

---

# Cours SGE

## « Modélisation de la pollution atmosphérique »

### Dispersion atmosphérique

Christian Seigneur

Cerea

# Plan

---

- Dispersion lagrangienne et eulérienne
- Modèles gaussiens
- Modèles lagrangiens
- Modèles eulériens
- Modèles hybrides

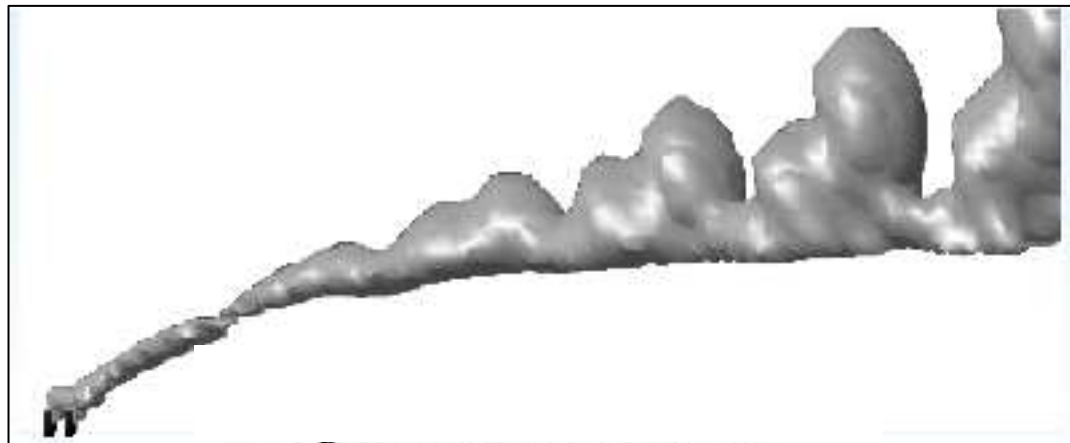
# Dispersion atmosphérique

---

La dispersion est due à la turbulence car la diffusion moléculaire est trop lente aux échelles de temps concernant la pollution atmosphérique

Coefficient de diffusion moléculaire :  $\sim 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

Coefficient de diffusion turbulente :  $\sim 1 \text{ m}^2/\text{s}$  (stable) à  $\sim 100 \text{ m}^2/\text{s}$  (instable)



# Représentations lagrangienne et eulérienne

---

La représentation lagrangienne consiste à suivre le mouvement de l'objet par rapport au mouvement moyen du système en mouvement



Déplacement du voyageur par rapport au siège

La représentation eulérienne consiste à suivre le mouvement de l'objet par rapport à un repère fixe



Déplacement du voyageur par rapport aux gares

# Représentations lagrangienne et eulérienne

---

La représentation lagrangienne de la dispersion atmosphérique consiste à suivre le mouvement des polluants (particules, molécules) par rapport au mouvement moyen de la masse d'air



Déplacement des polluants par rapport au centre du panache

La représentation eulérienne consiste à suivre le mouvement des polluants par rapport à un repère fixe



Déplacement des polluants par rapport à la station de mesure

# Représentation eulérienne

---

Représentation eulérienne de la dispersion:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \underbrace{v_x \frac{\partial C_i}{\partial x} + v_y \frac{\partial C_i}{\partial y} + v_z \frac{\partial C_i}{\partial z}}_{\text{advection}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \langle v_x' C_i' \rangle - \frac{\partial}{\partial y} \langle v_y' C_i' \rangle - \frac{\partial}{\partial z} \langle v_z' C_i' \rangle}_{\text{diffusion turbulente}} + \underbrace{q \delta(x) \delta(y) \delta(z)}_{\text{émission}}$$

On considère :

- un vent moyen constant
- une turbulence homogène dans l'espace et stationnaire dans le temps

# Équations de Navier-Stokes moyennées (RANS)

---

La diffusion moléculaire est fondamentalement représentée par la loi de Fick :

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = -D_g \text{grad}(c(\mathbf{x}, t))$$

où  $\mathbf{F}$  est le flux de masse,  $D_g$  est le coefficient de diffusion moléculaire,  $c$  est la concentration de la substance qui diffuse et  $\text{grad}$  est le gradient spatial (e.g.,  $dc/dx$ )

Par analogie, on représente le terme correspondant à la turbulence ainsi :

$$\langle \mathbf{v}_x' c' \rangle = -\mathbf{K}(\mathbf{x}, t) \text{grad}(c(\mathbf{x}, t))$$

C'est-à-dire, on fait l'hypothèse que le flux de masse dû à la diffusion turbulente (dispersion) est proportionnel au gradient de la concentration massique.

On introduit alors le coefficient de diffusion turbulente  $\mathbf{K}$  (l'équivalent de  $D_g$ ).

# Représentation eulérienne

---

Représentation eulérienne de la dispersion:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \underbrace{v_x \frac{\partial C_i}{\partial x} + v_y \frac{\partial C_i}{\partial y} + v_z \frac{\partial C_i}{\partial z}}_{\text{advection}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left( K_{xx} \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{yy} \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{zz} \frac{\partial C_i}{\partial z} \right)}_{\text{diffusion}} + q \delta(x) \delta(y) \delta(z)$$

émission

On considère :

- un vent moyen constant
- une turbulence homogène dans l'espace et stationnaire dans le temps



# Représentation eulérienne

---

Équation eulérienne de la dispersion à l'état stationnaire :

$$v_x \frac{\partial c(\mathbf{x})}{\partial x} = K_{yy} \frac{\partial^2 c(\mathbf{x})}{\partial y^2} + K_{zz} \frac{\partial^2 c(\mathbf{x})}{\partial z^2} + q \delta(x) \delta(y) \delta(z)$$

$$c(0, y, z) = 0$$

$$c(x, y, z) = 0 \quad y, z \rightarrow \pm \infty$$

Solution:

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

# Représentation lagrangienne

---

Distribution gaussienne autour du centre du panache : on fait l'hypothèse qu'une distribution gaussienne est typique d'un processus stochastique

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 : conservation de la masse

Solution : 
$$c(\mathbf{x}) = \frac{q}{2\pi v_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

# Écart-type $\sigma$

## Représentation lagrangienne

---

Les écarts-types ( $\sigma$ ) de la distribution doivent être estimés.

Le théorème de Taylor (1922) montre que près de la source  
( $x \Rightarrow 0$ ) :

$$\sigma_y^2 = v_x^2 t^2$$

C'est-à-dire, les écarts-types sont proportionnels au temps, donc à la distance à proximité de la source

# Écart-type $\sigma$

## Représentations eulérienne et lagrangienne

---

Loin de la source, la représentation eulérienne est valable et si l'on compare les deux solutions des équations eulérienne et lagrangienne, on voit que :

$$\sigma_j^2 = 2K_{jj}t$$

Donc l'écart-type de la distribution gaussienne  $\sigma$  (coefficient de dispersion lagrangien) évolue alors comme la racine carré du temps écoulé depuis l'émission, c'est-à-dire comme la racine carré de la distance  $x$  depuis la source (puisque l'on a fait l'hypothèse d'un vent constant) :

$$x = v t$$

# Écart-type $\sigma$

## Évolution de la source vers l'aval

---

Près de la source, la théorie lagrangienne mène à la relation :

$$\sigma = v t$$

Loin de la source, la représentation eulérienne mène à :

$$\sigma = (2 K t)^{1/2}$$

Donc l'écart-type de la distribution gaussienne  $\sigma$  (coefficient de dispersion lagrangien) évolue plus rapidement près de la source qu'en aval loin de la source

# Écart-type $\sigma$

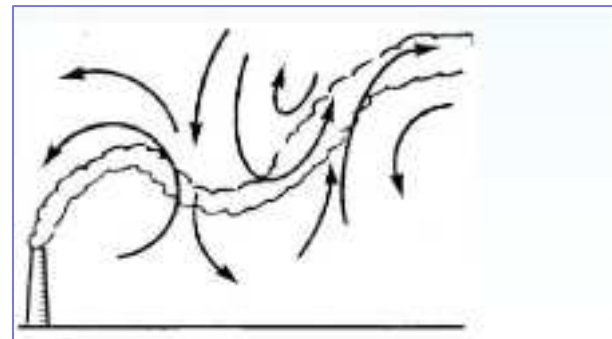
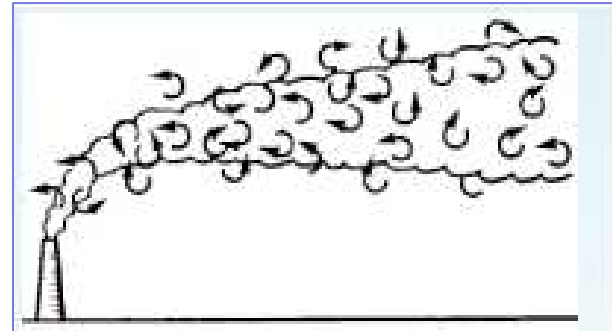
## Évolution de la source vers l'aval

---

Près de la source, seuls les tourbillons plus petits que le panache vont disperser le panache : dispersion relative

Les tourbillon plus grands que le panache vont le déplacer

Déplacement + dispersion relative : dispersion absolue



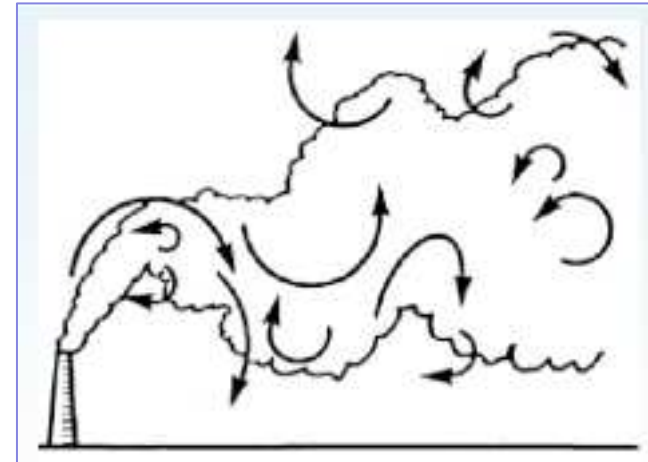
# Écart-type $\sigma$

## Évolution de la source vers l'aval

---

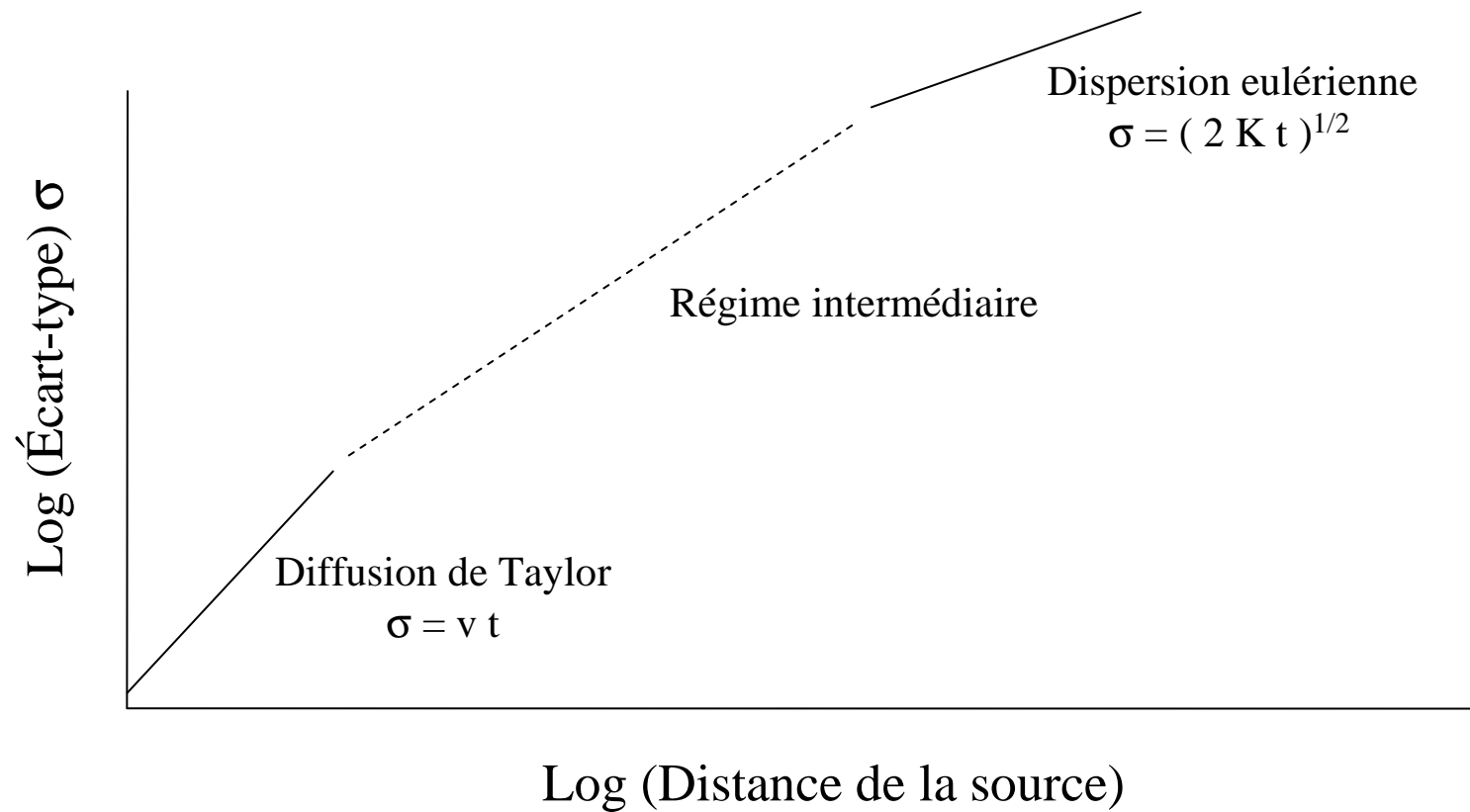
Plus le panache grossit, plus il y a de tourbillons qui sont de taille inférieure à la taille du panache, donc plus la dispersion du panache est importante

Une fois que la taille du panache englobe la plupart des tourbillons, la dispersion relative est égale à la dispersion absolue et la dispersion lagrangienne est alors équivalente à la dispersion eulérienne



# Écart-type $\sigma$

## Évolution de la source vers l'aval

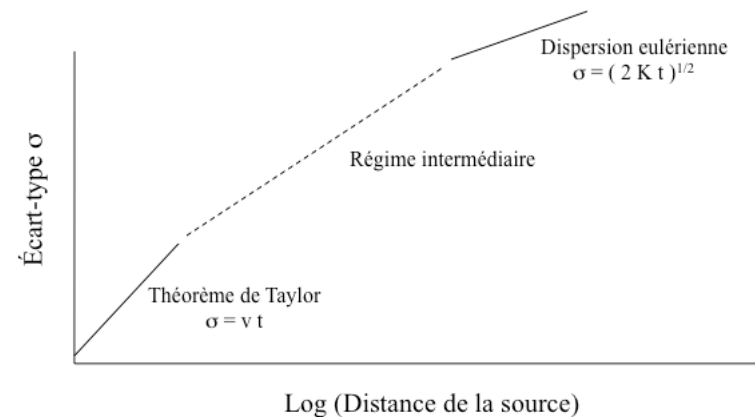




# Écart-type $\sigma$

## Évolution de la source vers l'aval

Comme l'atmosphère n'est pas un milieu stationnaire et homogène, l'évolution des écarts-types peut différer de manière significative de cette représentation théorique.



Néanmoins, il est important de noter le passage de la dispersion lagrangienne (qui dépend de la distance de la source et est utilisée dans les modèles de proximité) à une dispersion eulérienne (qui est indépendante de la distance de la source et est utilisée dans les modèles urbains et régionaux)

# Modèles gaussiens

---

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

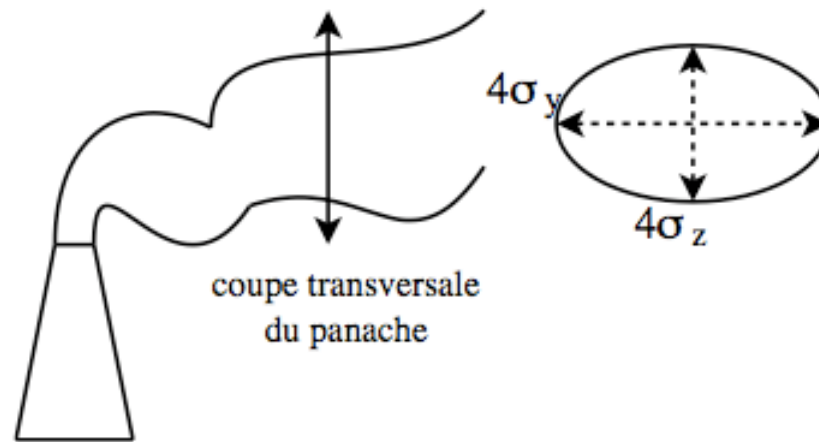
On distingue :

- les modèles de panache stationnaires\*
- les modèles de bouffées (qui peuvent être non-stationnaires)

\* Stationnaire : les conditions des variables d'entrée (émission, météorologie) sont constantes dans le temps (généralement avec un pas de temps horaire) et, pour la météorologie, l'espace.

# Modèle de panache gaussien

---



Les concentrations dans le panache sont représentées par l'équation suivante :

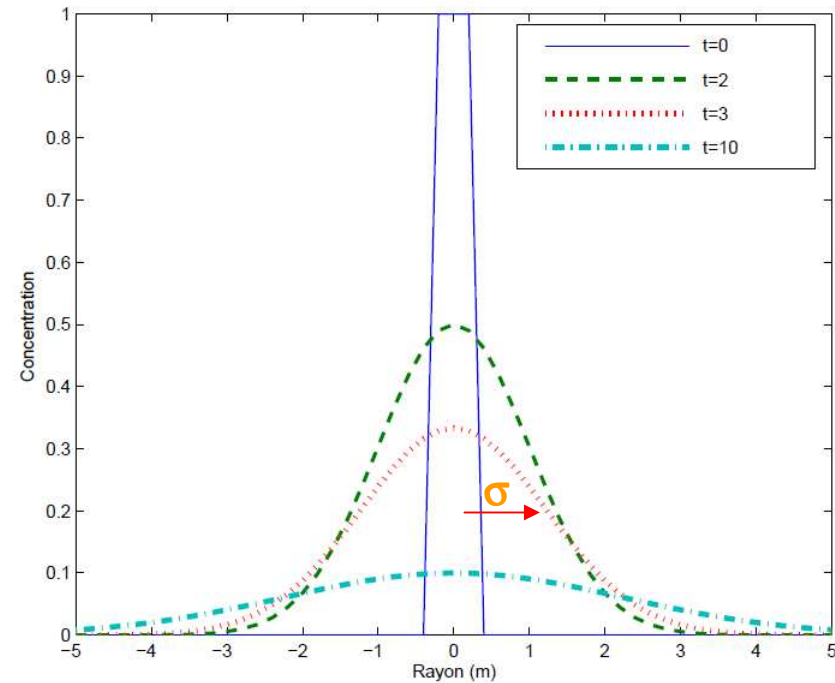
$$c(\mathbf{x}) = \frac{q}{2\pi v_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

L'ellipse  $(4\sigma_y, 4\sigma_z)$  contient 95,4% de la masse du panache gaussien ;  
l'ellipse  $(2\sigma_y, 2\sigma_z)$  contient 68,2% de la masse du panache gaussien

# Modèle de panache gaussien

Les coefficients de dispersion augmentent avec le temps (la distance de la source) ; ce sont les écarts types de la distribution gaussienne qui évoluent donc ainsi :

$$c(\mathbf{x}) = \frac{q}{2\pi V_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right)$$



# Modèle de panache gaussien

## Prise en compte de la hauteur initiale

---

La prise en compte de la hauteur initiale du panache est faite simplement par changement de coordonnée verticale :  $z \Rightarrow z - z_0$

$$c(\mathbf{x}) = \frac{q}{2\pi v_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

Cette hauteur  $z_0$  est la hauteur de la source (par exemple, cheminée) + la hauteur de surélévation du panache par rapport à la source

# Modèle de panache gaussien

## Effet de la stabilité atmosphérique

---

La stabilité atmosphérique influence la dispersion du panache :

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

# Modèle de panache gaussien

## Caractérisation de la stabilité atmosphérique

---

Des paramètres météorologiques permettent de caractériser la stabilité atmosphérique : longueur de Monin-Obukhov ( $L$ ), nombre de Richardson ( $Ri_b$ ,  $Ri_g$ ).

$L$  est proportionnel à la hauteur à laquelle la turbulence thermique (flottabilité) commence à dominer la turbulence mécanique (cisaillement de vent).

$L$  large et négatif : conditions instables (turbulence mécanique)

$L$  petit et négatif : conditions instables (turbulence thermique, convection)

$L$  positif : conditions stables (atmosphère stratifiée)

# Modèle de panache gaussien

## Longueur de Monin-Obukhov

---

$$L = ( u_*^3 \theta_v ) / ( k g H / ( \rho C_p ) )$$

où  $u_*$  : vitesse de friction =  $(\overline{u' w'})_s^{1/2}$

$\theta_v$  : température virtuelle potentielle moyenne

$k$  : constante de Boltzman

$g$  : constante de gravité

$H$  : flux de chaleur sensible

$\rho$  : masse volumique de l'air

$C_p$  : capacité thermique massique de l'air

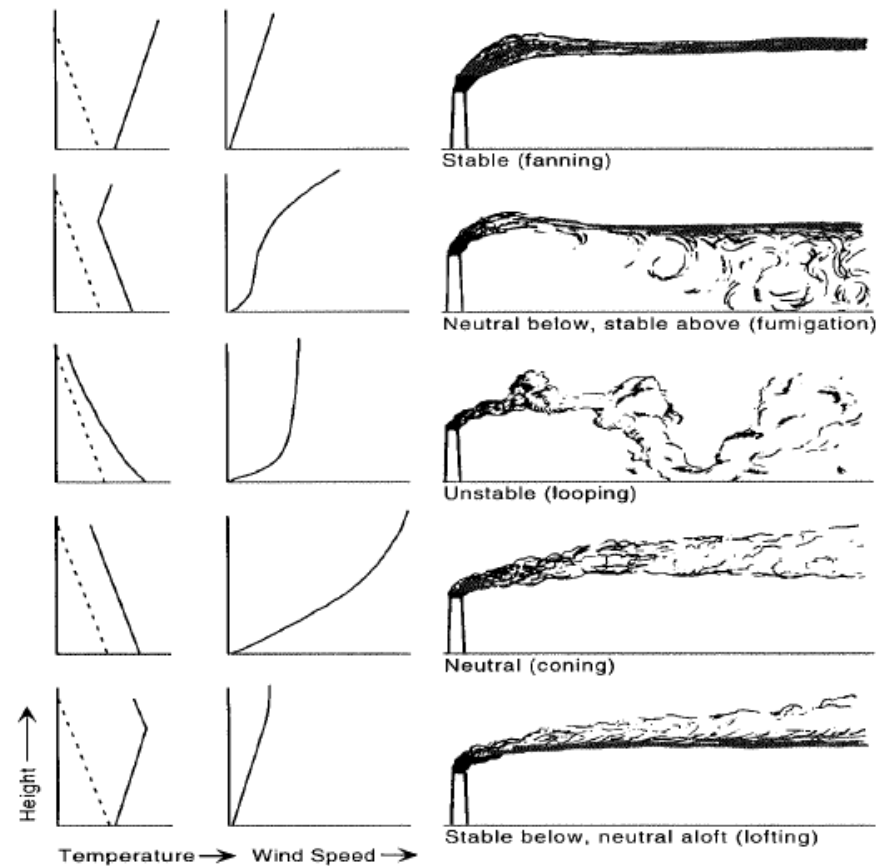


# Modèle de panache gaussien

## Effet de la stabilité atmosphérique

La stabilité atmosphérique influence la dispersion du panache :

la dispersion verticale peut être caractérisée qualitativement selon les profils de température verticaux

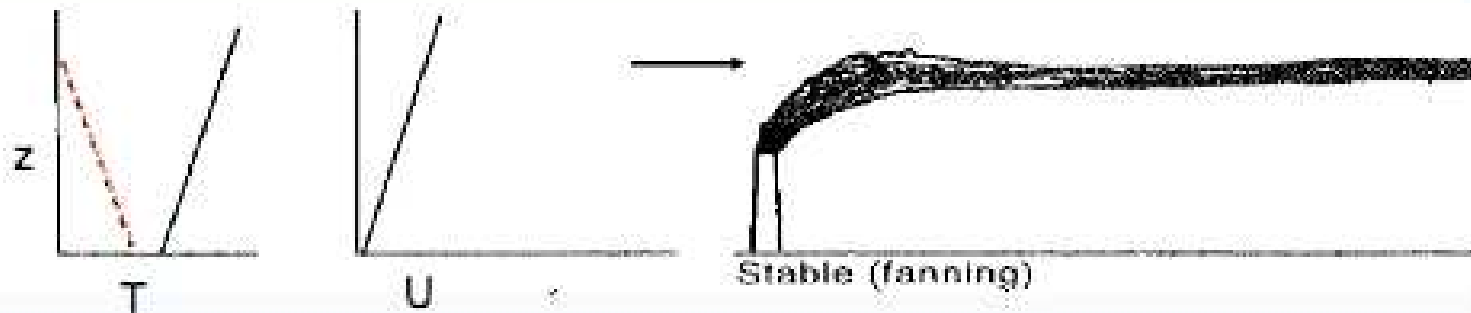


# Modèle de panache gaussien

## Effet de la stabilité atmosphérique

Conditions de **forte stabilité** (vent modéré)

$$Ri > 0 \quad \frac{\partial T}{\partial z} > -1^\circ\text{C} / 100\text{m} = -\Gamma_{ad}$$



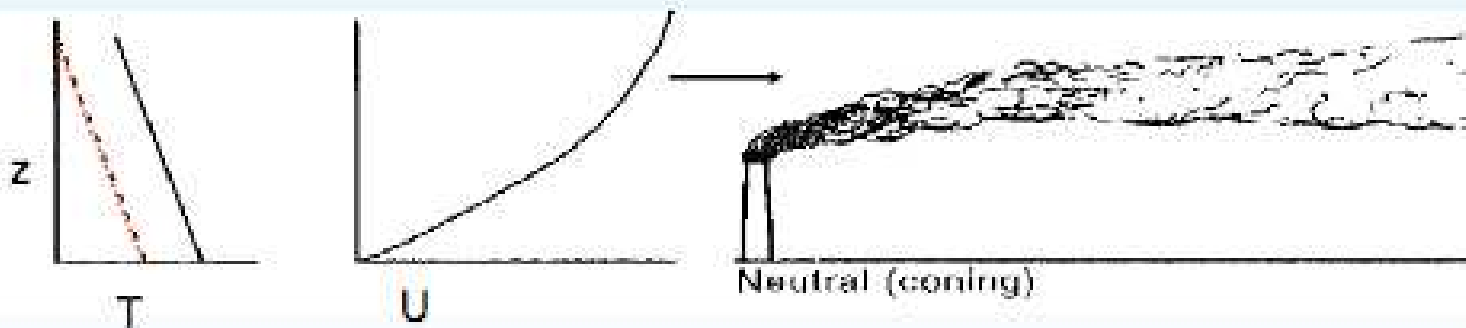
- Configuration nuit claire **ou** peu après le coucher du soleil **ou** peu après le lever du soleil
- Couche limite atmosphérique stable
- Les transferts turbulents sont beaucoup plus faibles dans la direction verticale que dans la direction transversale
- Le panache peut être animé de fluctuations latérales de grande période

# Modèle de panache gaussien

## Effet de la stabilité atmosphérique

Conditions de **stabilité** neutre (vent fort)

$$Ri \approx 0 \quad \frac{\partial T}{\partial z} \approx -\Gamma_{ad}$$



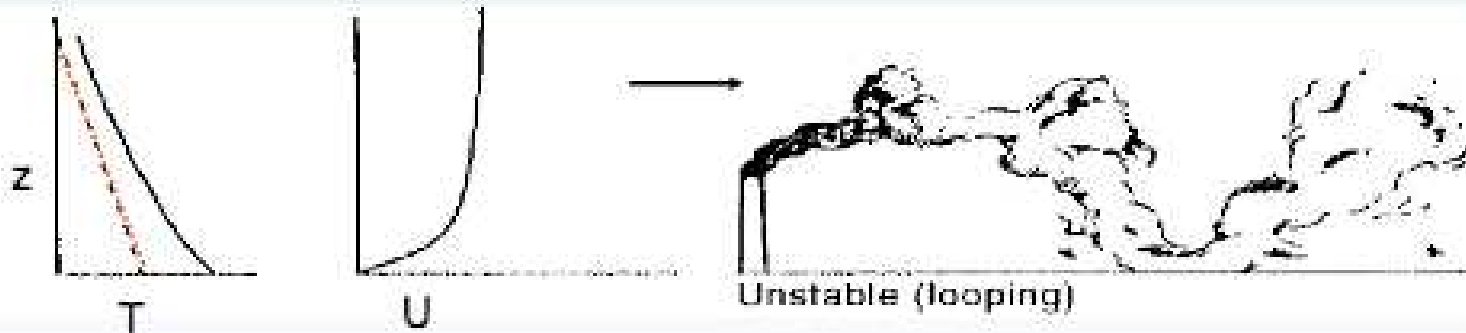
- Couverture nuageuse importante
- Couche limite atmosphérique neutre
- Turbulence d'origine dynamique

# Modèle de panache gaussien

## Effet de la stabilité atmosphérique

Conditions de **forte instabilité** (vent faible)

$$Ri < 0 \quad \frac{\partial T}{\partial z} < -1^\circ\text{C}/100\text{m} = -\Gamma_{\text{inf}}$$

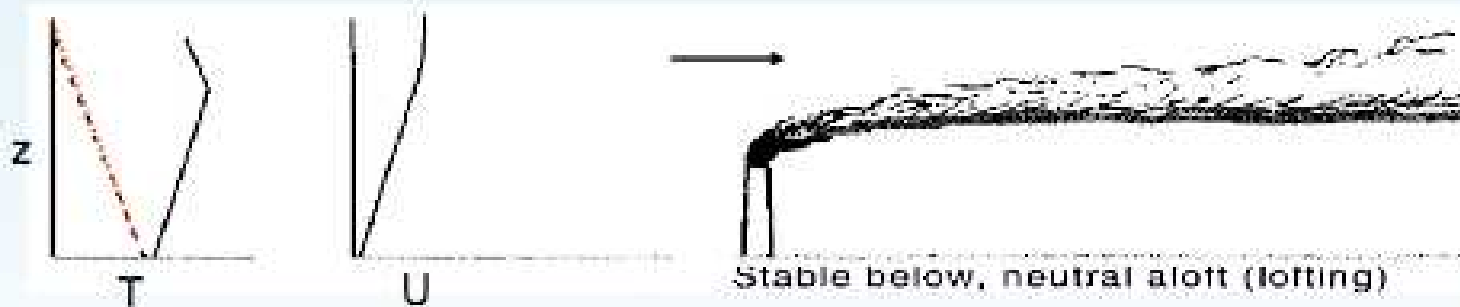


- Panache en configuration ciel clair – rayonnement solaire intense
- Couche limite atmosphérique instable
- Polluants dispersés rapidement

# Modèle de panache gaussien

## Effet de la stabilité atmosphérique

Conditions d'**inversion au-dessous** du sommet de la cheminée et **instabilité (ou neutralité) au-dessus**

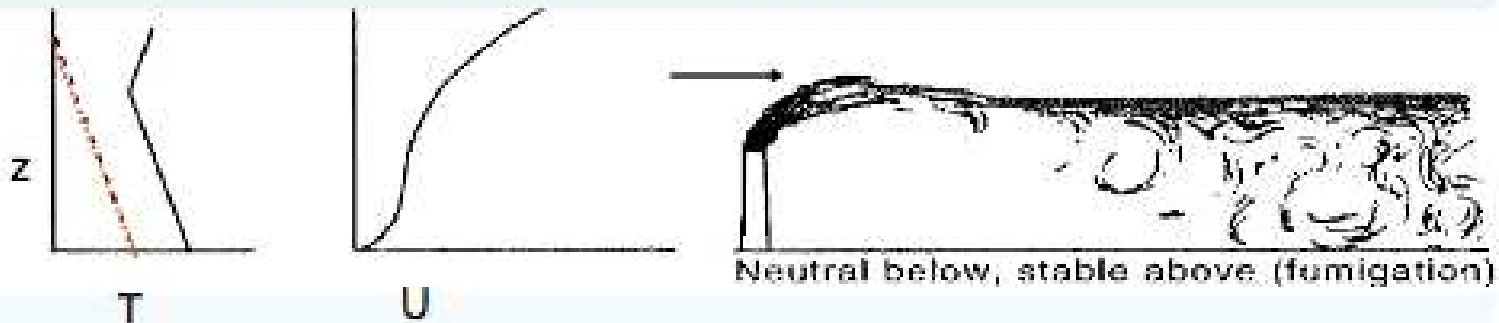


- Couche stable à partir du sol qui s'observe souvent vers la fin de l'après-midi
- C'est un cas **très favorable** puisque la plus grande partie du panache est diffusée verticalement vers le haut, la diffusion vers le sol étant bloquée par la couche d'inversion

# Modèle de panache gaussien

## Effet de la stabilité atmosphérique

Conditions d'**inversion au-dessus** du sommet de la cheminée et d'**instabilité (ou neutralité) au-dessous**



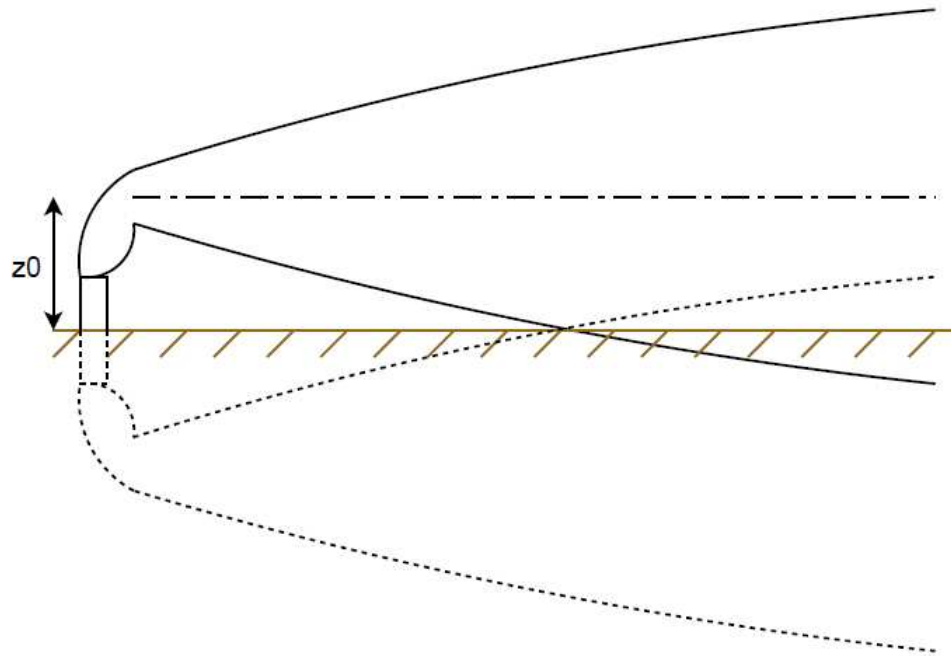
- Couche instable à partir du sol qui s'observe souvent dans la matinée
- Lorsque la limite supérieure de la couche instable atteint le niveau du panache, les parties les plus basses sont diffusées vers le sol assez rapidement alors que la partie supérieure reste intacte
- A la limite, tout le panache sera situé dans la couche instable : c'est le cas du **trapping** où la limite inférieure de la couche stable joue le rôle d'un plafond fictif
- La couche d'inversion bloque les phénomènes d'ascendance
- Ces conditions sont **très défavorables** : condition de **fumigation**

# Modèle de panache gaussien

## Réflexion sur le sol

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

$$c(\mathbf{x}) = \frac{q}{2\pi V_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left( \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z + z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right)$$

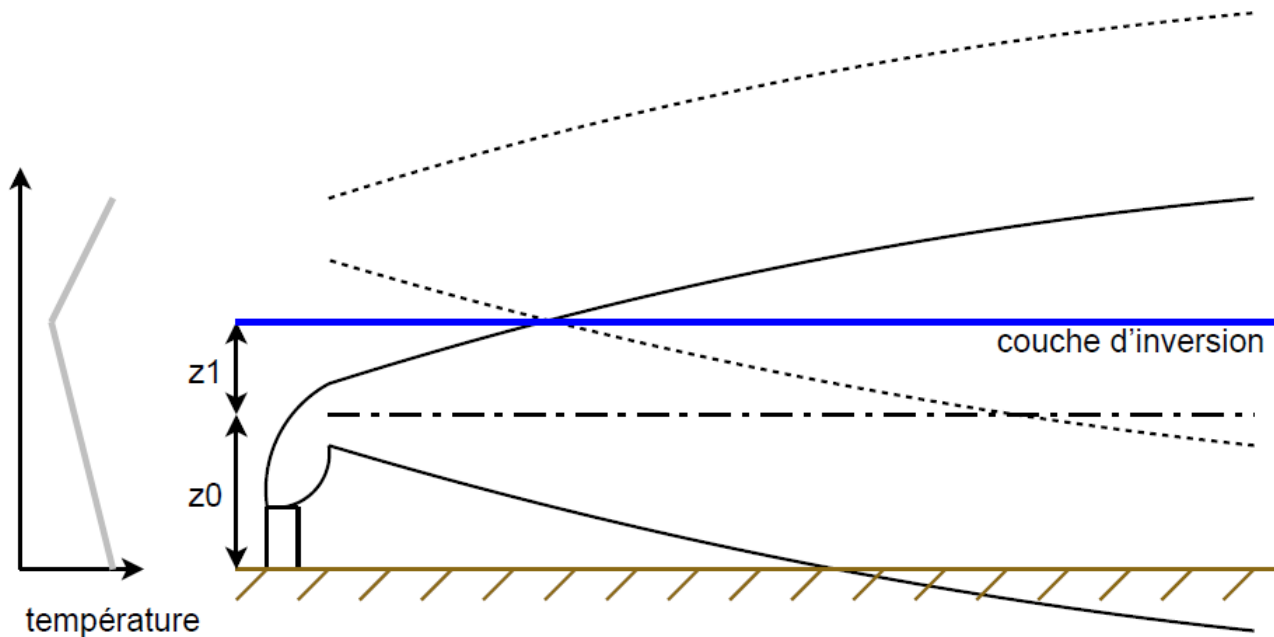


# Modèle de panache gaussien

## Réflexion sous une couche d'inversion de température

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

$$c(\mathbf{x}) = \frac{q}{2\pi V_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left( \exp\left(-\frac{(z-z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z-z_0-2z_1)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right)$$





# Modèle de panache gaussien

## Stabilité atmosphérique : Classification de Pasquill

- La stabilité atmosphérique intervient dans les processus turbulents
- Nécessité d'utiliser des tables
- Classes de Pasquill : méthode indirecte à partir des valeurs de vitesse du vent, du rayonnement solaire et de la nébulosité

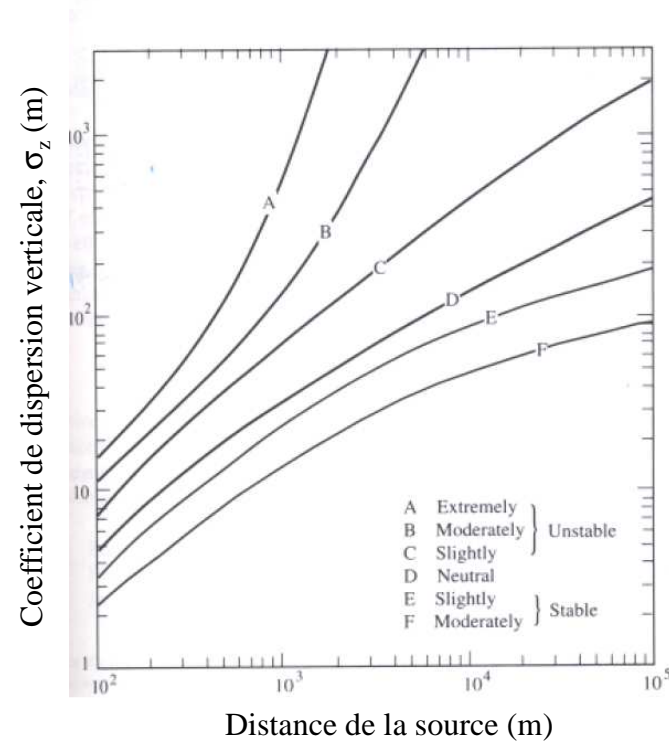
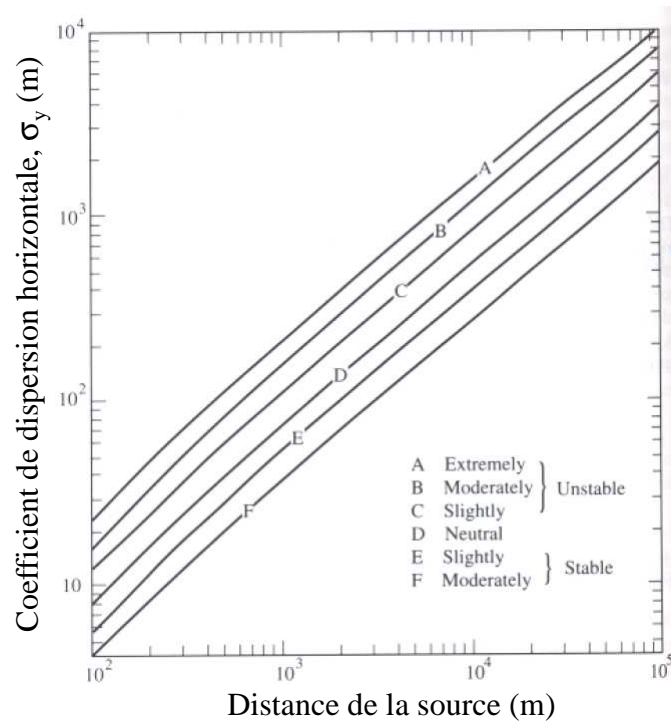
Vitesse du vent à 10 m	JOUR			NUIT	
	Rayonnement solaire incident			Nébulosité	
[m/s]	Fort	Modéré	Faible	4/8 – 7/8	<3/8
< 2	A	A-B	B	F	F
2 - 3	A-B	B	C	E	F
3 - 5	B	B-C	C	D	E
5 - 6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

### Classes de stabilité de Pasquill

A : très instable B : instable C : peu instable D : neutre E : stable F : très stable

# Modèle de panache gaussien

## Coefficients de dispersion empiriques



Coefficients de dispersion de Pasquill-Gifford-Turner (PGT)

A : très instable ; B : instable ; C : peu instable ; D : neutre ; E : stable ; F : très stable

Source: D.B. Turner, « Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates » (1970)

# Modèle de panache gaussien

## 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) à l'équation ; on obtient alors la solution suivante qui s'applique donc à une réaction chimique du premier ordre par rapport au polluant :

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

$$c(\mathbf{x}) = \frac{q}{2\pi v_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right) \exp\left(-k \frac{x}{v_x}\right)$$

# Surélévation du panache d'une source ponctuelle

---

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



# Surélévation du panache d'une source ponctuelle

---

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

- Briggs
- Holland
- Carson et Moses
- Concawe

La formule de Briggs est la plus utilisée dans les modèles de panaches gaussiens

# Surélévation du panache d'une source ponctuelle

Equation de Holland

$$\Delta h = \frac{V_s d}{v} \left( 1.5 + 2.68 \cdot 10^3 P d \frac{T_s - T_a}{T_s} \right)$$

Équation de Carson et Moses

$$\Delta h = -0.029 \frac{V_s d}{v} + 2.62 \frac{Q_h^{1/2} d}{v}$$

Équation de Concawes

$$\Delta h = 2.71 \frac{Q_h^{1/2} d}{v^{3/4}}$$

Équation de Briggs

$$\Delta h = \left( \frac{3F_m x}{0.36v^2} + 4.17 \frac{F_b x^2}{v^3} \right)^{1/3} \quad x < x_f$$

$$x_f = 49F_b^{5/8} \quad \text{si } F_b < 55 \quad \text{et } 119F_b^{2/5} \quad \text{sinon}$$

$\Delta h$  surélévation du panache ([m])

$V_s$  vitesse des gaz en sortie de cheminée ([m s<sup>-1</sup>])

$d$  diamètre de la cheminée ([m])

$v$  vitesse du vent à la hauteur de la cheminée ([m s<sup>-1</sup>])

$P$  pression à la hauteur de la cheminée ([Pa])

$Q_h$  débit de chaleur ([kJ s<sup>-1</sup>])

$T_s$  température des gaz en sortie de cheminée ([K])

$T_a$  température de l'atmosphère à la hauteur de la cheminée ([K])

$F_m$  effet dynamique ([m<sup>4</sup> s<sup>-2</sup>])

$$F_m = \frac{T_a}{T_s} V_s^2 \frac{d^2}{4}$$

$F_b$  effet de flottabilité ([m<sup>4</sup> s<sup>-3</sup>])

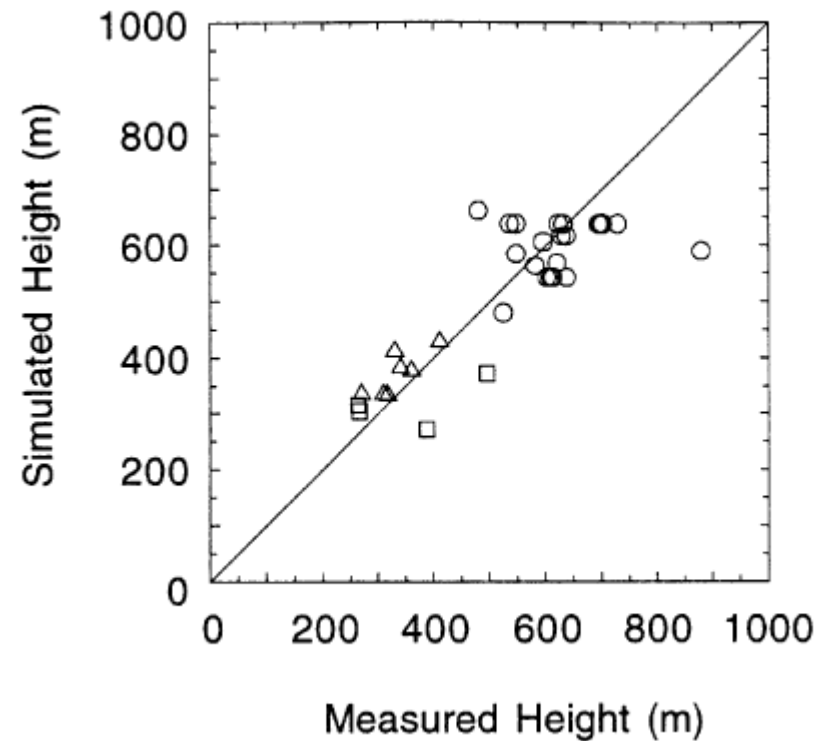
$$F_b = g V_s \frac{d^2}{4} \frac{T_s - T_a}{T_s}$$

$x_f$  limite d'application de la surélévation

# Surélévation du panache d'une source ponctuelle

Comparaison de hauteurs de surélévation mesurées et simulées pour un modèle de bouffées gaussiennes qui résout de façon explicite les équations de conservation de la quantité de mouvement, de la chaleur et de la masse

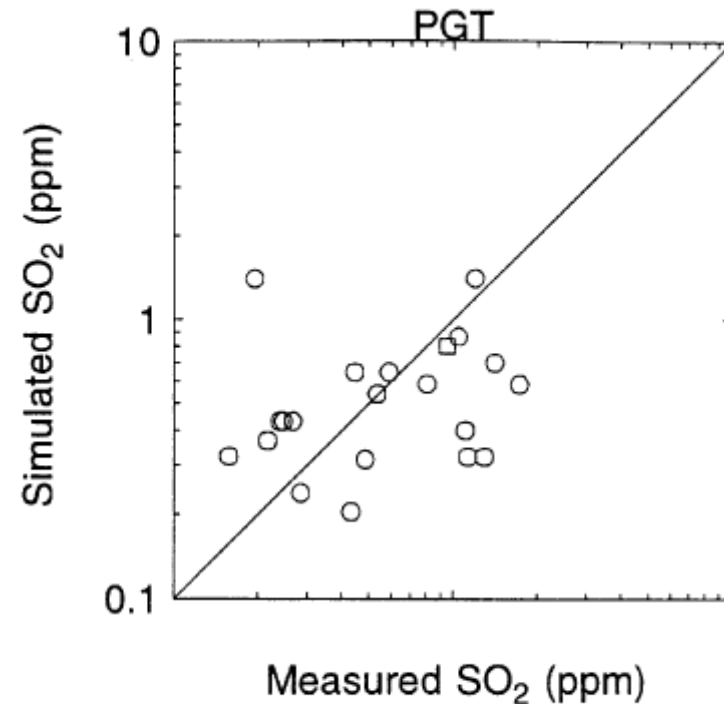
- Corrélation = 0,82
- Erreur moyenne = 13%
- Toutes les valeurs simulées sont dans un facteur 2 de la valeur mesurée correspondante



# Simulation de la dispersion de panaches

Comparaison de concentrations de SO<sub>2</sub> mesurées et simulées dans des panaches avec la formulation de Pasquill-Gifford-Turner (PGT) pour la dispersion atmosphérique des panaches

- Corrélation = 0,24
- Erreur moyenne = 52%
- 64% des valeurs simulées sont dans un facteur 2 de la valeur mesurée correspondante

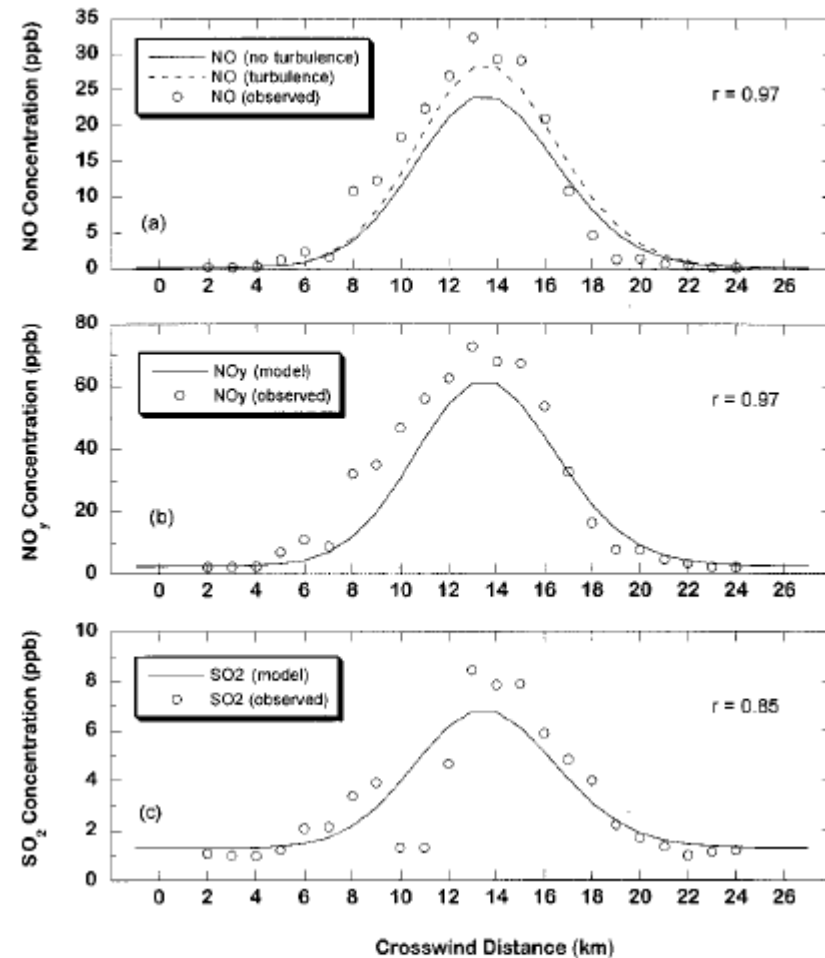




# Simulation de la dispersion de panaches

Comparaison concentrations de NO, NO<sub>y</sub> et de SO<sub>2</sub> mesurées et simulées dans des panaches avec une formulation de bouffées gaussiennes avec une fermeture de la turbulence au second-ordre

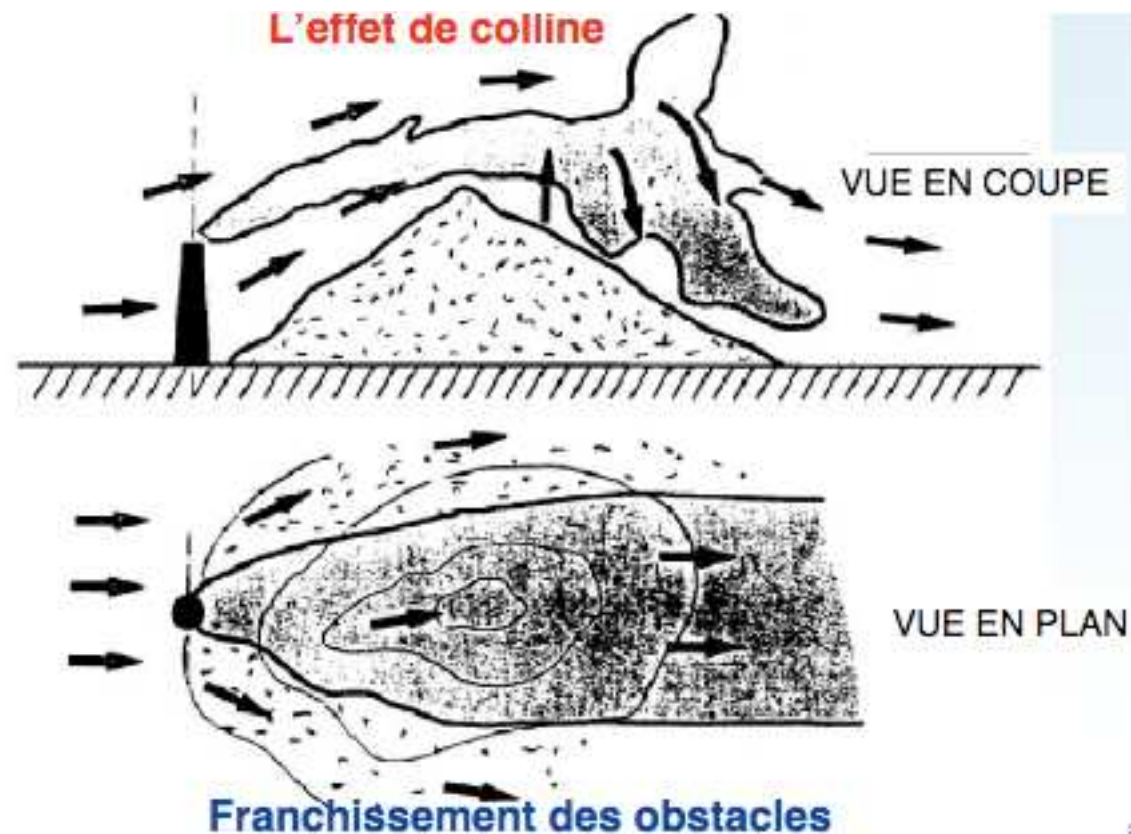
Source : Karamchandani et al., *Environ. Sci. Technol.*, **34**, 870 (2000).



# Simulation de la dispersion de panaches

## Effet de colline

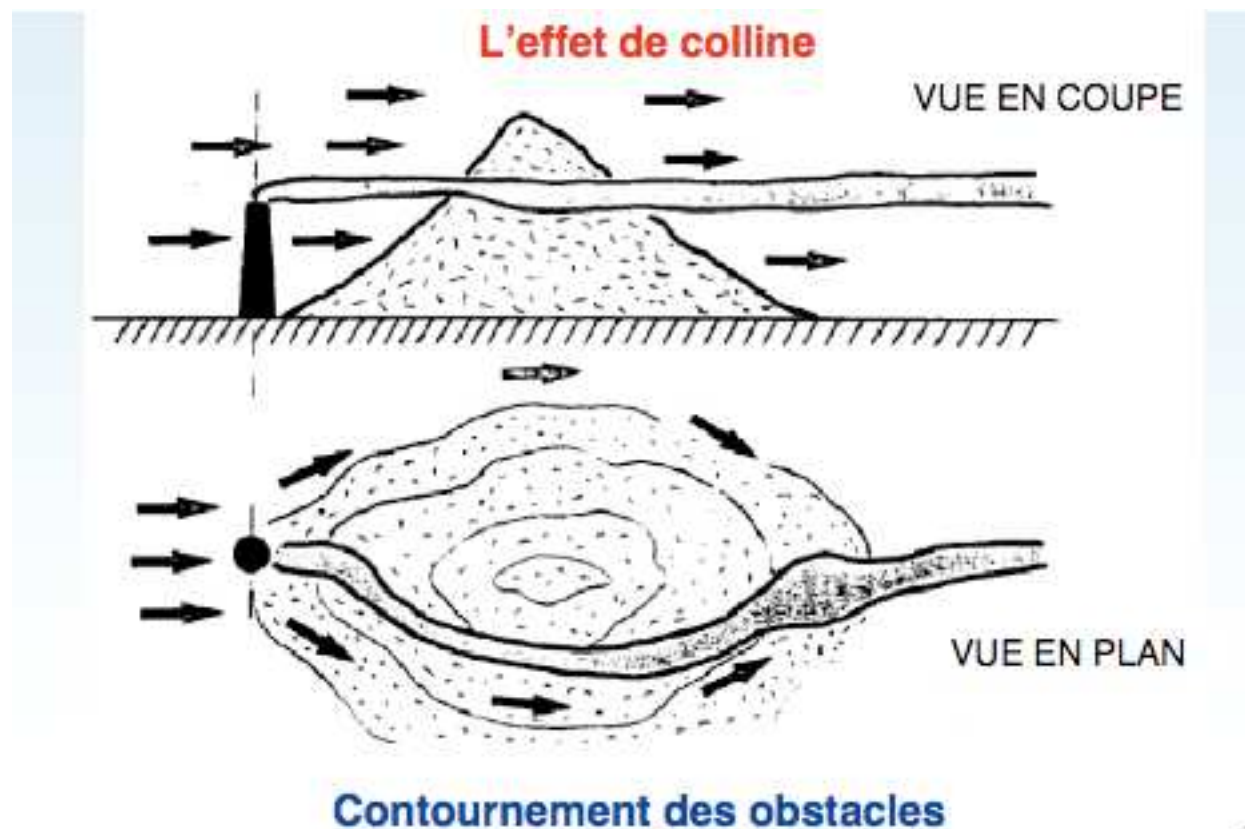
L'effet de colline est traité par certains modèles de panaches. Si l'énergie cinétique est suffisante, le panache est transporté par-dessus la colline.



# Simulation de la dispersion de panaches

## Effet de colline

Si l'énergie cinétique est insuffisante, le panache ne peut pas être transporté par-dessus la colline et soit contourne la colline ou impacte la colline.



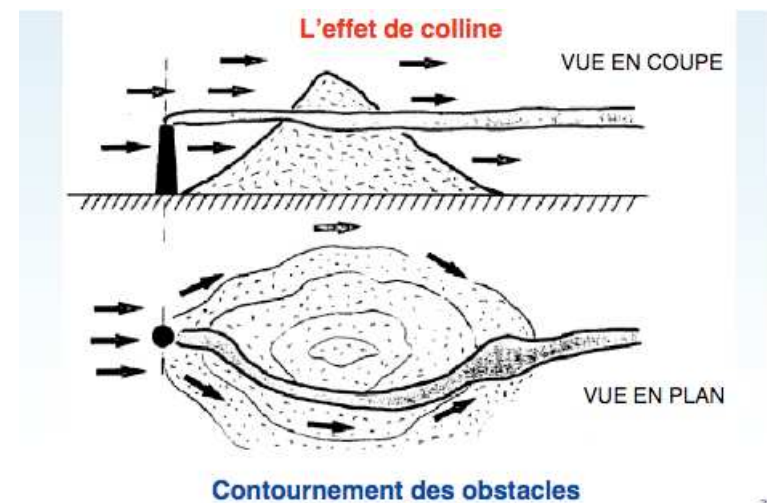
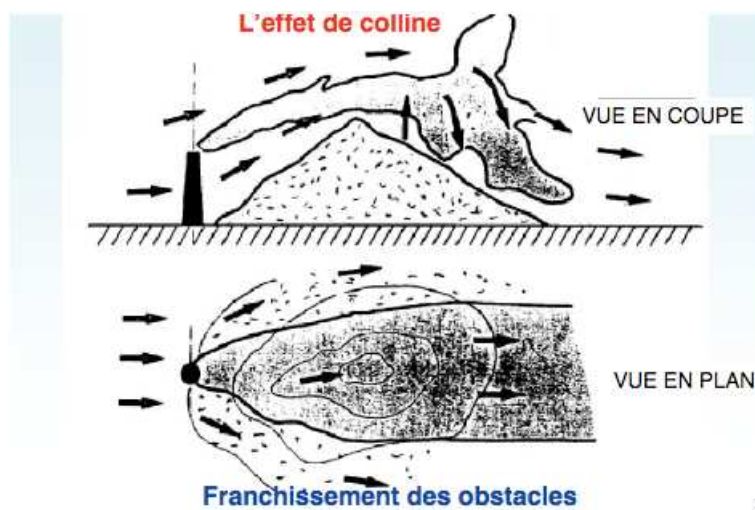
# Simulation de la dispersion de panaches

## Effet de colline

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

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

où  $v$  est la vitesse du vent,  $g$  la constante de gravité et  $h$  une longueur caractéristique (par exemple la hauteur de l'obstacle)



# Modèles de panaches gaussiens

## Exemples

---

**AERMOD** : Modèle de l'U.S. Environmental Protection Agency (EPA)

[http://www.epa.gov/ttn/scram/dispersion\\_prefrec.htm#aermod](http://www.epa.gov/ttn/scram/dispersion_prefrec.htm#aermod)

**ADMS** : Modèle de Cambridge Environmental Research Consultants

<http://www.cerc.co.uk/environmental-software/ADMS-model.html>

**POLYPHEMUS** : Modèle du Cerea

<http://cerea.enpc.fr/polyphemus>

# Modèles de panaches gaussiens

## Sources surfaciques

---

Pour simuler la dispersion de polluants émis d'une source surfacique (c'est-à-dire rectangulaire), deux approches sont possibles :

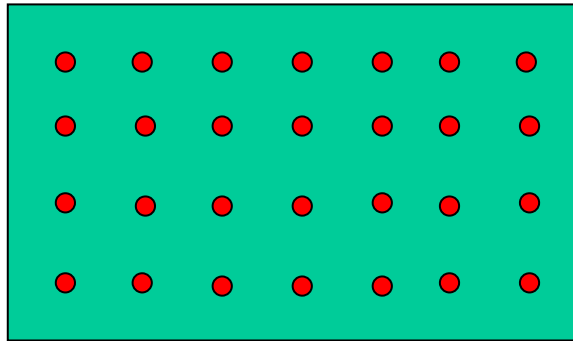
- on peut discrétiser la source surfacique et la représenter par une grille de sources ponctuelles
- on peut utiliser une source ponctuelle virtuelle située en amont de la source surfacique

# Modèles de panaches gaussiens

## Sources surfaciques

---

Discrétisation de la source surfacique en un ensemble de sources ponctuelles



Avantage : la solution de l'équation gaussienne est exacte pour une source ponctuelle (avec les hypothèses associées)

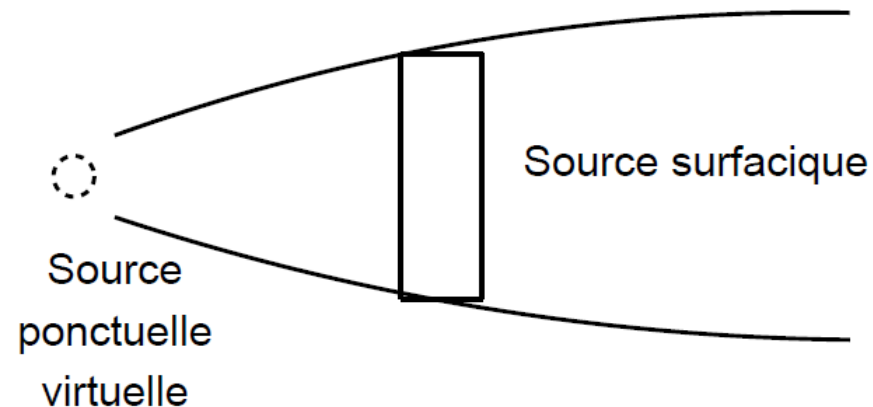
Inconvénient : il est nécessaire d'avoir un grand nombre de sources ponctuelles pour représenter correctement la source surfacique et le temps de calcul peut rapidement devenir prohibitif

# Modèles de panaches gaussiens

## Sources surfaciques

---

Représentation de la source surfacique par une source ponctuelle virtuelle en amont



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 qui n'est pas réaliste



# Modèles de panaches gaussiens

## Sources linéiques

---

Pour simuler la dispersion de polluants émis d'une source linéique, plusieurs approches sont possibles :

- on peut discrétiser la source linéique et la représenter par un ensemble de sources ponctuelles
- on peut utiliser une source ponctuelle virtuelle située en amont de la source linéique
- on peut résoudre l'équation de dispersion gaussienne qui a une solution analytique pour le cas où le vent est perpendiculaire à la source linéique et modifier la solution pour minimiser l'erreur pour les cas où le vent n'est pas perpendiculaire à la route

# Modèles de panaches gaussiens

## Trafic routier

---

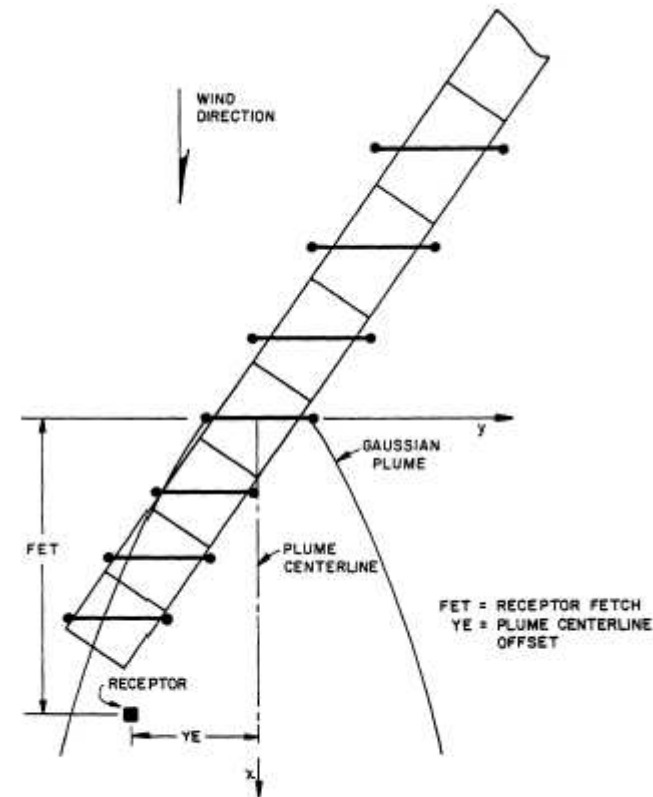
Pour simuler la dispersion de polluants émis du trafic routier, on prend la formulation d'une source linéique à laquelle on peut ajouter une largeur :

- on peut discrétiser la route et la représenter par un ensemble de sources ponctuelles (option de Polyphemus) ou surfaciques (AERMOD)
- on peut utiliser la solution analytique d'une source linéique quand le vent est perpendiculaire à la route (ADMS)
- on peut utiliser la solution approximative mais optimisée de la source linéique pour toutes les directions de vent, sauf les configurations où le vent est parallèle à la route qui utilisent une solution discrétisée (option de Polyphemus)

# Modèles de panaches gaussiens

## Trafic routier

- on peut utiliser la solution analytique d'une source linéique quand le vent est perpendiculaire à la route (ADMS)



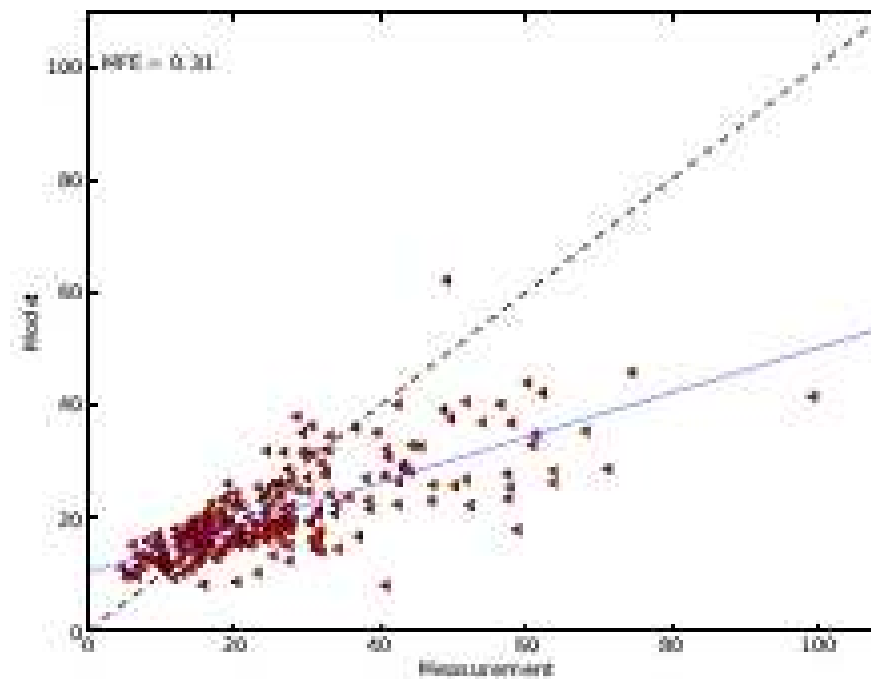
ELEMENT SERIES REPRESENTED BY  
SERIES OF EQUIVALENT FINITE LINE SOURCES

# Modèles de panaches gaussiens

## Trafic routier

---

- Comparaison de concentrations de  $\text{NO}_2$  mesurées et simulées avec Polyphemus en proximité de routes



Source : Briant & Seigneur, Amer. Meteor. Soc. Meeting, 2012.

# Modèles de panaches gaussiens

## Limites

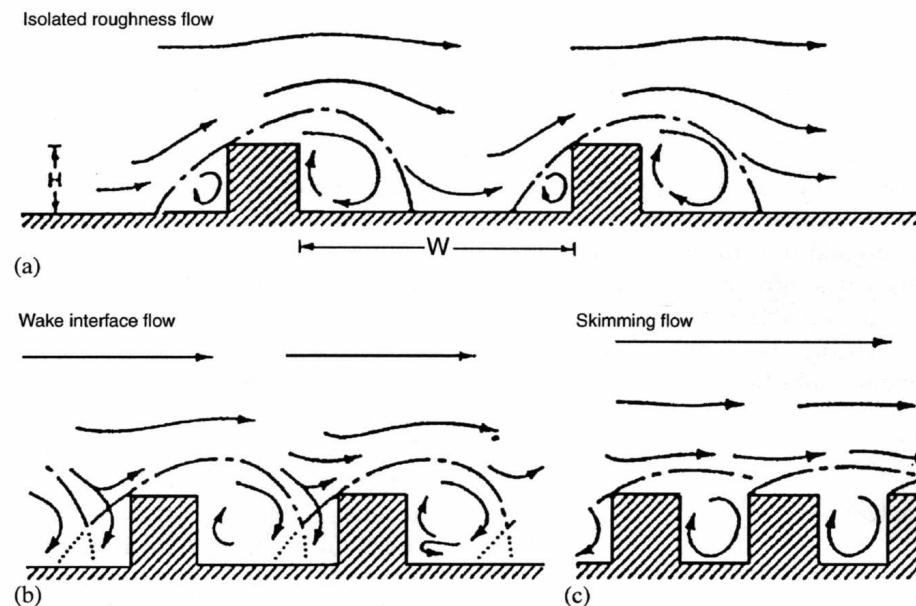
---

- Les modèles gaussiens ont des limites dans leurs applications qui résultent des hypothèses invoquées :
  - Ils ne s'appliquent pas très loin des sources ( $< 50$  km).
  - Ils s'appliquent en terrain découvert : des approximations peuvent être faites pour traiter certains cas particuliers (colline), mais ils ne peuvent traiter le cas de rues-canyons par exemple.
  - Ils s'appliquent à des conditions météorologiques simples : ils peuvent prendre en compte la réflexion sous une couche d'inversion mais de peuvent pas traiter le cas de cisaillement de vent.

# Modèles de panaches gaussiens

## Dispersion dans une rue-canyon

- Les modèles gaussiens ont des limites dans leurs applications qui résultent des hypothèses invoquées : Exemple d'écoulements dans une rue canyon.



# Dispersion dans une rue-canyon

---

- Des modèles non-gaussiens ont donc été développés pour traiter les situations telles que la dispersion des polluants atmosphériques dans une rue canyon
  - Modèles paramétrisés à partir de modèles conceptuels : par exemple **OSPM**
  - Modèles paramétrisés à partir d'expériences en soufflerie : par exemple **SIRANE** (École Centrale de Lyon)

# Modèles lagrangiens

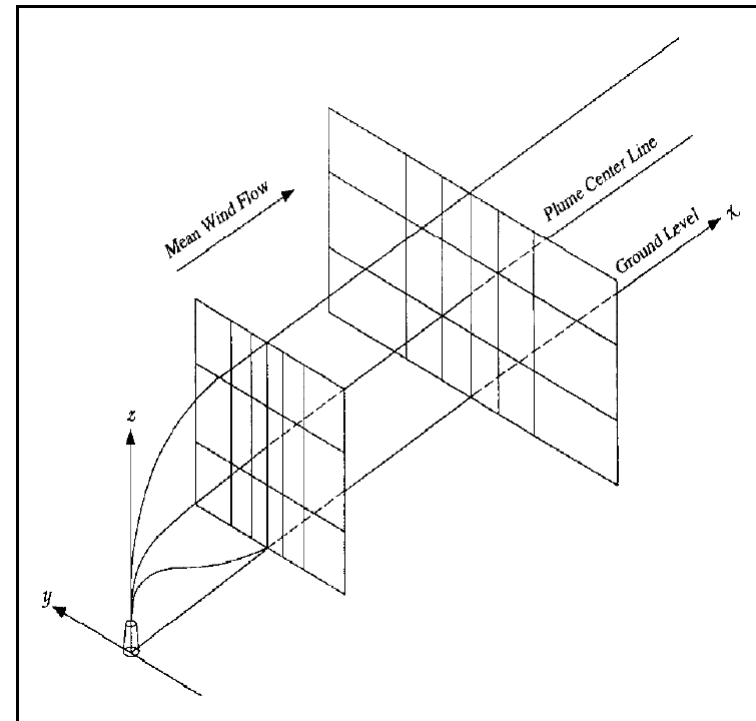
---

- Les modèles lagrangiens, comme les modèles gaussiens, calculent les concentrations de polluants par rapport à un système de référence qui suit la trajectoire moyenne du vent. Cependant, l'hypothèse de conditions stationnaires n'est plus nécessaire.
- On peut distinguer par exemple :
  - les modèles lagrangiens à maillage bi-dimensionnel (2D) transversal à la direction du vent (**ROME**)
  - Les modèles lagrangiens à bouffées (**SCIPUFF & SCICHEM, HYSPLIT**)



# Modèles lagrangiens à maillage 2D

- Les modèles lagrangiens à maillage bi-dimensionnel (2D) transversal à la direction du vent tels que **ROME** (Reactive & Optics Model of Emissions) peuvent traiter une chimie atmosphérique détaillée (en raison de la résolution spatiale fine du maillage) mais ne peuvent pas traiter les cisaillements de vent de manière explicite (à cause du plan fixe du maillage)



# Modèles lagrangiens à bouffées

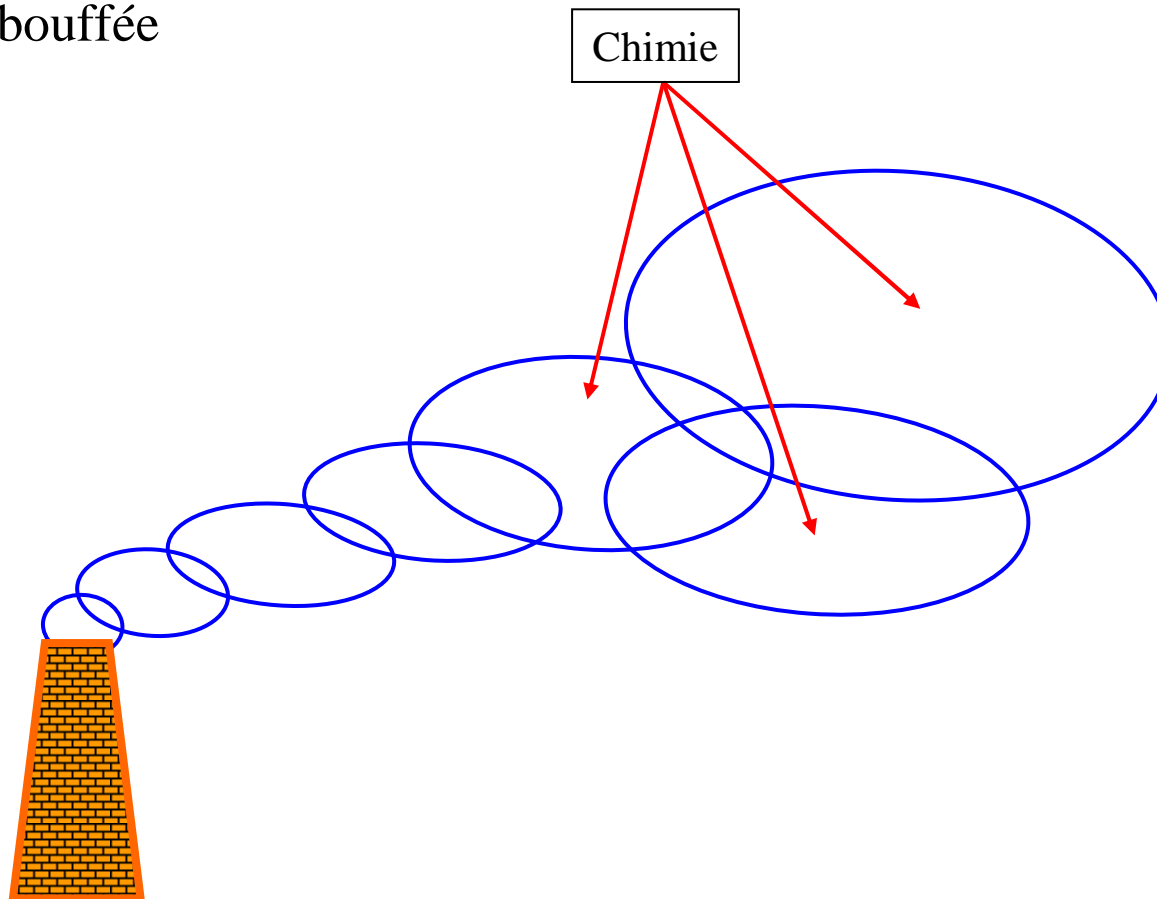
---

- Les modèles lagrangiens à bouffées ou à « particules » peuvent traiter des champs de vents complexes, par exemple avec cisaillement (en raison des bouffées qui peuvent suivre des directions différentes) mais doivent invoquer des approximations pour le traitement de la chimie (à cause du besoin d'utiliser des concentrations moyennes pour chaque bouffée). Les bouffées individuelles peuvent être gaussiennes, mais l'ensemble des bouffées ou des « particules », qui définit donc le panache, n'est pas nécessairement gaussien.
- Modèles à bouffées : **SCIPUFF** (Second-order closure integrated puff) & **SCICHEM** (SCIPUFF with chemistry) ; **HYSPLIT** (Hybrid single-particle lagrangian integrated trajectory)
- Modèles à « particules » : **HYSPLIT**

# Modèles lagrangiens à bouffées

---

- Modèles à bouffées : la chimie peut être traitée de manière moyennée dans chaque bouffée

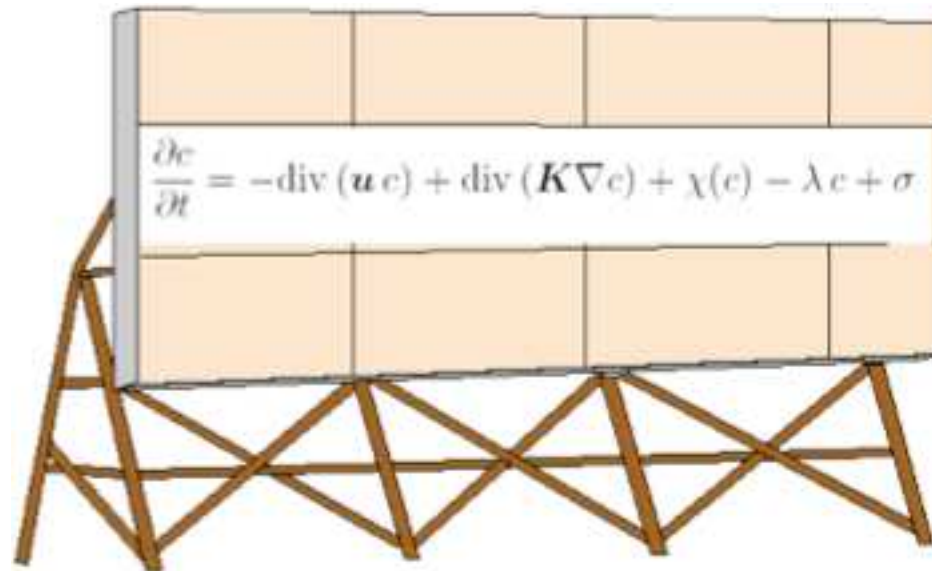


# Modèles eulériens

## Équation de chimie-transport

---

- L'équation de chimie-transport (aussi appelée équation de diffusion atmosphérique ou équation de conservation de la masse) n'a pas de solution analytique sauf dans des cas très simples (par exemple, modèles gaussiens) et donc non représentatifs de l'atmosphère à des échelles régionales à globales. Par conséquent, une solution numérique s'impose. C'est la discrétisation de l'équation de chimie-transport.



# Modèles eulériens

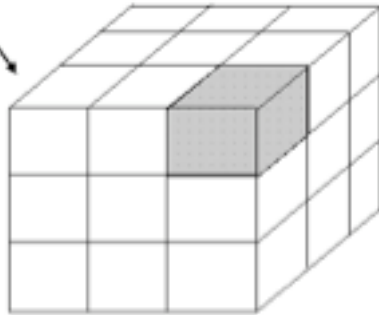
## Structure = discrétisation

---

- Un modèle eulérien tri-dimensionnel (3D) utilise un maillage (généralement régulier) qui recouvre l'atmosphère du domaine considéré (par exemple, l'Europe) :

Vue 2D →

Vue 3D ↙

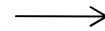
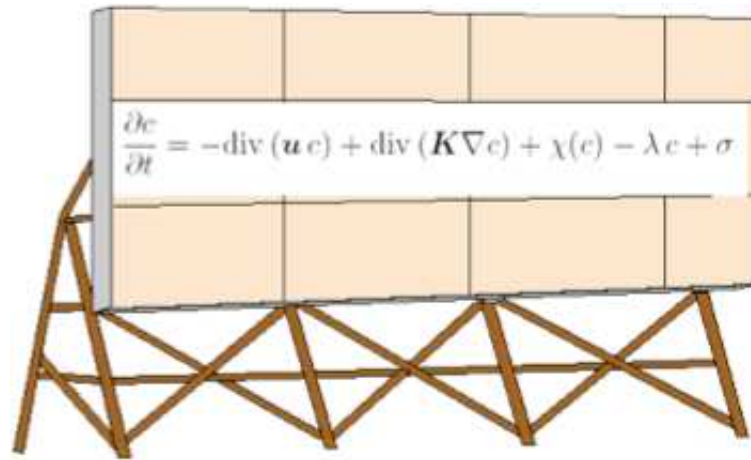


# Modèles eulériens

## Structure = discrétisation

---

- Il faut donc résoudre l'équation de chimie-transport sur le maillage 3D, c'est-à-dire, discrétiser l'équation car les variables (vent, température, concentrations...) sont uniformes dans chaque cellule :

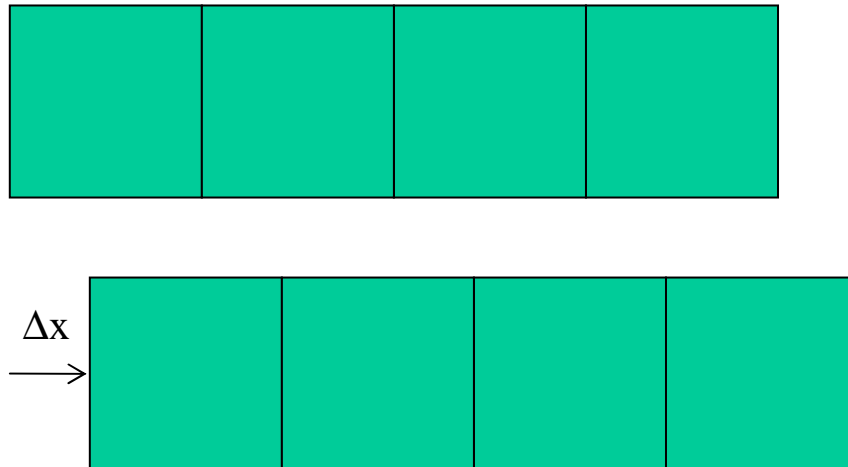


# Modèles eulériens

## Traitement numérique de l'advection

---

- L'advection correspond au transport horizontal par le vent moyen des espèces chimiques.
- Pour un vent constant perpendiculaire au maillage, la solution exacte consisterait à déplacer le maillage selon la distance pour un intervalle de temps  $\Delta t$  :  $\Delta x = v \Delta t$



# Modèles eulériens

## Traitement numérique de l'advection

---

- Comme le maillage est fixe (et le vent n'est pas généralement perpendiculaire au maillage), il faut résoudre l'équation dans ce cadre fixe.
- La méthode des différences finies est la plus simple des méthodes numériques. Elle consiste à discrétiser l'équation du transport advectif. Par exemple, dans la direction  $x$  :

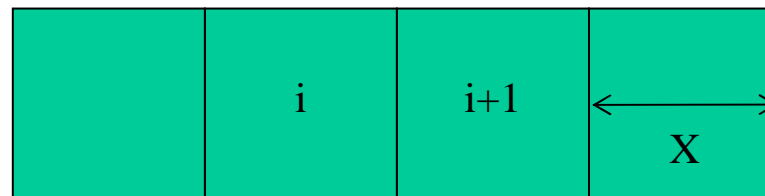
$$\Delta c / \Delta t = - v \Delta c / \Delta x$$

- La méthode d'Euler donne la solution suivante :

$$c_{i+1}(t + \Delta t) = c_{i+1}(t) + (c_i(t) * \Delta x / X) - (c_{i+1}(t) * \Delta x / X)$$

où  $i$  dénote la cellule

et  $X$  est le pas de maille





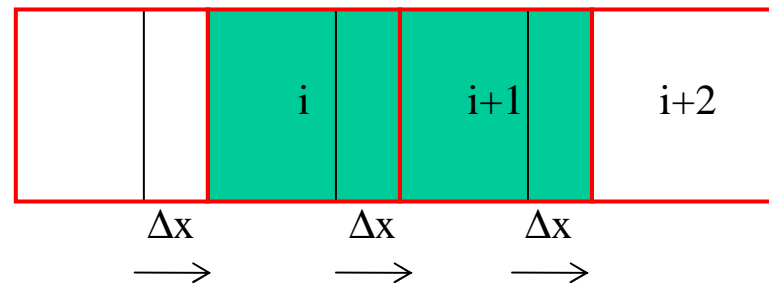
# Modèles eulériens

## Traitement numérique de l'advection

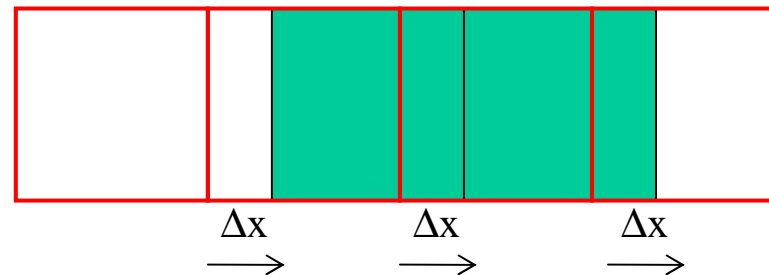
---

- Schématiquement, la méthode d'Euler consiste à déplacer une partie de la masse présente dans la cellule  $i$  dans la cellule en aval, c'est-à-dire  $(i+1)$  et, de même, de déplacer une partie de la masse présente dans la cellule  $(i+1)$  dans la cellule  $(i+2)$ .

Temps =  $t$



Temps =  $t + \Delta t$



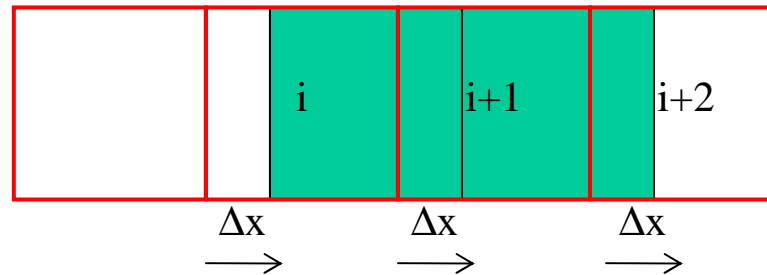
# Modèles eulériens

## Traitement numérique de l'advection

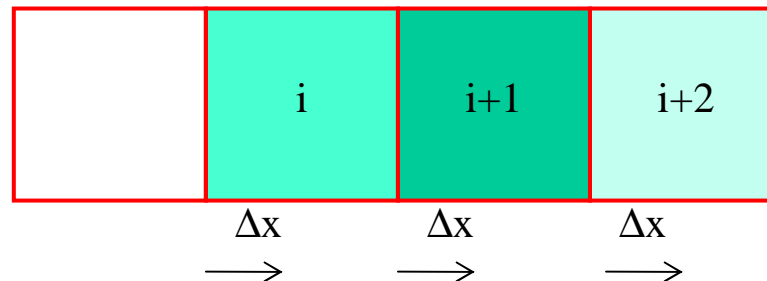
---

- Cependant, la valeur d'une variable est uniforme à l'intérieur d'une cellule, il en résulte donc une « diffusion numérique » puisque la masse transférée par exemple de la cellule (i+1) à la cellule (i+2) est maintenant présente dans toute la cellule (i+2) et sera donc disponible pour le transfert en (i+3) au prochain pas de temps.

Temps =  $t + \Delta t$   
Résultat lagrangien



Temps =  $t + \Delta t$   
Résultat eulérien



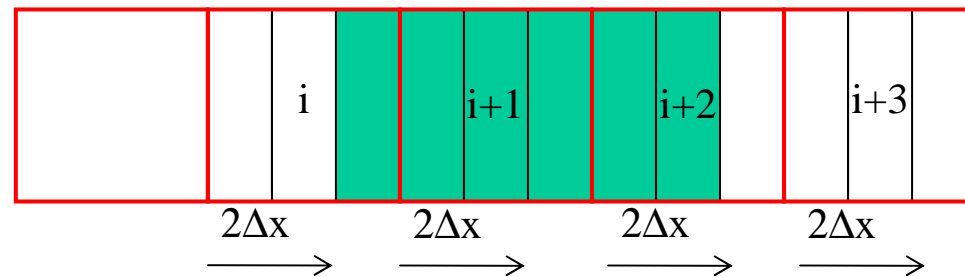
# Modèles eulériens

## Traitement numérique de l'advection

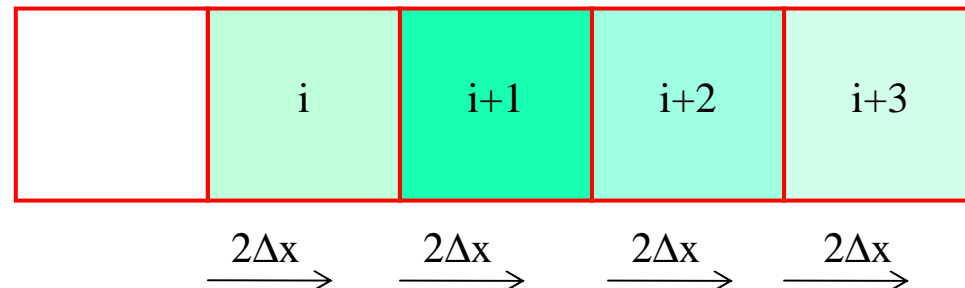
---

- Cependant, la valeur d'une variable est uniforme à l'intérieur d'une cellule, il en résulte donc une « diffusion numérique » puisque la masse transférée par exemple de la cellule (i+1) à la cellule (i+2) est maintenant présente dans toute la cellule (i+2) et sera donc disponible pour le transfert en (i+3) au prochain pas de temps.

Temps =  $t + 2\Delta t$   
Résultat lagrangien



Temps =  $t + 2\Delta t$   
Résultat eulérien



# Modèles eulériens

## Traitement numérique de l'advection

---

- Ce problème de diffusion numérique peut être minimisé :
  - En utilisant un maillage plus fin (quand  $X$  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 que la méthode explicite d'Euler (Smolarchiewicz, Bott, ...), mais aucune de ces méthodes n'est parfaite.

# Modèles eulériens

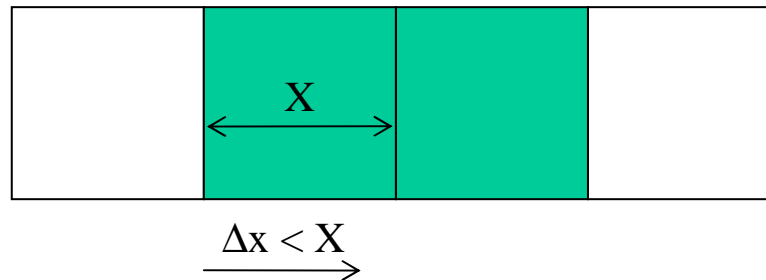
## Traitement numérique de l'advection

---

- Pas de temps : le pas d'advection lagrangien est proportionnel au pas de temps :  
$$\Delta x = v \Delta t$$

- Le critère de Courant impose que le pas d'advection soit inférieur au pas de maille pour éviter de « sauter » des cellules lors de l'advection :

$$\Delta t = \Delta x / v \Rightarrow \Delta t < X / v$$



# Modèles eulériens

## Traitement numérique de l'advection

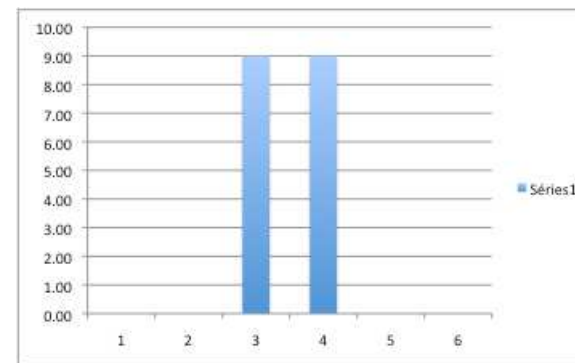
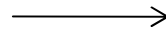
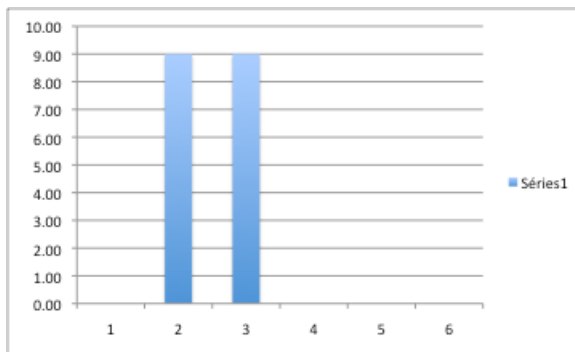
---

- Exemple : advection dans une direction perpendiculaire au maillage.
- Cas 1 : pas de maille de 9 km
- Cas 2 : pas de maille de 4,5 km (donc, deux fois plus fin)
  
- Conditions : vitesse du vent = 10 m/s,  $\Delta t = 5$  minutes
  
- Calculs : trois pas de temps, donc 15 minutes

# Modèles eulériens

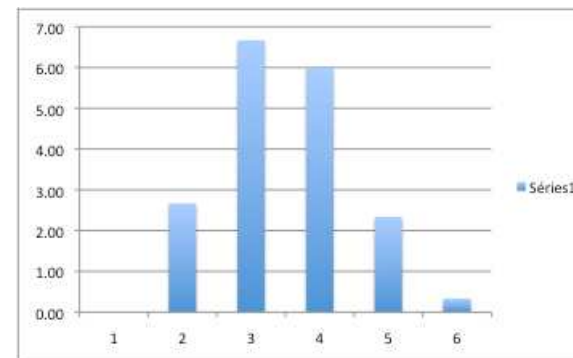
## Traitement numérique de l'advection

- Évolution des concentrations après trois pas de temps dans une représentation lagrangienne :



représentation eulérienne :

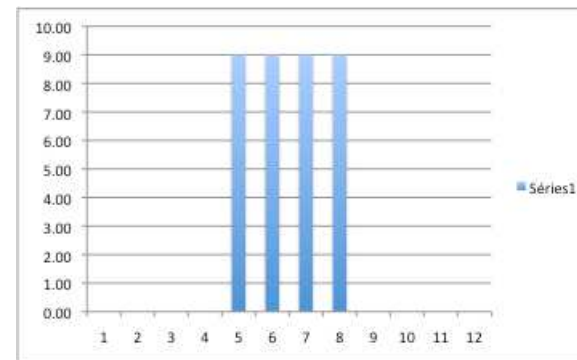
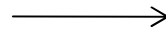
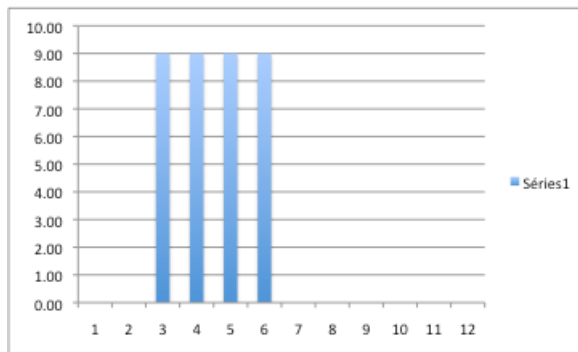
- diffusion numérique en amont et en aval



# Modèles eulériens

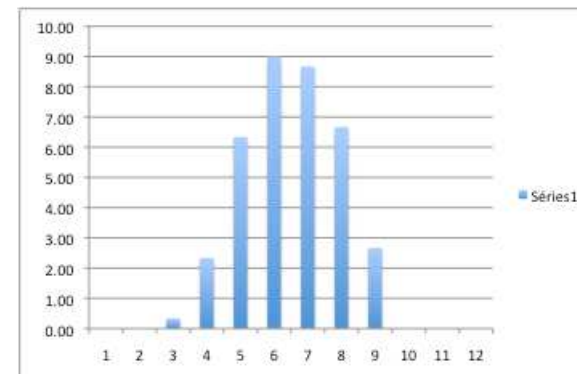
## Traitement numérique de l'advection

- Évolution des concentrations après trois pas de temps dans une représentation lagrangienne :



représentation eulérienne :

- diffusion numérique en amont et en aval



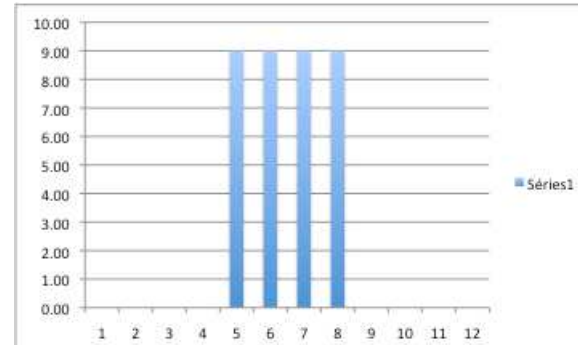


# Modèles eulériens

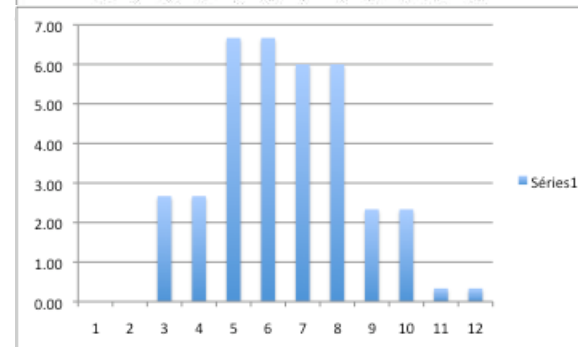
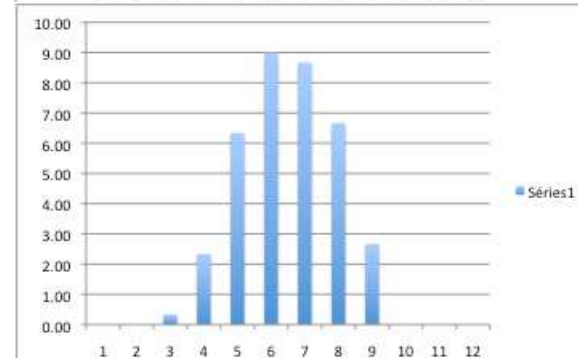
## Traitement numérique de l'advection

- Comparaison des résultats de la solution lagrangienne (exacte) et des solutions eulériennes avec des pas de maille différents :

- 4,5 km



- 9 km

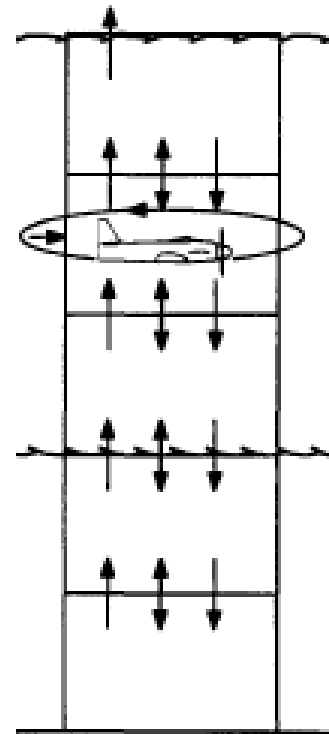
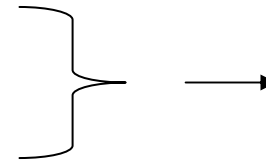


# Modèles eulériens

## Traitement de la dispersion verticale

---

- Il existe deux catégories de méthodes pour traiter la dispersion verticale :
  - Algorithme local : échanges entre couches du modèle adjacentes
  - Algorithme non-local : échanges possibles entre des couches non-adjacentes => meilleure représentation des conditions convectives

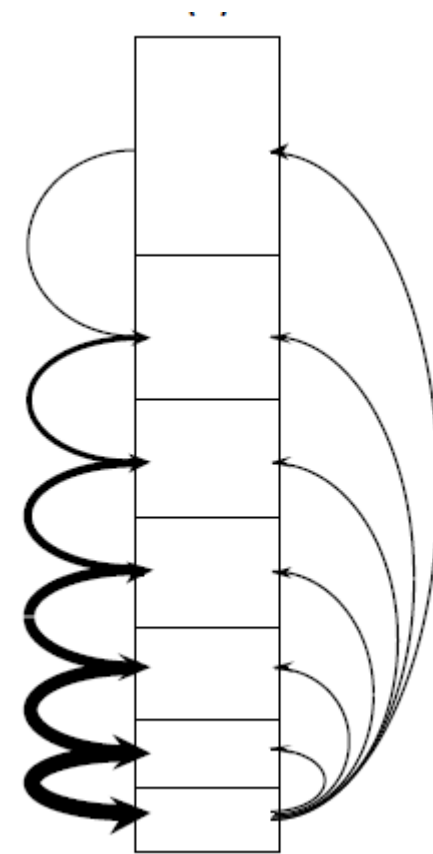
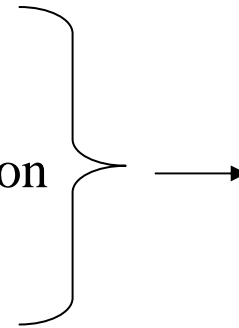


# Modèles eulériens

## Traitement de la dispersion verticale

---

- Il existe deux catégories de méthodes pour traiter la dispersion verticale :
  - Algorithme local : échanges entre couches du modèle adjacentes
  - Algorithme non-local : échanges possibles entre des couches non-adjacentes => meilleure représentation des conditions convectives



# Modèles eulériens

## Traitement de la dispersion horizontale

---

- Il existe trois catégories de méthodes pour traiter la dispersion verticale :
  - Pas d'algorithme de dispersion horizontale : on considère que la diffusion numérique due à l'algorithme d'advection génère suffisamment de dispersion horizontale
  - Algorithme de type Smagorinsky
  - Algorithme de type Unif

# Modèles eulériens

## Traitement de la dispersion horizontale

---

- Algorithme de type Smagorinsky
  - Le coefficient de dispersion est proportionnel à la résolution horizontale (pas) de la maille :

$$K_h = \alpha X$$

- La diffusion numérique augmente aussi avec le pas de maille
- Donc, l'algorithme de Smagorinsky mène à une augmentation de la dispersion horizontale avec un maillage plus grossier par rapport à un maillage plus fin.

# Modèles eulériens

## Traitement de la dispersion horizontale

---

- Algorithme de type Unif
  - Le coefficient de dispersion est inversement proportionnel à la résolution horizontale (pas) de la maille :

$$K_h = \alpha / X$$

- La diffusion numérique augmente aussi avec le pas de maille
- Donc, l'algorithme Unif mène soit à une diminution, soit à une augmentation de la dispersion horizontale avec un maillage plus grossier par rapport à un maillage plus fin.

# Modèles eulériens

## Traitement de la dispersion horizontale

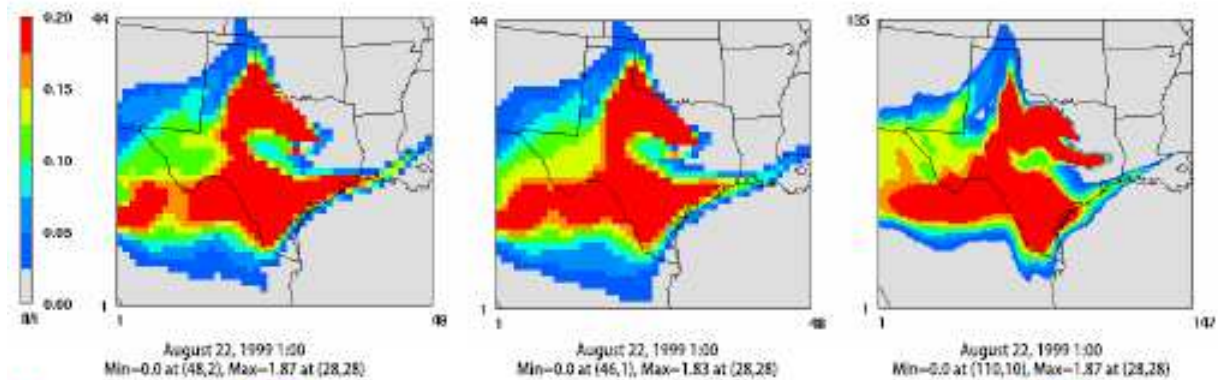
- Comparaison d'algorithmes de dispersion horizontale :

Unif  
(36 km)

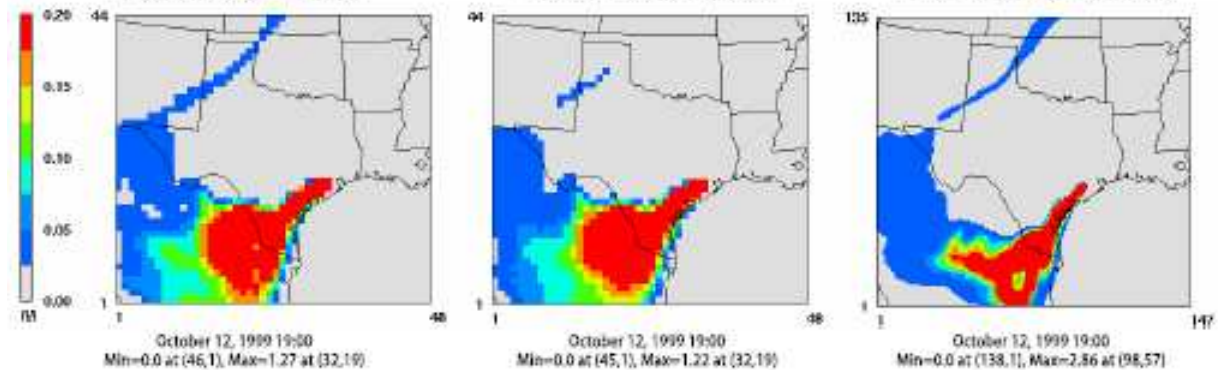
Smagorinsky  
(36 km)

Smagorinsky  
(12 km)

Rejet d'un traceur du  
nord-est du Texas



Rejet d'un traceur de  
Houston

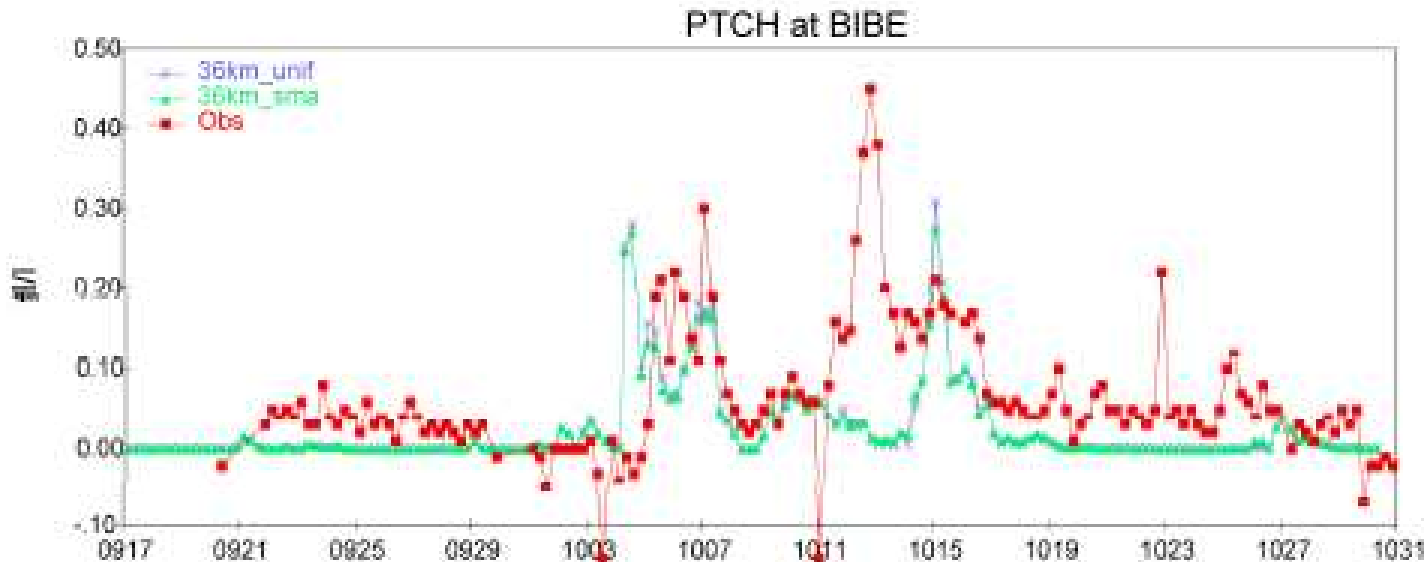


# Modèles eulériens

## Traitement de la dispersion horizontale

- Cconfrontation à des mesures :

Exemple de comparaisons des concentrations simulées (Unif et Smagorinsky avec un pas de maille de 36 km) avec les concentrations mesurées





# Modèles eulériens

## Traitement de la dispersion horizontale

---

- Comparaison d'algorithmes de dispersion horizontale et confrontation à des mesures :

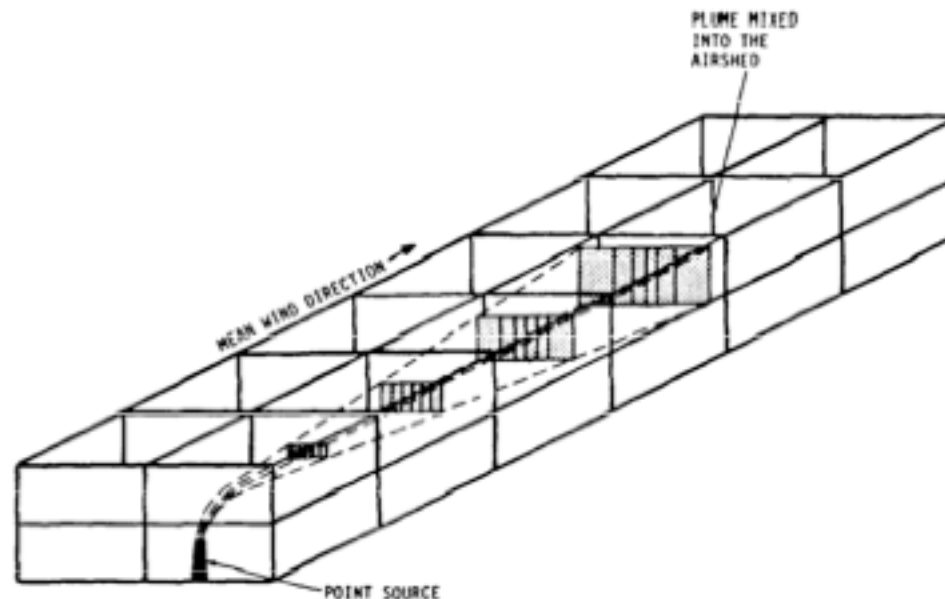
L'analyse des résultats montre que dans ce cas l'algorithme de Smagorinsky donne de meilleurs résultats que celui de Unif. Les résultats avec Smagorinsky sont sensibles au pas de maille qui affecte la diffusion numérique et la valeur de  $K_h$ .

Par ailleurs, on ne peut pas dissocier le traitement de la dispersion horizontale du traitement de l'advection (algorithme plus ou moins diffusif) ni du traitement de la dispersion verticale (différentes directions du vent selon l'altitude favorise aussi la dispersion horizontale).

# Modèles eulériens et lagrangiens : Modèles hybrides ou « plume-in-grid »

---

- Si l'on veut simuler à la fois la pollution de fond (urbain et/ou régional) et la pollution de proximité, on peut construire un modèle hybride qui simule la pollution de fond dans un cadre eulérien et la pollution de proximité avec une approche lagrangienne imbriquée dans le cadre eulérien : c'est l'approche « plume-in-grid » (PinG) ou panache en sous-maille.



# Modèles hybrides ou « plume-in-grid »

---

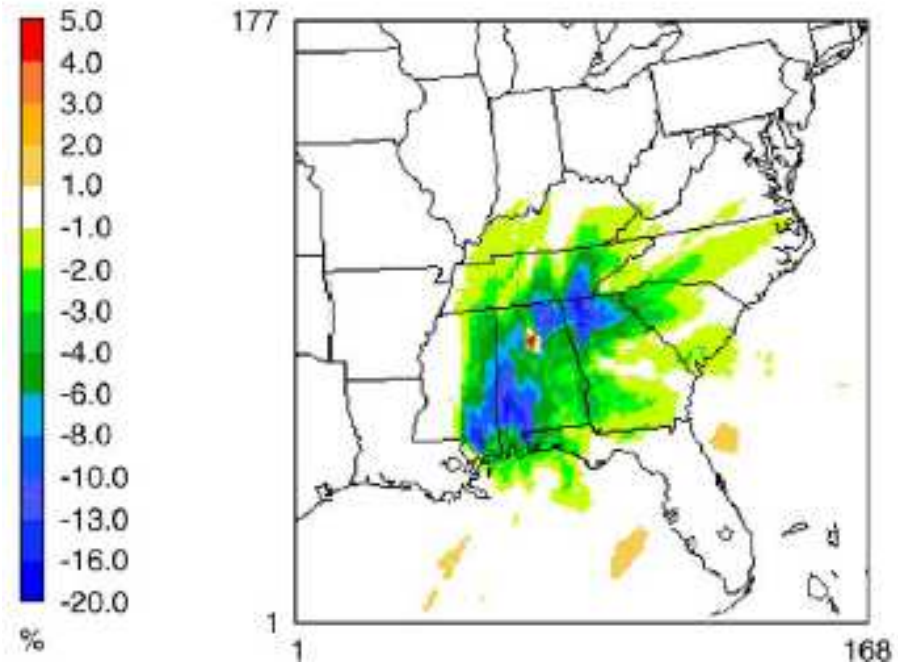
- Les modèles hybrides offrent plusieurs avantages :
  - Caractérisation de la pollution de proximité en sous-maille
  - Traitement correct de la dispersion et de la chimie des rejets des grandes sources ponctuelles (centrales électriques, cimenteries, etc.) et linéiques (grands axes routiers, avions, etc.)

# Modèles hybrides ou « plume-in-grid »

- Exemple pour les sources ponctuelles

Influence du traitement en sous-maille des panaches des centrales électriques au charbon sur leur contribution aux concentrations de  $PM_{2.5}$  dans le sud-est des États-Unis

Source : Karamchandani et al., *Atmos. Environ.*, **40**, 7280-7297 (2006)

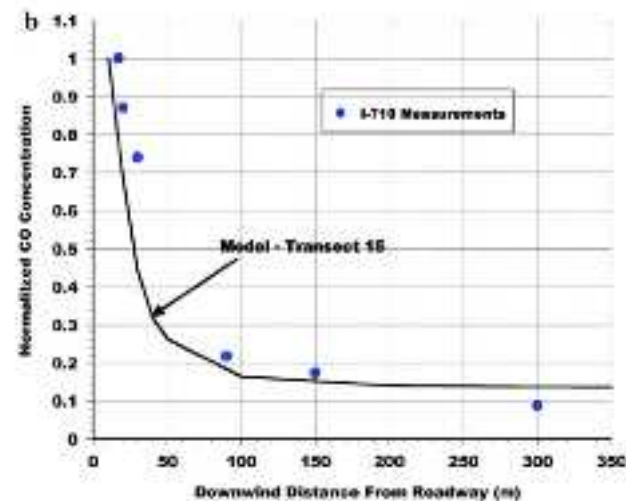


# Modèles hybrides ou « plume-in-grid »

- Exemple pour les sources linéiques

Simulation des concentrations de CO en proximité d'une autoroute à New-York

Source : Karamchandani et al., *Environ. Fluid Mech.*, **9**, 59-71 (2009)



# Modèles de qualité de l'air

---

Modèles de panache gaussiens : pollution de proximité

Modèles de rue-canyon : pollution de proximité

Modèles lagrangiens : pollution de proximité et à longue-distance d'un nombre limité de sources

Modèles eulériens : pollution de fond urbaine, régionale, voire globale de toutes les sources

Modèles hybrides (plume-in-grid) : pollution de fond et pollution de proximité