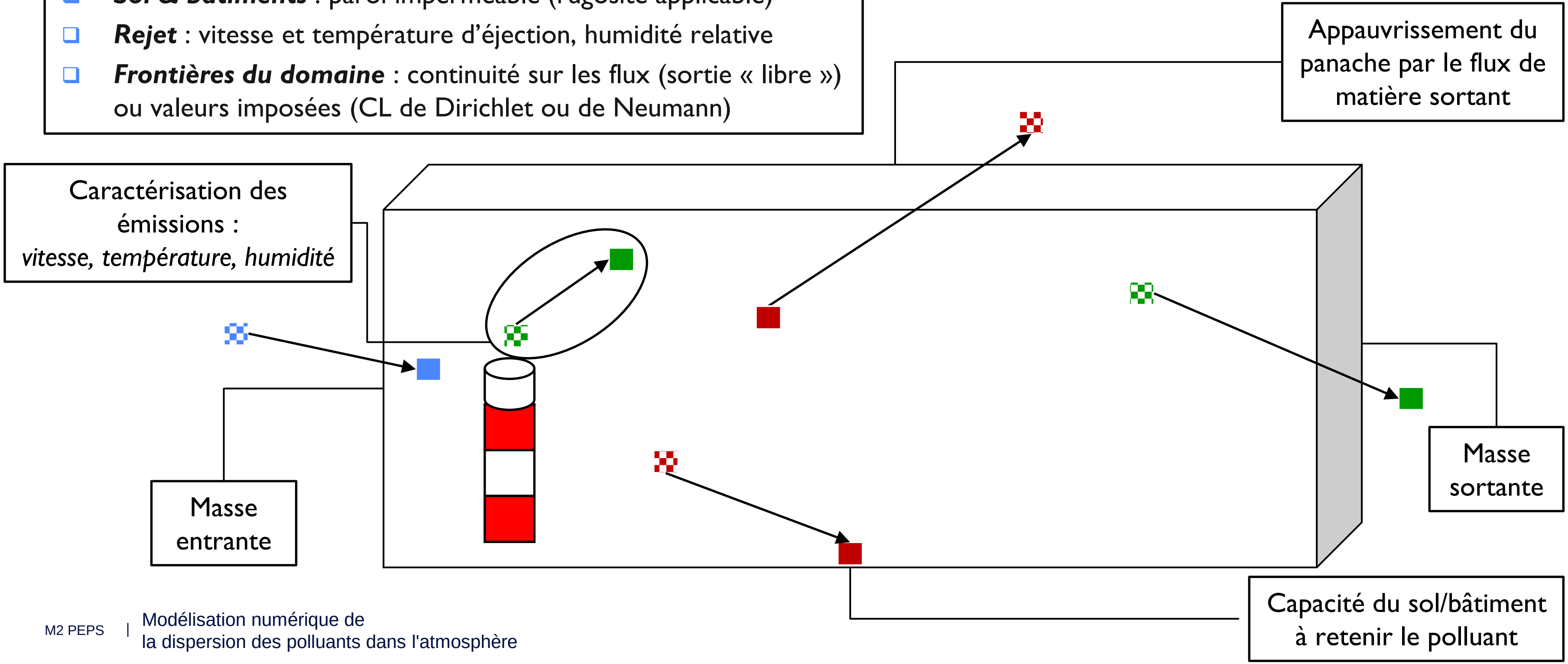
- Une solution numérique s'impose:
  - Le domaine modélisé, fixe dans l'espace, est discrétisé en cellules.
  - Les variables sont uniformes dans chaque cellule (maille).
  - Les changements de la composition chimique dans chaque cellule sont simulés.
- Définition des variables pour les équations. En bleu les champs fournit par l'état de l'atmosphère, en noir les champs estimés par l'équation de conservation de la masse.
  - Vitesse : $\vec{\boldsymbol{v}}$
  - Pression : P
  - Température : T
  - Masse volumique de l'air sec : ρ
  - Concentration en vapeur d'eau: Cv
  - Concentration en polluant : Ci



Modèles Eulériens - Conditions limites

Conditions aux limites:

- ***Sol & bâtiments*** : paroi imperméable (rugosité applicable)
- ***Rejet*** : vitesse et température d'éjection, humidité relative
- ***Frontières du domaine*** : continuité sur les flux (sortie « libre ») ou valeurs imposées (CL de Dirichlet ou de Neumann)



Modèles Eulériens - Discrétisation spatial et temporelle

- Une équation simplifiée du transport va permettre une présentation des différentes méthodes numériques de résolution. v représente une vitesse caractéristique du problème.

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) = -v\frac{\partial c}{\partial x}(x,t)$$

- **Condition initiale :**

$$c(x, t=0) = c_0(x)$$

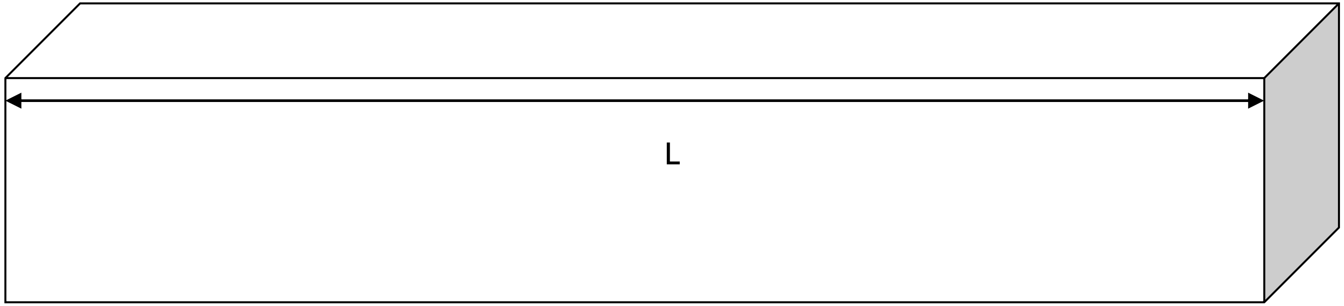
- **Conditions aux limites de Neumann :**

$$\frac{\partial c}{\partial x}(x=0,t) = \frac{\partial c}{\partial x}(x=L,t) = 0$$

- **Conditions aux limites de Dirichlet :**

$$c(x=0,t) = c(x=L,t) = 0$$

- Modélisation sur $0 \leq x \leq L$ avec $\mathrm{dx} = L/(N_X - 1)$ et N_X points.
- Modélisation sur $0 \leq t \leq T$ avec $\mathrm{dt} = T/(N_T - 1)$ et N_T échéances.



Modèles Eulériens - Discrétisation spatial et temporelle

Schéma numérique

- Explicite :

$$c(x,t+dt) = f\,(x,t)$$

- Implicite :

$$c(x,t+dt) = f\,(x,t,t+dt)$$

Stabilité d'un schéma numérique

- Il existe $\tau > 0$ tel que $c(x,t+n\cdot dt)$ est uniformément borné pour tout $0 < \mathrm{dt} \leq \tau$, tout $n \in \mathbb{N}$ et tout x.

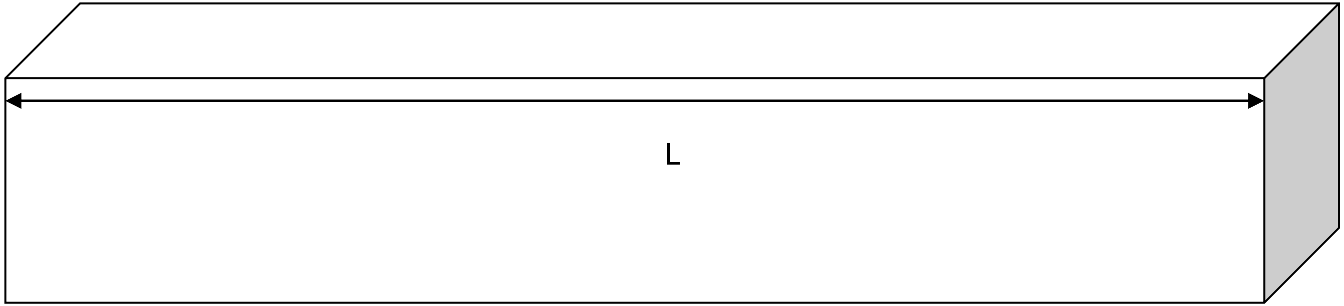
Dérivée spatiale

- Schéma décentré d'ordre 1 :

$$\frac{c(x,t) - c(x-dx,t)}{dx} = \frac{\partial c}{\partial x}(x,t) + \frac{dx}{2}\frac{\partial^2 c}{\partial^2 x}(x,t) + \cdots \sim \frac{\partial c}{\partial x}(x,t)$$

- Schéma centré d'ordre 2 :

$$\frac{c(x+dx,t) - c(x-dx,t)}{2dx} = \frac{\partial c}{\partial x}(x,t) + \frac{(dx)^2}{6}\frac{\partial^3 c}{\partial^3 x}(x,t) + \cdots \sim \frac{\partial c}{\partial x}(x,t)$$



Modèles Eulériens - Discrétisation spatial et temporelle

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) = -v\frac{\partial c}{\partial x}(x,t)$$

- **Nombre de Courant :**

$$C_{FL} = v\frac{dt}{dx}$$

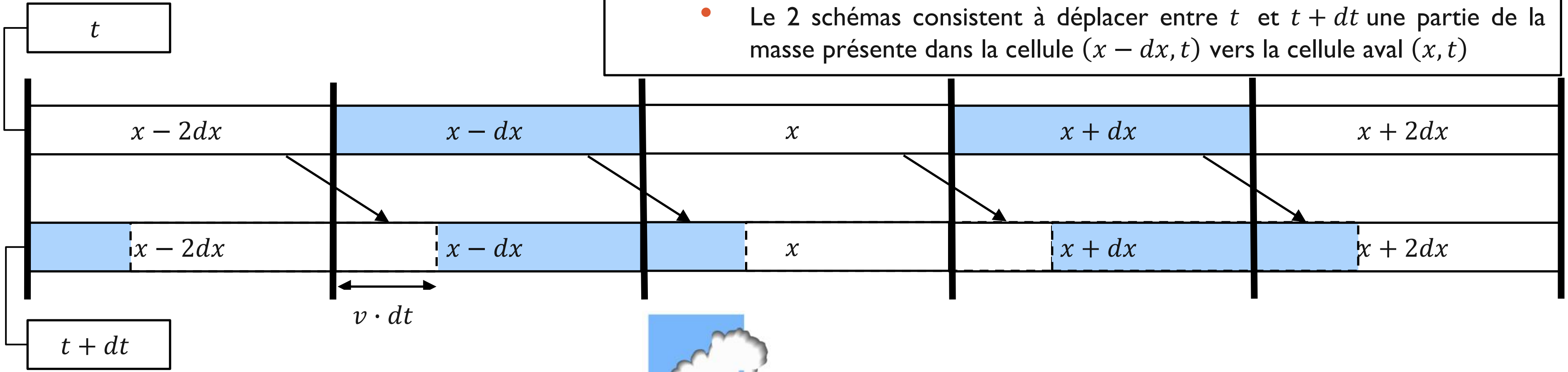
- **Schéma explicite décentré d'ordre 1**

$$c(x,t+dt) = c(x,t) - C_{FL}\cdot\big(c(x,t) - c(x-dx,t)\big)$$
$$= c(x,t)\cdot(1-C_{FL}) + c(x-dx,t)\cdot C_{FL}$$

- **Schéma explicite centré d'ordre 2**

$$c(x,t+dt) = c(x,t) + C_{FL}/2\cdot c(x-dx,t) - C_{FL}/2\cdot c(x+dx,t)$$

  - On connait entièrement $c(\cdots,t+dt)$ à partir des différents $c(\cdots,t)$
  - Le 2 schémas consistent à déplacer entre t et $t+dt$ une partie de la masse présente dans la cellule $(x-dx,t)$ vers la cellule aval (x,t)



Modèles Eulériens - Discrétisation spatial et temporelle

- **Nombre de Courant :**

$$C_{FL} = v\frac{dt}{dx}$$

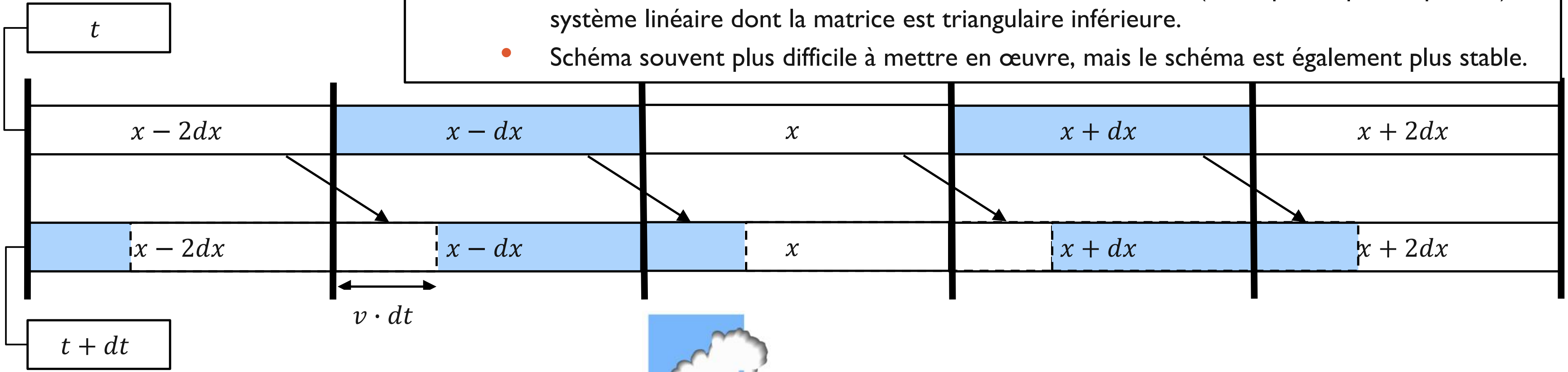
- **Critère de stabilité :** le pas d'advection doit être inférieur au pas de maille pour éviter de *sauter* des cellules lors de l'advection.

$$C_{FL} < 1$$

- **Schéma implicite décentré d'ordre 1**

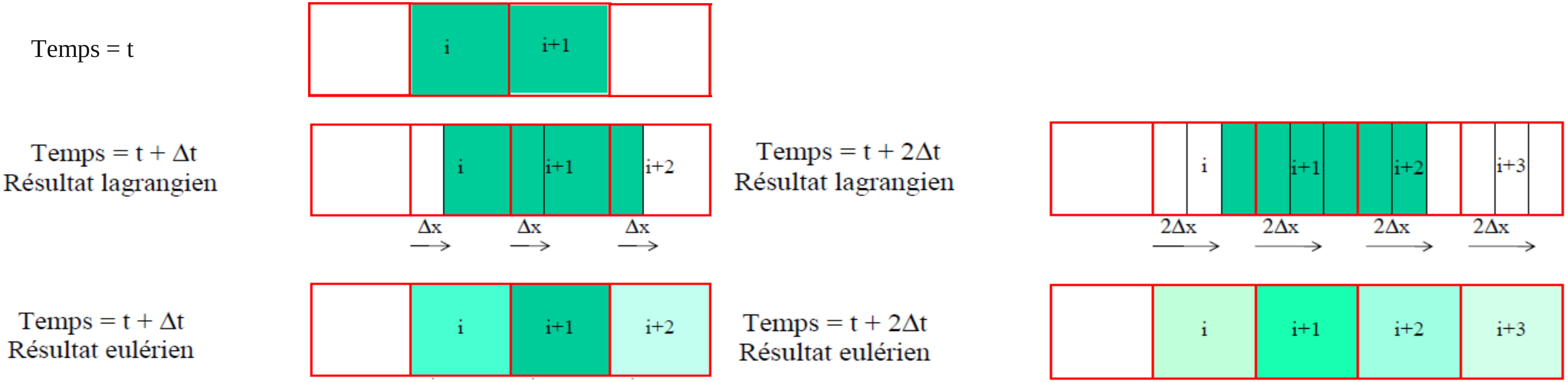
$$c(x, t+dt) = c(x,t) - C_{FL} \cdot \big(c(x, t+dt) - c(x-dx, t+dt)\big)$$
$$(1 + C_{FL}) \cdot c(x, t+dt) - C_{FL} \cdot c(x-dx, t+dt) = c(x,t)$$

  - Pour sa mise en œuvre, le schéma nécessite de résoudre (à chaque étape temporelle) un système linéaire dont la matrice est triangulaire inférieure.
  - Schéma souvent plus difficile à mettre en œuvre, mais le schéma est également plus stable.



Modèles Eulériens - Diffusion numérique

- Partant d'une variable uniforme à l'intérieur d'une cellule, la modélisation numérique du transport est associée à une *diffusion numérique*. La masse transférée de la cellule *(i+1)* à la cellule *(i+2)* est ainsi présente dans toute la cellule *(i+2)*. Cette masse est disponible pour un transfert vers *(i+3)* au pas de temps suivant.



- La diffusion numérique peut être minimisée :
  - En utilisant un maillage plus fin (quand dx tend vers 0, la solution numérique tend vers la solution exacte) ; plus le maillage est grossier, plus la diffusion numérique est importante.
  - En utilisant des méthodes numériques plus sophistiquées (Smolarchiewicz, Bott …).

Modèles Eulériens - Diffusion numérique

$$\frac{\Delta c}{dx} = \frac{c(x,t) - c(x-dx,t)}{dx} = \frac{\partial c}{\partial x}(x,t) - \frac{dx}{2}\frac{\partial^2 c}{\partial^2 x}(x,t) + \cdots \sim \frac{\partial c}{\partial x}(x,t) - \frac{dx}{2}\frac{\partial^2 c}{\partial^2 x}(x,t)$$

$$\frac{\Delta c}{dt} = \frac{c(x,t+dt) - c(x,t)}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t}(x,t) + \frac{dt}{2}\frac{\partial^2 c}{\partial^2 t}(x,t) + \cdots \sim \frac{\partial c}{\partial t}(x,t) + \frac{dt}{2}\frac{\partial^2 c}{\partial^2 t}(x,t)$$

- **Schéma explicite décentré d'ordre 1**

$$\frac{\Delta c}{dt} = -v \cdot \frac{\Delta c}{dx} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial c}{\partial t} + v\frac{\partial c}{\partial x} = -\frac{dt}{2}\frac{\partial^2 c}{\partial^2 t} + v\frac{dx}{2}\frac{\partial^2 c}{\partial^2 x}$$

$$X = x - v \cdot t \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial c}{\partial X} = v\frac{dx}{2} \cdot (1 - C_{FL}) \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial^2 X}$$

- **Nombre de Courant :**

$$C_{FL} = v\frac{dt}{dx}$$

- **Critère de stabilité :**
  - La diffusion numérique peut être minimisée en utilisant un maillage plus fin (quand dx tend vers 0, la solution numérique tend vers la solution exacte) ; plus le maillage est grossier, plus la diffusion numérique est importante.
  - En augmentant le nombre de courant.

$$C_{FL} < 1$$

Modèles Eulériens - Prise en compte de la turbulence

- Echelle horizontale caractéristique : L=10km
- Echelle de vent caractéristique : U=10m/s
- Echelle de temps caractéristique d'advection des structures de grande échelle : L/U=1000s

- L'équation de conservation de la masse est non linéaire. Les termes non linéaire sont liés à la prise en compte des phénomènes de turbulence (dissipation de la quantité de mouvement, cisaillement).

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (c\vec{\boldsymbol{v}}) = \mathrm{S} + \mathrm{P}$$

- On va décomposer les champs en une valeur moyenne sur un certain intervalle de temps (ce temps doit être plus petit que le temps caractéristique d'advection des structures de grande) et qu'on notera $\bar{q}$. Les fluctuations rapides liées à la turbulence de petite échelle q'.

- En l'absence de sources, de puits et en négligeant la diffusion moléculaire, l'équation de transport peut alors s'écrire :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{w}}{\partial z} = -\frac{\partial \overline{c'u'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{c'v'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{c'w'}}{\partial z}$$

- Le terme de droite prend uniquement en compte les flux turbulent. Des hypothèses de simplification (fermeture turbulente) doivent être formulées :
  - Etablissement des équations en moyenne de Reynolds
  - Introduction dans le système d'équations de nouvelles variables liées à la turbulence

Modèles Eulériens - Prise en compte de la turbulence

- En l’absence de sources, de puits et en négligeant la diffusion moléculaire, l’équation de transport peut alors s’écrire :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{w}}{\partial z} = -\frac{\partial \overline{c'u'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{c'v'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{c'w'}}{\partial z}$$

- On introduit la longueur de mélange verticale l, ou libre parcours moyen verticale des parcelles d’air.

- On suppose qu’une parcelle d’air qui descend $(w' < 0\,)$ a au départ la concentration en polluant correspondant au champ moyen d’où elle provient. Cette parcelle amène donc au niveau z une perturbation sur la concentration:

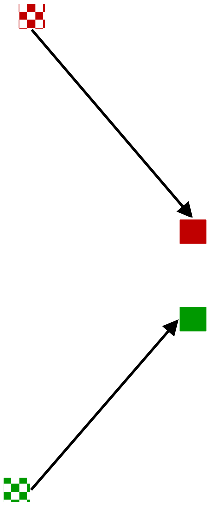
$$c' = \bar{c}(z+l) - \bar{c}(z) \sim l \cdot \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$$

- Pour une parcelle d’air qui monte $(w' > 0\,)$, la perturbation au niveau z vaut:

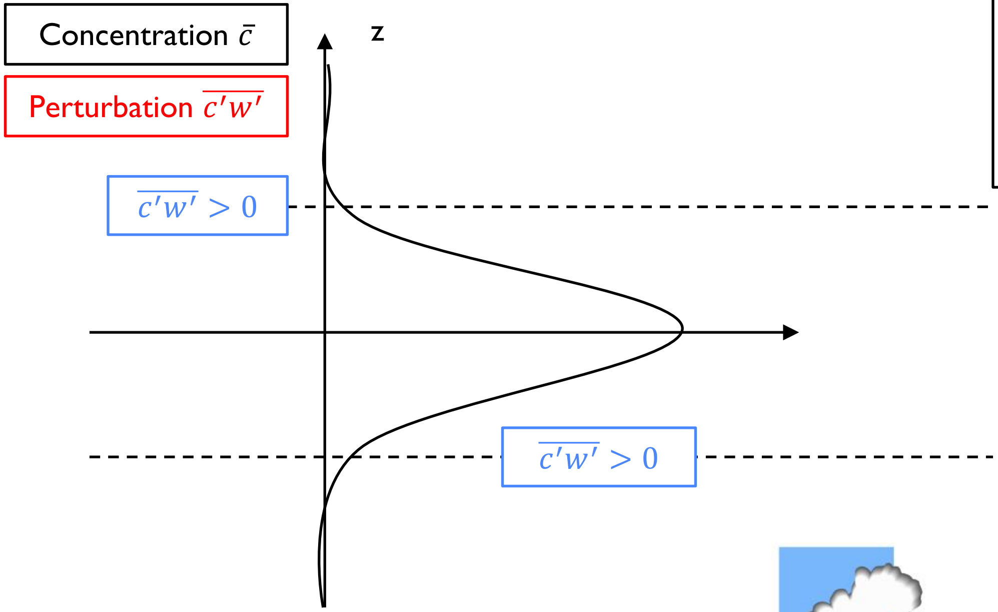
$$c' = -\bar{c}(z) + \bar{c}(z-l) \sim -\, l \cdot \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$$

- Dans les 2 cas, le flux turbulent vaut:

$$\overline{c'w'} = -l \cdot |w'| \cdot \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$$



Modèles Eulériens - Prise en compte de la turbulence



- En l'absence de sources, de puits et en négligeant la diffusion moléculaire, l'équation de transport peut alors s'écrire :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{w}}{\partial z} = -\frac{\partial \overline{c'u'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{c'v'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{c'w'}}{\partial z}$$

- Le flux turbulent vaut:

$$\overline{c'w'} = -l \cdot |w'| \cdot \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$$

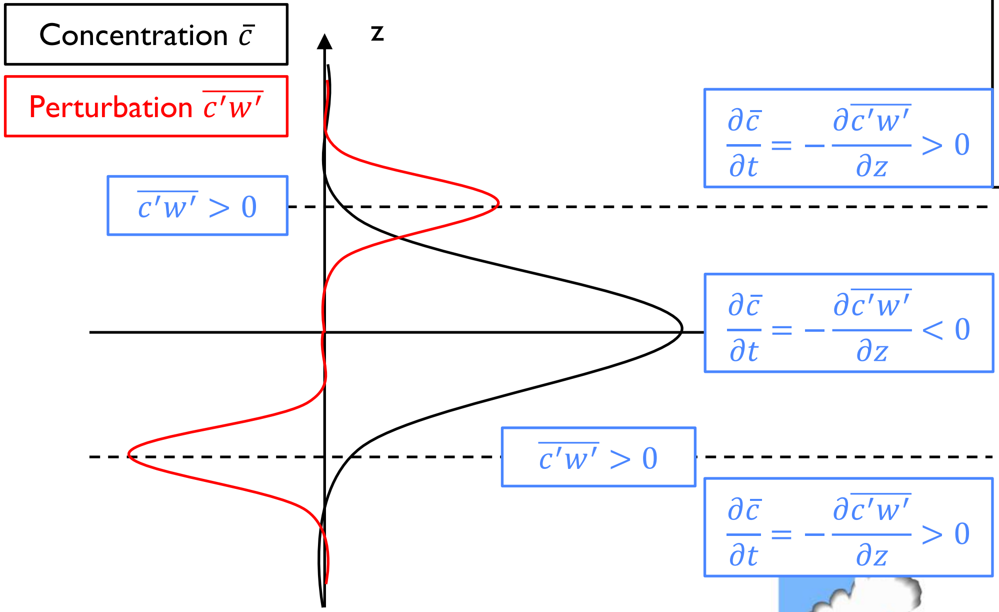
- Cas simplifié :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{c'w'}}{\partial z}$$

- Le flux turbulents vaut:

$$\overline{c'w'} = -l \cdot |w'| \cdot \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$$

Modèles Eulériens - Prise en compte de la turbulence



- En l'absence de sources, de puits et en négligeant la diffusion moléculaire, l'équation de transport peut alors s'écrire :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{c} \cdot \bar{w}}{\partial z} = -\frac{\partial \overline{c'u'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{c'v'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{c'w'}}{\partial z}$$

- Le flux turbulent vaut:

$$\overline{c'w'} = -l \cdot |w'| \cdot \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$$

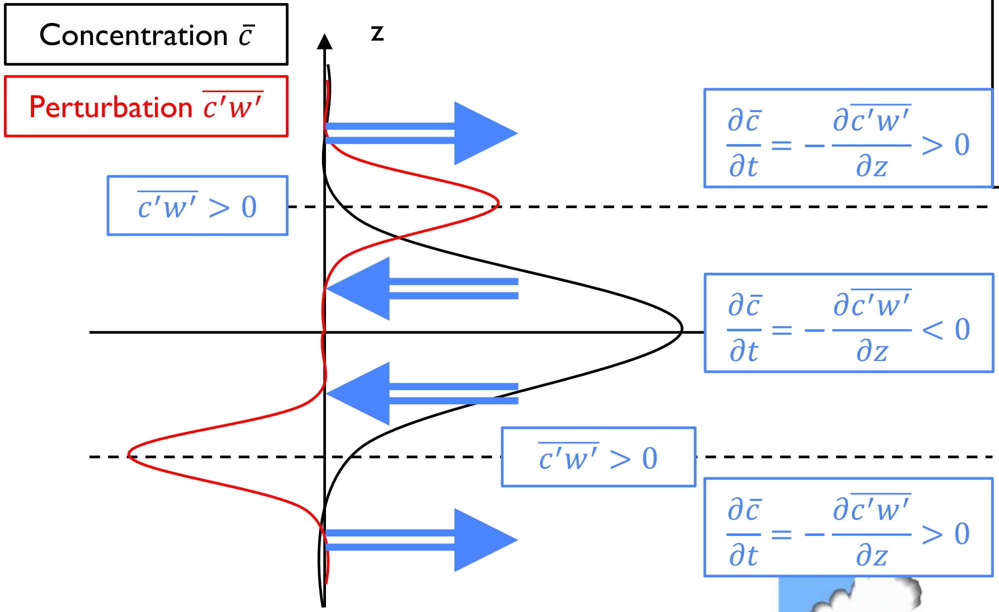
- Cas simplifié :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{c'w'}}{\partial z}$$

- Le flux turbulents vaut:

$$\overline{c'w'} = -l \cdot |w'| \cdot \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$$

Modèles Eulériens - Prise en compte de la turbulence



- En l'absence de sources, de puits et en négligeant la diffusion moléculaire, l'équation de transport peut alors s'écrire :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{c}\cdot\bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{c}\cdot\bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{c}\cdot\bar{w}}{\partial z} = -\frac{\partial \overline{c'u'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{c'v'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{c'w'}}{\partial z}$$

- Le flux turbulent vaut:

$$\overline{c'w'} = -l \cdot |w'| \cdot \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$$

Diffusion turbulente

- Cas simplifié :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{c'w'}}{\partial z}$$

- Le flux turbulents vaut:

$$\overline{c'w'} = -l \cdot |w'| \cdot \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$$

Modèles Eulériens - Diffusion turbulente

- La diffusion moléculaire est représentée par une loi de Fick :

$$\vec{F}(\vec{x},t) = -D_g \cdot \vec{\nabla}\bar{c}(\vec{x},t)$$

où $\vec{F}$ est le flux de masse, D_g est le coefficient de diffusion moléculaire,
c est la concentration de la substance qui diffuse et $\vec{\nabla}$ est le gradient spatial

- Par analogie, le terme correspondant à la turbulence est représenté ainsi :

$$\overline{c'\vec{v}'} = -\vec{K} \cdot \vec{\nabla}\bar{c}$$

- C'est-à-dire, l'hypothèse est faite que le flux de masse dû à la diffusion turbulente (dispersion) est proportionnel au gradient de la concentration massique. Le coefficient de proportionnalité se nomme le coefficient de **diffusion turbulente** $\vec{K}$ (l'équivalent de D_g).

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \underbrace{u_x \frac{\partial C}{\partial x} + u_y \frac{\partial C}{\partial y} + u_z \frac{\partial C}{\partial z}}_{\text{advection}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left(K_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_{zz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)}_{\text{diffusion}} - q_{em}$$

Modèles Eulériens - Discrétisation spatial et temporelle

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \underbrace{u_x \frac{\partial C}{\partial x} + u_y \frac{\partial C}{\partial y} + u_z \frac{\partial C}{\partial z}}_{\text{advection}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left(K_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_{zz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)}_{\text{diffusion}} - q_{em}$$

- En considérant les hypothèses suivantes, l'équation de transport se résume à :
  - Etat stationnaire
  - Vent unidirectionnel (vx ; 0 ; 0)
  - Turbulence homogène et uniquement dans le plan transverse à l'advection (0 ; Kyy ; Kzz)

$$v_x \frac{\partial c(\boldsymbol{x})}{\partial x} = K_{yy}\frac{\partial^2 c(\boldsymbol{x})}{\partial y^2} + K_{zz}\frac{\partial^2 c(\boldsymbol{x})}{\partial z^2} - q_{em}$$

- Conditions Limites : $c(0, y, z) = 0$ $\quad c(x, y, z) = 0 \quad y, z \to \pm\infty$

- Solution Exacte : $c(\boldsymbol{x}) = \dfrac{q}{4\pi\,(K_{yy}K_{zz})^{1/2}\,x}\exp\left(-\dfrac{v_x}{4x}\left(\dfrac{y^2}{K_{yy}} + \dfrac{z^2}{K_{zz}}\right)\right)$

TD

- Une équation simplifiée du transport est considérée. v représente une vitesse caractéristique du problème.

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) = -v\frac{\partial c}{\partial x}(x,t)$$

- Montrer que le schéma explicite centré d'ordre 2 est toujours instable
- Montrer que le schéma explicite décentré d'ordre 1 est stable pour $C_{FL} < 1$

- Partant de la solution exacte, vérifier la conservation intégrale de la masse

$$c(\boldsymbol{x}) = \frac{q}{4\pi\left(K_{yy}K_{zz}\right)^{1/2}x}\exp\left(-\frac{v_x}{4x}\left(\frac{y^2}{K_{yy}}+\frac{z^2}{K_{zz}}\right)\right)$$

- Une équation simplifiée du transport est considérée. v représente une vitesse caractéristique du problème.

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) = -v\frac{\partial c}{\partial x}(x,t)$$

- Montrer que le schéma explicite centré d'ordre 1 est toujours instable
- Montrer que le schéma explicite centré d'ordre 1 est stable pour $C_{FL} < 1$

- On suppose qu'une solution harmonique $\omega \in \mathbb{R}$ existe :

$$c(x,t) = \exp\left(i\omega \cdot \left(t - {}^{x}/_{v}\right)\right)$$

- Schéma explicite centré d'ordre 2

$$\frac{\Delta c}{dt} = \frac{c(x,t+dt) - c(x,t)}{dt} = -v \cdot \frac{\Delta c}{dx} = -v \cdot \frac{c(x+dx,t) - c(x-dx,t)}{2dx}$$

$$e^{i\omega \cdot dt} - 1 = -\frac{C_{FL}}{2}\left(e^{-idx\cdot\omega/v} - e^{idx\cdot\omega/v}\right)$$

$$e^{i\omega \cdot dt} = 1 + i \cdot C_{FL} \cdot \sin(dx \cdot \omega/v)$$

$$\left\|e^{i\omega\cdot dt}\right\|^2 = 1 + C_{FL}^2 \cdot sin^2(dx \cdot \omega/v) > 1$$

La solution harmonique diverge. Le schéma est instable.

Instable !

- Schéma explicite décentré d'ordre 1

$$\frac{\Delta c}{dt} = \frac{c(x,t+dt) - c(x,t)}{dt} = -v \cdot \frac{\Delta c}{dx} = -v\frac{c(x,t) - c(x-dx,t)}{dx}$$

$$e^{i\omega \cdot dt} = 1 + 2i \cdot C_{FL} \cdot e^{idx\cdot\omega/2v} \cdot \sin(dx \cdot \omega/2v)$$

$$\left\|e^{i\omega\cdot dt}\right\|^2 = 1 + 4 \cdot C_{FL} \cdot sin^2(dx \cdot \omega/2v)\,(C_{FL} - 1)$$

Stable $\Leftrightarrow C_{FL} \leq 1$

- Partant de la solution exacte, vérifier la conservation intégrale de la masse

$$c(\boldsymbol{x}) = \frac{q}{4\pi\left(K_{yy}K_{zz}\right)^{1/2} x} \exp\left(-\frac{v_x}{4x}\left(\frac{y^2}{K_{yy}} + \frac{z^2}{K_{zz}}\right)\right)$$

- **Conservation de la masse :** l'intégrale de la concentration sur un plan transversal du panache multipliée par la vitesse du vent doit être égale au taux d'émission de la source.

$$\iint_{-\infty}^{\infty} c(y,z) v_x dydz = \frac{q v_x}{4\pi x \sqrt{K_{yy}K_{zz}}} \iint_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{v_x y^2}{4K_{yy}x}} e^{-\frac{v_x z^2}{4K_{zz}x}} dydz$$

- Avec une transformation en coordonnées « cylindriques » :

$$\iint_{-\infty}^{\infty} c(y,z) v_x dydz = \frac{q}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} e^{-z^2} dydz = \frac{q}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} e^{-r^2} r dr d\theta = 2q \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr = q$$

Modèles Eulérien - Avantages / Limites

Points Forts :

- Prise en compte de l'inhomogénéité spatiale des champs météorologiques
- Prise en compte de l'influence du rejet sur l'écoulement
- Introduction aisée de physique complexe (multi-phase, jets …) comme des bâtiments (approche petite échelle)
- Prise en compte de toutes les sources sans limite de nombre (invariance du temps CPU avec le nombre de sources)
- Prise en compte des réactions photochimiques:
  - Analyse de l'évolution spatio-temporel des photo-oxydants en basse troposphère (NOX + COV + hv = O3)
  - Evaluation de l'efficacité d'une mesure de réduction des émissions.
  - Surveillance opérationnelle de la qualité de l'air sur une région ou un continent.

Points faibles :

- Temps de calcul CPU élevé : Tcpu = f(maillage)
- Mise en œuvre plus complexe
- Sensibilité des résultats aux hypothèses de calcul : dt, dx, conditions limites …
- Interprétation des résultats nécessite un utilisateur plus expérimenté
- Données d'entrée plus complètes (notamment pour les modèles réactifs)

Modélisation numérique de
la dispersion des polluants dans l'atmosphère

POURQUOI MODÉLISER ?

TRANSPORT DE MATIÈRE DANS L’ATMOSPHERE

DYNAMIQUE DE L’ATMOSPHÈRE

- **Equation d’état**
- **Approximation hydrostatique**
- **Equation thermodynamique**
- **Stabilité de l’atmosphère**

LES DIFFÉRENTS MODÈLES

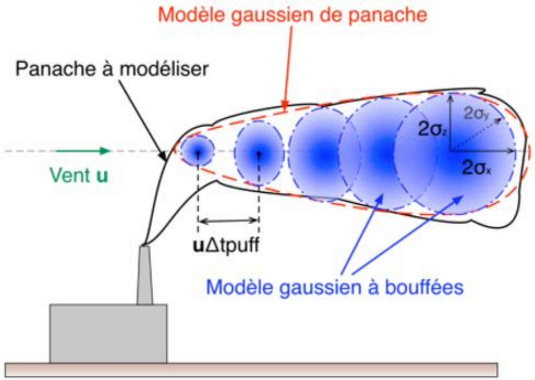
- **Modèle Lagrangien**
- **Modèle Eulérien**
- **Modèle Gaussien**

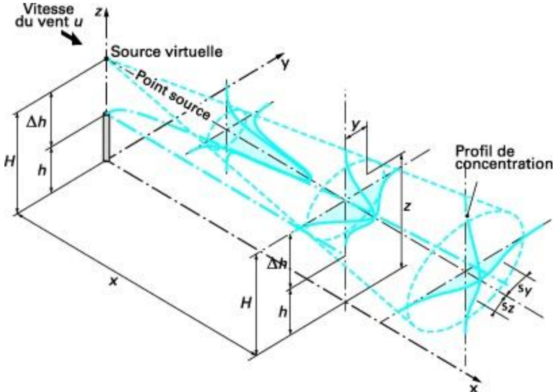
Modèles gaussiens

Les modèles gaussiens permettent de simuler la dispersion atmosphérique de polluants non-réactifs à proximité de la source.

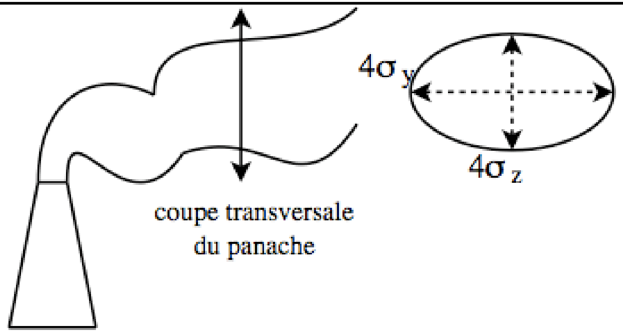
- **Hypothèse d'une distribution gaussienne autour du centre du panache**
- **Stationnaire :** les conditions des variables d'entrée (émission, météorologie) sont constantes dans le temps (rejet continu) et dans l'espace (pour la météorologie).
- **Conservation de la masse :** l'intégrale de la concentration sur un plan transversal du panache multipliée par la vitesse du vent doit être égale au taux d'émission de la source.

- On distingue :
  - les modèles de panache stationnaires
  - les modèles de bouffées non-stationnaires (modèle lagrangien de dispersion)





Modèles gaussiens - Formulation



Les concentrations dans le panache sont représentées par l'équation suivante, avec q le terme d'émission.

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{2\pi v_X \sigma_Y \sigma_Z} \cdot e^{-y^2/2\sigma_Y^2} \cdot e^{-z^2/2\sigma_Z^2}$$

Fonction erreur de Gauss

$$|t| = \left|\frac{z}{\sqrt{2}\sigma}\right| \leq x$$

$$erf(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^{x} e^{-t^2} \cdot dt$$

$erf\left(1/\sqrt{2}\right) \sim 68{,}2\%$ signifie que 68,2% de la gaussienne $\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-z^2/2\sigma^2}$ se trouve dans l'intervalle $\pm\sigma$

- L'ellipse $(2\sigma_Y, 2\sigma_Z)$ contient $erf^2\left(1/\sqrt{2}\right) \sim 46{,}6\%$ de la masse du panache gaussien
- L'ellipse $(4\sigma_Y, 4\sigma_Z)$ contient $erf^2\left(\sqrt{2}\right) \sim 91{,}1\%$ de la masse du panache gaussien

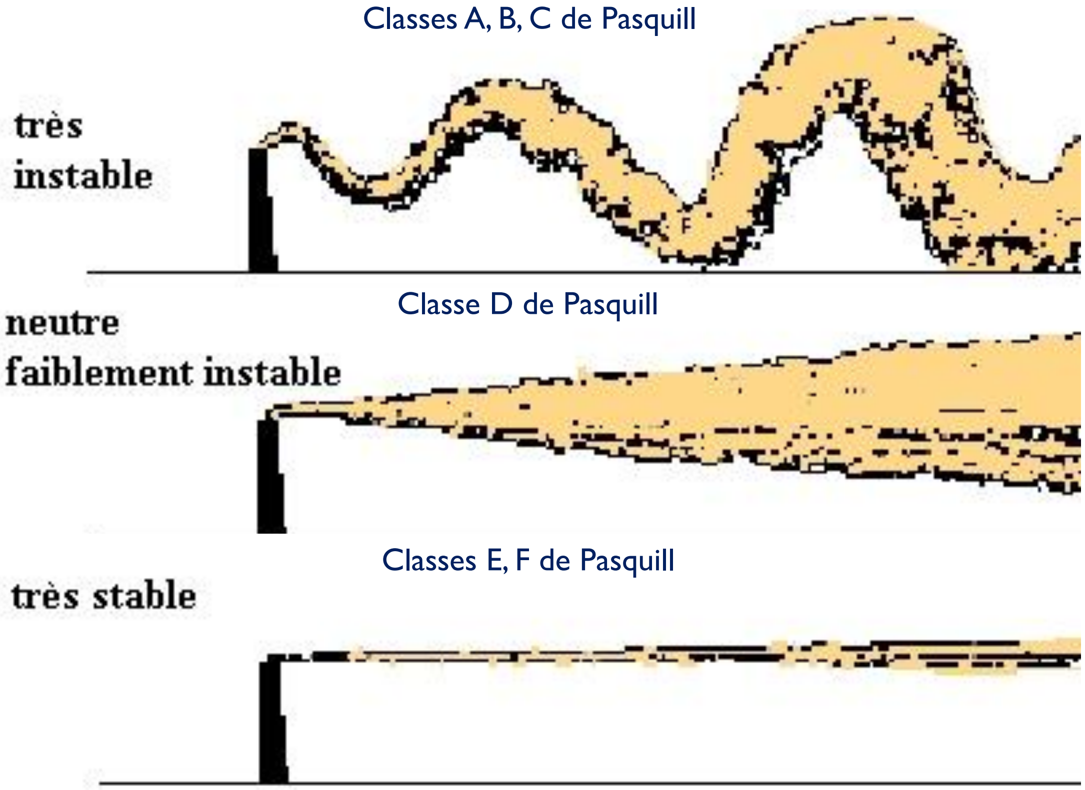
Modèles gaussiens - Stabilité

La stabilité atmosphérique influence la dispersion du panache :

- des conditions stables dispersent peu le panache
- des conditions instables dispersent fortement le panache

Smoke plume - Borex dispersion experiment

https://envs.au.dk/en/research-areas/air-pollution-emissions-and-effects/the-monitoring-program/air-pollution-models/background-info/borex



Modèles gaussiens - Stabilité

Des paramètres météorologiques permettent de caractériser la stabilité atmosphérique :

- **Gradient thermique (classes de Pasquill)**

	A Très instable	B Instable	C Peu instable	D Neutre	E Stable	F Très stable
Gradient thermique en °C/100m	- 2,1	- 1,8	- 1,6	- 1,0	1,0	2,0

- **Ecart-type de direction**
  Une classification de classification de la stabilité de l'atmosphère existe pour l'écart-type des fluctuation de la direction du vent.
  - Ecart-type faible : $\sigma_{DIR} < 5\,°$: atmosphère *stable* équivalente à une classe de Pasquill F
  - Ecart-type important : $\sigma_{DIR} > 25°$: atmosphère *instable* équivalente à une classe de Pasquill A
- **Longueur de Monin-Obukhov (L)**
  L est proportionnel à la hauteur à laquelle la turbulence thermique (flottabilité) commence à dominer la turbulence mécanique (cisaillement de vent).
- **Nombre de Richardson (Rib, Rig)**
- **Ri = Énergie potentielle / Énergie cinétique.**
  Pour caractériser l'atmosphère, l'utilisation du nombre de Reynolds n'est pas satisfaisante, car celle-ci est toujours un gaz naturel turbulent. Le paramètre n'est pas utilisé pour distinguer différents régimes observées.

Modèles gaussiens – Coefficient de dispersion

Vent v_X selon l'axe X:

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{4\pi x\sqrt{K_{YY}K_{ZZ}}} \cdot \exp\left(-\frac{v_X}{4x} \cdot \left(\frac{y^2}{K_{YY}} + \frac{y^2}{K_{YY}}\right)\right) = \frac{Q}{2\pi v_X \sigma_Y \sigma_Z} \cdot \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_Y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_Z^2}\right)$$

Les écarts types de la distribution gaussienne augmentent avec le temps / la distance à la source:

$$\sigma_Y^2 = \frac{2K_{YY}}{v_X} \cdot x \qquad \sigma_Z^2 = \frac{2K_{ZZ}}{v_X} \cdot x$$

Handbook on Atmospheric Diffusion
S.R. Hanna, G.A. Briggs, R.P. Hosker

Modèles gaussiens – Coefficient de dispersion

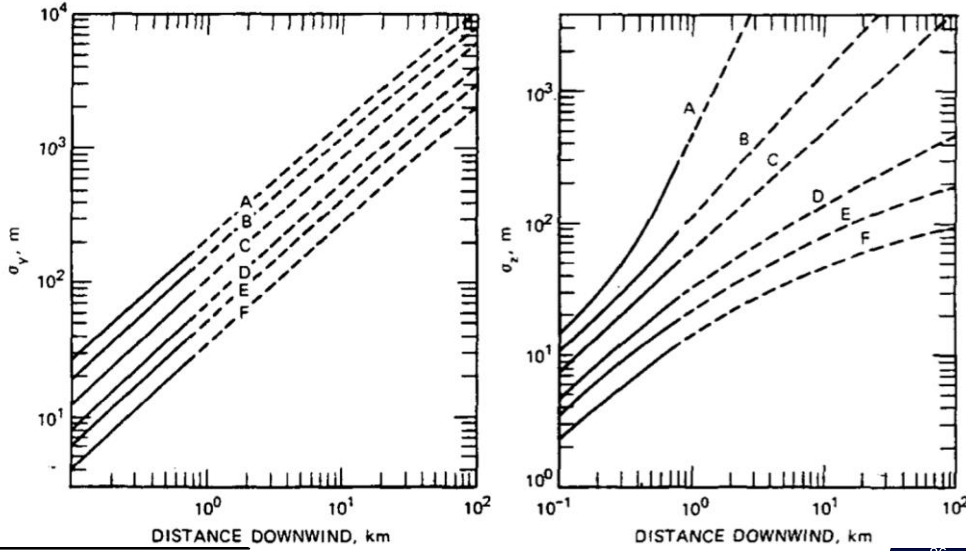
Vent v_X selon l'axe X:

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{4\pi x\sqrt{K_{YY}K_{ZZ}}} \cdot \exp\left(-\frac{v_X}{4x} \cdot \left(\frac{y^2}{K_{YY}} + \frac{y^2}{K_{YY}}\right)\right) = \frac{Q}{2\pi v_X \sigma_Y \sigma_Z} \cdot \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_Y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_Z^2}\right)$$

Les écarts types de la distribution gaussienne augmentent avec le temps / la distance à la source:

$$\sigma_Y^2 = \frac{2K_{YY}}{v_X} \cdot x \sim (a \cdot x^b)^2 \qquad \sigma_Z^2 = \frac{2K_{ZZ}}{v_X} \cdot x \sim (c \cdot x^d)^2$$

Stability Description	Pasquill	a	b	c	d
		$\sigma_Y = a \cdot x^b$		$\sigma_Z = c \cdot x^d$	
Moderately unstable	B	0,36	0,86	0,33	0,86
Slightly unstable	C	0,40	0,91	0,41	0,91
Neutral	D	0,32	0,78	0,22	0,78
Moderately stable	F	0,31	0,71	0,06	0,71



Handbook on Atmospheric Diffusion
S.R. Hanna, G.A. Briggs, R.P. Hosker

Modèles gaussiens – Coefficient de dispersion

Vent v_X selon l'axe X:

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{4\pi x\sqrt{K_{YY}K_{ZZ}}} \cdot \exp\left(-\frac{v_X}{4x}\cdot\left(\frac{y^2}{K_{YY}}+\frac{y^2}{K_{YY}}\right)\right) = \frac{Q}{2\pi v_X \sigma_Y \sigma_Z}\cdot \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_Y^2}-\frac{z^2}{2\sigma_Z^2}\right)$$

Les écarts types de la distribution gaussienne augmentent avec le temps / la distance à la source:

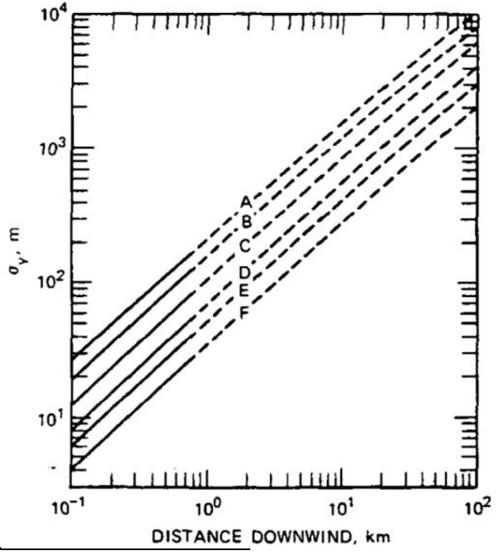
$$\sigma_Y^2 = \frac{2K_{YY}}{v_X}\cdot x \sim (a\cdot x^b)^2 \qquad \sigma_Z^2 = \frac{2K_{ZZ}}{v_X}\cdot x \sim (c\cdot x^d)^2$$

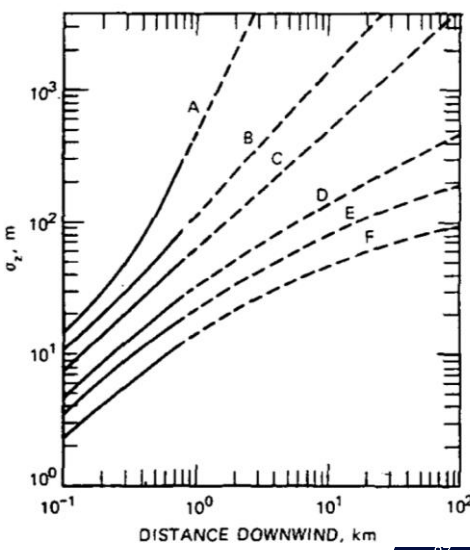
x, σ_Y et σ_Z sont exprimés en mètre.

Pour une classe de Pasquill D, on impose:

- $K_Y = K_Z \approx l v_X$ avec $l \approx 0.05m$
- $2b = 2d \approx 1.$

Stability Description	Pasquill	a	b	c	d
		$\sigma_Y = a\cdot x^b$		$\sigma_Z = c\cdot x^d$	
Moderately unstable	B	0,36	0,86	0,33	0,86
Slightly unstable	C	0,40	0,91	0,41	0,91
Neutral	D	0,32	0,78	0,22	0,78
Moderately stable	F	0,31	0,71	0,06	0,71





Handbook on Atmospheric Diffusion
S.R. Hanna, G.A. Briggs, R.P. Hosker

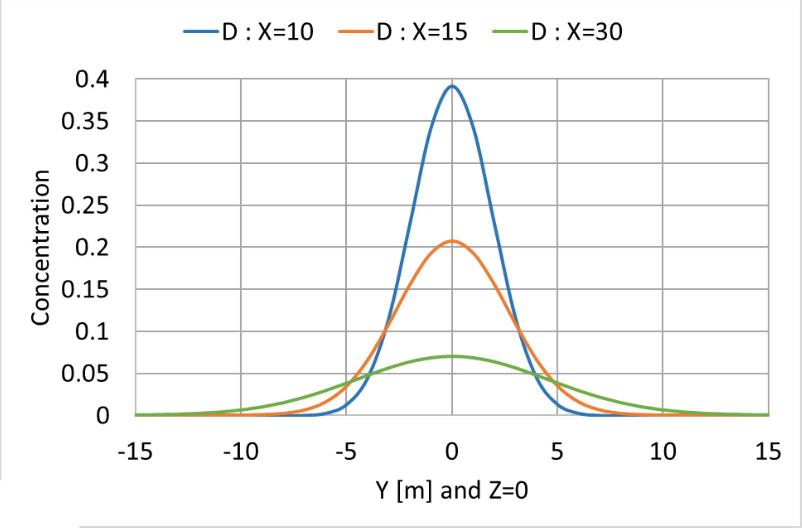
Modèles gaussiens – Coefficient de dispersion

Les écarts types de la distribution gaussienne augmentent avec le temps / la distance à la source

Stability Description	Pasquill	a	b	c	d
		$\sigma_Y = a \cdot x^b$		$\sigma_Z = c \cdot x^d$	
Moderately unstable	B	0,36	0,86	0,33	0,86
Slightly unstable	C	0,40	0,91	0,41	0,91
Neutral	D	0,32	0,78	0,22	0,78
Moderately stable	F	0,31	0,71	0,06	0,71

Vent selon l'axe X:

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{2\pi v_X \sigma_Y \sigma_Z} \cdot e^{-y^2/2\sigma_Y^2} \cdot e^{-z^2/2\sigma_Z^2}$$



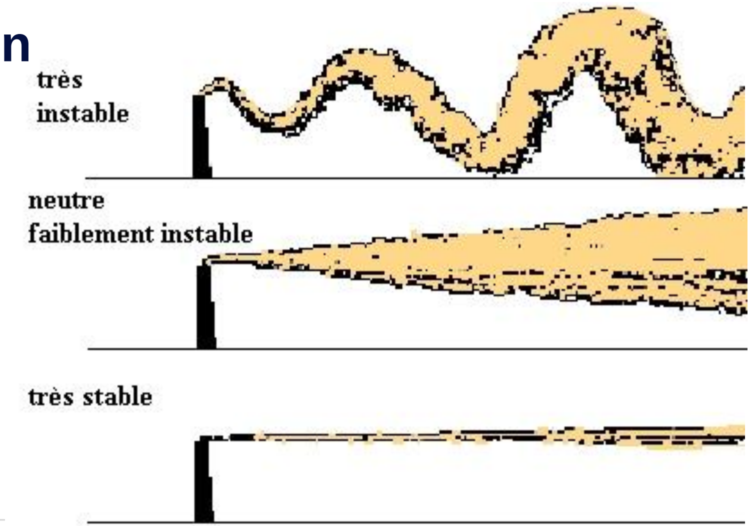
Modèles gaussiens – Coefficient de dispersion

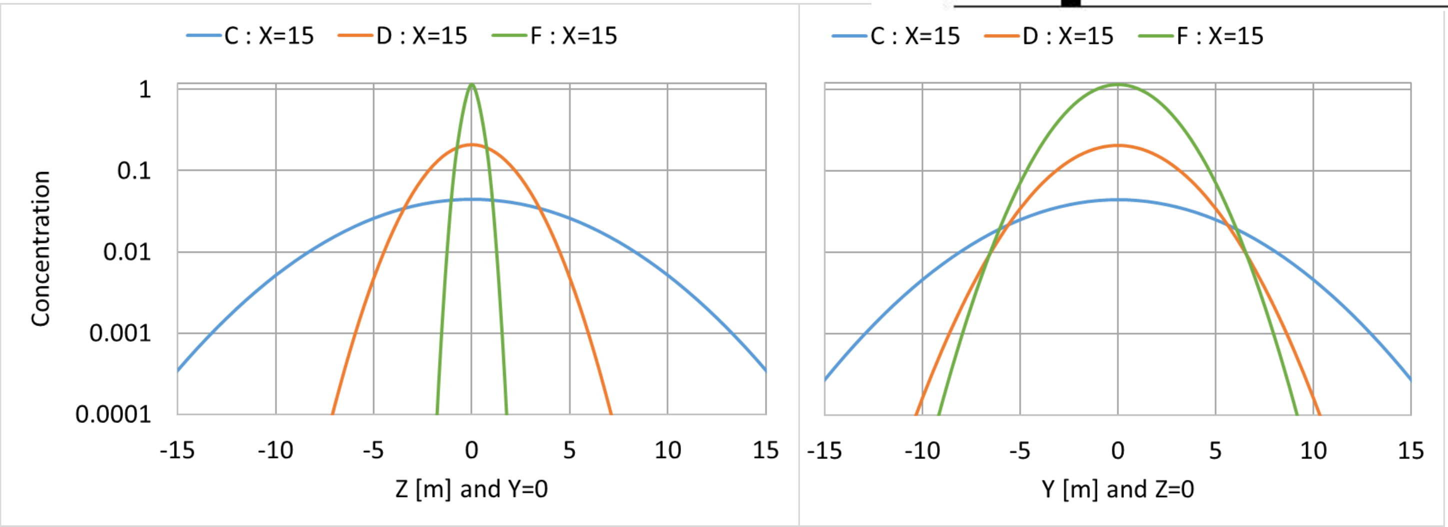
Vent selon l'axe X:

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{2\pi v_X \sigma_Y \sigma_Z} \cdot e^{-y^2/2\sigma_Y^2} \cdot e^{-z^2/2\sigma_Z^2}$$

La stabilité atmosphérique influence la dispersion du panache :

- des conditions stables dispersent peu le panache
- des conditions instables dispersent fortement le panache



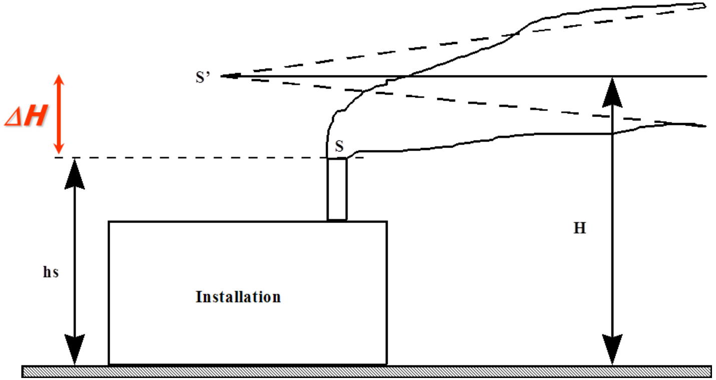


Modèles gaussiens - Surélévation d'un panache

- Un changement de coordonnée verticale (z ➔ z – z0) permet la prise en compte de la hauteur initiale du panache.

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{2\pi v_X \sigma_Y \sigma_Z} \cdot e^{-y^2/2\sigma_Y^2} \cdot e^{-(z-z_0)^2/2\sigma_Z^2}$$

z_0 correspond à : la hauteur de la source + la surélévation du panache par rapport à la source



- Deux phénomènes contribuent à la surélévation d'un panache émis par une source ponctuelle (cheminée, pot d'échappement) :
  - la force convective de l'écoulement
  - la flottabilité due à la chaleur du panache par rapport au milieu ambiant

Modèles gaussiens - Surélévation d'un panache

Plusieurs formules sont disponibles pour calculer la surélévation d'un panache :

- Formule de Holland :

$$\Delta h = \frac{V_s}{V} d \left(1.5 + 2.68 \cdot 10^{-3} \cdot Pd \frac{T_S - T_a}{T_S} \right)$$

Avec V la vitesse du vent à la hauteur de la cheminée $(m \cdot s^{-1})$, V_s la vitesse des gaz en sortie de la cheminée $(m \cdot s^{-1})$, d le diamètre de la cheminée (m), P la pression à la hauteur de la cheminée (hPa), T_s la température des gaz en sortie de cheminée (K), T_a la température de l'air à la hauteur de cheminée (K).

- Formule de Briggs :

$$\Delta h = \left(\frac{3}{0.36} \cdot \frac{F_m}{V^2} x + 4.17 \frac{F_b}{V^3} x^2 \right)^{1/3}$$

Avec $F_m = \frac{T_a}{T_S} V_s{}^2 \frac{d^2}{4}$ le forçage mécanique $(m^4 \cdot s^{-2})$ et $F_b = gV_s \frac{d^2}{4} \frac{T_S - T_a}{T_S}$ le forçage thermique $(m^4 \cdot s^{-3})$.
$x < x_f$ représente la distance à la source, avec $x_f = 49F_b^{5/8}$ si $F_b < 55$ et $119F_b^{2/8}$ sinon.

La formule de Briggs est la plus couramment utilisée

Modèles gaussiens - Surélévation d'un panache

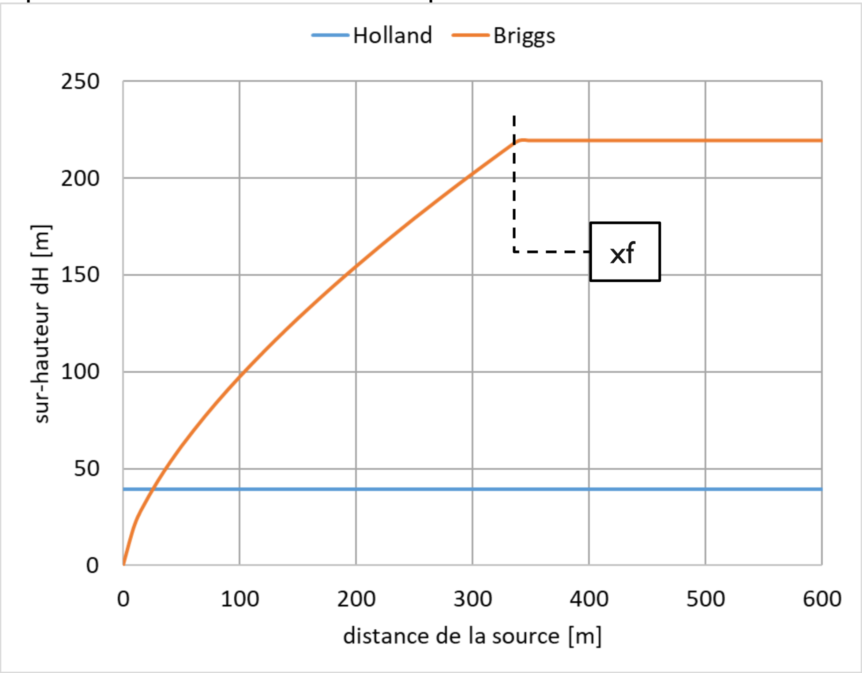
Exemple avec une cheminée avec effet thermique ($T_s = 150°C$) pour ($T_a = 15°C$), de diamètre ($d = 1m$), de vitesse d'éjection ($V_s/V = 10$), vitesse du vent ($V = 1m/s$) et de pression $P = 1013hPa$.

- Formule de Holland

$$\Delta h \sim 40m$$

- Formule de Briggs

$$\Delta h \sim 220m$$
$$x_f \sim 340m$$



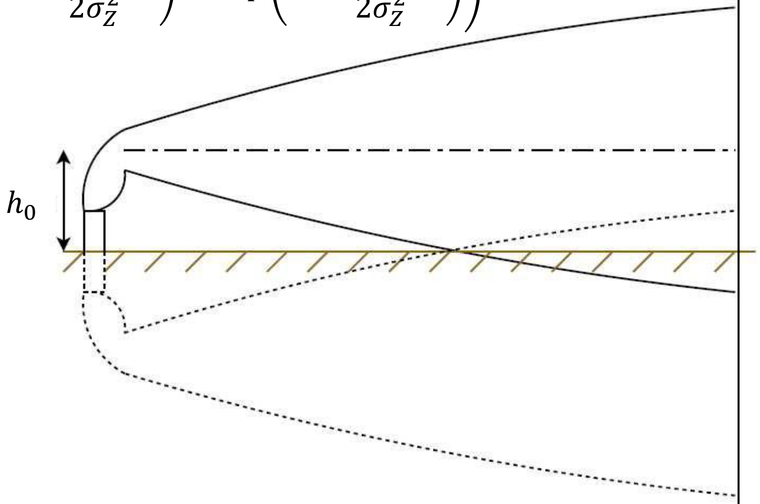
Limitations des formules de sur-hauteur:

- Justification purement empirique
- Absence d'effet de dilution de la contribution de la vitesse et température d'éjection des polluants

Modèles gaussiens - Réflexion sur le sol

- La réflexion d'un panache sur le sol est *représentée* en ajoutant une source virtuelle symétrique de la source réelle par rapport au sol :

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{2\pi v_X \sigma_Y \sigma_Z} \cdot e^{-y^2/2\sigma_Y^2} \cdot \left(\exp\left(-\frac{(z-h_0)^2}{2\sigma_Z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+h_0)^2}{2\sigma_Z^2}\right) \right)$$



La concentration $c(x,y,z=0)$ est 2 fois supérieure à celle sans réflexion du panache !

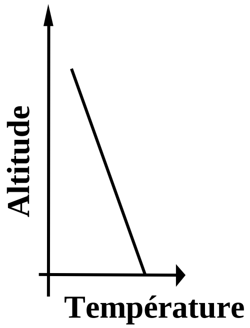
- 68,2% de la masse du panache gaussien est contenu dans $\pm\sigma_Z$ autour du la hauteur d'injection.
- La distance sous le vent à partir de laquelle la réflexion sur le sol se fait ressentir vérifie:

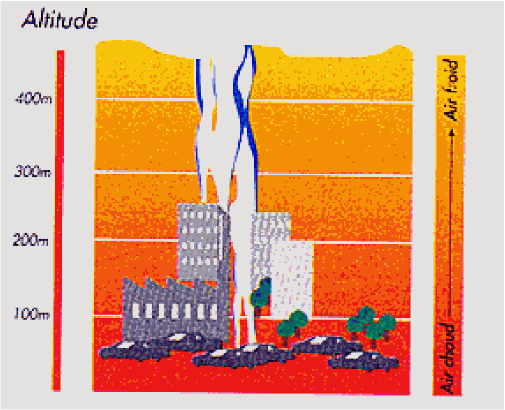
$$\sigma_Z(x) = h_0$$

La stratification de l'atmosphère

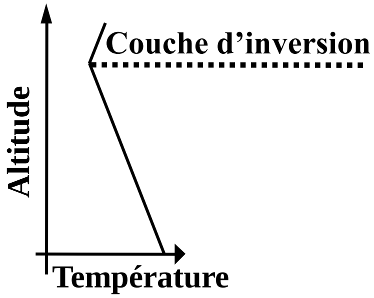
La structure thermique verticale de la troposphère peut varier suivant les jours et les heures :

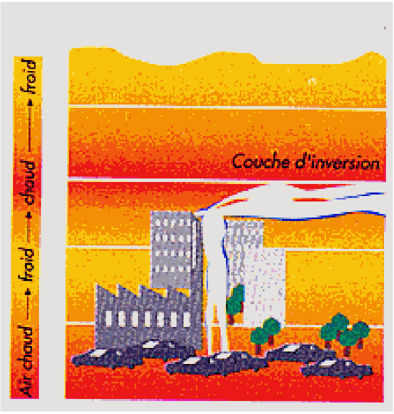
- **En situation normale de dispersion** : la température diminue avec l'altitude. La structure thermique de l'atmosphère ne freine pas la dispersion des polluants.
    - **L'air pollué se disperse vers le haut**
    - *Très favorable pour la dispersion des polluants*





- **En situation d'inversion thermique :** Parfois, à partir d'une certaine hauteur, la **température** peut **augmenter avec l'altitude**. Il y a alors inversion thermique : une couche d'air chaud se trouve au-dessus d'une couche d'air plus froid.
    - **L'air pollué est alors bloqué par cette couche d'air plus chaud qui agit comme un couvercle thermique.**
    - *Très défavorable pour la dispersion des polluants*
- Condition favorable pour une inversion thermique :
    - **nuit** lors d'un refroidissement intense du sol
    - **hiver** à cause des systèmes de chauffage



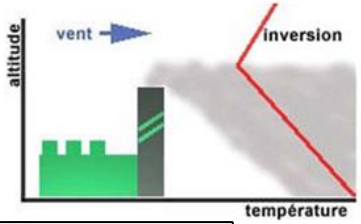


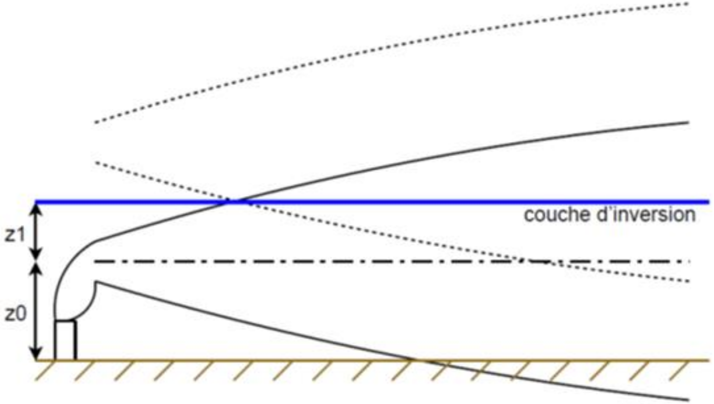
Les polluants restent dans la partie la moins stable (stratifiée)

Modèles gaussiens - Modélisation couche d'inversion

- La réflexion d'un panache sous une couche d'inversion de température est *représentée* en ajoutant une source virtuelle symétrique de la source réelle par rapport à la base de cette couche d'inversion :

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{2\pi v_X \sigma_Y \sigma_Z} \cdot e^{-y^2/2\sigma_Y^2} \cdot \left(\exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{2\sigma_Z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z-z_0-2z_1)^2}{2\sigma_Z^2}\right)\right)$$





Loin de la source, la concentration $c(x,y,z=0)$ est 2 fois supérieure à celle sans inversion !

68,2% de la masse du panache gaussien est contenu dans $\pm\sigma_Z$ autour du la hauteur d'injection. La distance sous le vent à partir de laquelle la contribution de la hauteur d'inversion se fait ressentir au sol vérifie:

$$\sigma_Z(x) = z_0 + 2 \cdot z_1$$

Modèles gaussiens - Modélisation couche d'inversion

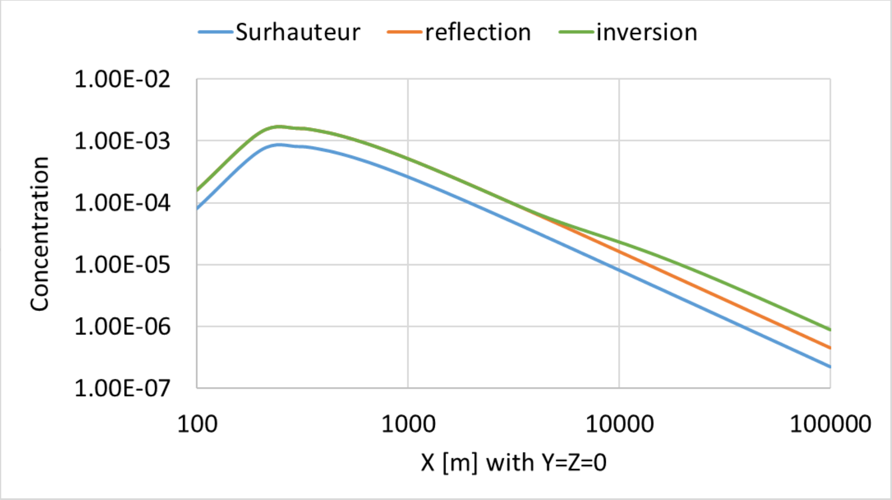
Exemple avec une cheminée sans effet thermique ($T_s = T_a$), de diamètre ($d = 1m$), de vitesse d'éjection ($V_s/V = 10$) et de hauteur $h_0 = 10m$

- Formule de Holland

$$z_0 = h_0 + \Delta h = 25m$$

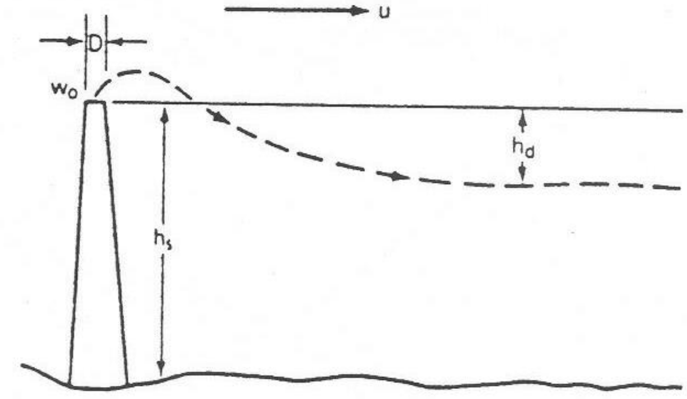
On suppose une atmosphère neutre (classe de Pasquill D) et une hauteur d'inversion à $z_0 + z_1 = 200m$.

$$\sigma_Z(x) = cx^d = z_0/2 + z_1 \Leftrightarrow x = \left(\frac{z_0 + 2 \cdot z_1}{c}\right)^{1/d} \approx 13900m$$



Modèles gaussiens - Rabattement du panache

- **Effet « downwash » - Effet lié au bâti de la cheminée**



$$Si\ \frac{w_0}{u} < 1{,}5\ alors \quad h_d = 2 \times \left(\frac{w_0}{u} - 1{,}5 \right) \times D$$

h_d : sous-hauteur liée à l'effet downwash

w_0 : vitesse des gaz en sortie de cheminée

u : vitesse du vent

D : diamètre interne de la cheminée

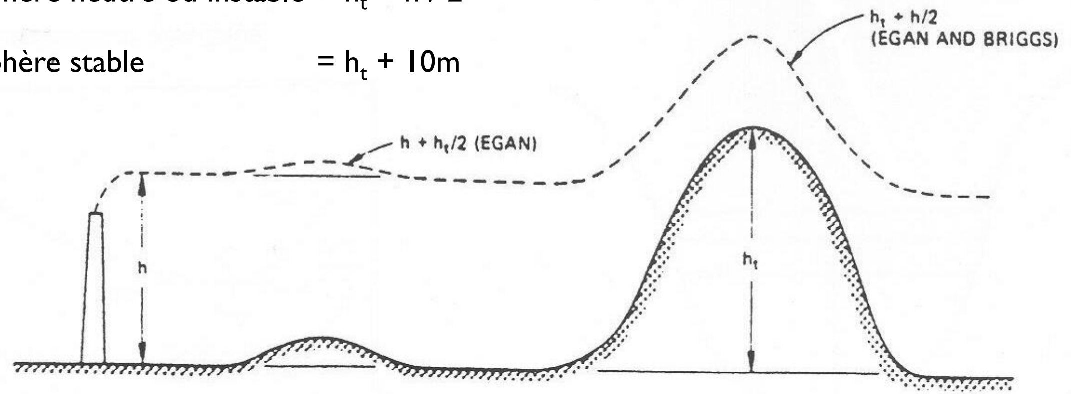
Modèles gaussiens - Topographie

Altitude du panache si h > ht :

- Atmosphère neutre ou instable $= h + h_t / 2$
- Atmosphère stable $= h$

Altitude du panache si h < ht :

- Atmosphère neutre ou instable $= h_t + h / 2$
- Atmosphère stable $= h_t + 10m$

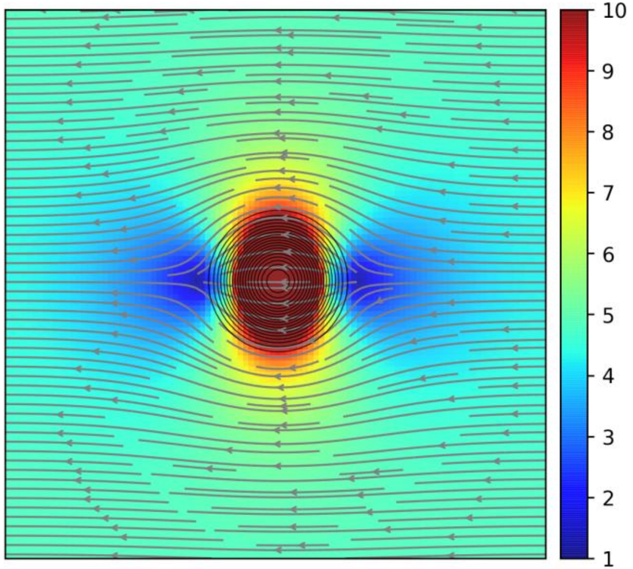


Effet de la stabilité sur le champ de vent

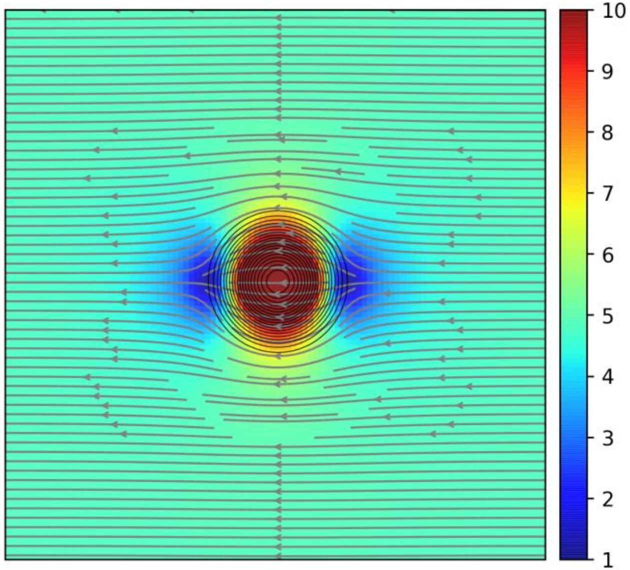
- L'état de l'atm. dans son ensemble est catalogué par classe de stabilité
- Ecoulement autour d'une colline de 30m (domaine 200m*200m) : vent en m/s à 5m du sol

Cas **atmosphère fortement stable ➔ Contournement** de la colline

Stable (6F)



Instable (6A)

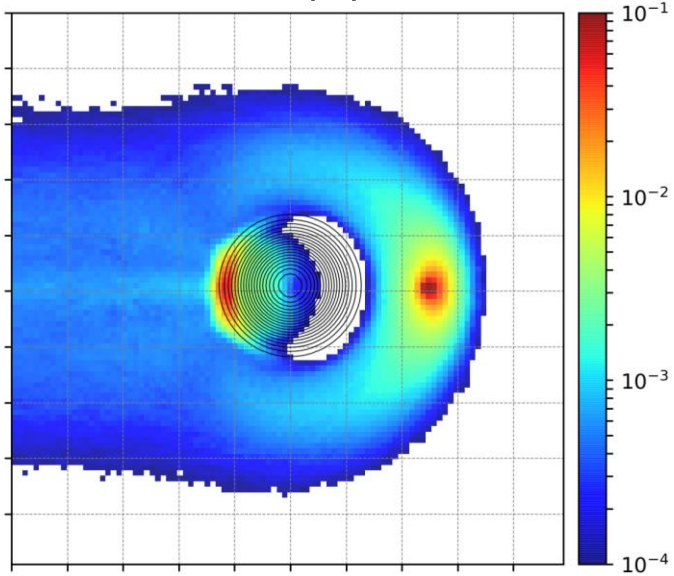


Effet de la stabilité sur la dispersion

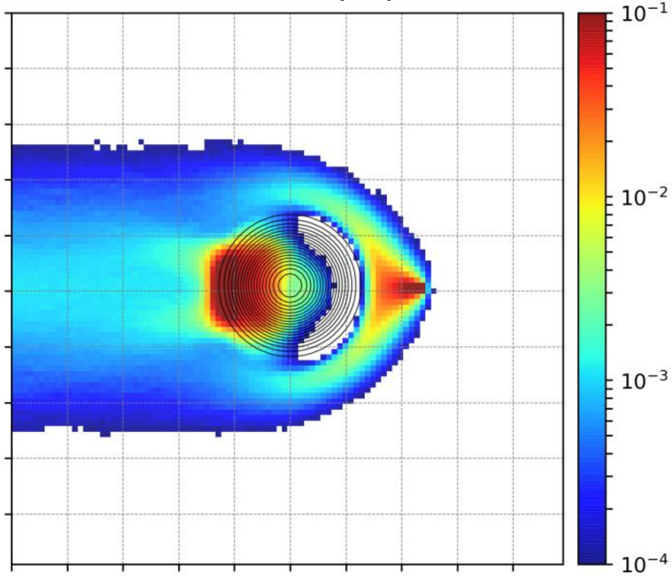
- Ecoulement autour d’une colline de 30m (domaine 200m*200m) : <u>concentration en mcg/m3 au sol</u>

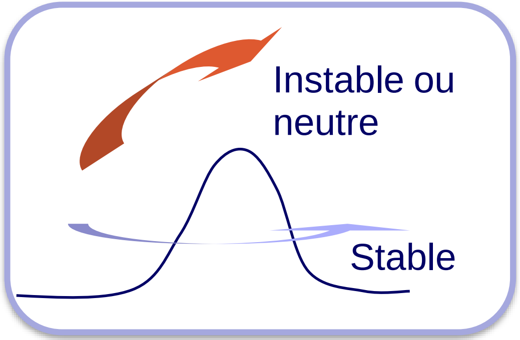
  Cas **atmosphère fortement stable** ➔ **Contournement** de la colline

Stable (6F)



Instable (6A)



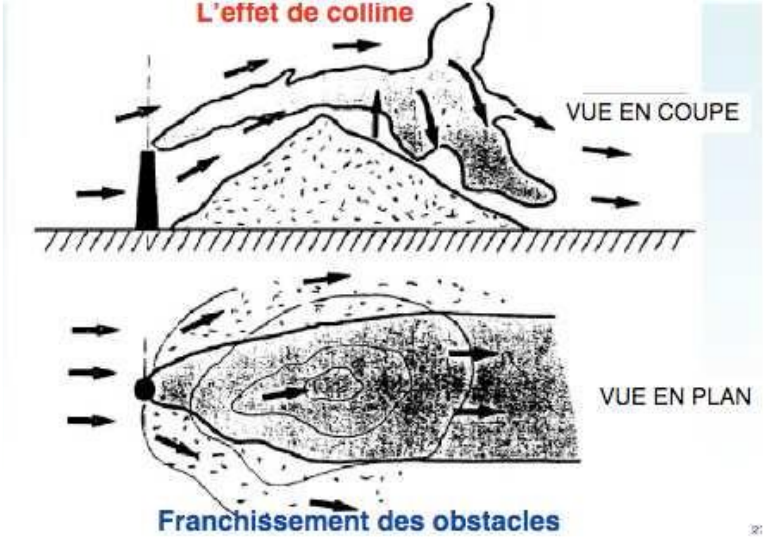


Modèles gaussiens – Effet de colline

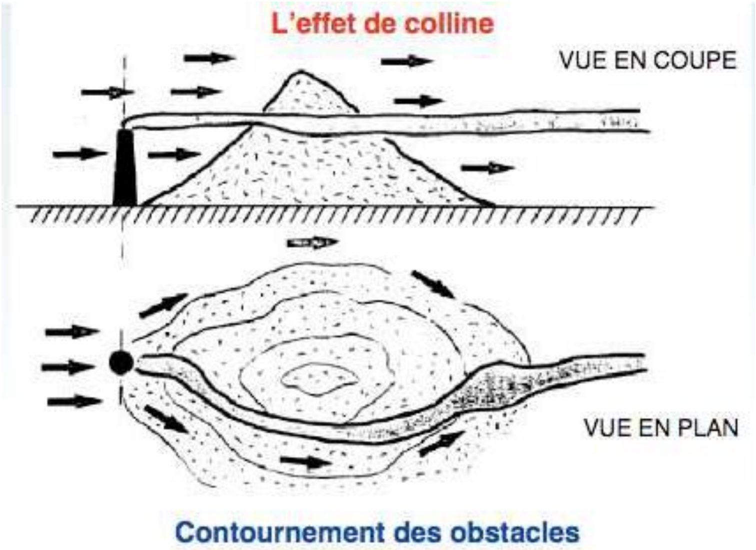
Le nombre de Froude (Fr) est utilisé pour estimer si le panache est transporté ou non par dessus la colline :

$$Fr = v / (N\,h) = \text{force d'inertie} / \text{force de gravité}$$

où v est la vitesse du vent, N la fréquence de Brunt-Väisälä et h la hauteur de l'obstacle.



$Fr > 1$



$Fr < 1$

Modèles gaussiens - Chimie simple

- Si la formulation du panache gaussien s'applique fondamentalement à des espèces inertes chimiquement (non-réactives), il est possible d'ajouter un terme de perte linéaire (c'est-à-dire proportionnel à la concentration du polluant), ou toute autre réaction chimique du premier ordre par rapport au polluant.

$$\left(\frac{\partial c(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}\right)_{\text{chimie}} = -kc(\boldsymbol{x},t)$$

- L'équation de perte linéaire $\partial_t c = -kc$ indique que la concentration peut s'écrire sous la forme :

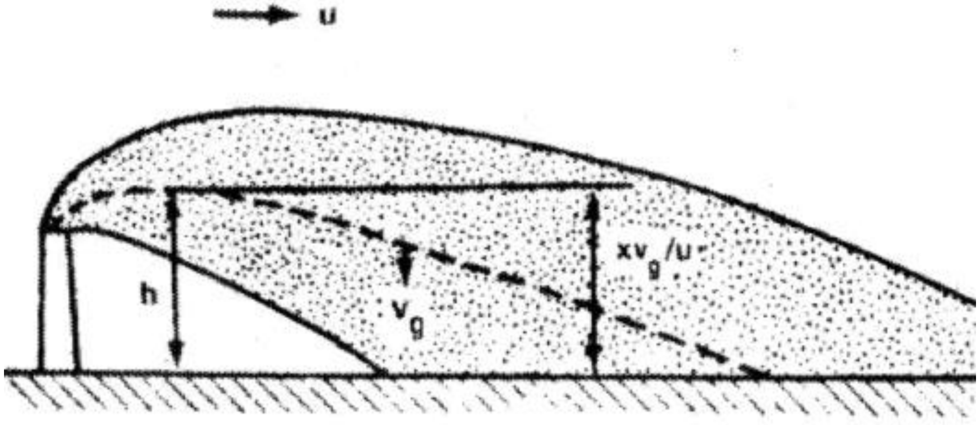
$$c(\vec{\boldsymbol{x}},t) = c_0(\vec{\boldsymbol{x}})e^{-kt}$$

- Par hypothèse du modèle gaussien, le vent est uniforme et stationnaire, c'est-à-dire que le panache avance de *x* en un temps $t = x/v_x$. La concentration peut donc s'écrire :

$$c(\vec{\boldsymbol{x}},t) = c_0(\vec{\boldsymbol{x}})e^{-kx/v_x} = \frac{q}{2\pi v_x \sigma_y \sigma_z} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{(z-z_0)^2}{2\sigma_z^2}} e^{-k\frac{x}{v_x}}$$

Modèles gaussiens - Chute gravitaire

- **Inclinaison de l'axe du panache :** effet gravitaire et vitesse de chute (loi de Stocke)



$$w_g = \frac{d_j^2\, g(\rho_p - \rho_a)}{18\mu}$$

d_j : diamètre des particules de classe j (m)
g : accélération de la pesanteur (m/s²)
ρ_p : masse volumique des poussières (kg/m³)
ρ_a : masse volumique de l'air (kg/m³)
μ : viscosité dynamique de l'air = 1.8 10⁻⁵ kg/m.s

- La loi valable de chute gravitaire est supposée négligeable pour $\mathrm{d} < 10\mu m$ ou $w_g < 1m/s$
- La direction du panache est autrement inclinée vers le sol.

En notant u la vitesse du vent et h_0 initiale, la hauteur $\mathrm{h(x)}$ du panache devient : $$\mathrm{h(x)} = h_0 - \frac{w_g}{u} \cdot x$$

Combinaison de l'advection moyenne du panache $x - x_0 = u \cdot t$ et de la chute gravitaire $z = w_g \cdot t$

Modèles gaussiens - Dépôts sec et humide

- **Le dépôt représente un flux de poussières vers le sol et qui appauvrit le panache.**
- **Dépôt sec des poussières**
  - Calcul du dépôt au sol : $Ds_{j,i-1} = V_{dj}\, C_{j,i-1}$

    Pour l'espèce j :

    $Ds_{j,i-1}$: dépôts au sol j à la distance *(i-1)* [µg/m²/s]

    $V_{d\,j}$: vitesse de dépôts au sol [m/s]

    $C_{j,i-1}$: concentration à la distance *(i-1)* [µg/m³]
  - La vitesse de dépôt permet de tenir compte de la capacité du sol à retenir le polluant. **Si non négligeable, la vitesse de chute gravitaire égale la vitesse de dépôt. La vitesse de dépôt est sinon estimée de manière empirique.**

- **Dépôt humide des poussières**
  - Hypothèse **d'un panache entièrement humide et d'une** décroissance exponentielle de la concentration

$$C(t) = C(0) \cdot e^{-\Lambda t}$$

- $\Lambda = \lambda\, {}^{R}/_{R_1}$: ratio de lessivage
- λ : coefficient de lessivage (s^{-1}), typiquement 10^{-5} s^{-1}
- ${}^{R}/_{R_1}$: rapport du taux de précipitation à une référence (1mm/h)

  - Le dépôt humide totalise la décroissance de la concentration **par** la pluie.

$$\Delta h_{j,i-1} = -\int \partial_t C_{j,i-1}\, \mathbf{d}z = \int \Lambda\, C_{j,i-1}\, \mathbf{d}z = \frac{q\Lambda}{\sqrt{2\pi}\, v_x \sigma_y} e^{-y^2/2\sigma_y^2}$$

Calcul des pertes et dépôts au sol

$$\boldsymbol{Q_i = Q_{i-1} - Ds_{i-1} - Dh_{i-1} - Dr_{i-1}}$$

Q_i : terme-source à la distance i qui s'appauvrit compte tenu des dépôts et de la décroissance radioactive du polluant survenus entre la source et le point de calcul

Ds_{i-1} : **dépôt sec** à la distance i-1

Dh_{i-1} : **dépôt humide** à la distance i-1

Dr_{i-1} : **quantité de polluant perdue par décroissance radioactive** à la distance i-1

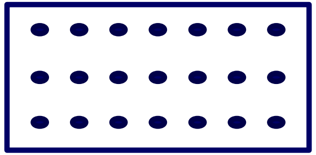
Prise en compte similaire au dépôt humide avec $T_{1/2}$ remplaçant Λ

	Paramètres obligatoires	Définition
Ds	Vitesse de dépôt	la vitesse de dépôt permet de tenir compte de la capacité du sol à retenir le polluant qui se dépose
Dh	Coefficient de lessivage Taux de pluie horaire	proportion de polluant entraîné la pluie pendant une seconde
Dr	Demi-vie	temps qu'il faut au polluant pour voir son activité radioactive diminuer de moitié

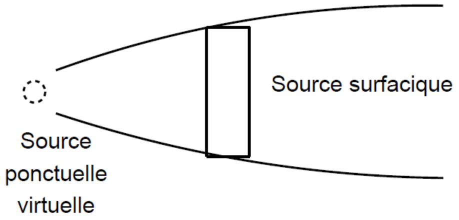
Modèles gaussiens - Sources surfaciques

2 approches existent pour disperser des polluants émis par une source 2D étendue (surfacique):

- discrétiser la source surfacique pour la représenter par de multiples sources ponctuelles
  - ***Avantage* :** la solution de l'équation gaussienne est exacte pour une source ponctuelle (avec les hypothèses associées)
  - ***Inconvénient* :** il est nécessaire d'avoir un grand nombre de sources ponctuelles pour représenter correctement la source surfacique et le temps de calcul peut rapidement devenir prohibitif



- Utiliser une source ponctuelle virtuelle située en amont de la source surfacique
  - ***Avantage* :** une seule source ponctuelle est simulée, donc le temps de calcul est faible
  - ***Inconvénient* :** la source ponctuelle mène à un profil gaussien des concentrations dans la direction correspondant à la largeur de la source, ce qui n'est pas toujours réaliste



Modèles gaussiens - Sources linéiques

3 approches existent pour disperser des polluants émis par une source 1D étendue (linéique):

- discrétiser la source linéique et la représenter par un ensemble de sources ponctuelles
- Utiliser une source ponctuelle virtuelle située en amont de la source linéique
- L'équation de dispersion gaussienne a une solution analytique pour un vent perpendiculaire à la source linéique. Il est possible de modifier la solution analytique pour minimiser l'erreur suivant la direction du vent vis-à-vis de la route.

Modèles gaussiens - Avantages / Limites

Limites du modèle
Météorologie homogène sur le domaine d'étude
Ne permet pas la prise en compte des bâtiments ⇒ **Domaine d'étude entre 1 et 30 km (inadapté pour les études à échelle locale**)
Méthodologie pour la prise en compte du relief **limitée pour les sites de topographie complexe**
Ne permet pas la prise en compte de la réactivité chimique
Pas de représentation 3D du panache : résultats disponibles uniquement au niveau du sol

Avantages
Données **météorologiques réelles** sur plusieurs années ou rose des vents
Temps de calcul très courts ⇒ **Calcul de l'impact à long terme, calculs statistiques** Prise en compte des vents calmes
Multi-sources : ponctuelles, linéiques, surfaciques, volumiques **Multi-espèces** : gaz et particules, odeur, radioactivité
Prise en compte néanmoins de réaction simple du 1er ordre tels que la conversion des NOx en NO/NO_2 pour le trafic
Différents exports des résultats : vers SIG, excel, image, google earth…

Modèles gaussiens – Limites

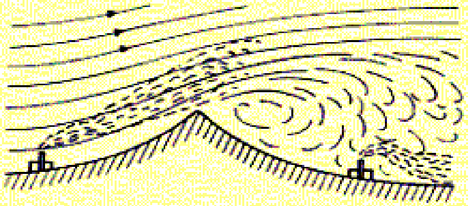


Figure 7 – Cas de l'arête montagneuse (d'après STROM)

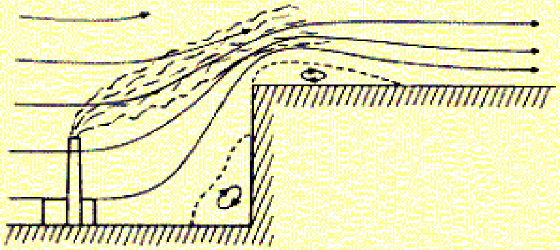


Figure 8 – Cas de la falaise : cheminée au vent. (d'après SCORER)

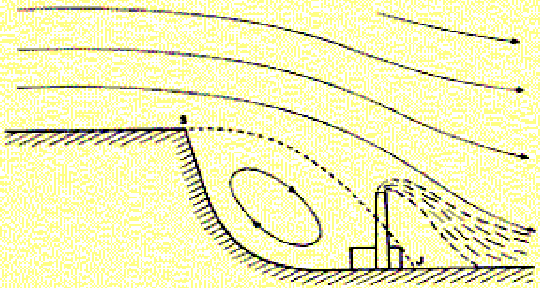


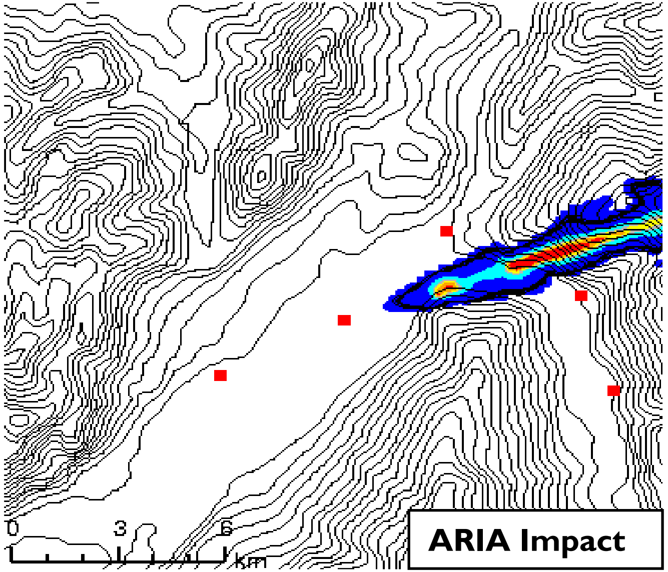
Figure 9 – Cas de la falaise : cheminée sous le vent. (d'après SCORER)

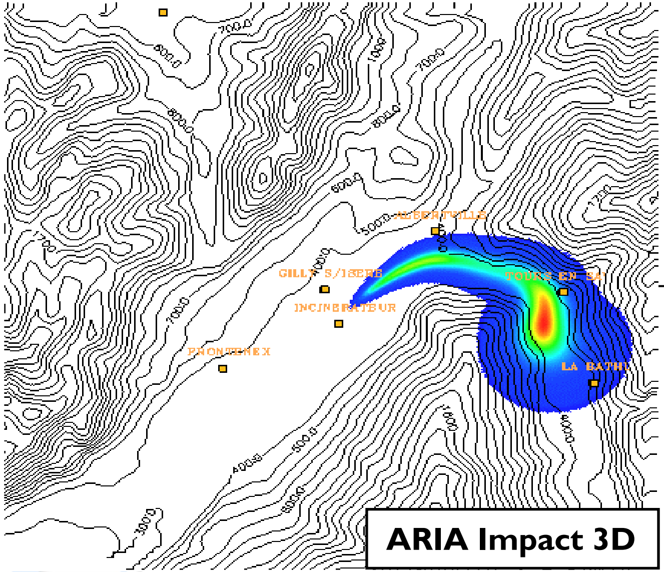
Exemples de limite de ARIA Impact

Le modèle ARIA Impact est un modèle gaussien. Pour qu'un tel modèle soit applicable, il est nécessaire que :

- **la topographie soit peu accentuée**
- **la météorologie de la station météo soit représentative du site**

Les **résultats** sont valables au-delà de 100 mètres de la source environ



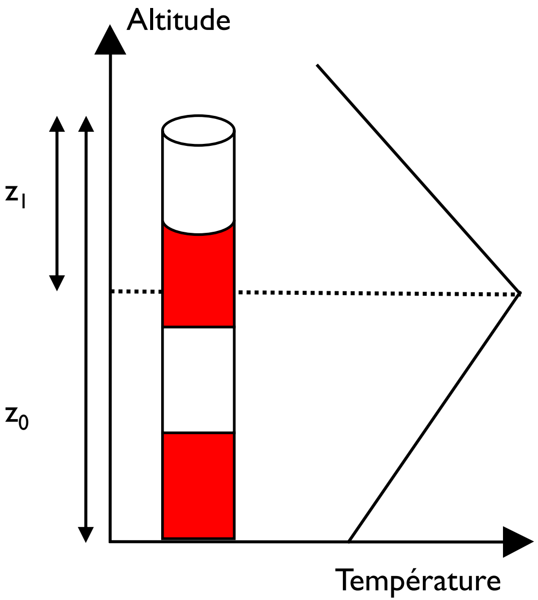


Incinérateur de Gilly-sur-Isère (Albertville)

TD

- **Condition d'inversion thermique** : rupture de gradient thermique
- L'inversion thermique se trouve au-dessous de la hauteur d'injection des polluants dans l'atmosphère (prise en compte de la sur-hauteur).
- **Injection des polluants dans la couche la moins stable (stratifiée)**

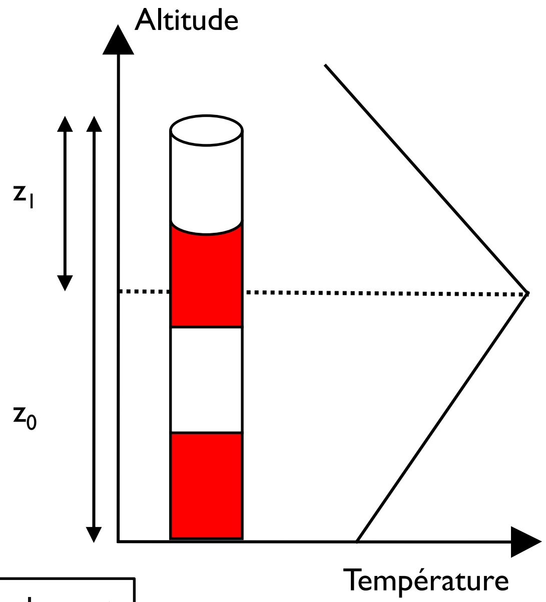
- Comment est modélisé la dispersion d'un panache gaussien ?
- La situation est-elle favorable en terme de qualité de l'air au sol ?



TD

- **Condition d'inversion thermique** : rupture de gradient thermique
- L'inversion thermique se trouve au-dessous de la hauteur d'injection des polluants dans l'atmosphère (prise en compte de la sur-hauteur).
- **Injection des polluants dans la partie la moins stable (stratifiée)**

- Comment est modélisé la dispersion d'un panache gaussien ?
- La situation est-elle favorable en terme de qualité de l'air au sol ?

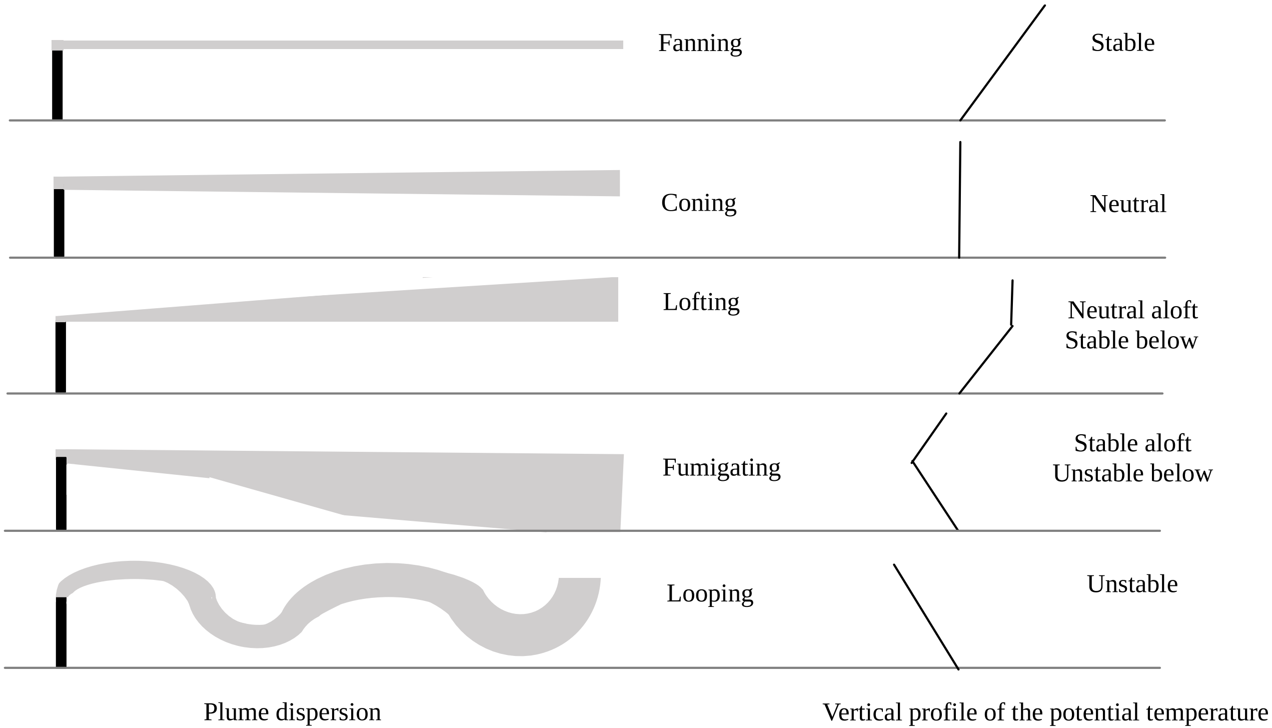


- C'est un cas *extrêmement favorable* puisque la plus grande partie du panache est diffusée verticalement vers le haut, la diffusion vers le sol étant bloquée par la couche d'inversion.

- La réflexion d'un panache sous une couche d'inversion de température est *représentée* en ajoutant une source virtuelle symétrique de la source réelle par rapport à la base de cette couche d'inversion :

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{2\pi v_X \sigma_Y \sigma_Z} \cdot e^{-y^2/2\sigma_Y^2} \cdot \left(\exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{2\sigma_Z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z-z_0+2z_1)^2}{2\sigma_Z^2}\right) \right)$$

TD



Fanning
Stable
Coning
Neutral
Lofting
Neutral aloft
Stable below
Fumigating
Stable aloft
Unstable below
Looping
Unstable
Plume dispersion
Vertical profile of the potential temperature

TD

Chute gravitaire:

1) Pour des poussières d'une densité $\rho_p = 2\ 10^4$ kg/m^{3,} trouver le diamètre d_0 à partir duquel w_g [d > d0] > 1m/s .

2) Faire de même des gouttelettes d'aérosols de densité $\rho_p = 20$ kg/m^3.

TD

Chute gravitaire:

1) Pour des poussières d'une densité ρ_p = 2 10^4 kg/m^3, trouver le diamètre d_0 à partir duquel w_g [d > d0] > 1m/s .

2) Faire de même des gouttelettes d'aérosols de densité ρ_p = 20 kg/m^3.

- Le diamètre peut s'exprimer en fonction de la vitesse de chute. Pour $v_0 = 1m/s$ la vitesse de dépôt limite, le diamètre d_0 des particules vérifie :

$$d_0 = \sqrt{\frac{18\,\mu v_0}{g(\rho_P - \rho_{air})}} \sim 40.6\mu m$$

- Pour des poussières de densité ρ_p et de diamètre 10um, la vitesse de chute est de 6 cm/s !
- Pour des aérosols de densité ρ_a , le diamètre limite est :

$$d_0 = \sqrt{\frac{18\,\mu v_0}{g(\rho_P - \rho_{air})}} \sim 1330\mu m = 1.33mm$$

- La dispersion d'aérosol se fera majoritairement sans effet de chute gravitaire !

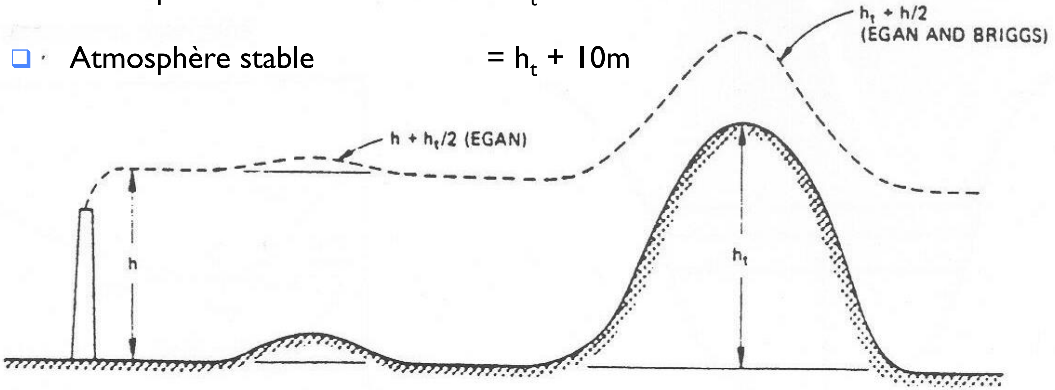
TD

Altitude du panache si h > ht :

- Atmosphère neutre ou instable $= h + h_t / 2$
- Atmosphère stable $= h$

Altitude du panache si h < ht :

- Atmosphère neutre ou instable $= h_t + h / 2$
- Atmosphère stable $= h_t + 10m$



- Dans les différentes configurations, calculer la hauteur au sol du panache au sommet des colline et de la montagne.
- Discuter l'impact sur la concentration au sol.

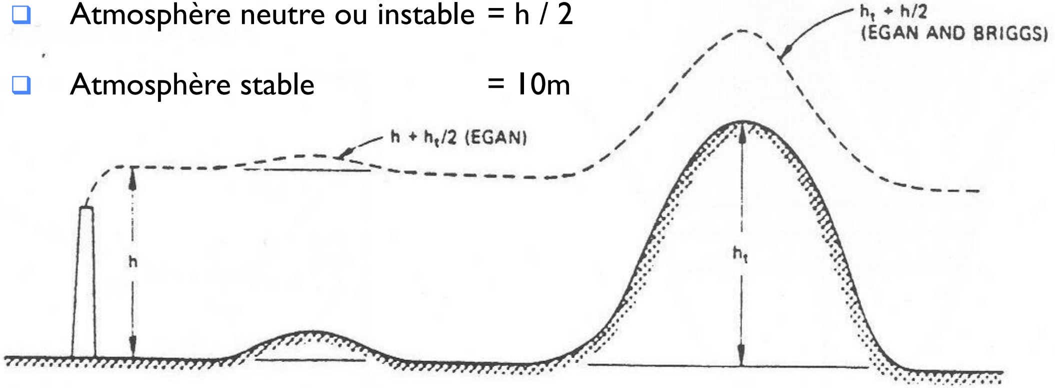
- Dans les différentes configurations, calculer la hauteur du panache au sommet des colline et de la montagne. Discuter l'impact sur la concentration au sol.

Hauteur du panache si h > ht :

- Atmosphère neutre ou instable = h - h_t / 2
- Atmosphère stable = h - h_t

Hauteur du panache si h < ht :

- Atmosphère neutre ou instable = h / 2
- Atmosphère stable = 10m



$$c(y, z=0) = \frac{q}{\pi v_x \sigma_y \sigma_z} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{z_0^2}{2\sigma_z^2}}$$

$$e^{-\frac{z_0^2}{2\sigma_z^2}} > e^{-\frac{h^2}{2\sigma_z^2}}$$

La topographie réduit la hauteur du panache, ce qui a pour conséquence d'augmenter la concentration au sol des polluants