Thèse de doctorat de l'École Nationale des Ponts et Chaussées

Présentée et soutenue publiquement le 30 novembre 2007 par

Emmanuel Demaël

pour l'obtention du titre de docteur de l'École Nationale des Ponts et Chaussées Spécialité : Sciences et techniques de l'environnement

Modélisation de la dispersion atmosphérique en milieu complexe et incertitudes associées

Jury composé de

Richard Perkins Jean-Pierre Chollet Jean-François Sini Bertrand Carissimo Olivier Isnard Pierre Roubin LMFA, École Centrale de Lyon Université Joseph Fourrier, Grenoble LMF, École Centrale de Nantes CEREA, ENPC IRSN CEA Président Rapporteur Directeur de thèse Examinateur Examinateur

Résumé :

L'étude de l'impact des rejets atmosphériques industriels en fonctionnement normal ou des risques liés aux émissions accidentelles nécessite aujourd'hui l'utilisation d'outils numériques. Ceux-ci présentent des degrés de complexité divers et sont adaptés aux différentes échelles de l'atmosphère. À l'échelle locale, les modèles gaussiens sont les plus utilisés par les équipes opérationnelles, présentant l'avantage d'être économiques en terme de coût de calcul. Ils peuvent en revanche s'avérer partiellement ou totalement inadaptés aux cas complexes où la dispersion est fortement influencée par la présence de bâtiments et/ou d'un relief accidenté. Dans de telles situations, les modèles CFD atmosphériques, dont ceux fondés sur une approche RANS, offrent une alternative intéressante mais augmentent considérablement le coût numérique. Par ailleurs, ils présentent également des lacunes qui leur sont propres et qu'il est nécessaire d'identifier. Aussi, l'ingénierie dans le domaine de la dispersion atmosphérique a-t-elle besoin de bénéficier d'une évaluation comparative de ces différentes approches et d'une méthodologie adaptée à un cadre opérationnel.

Au cours de cette thèse, des réponses sont apportées quant à l'intérêt offert par les modèles CFD associés à une approche RANS à diffusivité turbulente, à l'instar du modèle Mercure Saturne, pour la modélisation de la dispersion en champ proche et en zone complexe, en regard du rapport entre qualité des prédictions et temps de calcul offert par les modèles fondés sur une formulation gaussienne. Dans un premiers temps, ces différents modèles sont comparés sur une expérience de rejet surfacique en terrain plat que constitue la campagne Prairie Grass, permettant d'évaluer sur un cas simple l'outil CFD Mercure Saturne par rapport à la formulation gaussienne, dont la paramétrisation des écarts-types de la dispersion est ici issue de Briggs (1973) et Doury (1976). Le modèle Mercure Saturne est ensuite comparé à la plateforme de dispersion ADMS pour la modélisation de la dispersion atmosphérique sur le site CNPE de Bugey dont l'orientation des bâtiments par rapport aux directions principales du vent influence grandement les processus dispersifs. Cette étude s'appuie sur les mesures en soufflerie réalisées en amont par le LMFA. Dans un derniers temps, la comparaison se poursuit par la modélisation de la dispersion sur le site CNPE de Flamanville dont la particularité est la présence d'une falaise abrupte accolée aux bâtiments réacteurs. Encore une fois, des données en soufflerie fournies par le LMFA servent de support à l'évaluation des modèles.

Enfin, une attente concerne aujourd'hui l'incertitude portant sur les résultats fournis par les modèles, liée à celle inhérente aux données d'entrée. Dans ce but, nous proposons ici deux approches permettant d'y répondre dans le cas précis de la modélisation de la dispersion sur le site CNPE de Bugey à l'aide du modèle *Mercure_Saturne*. La première, très connue, est la méthode de Monte-Carlo qui permet dans le même temps d'accéder à la variabilité globale des variables d'intérêt et de quantifier l'importance relative de chacune des variables d'entrée. La seconde, la méthode de Morris, permet une hiérarchisation des facteurs d'entrée en fonction de leur influence sur les sorties.

Remerciements

Je remercie Électricité de France (EDF) pour avoir financé mes travaux de thèse et le CEREA pour m'avoir accueilli et proposé ce sujet.

Je remercie chaleureusement mon directeur de thèse, Bertrand Carissimo, pour m'avoir encadré tout au long de ces trois années. Á ses côtés j'ai pu apprendre énormément sur un sujet qui m'a passionné, grâce à sa grande expérience et son savoir-faire. Il m'a accordé également sa plus grande confiance, ce qui est une des clés pour se sentir investi et mener au mieux ses travaux de recherche. Travailler avec lui restera un moment fort de mon apprentissage.

Je tiens aussi à remercier particulièrement tous ceux qui ont également pris part à mon encadrement et qui ont su rendre ce travail aussi riche qu'intéressant. Mes remerciements les plus sincères vont ainsi à Damien Bilbault, arrivé peu après moi au sein du groupe Météorologie Appliquée et Environnement Atmosphérique, qui a suivi mes travaux sur les incertitudes, à Eric Gilbert pour tous ses conseils avisés, tant d'un point de vue technique, informatique que personnel et enfin à Luc-Musson Genon pour son expertise et sa clairvoyance.

Je suis sincèrement reconnaissant envers mes rapporteurs M. Jean-Pierre Chollet et M. Jean-François Sini qui ont eu le courage de lire ce manuscrit jusqu'à l'ultime graphique miniature de l'annexe et d'en avoir fait une correction détaillée, ayant permis de soulever de vraies questions qui ont alimenté le débat de la soutenance. Merci aussi à M. Olivier Isnard d'avoir suivi ces travaux d'un peu plus près et d'avoir fait partie des examinateurs, au même titre que M. Pierre Roubin, dont j'ai apprécié l'intérêt qu'il a montré à ce travail, et que M. Perkins, qui a eu l'amabilité d'accepter d'être Président du jury.

Je remercie également les équipes avec lesquelles j'ai partagé d'excellents moments, à EDF dans le groupe Météorologie Appliquée et Environnement Atmosphérique et à Champs-sur-Marne sur le site de l'ENPC. J'espère que nos chemins se croiseront dans l'avenir et que l'on pourra prolonger les échanges que nous avons pu avoir sur des sujets aussi variés que les élections, la coupe du monde 2006 et bien sûr la météorologie.

Plus particulièrement, je remercie certaines personnes qui m'ont apporté un soutien technique, scientifique et moral au quotidien et qui sont devenues de vrais amis au fil des ans : Hadjira, Maya, Solen et Laurent. Je n'oublie pas non plus mes deux Italiens préférés rencontrés à EDF, Alex et Sergio, qui ont aussi fait partie des rencontres riches et inattendues qui jalonnent une vie.

Cet encart est aussi l'occasion de remercier mes proches. Mes premières pensées vont à Aurélie, ma femme depuis octobre 2006, qui m'a fait baptiser "docteur du vent" par ses élèves de grande section! Si elle n'a su complètement percer les mystères de la dispersion atmosphérique ni toujours compris mon investissement, elle s'est accrochée et est restée sur le même bateau que moi en maintenant toujours le cap. Son dévouement éternel et son attention sans limite sont une des nombreuses raisons pour la garder tout près de moi.

Je pense aussi à mes parents. Merci de m'avoir inculqué le goût du travail (ne pas trop en abuser quand même!) et de m'avoir soutenu dans mes choix. Merci enfin à toute la bande pour les moments de détente (mariages, naissances, concerts, foot, naissances, mariages, ...).

Table des matières

In	Introduction Générale 1							
1	Mo	délisat	ion de la dispersion en terrain complexe	5				
	1.1	Éléme	ents de base de micrométéorologie	5				
		1.1.1	Couche limite atmosphérique (CLA)	5				
		1.1.2	Turbulence atmosphérique à micro échelle dans la CLA	6				
		1.1.3	Équations fondamentales	8				
		1.1.4	Stratification thermique	11				
		1.1.5	Théorie de similitude	12				
	1.2	Disper	rsion à l'échelle locale et en environnement complexe	16				
		1.2.1	Nature de la dispersion atmosphérique	16				
		1.2.2	Équation d'advection-diffusion	17				
		1.2.3	L'échelle locale	17				
		1.2.4	Influence d'un environnement complexe sur la dispersion	18				
		1.2.5	Différentes approches de modélisation	19				
	1.3	Les m	odèles gaussiens : l'exemple d'ADMS	22				
		1.3.1	Les formulations gaussiennes	22				
		1.3.2	Description générale du modèle ADMS 3.3	25				
		1.3.3	Paramétrisation de la CLA	26				
		1.3.4	Calcul de la dispersion	28				
		1.3.5	Prise en compte des bâtiments	29				
		1.3.6	Prise en compte du relief	32				
	1.4	L'app	roche RANS : l'exemple de Mercure	33				
		1.4.1	Introduction	33				
		1.4.2	Fermetures au premier ordre	34				
		1.4.3	Fermetures au second ordre	41				
		1.4.4	Le modèle <i>Mercure</i>	42				
	1.5	Traite	ement des conditions limites dans <i>Mercure</i>	45				
		1.5.1	Importance des conditions aux limites	45				
		1.5.2	Conditions aux limites en entrée pour le modèle k - ε	46				
		1.5.3	Lois de parois rugueuses dans <i>Mercure</i>	48				
		1.5.4	Simulation d'une couche limite neutre homogène	51				
2	Étu	Étude comparative de la dispersion atmosphérique sur terrain plat : l'expé-						
	rien	ice de	Prairie Grass	57				
	2.1	Objec	tifs de l'étude	57				
	2.2	La cai	mpagne de mesures <i>Prairie Grass</i>	58				
		2.2.1	Description et objectifs de la campagne	58				
		2.2.2	Les paramétrisations de Pasquill et Pasquill-Gifford	60				

		2.2.3	L'importance de <i>Prairie Grass</i> dans la paramétrisation et la validation de modèles	61
	23	Descri	intion des formulations gaussiennes utilisés dans l'étude	63
	2.0	231	La formulation de Briggs	63
		2.3.1 2.3.2	La formulation de Doury	63
	2.4	Comp	paraison théorique des modèles eulériens à diffusivité turbulente et des mo-	00
		dèles ;	à panache gaussien	65
	2.5	Indica	teurs statistiques adaptés à l'évaluation de modèles et application sur <i>Prairie</i>	00
		Grass	······································	70
	2.6	Expér	eiences retenues et conditions de simulation <i>Mercure</i>	72
		2.6.1	Cas retenus	72
		2.6.2	Conditions de simulation <i>Mercure</i>	72
		2.6.3	Anisotropie de la dispersion turbulente	72
	2.7	Résult	tats et discussion	76
	2.8	Concl	usions	84
	_	_		
3	Etu	de con	nparative de la dispersion en milieu bâti sur le site CNPE de Bugey	85
	3.1	Objec	itifs de l'étude	85
	3.2	Descri	Dien esitif ern (nimentel et menune de menune	80
		3.2.1	Dispositif experimental et moyens de mesure	80
		3.Z.Z 2.2.2	Constinitiones de l'économent encent	- 89 - 00
		3.2.3 2.2.4	Caracteristiques de l'écoulement amont	90
		3.2.4 2.2.5	Les configurations d'étude	90
	? ?	0.2.0 Doceni	Description du jeu de mésures	91
	0.0	Descri	Demaine de enleul et meille ge	91
		0.0.1 220	Domaine de calcul et mainage	91
	2/	Doseri	intion des simulations ADMS	90 07
	0.4	3/1	Configurations pour la prise en compte des hôtiments	91 07
		3.4.1	Paramètres de calcul	91
	35	0.4.⊿ Étude	détaillée de la dispersion pour le rejet en cheminée par vent de Sud	99 100
	0.0	251	Analyse des champs dynamiques	100
		359	Analyse des champs movens de concentration	111
		353	Analyse des champs moyens d'écart-type de concentration	122
		354	Études de sensibilité pour les simulations <i>Mercure</i>	124
	3.6	Autre	s configurations de rejet	130
	0.0	3.6.1	Bejet diffus par vent de Sud	130
		3.6.2	Rejets diffus et en cheminée par vent de Nord	130
		3.6.3	Évaluation des performances des modèles <i>Mercure</i> et ADMS pour les champs	100
		0.0.0	de CTA au sol	133
	3.7	Concl	usions	138
4	Etu	de cor	nparative de la dispersion en terrain complexe sur le site CNPE de	
		manvil		141
	4.1	Ubjec	this de l'étude	141
	4.2	Descri	iption de l'étude en souffierie 2006	142
		4.2.1	Maquette du site	142
		4.2.2	Conditions météorologiques et caractéristiques de l'écoulement amont	143
		4.2.3	Caracteristiques des rejets	144
		4.2.4	Les moyens de mesures	144

		4.2.5 Description du jeu de données $\ldots \ldots \ldots$	44
	4.3	Description des simulations	45
		4.3.1 Description des simulations <i>Mercure</i>	45
		4.3.2 Description des simulations ADMS	48
	4.4	${ m \acute{E}tude}$ d ${ m \acute{e}taill}$ ée de l'écoulement pour les directions 229°, 289° et 329° : comparaison	
		Mercure vs soufflerie	49
		4.4.1 Caractéristiques générales de l'écoulement selon <i>Mercure</i>	49
		4.4.2 Évolution des profils dans le domaine	49
		4.4.3 Comparaison en amont de la falaise	54
		4.4.4 Comparaison au niveau des cheminées	56
		4.4.5 Comparaison au niveau du mât météorologique	57
		4.4.6 Comparaison sur le sommet de la falaise, en aval des rejets	58
	4.5	Étude de la dispersion pour les directions 229°, 289° et 329° : comparaison <i>Mercure</i>	
		- ADMS vs soufflerie	58
		4 5 1 Caractéristiques générales de la dispersion et principaux résultats de soufflerie 10	60
		4.5.2 Les simulations Mercure	60
		45.3 Les simulations ADMS	69
		45.4 Intercomparaison et performances des modèles <i>Mercure</i> et ADMS 16	60
	4.6	Conclusions	79
	1.0		12
5	Ana	lyse d'incertitudes pour la modélisation de la dispersion avec <i>Mercure</i> 17	75
	5.1	Introduction	75
	5.2	Méthodologie générale	77
		5.2.1 Étape A : spécification du cas d'étude	77
		5.2.2 Étape B : quantification des sources d'incertitude	78
		5.2.3 Étapes C et C': propagation et hiérarchisation des incertitudes 1'	79
	5.3	Application à la modélisation de la dispersion sur le site CNPE de Bugey 18	81
		$5.3.1$ Cas d'étude \ldots 18	81
		5.3.2 Variables d'intérêt (étape A) 18	81
		5.3.3 Variables d'entrée (étape A)	82
		5.3.4 Formulation du problème et critère associé à l'étude (étape A)	83
		5.3.5 Quantification des incertitudes liées aux variables d'entrée (étape B) 18	83
		5.3.6 Les simulations <i>Mercure</i>	83
	5.4	Calcul d'incertitudes et hiérarchisation par la méthode de Monte-Carlo	84
	0.1	5.4.1 Objectifs et mise en oeuvre de la méthode	84
		5.4.2 Échantillonage	85
		543 Analyse des incertitudes	87
		5 4 4 Hiérarchisation des incertitudes 19	92
		5.4.5 Conclusions sur la méthode de Monte-Carlo 20	00
	5.5	Hiérarchisation par la méthode de Morris	01
	0.0	551 Présentation 20	01
		5.5.2 Méthodologie et mise en ceuvre 20	01
		5.5.2 Methodologie et inise en deuvre	01
		5.5.4 Conclusions sur la méthode de Morris 20	00 00
	56	Sunthèse et comparaison des hiérarchiestions	00
	0.0	5.6.1 Comparation des méthodes de Menrie et Monte Carle	09 09
		5.6.2 Conclusions relatives à l'influence des fecteurs d'entrée	09 00
	57	Conclusions	09 10
	9.7	Outerusions	10

 $\mathbf{213}$

A	Emplacement des profils de mesure sur la maquette du site CNPE de Bug	<mark>gey</mark> 229
В	Configurations d'étude pour les simulations ADMS sur le site CNPE de Bug	<mark>gey</mark> 235
С	Champs de concentration surfacique issus des simulations ADMS sur le de Bugey pour le cas de vent de Sud et de rejet en cheminée	<mark>site</mark> 237

	de Bugey pour	le cas de vent de Sud et de rejet en cheminée	237
D	Intégralité des	profils analysés pour la direction de Vent de Sud	239
	D.1 Profils dyn	amiques pour le vent de Sud	. 239
	D.1.1 Pro:	ils verticaux	. 239
	D.1.2 Pro:	ils transverses	. 243
	D.2 Profils de C		. 246
	D.2.1 Pro:	ils verticaux	. 246
	D.2.2 Pro:	ils transverses en z $= 25~{ m m}$. 248
	D.2.3 Pro:	ils transverses au sol	. 250
	D.3 Profils de f	uctuation de CTA pour le vent de Sud et le rejet en cheminée	. 252
	D.3.1 Pro:	ils verticaux	. 252
	D.3.2 Pro:	ils transverses en z = 25 m $\dots \dots \dots$. 254
	D.3.3 Pro:	ils transverses au sol	. 256
\mathbf{E}	Simulations A	DMS sur le site de Flamanville	258
	E.1 Champs de	vent pour la direction 289°	. 258
	E.2 Champs de	CTA (isocontours) pour la direction 289°	. 260
\mathbf{F}	Méthode de M	lonte-Carlo : Scatter-diagrammes complémentaires	262
\mathbf{G}	Méthode de M	lorris : ensemble des résultats	264
	G.1 Ensemble d	es résultats pour $r = 11$. 265
	G.1.1 Var	able C_{max}	. 265
	G.1.2 Var	able C_y	. 267
	G.1.3 Var	able Y_{max}	. 269
	G.2 Quelques re	$r = 8 \ldots \ldots$. 271
	G.3 Quelques re	$ m esultats \ pour \ r = 14$. 272

Nomenclature

Lettres Latines

C	:	concentration $kg.m^{-3}$ d'air
C_i	:	concentration de l'espèce i $kg.m^{-3}$ d'air
C_p	:	capacité calorifique massique à pression constante $\dots \dots \dots$
$\dot{D_i}$:	coefficient de diffusion moléculaire $\dots \dots \dots$
D_{m_i}	:	coefficient de diffusion moléculaire massique $\dots \dots \dots$
g	:	accélération de la pesanteur $m.s^{-2}$
H_{CL}	:	hauteur de la couche limité atmosphérique m
I_{turb}	:	intensité de la turbulence
K_x, K_y, K_z	:	diffusivités turbulentes dans les trois directions $\dots \dots \dots$
k	:	énergie cinétique turbulente $m^2.s^{-2}$
K_h	:	diffusivité turbulente horizontale $m^2.s^{-1}$
k_T	:	diffusivité thermique $\dots \dots \dots$
k_t	:	diffusivité thermique turbulente $\dots \dots \dots$
L_i	:	échelle de longueur intégrale de la turbulence m
L_{MO}	:	longueur de Monin-Obukhov m
l_m	:	longueur de mélange pour la quantité de mouvement m
P_k	:	terme de production d'énergie cinétique turbulente $\dots m^2.s^{-3}$
P_{r_t}	:	nombre de Prandt turbulent
p	:	pression instantannée kg.m ⁻¹ .s ⁻²
p_{ref}	:	pression de référence au niveau de la mer $\dots \dots \dots$
p^*	:	pression non hydrostatique \dots kg.m ⁻¹ .s ⁻²
R^*	:	constante des gaz parfaits en atmosphère sèche
Re	:	nombre de Reynolds
R_f	:	nombre de Richardson de flux
R_i	:	nombre de Richardson de gradient
$\overline{\overline{S}}(S_{ij})$:	tenseur des taux de déformation
S_{ct}	:	Nombre de Schmidt turbulent
T	:	température instantannée K
T_i	:	échelle de temps intégral de la turbulence s
T_v	:	température virtuelle K
U	:	échelle caractéristique de vitesse $\dots \dots \dots$
U_i	:	échelle intégrale de vitesse $\dots \dots \dots$
u, v, w	:	composantes de la vitesse dans les 3 directions $\dots \dots \dots$
u^*	:	vitesse de frottement $\dots \dots \dots$
x, y, z	:	coordonnées dans les trois directions m
X_i	:	fraction massique de l'espèce i
z_0	:	rugosité dynamique m
z_{0t}	:	rugosité thermique m

Lettres grecques

β	:	coefficient de flot tabilité m.s $^{-2}.\mathrm{K}^{-1}$
Δ_H	:	surhauteur du rejet m

ε	:	taux de dissipation d'énergie cinétique turbulente $\dots \dots \dots$
η	:	échelle de longueur de Kolmogorov m
κ	:	constante de Von Kármán ($\kappa = 0.4$)
λ	:	conductivité thermique moléculaire $W.m^{-1}.K^{-1}$
λ_t	:	conductivité thermique turbulente $\dots \dots \dots$
μ	:	viscosité moléculaire kg.m ⁻¹ .s ⁻¹
μ_t	:	viscosité turbulente kg.m ⁻¹ .s ⁻¹
ν	:	viscosité cinématique $\nu = \mu/\rho$ m ² .s ⁻¹
$ u_t$:	viscosité cinématique turbulente $\nu_t = \mu_t / \rho \dots m^2 . \mathrm{s}^{-1}$
σ_{f}	:	écart-type relatif à la variable f
$\sigma_{x,y,z}$:	écarts-types de la dispersion dans les directions x, y et z m
σ_{ε}	:	Nombre de Prandtl pour ε
σ_k	:	Nombre de Prandtl pour k
$\sigma_{ heta}$:	écart-type relatif à la variable θ , angle de variation du vent
$\overline{\overline{\tau}}(\tau_{ij})$:	tenseur des contraintes visqueuses
$ au_s$:	micro-échelle de Taylor s
θ	:	température potentielle K
$ heta_v$:	température potentielle virtuelle K
ho	:	masse volumique \ldots kg.m ⁻³
$ ho^*$:	masse volumique non hydrostatique $\dots \dots \dots$
ρ_{ref}	:	masse volumique de référence \dots kg.m ⁻³
Φ_h	:	fonction de Monin-Obhukov flux-gradient pour la température potentielle
Φ_m	:	fonction de Monin-Obhukov flux-gradient pour la quantité de mouvement
Ψ_h	:	fonction de Monin-Obhukov pour la température potentielle
Ψ_m	:	fonction de Monin-Obhukov pour la quantité de mouvement
$\overline{\overline{\Omega}} (\Omega_{ij})$:	tenseur de vorticité

Indices et exposants

$\Box_{i,j,k}$:	grandeur scalaire suivant les trois directions
\Box_S	:	source d'émission (rejet)
\Box_t	:	$\operatorname{turbulent}$
\Box'	:	fluctuation, écart à la moyenne temporelle
\Box_E	:	Eulérien
\Box_L	:	Langrangien

Opérateurs mathématiques

$\frac{df}{dt}$:	dérivée particulaire de la grandeur scalaire f
\overline{f}	:	partie moyennée de la grandeur scalaire f
f'	:	partie fluctuante de la grandeur scalaire f
δ_{ij}	:	symbole de Kronecker

Acronymes

:	Atmospheric Dispersion Modelling System
:	American Society for Testing and Materials
:	Commissariat à l'Énergie Atomique
:	Cambridge Environmental Research Consultants
:	Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique
:	Computational Fluid Dynamics
:	Couche Limite Atmosphérique
:	Couche Limite de Surface
:	Centre Nucléaire de Production d'Électricité
:	Coefficient de Transfert Atmosphérique
:	Direct Numerical Simulation
:	École Centrale de Lyon
:	European Pressurized Reactor
:	Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes
:	Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
:	Large Eddy Simulation
:	Latin Hypercube Sampling
:	Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique (UMR CNRS 5509 - ECL -
	INSA - UCLB1)
:	Département Mécanique des Fluides, Énergies et Environnement d'EDF R&D
:	Nivellement Général de la France
:	Reynolds Average Navier Stokes
:	Réacteur à eau pressurisée
:	Turbulent Kinetic Energy
:	Unites States Environmental Protection Agency

Introduction Générale

L'impact des installations industrielles sur l'environnement est un sujet majeur de préoccupation des populations. Cette sensibilité est très forte depuis longtemps pour les rejets radioactifs mais s'intensifie également pour les impacts potentiels de tout ordre. Il en résulte un durcissement des exigences de l'administration, tant au niveau français qu'européen, et des démarches de débats publics et de concertations avec les parties prenantes qui participent directement à la préparation des choix effectués par les pouvoirs publics (européens, nationaux et locaux).

Dans cette perspective, l'utilisation d'outils de modélisation dévolus aux études d'impact et de risques environnementaux liés aux rejets atmosphériques est devenue incontournable. Ces modèles s'appliquent à différentes échelles spatio-temporelles, d'une échelle locale (quelques centaines de mètres à plusieurs kilomètres) à celle d'un continent. À l'échelle locale plus particulièrement, il est nécessaire d'évaluer avec un maximum de précison l'impact des émissions pour une multitude de configurations qui diffèrent par les conditions météorologiques, mais également par la nature du site (zone urbaine, industrielle ou rurale) et sa topographie.

Pour ce faire, des modèles de plus en plus précis ont vu le jour au cours de la seconde moitié du XXème siècle, permettant de prendre en compte de manière plus ou moins réaliste les phénomènes mis en jeu, ce qui a été facilité par l'augmentation des puissances de calcul. Tous ont pour but de modéliser les processus de dispersion qui sont intrinsèquement liés aux conditions de turbulence atmosphérique. Les premiers mis en oeuvre sont les modèles gaussiens, modèles semi-analytiques introduisant des paramètres caractéristiques de la dispersion, plus connus sous le terme écarts-types de dispersion. Ces modèles s'appuient sur des paramétrisations semiempiriques, développées à partir des premières campagnes de mesures in situ. Les formulations les plus reconnues internationalement sont celles de Pasquill (1961), de Brookhaven (Islitzer & Slade (1968)) et de Briggs (1973) alors que celle de Doury (1976) a été recommandée en France pour les applications nucléaires. Ces modèles sont surtout adaptés à l'estimation de la dispersion d'un nuage de polluant sur un terrain très peu accidenté et dépourvu de bâtiments, ce qui est une limitation importante. Pour pallier ces insuffisances furent développés assez récemment des modèles gaussiens dits de "nouvelle génération", toujours fondés sur les formulations gaussiennes ou ses dérivées, mais pouvant tenir compte des bâtiments et d'un relief plus ou moins accidenté. Un des modèles les plus employés en Europe par les industriels et les instances de réglementation est aujourd'hui le modèle ADMS (Atmospheric Dispersion Modelling System, CERC (2004)), le modèle AERMOD (Cimorelli et al. (2004)) étant recommandé par l'USEPA (United States Environmental Protection Agency) aux États-Unis.

L'essort, au cours de ces dernières décades, des techniques CFD (*Computational Fluid Dy-namics*) appliquées aux écoulements atmosphériques constitue aujourd'hui une voie de modélisation qui permet de décrire la dispersion aux plus fines échelles, en résolvant explicitement la dynamique de l'écoulement ainsi que les champs des grandeurs scalaires caractéristiques de la dispersion. La CFD est ainsi particulièrement adaptée aux cas complexes où doivent être pris en compte des bâtiments et/ou une topographie accidentée. Regroupant plusieurs approches pour décrire la turbulence ainsi que le transport dans l'écoulement des grandeurs scalaires, ces modèles offrent une très grande richesse de possibilités, s'adaptant à la fois à la physique étudiée (microphysique, chimie réactive, etc ...) et au type d'étude (cas académique ou cas opérationnel complexe). Nombre de modèles CFD adaptés aux écoulements atmosphériques existent aujourd'hui, nous pouvons citer les modèles commerciaux StarCD et Fluent, ou le modèle CFD-Urban (Coirier *et al.* (2006)). Dans cette même optique, EDF R&D développe depuis plusieurs années un outil de CFD adapté aux écoulements atmosphériques et aux phénomènes de dispersion nommé *Mercure_Saturne*. Son développement est assuré conjointement par EDF R&D et le CE-REA (Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique) et il s'appuie sur le solveur Navier-Stokes Code_Saturne, développé à EDF R&D par le département MFEE (Mécanique des Fluides, Énergie et Environnement), qui est adapté aux maillages non structurés et non conformes. *Mercure_Saturne*, datant de 2003, est le prolongement de l'ancienne version MERCURE, qui était fondée sur le noyau ESTET et était restreinte aux maillages structurés. Les nouvelles caractéristiques du code offrent ainsi l'avantage de mieux s'adapter à des géométries complexes mais elles rendent plus délicats le développement de paramétrisations physiques. Il a par ailleurs été nécessaire de remplacer les outils de post-traitement qui avaient été mis en place jusqu'à maintenant.

En vue de modéliser l'impact des rejets d'effluents gazeux en fonctionnement normal ou d'évaluer les risques liés à un scenario de rejet accidentel sur site nucléaire, les services d'ingénierie ont recours à des modèles opérationnels capables de traiter un grand nombre de situations dans un temps très court. Ces modèles sont très majoritairement fondés sur la formulation gaussienne. Une question posée par l'ingénierie concerne alors leur réelle capacité à retranscrire les processus dispersifs dès lors qu'interviennent des phénomènes propres à la présence de bâtiments ou d'un relief fortement accidenté. Il est également intéressant de regarder comment les modèles complexes de type CFD parviennent alors à améliorer la qualité de la prévision, en regard notamment du sur-coût de calcul qu'ils induisent. Ainsi, un réel besoin de l'ingénierie est de comparer sur des cas complexes les performances des deux types de modèles, notamment pour dessiner les limites d'utilisation et les erreurs propres aux modèles opérationnels. Cette volonté s'inscrit dans une démarche actuelle très répandue d'inter-comparaison de modèles (par exemple Perkins et al. (2005b)). Elle a été aussi à l'origine de la constitution de bases de données en libre accès regroupant des campagnes de mesures bien connues. Ainsi l'initiative HARMO (Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, http://www.harmo.org) a-telle élaboré le "Model Validation Kit" alors que les instances réglementaires américaines ont mis en place un cadre normatif pour la validation de modèles à travers la norme ASTM (American Society for Testing and Materials) D6589 décrite par le Standard Guide for Statistical Evaluation of Atmospheric Dispersion Models (Irwin et al. (2003)).

Une autre question cruciale adressée par les opérationnels et les instances réglementaires concerne l'incertitude associée aux prédictions de ces modèles. En effet, l'incertitude propre aux données utilisées en entrée des modèles ou à certains paramètres internes induit une variabilité sur les prédictions qu'il peut être nécessaire de quantifier. Parallèlement, il est utile de parvenir à identifier et hiérarchiser les facteurs d'entrée les plus influents. Cette préoccupation n'est pas récente et a déjà été mise en avant par Baird (1989) dans un cadre général de réglementation et par Pielke (1998) en l'appliquant au cas de la prévision de la qualité de l'air. Notamment, l'incertitude sur les champs météorologiques en entrée des modèles ou sur les paramètres d'émission peuvent expliquer en partie les écarts constatés entre prévisions des modèles et observations sur des campagnes de mesure du passé (Irwin et al. (2001)). De nombreuses méthodes permettent de répondre à ces questions et proposent une analyse complète de l'incertitude et de la sensibilité aux facteurs d'entrée. Elles ont déjà été appliquées aux modèles gaussiens mais leur association avec un modèle complexe, fortement non-linéaire, et coûteux numériquement tel qu'un outil CFD reste un sujet difficile et d'actualité, les études en la matière étant rares. Cependant, une telle démarche est vouée à être systématisée dans le futur, grâce notamment à l'augmentation des moyens de calcul et au développement du calcul parallèle.

Ce travail de thèse s'inscrit dans la volonté de répondre aux attentes des unités opérationnelles formulées ci-dessus et présente ainsi les trois objectifs suivants :

- la validation de l'outil Mercure_Saturne utilisé avec une approche RANS (Reynolds Average Navier-Stokes) dans le cadre d'étude d'impact ou de scénario accidentel sur site nucléaire lorsque sont pris en compte à la fois des bâtiments et le relief.
- la comparaison du modèle Mercure_Saturne à un outil gaussien plus simple et moins onéreux en terme de coût de calcul qu'est le logiciel ADMS (Atmospheric Dispersion Modelling System), utilisé par les équipes opérationnelles et qui possède des caractéristiques communes à un grand nombre de modèles employés dans la communauté scientifique et par les instances de réglementation françaises et internationales.
- la quantification des incertitudes liées à l'utilisation du modèle *Mercure_Saturne*. Une première voie peut être l'estimation des fluctuations de concentration propres à la nature turbulente de l'atmosphère. Une seconde peut être l'estimation de l'incertitude globale sur le champ de concentration moyen calculé à partir de la variabilité propre à certains facteurs d'entrée tels que les données météorologiques en amont du domaine de calcul.

Autour des objectifs ainsi dessinés, ce mémoire s'articule en cinq chapitres :

Le chapitre 1 introduit certains éléments théoriques de la physique de l'atmosphère et de la dispersion atmosphérique dans la couche limite et présente les principales approches existant à ce jour pour modéliser la dispersion atmosphérique à l'échelle locale. Nous développerons davantage les outils utilisés dans le cadre de ce travail, le modèle gaussien de dernière génération ADMS ainsi que l'outil *Mercure_Saturne* et l'approche RANS qui lui est associée.

Le chapitre 2 consiste en une étude préliminaire dont l'objectif est la comparaison de l'outil Mercure_Saturne à des modèles à panache gaussien classiques que sont les formulations de Briggs et de Doury sur la campagne de mesures Prairie Grass (Barad (1958)), celle-ci ayant été largement utilisée dans le cadre du développement des formulations gaussiennes et dans la validation de modèles de dispersion jusqu'à ce jour. Cette étude a fait l'objet d'un article à paraître (Demaël & Carissimo (2007)).

Le chapitre 3 est dévolu à l'étude de l'écoulement et de la dispersion atmosphérique sur le site du Centre Nucléaire de Production d'Électricité de Bugey (Ain, France) à partir d'une étude en soufflerie réalisée en amont par le LMFA (Laboratoire de Mécanique des Fluides, École Centrale de Lyon) en 2000 et qui avait été commandée par l'IRSN (Institut National de Sûreté et de Radioprotection). Cette étude a pour objectif de comparer les outils *Mercure_Saturne* et ADMS sur un cas où les bâtiments sont susceptibles d'influer fortement sur les processus dispersifs à proximité de la centrale.

Le chapitre 4 présente une étude comparable pour le site de Flamanville (Manche, France) qui accueillera le prochain réacteur EPR (*European Pressurized Reactor*). Encore une fois seront comparés les modèles *Mercure_Saturne* et ADMS sur un site présentant une topographie complexe à travers l'abrupte falaise accolée aux bâtiments.

Enfin, le *chapitre 5* est consacré à la thématique de l'analyse d'incertitudes avec le modèle *Mercure_Saturne* en l'appliquant au cas de la dispersion autour du CNPE de Bugey. Il propose pour cela deux approches. La première est l'application de la méthode de Morris (Morris (1991)), appartenant à la famille des *screening methods*, qui permet de classer en terme d'importance et de manière qualitative les sources d'incertitude. La seconde est la méthode de Monte-Carlo qui permet de quantifier à la fois l'incertitude globale sur le champ de concentrations calculé et la sensibilité à chacune des sources d'incertitude que nous aurons retenues.

Chapitre 1

Modélisation de la dispersion en terrain complexe

Nous fournissons dans ce chapitre les éléments de base permettant d'appréhender les phénomènes de dispersion turbulente dans l'atmosphère ainsi que les différentes approches de modélisation couramment utilisées, en se focalisant sur l'échelle locale. Nous insisterons plus en détails sur les méthodes retenues dans le cadre de ce travail et les outils *Mercure* et ADMS.

1.1 Éléments de base de micrométéorologie

1.1.1 Couche limite atmosphérique (CLA)

La couche limite atmosphérique (CLA) est la couche la plus basse de la troposphère et n'en constitue qu'une faible partie, de l'ordre de 10%, dont le sommet varie de quelques centaines de mètre à guère plus de 2 km. Cependant, cette couche tient un rôle particulièrement important dans de nombreux champs d'application incluant notamment la pollution atmosphérique, la micrométéorologie ou encore la prévision du temps.

La CLA est le siège de fortes interactions entre l'atmosphère et la surface terrestre, sur des échelles de temps de l'ordre de quelques heures à la journée, qui se traduisent de deux manières : par des effets purement mécaniques dus au forcage exercé par le sol sur la couche d'air d'une part, par des effets thermiques correspondant aux échanges de chaleur entre ces derniers d'autre part. Ces échanges de quantité de mouvement et de chaleur se transmettent alors efficacement et rapidement à l'ensemble de la CLA par transfert turbulent et mélange.

Deux sous-couches principales constituant la CLA peuvent être distinguées :.

- Dans la partie supérieure de celle-ci, l'influence de la surface ne se fait que faiblement sentir et les effets de Coriolis dus à la rotation de la terre sont alors prépondérants. Cette partie supérieure porte le nom de **couche d'Ekman**, ce dernier ayant été le premier à mettre en évidence les effets de la rotation de la terre sur l'écoulement de couche-limite au-dessus des océans en 1905.
- La partie inférieure est la couche de surface (CLS) encore appelée **couche limite super**ficielle et s'étend du sol jusqu'à une altitude correspondant environ à un dixième de la hauteur globale H_{CL} . Au sein de cette couche, il est possible d'identifier deux zones : la sous-couche rugueuse et la sous-couche inertielle.

Dans la **sous-couche rugueuse**, l'écoulement du vent dépend directement des variables locales de la surface (petite topographie, végétation, environnement urbain). Ces obstacles génèrent de nombreux tourbillons caractérisés par une turbulence très intermittente et instationnaire. C'est dans cette couche qu'ont lieu les échanges d'énergie, de quantité de mouvement et de matière entre le sol et l'atmosphère. Juste au-dessus se trouve la **sous-couche inertielle** caractérisée par un écoulement de vent quasi-stationnaire où les forces de Coriolis restent négligeables, la direction du vent restant ainsi constante avec l'altitude. Les flux verticaux de quantité de mouvement, de masse et de chaleur y sont constants et les caractéristiques de la surface n'influencent l'écoulement qu'à travers des paramètres macroscopiques appelés longueurs de rugosité dynamique (z_0) et thermique (z_{0t}) . Enfin, le terme **canopée** (urbaine ou végétale) est introduit pour désigner la partie la plus basse de la sous-couche rugueuse qui comporte les éléments de forçage mécanique et thermique (bâtiments, arbres). La figure 1.1 schématise le découpage par tranches de la CLA.



FIG. 1.1 : Schématisation de la couche limite atmosphérique (CLA), plus basse couche de la troposphère (d'après Arya, 1982)

1.1.2 Turbulence atmosphérique à micro échelle dans la CLA

La CLA est par nature fortement turbulente, caractérisée par un nombre de Reynolds (Re) très élevé. En effet, si l'on considère une vitesse caractéristique du vent $U = 10 \, m.s^{-1}$, pour une viscosité cinématique de l'air ν de l'ordre $10^{-5} \, m^2.s^{-1}$ et une épaisseur de la couche limite atmosphérique $H_{CL} = 1000 \, m$, l'ordre de grandeur de Re est alors largement supérieur à la valeur critique de transition $R_{e_{crit}}$ d'un écoulement laminaire vers un écoulement turbulent :

$$R_e = \frac{UH_{CL}}{\nu} = 10^9 >> R_{e_{crit}} \approx 3000$$

La turbulence atmosphérique est fortement anisotrope, du fait notamment de l'interaction avec la surface terrestre et des effets de flottabilité inhérents au forçage thermique selon la verticale. Variable en temps et en espace, elle est tridimensionnelle et rotationnelle. Elle est également multi-échelle, caractérisée par une gamme très étendue de structures turbulentes ou tourbillons. Nous pouvons décrire qualitativement les phénomènes dans le cadre d'une turbulence homogène isotrope.

Chaque gamme de tourbillons possède une énergie propre et l'ensemble des tourbillons présente une énergie globale notée e qui peut être vue comme l'intégrale de la fonction densité spectrale d'énergie E_k :

$$\int_0^\infty E(k)dk = e \tag{1.1.1}$$

1.1 Éléments de base de micrométéorologie

Parmi l'ensemble des échelles de longueur -ou échelles temporelles- liées aux structures turbulentes, certaines permettent de caractériser l'écoulement. Une première échelle est propre aux grandes structures, appelée échelle intégrale et notée L_i , à laquelle est associée l'échelle de temps intégrale T_i , qui représente l'échelle de temps des tourbillons recevant de l'écoulement moyen la plus grande partie de l'énergie e. L'autre échelle de longueur, notée η , est caractéristique des plus petits tourbillons. L'interaction entre les différentes structures turbulentes est décrit qualitativement par le principe de la cascade énergétique, introduit par Richardson en 1922 et formalisé par Kolmogorov en 1941, selon lequel l'énergie est transférée continuement des grandes structures, crées sous l'effet conjugué des gradients moyens et de la stratification atmosphérique, vers les petites structures, crées par instabilité et rupture des tourbillons d'échelle supérieure (Fig. 1.2). L'application de ce principe aux écoulements atmosphériques a été validé par des campagnes de mesures (Lumley & Panofsky (1964)).



FIG. 1.2: Représentation schématique du spectre d'énergie turbulente (d'après Garratt (1992))

Selon Kolmogorov (1941), les petites échelles correspondent à une turbulence en équilibre statistique caractérisée uniquement par le taux de dissipation de l'énergie turbulence ε et par la viscosité dynamique ν . Les échelles caractéristiques (micro-échelles de Kolmogorov) de longueur η et de vitesse v sont alors définies par :

$$\eta \approx \nu^{3/4} \varepsilon^{-1/4} \tag{1.1.2}$$

$$v \approx \nu^{1/4} \varepsilon^{1/4} \tag{1.1.3}$$

Les échelles de Kolmogorov sont reliées aux échelles intégrales de longueur L_i et de vitesse U_i de la façon suivante :

$$\frac{L}{\eta} \approx Re^{3/4} \quad et \quad \frac{U_i}{v} \approx Re^{1/4} \tag{1.1.4}$$

Enfin, il existe une partie du spectre appelée zone inertielle correspondant au transfert d'énergie des grandes structures vers les plus petites. Dans cette zone, la fonction d'énergie spectrale est donnée par : $E(\kappa) = \alpha \varepsilon^{2/3} N^{-5/3}$ où α est une constante universelle.

1.1.3 Équations fondamentales

Équations instantannées

Nous introduisons dans ce paragraphe les équations fondamentales de la dynamique des fluides régissant les écoulements dans la couche limite atmosphérique. L'approche eulérienne est ici adoptée qui consiste à décrire l'évolution spatiale d'une variable f en tout point du domaine fluide \underline{x} et pour tout instant t. Le système d'équations comprend une équation de conservation de la masse, trois équations portant sur les trois composantes du vent (ou équations de Navier-Stokes), une équation de conservation de l'énergie à laquelle est ajoutée une équation d'état.

Conservation de la masse

L'équation de conservation de la masse (ou équation de continuité) s'écrit :

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1.1.5}$$

Il est couramment fait usage de l'hypothèse d'incompressibilité dans la CLA, les effets de compressibilité n'étant généralement pas importants. Néanmoins, nous conservons ici le caractère compressible en retenant notament l'hypothèse anélastique (Ogura & Phillips (1962), Pielke (1984)) qui permet de filtrer les ondes acoustiques tout en maintenant l'hypothèse de compressibilité. L'équation de conservation s'écrit alors :

$$\frac{\partial \left(\rho u_i\right)}{\partial x_i} = 0 \tag{1.1.6}$$

Bilan de quantité de mouvement (ou équations de Navier-Stokes)

Au sein de la CLA, les équations de Navier-Stokes mettent en jeu les forces de pesanteur, les effets visqueux, et les effets de Coriolis. À une échelle suffisamment petite, les effets de Coriolis peuvent être négligés, si bien que celles-ci s'écrivent :

$$\frac{d\left(\rho u_{i}\right)}{dt} = \underbrace{\rho \frac{\partial u_{i}}{\partial t}}_{A} + \underbrace{\rho u_{j} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}}}_{B} = -\underbrace{\rho g \,\delta_{i3}}_{C} - \underbrace{\frac{\partial p}{\partial x_{i}}}_{D} + \underbrace{\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_{i}}}_{E} \tag{1.1.7}$$

Les différents termes de l'équation sont :

- (A) : le terme instationnaire (ou terme d'inertie)
- (B) : le terre d'advection
- (C) : le terme de gravité
- (D) : le terme de gradient de pression
- (E) : le terme de viscosité moléculaire

L'air étant considéré comme un fluide Newtonien, le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} est décrit classiquement à l'aide du tenseur de déformation des vitesses $S_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right]$ et de la viscosité moléculaire μ :

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}$$
(1.1.8)

Équation d'état

Afin de prendre en compte l'eau sous forme de vapeur, l'équation d'état pour une parcelle d'air humide est :

$$p = R^* \rho T_v, \tag{1.1.9}$$

où p est la pression de l'air, ρ la masse volumique, R^* la constante des gaz parfaits pour l'air sec et T_v la température virtuelle définie à partir de la température absolue T de la manière suivante :

$$T_v = T(1+0.61q) \tag{1.1.10}$$

avec $q = 0.622 \frac{e}{p}$, où q est l'humidité spécifique et e la pression de vapeur saturante.

Pour caractériser l'état thermodynamique de l'atmosphère, il est fait usage d'une variable appelée température potentielle θ qui est définie comme la température d'une parcelle d'air amenée adiabatiquement de sa position initiale à une pression de référence au niveau de la mer p_{ref} :

$$\theta = T \left(\frac{p_{ref}}{p}\right)^{\gamma} \quad \text{avec} \quad \gamma = R^* / C_p$$
(1.1.11)

La relation est identique en atmosphère humide pour la température potentielle virtuelle θ_v en remplaçant T par T_v .

Conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie est encore dénommée équation de la chaleur ou équation bilan de l'enthalpie. Elle peut se mettre sous la forme d'une équation d'évolution de la variable θ (Carissimo *et al.* (1995)) :

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial\theta}{\partial t} + u_j \frac{\partial\theta}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho C_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial\theta}{\partial x_j}\right) + S_\theta \tag{1.1.12}$$

où λ est la conductivité thermique moléculaire et S_{θ} un terme source additionnel (positif ou négatif) qui peut inclure la chaleur latente dégagée lors des éventuels changements de phase ainsi que la divergence des flux radiatifs lorsque ces derniers sont considérés.

Prise en compte de la turbulence

Dans le but de parvenir à une modélisation de la nature turbulente des écoulements décrits par les équations fondamentales de la mécanique des fluides, Reynolds (1894) a introduit un opérateur de moyenne permettant de décomposer les grandeurs calculées en une partie moyennée et une partie représentative des fluctuations. Cet opérateur possède les propriétés suivantes, définies pour une variable f et sa fluctuation f':

$$\langle f' \rangle = 0 \tag{1.1.13}$$

$$\langle f_1 f_2 \rangle = \langle f_1 \rangle \langle f_2 \rangle + \langle f'_1 f'_2 \rangle$$
 (1.1.14)

$$f_1 + f_2 > = \langle f_1 \rangle + \langle f_2 \rangle \tag{1.1.15}$$

$$\langle \alpha f \rangle = \alpha \langle f \rangle$$
 (1.1.16)

Dans la suite, $\langle f \rangle$ sera remplacé par la notation usuelle \overline{f} .

<

Cette décomposition s'applique ainsi à toutes les variables dynamiques et grandeurs scalaires soit :

$$u_i = \overline{u} + u'_i \tag{1.1.17}$$

$$p = \overline{p} + p' \tag{1.1.18}$$

$$\theta = \theta + \theta' \tag{1.1.19}$$

$$f = f + f' (1.1.20)$$

L'application de l'opérateur Moyenne de Reynolds dans les précédentes équations, en utilisant la propriété de l'opérateur dérivation $(\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{\partial \overline{f}}{\partial x_i})$ aboutit aux équations moyennées suivantes : <u>Conservation de la masse :</u>

Nous utilisons l'approximation de Boussinesq qui permet de substituer ρ par $\overline{\rho}$ en considérant que la fluctuation de la masse volumique reste faible dans la CLA, sauf pour le terme de flottabilité. On a alors :

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\,\overline{u_i}\right)}{\partial x_i} = 0 \tag{1.1.21}$$

Bilan de quantité de mouvement (ou équations de Navier-Stokes)

L'écriture moyennée des équations de Navier-Stokes dans la CLA sous l'approximation de Boussinesq donne :

$$\overline{\rho}\left[\frac{\partial\overline{u_i}}{\partial t} + \overline{u}_j\frac{\partial\overline{u_i}}{\partial x_j}\right] = -\overline{\rho}\left[1 - \beta\left(\overline{\theta} - \theta_{ref}\right)\right]g\delta_{i3} - \frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\tau_{ij} - \overline{\rho}\overline{u'_iu'_j}\right)$$
(1.1.22)

La prise en compte de la turbulence dans les équation de quantité de mouvement fait ainsi apparaître des termes supplémentaires sous la forme de corrélations doubles entre fluctuations de vitesse $-\overline{\rho u'_i u'_j}$. Ces termes portent le nom de tensions de Reynolds ou encore de flux turbulents de quantité de mouvement et représentent de nouvelles inconnues.

Nous pouvons par ailleurs introduire l'équation d'équilibre hydrostatique, entre force de pesanteur et gradient de pression, issue de la projection de l'équation (1.1.22) sur l'axe vertical, en l'absence de mouvement, soit :

$$\frac{\partial \overline{p}}{\partial z} = -\overline{\rho}g \tag{1.1.23}$$

Si à l'équilibre hydrostatique nous associons une pression de référence p_{ref} et une masse volumique de référence ρ_{ref} , l'écriture de l'équation 1.1.22, en terme de déviation par rapport à cet état de référence, donne :

$$\overline{\rho}\left[\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}\right] = -\overline{\rho^*} g \delta_{i3} - \frac{\partial \overline{p^*}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\tau_{ij}} - \overline{\rho} \overline{u'_i u'_j}\right)$$
(1.1.24)

où : $p^* = p - p_{ref}$ et $\rho^* = \rho - \rho_{ref}$

C'est cette forme des équations qui est souvent utilisée dans les modèles numériques (Pielke (1984)).

Conservation de l'énergie

Un traitement similaire de l'équation (1.1.12) conduit à :

$$\frac{\partial \overline{\theta}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\overline{\rho} C_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} - \overline{\theta' u'_j} \right) + \overline{S_{\theta}}$$
(1.1.25)

Cette équation fait également intervenir une nouvelle corrélation entre fluctuation de température et fluctuation de vitesse $-\overline{\theta' u'_{j}}$.

1.1.4 Stratification thermique

Dans la CLA, la température, ainsi que la masse volumique, ne sont pas homogènes dans la verticale. En effet, si l'on introduit la définition de la température potentielle virtuelle et l'équation d'état (1.1.9) dans l'équation d'équilibre hydrostatique (1.1.23), le gradient vertical de température virtuelle s'écrit :

$$\frac{\partial \theta_v}{\partial z} = \frac{\theta_v}{T_v} \left(\frac{\partial T_v}{\partial z} + \Gamma \right) \approx \frac{\partial T_v}{\partial z} + \Gamma \text{ avec } \Gamma = -\frac{g}{C_p} \quad \left(= 9.8 K. km^{-1} \right) \tag{1.1.26}$$

Des critères locaux de stabilité peuvent alors être définis en fonction du signe de $\frac{\partial \theta_v}{\partial z}$:

- atmosphère stable : $\frac{\partial \theta_v}{\partial z} > 0$
- atmosphère instable : $\frac{\partial \theta_v}{\partial z} < 0$
- atmosphère neutre : $\frac{\partial \theta_v}{\partial z} = 0$

Afin de faire le lien entre stratification thermique et turbulence, introduisons l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulence k, définie par : $k = \frac{1}{2} \left(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2} \right)$, en faisant l'hypothèse d'un écoulement isovolume et homogène horizontalement (Stull (1988)) :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{w}\frac{\partial k}{\partial z} = \underbrace{-\frac{1}{\overline{\rho}}\frac{\partial\left(\overline{w'p'}\right)}{\partial z}}_{A} \underbrace{-\frac{\partial\overline{(w'k)}}{\partial z}}_{B} \underbrace{-\overline{u'w'}\frac{\partial\overline{u}}{\partial z} - \overline{v'w'}\frac{\partial\overline{v}}{\partial z}}_{C} + \underbrace{\frac{g}{\theta_v}\left(\overline{w'\theta'_v}\right)}_{D} - \underbrace{\varepsilon}_{E} \tag{1.1.27}$$

avec :

- (A) : terme de distribution par fluctuation de pression
- (B) : terme de diffusion turbulente de k
- (C) : terme de production mécanique, par effets de cisaillement
- (D) : terme de production thermique, par effets de flottabilité
- (E) : terme de dissipation

Cette équation met en évidence la "compétition" entre production mécanique (terme C) et production thermique (terme D). Pour évaluer les effets de la stratification thermique, le ratio de ces deux termes a été introduit, connu sous le nom de nombre de Richardson R_f :

$$R_f = \beta \frac{\overline{w'\theta'_v}}{\overline{u'w'}\frac{\partial \overline{u}}{\partial z} + \overline{v'w'}\frac{\partial \overline{v}}{\partial z}}$$
(1.1.28)

où β est le coefficient de flottabilité défini par : $\beta = \frac{g}{\overline{\theta}_{\alpha}}$.

Il est également fait usage du nombre de Richardson de gradient R_i dont la définition s'apparente à celle du nombre précédent en utilisant uniquement les gradients de grandeurs moyennes :

$$R_{i} = \beta \frac{\partial \theta_{v} / \partial z}{\left[\left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right)^{2} + \left(\frac{\partial \overline{v}}{\partial z} \right)^{2} \right]}$$
(1.1.29)

Une condition nécessaire d'instabilité dynamique est donnée par la relation : $R_i < R_{ic}$, où R_{ic} est une valeur critique dont de nombreux travaux de recherche empiriques ou théoriques ont donné une valeur comprise entre 0.21 et 0.25 (Stull (1988)). Par opposition, un écoulement turbulent devient laminaire pour une valeur de R_i supérieur à 1.

1.1.5 Théorie de similitude

Dans de nombreuses modèles de dispersion atmosphérique, il est nécessaire de connaître les profils de vent et de température régnant au sein de la CLA. Dans les cas d'étude que nous développerons dans la suite de ce manuscrit, la donnée du profil de vent notamment sera essentielle, afin de définir les conditions limites sur notre domaine de calculs lorsque l'on utilisera l'outil *Mercure_Saturne*. Dans ce but, un grand nombre d'études empiriques et théoriques ont été réalisées afin de parvenir à une paramétrisation de la CLA, aussi bien dynamique que thermique, représentative des conditions de stabilité. Nous donnons dans ce paragraphe l'ensemble des lois issues de l'application du théorème de Vaschy-Buckingham qui permet de relier les variables caractéristiques de la CLA sous la forme de nombres adimensionnels.

Flux turbulents surfaciques

Considérons un écoulement atmosphérique homogène, turbulent et pleinement développé sur une surface plane et uniformément rugueuse. L'équation de quantité de mouvement moyennée au sens de Reynolds (1.1.22) et projetée dans la direction x du vent moyen s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} - \tau_u \right) = 0 \tag{1.1.30}$$

où τ_u regroupe les trois composantes du tenseur de Reynolds τ_{ij} suivantes : $\overline{u'^2}$, $\overline{u'v'}$ et $\overline{u'w'}$.

Selon ces hypothèses, le transport de quantité de mouvement s'opère uniquement dans la direction verticale et ne conduit à des inhomogénéités turbulentes que dans cette même direction. Ainsi, seul le flux de quantité de mouvement $\overline{u'w'}$ est à prendre en compte. On introduit alors le flux turbulent de quantité de mouvement au niveau du sol $(-\overline{u'w'})_0$ par l'intermédiaire d'une vitesse de frottement u_* reliée au frottement exercé par la surface : $u_* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}}$. L'équation (1.1.30) intégrée verticalement et divisée par la masse volumique $\overline{\rho}$ s'écrit alors :

$$\nu \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} - \overline{u'w'} = u_*^2 \tag{1.1.31}$$

De manière analogue, l'équation (1.1.25) s'écrit sous ces hypothèses :

$$\frac{\lambda}{C} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial z} - \overline{w'\theta'} = Q_0 , \qquad (1.1.32)$$

où Q_0 est le flux de chaleur au sol.

Analyse adimensionnelle

Le théorème de Vaschy-Buckingham (1914) stipule qu'une relation faisant intervenir n variables et un nombre k de dimensions physiques (par exemple, la longueur [L], le temps [t], la masse [M]) peut être réduite à une relation faisant intervenir (n-k) paramètres adimensionnés. Nous pouvons différencier ainsi deux cas : le cas neutre où le nombre de dimensions physiques est égal à 2 ([L] et [t]) et le cas à couche stratifiée de dimension 3 ([L[, [t] et la température [T]).

Par conséquent, trois paramètres adimensionnels peuvent représenter l'ensemble des variables figurant dans les équations (1.1.31) et (1.1.32). Nommés A_1, A_2 et A_3 , ils s'écrivent (Stull (1988)) :

$$A_1 = \frac{zu_*}{\nu}$$
(1.1.33)

$$A_2 = \frac{z}{u_*} \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \tag{1.1.34}$$

$$A_3 = \frac{z}{L} \tag{1.1.35}$$

L est une échelle de longueur caractéristique de la flottabilité. Elle est appelée longueur d'Obukhov (ou de Monin-Obukhov selon les auteurs) et sera notée dorénavant L_{MO} . Elle est définie de la manière suivante :

$$L_{MO} = -\frac{u_*^3}{\kappa \beta Q_0} = \frac{u_*^2}{\kappa \beta \theta_*},$$
 (1.1.36)

où $\theta_* = -\frac{Q_0}{u_*}$ est une échelle caractéristique de la température appelée température de frottement.

La longueur L_{MO} est particulièrement importante puisqu'elle permet de caractériser la stabilité atmosphérique de la couche de mélange. Le terme $\xi = z / L_{MO}$ traduit, tout comme R_i la compétition entre effets de cisaillement et flottabilité. Ainsi, nous pouvons définir formellement d'autres critères de stabilité locaux :

- pour une atmosphère stable : $\xi > 0$ ou $L_{MO} > 0$
- pour une atmosphère instable : $\xi < 0$ ou $L_{MO} < 0$
- pour une atmosphère neutre : $\xi = 0$ ou $L_{MO} \pm \infty$

De manière pratique, l'intervalle "neutre" peut être considéré comme correspondant à un intervalle de variation de z/L_{MO} compris entre -1/100 et 1/100. S'il n'y a pas de règles strictes, on peut garder en tête l'espace possible de correspondance entre la valeur de L_{MO} et l'état de stabilité de l'atmosphère (Fig. 1.3). Cette valeur de L_{MO} peut s'avérer cruciale lorsqu'elle entre en jeu dans les paramétrisations dynamique et thermique de la CLA, comme nous le verrons dans les paragraphes suivants. Pour nous, il s'agira notamment d'un paramètre d'intérêt lors de la recherche de paramètres d'entrée influençant sensiblement nos résultats en terme de champs de concentration (cf chapitre 5).

Profils dynamique dans une couche neutre

Dans le cas neutre, les deux paramètres adimensionnels A_1 et A_2 sont suffisants pour décrire la couche limite. Ainsi, l'application du théorème de Vaschy-Buckingham à l'équation (1.1.31) conduit à la relation suivante :



FIG. 1.3 : Représentation schématique de la variation de la longueur de Monin-Obukhov L_{MO} avec la stabilité atmosphérique, in CERC (2004)

$$\frac{z}{\overline{u}}\frac{\partial\overline{u}}{\partial z} = \text{const} = \frac{1}{\kappa} \tag{1.1.37}$$

Le gradient de vitesse adimensionnalisé est ainsi défini comme une constante dont l'inverse est connue sous le nom de constante de Von Kármán. Celle-ci vaut approximativement 0.4 d'après les études expérimentales de couches limites (en réalité, $\kappa \in [0.35; 0.42]$). L'intégration de 1.1.37 en plaçant l'origine au niveau du sol conduit à la loi logarithmique suivante :

$$\overline{u(z)} = \frac{u_*}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) , \qquad (1.1.38)$$

où z_0 est la rugosité dynamique.

Nous reviendrons dans le paragraphe consacré au traitement des conditions limites dans Mercure_Saturne (cf paragraphe 1.5.2) sur les profils de quantités turbulentes, l'énergie cinétique turbulente k et le taux de dissipation associé ε , qui peuvent être déduits du profil de vent.

Nous donnons en revanche les relations empiriques portant sur les variances de vitesse, qui sont décrits à la fois pour la CLA et pour la CLS (Stull (1988)) :

<u>Relations de la CLA</u> :

$$\frac{\overline{u'^2}}{u_*^2} = 6\left(1 - \frac{z}{H_{CL}}\right)^2 + \frac{z}{H_{CL}}\frac{\overline{u'^2}_{top}}{u_*^2}$$
(1.1.39)

$$\frac{v'^2}{u_*^2} = 3\left(1 - \frac{z}{H_{CL}}\right)^2 + \frac{z}{H_{CL}}\frac{v'^2_{top}}{u_*^2}$$
(1.1.40)

$$\frac{w^{\prime 2}}{u_*^2} = \left(1 - \frac{z}{H_{CL}}\right)^{1/2} \tag{1.1.41}$$

où u'_{top} et v'_{top} sont les fluctuations de vitesse estimées au sommet de la couche limite. Le ratio entre ces valeurs et u_* est supposé varier d'une situation à une autre et n'est donc pas facilement paramétrable.

La hauteur de couche limite atmosphérique H_{CL} pour des conditions de stabilité neutre peut être déterminée à partir de la relation suivante :

$$H_{CL} = C_H \frac{u_*}{|f|},\tag{1.1.42}$$

où f est le paramètre de Coriolis et C_H un coefficient compris entre 0.2 (Garratt (1992)) et 0.3 (Arya (1999)).

Relations de la CLS (Stull (1988)):

$$\frac{u'^2}{u_*^2} \in [6.1; 6.5] \tag{1.1.43}$$

$$\frac{v'^2}{u_*^2} \in [2.9; 6.1] \tag{1.1.44}$$

$$\frac{\overline{u'^2 + \overline{v'^2}}}{u_*^2} = 8.5 \tag{1.1.45}$$

$$\frac{w^{\prime 2}}{u_*^2} \in [1.0; 2.5] \tag{1.1.46}$$

Les différentes observations effectuées ont conduit à un encadrement des valeurs possibles pour les variances de vitesse. En utilisant les relations (1.1.45) et (1.1.46) et en prenant la borne supérieure, nous pouvons déterminer un coefficient de proportionnalité entre l'énergie cinétique turbulente k et la vitesse de frottement $u_*: k \approx 5.5u_*^2$. Cette dernière relation a son intérêt, nous y reviendrons dans le paragraphe 1.4.4.

Profil de la dynamique dans une couche stratifiée

Dans le cas général d'une atmosphère stratifiée, les trois paramètres adimensionnés A_1 , A_2 et A_3 entrent en jeu. La théorie de similitude de Monin-Obukhov (1954) permet alors d'obtenir les profils dynamiques et thermique en introduisant des fonctions de similitude (appelées également fonctions de Monin-Obukhov).

Si Φ_m est la fonction de similitude pour le vent, le profil théorique est donné par la relation suivante :

$$\left(\frac{\kappa z}{u_*}\right)\left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial z}\right) = \Phi_m(\xi) \tag{1.1.47}$$

Son intégration permet de remonter au profil de vent :

$$\overline{u(z)} = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \Psi_m(\xi) \right]$$
(1.1.48)

où Ψ_m est donné par :

$$\Psi_m(\xi) = \int_{z_0/L_{MO}}^{z/L_{MO}} \left[1 - \Phi_m(\xi)\right] \frac{d\xi}{\xi}$$
(1.1.49)

La détermination des fonctions de similitude a fait l'objet de nombreuses études expérimentales. Nous pouvons citer les relations suivantes : Businger et al (1971), Dyer (1974) ou encore Louis (1979). Nous donnons ici, pour la quantité de mouvement, les formules de Businger et Dyer qui sont les plus couramment utilisées :

$$\Phi_h(\xi) = \Phi_m^2(\xi) = (1 - 15\xi)^{-1/2}, \text{ si } -5 < \xi < 0$$

$$\Phi_h(\xi) = \Phi_m(\xi) = 1 + 5\xi, \text{ si } 0 \le \xi < 1$$
(1.1.50)

Enfin, il est aussi possible d'accéder au coefficient de diffusivité pour la quantité de mouvement noté K_m et celui pour les autres scalaires, noté K_h :

$$K_m = \frac{\kappa z u_*}{\Phi_m(\xi)} \tag{1.1.51}$$

$$K_h = \frac{\kappa z u_*}{\Phi_h(\xi)} \tag{1.1.52}$$

Les relations pour les quantités turbulentes similaires aux équations (1.1.40) à (1.1.41) et (1.1.43) à (1.1.46) ne sont pas ici développées. Le lecteur pourra se reporter à Stull (1988).

Nous noterons enfin que toutes les relations décrites dans ce paragraphe pour une atmosphère stratifiée conduisent à celles formulées dans le cas neutre lorsque l'on fait tendre L_{MO} vers l'infini.

1.2 Dispersion à l'échelle locale et en environnement complexe

1.2.1 Nature de la dispersion atmosphérique

La dispersion turbulente définit le phénomène physique d'expansion dans le temps et dans l'espace d'un nuage d'espèces chimiques inertes ou réactives, de polluants par exemple, issu d'un rejet qui peut avoir différentes caractéristiques : rejets continus ou instantanés, ponctuels ou volumiques par exemple. Elle résulte de l'interaction entre trois processus physiques distincts : l'advection, la diffusion moléculaire et la diffusion turbulente..

L'advection désigne simplement le transport de l'espèce ou du polluant par le vent alors que la *diffusion moléculaire* est un mécanisme de transport de la matière à une échelle microscopique, conduisant à l'échelle macroscopique à une dilution et ainsi une homogénéisation dans l'espace de l'espèce.

L'interaction entre advection et diffusion turbulente est particulièrement forte au sein d'écoulements turbulents, à l'image de la CLA, et renforce l'homogénéisation du nuage de polluant. Celui-ci est en effet soumis à l'ensemble des structures turbulentes d'échelles différentes qui participent toutes à leur manière au transport et à la déformation progressive du nuage. La dispersion turbulente dépend ainsi des caractéristiques de l'écoulement. Si l'on introduit la concentration instantanée C d'un composé, celle-ci est alors nécessairement fluctuante dans le temps et dans l'espace, au même titre que les grandeurs dynamiques. L'utilisation de la décomposition de Reynolds conduit alors à : $C = \overline{C} + C'$ où \overline{C} est la partie moyennée et C' la partie fluctuante. Le but de la modélisation, physique ou numérique, est alors de déterminer en premier lieu le champ de concentration moyen \overline{C} , et accessoirement les moments statistiques d'ordre 2 $\overline{C'^2}$ qui apportent une information complémentaire.

1.2.2 Équation d'advection-diffusion

Considérons une espèce chimique réactive ou inerte i dispersée dans l'atmosphère, et associons lui sa fraction massique X_i définie par :

$$X_i = \frac{\rho_i}{\rho} \tag{1.2.1}$$

L'application du principe de conservation de la masse pour l'espèce i conduit à l'équation pronostique eulérienne suivante :

$$\frac{d(\rho X_i)}{dt} = \underbrace{\frac{\partial(\rho X_i)}{\partial t}}_{I} + \underbrace{u_j \frac{\partial(\rho X_i)}{\partial x_j}}_{II} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{m_i} \frac{\partial(\rho X_i)}{\partial x_j} \right)}_{III} + S_i + R_i$$
(1.2.2)

Dans cette équation :

- (I) représente le terme instationnaire
- (II) représente le terme d'advection, c'est à dire le transport par l'écoulement de l'espèce i
- (III) est le terme de diffusion moléculaire régie par une loi de Fick, avec un coefficient de diffusion moléculaire massique supposé constant D_{m_i} (en $kg.m^{-1}.s^{-1}$)
- S_i correspond au terme source (positif ou négatif)
- R_i correspond au terme de production ou destruction de i par réaction chimique

La variable généralement utilisée est la concentration massique que l'on note C_i pour le constituant *i*. Nous donnons une forme équivalente à l'équation précédente (1.2.2) dans laquelle la variable ρX_i est remplacée par C_i sous l'hypothèse d'incompressibilité :

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{\partial C_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right) + S_i + R_i, \qquad (1.2.3)$$

où D_i est cette fois la diffusivité moléculaire exprimée en $m^2 \cdot s^{-1}$.

L'application de l'opérateur de moyenne aboutit à l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \overline{C_i}}{\partial t} + \overline{u_j} \frac{\partial \overline{C_i}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_i \frac{\partial \overline{C_i}}{\partial x_j} - \overline{c_i' u_j'} \right) + \overline{S_i} + \overline{R_i}$$
(1.2.4)

1.2.3 L'échelle locale

Les mouvements de l'air au sein de l'atmosphère s'étendent sur une très large gamme d'échelles spatiales et temporelles. Les plus grandes échelles constituent les échelles continentales pour lesquelles sont adaptés les modèles de météorologie ou de climatologie, qui s'étendent sur des distances supérieures au millier de kilomètres et d'une durée de vie supérieure à la journée. L'échelle régionale correspond à des distances comprises entre 50 et 500 km, alors que l'échelle inférieure est l'échelle méso, comprise entre 5 et 50 km. Les plus fines échelles de l'atmosphère, imposées par les structures dissipatives, ont elles une durée de vie inférieure à l'heure correspondant à des distances inférieures à 5 kilomètres. On parle alors d'**échelle locale**. Le cadre de cette thèse étant la modélisation de la dispersion autour de sites industriels, il s'agit bien ici d'étudier le dispersion à une échelle locale, soit à des distances inférieures à quelques kilomètres et correspondant à des échelles temporelles de l'ordre de la dizaine de minutes. Dans le domaine de la dispersion atmosphérique, on parle également de modélisation en **champ proche**.

1.2.4 Influence d'un environnement complexe sur la dispersion

La plupart des émissions d'effluents atmosphériques n'ont pas lieu sur un terrain plat dépourvu d'obstacles mais au contraire dans un environnement complexe alliant la présence de bâtiments et/ou d'un terrain accidenté qui influencent fortement la dispersion.

<u>Influence du relief</u>

La présence d'un relief accidenté modifie l'écoulement, qui est alors nécessairement différent d'un écoulement de plaine, et induit également une modification de la dispersion. Les principaux effets, décrits dans Perkins *et al.* (2002) et Hanna (1982), sont les suivants :

- un effet de déviation du panache lié à la déviation de l'écoulement,
- un effet de blocage rencontré lors de la présence d'une recirculation dans le sillage d'un élément topographique conduisant à un confinement des effluents,
- un étalement du panache induit par la turbulence générée dans le sillage du relief qui engendre des maximums de concentration plus faibles que dans le cas dépourvu d'obstacle.

L'influence du relief sur le champ de concentration dépend de son emplacement par rapport à la trajectoire du panache. Il peut donc être opportun ou non de prendre en considération le relief suivant la localisation de la source et la direction du vent. La prise en compte du relief dans la modélisation de la dispersion peut se faire selon deux approches :

- en résolvant explicitement les champs dynamiques permettant de décrire de manière tridimensionnelle l'impact du relief sur l'écoulement et d'en déduire le champ de concentration.
- en prenant en compte implicitement le relief dans la paramétrisation du modèle de dispersion, ce qui s'applique surtout aux modèles gaussiens.

Influence des bâtiments

L'influence des bâtiments sur la dispersion conduit aux effets suivants, également détaillés dans Perkins *et al.* (2002) et Hanna (1982) :

- une déviation du panache : la déflexion autour d'un bâtiment engendre un déplacement du centre de masse du panache dans les trois directions. Moins le panache est dispersé, plus il est proche de l'obstacle et plus cet effet est significatif. La déviation locale au niveau du bâtiment peut conduire à une déviation du panache en aval de celui-ci par rapport à la trajectoire idéale, sans présence de bâtiments. Le franchissement du bâtiment induit par ailleurs un plus grand étalement du panache dans la direction transverse.
- un mélange intense : si le panache n'est pas trop surélevé par rapport à la hauteur du bâtiment, une partie de celui-ci peut être entraînée dans la recirculation qui s'opère à l'arrière de celui-ci. Un fort mélange s'exerce à l'intérieur de la recirculation induisant une zone de concentration uniforme dans l'espace dont l'intensité dépend de la quantité de matière introduite. La forte diffusion latérale qui y prévaut entraîne un élargissement du panache dont la dimension transverse devient alors proche de celle de l'obstacle.
- une intensification de la diffusion dans le sillage : dans le sillage du bâtiment, un déficit de la vitesse est observé associé à une augmentation de la turbulence qui induisent une plus grande dispersion des effluents présents dans cette zone. On parle alors de phénomène de *fumigation*.

La présence de plusieurs bâtiments constituant un groupe d'obstacles interagissant entre eux peut sensiblement compliquer leur prise en compte dans la description de la dispersion. Comme pour l'influence du relief, deux voies sont alors possibles :

- la résolution explicite des champs dynamiques en réalisant un nombre plus ou moins important d'hypothèses sur la géométrie des bâtiments en fonction du coût de calcul.
- la prise en compte implicite des bâtiments en introduisant des paramétrisations appropriées dans le calcul du panache.

1.2.5 Différentes approches de modélisation

Il existe de nombreuses approches en vue de modéliser la dispersion atmosphérique à l'échelle locale qui diffèrent par leur degré de complexité et leur champ d'application. La richesse du panel des modèles existant à ce jour permet aux utilisateurs d'orienter la modélisation vers un type donné de modèle en fonction de l'étude, des contraintes en terme coût de calcul et de la qualité des résultats visée. Nous passons en revue dans cette sous-section les trois principales familles, en insistant ici plus sur leurs caractéristiques dans un cadre applicatif que sur les aspects théoriques. Un inventaire plus précis et exhaustif des différents modèles appartenant à ces trois catégories est par exemple fourni dans Perkins *et al.* (2002) et U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards (2001).

Les modèles gaussiens

Les modèles gaussiens sont des modèles semi-analytiques fondés sur la résolution de l'équation d'advection-diffusion 1.2.4 et sur ses formes dérivées sous certaines hypothèses fortes. Ils regroupent les modèles à panache qui s'appliquent aux rejet continus ponctuels, linéaires, surfaciques ou volumiques ainsi que les modèles à bouffées pour les rejets instantanés. La paramétrisation des écarts-types de la dispersion apparaissant dans leur formulation est généralement issue de campagnes de mesures. Les modèles d'origine, très simples dans leur formulation, permettent uniquement de définir le champ de concentration à partir de l'estimation des écarts-types et de la vitesse effective d'advection du panache. Avec le temps, les modèles inclurent la prise ne compte d'un gradient de vitesse et la possibilité de modéliser les moments statistiques d'ordre 2 des concentrations. Enfin, pour la nouvelle génération, la prise en compte des bâtiments et de la topographie du site étudié est rendue possible. Nous reviendrons plus en détails dans la section suivante sur les éléments théoriques, les avantages et inconvénients de ce type de modèle ainsi que sur l'exemple d'un modèle gaussien évolutif de dernière génération qu'est le modèle ADMS .

Les modèles lagrangiens stochastiques (modèles à particules)

L'approche lagrangienne consiste à décrire l'écoulement à un instant donné comme un ensemble de trajectoires de particules fluides en fonction du temps et de leur position initiale. Ces trajectoires sont représentées d'une manière stochastique, traduisant la variabilité inhérente à la turbulence, à l'aide d'une équation de transport portant sur une fonction de densité de probabilité (pdf) associée à chaque trajectoire. Cette classe de modèles est particulièrement adaptée au cas de la dispersion turbulente atmosphérique, qui est par nature un processus lagrangien, et ces modèles ont donc ainsi particulièrement été développés et utilisés dans ce cadre, permettant de rendre compte de l'évolution d'un ensemble de particules au sein d'un écoulement extérieur qui pour sa part peut être décrit de manière eulérienne.

Cette théorie s'appuie à l'origine sur les équations de Langevin (1908) qui permettent de représenter les trajectoires de particules fluides pour une turbulence isotrope et homogène, les équations de Langevin généralisées en étant l'extension pour une turbulence inhomogène. Nous en introduisons ici les éléments essentiels.

Considérons une particule à la position (x, y, z) à l'instant t, ayant une vitesse propre de composante V_i dans la direction i que l'on décompose en une partie moyennée dans le temps \overline{V}_i et une partie fluctuante v'_i . Pour un écoulement stationnaire et uniforme, la vitesse moyennée \overline{V}_i est assimilée à la vitesse eulérienne au point considéré x_i . L'équation du mouvement est :

$$\frac{dx_i}{dt} = \overline{V_i} + v'_i \tag{1.2.5}$$

L'inconnue v'_i est alors résolue par une équation de Markov :

$$v'_{i}(t + \Delta t) = R_{L}(\Delta t)v'_{i}(t) + v''_{i}, \qquad (1.2.6)$$

où :

• R_L est la fonction d'autocorrélation la grangienne pouvant être simplement représentée par une fonction de type exponentielle :

$$R_L(\tau) = exp\left(-\frac{\tau}{T_L}\right)$$

• v''_i est la partie non corrélée de la fluctuation de vitesse et s'obtient à partir de l'écart type des fluctuations de vitesse σ_i :

$$v_i'' = \sigma_i \left(1 - R_l (\Delta t)^2 \right)^{1/2} \eta(t)$$
(1.2.7)

 T_L est une grandeur importante, il s'agit de l'échelle intégrale lagrangienne correspondant à l'échelle intégrale des processus dispersifs.

La variable $\eta(t)$ est aléatoire, de moyenne nulle et d'écart-type égal à un, pouvant par exemple être apparentée à une distribution gaussienne ou pouvant être décrite par un processus de Monte-Carlo. Le report de (1.2.7) dans(1.2.6) donne :

$$v'_{i}(t + \Delta t) = av'_{i}(t) + \sigma_{i} \left(1 - a^{2}\right)^{1/2} \eta(t)$$
(1.2.8)

où a s'exprime en fonction de l'échelle intégrale lagrangienne :

$$a = exp\left(-\frac{\Delta t}{T_L}\right),\tag{1.2.9}$$

et σ_i est l'écart-type des fluctuations de vitesse v'_i

En pratique, le calcul d'un champ moyen de concentration pour une turbulence inhomogène fait intervenir un nombre très important de trajectoires particulaires afin de calculer des moyennes statistiques de concentration en tout point de la grille de calcul \underline{x} et à tout instant t:

$$\overline{C}(\underline{x},t) = Q \int_{-\infty}^{t} p(\underline{x},t|\underline{x}',t') dt'$$
(1.2.10)

où p est la densité de probabilité qu'une particule émise en $\underline{x'}$ à l'instant t' se trouve en \underline{x} à l'instant t, évaluée à partir d'un large ensemble de trajectoires particulaires et Q est le taux d'émission.

La CFD (Computational Fluid Dynamics)

Les outils de type CFD (Computational Fluid Dynamics) sont particulièrement appropriés pour modéliser la dispersion d'une ou plusieurs espèces chimiques passives ou réactives dans des configurations complexes intégrant séparément ou de manière couplée des bâtiments et du relief. La résolution de l'équation d'advection-diffusion est réalisée à partir d'un champ dynamique préalablement calculé en résolvant les équations de Navier-Stokes (Éq. 1.1.7). La modélisation de la turbulence et de ses différentes échelles spatio-temporelles est alors un élément clé qui caractérise le type de modèle.

L'enjeu des différents modèles se situe alors dans l'équilibre entre la qualité des résultats et les coûts de calcul, le choix du modèle dépendant alors nécessairement du type d'étude réalisée et de son cadre. Dans l'ingénierie par exemple, les contraintes pourront être celles d'un écoulement dans un domaine à géométrie complexe et le but sera moins de décrire les plus petites structures de la

turbulence que de reproduire les principales caractéristiques de l'écoulement et d'en déduire des valeurs de paramètres ou de variables physiques, à travers leur moyenne ou leurs extrêmes. Ainsi, les contraintes liées à la qualité de la représentation des phénomènes physiques diffèrent de celles requises dans les études fondamentales et académiques où la compréhension de l'ensemble des processus est recherchée. Pour parvenir à abaisser le degré de résolution, les méthodes introduisent des modèles statistiques chargés de prendre en compte ce qui n'est pas explicitement résolu. De ces méthodes et de la technique de filtrage utilisée dépend la nature du modèle de turbulence.

Les méthodes RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*) sont les plus couramment utilisées et ont pour but la résolution des équations moyennées au sens de Reynolds. Cette approche sera celle utilisée dans nos travaux avec le code *Mercure* et nous y reviendrons plus en détails dans la section 1.4. Une autre approche est fondée sur la résolution des champs instationnaires en résolvant explicitement les grandes structures et en paramétrant les plus petites, il s'agit de la méthode nommée *Simulation des Grandes Échelles* (LES pour *Large Eddy Simulation*). Enfin, la dernière possibilité, mais la plus coûteuse numériquement, est de résoudre explicitement les équations de Navier-Stokes, il s'agit de l'approche nommée *Simulation Numérique Directe* (DNS pour *Direct Numerical Simulation*). Nous donnons ci-dessous les principales caractéristiques de ces deux dernières méthodes.

La simulation numérique directe - Direct Numerical Simulation

La simulation numérique directe (*Direct Numerical Simulation* ou DNS) consiste en la résolution explicite des équations de la mécanique des fluides pour un écoulement turbulent, en prenant en compte l'ensemble du spectre énergétique soit toutes les échelles de la turbulence. Pour les écoulements atmosphériques, cela nécessite d'avoir un rapport de taille de 10^4 à 10^5 entre les mailles les plus petites de l'ordre de grandeur de l'échelle de Kolmogorov ($\approx 1 \text{ mm}$) et les plus grandes (jusqu'à la centaine de mètres). On peut alors facilement imaginer le coût de calculs prohibitif induit, coût d'autant plus important que le domaine de calculs est étendu et à géométrie complexe. Pour cette raison, les calculs DNS en atmosphère ont longtemps été prohibés. Cependant, grâce aux progrès réalisés depuis une dizaine d'année en matière de technologie informatique et à l'essort du calcul massivement parallèle, des calculs DNS commencent à être envisagés.

La simulation aux grandes échelles - Large Eddy Simulation - LES

Les Scientifiques comme les ingénieurs sont avant tout intéressés par la description des plus grandes échelles de la turbulence, qui par exemple participent de manière prépondérante au transport de polluants dans l'atmosphère. Il est ainsi apparu intéressant de simuler numériquement les plus grandes échelles de la turbulence, ce qui, fondamentalement, consiste à filtrer le spectre d'énergie turbulente en ne conservant que les faibles nombres d'onde. Cette méthode est ainsi nommée la Simulation aux Grandes Échelles, ou *Large Eddy Simulation* (LES).

La partie non résolue explicitement correspondant aux petites structures est alors modélisée statistiquement, on parle de modèles sous-maille. La technique LES nécessite ainsi l'application d'un filtre aux équations de la mécanique des fluides turbulents, afin de ne conserver que les grandes échelles, d'où l'introduction d'une échelle de séparation décrite mathématiquement ayant fait l'objet de nombreux travaux. Cette échelle théorique de séparation consiste, d'un point de vue formel, en un filtre passe-bas. Ainsi une variable quelconque f (vecteur ou scalaire) peut être approximée en tout point de l'espace (\underline{x}, t) par le produit de convolution suivant :

$$\overline{f}(\underline{x},t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\underline{x},t)G(\underline{x}-\xi)d\xi \qquad (1.2.11)$$

Les filtres sont définis pour une longueur de coupure (longueur de séparation des échelles)

 $\overline{\Delta}$, dans un cas simplifié monodimensionnel. Nombre de ces filtres et leur propriétés sont décrits dans Sagaut (2002).

L'application de ces filtres aux équations de Navier-Stokes et autres équations de transport conduit en un nouveau systèmes d'équations représentatif des grandes échelles, en introduisant une modélisation statistique sous-maille pour les échelles plus petites. En effet, si l'on considère l'équation de Navier-Stokes pour la composante u_i en omettant le terme de pesanteur, sa formulation filtrée s'écrit :

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_i} = \nu \frac{\partial^2 (\overline{u}_i)}{\partial x_i^2} - \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}$$
(1.2.12)

Cette équation diffère de l'équation moyennée classique (1.1.22) car le produit filtré $\overline{u_i u_j}$ est différent du produit des composantes de vitesses filtrées $\overline{u_i} \overline{u_j}$. Cette différence est définie comme un tenseur résiduel noté τ_{ij}^r analogue dans la forme au tenseur de Reynolds, si bien que l'équation (1.2.12) prend alors la forme suivante :

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} = \nu \frac{\partial^2(\overline{u}_i)}{\partial x_i^2} - \frac{\partial \tau_{ij}^r}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}$$
(1.2.13)

L'enjeu de la technique LES est alors de modéliser le tenseur résiduel, également dénommé tenseur sous-maille car issu des processus de petite échelle. Les modèles de sous-maille existants sont nombreux et décrits largement dans la littérature (par exemple Pope (2000), Sagaut (2002)) regroupant les modèles dits dynamiques et les modèles à filtre stochastique. Le plus simple est le modèle de Smagorinsky (1963) qui décrit le tenseur résiduel τ_{ij}^r en fonction du tenseur de déformation des vitesses filtrées $\overline{S_{ij}}$ et d'une viscosité dite de sous-maille ν_r :

$$\tau_{ij}^r = 2\nu_r \overline{S_{ij}} = \nu_r \left[\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right], \qquad (1.2.14)$$

où la viscosité sous-maille est modélisée par :

$$\nu_r = l_r^2 \sqrt{2\overline{S_{ij}S_{ij}}} \text{ avec } l_r = C_s \Delta, \qquad (1.2.15)$$

où C_s est le coefficient de Smagorinsky et Δ la largeur du filtre.

1.3 Les modèles gaussiens : l'exemple d'ADMS

1.3.1 Les formulations gaussiennes

Les modèles gaussiens sont des modèles analytiques provenant de la résolution de l'équation d'advection-diffusion 1.2.4 sous certaines hypothèses fortes. Ils regroupent les modèles à panache qui s'appliquent aux rejet continus ponctuels, linéaires, surfaciques ou volumiques ainsi que les modèles à bouffées pour les rejets instantanés ou lorsque les champs dynamiquent varient avec le temps sur la durée du rejet.

Modèles à panache

Revenons sur l'équation (1.2.4) et écrivons là dans le cas d'un écoulement homogène et stationnaire, où les diffusivités turbulentes prises dans les trois directions x, y et z et notées ici K_x, K_y et K_z ne dépendent *a priori* pas des coordonnées spatiales et du temps :
$$\overline{u_j}\frac{\partial \overline{C}}{\partial x_j} = K_x \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial z^2}$$
(1.3.1)

Dans le cas d'une turbulence isotrope, les diffusivités turbulentes peuvent être considérées comme identiques dans les trois directions, et en introduisant la diffusivité turbulente isotrope K on peut écrire :

$$\overline{u_j}\frac{\partial \overline{C}}{\partial x_j} = K \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x_j^2} \tag{1.3.2}$$

Nous développons ici une solution de cette équation pour un cas courant d'application qui est celui du rejet ponctuel et continu pour un écoulement uniforme de vitesse \overline{u} . Soit Q le débit massique du rejet (en $kg.s^{-1}$), les conditions limites associées étant :

$$\overline{C} \to 0$$
 quand $(x, y \ et \ z) \to \infty$

La solution exacte de l'équation (1.3.2) est alors :

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{4\pi K r} \exp\left[-\overline{u}\left(\frac{r-x}{2K}\right)\right],$$
(1.3.3)

où : $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$

À l'exception de la zone à proximité immédiate de la source et pour de faibles vitesses \overline{u} , l'approximation dite de "panache mince", $y^2 + z^2 << x^2$, qui consiste à négliger la diffusion turbulente dans le sens de l'écoulement, conduit à : $r - x \simeq \frac{y^2 + z^2}{2x}$ et $r \simeq x$.

Dans ce cas, la solution (1.3.4) se présente alors sous la forme d'une gaussienne :

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi \overline{u}\sigma^2} \exp\left[-\left(\frac{y^2 + z^2}{2\sigma}\right)\right],$$
(1.3.4)

à la condition d'introduire l'écart-type de la distribution, qui, dans la littérature, est nommé paramètre de diffusion ou de dispersion :

$$\sigma = \left(\frac{2Kx}{\overline{u}}\right)^{1/2} \tag{1.3.5}$$

Il est possible de faire la correspondance directe entre temps de trajet et distance depuis la source en posant : $t = x/\overline{u}$. Le paramètre de diffusion s'écrit alors également : $\sigma = (2Kt)^{1/2}$.

D'après la solution proposée, nous pouvons observer que le panache s'élargit avec la distance dans les deux directions transverses à la direction x de l'écoulement et que l'augmentation de la vitesse du vent va dans le sens d'une diminution de l'épaisseur du panache.

Dans le cas d'une turbulence anisotrope, la solution est plus complexe à obtenir. Roberts a proposé en 1923 une première solution en faisant intervenir les diffusivités spécifiques dans les trois directions :

$$\overline{C}(x,y,z) = \frac{Q \exp\left[-\frac{\overline{u}}{2K_x^{1/2}} \left[\left(\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{z^2}{K_z}\right)^{\frac{1}{2}} - \frac{x}{K_x^{1/2}} \right] \right]}{4\pi \left(K_x K_y K_z\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{z^2}{K_z}\right)^{\frac{1}{2}}}$$
(1.3.6)

Introduisons les écarts-types ou paramètres de diffusion dans les trois directions :

$$\sigma_x(t) = \left(\frac{2K_xx}{\overline{u}}\right)^{\frac{1}{2}}; \sigma_y(t) = \left(\frac{2K_yx}{\overline{u}}\right)^{\frac{1}{2}}; \sigma_z(t) = \left(\frac{2K_zx}{\overline{u}}\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad (1.3.7)$$

L'hypothèse de "panache mince" conduit alors à la formulation suivante :

$$\overline{C}(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi \overline{u}\sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right]$$
(1.3.8)

En considérant dans un cas plus courant que la source se situe à une hauteur H (en m) au-dessus du sol et en appliquant la méthode des images (Hanna (1982)), nous obtenons ce qui est reconnu comme étant la formule gaussienne pour un panache :

$$\overline{C}(x,y,z,t) = \frac{Q}{2\pi\overline{u}\sigma_y\sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \left[\exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right]\right]$$
(1.3.9)

Nos cas d'étude se résument le plus souvent à un rejet ponctuel et nous ne donnons pas ici les formulations appropriées aux autres types de rejet, linéiques et surfaciques, que le lecteur trouvera facilement dans la littérature (e.g. Arya (1999)).

D'une façon générale, les écarts-types ou paramètres de diffusion σ_i dépendent des caractéristiques de l'écoulement (turbulence, stabilité, rugosité surfacique). Le problème posé par ce type de modélisation réside alors dans la paramétrisation des écarts types. Pasquill (1961) proposa les premières relations empiriques permettant d'évaluer ces paramètres. De nombreuses formulations empiriques ou semi-empiriques virent le jour depuis. Nous reviendrons sur certaines de ces paramétrisations dans le chapitre suivant consacré à la comparaison du modèle CFD RANS *Mercure_Saturne* à des modèles gaussiens à panache sur la campagne Prairie Grass.

Modèles à bouffées

Dans le cas d'un unique rejet instantané et lorsque les champs de vitesse et de quantités turbulentes varient avec le temps, la modélisation par panache gaussien est abandonnée au détriment d'une modélisation plus complexe par bouffées. Cette méthode consiste à discrétiser le rejet grâce à une succession de rejets instantanés. Le pas de temps entre deux rejets est défini de telle sorte que soient reproduits correctement la cinétique d'évolution du rejet et des conditions météorologiques et que le panache ainsi décrit ait un aspect continu (Perkins *et al.* (2002). Pour un rejet instantané ponctuel situé près d'une surface réfléchissante, la formulation à bouffées s'écrit :

$$\overline{C}(x,y,z) = \frac{Q_0}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right] \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}$$
(1.3.10)

où Q_0 est la quantité rejetée à l'instant initial.

Avantages et inconvénients des modèles gaussiens

Les modèles gaussiens présentent des avantages liés à la simplicité de leur formulation. Ils sont ainsi faciles à mettre en oeuvre et offrent un très faible coût de calcul, ce qui est très intéressant dans un cadre opérationnel. Par ailleurs, une grande variété de paramétrisations est disponible, ainsi que leur validation sur des cas académiques bien connus. Les limites d'application de ces modèles résultent de la simplification de la modélisation physique. Ils sont en effet applicables pour des surfaces homogènes, planes et faiblement rugueuses. Enfin, ils se limitent à un écoulement uniforme dans le temps et dans l'espace, ce qui constitue véritablement un cadre d'application idéalisé, peu reproductible dans des situations réelles. Ils s'avèrent ainsi difficilement applicables dans un environnement complexe mettant en jeu des surfaces très rugueuses (présence de bâtiments et d'éléments de topographie).

Des modèles récents plus évolués permettent de prendre en compte un tel environnement complexe, tout en s'appuyant sur les formulations gaussiennes. Un large panel de modèles de ce type existe, présentant des degrés de complexité divers. Certains modèles possèdent un préprocesseur météorologique permettant de paramétrer la CLA et d'en déduire une formulation adaptée des écarts-types de distributon alors que certains utilisent un champ dynamique préalablement calculé. En dehors de cette caractéristique, les modèles peuvent présenter un nombre de modules internes pouvant *in fine* permettre le calcul de la concentration en tout point de l'espace et pour un temps de rejet quelconque. À cet égard, le modèle ADMS 3 (*Atmospheric Dispersion Modelling System*) est une plateforme de dispersion très complète qui est aujourd'hui largement utilisée pour les études réglementaires. C'est ce modèle que nous utiliserons parallèlement à *Mercure* dans nos travaux et que nous présentons dans les paragraphes suivants.

1.3.2 Description générale du modèle ADMS 3.3

Le modèle ADMS 3 (Atmospheric Dispersion Modelling System) est une plateforme avancée de modélisation de la dispersion atmosphérique permettant le calcul du champ de concentration de polluants atmosphériques émis par un point, une ligne, un volume ou une surface de quelques mètres à cent kilomètres en aval de la source de rejet. Il a été développé par le CERC (*Cambridge Environmental Research Consultants*) en collaboration avec l'office de météorologie britannique (UK Meteorogical Office) et le professeur Alan Robins de l'université de Surrey. La version actuelle, troisième du nom, fut mise en disposition en février 1999.

Il est largement distribué à travers l'Europe et dans le monde, en commençant par le Royaume-Unis. Il est notamment le modèle de référence pour les autorités de sûreté et de réglementations britanniques, l'Agence pour l'Environnement de l'Angleterre et du Pays-de-Galles et l'Agence écossaise pour la protection de l'environnement. Sa licence a été achetée à travers l'Europe par plusieurs centaines de compagnies privées mais également dans le monde entier (Asie, Australie, Moyen-Orient). Il fait partie des modèles reconnus par l'USEPA comme "alternatifs" à ceux recommandés par les autorités américaines.

Ce modèle offre une vaste étendue de possibilités : il peut prendre en compte de manière simplifiée les effets sur la dispersion liés à la présence d'obstacles, d'un terrain complexe ou d'une ligne de côte, il permet de calculer le dépôt, le moments d'ordre 2 du champ de concentration et de résoudre explicitement les équations de Briggs (1969) pour décrire la phase d'élévation du panache. Il s'applique à des rejets passifs et à certaines espèces réactives. Il possède un pré-processeur spécifique permettant de déterminer les profils de vent, de turbulence et de température potentielle de la CLA. Ce pré-processeur sera partiellement décrit dans le paragraphe suivant, les deux autres paragraphes s'attachant à décrire le mode de calcul du champ de concentration et à donner les grandes lignes des modules de prise en compte des bâtiments et du terrain complexe. Le modèle ADMS 3.3, version utilisée dans nos études, a fait l'objet de nombreuses validations par les membres du CERC et disponibles en ligne sur le web (adresse : http ://www.cerc.co.uk/software/publications.html). Les grandes lignes pour l'utilisation du modèle ADMS sont données dans CERC (2004). Nous explicitons ci-dessous certains éléments théoriques qui ont servi pour nos études.

1.3.3 Paramétrisation de la CLA

La paramétrisation propre à ADMS 3.3 de la CLA s'appuie sur les lois de similitude introduites dans le paragraphe 1.1.5 à partir de l'estimation de la hauteur de couche limite H_{CL} et de la longueur de Monin-Obhkov L_{MO} . Nous donnons les lois d'évolution des grandeurs caractéristiques de la CLA dans le cas neutre qui correspond pour ADMS 3 à un rapport H_{CL}/L_{MO} compris entre -0.3 et 1.0.

Profil de vent

Le profil de vent est directement déterminé à partir de la loi de similitude (Éq. 1.1.47). Dans les cas convectifs, la fonction Ψ_m utilisée est celle de Panofsky & Dutton (1984) :

$$\Psi_m(\xi) = \ln\left[\frac{(1+\xi)^2 (1+\xi^2)}{(1+\xi_0)^2 (1+\xi_0^2)}\right] - 2\left(\tan^{-1}(\xi) - \tan^{-1}(\xi_0)\right), \quad (1.3.11)$$

avec :

$$\xi = \left[1 + \frac{16(z + z_0)}{|L_{MO}|}\right]^{1/4}$$

$$\xi_0 = \left[1 + \frac{16z_0}{|L_{MO}|}\right]^{1/4}$$

Pour une atmosphère stable ou neutre, celle de Ulden & Holtslag (1985) est appliquée :

$$\Psi_{m}(\xi) = a \frac{z_{0}}{L_{MO}} + b \left(\frac{z_{0}}{L_{MO}} - \frac{c}{d} \right) \exp\left(-dz_{0}/L_{MO}\right) - a \frac{(z+z_{0})}{L_{MO}} - b \left(\frac{z+z_{0}}{L_{MO}} - \frac{c}{d} \right) \exp\left(-d(z+z_{0})/L_{MO}\right), \quad (1.3.12)$$

avec les constantes suivantes : a = 0.7, b = 0.75, c = 5.0 et d = 0.35.

Profils de turbulence

Nous donnons ici les formules utilisées dans le cas neutre. Le lecteur pourra se reporter à Carruthers & Dyster (2003) pour obtenir celles correspondant aux cas stable et instable. Ces formules valables pour toute la CLA sont les suivantes :

$$\sigma_u = 2.5 \, u_* \left(1 - 0.8 \frac{z}{H_{CL}} \right) \tag{1.3.13}$$

$$\sigma_v = 2.0 \, u_* \left(1 - 0.8 \frac{z}{H_{CL}} \right) \tag{1.3.14}$$

$$\sigma_w = 1.3 \, u_* \left(1 - 0.8 \frac{z}{H_{CL}} \right) \tag{1.3.15}$$

Fréquence de flottabilité

Nous rappelons la définition de la fréquence de flottabilité de Brunt-Väisäla :

$$N^{2}(z) = \frac{g}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z}$$
(1.3.16)

Pour des conditions stables au sens strict $(H_{CL}/L_{MO} > 0)$, la fonction de similitude pour la quantité de mouvement est $\Psi_m(\xi)$ sensiblement égale à celle pour la température $\Psi_H(\xi)$:

$$\Psi_H(\xi) = -\frac{\kappa z \rho_a C_p u_*}{F_{\theta_0}} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial z} \approx \Psi_m(\xi)$$
(1.3.17)

En repartant de la définition de L_{MO} :

$$L_{MO} = -u_* \frac{^3 \rho_a C_p \theta}{\kappa g F_{\theta_0}}, \qquad (1.3.18)$$

 $N^2(z)$ s'écrit simplement :

$$N^{2}(z) = \frac{u_{*}^{2}}{\kappa^{2} L_{MO}} \frac{\Psi_{m}(\xi)}{z}, \qquad (1.3.19)$$

L'utilisation de l'équation 1.3.12 aboutit alors à la formulation suivante :

$$N^{2}(z) = \frac{u_{*}^{2}}{\kappa^{2}L_{MO}} \left\{ \frac{1}{(z+z_{0})} + \frac{a}{L_{MO}} + \left[\frac{b}{L_{MO}} - b\left(\frac{(z+z_{0})}{L_{MO}} - \frac{c}{d}\right) \frac{d}{L_{MO}} \right] \exp\left(-d\left(z+z_{0}\right)/L_{MO}\right) \right\}$$
(1.3.20)

La formule n'est valide que pour la plus basse couche de l'atmosphère, de hauteur inférieure à $z_{su} = \min(100, H_{CL})$. Pour une altitude z supérieure, on utilise :

$$N(z) = N(z_{su}) \text{ pour } z_{su} < z \le H_{CL}$$

$$(1.3.21)$$

$$N(z) = N(H_{CL}) \quad \text{pour } z > H_{CL} \tag{1.3.22}$$

Échelles caractéristiques de la turbulence et taux de dissipation de l'énergie arepsilon

Une échelle de longueur caractéristique de la turbulence $L_w(z)$ est d'une manière générale définie à partir du gradient de l'écoulement moyen et des effets de flottabilité (d'après Hunt et al., 1988)) en fonction du rapport H_{CL}/L_{MO} :

$$L_w(z) = \left(\frac{2.5}{Z} + \frac{4}{H_{CL}} + \frac{N(z)}{\sigma_w(z)} + \frac{1}{z_u}\right)^{-1} \text{ pour } H_{CL}/L_{MO} \ge 0$$
(1.3.23)

$$L_w(z) = \left(\frac{0.6}{Z} + \frac{2}{H_{CL}} + \frac{\partial \overline{u}/\partial z}{\sigma_w(z)} + \frac{1}{z_u}\right)^{-1} \text{ pour } H_{CL}/L_{MO} \le 0$$
(1.3.24)

où :

• z_u est une échelle de longueur définie par :

$$z_u = \max\left(0, (H_{CL} - z), \frac{\sigma_w(z)}{N(z)}\right) \text{ si } N(z) > 0$$

$$z_u = \max\left(0, (H_{CL} - z)\right) \text{ si } N(z) \le 0$$

• Z est donné par :

$$Z = \min(z + z_0, H_{CL} + z_0)$$

L'échelle transverse $L_v(z)$ est déterminée à partir de la hauteur de couche limite :

$$L_v(z) = \frac{H_{CL}}{5}$$
 en conditions stables ou neutres $(H_{CL}/L_{MO} \ge -0.3)$ (1.3.25)

$$L_v(z) = \frac{H_{CL}}{3}$$
 en conditions instables $(H_{CL}/L_{MO} < -0.3)$ (1.3.26)

Les formulations semi-analytiques pour l'échelle de temps la grangienne T_L ainsi que le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε sont les suivantes : :

$$T_L = \frac{L_w(z)}{1.3\sigma_w(z)} \text{ pour } H_{CL}/L_{MO} \ge 0$$
 (1.3.27)

$$T_L = \left(\frac{|H_{CL}/L_{MO}| + 1/1.3}{|H_{CL}/L_{MO}| + 1}\right) \frac{L_w(z)}{\sigma_w(z)} \text{ pour } H_{CL}/L_{MO} < 0$$
(1.3.28)

$$\varepsilon(z) = \frac{1}{L_w(z)} \left(\frac{\sigma_w(z)}{1.3}\right)^3 + 0.4 \frac{w_*^3}{H_{CL}}$$
 en conditions neutres et instables (1.3.29)

$$\varepsilon(z) = \frac{1}{L_w(z)} \left(\frac{\sigma_w(z)}{1.3}\right)^3$$
en conditions stables, (1.3.30)

où l'échelle de vitesse en conditions convectives est donnée par :

$$w_*{}^3 = \frac{H_{CL}u_*{}^3}{\kappa \left|L_{MO}\right|} \tag{1.3.31}$$

1.3.4 Calcul de la dispersion

Champ de concentration moyen

Le modèle ADMS dispose des formulations à panache gaussien et à bouffées. Dans le premier cas, l'équation 1.3.9 est donc appliquée en utilisant une paramétrisation spécifique des écartstypes de la dispersion σ_y et σ_z . Les formulations des écarts-types découlent de travaux réalisés par Hanna (1989) et Weil (1985). Nous en donnons ici leur formulation dans le cas d'une atmosphère stable ou neutre. Pour le cas convectif, se reporter à Carruthers *et al.* (2003).

L'écart-type vertical σ_z à la hauteur moyenne du panache z_m s'exprime en fonction du temps t de trajet depuis la source, de l'écart-type de vitesse verticale σ_w , de la fréquence de flottabilité N et d'un facteur b. Celui-ci est fonction de H/H_{CL} où H est la hauteur de rejet. La formulation s'écrit :

$$\sigma_z = \sigma_w t \left[\frac{1}{b^2} + \frac{N^2 t^2}{1 + 2Nt} \right]^{-1/2}$$
(1.3.32)

L'écart-type latéral σ_y est donné par la relation suivante :

$$\sigma_y^2 = \sigma_{yt}^2 + \sigma_{yw}^2 \tag{1.3.33}$$

où :

$$\sigma_{yt} = \sigma_v t \left[1 + (15.6)^{1/3} \frac{u_* t}{H_{CL}} \right]^{-1/2}$$
(1.3.34)

 et

$$\sigma_{yw} = \sigma_{\theta} x \,, \tag{1.3.35}$$

 σ_{θ} représentant l'écart-type de la direction du vent. Sans connaissance préalable des valeurs de σ_{θ} , celui-ci peut être calculé par le pré-processeur météorologique à l'aide de la formule suivante :

$$\sigma_{\theta} = 0.065 \sqrt{\frac{7t_m}{U_{10}}} \tag{1.3.36}$$

où t_m est le temps d'échantillonage et U_{10} la vitesse de référence prise à une altitude de 10 m.

Les phénomènes de réflexion du panache sur le sommet de la couche limite ainsi qu'au niveau du sol sont pris en compte, ce qui, suffisamment loin de la source, conduit à une répartition de la concentration homogène suivant la verticale. Cette distance correspond à une valeur de σ_z proche de $1.5H_{CL}$. Au-delà de cette distance, l'expansion du panache se fait uniquement selon l'horizontale, en considérant une source rectiligne verticale fictive de longueur H_{CL} et positionnée à la distance à laquelle est atteinte cette valeur de σ_z . La contribution suivant z dans la formulation du panache gaussien est alors négligée.

Afin que les formulations propres à une source linéaire puissent être utilisées en champ lointain, la vitesse en milieu de couche limite $U(H_{CL}/2)$ est prise comme référence de telle sorte que la concentration $\overline{C}(x, y)$ vaut :

$$\overline{C}(x,y) = \frac{Q'}{\sqrt{2\pi}\sigma_y H_{CL} U(H_{CL}/2)} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right)$$
(1.3.37)

où Q' est le terme source équivalent à celui d'origine à la distance x_{tr} de transition entre les deux formulation (quand $\sigma_z \approx 1.5 H_{CL}$).

rms de concentration et durée d'échantillonnage

En dehors du champ de concentration moyen, le modèle ADMS est capable de donner les rms de concentration dans des configurations simples dépourvues de bâtiments. L'approche qui est adoptée est fondée à la fois sur des considérations théoriques et sur des résultats expérimentaux. Elle est décrite dans Thomson (1992) et Thomson (1996). Pour des rejets continus et de durée inférieure à l'heure, ce qui correspond à notre cadre d'étude, le module decalcul des rms estime la probabilité, au sens de la moyenne d'ensemble, avec laquelle une concentration moyennée sur une période donnée excède une concentration critique C_{cr} , la sortie globale étant alors la variance d'une distribution de probabilité. Une durée d'échantillonnage des fluctuations t_{avf} est fixée par l'utilisateur pour laquelle le module estime la probabilité que la concentration moyenne excède la valeur critique C_{cr} . Nous soulignons que dans sa version 3.3, le module ne peut être activé lorsque sont pris en compte des bâtiments.

1.3.5 Prise en compte des bâtiments

La méthodologie est assez simple mais est supposée reproduire les effets principaux des bâtiments sur la dispersion. Ceux-ci sont nécessairement parallélépipédiques et limités à dix. Pour une direction de vent donnée, l'ensemble des bâtiments représenté est réduit par le module en un seul bâtiment dénommé bâtiment effectif, dont les dimensions sont fonctions de celles des autres bâtiments. La perturbation du champ dynamique liée aux bâtiments est représentée par une zone de recirculation à l'arrière du bâtiment effectif ainsi que par une zone de sillage en aval de celui-ci. À l'intérieur de la zone de recirculation, le mélange est supposé parfait conduisant à un champ de concentration uniforme et déterminé à partir de la fraction de composé entraîné dans la recirculation. Dans le sillage, la concentration en un point donné est la somme de la contribution due à la recirculation et de celle due au panache en amont auquel a été retranchée la fraction entraînée dans la recirculation. Par ailleurs, la diffusion est augmentée pour tenir compte du déficit de vitesse et du surplus de turbulence. La figure 1.4, traitant un exemple simple, illustre la méthodologie employée.



FIG. 1.4 : Etapes permettant de modéliser l'influence d'un bâtiment situé en aval d'un rejet surélevé, in CERC (2004)

<u>Géométrie des bâtiments</u> :

Le modèle s'appuie sur l'hypothèse qu'un ensemble de bâtiments suffisamment proches peut être remplacé par un seul bâtiment équivalent. Ainsi, à partir d'une série de bâtiments caractérisés par leur centre (x_i, y_i) , leur hauteur H_i , leurs faces et leur orientation par rapport à la direction principale du vent θ_i , sont définies les grandeurs correspondantes pour le bâtiment équivalent H_b , les longueurs transverse et longitudinale L_b et W_b ainsi que l'angle θ_b qui ne sert ici qu'à déterminer certaines caractéristiques de la zone de recirculation, le bâtiment équivalent étant toujours perpendiculaire à la direction du vent. Nous ne développons pas ici l'algorithme permettant le calcul de ces différentes grandeurs, pour cela se reporter à Robins & Apsley (2004).

Régions de l'écoulement :

La région de l'écoulement contenant le bâtiment et son silage est compartimentée en différentes sous-régions (Fig. 1.5) :

- U est la zone en amont de l'obstacle.
- A est la zone externe au sillage partiellement perturbée par l'obstacle
- R est la zone de recirculation
- W est la zone de sillage
- E est la zone externe au sillage



FIG. 1.5: Régions de l'écoulement définies autour d'un obstacle, in Robins & Apsley (2004) (L_R est la longueur de recirculation)

Les dimensions de la zone B sont données sur la Figure 1.5 avec :

$$N_H = 1 + 2\min(1, W_b/H_b)$$

$$N_L = 1 + 2\min(1, L_b/H_b)$$

Dispersion dans la zone de recirculation

La longueur de la zone de recirculation L_R est déterminée d'après la formule empirique de Fackrell et Pierce (1981) :

$$L_R = \frac{A.W_b}{1 + B.W_b/H_b}, \text{ avec } A = 1.8 \left(\frac{L_b}{H_b}\right) \text{ et } B = 0.24$$
 (1.3.38)

dans les conditions où le rapport L_b/H_b reste compris entre 0.3 et 3.

La zone de recirculation est parfaitement mélangée sur une largeur $W'_b = \min(W_b, 3H_b)$ à laquelle est associé le volume R' et la concentration y est constante et égale à la valeur C_R déterminée à partir du temps de résidence dans la recirculation, du débit amont et du volume R'.

Les paramètres de dispersion σ_y et σ_z ainsi que la trajectoire du panache z_p au sein de la zone de recirculation serviront de nouvelles conditions initiales pour la description de la dispersion dans la zone de sillage. Dans le cas où le rejet est entièrement entraîné par la recirculation, σ_y , σ_z et z_p valent :

$$\sigma_y = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{W_b'}{2} \tag{1.3.39}$$

$$\sigma_z = \frac{1}{\sqrt{3}} H_b \tag{1.3.40}$$

$$z_p = 0$$
 (1.3.41)

En revanche, si le rejet n'est pas complètement entraîné, les valeurs de σ_y et σ_z sont identiques à celles de l'écoulement non perturbé. Par contre, la trajectoire du panache est alors décrite par les équations suivantes :

$$\frac{dy_p}{dx} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{dz_p}{dx} = \frac{w}{U_H},\tag{1.3.42}$$

où U_H est la vitesse horizontale et w la vitesse verticale.

Dispersion dans le sillage

Pour décrire l'écoulement moyen dans le sillage, des expressions analytiques assez complexes décrites par Robins & Apsley (2004) sont utilisées. Elle s'écrivent en fonction de la composante horizontale U_H qui prend en compte le déficit de vitesse propre au sillage. Les paramètres turbulents sont quant à eux calculés en fonction de la contrainte de frottement au sol et du déficit de vitesse.

Pour traiter la dispersion dans le sillage, un nouveau zonage est réalisé afin de prendre en compte l'évolution du déficit de vitesse et de l'excès de turbulence à travers des paramétrisations spécifiques des paramètres de dispersion.

Pour un rejet qui est partiellement entraîné par la recirculation, le champ de concentration dans la zone de sillage a deux contributuions, la première étant celle issue de la recirculation, la seconde provenant de la zone en amont, soit :

$$C(x, y, z) = Q[(1 - \alpha)C_1 + \alpha C_2], \qquad (1.3.43)$$

où C_1 représente la concentration du panache amont non entraînée dans la recirculation et C_2 celle du panache de recirculation. Le coefficient α est la fraction d'entraînement.

Effets de rabattement du panache

Par ailleurs, dans le cas où le rejet s'effectue à proximité immédiate d'un ou plusieurs bâtiments suffisamment hauts par rapport à la hauteur du rejet (typiquement $H/H_{bat} > 2.5$, où H_{bat} est la hauteur du bâtiment effectif, Hanna (1982)) et si le rapport de quantité de mouvement à l'origine W_s/U_s est inférieure à 1.5, la phase d'ascension du panache est alors perturbée par le bâtiment principal, conduisant à une hauteur effective de rejet inférieure à celle calculée usuellement. La correction apportée à la hauteur de rejet Δ_h est donnée par :

$$\Delta_h = 2D_s \left(\frac{W_s}{U_s} - 1.5\right) \tag{1.3.44}$$

où D_s est le diamètre de sortie du rejet.

1.3.6 Prise en compte du relief

Le modèle ADMS 3 propose la prise en compte du relief à travers un module spécifique qui calcule les champs dynamique et de turbulence et ajuste les caractéristiques du panache établies sur terrain plat. Le module fait appel au modèle diagnostique FLOWSTAR pour calculer les caractéristiques de l'écoulement, en utilisant des solutions analytiques linéarisées aux équations de conservation. Nous ne détaillons pas dans ce paragraphe les calculs développés dans le modèle FLOWSTAR (Carruthers *et al.* (2004)) mais donnons les paramétrisations permettant d'ajuster les paramètres du panache une fois les champs de vent et de turbulence connus.

Calcul de la hauteur moyenne du panache

La trajectoire de la hauteur moyenne du panache notée z_p est décrite à partir de la ligne de courant partant de la position initiale du panache (x_0, y_0, z_0) en laquelle le champ de vent est calculé par interpolation sur les points de grille du module FLOWSTAR. Connaissant la vitesse du vent et la position initiale, on parvient en une étape élémentaire à trouver la position suivante (x_1, y_1, z_1) de z_p et ainsi de suite jusqu'à décrire complètement sa trajectoire.

Calcul des paramètres de dispersion

La technique appliquée peut être considérée comme analogue à celle employée dans le module de bâtiments. Dans un premier temps les écarts-types σ_{yf} et σ_{zf} de la dispersion en terrain plat sont calculés puis utilisés dans des équations différentielles permettant d'accéder aux écarts-types en terrain complexe σ_{yh} et σ_{zh} :

$$\frac{d}{dx}\left(\sigma_{yh}\right) = \frac{\left[1 + \frac{\Delta\sigma_{v}^{2}}{\sigma_{v0}^{2}}\right]^{1/2}}{\left[1 + \frac{\Delta u}{U_{0}}\right]} \frac{d}{dx}\left(\sigma_{yf}\right)$$
(1.3.45)

$$\frac{d}{dx}(\sigma_{zh}) = \frac{\left[1 + \frac{\Delta \sigma_w^2}{\sigma_{w0}^2}\right]^{1/2}}{\left[1 + \frac{\Delta u}{U_0}\right]} \frac{d}{dx}(\sigma_{zf})$$
(1.3.46)

avec :

$$\Delta u = u - u_0$$

$$\Delta \sigma_v^2 = \sigma_{vh}^2 - \sigma_{v0}^2$$

$$\Delta \sigma_w^2 = \sigma_{wh}^2 - \sigma_{w0}^2$$

Les grandeurs σ_u et σ_v correspondent aux fluctuations de vitesse calculées par successivement en terrain plat (indice f) et en terrain complexe (indice h) par FLOWSTAR, u_0 est la vitesse non perturbée de l'écoulement et x représente l'abscisse curviligne.

Prise en compte d'une zone de recirculation

La méthode est encore une fois proche de celle développée pour le calcul du champ de concentration dans le sillage d'un bâtiment. Cependant, seuls seront concernés les rejets se produisant à l'intérieur même d'une zone de recirculation et aucun panache émis en dehors ne pourra pénétrer à l'intérieur de celle-ci. Dans le cas d'un rejet émis dans la zone de retournement, il est défini une zone de recirculation effective, qui n'a pas nécessairement les caractéristiques géométriques exactes de la zone de recirculation réelle, au sein de laquelle le constituant est parfaitement mélangé. Les écarts-types dispersifs ainsi que la distribution de concentration au sein de celle-ci sont alors de nouvelles conditions initiales pour le calcul de la dispersion en aval.

1.4 L'approche RANS : l'exemple de Mercure

1.4.1 Introduction

L'approche RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*) développée dans les modèles de CFD consiste en la résolution directe de la moyenne statistique de l'écoulement après l'application de l'opérateur de Reynolds introduit dans le paragraphe 1.1.3 aux équations fondamentales, conduisant aux équations moyennées 1.1.21, 1.1.22, 1.1.25 et 1.2.4 respectivement pour les trois composantes de la vitesse $\overline{u}, \overline{v}$ et \overline{v} , la température potentielle $\overline{\theta}$ et la concentration massique C. Le problème posé concerne alors la fermeture des flux turbulents apparaissant dans les équations

moyennées : les flux turbulents de quantité de mouvement ou tensions de Reynolds encore appelés tensions de Reynolds $-\overline{\rho}u'_iu'_i$, de chaleur $-\overline{\rho}u'_i\theta'$ et de masse $-\overline{\rho}u'_ic'$.

Une première approche est de décrire ces flux turbulents à l'aide de nouvelles équations pronostiques qui elles-mêmes feraient intervenir de nouveaux termes du troisième ordre inconnus également. Il s'agit là d'une fermeture au second ordre propre à la méthodologie employée dans le modèle R_{ij} , ou modèle aux tensions de Reynolds. Une autre démarche, très répandue, consiste en une fermeture au premier ordre de ces flux, c'est-à-dire que les corrélations vont être déterminées explicitement en fonction d'autres caractéristiques de l'écoulement moyen déjà connues.

Nous présentons dans cette section ces deux fermetures turbulentes propres à l'approche RANS. Dans un second temps, nous montrons comment celles-ci permettent également de modéliser les moments d'ordre 2 du champ de concentration dans des situations complexes. Enfin, nous introduisons le modèle *Mercure* utilisé dans le cadre de ce travail, utilisé avec le formalisme RANS.

1.4.2 Fermetures au premier ordre

Hypothèse de Boussinesq

La fermeture dite au premier ordre des flux turbulents repose sur l'hypothèse de Boussinesq (1877). Celle-ci établit une analogie directe entre flux turbulents et flux de masse de type diffusif régis par une loi de Fick. Soit le flux turbulent d'une variable instantanée f transportable par l'écoulement, Boussinesq postule ainsi que le transfert de la quantité fluctuante f' par la vitesse fluctuante u'_i dans la direction i est directement proportionnel au gradient de la valeur moyenne de f dans cette direction. Si u_L et L sont respectivement une échelle caractéristique de vitesse et de longueur de la turbulence, on peut alors écrire localement :

$$\begin{array}{rcl} f' &\approx & -L \frac{\partial \overline{f}}{\partial x_i} \\ u'_i &\approx & u_L \end{array}$$

Le flux turbulent $\overline{f'u'_i}$ s'écrit alors :

$$\overline{f'u'_i} = -\left(u_L L\right) \ \frac{\partial f}{\partial x_i} \tag{1.4.1}$$

Le flux turbulent est ainsi directement proportionnel au gradient de la moyenne de f, le coefficient de proportionnalité étant de la dimension de $(u_L L)$ c'est à dire celle d'une viscosité ou diffusivité (en $m^2 \cdot s^{-1}$). Tout flux turbulent peut ainsi être modélisé à l'aide d'un coefficient dit de diffusivité turbulente K_t , soit pour la corrélation suivant la direction i:

$$\overline{f'u_i'} = -K_{ti}\frac{\partial\overline{f}}{\partial x_i} \tag{1.4.2}$$

Il est à noter que contrairement à la diffusivité moléculaire qui est une propriété intrinsèque du fluide, la diffusivité turbulente est une paramétrisation qui dépend de l'écoulement, et est donc *a priori* variable en temps et en espace. Dans certains cas, elle peut devenir négative (flux à contre gradient).

L'application de cette hypothèse aux flux turbulents $-\overline{\rho}\overline{u'_iu'_j}$, $-\overline{\rho}\overline{u'_i\theta'}$ et $-\overline{\rho}\overline{u'_iC'}$ conduit alors aux formulations suivantes :

- Tensions de Reynolds :

$$-\overline{u_i'u_j'} = \nu_t \left[\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}\right] - \frac{2}{3}k\delta_{ij} = 2\nu_t \overline{S_{ij}} - \frac{2}{3}k\delta_{ij}$$
(1.4.3)

- flux turbulent de chaleur :

$$-\overline{\theta' u'_j} = k_h \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} = \frac{\nu_t}{P_{r_t}} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} \quad \text{où} \quad P_{r_t} = \frac{\overline{\rho} C_p}{\nu_t \lambda_t}$$
(1.4.4)

- flux turbulent de matière :

$$-\overline{c'_{i}u'_{j}} = K_{c}\frac{\partial\overline{C}}{\partial x_{j}} = \frac{\nu_{t}}{S_{c_{t}}}\frac{\partial\overline{C}}{\partial x_{j}}$$
(1.4.5)

où P_{r_t} dans l'équation (1.4.4) et S_{c_t} dans l'équation (1.4.5) sont respectivement les nombres turbulent de Prandtl et de Schmidt.

Les équations de conservation moyennées peuvent alors être ré-écrites à l'aide des fermetures précédentes, ce qui donne, en négligeant les termes de diffusion moléculaire :

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} = -g\delta_{i3} - \frac{1}{\overline{\rho}} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[2\nu_t \overline{S_{ij}} - \frac{2}{3}k\delta_{ij} \right]$$
(1.4.6)

$$\frac{\partial \overline{\theta}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} = \frac{1}{\overline{\rho} C_p} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\lambda_t \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_j} \right] + \overline{S_{\theta}}$$
(1.4.7)

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\nu_t}{S_{c_t}} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_j} \right] + \overline{S}_i + \overline{R}_i$$
(1.4.8)

Le problème posé concerne alors la définition des coefficients de diffusivité turbulente. Les différentes méthodes permettant d'y répondre sont développées dans les paragraphes suivants.

Le modèle à longueur de mélange

Prandlt introduit en 1925 une analogie avec les échanges de quantité de mouvement, de masse et de chaleur s'opérant à l'échelle moléculaire. Selon des concepts issus de la théorie cinétique des gaz, la viscosité moléculaire peut être décrite comme le produit d'une vitesse moléculaire moyenne par le libre parcour moyen. Prandlt suggéra qu'un mécanisme similaire pouvait être appliqué aux transferts fluides, en postulant que des tourbillons peuvent se détacher de l'écoulement stationnaire et "voyager" une certaine distance, appelée longueur de mélange, avant d'être mélangés. Bien que les trajectoires tourbillonnaires ont un caractère aléatoire et se produisent dans toutes les directions, il est raisonnable de penser que l'échange global de quantité de mouvement, de chaleur ou de masse se fait dans la direction du gradient moyen de vitesse, de température ou de concentration.

Considérons un écoulement horizontal de couche limite atmosphérique homogène bidimensionnel. Les échanges de quantité de mouvement et de chaleur s'opèrent selon la distance à la paroi z, et, si l'on place l'axe x dans le sens de l'écoulement, les flux turbulents dominants $-\overline{u'w'}$ et $-\overline{\theta'w'}$ sont alors donnés par :

$$-\overline{u'w'} = \nu_t \frac{\partial \overline{u}}{\partial z}, \qquad (1.4.9)$$

$$-\overline{\theta'w'} = \frac{\nu_t}{Pr_t}\frac{\partial\theta}{\partial z} \tag{1.4.10}$$

Les viscosités peuvent alors, selon l'approche de Prandlt, être considérées comme fonctions uniques d'une longueur de mélange (l_m pour la quantité de mouvement et l_h pour la chaleur) et du gradient de vitesse normé $\left|\frac{\partial \overline{u}}{\partial z}\right|$:

$$\nu_t = l_m^2 \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right|, \qquad (1.4.11)$$

$$\frac{\nu_t}{P_{r_t}} = l_h l_m \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right|$$
(1.4.12)

Dans sa forme généralisée, le modèle à longueur de mélange est applicable à un grand nombre d'écoulements et sa simplicité présente un avantage certain. Néanmoins, une des difficultés réside dans la calcul de cette longueur, notamment lorsque l'écoulement est complexe.

Dans la couche de surface, une hypothèse correcte est que la longueur de mélange évolue linéairement : $l_m = \kappa z$, où κ est la constante de Von Kármán. Dans la CLA prise dans son intégralité, la longueur de mélange est supposée suivre une loi du type (Arya (1999)) :

$$\frac{1}{l_m} = \frac{1}{\kappa z} + \frac{1}{l_b} + \frac{1}{l_0},$$

avec $l_0 \approx H_{CL}$ et l_b une valeur limite introduite pour les cas stables.

Le modèle de Louis

Le modèle de Louis (1979) n'est autre qu'une extension du modèle à longueur de mélange adapté spécialement aux écoulements atmosphériques. Il introduit une dépendance de la longueur de mélange aux effets de flottabilité au moyen de fonctions dépendant du nombre de Richardson de gradient R_i :

$$\nu_t = l_m^2 \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right| F_m(R_i), \qquad (1.4.13)$$

$$\frac{\nu_t}{Pr_t} = l_h l_m \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right| F_h(R_i)$$
(1.4.14)

Dans le cas stable, ces fonctions s'écrivent :

$$F_m(R_i) = \left[1 + x_m b R_i \left(1 + d R_i\right)^{-1/2}\right]^{-1}$$
(1.4.15)

$$F_h(R_i) = \left[1 + x_h b R_i \left(1 + d \cdot R_i\right)^{1/2}\right]^{-1}, \qquad (1.4.16)$$

et dans le cas instable :

$$F_{m,h}(R_i) = (1 - x_{m,h}.b.R_i) \left[1 + 3.b.c \left(\frac{l_m^2}{z^2}\right) \left(\frac{|R_i|}{27}\right)^{1/2} \right]^{-1}, \qquad (1.4.17)$$

avec : b = c = d = 5, $x_m = 2$ et $x_h = 3$.

Le modèle k-l

Kolmogorov (1942) et Prandlt (1945) ont indépendamment suggéré qu'il était préférable de décrire l'échelle de vitesse u_L à partir de l'énergie cinétique turbulente k, soit :

$$u_L = C.k^{1/2} \tag{1.4.18}$$

En gardant l'échelle de longueur correspondant à la longueur de mélange l_m , cela conduit à la définition suivante de la viscosité turbulente ν_t :

$$\nu_t = C.k^{1/2} l_m, \tag{1.4.19}$$

Une valeur de la constante C proche de 0.55 permet d'obtenir un comportement correct dans la zone logarithmique.

Cette fermeture implique la connaissance de k qui est décrite par une équation de transport

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]}_A + P_k + G - \underbrace{\varepsilon}_B \tag{1.4.20}$$

- Le terme A correspond aux processus de diffusion visqueuse et turbulente, ces derniers étant modélisés pour un nombre de Prandlt-Schmidt σ_k
- P_k est le terme de production d'énergie turbulente défini par :

$$P_k = \nu_t \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}\right) \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}$$
(1.4.21)

- G représente le terme de production ou de destruction par flottabilité :

$$G = -\frac{g}{\theta} \frac{\nu_t}{P_{r_t}} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \delta_{i3} \tag{1.4.22}$$

- B est le terme de dissipation qui est décrit en utilisant une échelle de longueur de dissipation l_{ε} généralement prise égale à la longueur de mélange l_m (Arya (1999)) :

$$\varepsilon = \frac{C_{\varepsilon} k^{3/2}}{l_{\varepsilon}} \tag{1.4.23}$$

Les constantes C, C_{ε} et σ_k sont répertoriées dans la tableau 1.1 :

TAB. 1.1: Constantes utilisées dans le modèle k-l (Pielke (1984))

$$\begin{array}{ccc} C & C_{\varepsilon} & \sigma_k \\ 0.16 & 0.54 & 1.66 \end{array}$$

Le modèle k- ε

Le modèle $k \cdot \varepsilon$ représente un moyen de contourner la détermination d'une longueur de mélange commune aux modèles à longueur de mélange ou au modèle $k \cdot l$. En effet, à défaut de construire formellement la viscosité turbulente avec une échelle de longueur et une vitesse caractéristique, il est possible de la déterminer complètement à partir d'un couple (k^{α}, l'^{β}) homogène en terme de dimensions au couple (u_L, l_m) . Dans le cas particulier où α vaut 3/2 et β vaut -1, alors $k^{3/2} l_m^{-1}$ n'est autre que le terme de dissipation ε de l'énergie cinétique turbulente défini par :

$$\varepsilon = \nu \frac{\overline{\partial u'_i}}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \tag{1.4.24}$$

Ainsi, la connaissance du couple (k, ε) donne accès à la viscosité turbulente. Est alors associée à l'équation sur k (1.4.20) une équation de transport sur ε :

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \left(P_k + C_{\varepsilon 3} G \right) - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k}$$
(1.4.25)

La résolution du système couplé formé par les équations (1.4.20) et (1.4.25) permet de déterminer la viscosité turbulente ν_t :

$$\nu_t = C_\mu \, \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{1.4.26}$$

Le jeu de constantes introduites dans ce modèle fait toujours l'objet de nombreux débats, notamment dans la communauté atmosphérique (Castelli *et al.* (2005)). Celui suggéré à l'origine par Launder & Spalding (1974) figure dans la tableau 1.2.

TAB. 1.2 : Constantes du modèles $k - \varepsilon$ (Launder & Spalding (1974))

C_{μ}	C_{ε_1}	C_{ε_2}	σ_k	$\sigma_{arepsilon}$
0.09	1.44	1.92	1	1.3

(La constante $C_{\varepsilon 3}$ vaut 1 en atmosphère instable, 0 en atmosphère sable)

Les modifications apportées aux constantes initiales ont eu souvent pour objectif de mieux prendre en compte les lois d'évolution des déviations standards dans les trois directions $\sigma_u, \sigma_v, \sigma_w$ définies autant pour la CLA que pour la CLS respectivement par rapport à u_L et u_* (équations (1.1.40) à (1.1.46)) et d'en déduire une énergie cinétique turbulente $k = 0.5 \overline{u'_i u'_i}$ qui serait plus réaliste. Introduisons à cet effet un coefficient C_k de proportionnalité entre k et u^2_* (ou le carré de la vitesse de frottement locale dans la CLA u^2_L) :

$$k = 0.5 \,\overline{u'_i u'_i} = C_k {u_*}^2 \tag{1.4.27}$$

La constante C_{μ} s'exprime alors dans la CLS directement à partir du coefficient C_k :

$$C_{\mu} = \frac{u_*^4}{k^2} = \left(\frac{1}{C_k}\right)^2 \tag{1.4.28}$$

En reprenant le résultat du paragraphe 1.1.5 issu des lois de similitude (k $\approx 5.5 u_*^2$), la valeur de C_{μ} correspondante est alors proche de 0.03.

C'est ainsi que certains auteurs préfèrent utiliser cette dernière valeur de C_{μ} , impliquant conjointement une modification du coefficient σ_{ε} de l'équation (1.4.25) calculé de la manière suivante :

$$\sigma_{\varepsilon} = \frac{\kappa^2}{\left(C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 2}\right)\sqrt{C_{\mu}}}\tag{1.4.29}$$

Selon la valeur de C_{μ} , le coefficient σ_{ε} varie ainsi entre 1.3 et 2.38 (Bottema (1997)).

Duynkerke (1988) opte pour une valeur de C_{μ} de 0.033 alors qu'un autre jeu de constantes est proposé par Musson-Genon (1995). Il est finalement admis qu'aucun jeu de constantes n'a une valeur universelle et que cela dépend non seulement du type d'écoulement, mais également de la zone de l'écoulement (Bottema (1997)), avec en arrière plan l'idée que la turbulence, notamment en présence d'obstacles, contient une part de turbulence active et une autre inactive dont la répartition est inhomogène dans l'espace. Nous reviendrons sur le problème soulevé par le choix des constantes dans le chapitre 3.

L'utilisation du modèle $k \cdot \varepsilon$ présente cependant certaines limites ou insuffisances, notamment lorsque l'on s'intéresse à un écoulement dans une zone fortement complexe. Ces limites sont largement pointées du doigt dans la littérature. Elles sont inhérentes à la formulation même des tensions de Reynolds en fonction des gradients moyens, au moyen d'une relation de linéarité. Or celle-ci est violée dans le cas d'écoulements présentant notamment des courbures importantes de ses lignes de courant, des zones de séparation et de rattachement (Ehrhard *et al.* (2000)). Un point de faiblesse reconnu est notamment l'existence d'un point de stagnation à proximité des parois de bâtiments pour lequel il y a à la fois une surévaluation de l'énergie cinétique turbulente k et des viscosités turbulentes (Franke *et al.* (2004)). Nous présentons ci-dessous quelques modèles qui représentent une alternative au modèle $k \cdot \varepsilon$, soit issus d'une modification plus ou moins importante du modèle classique, soit utilisant une fermeture plus complexe.

Le modèle $k - \omega$

Le modèle $k - \omega$ (Wilcox (1988) et Wilcox (2004)) est un modèle à deux équations pour lequel l'équation portant sur le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente (1.4.25) est remplacée par une équation portant sur la grandeur $\omega = \varepsilon/k$. L'équation sur k restant inchangée, celle sur ω s'écrit :

$$\frac{\partial\omega}{\partial x_j} + \overline{u}_j \frac{\partial\omega}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial\omega}{\partial x_j} \right] + C_{\omega 1} \frac{\omega}{k} \left(P_k + C_{\omega 3} G \right) - C_{\omega 2} \omega^2 \tag{1.4.30}$$

La viscosité turbulente est alors définie par :

$$\nu_t = C_\mu \frac{k}{\omega} \tag{1.4.31}$$

La valeur de σ_{ω} est généralement prise égale à celle de σ_k , et les valeurs de $C_{\omega 1}$, $C_{\omega 2}$ et $C_{\omega 3}$ sont respectivement : 0.44, 0.92 et 1.0.

Le modèle $k - \omega$ est reconnu pour être plus performant en écoulement de proche paroi, notamment dans le traitement de la couche visqueuse (Pope (2000)) et la prise en compte des effets de contre-gradient.

Les modèles linéaires dérivés du modèle k- ε

Pour pallier au problème de surproduction de la turbulence sur les faces amont des bâtiments, des modifications du modèle original ont été apportées. Nous pouvons citer notamment les modèles LK (Launder & Kato (1993)) et MMK (Murakami (1998)) qui sont tous deux comparés au modèle standard sur l'exemple simple de l'écoulement autour d'un cube dans Tsuchiya *et al.* (1997) et Murakami (1998), ce dernier montrant que ces deux modèles peuvent effectivement éviter la présence d'une zone de stagnation en modifiant la production de turbulence. Au lieu d'évaluer le terme de production P_k uniquement à partir du tenseur des déformations $\overline{\overline{S}}$ $(P_k = \nu_t \overline{S}^2)$, le modèle LK introduit le tenseur de vorticité $\overline{\overline{\Omega}} = \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_i} - \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}$ suivant la relation :

$$P_k = \nu_t S\Omega, \tag{1.4.32}$$

où S et Ω sont les normes des tenseurs $\overline{\overline{S}}$ et $\overline{\overline{\Omega}}$, définies par :

$$S = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right)^2 \quad \text{et} \quad \Omega = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right)^2 \tag{1.4.33}$$

Le modèle MMK fournit pour sa part une re-formulation de la viscosité turbulente en conservant la formulation d'origine pour le terme de production :

$$\nu_t = C^*_{\mu} \frac{k^2}{\varepsilon} \text{ avec } C^*_{\mu} = C^*_{\mu} \frac{\Omega}{S} \text{ si } \frac{\Omega}{S} < 1$$
(1.4.34)

$$\nu_t = C^*_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad \text{avec} \quad C^*_\mu = C_\mu \quad \text{si } \frac{\Omega}{S} \ge 1$$

$$(1.4.35)$$

(1.4.36)

Ces modèles sont régulièrement utilisés dans le cadre de modélisations de la pollution en milieu urbain et donnent ponctuellement de meilleurs résultats (Brzoska *et al.* (1997), Tsuchiya *et al.* (1997))

Le modèle RNG $k \cdot \varepsilon$ (Re-Normalization Group, Yakhot & Orszag (1986)) représente une autre alternative. Il consiste à modifier l'équation portant sur le taux de dissipation de l'énergie cinétique ε en y ajoutant un terme puits, afin de mieux prendre en compte la courbure des lignes de courant liée à de forts gradients de vitesse :

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j} + \overline{u}_j \frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \right) \frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \left(P_k + C_{\varepsilon 3} G \right) - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} - R_{RNG}, \quad (1.4.37)$$

avec :

$$R_{RNG} = \frac{C_{\mu}\eta^{3} (1 - \eta/\eta_{0})\varepsilon^{2}}{(1 + \beta\eta^{3})k}$$
(1.4.38)

$$\eta = \frac{Sk}{\varepsilon} \tag{1.4.39}$$

Les coefficients du modèle sont identiques à ceux décrits dans le tableau 1.2 à l'exception de la constante $C_{\varepsilon 1}$ qui vaut :

$$C_{\varepsilon 1} = 1.42 - \frac{\eta \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right)}{1 + \beta \eta^3} \tag{1.4.40}$$

Les constantes η_0 et β ont les valeurs suivantes : $\eta_0 = 4.38$ et $\beta = 0.015$.

Ce modèle est également largement répandu dans les études d'écoulements en milieu complexe (Coirier *et al.* (2006)). Nous le testerons dans le chapitre 3.

Par ailleurs, le modèle SST (Menter (1993)), qui couple les modèles $k - \varepsilon$ et $k - \Omega$, peut également apporter des améliorations. Ses performances sont notamment comparées à celle du modèle $k - \varepsilon$ standard pour de multiples configurations de type rue-canyon dans Wang *et al.* (2006).

Enfin, nous pouvons noter que certains auteurs suggèrent qu'afin de prendre en compte le caractère anisotrope de la turbulence atmosphérique, il peut être judicieux de combiner une diffusivité verticale calculée par la fermeture à deux équations avec une diffusivité horizontale calculée au moyen d'une formulation sous-maille (Baklanov (2000)).

Les modèles non linéaires

Les modèles non linéaires peuvent apparaître comme un bon compromis entre une fermeture au premier ordre et à un ordre plus élevé (cf paragraphe1.4.3). Ces modèles sont en effet capables de tenir compte de l'anisotropie de la turbulence puisque le tenseur d'anisotropie \overline{a} permettant d'accéder aux tensions de Reynolds ($a_{ij} = \frac{\overline{u'_i u'_j}}{k} - \frac{2}{3}\delta_{ij}$) n'est pas simplement développé au premier ordre au moyen de simples gradients, mais à un ordre plus élevé. Nous pouvons citer les modèles de Craft *et al.* (2000) et Lien *et al.* (1996) qui proposent un développement à l'ordre trois du tenseur d'anisotropie et le modèle de Shih *et al.* (1995) qui fait intervenir les termes linéaires et quadratiques. Ces trois modèles ont notamment été comparés par Ehrhard *et al.* (2000). Une autre étude portant également sur le modèle *cubic* de Craft ainsi que deux autres modèles a été réalisée par Wright & Easom (2003).

1.4.3 Fermetures au second ordre

La fermeture au second ordre consiste en la résolution d'une équation de transport pour chacun des flux turbulents $\overline{u'_i u'_j}$, $\overline{u'_i \theta'}$ et $\overline{u'_i c'}$ qui fait intervenir des corrélations du troisième ordre nécessitant à leur tour une fermeture appropriée. L'avantage offert par ce type de fermeture est qu'il décrit les flux turbulents de manière totalement anisotrope. Le modèle intégrant ce type de fermeture est appelé modèle aux tensions de Reynolds (*Reynolds Stress Models* - RSM) ou modèle R_{ij} .

L'équation de transport pour les tensions de Reynolds est donnée par :

$$\frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial t} + \overline{u}_k \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} = P_{ij} + \Phi_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\nu + \frac{2}{3} C_s \frac{\varepsilon^2}{k} \right) \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_k} \right] - \frac{2}{3} \delta_{ij\varepsilon}$$
(1.4.41)

où P_{ij} et Φ_{ij} sont respectivement le terme de production des tensions de Reynolds et le terme de corrélation pression - gradients de vitesse définis par :

$$P_{ij} = -\left[\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k}\right]$$
(1.4.42)

$$\Phi_{ij} = -\varepsilon \left[C_{s1} a_{ij} + C_{s2} \left(a_{ik} a_{kj} - \frac{1}{3} a_{ij} a_{ij} \delta_{ij} \right) \right] - C_{r1} P_{ik} a_{kj} + C_{r2} k \overline{Sij} \quad (1.4.43)$$

$$-C_{r3}k\overline{Sij}\sqrt{a_{ij}a_{ij}} + C_{r4}k\left(a_{ik}\overline{S}_{jk} + \overline{S}_{ik}a_{jk} - \frac{2}{3}a_{ij}\overline{S}_{ij}\delta_{ij}\right)$$
(1.4.44)

$$+C_{r5}k\left(a_{ik}\Omega_{jk}+\Omega_{ik}a_{jk}\right) \tag{1.4.45}$$

où $\overline{\overline{a}}$ et $\overline{\Omega}$ sont respectivement les tenseurs d'anisotropie et de vorticité définis par :

$$a_{ij} = \frac{u_i' u_k'}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij}, \quad \text{et} \quad \Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right)$$
(1.4.46)

Aux six équations portant sur les tensions de Reynolds s'ajoute une équation de transport de la variable ε :

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \overline{u}_j \frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{\sigma_{\varepsilon RS}} \left(\nu + C_{\mu RS} \frac{k^2}{\varepsilon} \right) \frac{\partial\varepsilon}{\partial x_k} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \left(P_k + C_{\varepsilon 3} G \right) - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \tag{1.4.47}$$

Le jeu de coefficients se trouve facilement dans la littérature (Rodi (1993)). Dans l'atmosphère, depuis Lee & Teske (1976), ce modèle de turbulence a fait l'objet de nombreux travaux. Il fut utilisé dans un premier temps pour simuler des couches neutres (Sykes *et al.* (1984)), puis appliquée aux cas stables et instables (i.e. Liu & Leung (1997) et Liu & Leung (2000)). Il est depuis quelques années également utilisé pour la modélisation de l'écoulement et de la dispersion en milieu bâti (Wang *et al.* (2006)).

1.4.4 Le modèle Mercure

Présentation générale

Mercure_Saturne a été développé par le CEREA dans le but de modéliser les écoulements atmosphériques et des phénomènes de transport et de dispersion à méso-échelle ou à l'échelle locale. *Mercure_Saturne* est une adaptation aux écoulements atmosphériques du modèle de CFD *Code_Saturne*, développé par EDF R&D (département MFEE), qui, lui, est utilisé pour de multiples applications : combustion, arc électrique, thermohydraulique, etc. Il est en "open source" depuis fin 2006.

Il s'agit d'un solveur Navier-Stokes de type volumes finis pouvant s'appliquer à des maillages non structurés et non conformes et permettant ainsi de prendre en compte des géométries complexes. Il dispose d'un large panel de modèles de turbulence : méthodes RANS (longueur de mélange, $k ext{-}\varepsilon$, $k ext{-}\Omega$, $k ext{-}\varepsilon$ bas-Reynolds, R_{ij}) et méthodes LES (modèles sous-maille de Smagorinsky, dynamique, etc) (Archambeau *et al.* (2003)).

De la même manière, Mercure_Saturne peut être appliqué à des maillages non structurés et non conformes, ce qui offre une flexibilité importante. Toute la gamme de modèles de turbulence n'a pas été adaptée à l'atmosphère, les méthodes RANS avec fermeture au premier ordre ayant été préalablement adaptées. Des travaux ont dernièrement été ébauchés, dans le cadre d'une thèse, sur l'adaptation et l'utilisation du modèle LES de Code_Saturne à nos problématiques. Notons enfin que Mercure_Saturne s'inscrit dans la continuité du modèle MERCURE (EDF R&D, Carissimo et al. (1995); Souffland (1985); Buty (1988)), version atmosphérique du code ESTET (EDF R&D), qui ne pouvait prendre en compte que des maillages structurés.

Le modèle MERCURE a été d'abord utilisé sur des cas d'écoulement orograhique (Elkhafi (1992), sur la modélisation de l'îlot de chaleur urbain (Troude *et al.* (2002)) puis des panaches d'aéroréfrigérants à l'aide du module de microphysique (Bouzereau (2004)). La version nonstructurée Mercure_Saturne a été surtout appliquée pour des études de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine (Milliez & Carissimo (2006b), Milliez & Carissimo (2006a)), avec également la possibilité de prendre en compte la chimie réactive (Lacour *et al.* (à paraître dans Atmos. Environ.)) ou de modéliser la formation et la dispersion d'aérosols (Albriet (2007)). Il est dernièrement également mis en oeuvre sur la thématique énergie éolienne, dans le but de modéliser les éoliennes au moyen de termes sources, dans un environnement à topographie complexe (travaux de thèse de Laurent Laporte). Par soucis de simplicité, nous désignerons le modèle Mercure_Saturne par *Mercure* dans la suite de ce manuscrit.

Une approche RANS a donc été envisagée pour mes travaux, ce qui se justifie complètement pour deux raisons liées à la relative faiblesse du coût de calculs, notamment en regard d'une méthode LES. D'une part, il s'agit de valider l'outil *Mercure* dans une utilisation "opérationnelle" qui est celle de l'étude de la dispersion autour des sites nucléaires d'EDF, mettant déjà en jeu un grand nombre de calculs en considérant à la fois la variabilité en terme de direction moyenne du vent et de conditions de stabilité. D'autre part, la volonté de réaliser en aval des calculs d'incertitude et une étude de sensibilité, avec comme ordre de grandeur une centaine de simulations, nécessitait également de réduire presque de manière "drastique" le coût de calcul.

Modélisation de la turbulence

Le modèle Mercure s'appuyant sur une approche RANS, il résout les équations moyennées au sens de Reynolds de conservation de la masse, de quantité de mouvement, d'énergie et d'advection-diffusion de la concentration massique \overline{C}_i pour un fluide incompressible (selon l'hypothèse anélastique). Associées à une fermeture au premier ordre des flux turbulents, cellesci sont décrites par les équations déjà introduites dans le paragraphe 1.4.2. Les modèles de turbulence proposées par Mercure sont le modèle de Louis (1.4.2) et le modèle k- ε qui offre une certaine flexibilité dans le choix du jeu de constantes, comme entrevu dans le paragraphe 1.4.2. Ce dernier modèle a été retenu pour nos études.

Modélisation des fluctuations de concentration

En dehors du champ de concentration moyen, un point essentiel, lors d'études d'impact sur des problématiques de pollution ou de dégagement de substances toxiques ou explosives, est de quantifier la variabilité intrinsèque du processus dispersif à travers la variance de la variable concentration autour de sa valeur moyenne. Ces fluctuations ont deux composantes, l'une propre à l'intérieur du panache, qui domine pour n'importe quelle taille de source et temps de parcours, l'autre relative aux méandres du panache qui prévaut lorsque l'on considère une source de petite taille pour un faible temps de parcours.

Par ailleurs, l'évaluation de modèles de dispersion atmosphérique à travers la comparaison des concentrations prédites aux données expérimentales nécessitent d'estimer l'incertitude liée à la prédiction qui peut être décrite par l'estimation de l'intensité de ces fluctuations, pouvant être du même ordre que les valeurs moyennes elles-mêmes.

Au même titre que nombre de modèles développés par le passé et dont nous ne donnons pas ici la liste qui a été détaillée par Hanna (1984) et encore rappelée par Milliez & Carissimo (2006a), les modèles de type CFD offrent également la possibilité de modéliser ces fluctuations. Cependant, contrairement aux modèles antérieurs, ces derniers prennent explicitement en compte la complexité du terrain. Ceci est réalisé à l'aide de fermetures au second ordre pour les modèles R_{ij} ou LES, ou à l'aide d'une nouvelle équation de transport pour la variance de la fluctuation de concentration $\overline{c'^2}$ pour les modèles RANS et *Mercure*, qui ne différencie pas les deux composantes des fluctuations. Cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial \overline{c'^{2}}}{\partial t} + \underbrace{\overline{u_{j}}}_{(II)} \frac{\partial \overline{c'^{2}}}{\partial x_{j}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(D \frac{\partial \overline{c'^{2}}}{\partial x_{j}} \right) - \frac{\partial \overline{u'_{j}c'^{2}}}{\partial x_{j}}}_{(III)} \\
\underbrace{-2 \overline{u'_{j}c'}}_{(IV)} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_{j}} - 2 D \frac{\partial \overline{c'}}{\partial x_{j}} \frac{\partial c'}{\partial x_{j}}}_{(V)} \tag{1.4.48}$$

où :

- (I) et (II) sont les termes de variation temporelle et d'advection de la variance par l'écoulement par d'écoulement moyen
- (III) est la somme des diffusions moléculaire et turbulente
- (IV) est le terme de production
- (V) est le terme de dissipation

Le terme (III) peut être décrit facilement en faisant l'hypothèse habituelle d'une relation au premier ordre de type flux-gradient, soit :

$$-\overline{u_j'c'^2} = \frac{\nu_t}{S_{c_t}} \frac{\partial \overline{c'^2}}{\partial x_j}$$
(1.4.49)

Le terme (IV) peut être pareillement modélisé en introduisant le gradient moyen de concentration :

$$-2\overline{u_j'c'}\frac{\partial\overline{C}}{\partial x_j} = 2\frac{\nu_t}{S_{c_t}}\frac{\partial\overline{C}}{\partial x_j}\frac{\partial\overline{C}}{\partial x_j}$$
(1.4.50)

Nous noterons que ce terme est toujours positif (terme de "production").

La fermeture du terme (V) est quelque peu plus ardue. Une première possibilité est de l'évaluer à l'aide d'une nouvelle équation de transport, induisant la résolution d'un système couplé. Une seconde option est d'introduire une échelle de temps T_c caractéristique des tourbillons à l'origine du processus dissipatif et d'estimer alors le terme de dissipation à travers le rapport entre la moyenne de la variance $\overline{c'^2}$ et T_C :

Un moyen pratique d'estimer cette échelle de temps est de la décrire de manière linéaire en fonction de l'échelle de temps intégrale de la turbulence propre au modèle k- ε , soit :

$$T_c = D_f \frac{k}{\varepsilon},\tag{1.4.51}$$

où D_f est ce coefficient de proportionnalité dont la paramétrisation est empirique. Le terme (V) devient alors :

$$2D\frac{\overline{\partial c'}}{\partial x_j}\frac{\partial c'}{\partial x_j} = \varepsilon_c = \frac{\overline{c'^2}}{D_f}\frac{\varepsilon}{k}$$
(1.4.52)

Au moyen de ces différentes fermetures, l'équation de transport pour la variance des concentrations s'écrit alors :

$$\frac{\partial \overline{c'^2}}{\partial t} + \overline{u_j} \frac{\partial \overline{c'^2}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(D + \frac{\nu_t}{S_{c_t}} \right) \frac{\partial \overline{c'^2}}{\partial x_j} \right] \\
+ 2 \frac{\nu_t}{S_{c_t}} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_j} - \varepsilon_c$$
(1.4.53)

45

Dans le cadre de notre travail, cette dernière approche a été appliquée. Celle-ci a déjà été utilisée par le passé, nous pouvons nommer à cet égard les travaux fondateurs de Sykes *et al.* (1984) et les comparaisons à des résultats expérimentaux réalisées par Andronopoulos *et al.* (2002) et Milliez & Carissimo (2006a) respectivement sur l'étude de la dispersion dans une rue canyon à travers une expérience en soufflerie et sur la campagne *in situ* MUST (Mock Urban Setting Test).

Méthodes numériques

Le schéma en temps utilisé dans Mercure_Saturne est un schéma d'Euler implicite et la discrétisation est réalisée au moyen d'un schéma à pas de temps fractionné. Les première et troisième étapes sont dévolues à l'algorithme prédiction-correction induisant l'inversion d'une équation de Poisson pour la pression. La seconde étape consiste en la résolution de la turbulence soit ici la résolution du système couplé en k et ε . La dernière étape est consacrée à la résolution des équations portant sur les grandeurs scalaires (température, concentrations, variances, etc ...), l'ensemble des variables se trouvant mis à jour en fin de pas de temps.

La discrétisation spatiale de Mercure_Saturne est de type volumes finis, les équations de conservation étant intégrées sur chaque volume de contrôle Ω_i , et co-localisée, les variables étant calculées en leur centre. Cette méthode assure la conservation locale au sens des flux définis sur les faces des volumes de contrôle.

1.5 Traitement des conditions limites dans Mercure

1.5.1 Importance des conditions aux limites

Dans les études réalisées au moyen d'outils CFD portant sur la dispersion atmosphérique et précisément dans nos cas d'études, le domaine de calcul, orienté dans une direction x correspondant à l'axe principal du vent moyen, peut être compartimenté en trois parties distinctes (Hargreaves & Wright (2006)) : un sous-domaine en amont de la zone de rejet à la fin duquel les profils de vitesse et de quantités turbulentes doivent être en équilibre et représentatifs de l'état de rugosité de la surface rencontrée, le sous-domaine de rejet proprement dit qui peut inclure un ou plusieurs bâtiments, et enfin un dernier sous-domaine en aval dans le sillage des bâtiments, les profils dynamiques tendant progressivement vers un nouvel équilibre.

Un des problème soulevé par de nombreux auteurs, et encore d'actualité, est qu'il apparaît délicat de conserver les profils de turbulence et de vent moyen le long de l'axe x en appliquant des lois de parois rugueuses, ceci notamment avec des codes commerciaux de type *Fluent* ou *CFX*. En partant de profils pleinement en équilibre, décrits notamment dans Richards & Hoxey (1993), il a été observé un affaissement des niveaux de turbulence et de vitesse dans la CLS dans la direction du vent moyen (Blocken & Carmeliet (2004); Blocken *et al.* (2006); Riddle *et al.* (2004); Hargreaves & Wright (2006). Dans Walshe (2003)), il est suggéré qu'à cet affaissement est associé un pic d'énergie cinétique turbulente k dans les premiers niveaux verticaux, également mis en évidence par d'autres auteurs (Hargreaves & Wright (2006), Fig. 1.6). Ces derniers ont partiellement réussi à résoudre ce problème en modifiant les lois de paroi prédéfinies dans ces logiciels du commerce mais n'ont pu reproduire intégralement les profils amont, le pic dans les premières cellules, quoique moins prononcé, restant encore présent.

Une autre cause de l'affaissement des profils de quantités turbulentes se situe au niveau du type de conditions aux limites appliquées au sommet du domaine de calculs. En effet, une condition de type symétrie ne permet pas d'apporter le cisaillement nécessaire en haut de la couche simulée pour maintenir la turbulence. Ce déséquilibre au sommet de la couche entraîne alors l'affaissement global de la turbulence selon la verticale le long de l'axe x, comme mis en évidence par Hargreaves & Wright (2006). Seule une condition sur les tensions de Reynolds évite, selon Richards & Hoxey (1993), d'observer ce problème.

Nous introduisons dans cette section les méthodes utilisées pour décrire les profils en amont en fonction des informations dont on dispose sur l'écoulement, avant de décrire de manière assez détaillée comment sont mis en oeuvre les lois de paroi dans *Mercure* pour l'utilisation du modèle k- ε . Nous en donnons enfin un exemple d'application sur la simulation d'une couche homogène bidimensionnelle neutre qui a constitué une étude préliminaire au travail de thèse et permis de résoudre certains problèmes liés à l'utilisation des lois de couches limites rugueuses.



FIG. 1.6: Profils verticaux pour la vitesse moyenne \overline{u} et l'énergie cinétique turbulente k sur une hauteur adimensionnelle $z/z_{ref} = 50$ pour la modélisation d'une couche limite neutre homogène avec le modèle de CFD Fluent (in Hargreaves & Wright (2006)). RH représente les profils de Richards & Hoxey (1993).

1.5.2 Conditions aux limites en entrée pour le modèle k- ε

À partir de la théorie de similitude

Conditions aux limites pour la vitesse

Des profils logarithmiques de vent sont très couramment appliqués en entrée de domaine, en s'appuyant sur la théorie de similitude. Dans *Mercure*, nous appliquons la théorie de similitude locale qui permet notamment de décrire le vent dans toute la CLA en estimant la vitesse de frottement locale u_L (cf paragraphe 1.1.5) ainsi que la longueur de Monin-Obukhov L_{MO} . En utilisant les relations 1.1.50, le profil de vent dans un cas neutre ou stable s'écrit alors :

$$\overline{u}(z) = \frac{u_L(z)}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{z+z_0}{z_0}\right) + 5\frac{z+z_0}{L_{MO}} \right]$$
(1.5.1)

La vitesse de frottement locale u_L est exprimée à partir de la vitesse de frottement au sol u_* et de la hauteur de la couche limite H_{CL} :

$$u_L(z) = u_* \left(1 - \frac{z}{H_{CL}} \right) \tag{1.5.2}$$

Conditions aux limites pour k et ε selon Richards et Hoxey

En appliquant les équations de transport de k et ε (éq. (1.4.20) et (1.4.25)) à une couche stationnaire homogène bidimensionnelle et neutre, nous obtenons :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial z} \right) + P_k - \varepsilon = 0 \tag{1.5.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + C_{\varepsilon 1} P_k \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} = 0 \tag{1.5.4}$$

avec $P_k = \nu_t \left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial z}\right)^2$

En introduisant la viscosité turbulente du modèle k- ε , Richards et Hoxey (1993) ont suggéré que les équations ci-dessus étaient automatiquement satisfaites avec :

$$k = \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}} \tag{1.5.5}$$

$$\varepsilon = \frac{u_*^3}{\kappa \left(z + z_0\right)} \tag{1.5.6}$$

Les profils à l'équilibre de vitesse et de quantités turbulentes précédemment décrits peuvent alors être considérés comme des conditions en entrée satisfaisantes pour l'utilisation du modèle de turbulence $k - \varepsilon$. Ces lois de profils en amont, dans le cadre de l'utilisation du modèle $k - \varepsilon$, ont d'ailleurs été recommandées par le programme européen *COST action 14* (Franke *et al.* (2004)).

L'indétermination porte alors sur le choix de la constante C_{μ} , comme il l'a été mentionné dans la paragraphe 1.4.4. Dans nos simulations, cette méthode a été utilisée.

À partir d'une loi puissance

Une autre possibilité est d'imposer en amont un profil de vitesse en loi puissance, technique qui ne repose pas sur des fondements théoriques mais qui est également très répandue. Si U_{ref} est la vitesse de référence prise à l'altitude z_{ref} , la loi exponentielle s'écrit :

$$\overline{u}(z) = U_{ref} \left(\frac{z}{z_{ref}}\right)^p, \qquad (1.5.7)$$

où p est l'exposant de la loi qui est soit déterminé à partir des mesures si elles existent, ce qui est plus souvent le cas pour des études réalisées en soufflerie qu'en conditions réelles, soit déterminée à partir des connaissances que l'on a de la nature de la surface et de la rugosité dynamique associée ainsi que des conditions de stabilité. Sa valeur est inférieure ou égale à l'unité et elle augmente indépendamment pour une rugosité et des conditions de stabilité plus fortes. Pour des conditions proches de la neutralité, la valeur de p est estimée proche de 0.15.

Une des limites de l'utilisation d'une loi puissance réside dans la difficulté à en déduire des lois portant sur les quantités turbulentes k et ε . Certains auteurs (e.g. Baik *et al.* (2003)) font des hypothèses sur l'intensité I_{turb} turbulente caractérisant la couche limite et en déduisent alors k:

$$k(z) = I_{turb}\overline{u}(z)^2 \tag{1.5.8}$$

En écrivant l'égalité entre les taux de production et de dissipation, le taux de dissipation est alors donné par :

$$\varepsilon(z) = \frac{C_{\mu}^{3/4} k(z)^{3/2}}{\kappa z} \tag{1.5.9}$$

Une seconde méthode (e.g. Coirier *et al.* (2006)) consiste à utiliser une longueur de mélange $l_0(z)$ et à en déduire alors les variables turbulentes selon les relations classiques suivantes :

$$\nu_t = l_0^2 \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right| \tag{1.5.10}$$

$$\varepsilon = \nu_t \left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial z}\right)^2$$
 (1.5.11)

$$k = l_0 \sqrt{\frac{\varepsilon}{C_{\mu}} \left| \frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \right|}$$
(1.5.12)

La difficulté est ici de parvenir à une paramétrisation satisfaisante de la longueur de mélange en fonction de l'altitude.

1.5.3 Lois de parois rugueuses dans Mercure

Associées au modèle $k-\varepsilon$, Mercure utilise des lois de parois rugueuses adaptées qui permettent de définir des valeurs de vitesse, de grandeurs turbulentes (k, ε) et de scalaires au niveau du sol. Ces lois de paroi sont appliquées pour le premier niveau vertical. Nous décrivons ici l'ensemble de la démarche que nous avons adoptée et qui s'appuie sur celle utilisée dans Code_Saturne pour les parois lisses (Archambeau *et al.* (2003)).

<u>Notations</u>

La figure 1.5.3 fournit le cadre géométrique dans le cas simplifié d'un maillage orthogonal.

- \underline{n} : vecteur normé orthogonal à la paroi dirigé vers l'extérieur du domaine
- $\underline{\tau}$: vecteur normé porté par la projection de la vitesse en I (orthogonal à \underline{n})
- u_{τ} : composante tangentielle de la vitesse du fluide par rapport à la paroi
- $u_{\tau,M}$: valeur de u_{τ} en un point M (M = I, F, G)
- $L_{k-\varepsilon}$: échelle de longueur de la turbulence propre au modèle $k-\varepsilon$
- L_{theo} : échelle de longueur théorique maximale des tourbillons de la couche limite turbulente
- ρ_I : masse volumique en I

Détermination de la vitesse de frottement

La vitesse de frottement u^* est calculée à partir de la vitesse tangentielle au centre de la cellule de bord en utilisant la loi logarithmique, soit :

$$\frac{u_{\tau,I}}{u^*} = \frac{1}{\kappa} \ln\left(\frac{IF + z_0}{z_0}\right)$$
(1.5.13)

où z_0 est la rugosité dynamique définie dans le paragraphe précédent.

Détermination des conditions limites pour la vitesse

Deux conditions aux limites portant sur la vitesse sont calculées, la première permettant de calculer la contrainte tangentielle à la paroi pour atteindre le bon gradient de vitesse normal à la paroi (condition de type "flux"), l'autre permettant de calculer correctement le terme de production turbulente dans la première maille verticale (condition de type "gradient").



FIG. 1.7: Cellule de bord et cellule adjacente dans le cas d'un maillage orthogonal.

• Condition de type "flux"

Le but est de calculer le flux diffusif de quantité de mouvement au niveau de la face de paroi en fonction de la contrainte au sol σ_0 :

$$(\mu + \mu_{t,I}) \overline{grad} (\underline{u}) \underline{n} = -\sigma_0 \underline{\tau}$$
(1.5.14)

Or la contrainte tangentielle vaut : $\sigma_0 = \rho_I u_*^2$ En faisant intervenir la viscosité turbulente du modèle à longueur de mélange $\mu_t^{lm} = \rho_I L_{\text{theo}} u_*$, avec $L_{\text{theo}} = \kappa IF$, on obtient :

$$\sigma_0 = \frac{u_*}{(IF + z_0)} \underbrace{\rho_I \kappa \left(IF + z_0\right) u_*}_{\mu_t^{lm}}$$
(1.5.15)

Notons que dans le cas où le modèle $k - \varepsilon$ a tendance à surestimer la production d'énergie turbulente, l'échelle de longueur correspondante $L_{k-\varepsilon} = C_{\mu} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}$ peut devenir sensiblement plus grande que l'échelle théorique, et il en va ainsi de même pour les viscosités, induisant un déséquilibre entre l'échelle de viscosité imposée et les conditions extérieures de la turbulence calculée. Ainsi, il est préférable dans ce cas de n'imposer que la contribution du gradient de vitesse et de laisser la contribution de la viscosité égale à la valeur calculée par le modèle $k - \varepsilon$:

$$\sigma_0 = \frac{u_*}{(IF + z_0)} \max\left(\mu_t^{lm}, \mu_t\right)$$
(1.5.16)

Ceci conduit donc de manière conditionnelle à imposer soit le flux théorique, soit le flux basé sur la viscosité calculée et la dérivée normale théorique. La discrétisation du terme de gauche de l'équation (1.5.14) donne :

(

$$(\mu + \mu_{t,I}) \overline{grad} (\underline{u}) \underline{n} = \frac{(\mu + \mu_{t,I})}{IF} (u_F - u_{\tau,I})$$
(1.5.17)

L'égalisation des équations (1.5.17) et (1.5.16) conduit à la valeur de u_F que l'on nomme $u_{F,flux}$ suivante :

$$u_{F,flux} = u_{\tau,I} - \frac{u_*}{\kappa \left(\mu + \mu_{t,I}\right)} \frac{IF}{(IF + z_0)} max\left(\mu_t^{\ lm}, \mu_t\right)$$
(1.5.18)

• Condition de type "gradient"

L'objectif est de trouver une valeur en face de paroi de la vitesse qui permet d'en déduire un terme de production turbulente le plus proche possible de la valeur théorique qui, au point I, est :

$$P_{theo} = \rho_I {u_*}^2 \left[\frac{\partial u_\tau}{\partial \underline{n}} \right]_I = \rho_I \frac{{u_*}^3}{\kappa \left(IF + z_0 \right)}$$
(1.5.19)

Le terme de production calculé pour la cellule est

$$P_{calc} = \nu_{t,I} \left[\frac{\partial u_{\tau}}{\partial z} \right]_I^2 = \nu_{t,I} \left(\frac{u_{\tau,I} + u_{\tau,J} - 2u_{\tau,F}}{4d} \right)^2 \tag{1.5.20}$$

En évaluant $u_{\tau,J}$ à partir de $u_{\tau,I}$ et du gradient normal de u_{τ} calculé en G grâce à la loi logarithmique, on a

$$u_{\tau,J} = u_{\tau,I} + 2d \left[\frac{u_*}{\kappa} \left(\frac{1}{2d + z_0} \right) \right]$$
(1.5.21)

En substituant cette valeur dans l'équation (1.5.20) et en égalisant les deux termes de production, la valeur de u_F renommée $u_{F,grad}$ est :

$$u_{F,grad} = u_{\tau,I} - \frac{u_*}{\kappa} \left(2d \sqrt{\frac{\rho_I \kappa u_*}{\mu_{t,I} \left(IF + z_0 \right)}} - \frac{1}{2 + z_0/IF} \right)$$
(1.5.22)

En imposant enfin que le gradient reste au moins aussi raide que celui donné par la dérivée normale du profil logarithmique, on obtient :

$$u_{F,grad} = u_{\tau,I} - \frac{u_*}{\kappa} \left[max \left(1, 2d\sqrt{\frac{\rho_I \kappa u_*}{\mu_{t,I} \left(IF + z_0 \right)}} - \frac{1}{2 + \frac{z_0}{IF}} \right) \right]$$
(1.5.23)

Détermination des conditions limites pour k et ε

Il est classiquement imposé une condition de Dirichlet sur la face de bord pour k, calculée en fonction de la vitesse de frottement u_* :

$$k = \frac{{u_*}^2}{\sqrt{C_\mu}}$$
(1.5.24)

Pour ε , une condition de Neumann est imposée à partir du profil théorique d'évolution de ε :

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{{u_*}^3}{\kappa \left(z + z_0\right)} \right] \tag{1.5.25}$$

Un développement limité au second ordre est appliqué en utilisant le centre du segment [IF] pour aboutir à la valeur suivante de ε_F au bord, en fonction de la valeur en I :

$$\varepsilon_F = \varepsilon_I + d \frac{{u_*}^3}{\kappa \left(d/2 + z_0\right)^2} \tag{1.5.26}$$

1.5.4 Simulation d'une couche limite neutre homogène

Nous reprenons ici intégralement le cas-test soumis par Richards *et al.* (2002) qui consiste en la simulation d'une couche limite neutre homogène bidimensionnelle. Une valeur de vent de 10 $m.s^{-1}$ à une référence donnée de 6 m ainsi qu'une rugosité de 0.01 m sont appliquées. Le domaine de calcul est quand à lui identique à celui utilisé pour ce même cas-test par Hargreaves & Wright (2006), nous permettant de nous comparer à leurs résultats. Il est pris suffisamment long pour permettre d'atteindre un écoulement pleinement développé. Le maillage dans la verticale est progressivement relâché et présente une première maille au niveau du sol de 1 m.

Les valeurs usuelles des constantes de modèle $k - \varepsilon$ ont été conservées. Deux types de conditions limites ont été appliqués sur la limite supérieure du domaine : une condition de conservation du flux turbulent d'une part et une condition de symétrie d'autre part. Les profils en entrée de domaine ont été calculés conformément à l'approche de Richards et Hoxey.



FIG. 1.8 : Tracé de la vitesse moyenne \overline{u} , de l'énergie cinétique turbulente k, du taux de dissipation ε et de la viscosité turbulente ν_t jusqu'à une hauteur adimensionnée de 50 z_{ref} en fonction de la position x dans le domaine, pour une condition de type symétrie sur le plan supérieur du domaine. RH représente les profils de Richards & Hoxey (1993).

Dans un premier temps sont présentés les résultats correspondant à l'application d'une condition de symétrie sur le plan supérieur du domaine. Les profils de vitesse moyenne \overline{u} , d'énergie cinétique turbulente k, du taux de dissipation ε et de viscosité turbulente sont représentés sur la verticale complète (Fig. 1.8) puis en se réduisant aux 30 premiers mètres au-dessus du sol (Fig. 1.9). Sur la figure 1.8 est observé un pic de turbulence au niveau du sol ainsi qu'un affaissement sensible du profil de turbulence dans le domaine, induisant une modification perceptible du profil de vent. La figure 1.9 montre que la turbulence est surestimée dans la basse-couche, dès la première cellule, avec un pic observé au deuxième niveau (1.5 contre 1.3 m^2s^{-2} selon Richards et Hoxey).



FIG. 1.9 : Idem Fig. 1.8 sur une hauteur de 5 z_{ref}

L'application de la condition sur la continuité du flux turbulent au sommet de la couche donne de biens meilleurs résultats. En effet, nous observons que les profils sont en équilibre dès 500 m et maintenus jusqu'en fin de domaine (Fig. 1.10). Les profils de vitesse et de taux de dissipation sont parfaitement conservés. En revanche, la partie basse de la couche simulée présente une turbulence surestimée, avec un pic toujours observé au niveau du sol. Le niveau de turbulence imposé en entrée est retrouvé pour une altitude de 0.25H où H est la hauteur de domaine. En se focalisant sur la basse-couche (Fig. 1.11), le pic de turbulence apparaît encore au niveau de la seconde cellule, un peu moins élevé que celui observé figure 1.9. La valeur au centre de la première cellule I est quant à elle très proche de la valeur imposée en entrée. La figure 1.12 montre que l'équilibre est très rapidement atteint et que les grandeurs u_* et k_{sol} calculées sur les faces de bord sont très proches des valeurs données par la théorie. La valeur de k_{sol} est cependant légèrement plus élevée, ce qui est en accord avec la valeur de k également un peu plus élevée en I. La valeur de la vitesse en I est aussi en concordance avec celle donnée par le profil logarithmique, une légère sous-estimation étant observable.

Les résultats obtenus avec Mercure_Saturne confirment dès lors certains résultats des travaux de Hargreaves et Wright ainsi que les observations mentionnées en introduction. D'une part, il apparaît clairement que l'utilisation d'une condition de symétrie en haut de domaine s'avère inadéquate. La turbulence n'est pas entretenue en haut de domaine et s'effondre le long de l'axe de l'écoulement, cet effondrement gagnant les parties inférieures du domaine jusqu'à influer sur l'équilibre de basse-couche.

D'autre part est mis en évidence un pic de turbulence sur le deuxième niveau vertical. Celui-ci apparaît dans les deux séries de simulation de Hargreaves et Wright, leur version corrigée des lois de couche limite fournissant même un pic de turbulence plus élevé, supérieur à 2 $m^2 s^{-2}$. Les profils de vitesse et de taux de dissipation ne sont pas également en adéquation parfaite avec les



FIG. 1.10 : Idem Fig. 1.8 en imposant la continuité du flux turbulent sur le plan supérieur du domaine



FIG. 1.11 : Idem Fig. 1.10 sur une hauteur de 5 z_{ref}



FIG. 1.12 : Évolution le long du domaine de la vitesse de frottement au sol u_* , de l'énergie cinétique turbulente au sol k_{sol} ainsi que de la vitesse tangentielle u_{τ} au centre de la première cellule dans la verticale.

profils théoriques, contrairement aux résultats de Mercure_Saturne.

L'approche adoptée pour ré-récrire les conditions aux limites d'après Richards et Hoxey (1993) est globalement identique à celle de Mercure_Saturne et nous n'en reprenons pas ici l'explicitation. Cependant, trois différences apparaissent :

- un seul type de condition à la limite pour la vitesse est utilisé en imposant intégralement la contrainte $\sigma_0 = \rho u_*^2$.
- la production d'énergie cinétique turbulente ne fait pas intervenir le gradient de vitesse théorique évalué en I mais plus simplement la différence $\Delta \overline{u} = \overline{u}_{\tau,G} \overline{u}(0) = \overline{u}(2d)$, soit :

$$P_{k} = \sigma_{0} u_{\tau,G} = \rho \frac{{u_{*}}^{3}}{\kappa} \ln\left(\frac{2d+z_{0}}{z_{0}}\right)$$
(1.5.27)

• le taux de dissipation et l'énergie cinétique turbulente sont imposées non sur les faces de bord mais au centre de la cellule I en appliquant les lois d'évolution classiques décrites par :

$$k_I = \frac{{u_*}^2}{\sqrt{C_\mu}} \tag{1.5.28}$$

$$\varepsilon_I = \frac{{u_*}^3}{\kappa \left(d + z_0\right)} \tag{1.5.29}$$

Ainsi, au regard des résultats issus des travaux de Hargreaves et Wright et des auteurs qui ont repris ce cas-test, Mercure_Saturne présente de bons résultats et permet de maintenir les profils théoriques plus loin dans l'écoulement, ce qui est primordial dans la perspective d'études plus complexes. Le niveau de turbulence légèrement plus élevé au sol observé ne semble pas être à même de présenter une source d'erreur importante quant aux études ultérieures. L'origine de cette surestimation reste cependant une question en suspens. Une confrontation à d'autres modèles CFD académiques et éprouvés sur ce même cas-test dans le cadre d'application du modèle $k - \varepsilon$ pourrait se révéler intéressante à cet égard, mais peu d'auteurs relatent ce cas d'étude, a priori simple.

Chapitre 2

Étude comparative de la dispersion atmosphérique sur terrain plat : l'expérience de Prairie Grass

2.1 Objectifs de l'étude

Des modèles de plus en plus élaborés ont vu le jour depuis le milieu du vingtième siècle pour prédire la qualité de l'air aux différentes échelles. Cependant, le développement de ces modèles n'est pas décorrélé des expérimentations réalisées en amont ou en appui de ceux-ci, bien au contraire. Nous pouvons résumer l'importance des expérimentations vis à vis du développement des modèles en trois points : la compréhension des phénomènes physiques, les paramétrisations internes aux modèles ainsi que la validation de ces derniers.

Concernant le premier point, nous pouvons affirmer sans conteste que tous les modèles ont recours d'une manière plus ou moins directe à des paramétrisations physiques issues de l'analyse des expériences. Dans le domaine des écoulements atmosphériques et de la dispersion de polluants, ces expériences peuvent se dérouler *in situ* ou en laboratoire, au moyen de mesures réalisées en veine hydraulique ou en soufflerie. Les mesures *in situ* ont notamment permis de donner une paramétrisation adaptée des lois de similitude (ou de Monin-Obukhov) introduites dans la soussection 1.1.37 ou des paramètres de dispersion σ_y et σ_z inhérents à l'application des formules gaussiennes (section 1.3), ceci à travers de nombreuses expériences telles que Prairie Grass (Barad (1958)) ou Project Green Glow (1964), traitant toutes deux de la dispersion sur terrain plat de rejets surfaciques, celles conduites par le British Meteorological Office (1958) ou le Brookhaven National Laboratory, l'expérience Tennessee Valley Authority traitant d'un rejet surélevé, ou enfin celles réalisées en milieu urbain (série d'expériences menées aux États-Unis dans les années 1970 à Saint-Louis, Fort Wayne, New-York City, etc.). Aujourd'hui encore, des expériences sont conduites, surtout en milieu urbain, pour parvenir à définir des paramétrisations dynamiques et thermiques de la canopée utilisées dans des modèles complexes résolvant de manière implicite, semi-explicite ou explicite l'écoulement et/ou la dispersion en zone urbaine.

Par ailleurs, les bases de données issues d'expériences antérieures offrent la possibilité de tester puis de valider un modèle. Cette étape est une condition *sine qua non* à l'utilisation ultérieure du modèle dans un cadre applicatif. Ainsi, des jeu de données même anciens sont encore systématiquement utilisés dans ce but, notamment en vue de comparer les modèles entre eux pour des configurations bien précises retrouvées dans la réalité ou s'en approchant à l'image des campagnes de mesures *Indianapolis* (Perkins *et al.* (2002)), de *Lillesrom*, près de Oslo (Gryning (1999)) ou encore des plus anciennes *Green Glow* (Lee & Irwin (1997), Irwin (1983)) ou *Prairie Grass*. Afin d'évaluer les performances de modèles complexes utilisés en milieu bâti, de nouvelles campagnes expérimentales sont également conduites dans ce but, à la fois *in situ* (URBAN 2000, Allwine *et al.* (2002), URBAN 2003, Allwine *et al.* (2002), Kit Fox, Hanna & Chang (2001), MUST, Yee & Biltoft (2004), NANTES'00, Vachon (2001)) ou en laboratoire (Schatzmann *et al.* (1997), MacDonald & Ejim (2006)). Certaines de ces expériences ont été regroupées dans des bases de données utiles à la validation et à l'inter-comparaison de modèles. Différentes initiatives sont apparues dernièrement, nous pouvons citer entre autres la démarche de l'USEPA à travers l'élaboration du Standard Guide for Statistical Evaluation of Atmospheric Dispersion Models, Irwin *et al.* (2003), définissant la norme ASTM (*American Society for Testing and Materials*) D6589, celle de HARMO avec le "Model Validation Kit" (<u>http://www.harmo.org/kit/default.asp</u>) ou encore l'action COST (*European Cooperation in the field of Scientific and Technical Research*) dans le domaine de la dispersion atmosphérique.

C'est dans ce cadre que nous proposons dans ce chapitre une évaluation du modèle Mercure en regard de deux formulations gaussiennes, l'une très classique et très répandue étant la formulation de Briggs (1973), l'autre, propre aux autorités françaises de sûreté nucléaire, étant la formulation de Doury (1976). L'expérience choisie est la campagne Prairie Grass (1958), précédemment évoquée, qui étudie la dispersion d'un traceur passif émis près du sol sur un terrain plat, pour un faible temps de rejet. Cette campagne de mesures fait partie de la base de données définie dans l'ASTM D6589 et décrite dans (Irwin et al. (2003)). Notre démarche peut paraître surprenante car, comme il a été mentionné dans le chapitre introductif, les modèles de type CFD ont surtout pour vocation de résoudre les problèmes liés à la modélisation de la dispersion en zone complexe, notamment autour de bâtiments. Cependant, dans les études habituellement menées par le groupe Météorologie Appliquée et Environnement Atmosphérique d'EDF R&D, l'objectif est non seulement de connaître le champ de concentration dans la zone de proximité immédiate des bâtiments du site mais également de suivre le parcours et l'évolution du panache pour une zone en aval s'étendant sur plusieurs centaines de mètre à quelques kilomètres. Ainsi, il s'avère important d'évaluer les performances du modèle Mercure utilisé avec une approche RANS et de définir, le cas échéant, les limites d'utilisation d'un tel modèle. La comparaison sera effectuée pour des conditions météorologiques proches de la neutralité, ceci se justifiant au regard des études développées dans les chapitres 3, 4 et 5 pour lesquelles des conditions quasi-neutres sont également considérées. Ces travaux ont fait l'objet d'un article à paraître dans Journal of Applied Meteorology (Demaël & Carissimo (2007)).

Au cours de ce chapitre, nous décrirons dans un premier temps la campagne de mesures *Prairie Grass* : ses caractéristiques et ses objectifs, l'importance qu'elle a eu dans la formulation des écarts-types de Pasquill (1961) puis Pasquill-Gifford, ainsi que le rôle qu'elle a tenu à la fois dans les différentes paramétrisations de la couche limite appliquées à la problématique de la dispersion atmosphérique et dans les validations de modèles. Ensuite, nous présenterons les deux formulations gaussiennes utilisées dans cette évaluation comparative puis les indices statistiques permettant d'évaluer les performances des modèles. Après avoir introduit l'ensemble des cas simulés et les conditions de simulation propres à *Mercure*, nous présenterons les résultats comparatifs et discuterons des performances de chacun d'entre eux.

2.2 La campagne de mesures *Prairie Grass*

2.2.1 Description et objectifs de la campagne

Durant l'été 1956, la Direction de Recherche Géophysique du Centre de Recherche de Cambridge pour la force aérienne finança et dirigea un programme d'expérimentation en micrométéorologie. L'objectif initial du programme était de déterminer le taux de diffusion d'un gaz émis continuement en un point en fonction des conditions météorologiques. La campagne expérimentale fut menée sur un champ d'herbe rase plat près de la ville d'O'Neill, dans le nord du Nébraska
(USA). Le nom donné à la campagne fut Project Prairie Grass.

Le traceur utilisé fut du SO_2 . Le rejet fut effectué à une hauteur de 0.46 m pendant dix minutes. La campagne se déroula sur une période estivale de deux mois au cours de laquelle toutes les conditions de stabilité atmosphérique furent répertoriées. L'équipement expérimental fut pourvu de capteurs répartis sur des arcs semi-circulaires centrés sur le rejet et situés à 50 m, 100 m, 200 m, 400 m et 800 m du rejet et à une hauteur de 1.5 m au-dessus du sol. Une carte topographique du site ainsi que la représentation des différents arcs de mesure est fournie Figure 2.1.

Pour chaque rejet est connu le débit d'émission Q, la valeur du vent à 2 m au-dessus du sol mesurée au niveau du rejet ainsi que le vent mesuré à 0.5 m, 2 m et 8 m au niveau d'un mât météorologique situé en aval du dernier arc de mesure.

Le principal rapport final regroupant tous les résultats de la campagne est celui de Barad (1958), complété par les travaux de Haugen (1958) puis Barad & Haugen (1959).



FIG. 2.1 : Plan de l'expérience Prairie Grass (in Barad & Haugen (1959))

2.2.2 Les paramétrisations de Pasquill et Pasquill-Gifford

La première exploitation des données de la campagne Prairie Grass fut à l'initiative de Pasquill qui en dériva, avec les données supplémentaires d'expériences de diffusion menées par le British Meteorological Office, une des premières paramétrisations des écarts-types de la dispersion, qui restera longtemps une des plus employées. Il s'agit surtout de la forme la plus aboutie pour l'époque, notamment en raison de la formulation d'une dépendance des paramètres de dispersion par rapport à la distance au rejet. Ses premiers travaux furent publiés en 1961 (Pasquill (1961)) après avoir été partiellement décrits dans un rapport du British Meteorological Office en 1958. Les deux paramètres introduits originellement par Pasquill furent l'expansion angulaire latérale du panache θ_p et la hauteur d'expansion verticale z_p qui furent décrits non seulement en fonction de la distance à la source mais aussi des conditions de stratification thermique, à travers la définition de classes de stabilité. Celles-ci, désignées comme les classes de Pasquill, sont au nombre de six et notées de A à F, en partant des conditions les plus instables vers celles les plus stables. Elles sont définies à partir de paramètres simples qui sont le vent à 10 m, la nébulosité, et l'intensité de l'ensoleillement (Tableau 2.1).

Gifford convertit en 1961 les paramètres θ_p et z_p en paramètres de dispersion σ_y et σ_z , plus familiers, utilisant les relations suivantes :

 σ

$$x_y = \frac{x \tan(\theta/2)}{2.15}$$
 (2.2.1)

$$\sigma_z = \frac{z_p}{2.15} \tag{2.2.2}$$

	Classes de stabilité en journée			Classes de st	abilité de nuit	
	Radiat	ion solaire in	$\operatorname{cidente}$	Nébulosité		
Vent à 10 m $(m.s^{-1})$	forte	$mod \acute{e}r\acute{e}e$	faible	$\geq 4/8$	≤ 3.8	
U < 2	А	A-B	В	-	-	
$2 \le U < 3$	A-B	В	С	Е	F	
$3 \le U < 5$	В	B-C	С	D	Е	
$5 \le U < 6$	С	C-D	D	D	D	
$6 \le U$	С	D	D	D	D	

TAB. 2.1: Conditions météorologiques définissant les classes de stabilité de Pasquill, in Arya (1999).

Les diagrammes log-log représentant les écarts-types σ_y et σ_z en fonction de la distance à la source sont appelées les courbes de dispersion de Pasquill-Gifford (P-G dispersion curves) et sont représentés Figure 2.2.

Les limitations de ces formulations furent mises en lumière par leurs propres auteurs (Pasquill (1976)) ou d'autres (Venkatram (1996), Turner (1997)). Elles sont notamment inhérentes à la qualité originale des données mais aussi à l'élaboration des classes de stabilité et leur utilisation pratique (il y a par exemple discontinuité lors du passage d'une classe à la suivante). Par ailleurs, une limite essentielle tient à la nature du terrain pour lequel les formulations sont applicables

(terrain relativement plat, rugosité comprise entre 0.03 et 0.3 m) et à la durée du rejet comprise entre 3 et 10 minutes.



FIG. 2.2 : Évolution des écarts-types de Pasquill-Turner σ_y et σ_z avec la distance en aval de la source pour les différentes classes de stabilité, d'après Perkins et al. (2005b).

2.2.3 L'importance de *Prairie Grass* dans la paramétrisation et la validation de modèles

Depuis les premiers rapports présentant l'ensemble de la base de données jusqu'à maintenant, le projet *Prairie Grass* a véritablement constitué un passage nécessaire pour nombres d'auteurs en quête de définir de nouvelles formulations des écarts-types de la dispersion σ_y et σ_z propres à la formulation gaussienne ou des coefficients de diffusivité associés K_y et K_z pour les modèles tridimensionnels à diffusivité turbulente (*K gradient transport models*). Il a parallèlement été et reste un jeu de données très couramment usité dans le cadre de l'évaluation de modèles de tous types. Nous effectuons dans cette sous-section une revue des travaux réalisés intégralement ou partiellement à l'aide de cette campagne expérimentale.

Dans une des premières exploitations de la campagne de mesures, Barad & Haugen (1959) revisitent et évaluent la formulation gaussienne de Sutton (1947) en se fondant exclusivement sur cette expérience. Plus tard, Briggs (1973) emploie partiellement les résultats de la campagne pour en déduire de nouvelles formulations offrant à l'époque une alternative aux formulations de Pasquill-Gifford, nous y reviendrons dans le paragraphe 2.3.1. À la fin des années 1970, les auteurs se sont penchés sur l'application des lois de similitude à la dispersion atmosphérique et sur l'expression d'une concentration intégrée dans la direction transverse $C_y = \int_{-\infty}^{+\infty} C(x, y) dy$, nommée couramment cross-wind integrated concentration et évaluée par les auteurs en fonction de la distance à la source et des conditions de stabilité. Notamment, Horst (1979) utilise les mesures dans le cadre de la paramétrisation d'un modèle lagrangien fondé sur la théorie de similitude et Nieuwstadt (1980) revient en particulier sur les cas convectifs en se comparant aux formulations données par Deardoff (1972)), elles-mêmes issues d'expériences menées en laboratoire. La connaissance de cette concentration intégrée transversalement permet d'accéder au champ de concentrations surfaciques $C_s(x, y)$ à travers la relation suivante :

$$C_s(x,y) = C_y(x) F(x,y), \qquad (2.2.3)$$

où la fonction F est gaussienne :

$$F(x,y) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma_y} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)$$
(2.2.4)

Nous pouvons par ailleurs citer les travaux de Ulden (1978), Wilson (1982), Briggs (1982) et Briggs (1985) qui tous proposent des formulations ou paramétrisations différentes des relations de similitude appliquées à la dispersion et notamment à l'évaluation des concentrations au sol. Enfin, parmi les travaux récents s'étant également appuyé sur le projet *Prairie Grass*, nous pouvons citer ceux de Britter *et al.* (2003) qui ont ré-estimé la vitesse d'entraînement $W_e = \frac{d\sigma_z}{dt}$ d'un traceur passif dans la direction verticale en fonction de la vitesse de frottement u_* et d'un coefficient de proportionnalité $\beta : W_e = \beta u_*$, avec $\beta \approx 0.65$, ou encore ceux de Venkatram & Du (1997) qui proposent encore de nouvelles paramétrisations adaptées aux rejets surfaciques.

Par ailleurs, la richesse du jeu de données a été à l'origine de travaux portant uniquement sur les relations de Monin-Obukhov et la paramétrisation des conditions météorologiques intiales, primordiales en vue de la bonne estimation des paramètres de la dispersion (Venkatram (1980), Ulden & Holtslag (1985))

Le projet Prairie Grass a également contribué au développement et à la paramétrisation de modèles numériques résolvant l'équation d'advection-diffusion à travers l'ajustement des coefficients de diffusivité verticaux et horizontaux K_y et K_z . Très tôt, Yamamoto & Shimanuki (1964) l'ont utilisé conjointement avec l'expérience Green Glow pour évaluer la valeur de la constante α employée dans l'expression de la diffusivité latérale en fonction du paramètre de stabilité "surfacique" $\xi_0 = z_0/L_{MO}$:

$$\frac{K_y}{\kappa z_0 u_*} = \alpha\left(\xi_0\right)\xi\tag{2.2.5}$$

Les mesures ont continué à être utilisées dans le cadre de la paramétrisation de modèles et de leur développement bien plus tardivement. Par exemple, Brown *et al.* (1993) les emploie pour évaluer la diffusivité verticale dans un modèle à diffusivité turbulente utilisant des lois puissances pour la vitesse moyenne et la diffusivité verticale.

Enfin, dans le cadre de la validation et de l'évaluation des performances des modèles, les données du projet *Prairie Grass* ont d'abord été employées pour comparer les différentes formulations des écarts-types ou des fonctions de similitude mises en oeuvre par les auteurs précédemment cités. Jaffe (1967) se fonde entre autres sur *Prairie Grass* pour valider son modèle à diffusivité turbulence tridimensionnel dans les cas instables, Irwin (1983) utilise entre autres *Prairie Grass* parmi onze expériences pour comparer cinq formulations dont celle de Pasquill-Gifford et enfin Weil (1985) fait une revue des différents modèles existant à cette époque en les comparant également sur les mesures de cette expérience. Par ailleurs, Wilson (1981) l'utilise pour tester un modèle à particules développé dans le cas d'une turbulence inhomogène puis dans le cadre de la validation d'un modèle semi-analytique très simple (Wilson (1982)).

Cette campagne de mesures figure encore aujourd'hui en bonne place parmi les plus usitées pour des validations de modèles simples ou complexes. Parmi les modèles dits "simples", Gavrilov & Klepikova (1995) valident récemment un modèle basé sur une fermeture non linéaire et Tirabassi & Rizza (1995) évalue les performances d'un modèle à bouffées évolué, puis Venkatram & Du (1997) en font de même sur de récentes paramétrisations d'un modèle à diffusivité turbulente. Enfin, Gryning (1999) s'en sert pour valider les formulations d'un modèle numérique précédemment développé pour les cas légèrement stables. Dans la gamme des plateformes de calcul dispersif récemment développées et couramment appliquées, Cimorelli *et al.* (2005) et Lee & Irwin (1997) évaluent les performances du modèle AERMOD, tout comme le rapport du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique dans le cadre du projet de recherche coopératif R.E.C.O.R.D (Perkins *et al.* (2005b,a)) qui le compare à d'autres outils de dispersion actuels tels que *ADMS*, *ARIA IMPACT* et le modèle à bouffées *TRAMES*.

Enfin, parmi les modèles plus "complexes", nous pouvons citer les travaux de validation réalisés par Dosio *et al.* (2000) sur un modèle LES, les études comparatives menées par Hanna *et al.* (2004) avec le modèle RANS *FLACS 3D* ainsi que celles réalisées par Tang *et al.* (2005) et Coirier (2004) avec deux autres modèles RANS -nous reviendrons sur ces études par la suiteou encore la démarche de validation basée partiellement sur *Prairie Grass* adoptée par Du & Venkatram (1998) pour un modèle lagrangien.

2.3 Description des formulations gaussiennes utilisés dans l'étude

Nous décrivons dans cette section les deux formulations gaussiennes qui sont adoptées dans cette étude et dont les performances sont évaluées vis à vis de celles du modèle RANS *Mercure*. La première formulation est celle de Briggs (1973), la seconde est due à Doury (1976).

2.3.1 La formulation de Briggs

Briggs entreprit le travail au début des années 1970 de regrouper et de synthétiser les différentes formulations ayant vu le jour depuis dix ans. Notamment, il basa son travail sur trois paramétrisations : celle de Pasquill-Gifford (P-G, 1961) précédemment introduite, celle du *Brookhaven National Laboratory* (BNL, 1968) et celle du *Tennessee Valley Authority* (TVA, 1971). Ses travaux aboutirent à de nouvelles formulations en terrain quasi plat et dégagé, en gardant en champ proche (de la source jusqu'à quelques kilomètres en aval) la formulation P-G, alors que pour de plus grandes distances les formulations sont issues d'une combinaison entre les formulations BNL et TVA. Ainsi, la paramétrisation P-G étant à moitié fondée sur la campagne *Prairie Grass*, la formulation de Briggs est donc également supposée reproduire de manière très proche les mesures de cette expérience.

Briggs proposa par ailleurs d'autres formules d'interpolation afin de parvenir à une paramétrisation des écarts-types de la dispersion mieux adaptée aux écoulements en zones urbaines. Les expériences qui sont à l'origine de ces nouvelles formulations sont celles de McElroy et Pooler's (1968) et de Saint-Louis (Draxler (1984)).

Les formulations de Briggs (1973) (Tableau 2.2) sont valables jusqu'une distance de 10 km. Elles furent par la suite étendues sur une longueur de 20 ou 30 km par Gifford. Les écartstypes σ_y sont conformes à la théorie statistique de la dispersion, nous y reviendrons dans la section suivante, alors que pour σ_z , les différences dans l'exposant intègrent la prise en compte des effets de flottabilité dans la dispersion verticale pour les conditions modérément instables ou plus fortement convectives et leur suppression dans les cas stables.

2.3.2 La formulation de Doury

Les formulations des écarts-types proposées par Doury et explicitées dans les rapports Doury (1976) et Doury (1983) répondirent à l'époque au besoin des autorités de sûreté françaises en matière d'énergie nucléaire civile (CEA, IPSN) de caractériser un panache de radionucléides. C'est un modèle qui resta longtemps une référence pour les organismes de sûreté et fut largement appliqué, ce qui justifie dans le cadre de cette étude son utilisation. Ces formulations ont été

classe de Pasquill	$\sigma_y(m)$	$\sigma_z(m)$
Dispersion en milieu rural		
А	$0,22x \left(1+0,0001x\right)^{-0,5}$	0,20x
В	$0,16x \left(1+0,0001x\right)^{-0.5}$	0,12x
С	$0,11x (1+0,0001x)^{-0,5}$	$0,08x (1+0,0002x)^{-0,5}$
D	$0,08x \left(1+0,0001x\right)^{-0.5}$	$0,06x (1+0,0015x)^{-0,5}$
Ε	$0,06x \left(1+0,0001x\right)^{-0.5}$	$0,03x \left(1+0,0003x\right)^{-1}$
F	$0,04x \left(1+0,0001x\right)^{-0,5}$	$0,016x \left(1+0,0003x\right)^{-1}$
Dispersion en milieu urbain		
A-B	$0,32x \left(1+0,0004x\right)^{-0,5}$	$0,24x \left(1+0,001x\right)^{-0.5}$
С	$0,22x \left(1+0,0004x\right)^{-0,5}$	0,20x
D	$0,16x \left(1+0,0004x\right)^{-0.5}$	$0,14x \left(1+0,0003x\right)^{-0,5}$
E-F	$0,11x (1+0,0004x)^{-0.5}$	$0,08x (1+0,0015x)^{-0,5}$

TAB. 2.2 : Formulations de Briggs des écarts-types de la dispersion adaptées aux milieux rural et urbain.

estimées après analyse d'un panel éclectique de rejets expérimentaux atmosphériques effectués par la communauté internationale durant la période 1950-1975 dont la liste résumée est la suivante :

- plusieurs expériences de rejet d'un traceur suivi jusqu'à une distance d'un kilomètre (traceur beryllium, traceur SF6, panaches d'Ar41, bouffées de fumées, particules fluorescentes, nuages de radionucléides, lachers de ballons)
- traçage de particules fluorescentes pour une distance comprise entre un et deux kilomètres
- suivi de nuages de radionucléides jusqu'une distance de 10 km, lâchers de ballons

Ces formulations définissent deux classes distinctes en fonction de l'intensité de la diffusion verticale. Aussi, pour un gradient vertical de température inférieur à -5 ° $C.km^{-1}$, la diffusion est elle qualifiée de normale alors qu'elle est considérée comme faible pour une valeur de gradient supérieure. Les écarts-types sont définis de la manière suivante :

$$\sigma_u = (K_h t)^{\alpha_h} \; ; \; \sigma_z = (K_z t)^{\alpha_z} , \qquad (2.3.1)$$

où K_h et K_z sont respectivement les coefficients de diffusivité turbulente latéral et vertical.

Les valeurs des constantes sont répertoriées dans les Tableaux 2.3 et 2.4 et définies à partir du temps de trajet depuis la source.

Temps de transport (s)	$K_h \ (m^2.s^{-1})$	$K_z \ (m^2.s^{-1})$	$lpha_h$	α_z
0 à 240	0.405	0.42	0.859	0.814
240 à 3280	0.135	1	1.13	0.685
3280 à 97000	0.135	20	1.13	0.5
97000 à 508000	0.463	20	1	0.5
508000 à 1300000	6.5	20	0.824	0.5
au-delà de 1300000	200000	20	0.5	0.5

TAB. 2.3: Paramétrisation de Doury en diffusion normale $(\frac{dT}{dz} \leq -0.5 \, C.(100m)^{-1})$.

2.4 Comparaison théorique des modèles eulériens à diffusivité turbulente et des modèles à panache gaussien

Avant d'aborder la comparaison pratique des différents modèles, nous proposons préalablement une analyse portant sur les différences théoriques existant entre les modèles à diffusivité turbulente et les modèles à panache gaussien. En d'autres termes, nous revenons sur le fait reconnu que les modèles eulériens utilisant une fermeture au premier ordre du flux turbulent $\overline{c'_i u'_i}$ sous l'hypothèse de Boussinesq ne peuvent totalement prendre en compte le régime dispersif

Temps de transport (s)	$K_h \ (m^2.s^{-1})$	$K_z \ (m^2.s^{-1})$	$lpha_h$	α_z
0 à 240	0.405	0.20	0.859	0.5
240 à 97000	0.135	0.20	1.13	0.5
97000 à 508000	0.463	0.20	1.0	0.5
508000 à 1300000	6.5	0.20	0.824	0.5
au-delà de 1300000	200000	0.20	0.5	0.5

TAB. 2.4 : Paramétrisation de Doury en diffusion faible $(\frac{dT}{dz} > -0.5 \ C.(100m)^{-1})$.

plus rapide qui s'observe près de la source. Cette discussion s'inspire en grande partie de Hanna (1982) et Arya (1999).

Un point de départ de cette discussion est un retour sur la théorie statistique de Taylor (1921) de la dispersion turbulente. Cette théorie trouve son origine dans une description lagrangienne des particules fluides et s'applique à une source continue pour une turbulence homogène et isotrope.

Considérons ainsi une particule de vitesse turbulente V'(t) et d'ordonnée Y(t) dans un repère cartésien, au sein d'un écoulement présentant une turbulence stationnaire et homogène. La relation entre trajectoire et vitesse instantannée est :

$$V'(t) = \frac{\mathrm{d}Y(t)}{\mathrm{d}t},\tag{2.4.1}$$

soit, après intégration :

$$Y(t) = \int_0^t V'(t')dt'$$
 (2.4.2)

En utilisant les propriétés de la moyenne de Reynolds, la dérivée temporelle de la variance de Y peut s'écrire (Arya (1999)) :

$$\frac{\mathrm{d}\overline{Y^2}}{\mathrm{d}t} = 2\overline{Y(t)}\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}t} = 2\overline{\left[\int_0^t V'(t')dt'\right]V'(t)} = 2\int_0^t \overline{V'(t)V'(t')dt'}$$
(2.4.3)

$$R_L(\Delta t) = \frac{\overline{u'(t)u'(t+\Delta t)}}{\sigma_u^2}$$
(2.4.4)

L'introduction de la fonction d'autocorrélation lagrangienne $R_L(\Delta t) = \frac{\overline{u'(t)u'(t+\Delta t)}}{\sigma_u^2}$ permet de remplacer le terme $\overline{V'(t)V'(t')dt'}$ par le produit de la variance de la vitesse $\overline{v'^2}$ et de $R_L(\tau)$ avec $\tau = t' - t$, ce qui donne :

$$\frac{\partial \overline{Y^2}}{\partial t} = 2\overline{v'^2} \int_0^t R_L(\tau) d\tau \qquad (2.4.5)$$

L'intégration de l'équation (2.4.5) aboutit à la formulation du théorème de Taylor :

$$\overline{Y^2} = 2\overline{v'^2} \int_0^t \int_0^{t'} R_L(\tau) d\tau dt'$$
(2.4.6)

Si T_i est l'échelle de temps intégrale de la turbulence, les conséquences du théorème de Taylor sont les suivantes :

• si $t \ll T_i$, $R_L(t)$ est proche de l'unité, et l'on a :

$$\overline{Y^2} = \sigma_y^2 \approx \overline{v'^2} t^2 \tag{2.4.7}$$

• si les temps de diffusion sont suffisamment longs, l'intégrale vaut T_i , échelle de temps intégrale lagrangienne, et l'on a :

$$\overline{Y^2} = \sigma_y^2 \approx \overline{v'^2} T_i t \tag{2.4.8}$$

Ce théorème, qui associe l'expansion spatiale du panache σ_y aux écarts-type de vitesse, met ainsi en évidence deux régimes distincts pour les faibles et longs temps de trajet avec $\sigma_y \propto t$ quand $t \to 0$ et $\sigma_y \propto t^{1/2}$ quand $t \to \infty$ (Figure 2.3). D'une manière générale, nous pouvons nous apercevoir que le taux de diffusion du panache diminue lorsque le temps de trajet augmente. La dépendance est d'abord linéaire car les particules gardent en mémoire leur vitesse initiale, une propriété qui différencie la turbulence d'un mouvement purement aléatoire. Ensuite, après avoir atteint des temps de trajet suffisamment longs pour que ce "souvenir" s'efface, le problème se réduit à un problème de Monte-Carlo et $\sigma_y \propto t^{1/2}$.

Si nous revenons maintenant sur la solution analytique de l'équation d'advection-diffusion pour un rejet continu ponctuel, sous l'hypothèse de Boussinesq, et en supposant l'isotropie (Équation 1.3.2), la solution s'écrit :

$$C = \frac{Q}{4\pi Kx} \exp\left[-\overline{u}\left(\frac{y^2}{4Kx} + \frac{z^2}{4Kx}\right)\right]$$
(2.4.9)

Dans cette solution, l'écart-type est donc donné par :

$$\sigma = (2Kx/\overline{u})^{1/2} = (2Kt)^{1/2}, \qquad (2.4.10)$$

où x est la distance à la source et $t = x/\overline{u}$ le temps de trajet.

Ainsi, nous pouvons observer que l'approche eulérienne associée à une fermeture au premier ordre au moyen du gradient moyen de concentration est capable de décrire le comportement pour les longs temps de trajet ($\sigma \propto t^{1/2}$) mais est inadaptée aux faibles temps de trajet, soit près de la source.

Les modèles gaussiens ont pallié ce problème en introduisant une paramétrisation spécifique des écarts-types qui prend en compte les deux régimes et la transition continue de l'un vers l'autre, sur la base d'expériences dont celle de *Prairie Grass* qui, nous l'avons vu, a largement contribué aux formulations P-G et de Briggs, surtout en champ proche.

Il est alors intéressant de comparer la dépendance spatiale des écarts-types dans les deux directions σ_y et σ_z pour les deux modèles gaussiens de Briggs et Doury. La figure 2.4 compare l'évolution des écarts-types pour une atmosphère proche de la neutralité (classes C à E d'après la classification de Pasquill). Nous pouvons noter que le modèle de Doury est moins diffusif que celui de Briggs, ceci étant plus prononcé pour la classe C. De plus, ces différences augmentent avec la distance x. Concernant la diffusion verticale, le modèle de Doury s'avère plus proche de celui de Briggs, notamment pour la classe D. Si maintenant nous nous intéressons au rapport



FIG. 2.3: Solution analytique de l'équation de Taylor pour $R_L(\tau) = exp(-t/\tau)$ et solutions asymptotiques pour les petite et grande échelles de temps, in Hanna (1982)

2.4 Comparaison théorique des modèles eulériens à diffusivité turbulente et des modèles à panache gaussien

 σ_y/σ_z , nous observons pour le modèle de Doury que les paramètres de dispersion restent très proches jusqu'à 1000 m. Pour le modèle de Briggs, il y a une évolution linéaire du rapport pour les conditions faiblement stables et neutres, la valeur passant de 1.5 à 2.5 alors que ce rapport reste constant en conditions légèrement instables avec une valeur de 1.4. À partir de ces observations, nous pouvons d'ores et déjà avancer quelques conclusions quant à la prédiction des maximums de concentration par les deux modèles : le modèle de Doury devrait prédire des maximums de concentration plus élevés, notamment pour de grandes distances et pour les cas correspondant à la classe E de Pasquill.



FIG. 2.4: Tracé de l'évolution des écarts-type de la dispersion σ_y (a) et σ_z (b) extraits des formulations de Briggs (zone rurale classes C à E au sens de Pasquill) et de Doury (diffusion normale) ainsi que du rapport σ_y/σ_z en fonction de la distance à la source x (c). croix : Briggs classe C, cercles : Briggs classe D, losanges : Brigs classe E, traits pleins : Doury diffusion normale

Dans un modèle eulérien, avoir une diffusivité qui dépend de la distance à la source n'est pas réalisable, notamment lorsque l'on considère la présence de bâtiments ou de plusieurs sources

2.5 Indicateurs statistiques adaptés à l'évaluation de modèles et application sur *Prairie Grass*

qui présenteraient chacune un champ de diffusivité K distinct, l'ensemble de ces champs entrant en conflit. Ainsi, dans le cas de l'expérience *Prairie Grass* présentant une turbulence homogène et stationnaire, le champ de diffusivité calculé par *Mercure* sera uniforme dans le plan (x, y). Une autre limite des modèles eulériens pourvus d'une fermeture au premier ordre est que les diffusivités turbulentes sont a priori estimées de manière isotrope avec un seul coefficient Kdans toutes les directions valant ici ν_t/S_{ct} . Nous reviendrons sur ce point dans la section 2.6.

2.5 Indicateurs statistiques adaptés à l'évaluation de modèles et application sur *Prairie Grass*

Les résultats de la campagne *Prairie Grass* concernent exclusivement les concentrations moyennes obtenues sur dix minutes en des points précis situés sur des arcs. Il est par conséquent possible de se placer dans le cadre d'une comparaison mesures-calculs sur l'ensemble des points expérimentaux pour chaque cas simulé. Cependant, la fluctuation de la direction du vent durant ces dix minutes d'expérience, même de quelques degrés, entraîne une nette dégradation des résultats puisqu'en un point fixe donné cet écart dans la direction du vent induit une forte variation de la concentration. C'est la raison pour laquelle les auteurs réalisent d'une manière générale des comparaisons qui vont plutôt porter sur les maximums de concentration par arc de mesure et sur les écarts-types horizontaux du panache, c'est le cas de Hanna dans ses travaux de validation du logiciel FLACS (Hanna *et al.* (2004)).

Dans le cadre de notre étude, nous ferons l'analyse des résultats à la fois sur les maximums de concentration pour l'ensemble des cas simulés et sur les concentrations en chaque point de mesure.

En vue d'avoir une idée claire et rapide de la qualité des résultats obtenus, sont tracés les "scatter-diagrammes" pour les maximums de concentration.

Les performances des modèles sont par ailleurs évaluées selon la méthodologie suggérée par Hanna *et al.* (1993) et résumée dans Chang & Hanna (2004). Cette méthodologie permet d'une manière générale de traiter un ensemble de mesures à la fois dans le temps et dans l'espace. Les paramètres statistiques introduits sont les suivants : le biais fractionnel FB (Fractionnal bias), le biais géométrique moyen MG (Geometric mean bias), l'erreur quadratique moyenne normalisée NMSE (Normalized mean square error), la variance géométrique VG (Geometric variance) et les facteurs 2 et 5 FAC2 et FAC5. Ces paramètres sont définis par :

$$FB = \frac{\left(\overline{C_0} - \overline{C_p}\right)}{0.5\left(\overline{C_0} + \overline{C_p}\right)} \tag{2.5.1}$$

$$MG = \exp\left(\overline{\ln C_0} - \overline{\ln C_p}\right) \tag{2.5.2}$$

$$NMSE = \frac{\overline{(C_0 - C_p)^2}}{\overline{C}_0 \overline{C}_p}$$
(2.5.4)

$$VG = \exp\left[\left(\ln C_0 - \ln C_p\right)^2\right]$$
(2.5.5)

$$FAC2 =$$
fraction des données vérifiant : $\frac{1}{2} \le \frac{C_p}{C_0} \le 2$

$$(2.5.6)$$

$$FAC5 =$$
fraction des données vérifiant : $\frac{1}{5} \le \frac{C_p}{C_0} \le 5$ (2.5.7)

où C_0 et C_p sont respectivement les observations et les prédictions des modèles, l'opérateur de moyenne s'exerçant sur l'ensemble des données.

Ces différents paramètres statistiques ne fournissent pas les mêmes informations en vue de l'évaluation des performances du modèle. Le biais fractionnel FB rend compte de l'erreur systématique globale commise et non des écarts ponctuels importants qui peuvent se compenser et faire en sorte d'obtenir un biais fractionnel quasi nul. Il en est de même du biais géométrique moyen MG qui quantifie également l'erreur systématique produite. L'intérêt de ce paramètre réside dans le fait qu'il ne privilégie pas les valeurs élevées par rapport aux valeurs plus faibles, contrairement aux autres paramètres calculées de manière linéaire. L'erreur locale peut être estimée à la fois par l'erreur quadratique moyenne normalisée NMSE et par la variance géométrique quadratique movenne VG qui, de manière similaire à MG, rend aussi bien compte des faibles valeurs que des plus grandes. Il est à noter que cette propriété engendre rapidement des valeurs importantes des paramètres statistiques MG et VG dues à la comparaison des faibles concentrations, notamment lorsqu'un décalage de quelques degrés s'observe entre le panache simulé et les mesures, ou lorsque l'incertitude sur les mesures est significative par rapport aux faibles concentrations relevées. C'est la raison pour laquelle il est généralement fait usage d'une valeur seuil en-dessous de laquelle les couples mesure-calcul ne sont pas inclus dans le calcul du paramètre. Cette démarche est ici adoptée, nous permettant de présenter des valeurs raisonnables tout en n'occultant pas leur pertinence. Ce seuil est en pratique difficile à déterminer, une approche pouvant être de l'estimer à partir des limites propres aux instruments de mesure (Milliez (2007)). Dans notre cas, n'ayant pas à disposition d'incertitudes sur les mesures effectuées, un seuil arbitraire de 2.5% du maximum sur chaque arc a été utilisé. Enfin, le "facteur 2" FAC2 est un paramètre classiquement utilisé permettant d'avoir une estimation brute des performances du modèle.

Un modèle parfait obtiendrait les performances suivantes : FB = NMSE = 0 et MG = VG = FAC2 = FAC5 = 1. Dans la pratique, Chang et Hanna ont défini des intervalles de "bonnes" performances, même si ce n'est à prendre qu'à titre indicatif (Chang & Hanna (2004)). Un modèle sera ainsi jugé suffisamment performant s'il ne s'éloigne pas des critères suivants :

(2.5.3)

 $\begin{array}{l} -0.3 < FB < 0.3 \\ 0.7 < MG < 1.3 \\ NMSE < 4 \\ VG < 1.6 \\ FAC2 \geq 0.5 \end{array}$

2.6 Expériences retenues et conditions de simulation *Mercure*

2.6.1 Cas retenus

L'ensemble des cas proches de la neutralité ont été traités. Nous reprenons ainsi le même ensemble de cas que celui retenu par Hanna dans sa validation de *FLACS* qui compte 33 séries temporelles de 10 minutes réparties de manière assez homogène dans les trois classes de Pasquill C, D et E. Nous donnons ainsi dans le Tableau 2.5 les caractéristiques des 33 cas retenus qui sont issues des travaux de Hanna. D'autres traitements de la base de données ont été réalisés récemment, le lecteur pourra par exemple en trouver une version sur le site ftp de J.S. Irwin (*ftp ://ftp.epa.gov/asmd/irwin*).

2.6.2 Conditions de simulation Mercure

Un domaine de 1200 m dans la direction longitudinale, de 900 m dans la direction transverse et de 40 m dans la direction verticale a été utilisé. Le maillage est de type structuré, composé d'hexahèdres, avec un raffinement optimal près de la source où les mailles ont une longueur élémentaire dans le plan de 0.5 m. Dans la verticale, la première cellule au-dessus du sol a une taille de 0.1 m, le maillage étant ensuite progressivement relâché.

Le rejet passif est modélisé à l'aide d'un terme source de masse activé dans deux cellules. Celles-ci correspondent au troisième niveau dans la verticale, avec un centre de cellule de cote très proche de la hauteur de rejet expérimentale (0.45 m).

En entrée de domaine (x = -60 m) sont imposés les profils de type logarithmique selon les lois définies en sous-section 1.5.2 pour le vent et les quantités turbulentes k et ε à partir de la connaissance de la longueur de Monin-Obukhov et de la rugosité mesurée sur le site, correspondant à de l'herbe rase, et valant 0.006 m. Cette rugosité est également appliquée dans le domaine de calcul.

Concernant les conditions limites (CL) appliquées sur les différentes faces de bord du domaine, les parois latérales voient leur type de condition définie en fonction de l'orientation du vent :

- Si le flux de quantité de mouvement traversant les faces de bord est positif (CL de type **entrée**), des conditions de Dirichlet sont utilisées, les valeurs des différentes variables (vitesse, scalaires et turbulence) étant fixées.
- Si le flux de quantité de mouvement traversant les faces de bord est négatif (CL de type **sortie**), des conditions de Neuman sont imposées assurant la continuité des variables transportées. La vitesse est corrigée pour assurer la conservation du débit.

Sur la paroi supérieure est imposée la conservation du flux turbulent permettant de maintenir la turbulence dans la domaine, des conditions de **symétrie** étant appliquées pour les autres variables.

Mercure est intégrée sur une durée de 10 minutes correspondant à la durée des mesures la convergence étant assurée par le suivi des variables en des capteurs placés sur les arcs de mesure.

2.6.3 Anisotropie de la dispersion turbulente

Ainsi que nous l'avons évoqué dans la section précédente, *Mercure*, par la formulation même de ses diffusivités turbulentes utilisées dans l'équation d'advection-diffusion (ν_t/S_{ct}), ne permet

cas N°	classe de Pasquill	U à 2 m $(m.s^{-1})$	$1/L_{MO} \ (m-1)$	$\sigma_{ heta}$	$Q \ (kg.s^{-1})$
8	\mathbf{C}	4.8	-0.0556	10.2	0.0911
9	С	6.8	-0.0323	10.2	0.092
17	D	3.3	-0.0208	5.6	0.0565
18	${ m E}$	3.5	0.04	5.3	0.0576
19	\mathbf{C}	5.8	-0.0357	11.6	0.1018
20	D	8.5	-0.0161	8.3	0.1012
21	D	5.8	0.0058	6.6	0.0509
22	D	6.5	-0.0556	7.3	0.0484
23	D	6.0	0.052	7.3	0.0409
24	D	6.0	0.004	7.1	0.0412
28	${ m E}$	2.6	0.0417	6.4	0.0417
29	D	3.5	0.0278	8.0	0.0415
33	D	8.2	-0.0196	10.5	0.0947
34	D	8.5	-0.0132	7.3	0.0974
37	D	4.6	0.0105	7.0	0.0403
38	D	4.1	0.0101	5.0	0.0454
41	${ m E}$	4.0	0.0286	5.0	0.0399
42	D	5.8	0.0083	6.6	0.0564
43	\mathbf{C}	4.95	-0.0625	12.2	0.986
44	\mathbf{C}	5.7	-0.04	12.7	0.1007
45	D	6.0	-0.0115	6.9	0.1008
46	D	5.2	0.0088	7.7	0.0997
48	D	8.0	-0.0159	8.1	0.1041
49	\mathbf{C}	6.3	-0.0357	11.9	0.102
50	С	6.5	-0.0385	10.9	0.1028
51	D	6.0	-0.025	10.8	0.1024
54	D	4.0	0.025	5.9	0.0434
55	D	5.3	0.0081	5.8	0.0453
56	D	4.3	0.0132	6.1	0.0459
57	D	6.7	-0.0052	8.0	0.1015
60	D	4.9	0.0172	5.9	0.0385
61	D	7.7	-0.0263	11.0	0.1021
62	\mathbf{C}	5.0	-0.0333	8.8	0.1021

TAB. 2.5 : 33 cas Prairie Grass retenus pour des conditions proches de la neutralité (calculs de $1/L_{MO}$ et σ_{θ} , écart-type de fluctuations de direction du vent, d'après Hanna, communication privée). Q est le débit d'émission.

pas de rendre compte de l'anisotropie de la dispersion turbulente à travers une formulation différente pour les directions horizontale et verticale, comme c'est le cas pour les modèles gaussiens. Notamment, les modèles eulériens dont les modèles CFD utilisant une approche RANS tels que *Mercure*, ont tendance à sous-estimer la diffusion latérale, spécialement en champ proche. Les auteurs mettent d'ailleurs en garde contre l'utilisation des modèles à diffusivité turbulente pour ces courtes distances lorsqu'il s'agit de décrire la diffusion latérale (e.g. Arya (1999)). Pour l'expérience de *Prairie Grass*, qui est une expérience en champ très proche, nous pouvons donc nous attendre à une sous-estimation de la dispersion latérale induisant une surestimation des maximums de concentration dans l'axe du panache et une sous-estimation de la largeur du panache. Les études déjà réalisé sur le projet *Prairie Grass* à l'aide de modèles CFD adoptant une approche RANS ne sont pas nombreuses. Une étude préliminaire réalisée par Huber *et al.* (2004) sur quelques cas neutres a effectivement mis en évidence une importante surestimation des maximums de concentration ainsi qu'une sous-estimation de la largeur du panache et pointait ainsi du doigt les difficultés inhérentes à la reproductibilité d'une telle expérience avec un modèle RANS.

Les simulations que nous avons réalisées sur les cas 17, 20 et 21, cas neutres et présentant des profils très peu déformés par rapport aux profils gaussiens, corroborent les résultats de Huber et al. ainsi que les affirmations précédemment avancées.

Le tracé des arcs sur le cas 21 (Fig. 2.5) met en évidence une assez nette sur-estimation des concentrations maximales, liée à une sous-estimation de la dimension transversale du panache, c'est à dire de l'écart type de la distribution de concentration. Ces observations vont ainsi bien dans le sens d'une sous-estimation de la diffusion horizontale vis à vis de l'advection par l'écoulement dans la direction du vent.

En vue de pallier ce problème, les auteurs qui se sont consacrés à ce cas test ont appliqué diverses méthodes. L'une d'entre elles, employée par Tang et Huber (Tang *et al.* (2005, 2006)) consiste à traiter les résultats stationnaires à l'aide d'une fonction introduisant un lissage du panache dans la direction transverse (*smoothing effect*, in Tang *et al.* (2006)) correspondant aux déviations du vent par rapport à sa direction moyenne pendant les 10 minutes de l'expérience. Pour mieux prendre en compte l'ensemble du spectre de turbulence atmosphérique, Hanna *et al.* (2004) introduisent pour leur part des fluctuations de vitesse dans les profils d'entrée avec deux périodes différentes (10-15 s et 60-70 s), correspondant au final à des écarts-type valant respectivement 2.4, 1.9 et 1.3 u_* dans les trois directions.

La solution que nous avons retenue est de définir et d'utiliser une diffusivité latérale K_y plus grande que celle prise dans la verticale, cette dernière n'étant pas modifiée. Cependant, le rapport K_y/K_z restera constant dans tous le domaine de calcul et l'on ne pourra pas répondre aux limites de la modélisation eulérienne liées à la dépendance des caractéristiques de la dispersion par rapport à la distance à la source.

La première méthode (méthode A) consiste à augmenter dans l'équation d'advectiondiffusion la valeur de K_y à l'aide d'une constante K_{0h} (Carissimo *et al.* (1995)), soit :

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\frac{\nu_t}{S_{c_t}} + K_{0h} \right) \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\left(\frac{\nu_t}{S_{c_t}} + K_{0h} \right) \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\nu_t}{S_{c_t}} \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} \right)$$
(2.6.1)

Les 33 cas simulés présentent ainsi une valeur différente de la constante K_{0h} pour chacun d'entre eux de telle manière que la valeur cible du rapport K_y/U soit prise égale à 1 m à 2 m du sol, où U est la vitesse du vent à 2 m mesurée pour chacun des cas. Cette valeur a été fixée arbitrairement pour rester cohérent en moyenne avec les valeurs calculées selon les formules de







(e)

FIG. 2.5: Concentrations en ppm massique (ppm-m) pour les arcs situés à 50 m, 100 m, 200 m, 400 m et 800 m du rejet. Expérience 21, cas isotrope $(K_h = K_z = \nu_t/S_{c_t})$. Mercure : traits pleins ; Briggs : traits espacés ; Doury : traits en pointillés ; Mesures : points.



FIG. 2.6: Tracé de l'évolution du rapport K_h/U pour les modèles de Briggs (zone rurale, classes C à E au sens de Pasquill), de Doury (diffusion normale) et de Mercure en fonction de la distance x à la source, où U est la vitesse du vent à 2 m.

Briggs et Doury. L'évolution du rapport K_h/U en fonction de la distance à la source pour les trois modèles présentement comparés est donnée Figure 2.6.

La seconde méthode (méthode B), notamment mise en oeuvre par le Lawrence Livermoore National Laboratory dans l'évaluation des diffusivités horizontales par le code eulérien FEM3A (Chan (1988)), s'appuie sur l'introduction d'une relation de quasi-linéarité entre la diffusivité horizontale K_h et celle verticale K_z . En supposant que la diffusivité verticale s'exprime uniquement en fonction de z et de la vitesse de frottement u_* et ne prend pas en compte une vitesse ascensionnelle traduisant les structures convectives, l'utilisation d'une relation de linéarité s'écrit :

$$K_h = \alpha K_z \tag{2.6.2}$$

Chan propose ainsi de déduire linéairement K_h de K_z par l'intermédiaire d'un coefficient α qu'il fixa à 6.5 en s'appuyant sur la paramétrisation de Pasquill-Gifford des écarts-types.

Si nous appliquons la même approche à partir des formulations de Briggs (cf sous-section 2.3.1), nous trouvons une valeur minimale du rapport K_h/K_z très proche de 2 à 100 m et de 4 à 1000 m pour la classe D (le lecteur pourra se reporter à la figure 2.4(c)).

Des tests ont été réalisés pour différentes valeurs du paramètre α dans la plage [2; 5]. Nous présentons ici les résultats pour les 33 cas simulés avec une valeur de α fixée à 3, ce qui correspondant à une valeur "moyenne" à partir des formulations de Briggs sur une distance inférieure à 1000 m. Cette paramétrisation conduit à une nette amélioration des résultats sur les cas 17, 20 et 21. La figure 2.7 témoigne de la concordance entre les résultats fournis par *Mercure* et ceux issus de Briggs sur le cas 21.

2.7 Résultats et discussion

Nous présentons et discutons dans ce paragraphe des performances obtenues avec *Mercure* pour les deux méthodes A et B introduites précédemment et les comparons à celles propres aux modèle de Briggs et de Doury. Dans ce qui suit, nous présenterons dans un premier temps les scatter-diagrammes comparant les maximums de concentration obtenues par les trois modèles, puis nous discuterons des mesures statistiques adaptées à l'évaluation de ces modèles.







(e)

FIG. 2.7: Concentrations en ppm massique (ppm-m) pour les arcs situés à 50 m, 100 m, 200 m, 400 m et 800 m du rejet. Expérience 21. Mercure méthode $B(K_h = 3, K_z)$: traits pleins; Briggs: traits espacés; Doury: traits en pointillés; Mesures: points.

150

La figure 2.8(a) compare les maximums de concentration entre les observations et les résultats fournis par l'application du modèle de Briggs. Ce diagramme montre que les prédictions sont en bonne concordance avec les valeurs expérimentales. Nous pouvons en effet observer que le nuage de points est symétriquement dispersé autour de la première bissectrice et que peu de points sortent de la zone délimitant le paramètre FAC2. Concernant le modèle de Doury (Fig. 2.8(b)), nous observons un nuage de point plus dispersé, ce qui laisse à penser que ce modèle ne reproduit pas aussi bien les concentrations maximales, avec à la fois des cas où il y a sur-estimation des mesures et des cas où, au contraire, une sous-estimation apparaît. Nous pouvons noter que tous les cas montrant une sur-estimation correspondent en réalité à ceux figurant dans la classe C.

Pour le modèle *Mercure* utilisé avec la méthode A (Fig. 2.8(c)), nous observons que la majorité des points pour les arcs situés à 100 et 200 m de la source appartiennent à la zone de "validation" vérifiant 0.5 < FAC2 < 2 alors que les points sont majoritairement situés en dehors à 50 m et 800 m. Cette première observation suggère que, pour cette méthode, *Mercure* n'est pas capable de décrire finement l'expansion du panache tout près de la source et de reproduire avec exactitude la dispersion plus en aval, sur-estimant les maximums de concentration pour les plus grandes distances. La méthode B, fondamentalement assez proche de la méthode A, présente à la fois un nuage de points plus dispersé mais également une pente en meilleure adéquation avec la première bissectrice (Fig. 2.8(d)). En s'intéressant à la classe de stabilité correspondant à chacun des cas, nous avons pu nous apercevoir que les cas neutres sont correctement prédits alors que les cas faiblement stables ou instables conduisent respectivement à une sur-estimation et une sous-estimation des maximums de concentration. Une spécification du coefficient α par classe pourrait permettre d'améliorer ces résultats mais le but était ici de définir une seule paramétrisation dans le cas quasi-neutre.

Les statistiques globales évaluées à la fois pour les maximums de concentration et pour l'ensemble des points de mesure (Tab. 2.6 et 2.7) confirment nos observations et remarques précédentes. En effet, nous notons que le modèle de Briggs obtient de très bonnes performances, avec toutefois une très légère sous-estimation des concentrations observées, et est en accord sur tous les critères de validation définis par Chang & Hanna (2004) au niveau des maximums de concentration. Quoiqu'acceptables, les résultats sont bien entendu moins bons pour l'ensemble des mesures, notamment pour le paramètre FAC2. Ceci est dû à deux raisons principales. D'une part, ce paramètre, pour lequel aucun seuil n'est appliqué, est très influencé par les très basses valeurs de concentration. D'autre part, une difficulté de l'étude est liée à la variabilité spatiale et temporelle de la direction du vent moyen au cours des dix minutes de l'expérience, comme en témoigne la figure 2.9 qui montre l'évolution de la direction où est observé le maximum de concentration pour chaque arc de mesure et pour une sélection de cas. La grande variabilité observée en fonction de la distance indique que le choix d'une direction uniforme est une mauvaise approximation dans ce cas. Cette variabilité influencera nécessairement plus la comparaison spatiale (sur l'ensemble de mesures) que celle axée sur les maximums de concentration.

Le modèle de Doury atteint pour sa part un niveau de performance bien moins élevé que le modèle de Briggs. Ce modèle présente en effet des performance inférieures en terme de FAC2 et de FAC5, notamment en regard des indices obtenus pour le modèle de Briggs, et ceci à la fois pour les maximums de concentration et les mesures prises dans leur ensemble. Par ailleurs, les valeurs de FB et MG pour les maximums de concentration indiquent une sous-estimation.

Les performances propres au modèle *Mercure* pour la méthode A se situent entre celles des deux modèles gaussiens présentés. En effet, bien que *Mercure* présente une sur-estimation globale des maximums de concentration, le paramètre FAC2 obtenu est au-dessus du critère de validité, meilleur que celui du modèle de Doury, moins bon toutefois que celui de Briggs. Concernant les résultats pour l'ensemble des mesures, cette sur-estimation des maximums est compensée par une sous-estimation des faibles valeurs, conduisant à une très légère sur-estimation



FIG. 2.8 : Comparaison des maximums de concentration entre les observations et les prédictions des modèles pour cinq arcs de mesure (50, 100, 200, 400 et 800 m) et pour les 33 cas des classes de Pasquill C, D et E : a) formulation de Briggs, b) formulation de Doury, c) Mercure pour la méthode A $(K_y/U = 1m)$, d) Mercure pour la méthode B $(\alpha = 3.0)$. Les droites tiretées délimitent la zone dite de "facteur 2" à l'intérieur de laquelle le rapport entre observation et résultat de simulation est compris dans l'intervalle [0.5; 2].



FIG. 2.9 : Déviation moyenne du vent déduite de l'observation des maximums de concentration sur les arcs de cercle situés à 50, 100, 200, 400 et 800 m pour les cas 17, 29, 41, 45 et 62 en fonction de la distance à la source.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
modèle de Briggs	0.028	1.148	0.237	1.305	0.845	0.993
modèle de Doury	-0.304	0.648	1.643	4.015	0.382	0.836
modèle Mercure méthode A	0.473	0.807	1.685	2.780	0.552	0.891
modèle Mercure méthode B	-0.100	0.923	1.275	3.875	0.418	0.818

TAB. 2.6 : Comparaison des indicateurs statistiques de performance entre le modèle Mercure et les modèles à panache gaussien de Briggs et Doury pour les maximums de concentration.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
modèle de Briggs	0.255	1.131	1.161	1.436	0.455	0.651
modèle de Doury	0.251	0.971	4.051	2.600	0.241	0.407
modèle Mercure méthode A	-0.018	0.692	1.620	2.324	0.384	0.651
modèle Mercure méthode B	0.331	1.166	3.006	2.146	0.310	0.586

TAB. 2.7 : Comparaison des indicateurs statistiques de performance entre le modèle Mercure et les modèles à panache gaussien de Briggs et Doury pour l'ensemble des mesures.

globale. L'application de la méthode B fournit de meilleures et très bonnes performances pour les indicateurs FB, MG et NMSE en terme de maximums de concentration. Les excellentes valeurs de FB et NMSE cachent néanmoins le fait que les sur-estimations et sous-estimations observées ont tendance à se compenser. L'indicateur FAC2 tant pour les maximums de concentration que pour l'ensemble des mesures est quant à lui inférieur à celui obtenu avec la méthode A mais reste ici supérieur à celui donné par le modèle de Doury.

Pour aller plus loin, nous avons analysé ces mesures de performance en fonction de la distance à la source. Les figures 2.10 et 2.11 représentent l'évolution des performances statistiques en fonction de la distance à la source, respectivement pour les maximums de concentration et l'ensemble des mesures pour chacun des arcs. Notons en préalable que des seuils ont été introduits pour l'estimation des paramètres MG et VG, conformément à ce qui a été énoncé dans la section précédente. Malgré cela, nous pouvons observer sur ces figures que l'indicateur VG augmente de manière significative avec la distance pour les trois modèles, ce qui est principalement dû à la variabilité spatiale de la direction principale du panache rendant la comparaison par rapport aux mesures plus difficile aux larges distances que proche de la source. D'ailleurs, une détérioration générale des indicateurs est globalement observable pour les maximums de concentration (notamment pour NMSE, VG, FAC2 et FAC5) mais aussi pour les indices statistiques calculés pour l'ensemble des mesures (pour FB, MG, NMSE et VG).

Une analyse rapide de ces paramètres statistiques attire l'attention sur les performances du modèle de Briggs qui s'avèrent meilleures que celles des deux autres modèles à toutes les distances. Il présente de très bonnes performances en terme de maximums de concentration (Fig. 2.10), en réelle concordance à 50 m puis montrant une légère sous-estimation en aval. À l'opposé, les meilleures performances quant à l'ensemble des mesures par arc sont obtenues aux plus grandes distances, mais la différence n'est pas significative (Fig. 2.11). Ceci peut être dû au fait que la sensibilité à la fluctuation du vent est moins importante aux grandes distances, lorsque le panache est plus large. Le modèle de Briggs satisfait à tous les critères de performance pour les maximums de concentration, de même pour l'ensemble des mesures par arc mis à part l'indicateur FAC2. Rappelons que ces performances pouvaient être escomptées puisque les écarts-type ont été partiellement paramétrés sur cette expérience, notamment en champ proche.

Le modèle Mercure présente quant à lui de relativement bonnes performances pour les deux paramétrisations de la diffusivité latérale envisagées, notamment en comparaison de celles propres au modèle de Doury. En effet, bien que Mercure n'offre pas un niveau de performance comparable au modèle de Briggs, les indices statistiques obtenus pour l'application de la méthode A sont satisfaisants entre 100 et 400 m en terme de maximums de concentration (Fig. 2.10). Nous retrouvons les caractéristiques entrevues lors de l'observation des scatter-diagrammes, à savoir une sous-estimation des maximums de concentration très près de la source et une sur-estimation aux plus grandes distances, ceci étant également vrai pour les mesures prises dans leur ensemble. Le comportement des indices statistiques pour l'ensemble des mesures par arc est identique, à l'exception du paramètre FAC2 qui est nettement supérieur près de la source (Fig. 2.11). Les performances fournies par l'utilisation de la méthode B sont davantage constantes en fonction de la distance à la source. Nous pouvons observer une légère sur-estimation des maximums de concentration (FB < 0 et MG < 1). Tant pour l'ensemble des mesures que pour les maximums de concentration, la méthode B donne de meilleurs valeurs pour les indices FB et MG décrivant l'erreur systématique commise alors que concernant l'estimation de l'erreur locale, la méthode A présente les résultats les plus pertinents.

Nous observons ainsi que le modèle *Mercure* se comporte différemment pour les deux méthodes employées afin de pallier aux anisotropies. Cependant, aucune des deux méthodes, quoique donnant des indices de performance acceptables, ne permet de représenter correctement la dispersion pour tous les cas pris parmi les classes de stabilité C à E et ce quelle que soit la distance à la source.



FIG. 2.10 : Évolution des performances statistiques pour les maximums de concentration le long de l'axe du panache. Mercure méthode A $(K_h/U = 1.)$: losanges, Mercure méthode B $(K_h = 3. K_z)$: carrés, Briggs : étoiles, Doury : cercles, les lignes pointillées représentent les valeurs idéales des indicateurs.



FIG. 2.11 : Évolution des performances statistiques pour l'ensemble des mesures prises sur un arc le long de l'axe du panache (les lignes pointillées représentent les valeurs idéales).

2.8 Conclusions

Enfin, le modèle de Doury donne les plus mauvaises performances, sous-estimant les maximums de concentration à toutes les distances (Fig. 2.10). Ces observations sont cohérentes avec la remarque faite dans la section 2.4 sur la comparaison des écarts-types latéraux σ_y pour les deux modèles gaussiens. La sur-estimation des maximums de concentration est liée à une valeur plus faible de σ_y , en particulier pour les conditions légèrement instables (classe C de Pasquill). Ces conclusions apparaissent moins clairement pour l'ensemble des mesures (Fig. 2.11), les valeurs de NMSE et FB étant par exemple proches des valeurs idéales par simple compensation des erreurs. Malgré tout, nous enregistrons de faibles valeurs des indices FAC2 et FAC5.

2.8 Conclusions

Les résultats obtenus à l'aide des différents modèles utilisés (Mercure, Briggs et Doury) et ayant servi aux calculs d'indices statistiques de performance ont permis de mettre en lumière le comportement satisfaisant du modèle *Mercure* et son aptitude à reproduire une telle expérience en terrain plat, notamment en comparaison avec un modèle à panache empirique dont la paramétrisation n'a été aucunement fondée sur cette campagne de mesures. Pour cela, Mercure a été utilisé avec deux paramétrisations très simples et générales permettant de pallier au défaut d'anisotropie du modèle k- ε . L'une a consisté à fixer à une valeur cohérente la diffusivité latérale K_h en regard des formulations de Briggs, l'autre à fixer cette fois la valeur du rapport K_h/K_z en fonction toujours de la valeur de ce rapport pour les formulations de Briggs. Les deux méthodes ont montré chacune leurs limites, ne présentant pas une paramétrisation suffisamment robuste pour modéliser correctement un ensemble de cas appartenant aux classe C à E au sens de Pasquill. Néanmoins, les performances de Mercure se situent à un niveau comparable à celui donné dans la littérature pour les modèles FLACS 3D (Hanna et al. (2004)) et CFD-Urban (Coirier (2004)) pour la comparaison des maximums de concentration, avec des performances optimales aux distances de 200 et 400 m (e.g. FAC2 y est compris entre 0.5 et 0.6, comme pour les simulations *Mercure*).

Ainsi, il semble illusoire de vouloir décrire plus finement la réelle expansion d'un panache avec un modèle tels que *Mercure* dés lors que l'utilisation d'une hypothèse flux gradient nécessite la dépendance des diffusivités turbulentes propres à la dispersion en fonction de la distance mais également de la stratification thermique. Une approche LES pourrait résoudre en partie les questions soulevées par cette problématique.

Chapitre 3

Étude comparative de la dispersion en milieu bâti sur le site CNPE de Bugey

3.1 Objectifs de l'étude

Après avoir évalué les performances de *Mercure* sur un cas simple de dispersion en terrain plat et les avoir comparées à celles de modèles gaussiens, l'objectif de ce chapitre est de comparer les approches CFD/RANS et gaussiennes sur un cas plus complexe où la dispersion est influencée par un ensemble de bâtiments. Dans ce but, nous nous appuyons sur des résultats expérimentaux issus d'une étude en soufflerie réalisée par le LMFA à l'ECL, à la demande de l'IRSN, qui traite de scenarii de rejets accidentels sur le site CNPE (Centre Nucléaire de Production d'Électricité) du Bugey. Nous mettons en oeuvre sur ce cas des simulations *Mercure* et ADMS, modèle de dispersion gaussien de dernière génération et introduit dans le chapitre 1, en modélisant de la manière la plus fine qui soit l'influence des bâtiments sur les processus dispersifs. Cela est rendu possible par *Mercure* en résolvant explicitement le champ dynamique autour des bâtiments, représentés dans leur intégralité. ADMS, de son côté, est supposé également répondre à cette problématique par l'intermédiaire de son module approprié, tout en ne résolvant pas explicitement la dynamique de l'écoulement.

L'enjeu de cette étude est double. D'une part, valider et évaluer l'outil *Mercure* sur un cas complexe pour lequel il est a priori adapté. D'autre part, quantifier les performances d'un modèle tels qu'ADMS, plus "simple" mais moins coûteux numériquement, et qui a pour vocation d'être utilisé dans un cadre opérationnel. L'objectif final est ainsi d'avoir une vision objective du rapport entre qualité des résultats d'une part et temps de calcul et complexité de mise en oeuvre d'autre part pour ces deux modèles.

3.2 Description de l'étude en soufflerie

Confiée à l'origine au LMFA par le département de Prévention et d'Étude des Accidents de l'IRSN, cette étude concerne la modélisation expérimentale en soufflerie de scenarii accidentels de rejet d'effluents gazeux sur le CNPE de Bugey, situé dans la plaine de l'Ain, au bord du Rhône et à l'Ouest des contreforts du massif du Bugey. Cette étude est la plus réaliste possible, prenant en compte les effets de bâtiments et de relief, pour deux configurations de rejet distinctes : un rejet ponctuel en sortie de la cheminée, et un rejet diffus à travers la paroi de béton d'un des réacteurs. L'étude de la dispersion est réalisée à l'échelle locale du site, soit sur quelques kilomètres. L'ensemble de l'étude est détaillée dans Mejean (2003).

3.2.1 Dispositif expérimental et moyens de mesure

La soufflerie

La soufflerie utilisée et située dans les locaux de l'ECL est de type aéraulique avec une veine à retour de 24 m de longueur, 7 m de largeur et 7 m de hauteur. La vitesse de l'écoulement s'étage de 0.5 à 7 $m.s^{-1}$ et la température de l'air est régulée à 0.25 °C près au moyen d'une batterie de résistances électriques et d'un groupe frigorifique. Par ailleurs, la couche limite atmosphérique est déclenchée à l'aide d'un système de type Counihan ou Irwin. Cette soufflerie a principalement été conçue pour simuler des écoulements atmosphériques neutres sur site complexe même s'il s'avère possible de modéliser des écoulements thermiquement stratifiés par l'intermédiaire d'un système d'échangeurs thermiques, ce dispositif ayant servi par le passé à quelques études menées à la Direction de la Recherche et Développement d'EDF.

La maquette

Une vue de la maquette du site est présentée figure 3.1 montrant la présence de quatre tranches REP et une tranche UNGG (Centrale à Uranium Naturel Graphite Gaz) n'étant plus exploitée actuellement. Les bâtiments réacteurs sont couplés par deux et seront respectivement nommés dans la suite de cette étude tranche 2-3 (au Sud du site) et tranche 4-5 (au Nord du site).



FIG. 3.1 : Vue de la maquette du CNPE de Bugey (in Mejean (2003)). Visualisation des différents bâtiments du site (du Sud vers le Nord : réacteur UNGG, tranches 2-3 puis 4-5, ensemble constitué des quatre aéroréfrigérants, à l'Est du fleuve : différents hameaux.

Les dimensions du site proprement dit sont d'environ 1800 m dans les directions Nord-Sud et Est-Ouest. Les bâtiments réacteurs ont une hauteur de 50 m, 80 m pour la tranche UNGG. Les aéroréfrigérants dans la partie Nord du site s'élèvent à 140 m par rapport au niveau du sol. Le relief du site et de l'environnement immédiat est relativement plat, avec une altitude moyenne de 197.5 m et 215 m pour le talus principal. Le relief le plus important est situé à 2000 m à l'Est du site. Les zones d'habitation les plus proches sont situées au Nord et au Sud ainsi qu'à l'Est,

sur l'autre rive du Rhône. Il s'agit de hameaux ou de bâtiments à usage agricole. Les dimensions de la maquette ont répondu à certains critères qui furent les conditions de similitude à respecter, les configurations d'étude et la finesse des observations souhaitée, le rapport à respecter entre la vitesse du rejet et celle de l'écoulement et enfin la taille de la soufflerie. Ainsi, afin de représenter au mieux les effets propres au milieu bâti et de disposer de suffisamment de distance en aval du site pour décrire correctement la dispersion, une échelle de 1/500ème fut retenue. Cette échelle permet également d'avoir une hauteur des bâtiments compatible avec la hauteur de la veine d'essai. La maquette est orientée dans la direction Nord-Sud correspondant à celle des vents dominants. Ainsi, les dimensions de la maquette sont proches de 5 km dans l'axe Nord-Sud et 2 km dans l'axe Est-Ouest.

La maquette prend en compte tous les bâtiments principaux ainsi qu'un certain nombre de zones d'habitation et d'espaces verts. Ceci est complété par la mise en place d'éléments de rugosité en amont et en aval du site, là où les zones habitées ne sont plus représentées. De plus, d'autres éléments de rugosité sont placés sur le site même pour améliorer artificiellement le frottement de l'air sur le sol, celui-ci étant naturellement trop lisse par rapport à ce qui est imposé par la similitude.



FIG. 3.2: Vue du bâtiment réacteur n°2 équipé de son système d'injection de fumée et de la cheminée

La maquette est instrumentée de façon à simuler un rejet à la sortie de la cheminée de la tranche 2-3 ainsi qu'une fuite à travers le béton du premier réacteur de cette tranche. Ces deux types de rejet sont illustrés figure 3.2. Le rejet est celui d'un gaz traceur constitué d'un mélange d'air et d'éthanol. Pour modéliser la source diffuse, le dispositif mis en place consiste en l'injection du gaz traceur à l'intérieur d'un tube poreux placé à l'intérieur et au centre du bâtiment, et entouré d'un grillage pour éviter qu'il soit en contact avec le gravier remplissant celui-ci. Cette technique permet en particulier une meilleure répartition du gaz dans le bâtiment alors que le gravier, apportant une perte de charge supplémentaire, participe à une meilleure répartition du gaz au niveau de l'enveloppe extérieure du bâtiment qui est constituée de tôle perforée. Pour les essais de visualisation, le bâtiment réacteur est équipé différemment afin de ne pas piéger les particules d'huile. Dans ce cas, celui-ci est rempli de mousse à cellules ouvertes. Ce dispositif permet une émission de fumée relativement homogène à travers la tôle perforée et les pertes de charge introduites par la mousse sont suffisamment fortes pour que le vent extérieur ne traverse pas le bâtiment (Fig. 3.3).



FIG. 3.3 : Schéma de principe de l'injection de gaz traceur à travers le réacteur n°2.

Les moyens de mesure

• Visualisation d'écoulement par tomographie laser :

A partir d'un rejet simulé à l'aide de fines gouttelettes d'huile introduites au niveau de l'émission, des plans de visualisation ont pu être obtenus au moyen d'un dispositif expérimental comprenant un laser argon de 5W et une fibre multi-modes, elle-même munie d'un coupleur optique d'une part et d'une lentille cylindrique d'autre part.

• Vélocimétrie laser Doppler :

La soufflerie est équipée depuis 1992 d'un système de vélocimétrie laser à trois composantes encore appelé Doppler différentiel ou à franges. Cette méthode optique permet in fine de fournir des signaux correspondant aux trois composantes de la vitesse. Elle s'avère très efficace et offre la possibilité de réaliser des mesures près de la paroi des bâtiments. Il est ainsi possible à partir du système installé d'accéder aux informations relatives à la turbulence, en particulier les tensions de Reynolds u'v', u'w' et v'w' et l'énergie cinétique turbulente k. Cette technique de mesure sur les trois composantes est appelée mesures en coïncidence, correspondant au recouvrement des trois bouffées Doppler relatives à chacune des trois composantes. Or ce type de fonctionnement est très contraignant, nécessitant un réglage optique très fin et répété à cause des déplacements du chariot de mesure induits par les vibrations de la soufflerie. C'est pour cette raison que les mesures furent la plupart du temps réalisées en non-coïncidence, donnant accès aux composantes moyennes de la vitesse ainsi qu'aux fluctuations de vitesse suivant la composante longitudinale. L'utilisation de cette technique en coïncidence pour quelques points de mesure permettent de connaître, outre les composantes moyennes de vitesse, l'énergie cinétique turbulente k. Les incertitudes associées à l'utilisation de cette technique ont été évaluées précisément Mejean (2003) et sont relativement faibles, avec une erreur aléatoire sur la vitesse de l'écoulement de 0.32%.

• Analyseur d'hydrocarbures par ionisation de flamme :

Les mesures de concentration instantanées dans la soufflerie furent réalisées au moyen d'un analyseur d'hydrocarbures disposant de deux voies. L'analyseur utilise une technique de détection par ionisation de flamme (FID). Cette méthode permet d'accéder en des points précis à des concentrations volumiques d'hydrocarbures instantanées exprimées en partie par million (ppm), représentant la fraction d'hydrocarbures contenue dans l'air au point de mesure. L'échantillonnage des points de mesure est réalisé à une fréquence de 1000 Hz et sur une durée d'une minute. La sauvegarde puis le traitement des concentrations instantanées permettent de déterminer finalement la concentration moyenne au point de mesure considéré ainsi que la fluctuation de concentration.

3.2.2 Problèmes de similitude

La modélisation expérimentale des écoulements atmosphériques en soufflerie repose sur la notion de similitude qui consiste à reproduire le comportement d'un écoulement et des phénomènes mis en jeu par simple changement d'échelle des grandeurs caractéristiques de celui-ci. En effet, l'écriture adimensionnée des équations de Navier-Stokes fait apparaître des termes adimensionnels qui, s'ils sont conservés après un changement d'échelle (longueur, vitesse, etc. ...), permettent d'obtenir des solutions identiques. Ainsi, un écoulement et ses phénomènes physiques associés pourront être reproduits à l'échelle de la soufflerie si et seulement si ces différents termes adimensionnels restent constants après changement d'échelle. Un principe fondamental de la modélisation expérimentale est donc de s'attacher à conserver ces paramètres que nous discutons ci-dessous :

• Nombre de Rossby :

La similitude n'est pas à envisager dans la mesure où les effets de la force de Coriolis sont négligeables à l'échelle considérée.

• Nombre d'Euler :

La similitude est respectée, les variations de pression étant directement liées aux variations de vitesse.

• Nombre de Reynolds ($Re = \frac{VL}{\nu}$) :

La similitude exacte sur le nombre de Reynolds n'est pas envisageable pour les écoulements atmosphériques car le rapport d'échelle de longueur, de l'ordre de 1000, ne peut être compensé en jouant sur le rapport des viscosités. Ainsi, les valeurs de Re obtenues en soufflerie sont inférieures de plusieurs ordres de grandeur à celles observées dans l'atmosphère. La question centrale quant aux études de dispersion atmosphérique est de savoir comment la similitude partielle sur Re affecte l'étude de la dispersion en soufflerie. À cet effet, rappelons dans un premier temps la relation entre l'échelle intégrale de la turbulence notée l représentative des grandes structures et l'échelle de Kolmogorov η :

$$\eta \approx lRe^{-3/4} \tag{3.2.1}$$

Il apparaît que réduire la gamme de Reynolds a pour conséquence de tronquer les structures de plus petite taille correspondant aux nombres d'ondes élevés dans le spectre de turbulence. Or, nous avons vu que le processus de dispersion turbulente atmosphérique est surtout dû aux structures de grande taille. Ainsi, cette similitude partielle sur le nombre de Reynolds n'est censée que peu influer sur le champ de concentration. En revanche, la comparaison des moments d'ordre 2 de la dispersion, plus sensibles aux petites structures turbulentes, pourra être altérée par la troncature des faibles nombres d'onde.

• Nombre de Froude :

Le respect de la similitude sur le nombre de Froude entraîne une diminution des vitesses de vent. Toutefois, de nombreux essais en soufflerie ont montré que les plus faibles valeurs de vitesse du vent ainsi obtenues n'avaient pas de conséquences importantes sur la dispersion (Mejean (2006)).

Similitude pour les conditions aux limites

Le sol étant considéré comme une paroi aérodynamiquement rugueuse, les caractéristiques de la couche limite sont indépendantes du nombre de Reynolds. Le respect de la condition de similitude conduit ainsi à s'assurer que la couche limite reste suffisamment rugueuse, ce qui est vérifié lorsque les éléments de rugosité présentent une hauteur h très supérieure à l'épaisseur de la sous-couche visqueuse, soit :

$$\frac{\varepsilon u_*}{\nu} > y_{lim}, \quad \text{avec} \quad y_{lim} \in [5;70] \tag{3.2.2}$$

Cette condition n'est pas nécessairement vérifiable puisque la modification du nombre de Reynolds entraîne une augmentation de l'échelle de Kolmogorov et de l'épaisseur de couche-limite. Par conséquent, afin de respecter ce critère, il est d'usage d'exagérer la rugosité en s'assurant toutefois que la longueur de rugosité reste petite devant la hauteur H des obstacles (H/h > 30, Mejean (2003)).

Similitude sur les rejets

L'analyse dimensionnelle appliquée aux variables caractéristiques d'un rejet de gaz passif à la cheminée montre qu'il est nécessaire de respecter la similitude géométrique de la source, le rapport des quantités de mouvement en sortie de cheminée, soit W_s/U_c où W_s est la vitesse verticale en sortie de cheminée et U_c la vitesse moyenne du vent à la hauteur de référence prise égale à la hauteur de la cheminée. Pour les raisons évoquées précédemment, la similitude sur le nombre de Reynolds est ici également tronquée. Concernant le rejet diffus, la similitude de la source est respectée. Il est par ailleurs important de vérifier que la vitesse du rejet à travers la paroi est suffisamment faible pour ne pas interférer avec l'écoulement extérieur.

3.2.3 Caractéristiques de l'écoulement amont

Les caractéristiques générales de la couche limite ont été déterminées pour un profil vertical de vitesse situé à 7 m de l'entrée de la veine d'essai et sans aucune maquette placée à l'intérieure de la soufflerie. Les mesures furent réalisées pour une vitesse non-perturbée de 5 $m.s^{-1}$ au-dessus de la couche limite, ce qui correspond à l'échelle réelle à une vitesse de référence de $3.7 m.s^{-1}$ pour l'altitude z = 50 m. La vitesse de frottement au sol u_* déduite du profil pour une loi logarithmique extrapolée est de $0.21 m.s^{-1}$ et la longueur de rugosité à l'échelle de la maquette est de 8.10^{-5} m. Ces caractéristiques correspondent à une couche limite relativement peu rugueuse comptetenu de l'échelle géométrique employée. Elles sont à rapprocher d'un écoulement de couche limite atmosphérique se développant sur un terrain plat couvert d'herbes, soit une longueur de rugosité de quelques centimètres. Ces caractéristiques ont semblé bien adaptées à la modélisation de la dispersion sur le site du CNPE de Bugey compte-tenu de son implantation géographique en zone rurale sur un terrain plat entouré de champs cultivés. Par ailleurs, les écarts-types de vitesse en amont de la maquette, adimensionnées par la vitesse de frottement u_* , sont en bon accord avec les valeurs couramment admises dans la littérature pour une atmosphère neutre Garratt (1992), soit :

3.2.4 Les configurations d'étude

Les configurations d'étude sont au nombre de quatre puisque seuls diffèrent le type de rejet, en sortie de cheminée de la tranche 2-3 ou diffus à travers la paroi de béton du bâtiment réacteur n°2, ainsi que la direction du vent provenant soit du Sud, soit du Nord. Les quatre configurations sont ainsi les suivantes :

• rejet en cheminée par vent de Sud

	Soufflerie	Valeurs typiques
$\sqrt{\overline{u'^2}}/u_*$	2.2	2.4
$\sqrt{\overline{v'^2}}/u_*$	1.8	1.9
$\sqrt{\overline{w'^2}}/u_*$	1.3	1.25

TAB. 3.1 : Écarts-types adimensionnés en comparaison des valeurs usuelles obtenues sur une paroi plane, in Mejean (2003)

- rejet diffus par vent de Sud
- rejet en cheminée par vent de Nord
- rejet diffus par vent de Nord

Les conditions de rejet associées à la cheminée correspondent en réalité à un débit d'effluents gazeux de 280 000 m³/h, ce qui, pour un diamètre de sortie de la cheminée de 2.2 m, conduit à une vitesse verticale de rejet de 20.5 $m.s^{-1}$. L'application des conditions de similitude pour l'échelle géométrique et pour le rapport de quantité de mouvement en sortie de cheminée impose le débit de sortie. Cette valeur a également été imposée au rejet diffus.

3.2.5 Description du jeu de mesures

La base de données à disposition est particulièrement fournie, tant du point de vue de la dynamique de l'écoulement que de la dispersion. Concernant la mesure des champs dynamiques, de nombreux profils horizontaux et verticaux ont été mesurés en non-coïncidence donnant ainsi accès aux valeurs des composantes moyennes de la vitesse que nous nommerons U, V et W ainsi qu'à l'écart-type de vitesse dans la direction longitudinale noté $\sqrt{u'2}$. Ces profils sont répartis tout du long de l'axe principal du rejet, soit dans la direction y ou -y suivant la direction du vent. Nous pouvons dénombrer vingt-six profils verticaux ainsi qu'une quarantaine de profils horizontaux pris à différentes altitudes : à 25 m, à 50 m, à 100 m et à 150 m. Enfin, quelques mesures ont été également effectuées en coïncidence permettant d'atteindre, en plus des composantes de vitesse moyenne, l'énergie cinétique turbulente k. Les plans décrivant l'ensemble des profils verticaux et horizontaux pour la direction de vent du Sud est illustrée Figure 3.4, celle pour la direction de vent de Nord étant fournie en Annexe A. Pour les mesures relatives à la dispersion, la même méthodologie a été appliquée. La base de données présente des profils verticaux répartis le long de l'axe de rejet de concentration et de fluctuation de concentration, ainsi que des profils horizontaux pour différents plans verticaux : au sol, à 25 m, à 50 m, à 100 m ainsi qu'à 150 m.

Un seul système de coordonnées a été défini pour l'étude en soufflerie et les simulations Mercure et ADMS :

- l'origine du repère est centrée au centre du bâtiment réacteur n°2
- la direction longitudinale dans la direction Sud-Nord est représentée par l'axe y
- \bullet la direction transverse d'Est en Ouest est représentée par l'axe x

3.3 Description des simulations Mercure

3.3.1 Domaine de calcul et maillage

Le maillage a été confié par EDF R&D à la société INCKA qui a notamment fourni un maillage hexaédrique modifiable réalisé avec le logiciel spécifique de maillage SIMAIL. Nous présentons ici la méthodologie appliquée ainsi que les caractéristiques du maillage issues de Jamet (2005).



FIG. 3.4 : Position des profils verticaux et transverses de variables cinématiques sur la maquette pour la position de vent de Sud et représentation du repère (x, y) (d'après Mejean (2003)).

Géométrie

Le domaine de calcul devant inclure l'ensemble du domaine de mesures, celui-ci est représenté par une zone rectangulaire de 5 km de long sur 2 km de large, le sommet étant situé à 300 m au-dessus du niveau du sol.

Les bâtiments les plus importants ont été conservés, en fonction de leur hauteur et de leur forme, ainsi que l'ensemble de la topographie du site et le lit du fleuve. Ainsi ont été pris en compte, en partant du Sud vers le Nord, l'ancien bâtiment réacteur (réacteur UNGG), successivement les tranches 2-3 puis 4-5 et enfin les aéroréfrigérants.

L'ensemble des toits des bâtiments est considéré comme plat à l'exception des toits des bâtiments réacteurs des tranches 2-3 et 4-5 qui sont pris hémisphériques. Les murs sont tous verticaux à l'exception des parois des aéroréfrigérants qui épousent la forme de deux cônes tronqués se rejoignant à la cote Z = 105 m. Par ailleurs, les cheminées des tranches ne sont pas explicitement modélisées, celle de la tranche 2-3 où intervient le rejet accidentel le sera implicitement par la technique de terme source. Notons que les tranches 2-3 et 4-5 culminent au niveau du dôme à 52 m, soit 3 m en-dessous de la sortie de cheminée fictive. Enfin, certains détails géométriques des bâtiments n'ont pas été conservés ou furent simplifiés afin de faciliter le maillage en aval et de ne pas altérer sa qualité. Pour de plus amples informations sur ces simplifications, se reporter à Jamet (2005). La figure 3.5 représente la tranches 2-3 qui révèle les simplifications géométriques mises en oeuvre, notamment à travers l'assemblage de chacun des réacteurs avec la salle de machine correspondante, diminuant ainsi la surface libre avec l'atmosphère du réacteur. Ceci aura son importance quant à la modélisation du rejet diffus.



FIG. 3.5 : Géométrie de la tranche 2-3 du CNPE de Bugey et maillage autour de celle-ci pour les simulations Mercure (d'après Jamet (2005)).

Concernant les aspects topographiques, la zone autour des bâtiments est celle ayant la plus petite cote qui est prise comme référence. Le fleuve est quant à lui situé à une altitude relative constante de -4 m. Les principales zones de relief qui ont été retenues sont les suivantes :

- une première zone sur les flancs Est et Nord des aéroréfrigérants en forme de "boomerang".
- une seconde zone un peu plus au Nord des aéroréfrigérants d'une hauteur de 12.5 m à son sommet et 10 m pour sa majeure partie.
- une troisième zone située au Sud-Ouest du réacteur n°1 et constituée de deux buttes de hauteur respectives 6 et 14 m.
- une dernière zone, la plus importante, de l'autre côté du fleuve. Elle est caractérisée par une pente plus irrégulière, le niveau le plus bas étant le sol et le niveau le plus élevé atteignant

60 m à l'extrémité Sud-Est du domaine. Des lignes de niveau de 10 à 60 m avec un pas de 10 m ont été utilisées, les points constituant ces lignes provenant de plans fournis par EDF.

Le domaine ainsi constitué est représenté figures 3.6 à 3.7.



FIG. 3.6 : Représentation du domaine de calcul Mercure. L'origine du repère (0,0) est située au centre du bâtiment réacteur n°2. L'axe y est orienté dans la direction Sud-Nord et l'axe x dans la direction Est-Ouest



FIG. 3.7 : Visualisation de la surface du domaine de calcul Mercure - Zoom sur la zone de bâtiments. Les couleurs représentent les différents éléments.
Maillage

Le maillage global du domaine s'effectue en deux temps. Dans un premier temps, un maillage surfacique optimisé est réalisé au niveau du sol. Dans un second temps, il est procédé à une technique d'élévation du maillage surfacique jusqu'au sommet du domaine afin de créer le maillage 3D.

Une fois définis les points et lignes correspondant aux parois des bâtiments et aux zones de relief, le domaine est découpé en différents sous-domaines (Fig. 3.8) pour lesquels le maillage est traité indépendamment, ceci ayant pour intérêt de pouvoir à terme raffiner localement le maillage dans les zones d'intérêt. Ces zones ont idéalement des formes rectangulaires afin d'obtenir un maillage quadrangulaire le plus régulier possible.

L'utilisation de la technique de maillage frontal permet de s'affranchir de la contrainte lié à un nombre de noeuds pairs sur un contour à mailler et offre également la possibilité de relâcher le maillage loin des zones d'intérêt. Cette technique génère principalement des quadrangles dans le plan, mais également un nombre limité de triangles qui ne dépasse pas 5 % des éléments. Des boîtes ont ainsi été définies autour des bâtiments : pour le bâtiment réacteur UNGG, les tranches 2-3 et 4-5, les aéroréfrigérants ainsi qu'autour des zones de relief. Enfin, sur la rive Est du fleuve, les différentes zones de maillage sont délimitées par les lignes de niveau. Le maillage surfacique est alors réalisé de sorte que le raffinement soit satisfaisant dans les zones d'intérêt et que le relâchement au loin conserve autant que possible la finesse vers les bords et permette de représenter correctement le relief situé au Sud-Est du domaine.

La dernière étape consiste alors à réaliser des élévations successives de la surface du maillage au sol et à mailler par tranches entre chaque surface, ce qui nécessite techniquement d'effectuer des interpolations 3D entre deux côtés. Les différentes cotes des surfaces sont déterminées en fonction de la finesse recherchée au niveau du sol et de la hauteur des bâtiments. L'ultime phase est le recollement des tranches dans la verticale. Un schéma descriptif de la méthodologie ainsi mise en place est proposé (Fig. 3.8).



FIG. 3.8 : Représentation des trois étapes successives ayant permis de réaliser le maillage volumique du domaine de calcul correspondant au site du CNPE de Bugey : construction de la géométrie, des lignes et des points - maillage surfacique par la technique de quadrangulation frontale puis élévation du maillage par tranches sur la verticale.

Cette technique globale de maillage apporte une double flexibilité. Il est possible d'une part

de raffiner localement une zone d'intérêt, notamment autour des tranches 2-3 et 4-5, sans trop alourdir le maillage et d'autre part d'affiner la résolution dans la verticale en jouant sur le nombres de tranches comprises entre les plans fixes s'appuyant sur le relief ou les toits des bâtiments.

Le maillage initial comporte 900 000 cellules, la longueur élémentaire des mailles au niveau des bâtiments étant de l'ordre de 4 m.

3.3.2 Paramètres de simulation et conditions limites

Modélisation et initialisation des rejets

La méthode de rejet par termes sources est adoptée dans les deux configurations de rejet. Pour celui en sortie de cheminée, il est ainsi défini une boîte, constituée de cellules élémentaires, dont les dimensions caractéristiques sont au minimum celles correspondant à l'orifice d'évacuation de la cheminée. Le nombre de cellules dépendra du raffinement du maillage à ce niveau, nous reviendrons sur ce point et ses implications dans le paragraphe 3.5.2. Le rejet diffus à travers la paroi du réacteur n°2 est plus délicat à modéliser. Étant donné que les cellules s'appuyant sur les faces de bord appartenant à la surface de rejet présentent un volume quasi constant, le rejet fut réalisé à travers l'ensemble de ces cellules élémentaires en distribuant proportionnellement au volume de chacune d'entre elles le débit total. La surface de rejet total n'étant qu'une approximation de la surface réelle du fait des simplifications géométriques opérées dans le design des bâtiments, le rejet est modélisé pour une surface totale plus petite d'environ 30 % par rapport à celle considérée dans l'étude en soufflerie, la partie non prise en compte correspondant à un peu moins de la demi-section cylindrique faisant face au Nord.

Par ailleurs doivent être définies les conditions initiales du rejet : termes sources de masse $(Q_s \text{ en } kg.s^{-1})$, de mouvement (U_s, V_s, W_s) et de turbulence (k_s, ε_s) ainsi que la valeur initiale de la variance des fluctuations de concentration.

Pour le rejet diffus à travers la paroi du réacteur n°2, les conditions initiales du rejet sont simples puisque toutes les grandeurs dynamiques ainsi que la variance du scalaire concentration sont nulles.

Dans le cas du rejet en cheminée, l'interrogation porte sur la manière d'initialiser les variables turbulentes. Il existe plusieurs méthodes dans la littérature, en fonction de la connaissance que l'on peut avoir de l'écoulement en sortie de cheminée et de la discrétisation de la section de sortie dont on dispose. Par exemple, Bornoff & Mokhtarzadeh-Dehghan (2001) utilisent des profils très détaillés de la turbulence sur la section de sortie de la cheminée à partir de mesures réalisées en amont. Saïd *et al.* (2005) donne une valeur homogène sur la surface en fonction des caractéristiques moyennes de l'écoulement dans la cheminée alors connues. Enfin, König & Mokhtarzadeh-Dehghan (2002) déterminent la turbulence en introduisant une intensité de turbulence raisonnable. C'est cette dernière méthode que nous employons, adaptée à notre cas pour deux raisons. D'une part nous n'avons pas en possession des données précises sur l'écoulement en sortie de cheminée hormis la vitesse moyenne. D'autre part, nous ne bénéficions pas nécessairement d'une discrétisation suffisamment fine autour de la source pour imposer des conditions non uniformes sur celle-ci. Nous utilisons également la même valeur d'intensité turbulente I_s que celle appliquée par König & Mokhtarzadeh-Dehghan (2002) et qui est de 7 %, ce qui donne :

$$k_s = 0.5 (I_s W_s)^2 \approx 0.002 W_s^2,$$
 (3.3.1)

conduisant à une valeur proche de 0.85 $m^2 \cdot s^{-2}$ pour $W_s = 20.5 m \cdot s^{-1}$.

Le tau de dissipation associé ε_s peut alors être facilement déduit à partir de la valeur de k_s , en utilisant une échelle caractéristique de longueur l, soit :

$$\varepsilon_s = \frac{k_s^{3/2}}{l} \tag{3.3.2}$$

L'inconnue porte alors sur la longueur caractéristique à utiliser, déduite du diamètre hydraulique de la cheminée. Nous utilisons ici le diamètre de la cheminée (2.2 m), conformément à ce qui est suggéré par Demuren & Rodi (1987). La valeur de la dissipation ainsi déduite est de 0.35 $m^2.s^{-3}$.

L'initialisation des termes sources de turbulence au niveau du rejet comporte ainsi certaines incertitudes. Nous nous sommes cependant assurés par une analyse de sensibilité que celle-ci n'influait sur le jet que très localement, sans modifier les champs dynamiques et scalaires une centaine de mètres en aval.

Conditions limites

Conditions aux limites en entrée :

Le profil de vent est calé sur celui en entrée de la soufflerie, ce qui impose d'utiliser une rugosité identique à celle de la soufflerie au facteur d'échelle près, soit 0.04 m. Le profil logarithmique est alors imposé avec une référence de vitesse de $3.7 \ m.s^{-1}$ à 50 m d'altitude. Les profils de quantités turbulentes k et ε sont issus de l'application des formules classiques introduites dans le paragraphe 1.5.2. La vitesse de frottement est égale à celle extrapolée à partir des profils expérimentaux, soit 0.21 $m.s^{-1}$. Nous reviendrons sur la sensibilité aux conditions en entrée dans le paragraphe 3.5.4.

Autres conditions aux limites :

La sortie de domaine est une sortie libre, un gradient nul étant imposé pour toutes les variables. Les parois latérales sont affectées d'une condition de type symétrie. Pour le traitement de la paroi supérieure, la composante $\overline{u'w'}$ du tenseur de Reynolds, à travers le gradient de vitesse $\frac{\partial \overline{u}}{\partial z}$, est imposée à une valeur constante correspondant à celle du profil amont en équilibre. Au niveau du sol, les lois de couche limite rugueuse sont appliquées pour une rugosité constante de 0.04 m à l'exception du fleuve où la rugosité est prise égale à 0.5 mm. Les parois des bâtiments sont traitées également avec des lois rugueuses, les rugosités valant 0.005 m pour les aéroréfrigérants et 0.01 m pour les autres bâtiments.

Paramètres numériques :

Les simulations *Mercure* ont été réalisées avec la version 1.2 de *Mercure* sur des stations de travail (calculs mono-processeurs sur processeur Intel Xeon(TM) 3.4 GHz). La méthode de calcul en pas de temps, variable en temps et en espace, est adoptée pour un pas de temps de référence de 1 s. La convergence des champs dynamiques est obtenue pour approximativement 450 pas de temps, alors que celle des grandeurs scalaires nécessite 1000 pas de temps. Le temps C.P.U correspondant est de 1 jour environ pour le maillage initial contenant 900 000 éléments.

3.4 Description des simulations ADMS

3.4.1 Configurations pour la prise en compte des bâtiments

Etant donné la complexité liée à la présence de bâtiments pour l'étude de la dispersion sur le site de Bugey, plusieurs configurations ADMS ont été envisagées pour chaque direction de vent, en prenant en compte certains des bâtiments et en définissant, quand plusieurs bâtiments entrent en jeu, lequel d'entre eux est le bâtiment principal pour la dispersion. Il s'est avéré cependant difficile de prendre en compte la tranche 2-3, lieu même du terme source. Par ailleurs, les quatre

aéroréfrigérants ont été modélisés à l'aide d'un seul bloc. L'ensemble des configurations étudiées est fourni dans les tableaux 3.2 et 3.3 pour les deux directions de vent et l'annexe C en donne une illustration pour le vent de Sud.

	SUD					
Configuration	UNGG	tranche 2-3	tranche 2-3	aéroréfrigérants		
BUsud1	-	-	BP	-		
BUsud2	-	-	BP	В		
BUsud3	-	-	В	BP		
BUsud4	-	В	BP	В		
BUsud5	-	В	В	BP		
BUsud6	-	-	-	-		

TAB. 3.2 : Configurations ADMS étudiées pour la modélisation de la dispersion par vent de Sud (- : bâtiment non modélisé ; B : bâtiment pris en compte ; BP : bâtiment pris en compte et désigné comme principal pour la dispersion).

	NORD				
Configuration	UNGG	tranche 2-3	tranche 2-3	aéroréfrigérants	
BUnord1	BP	-	-	-	
BUnord2	BP	-	В	-	
BUnord3	BP	-	-	В	
BUnord4	В	-	-	BP	
BUnord5	В	-	В	BP	
BUnord6	BP	-	В	В	
BUnord7	-	-	-	-	

TAB. 3.3 : Idem Tab. 3.2 pour la direction de vent de Nord.

Néanmoins, dans la présentation des résultats, nous ne retiendrons qu'une seule de ces configurations pour simplifier la discussion, sachant que les différences observées s'opèrent essentiellement dans la zone des bâtiments, région pour laquelle ADMS présente le plus d'écarts par rapport aux mesures. Dans le sillage induit par l'ensemble des bâtiments, les résultats s'avèrent extrêmement proches. La figure 3.9, qui décrit l'évolution des CTA avec la distance à la source pour le rejet à la cheminée, illustre cette remarque. Nous avons représenté les deux configurations qui présentent le plus grand écart dans la zone bâtie, sachant que la sensibilité des résultats dépend quasiment exclusivement du choix du bâtiment principal. Ces deux configurations sont ainsi "BUsud4" et "BUsud5", comparées au cas en terrain plat. Le choix pour la comparaison dans le cadre du manuscrit s'est porté vers la configuration **"BUsud5"**. Il semblait en effet important de caractériser au mieux la dispersion en aval des bâtiments sachant que la modélisation à l'intérieur de la zone bâtie ne pouvait être idéale, et de spécifier ainsi le bloc des aéroréfrigérants comme bâtiment influençant le plus la dispersion.

Par vent de Nord, les configurations suivantes ont été envisagés :

- prise en compte du bâtiment UNGG uniquement : configuration "BUnord1".
- prise en compte de la tranche 4-5 et du bâtiment UNGG, le bâtiment UNGG étant défini comme bâtiment principal pour la dispersion : configuration "BUnord2".
- prise en compte des aéroréfrigérants et du bâtiment UNGG, le bâtiment UNGG étant défini comme bâtiment principal pour la dispersion : configuration "BUnord3".



FIG. 3.9: {Évolution du maximum de CTA dans l'axe du panache pour le rejet en cheminée et la direction de vent de Sud issue des simulations ADMS pour les configurations "BUsud4" (UNGG - tranche 4-5 (principale pour la dispersion) - bloc des aéroréfrigérants), "BUsud5" (UNGG - tranche 4-5 - bloc des aéroréfrigérants (principal pour la dispersion)) et "BUsud6" (terrain plat)

- prise en compte des aéroréfrigérants et du bâtiment UNGG, les aéroréfrigérants étant définis comme bâtiment principal pour la dispersion : configuration "BUnord4".
- prise en compte de tous les bâtiments à l'exception de la tranche 2-3, les aéroréfrigérants étant définis comme bâtiment principal pour la dispersion : configuration "BUnord5".
- prise en compte de tous les bâtiments à l'exception de la tranche 2-3, le bâtiment UNGG étant défini comme bâtiment principal pour la dispersion : configuration "BUnord6".
- aucun bâtiment, terrain plat : configuration "BUnord7".

De manière analogue, nous ne retenons qu'une seule des configurations dans la présentation des résultats à travers le cas **"BUnord6"** qui prend en compte l'ensemble des bâtiments.

3.4.2 Paramètres de calcul

Les simulations ADMS sont réalisées pour un traceur passif, en utilisant un rejet ponctuel et en définissant une grille aux dimensions de la maquette avec une résolution de 50 m dans la direction Nord-Sud et 20 m dans la direction Est-Ouest. Les conditions météorologiques sont celles correspondant au cas traité soit une vitesse de vent à 50 m de $3.7 m.s^{-1}$ et une stratification neutre que l'on impose en fixant le flux radiatif net au sol à une valeur nulle. La hauteur de couche limite est calculée par le logiciel et vaut près de 800 m.

Les simulations sont réalisées pour une durée de 10 minutes ("short term simulation"). Cette durée est justifiée par le fait qu'elle est a priori représentative de l'expérience en soufflerie et des simulations Mercure, au sens où sont reproduites les mêmes échelles spatio-temporelles de la turbulence. Prendre un temps de simulation plus long entraîne la prise en compte d'échelles de turbulence d'ordre supérieur et conduit d'un point de vue physique à une dispersion plus importante du panache dans l'espace, induisant ainsi des concentrations maximales dans l'axe moins élevées et un panache plus étalé à la fois transversalement et verticalement. Néanmoins, un facteur "correctif" peut permettre de passer d'une durée de simulation à une autre dans l'estimation des maximums de concentration.

Les calculs des fluctuations n'étant pas permis dans la version 3.3 du logiciel lorsque sont définis un ou plusieurs bâtiments dans le domaine, ceux-ci furent nécessairement réalisés en terrain plat sans bâtiments, pour les deux types de rejet. Pour se placer dans le même cadre comparatif que la soufflerie et les simulations *Mercure*, ces résultats ne seront pas discutés au cours de ce chapitre.

3.5 Étude détaillée de la dispersion pour le rejet en cheminée par vent de Sud

Nous consacrons une section entière à la description de la modélisation de la dispersion pour le cas particulier du rejet au niveau de la cheminée du réacteur n°3 par vent de Sud. Les autres rejets seront ensuite décrits de manière plus succincte. Une première partie est dédiée à l'analyse des champs cinématiques fournis par *Mercure* et de leur comparaison aux mesures en soufflerie. Une seconde partie analyse comparativement les champs moyens de concentration des modèles *Mercure* et ADMS toujours par rapport aux données soufflerie. Enfin nous terminerons cette étude détaillée par l'analyse des champs de fluctuations de concentration donnés par *Mercure* puis fournirons les principales conclusions des tests de sensibilité réalisés.

3.5.1 Analyse des champs dynamiques

Nous fournissons dans cette sous-section une analyse des champs dynamiques fournis par *Mercure* concernant l'écoulement autour de la centrale par vent de Sud, en terme de champs de vitesse et de quantités turbulentes. Dans une première approche qualitative, nous donnons les principales caractéristiques de l'écoulement puis de manière plus quantitative nous comparons *Mercure* aux résultats issus de l'expérience en soufflerie au moyen des profils verticaux et transverses situés en amont de la centrale, au sein de la zone de bâtiments puis en aval de celle-ci dont la localisation a été illustrée par la Figure 3.4.

Description des caractéristiques de l'écoulement

L'analyse qualitative des champs cinématiques permet de scinder le domaine de calcul en trois zones distinctes :

- une première zone en amont des bâtiments et de la zone de rejet pour laquelle les profils initiaux de vitesse et d'énergie cinétique turbulente (TKE) entrés en conditions limites restent développés et maintenus jusqu'à leur approche (Fig. 3.10).
- une zone affectée par les bâtiments où l'on observe un déficit de vitesse (Fig. 3.10(a)) et de multiples zones secondaires avec un déficit encore plus prononcé. Il est par ailleurs constaté un accroissement global du niveau de turbulence issue de sa production locale par les bâtiments.
- une zone en aval des bâtiments qui reste influencée par la modification de l'écoulement engendrée par le sillage de grande échelle.

La figure 3.11 permet également de mettre en évidence, sur une coupe horizontale, l'effet global des bâtiments sur l'écoulement à travers la création d'un effet de sillage de grande échelle caractérisé par un déficit de vitesse et une augmentation de la turbulence.

Si l'on se focalise sur la zone intermédiaire constituée des bâtiments, on y observe un écoulement particulièrement complexe résultant de l'interaction de multiples sillages secondaires et recirculations à hauteur des bâtiments. La figure 3.12 rend compte de la complexité de l'écoulement dans la zone des bâtiments. Elle montre l'influence de la présence de l'ancien réacteur





FIG. 3.10 : Plan de coupe vertical perpendiculaire à la surface pris en x = 0 pour la direction de vent de Sud permettant de visualiser a) le champ de vitesse en $m.s^{-1}$ (module), b) l'énergie cinétique turbulente (TKE) en $m^2.s^{-2}$.

UNGG puis des deux bâtiments réacteurs REP sur l'écoulement. L'écoulement "s'enroule" en effet autour de ces bâtiments avant d'atteindre les aéroréfrigérants. Ainsi, l'on observe dans un premier temps un enroulement entre le bâtiment UNGG et la tranche 2-3 avec un écoulement s'établissant d'Est en Ouest. On note par ailleurs que le vent s'engouffre entre les tranches 2-3 et 4-5, induisant cette fois un écoulement local d'Ouest en Est, quoique plus faible. Le contournement du dernier bloc provoque une importante déviation vers l'Ouest de l'écoulement avant la zone des aéroréfrigérants en contournant chacun d'entre eux. Même si les structures dynamiques sont décrites ici de manière bidimensionnelle, il faut savoir que celles-ci sont de nature tridimensionnelle. Par ailleurs, des recirculations apparaissent nettement : entre les différents bâtiments (cf Fig. 3.13 qui met en évidence deux recirculations successives entre le réacteur n°3 et la salle des machines du réacteur n°5), entre les réacteurs et même en aval des aéroréfrigérants.

Comparaison des champs Mercure aux données en soufflerie

Les figures 3.14, 3.15, 3.16, 3.17 décrivent l'évolution des profils verticaux et transverses de vitesse longitudinale et des fluctuations de vitesse associées, le long de l'axe y, respectivement pour l'étude en soufflerie et issus des champs dynamiques *Mercure*. La comparaison des profils verticaux de vitesse (Figure 3.14) montre que les principales caractéristiques de l'écoulement se retrouvent à la fois dans les mesures et le calcul, à savoir :

- un déficit global en vitesse une fois la zone de bâtiments atteinte par rapport au profil amont.
- un écoulement totalement perturbé en aval immédiat du dernier aéroréfrigérant (y = 850 m).
- un écoulement restant perturbé en aval des aéroréfrigérants avec l'observation d'un profil non-logarithmique. Le profil tend toutefois vers un nouvel équilibre non atteint en fin de domaine.

Des différences sont néanmoins observées, que nous résumons à travers les points suivants :



FIG. 3.11 : Plan de coupe horizontal à z = 50 m pour la direction de vent de Sud permettant de visualiser a) le champ de vitesse en $m.s^{-1}$ (module), b) l'énergie cinétique turbulente (TKE) en $m^2.s^{-2}$.



FIG. 3.12 : Plan de coupe horizontal situés à z = 50 m et vue tridimensionnelle des bâtiments pour la direction de vent de Sud avec projection du vecteur vitesse sur ce plan, coloré en intensité $(m.s^{-1})$: illustration de l'écoulement autour des différents bâtiments du site.



FIG. 3.13 : Plan de coupe vertical perpendiculaire au sol en x = 0 pour la direction de vent de Sud avec projection du vecteur vitesse sur ce plan, coloré en intensité $m.s^{-1}$: illustration des deux recirculations successives situées entre le réacteur n°3 et la salle des machines du réacteur n°5.

- le déficit de vitesse après le passage dans la zone bâtie est plus important pour Mercure (par exemple nous observons à la distance y = 1150 m une vitesse proche de 3 $m.s^{-1}$ à 50 m d'altitude d'après l'étude expérimentale contre moins de 2 $m.s^{-1}$ pour Mercure), tout comme la ré-accélération du profil en aval des aéroréfrigérants.
- La modification des profils en basse-couche est plus accentuée avec *Mercure* avec des profils scindés en deux à la hauteur des aéroréfrigérants, la partie basse se rapprochant d'une droite.
- La vitesse en sommet de domaine est maintenue par *Mercure* alors que le déficit de vitesse affecte également la partie haute du profil dans le cas expérimental. Cet écart tient sûrement à la différence de nature de conditions limites au sommet.



FIG. 3.14: Comparaison de l'évolution des profils verticaux de vitesse longitudinale $(m.s^{-1})$ le long de l'axe y = 0 pour la direction de vent de Sud

Pour la comparaison des fluctuations de vitesse longitudinale, nous utilisons la définition de la composante $-\overline{\rho u'u'}$ du tenseur de Reynolds, en récupérant les valeurs de TKE et les gradients longitudinaux de vitesse, ainsi qu'il est réalisé dans Coirier *et al.* (2006) :

$$-\overline{\rho u'u'} = 2\mu_t \frac{\partial \overline{u}}{\partial y} - \frac{2}{3}\overline{\rho}k \qquad (3.5.1)$$

La Figure 3.15, qui compare les profils verticaux, conduit aux observations suivantes :

- Le niveau général des fluctuations est comparable.
- Les profils amont (en y = -750 m) sont similaires, même s'ils sont plus uniformes pour *Mercure*.
- Une assez bonne concordance apparaît entre les bâtiments (y = 120, 200 et 450 m) où un pic d'intensité apparaît entre le sol et la hauteur maximale des bâtiments correspondant à la production de TKE par ces derniers. Néanmoins, les valeurs semblent légèrement en-deçà pour *Mercure*, notamment en très basse couche.
- La production de turbulence à l'intérieur du bloc d'aéroréfrigérants est bien retranscrite par *Mercure* bien qu'atteignant des valeurs plus faibles. En revanche, l'écart est plus important dans le sillage des aéroréfrigérants avec un maximum plus faible pour *Mercure* et une décroissance plus importante entre l'altitude correspondant à ce maximum et le sol.



FIG. 3.15: Comparaison de l'évolution des profils verticaux de l'écart-type de vitesse longitudinale $\sqrt{u'^2}$ $(m.s^{-1})$ le long de l'axe y = 0 pour la direction de vent de Sud.

• Plus en aval, dans le sillage global, nous notons que le niveau maximum atteint est identique (entre 0.45 et 0.5 $m.s^{-2}$) mais la différence tient au fait que le profil expérimental est uniforme entre le sol et une altitude proche de 150 m alors qu'une décroissance est observée pour *Mercure* entre l'altitude du maximum et le sol.

Les figures 3.16 et 3.17 permettent de poursuivre l'analyse pour les profils transverses mesurés et calculés à l'altitude z = 50 m, en apportant certains éléments nouveaux et en confirmant les observations mentionnées ci-dessus. Pour les profils de vitesse, nous notons les points suivants :

- l'évolution des profils est globalement cohérente entre l'étude en soufflerie et les résultats fournis par *Mercure*.
- des différences s'observent dans le milieu bâti dans la description des perturbations locales de l'écoulement engendrées par les bâtiments (à 160 et 450 m). Notamment, certains pics de vitesse ne correspondent pas exactement.
- le déficit extrême de vitesse observé à 1150 m et situé quasiment en x = 0 est plus important dans le cas de *Mercure* (0.5 $m.s^{-1}$) que pour l'étude en soufflerie (proche de 0.8 $m.s^{-1}$). De même, le déficit est plus net plus loin en aval correspondant à des profils présentant une "courbure" plus marquée autour de l'axe central alors qu'ils apparaissent plus uniformes avec un extrême moins marqué dans le cas expérimental.

Les profils transverses d'écart-type de vitesse longitudinale, pris à la hauteur moyenne des bâtiments (z = 50 m) (Fig. 3.17), montrent une nouvelle fois certaines similitudes, notamment dans la délimitation de la zone où sont observées les augmentations de $\sqrt{u'^2}$ (soit entre -400 m et 300 m dans la direction latérale) et le niveau général atteint par les fluctuations, notamment dans le sillage des aéroréfrigérants. Les différences concernent l'obtention d'une seul maximum localisé globalement le long de l'axe x = 0 d'après les mesures, sauf en aval des aéroréfrigérants où l'on dénombre deux pics, alors que plusieurs maximums apparaissent selon *Mercure* à la fois entre les bâtiments (y = 160 et 450 m) et en aval des aéroréfrigérants (y = 850 m). Nous retrouvons encore le pic en y = 160 m et x = 200 m qui n'apparaît pas sur les profils mesurés.

Cette première analyse peut être complétée par la comparaison élémentaire de chacun des profils verticaux et transverses. Le lecteur pourra ainsi trouver en Annexe D l'ensemble des figures



FIG. 3.16: Comparaison de l'évolution des profils transverses de vitesse longitudinale $(m.s^{-1})$ le long de l'axe y = 0 pour la direction de vent de Sud.



FIG. 3.17 : Comparaison de l'évolution des profils transverses d'écart-type de vitesse longitudinale $\sqrt{u'^2}$ $(m.s^{-1})$ le long de l'axe y = 0 pour la direction de vent de Sud.

comparant *Mercure* et l'étude en soufflerie pour chacun d'eux. Nous fournissons ici certains profils caractéristiques révélant les cohérences ou dissemblances entre les simulations *Mercure* et les mesures.



FIG. 3.18 : Comparaison des profils verticaux de vitesse longitudinale U (en $m.s^{-1}$) et d'écart-types de vitesse longitudinale $\sqrt{u'^2}$ (en $m^2.s^{-2}$) en y = -750 m et x = 0 (en amont des bâtiments) entre Mercure et les données soufflerie.

La figure 3.18 montre que les profils *Mercure* de vent et d'énergie cinétique turbulente (TKE) sont maintenus dans la zone située en amont des bâtiments et restent ainsi en bonne adéquation avec les profils mesurés.

Les figures 3.19 et 3.20 révèlent la bonne description de l'écoulement par *Mercure* dans des zones complexes. Pour le premier emplacement situé en aval de la tranche 4-5, nous observons dans les directions verticale et horizontale une bonne concordance des profils, à la fois dans la localisation des structures que dans les intensités. Notons toutefois que la correspondance est moins bonne dans les premières dizaines de mètres au-dessus du sol où l'on commence à deviner l'affaissement plus prononcé du profil de vitesse dans le cas de *Mercure* ainsi qu'un déficit de turbulence à proximité immédiate du sol. Le second emplacement est localisé juste en aval du dernier aéroréfrigérant. Les profils y sont encore en relativement bonne adéquation bien qu'apparaît un écart concernant la valeur de la vitesse minimale au point de déflexion, plus faible pour *Mercure*. De plus, le pic de turbulence observé dans l'axe du dernier aéroréfrigérant est nettement moins marqué avec *Mercure*.

La figure 3.21 est caractéristique des différences observées dans le sillage dû à la zone bâtie et est intéressante pour la suite de l'étude portant sur la dispersion. En dehors du déficit de vitesse déjà observé, cette figure montre l'existence d'une composante non nulle et négative de la vitesse transverse, et donc d'une déviation vers l'Est de l'écoulement, qui n'apparaît pas pour les simulations *Mercure*. Elle met par ailleurs en évidence l'existence d'une composante verticale dirigée vers le sol qui s'amplifie jusqu'à une centaine de mètres d'altitude avant de rester uniformément constante à une valeur proche de $0.5 \ m.s^{-1}$. Cette singularité observée dans une zone dépourvue de bâtiments pose question. Après consultation des expérimentateurs, il nous a été suggéré que la perturbation pouvait être induite par la présence du chariot de mesure, nécessairement à la verticale du point de mesure, que l'écoulement doit naturellement contourner. Ce fait est non sans importance et sera pris en considération dans la suite de ce chapitre. Enfin, nous retrouvons le déficit de turbulence en basse-couche qui tend à se réduire progressivement le long de l'axe y.



(a) Profil vertical en y = 450 m et x = 0



(b) Profil transverse en y = 450 m et z = 25 m

FIG. 3.19 : Comparaison des profils verticaux et transverses pour les trois composantes de la vitesse U, V, et W (en $m.s^{-1}$) et les écarts-types de vitesse longitudinale $\sqrt{u'^2}$ (en $m^2.s^{-2}$) en y = 450 m (en aval de la tranche 4-5) issues des simulations Mercure et des données soufflerie, pour la direction de vent de Sud. Le trait continu rouge en gras correspond au profil pris exactement en x = 0, les traits discontinus représentant les profils localisés entre l'origine et $\Delta x = \pm 40$ m.



(a) Profil vertical en y = 850 m et x = 0



(b) Profil transverse en y = 850 m et z = 100 m

FIG. 3.20 : Idem Fig. 3.19 mais en y = 850 m.



FIG. 3.21 : Idem Fig. 3.19 en y = 1450 m.

3.5.2 Analyse des champs moyens de concentration

Nous présentons dans cette sous-section l'ensemble des résultats sur la modélisation de la dispersion du panache émis au niveau de la cheminée du réacteur n°3 pour le vent venant du Sud, à travers la comparaison des champs moyens de concentration issus des simulations *Mercure* et ADMS, ainsi que de l'étude en soufflerie.

Méthodologie de comparaison des résultats

Les concentrations seront présentées en terme de Coefficients de Transfert Atmosphérique (CTA) et exprimées en $s.m^{-3}$. Soit C la fraction massique (ou volumique) du constituant émis. La similitude sur les champs de concentration permet d'écrire l'identité des paramètres sans dimension suivants :

$$\left(\frac{U.C.L^2}{q}\right)_{site} = \left(\frac{U.C.L^2}{q}\right)_{soufflerie}$$
(3.5.2)

où U et L sont respectivement des échelles caractéristiques de vitesse et de longueur pour chacun des cas et q le taux d'émission en $m^3 \cdot s^{-1}$.

En terme de CTA, l'égalité précédente s'écrit :

$$CTA_site = \left(\frac{C}{q}\right)_{soufflerie} \frac{\left(U.L^2\right)_{soufflerie}}{\left(U.L^2\right)_{site}}$$

$$(3.5.3)$$

avec : $\left(\frac{C}{q}\right)_{soufflerie} = CTA_s oufflerie$

Caractéristiques du rejet

Le rejet en cheminée (Fig. 3.22) libère les effluents en altitude, où la vitesse du vent est plus élevée et l'effet des bâtiments moins important. Ceci est notamment visible sur la Figure 3.23 qui montre que les recirculations entre le réacteur n° 3 et la salle des machines du réacteur n° 5 n'entraînent pas de matière à l'intérieur de celles-ci. Une trace au sol apparaît à partir du réacteur n° 5, ce que montrent conjointement le tracé des iso-contours de concentration au niveau du sol pour l'étude en soufflerie (Fig. 3.24(b)) et la visualisation de l'impact du panache au sol dans le cas de Mercure (Figure 3.24(a)). Le panache atteint ensuite les aéroréfrigérants qui induisent un mélange intense et également participer au rabattement de celui-ci en direction du sol. Sur ces mêmes figures, nous distinguons une zone de concentrations maximales située au niveau du dernier aéroréfrigérant rencontré par l'écoulement, cette zone étant plus étendue et localisée exclusivement en aval de l'aéroréfrigérant pour Mercure. La zone de maximums de concentrations est localisée plus en aval des aéroréfrigérants pour les simulations ADMS (cf Annexe C). Ceci est à la fois vrai dans le cas sans bâtiments et pour le scénario "BUsud5" où sont pris en compte tous les bâtiments (le bloc représentant les aéroréfrigérants est le bâtiment "principal"), pour lequel on relève une zone de maximum à une distance correspondant à la longueur de recirculation en aval du bloc d'aéroréfrigérants.

Nous observons par ailleurs dans les deux cas que la panache reste globalement dans l'axe du rejet en aval des aéroréfrigérants. Nous notons toutefois une légère déviation vers l'Est pour l'essai en soufflerie et une très légère déviation vers l'Ouest dans le cas *Mercure*. Cette remarque corrobore celle apparaissant dans le rapport du CEA sur ce cas d'étude avec les modèles CFD Trio-U et Star-CD (Roubin (2005) et Roubin (2006)). Cette déviation vers l'Est dans la soufflerie est directement connectée à la déviation dans cette même direction de l'écoulement mise en évidence dans l'analyse des champs cinématiques.



FIG. 3.22 : Coupe dans le plan du rejet du champ de concentration exprimé en CTA (s.m⁻³) pour le rejet en cheminée et la direction de vent de Sud.



FIG. 3.23 : Coupe dans le plan du rejet et projection des vecteurs vitesses sur ce plan colorés en concentration pour le rejet en cheminée et la direction de vent de Sud.

Phase d'élévation du panache

La description de la phase d'élévation du panache près de la source pour un rejet surélevé est est un élément essentiel. D'après les remarques ci-dessus, le rejet a lieu à une hauteur suffisamment élevée pour qu'il ne soit que relativement peu affecté par les structures d'écoulement entre les bâtiments. Une difficulté inhérente au modèle *Mercure* est d'atteindre un niveau de résolution suffisamment fin au niveau de la source pour décrire correctement cette phase ascensionnelle. Nous proposons ici de voir quelles en sont les caractéristiques en regard des formulations semiempiriques existantes et quelles sont les possibilités offertes par le *Mercure* pour parvenir à une meilleure résolution.

Nous revenons dans un premier temps sur l'approche théorique s'appliquant à la phase d'élévation. La trajectoire du panache en sortie de cheminée est non seulement influencée par les conditions thermiques et aérodynamiques locales mais également par ses propres quantité de mouvement et flottabilité à la source. Il existe ainsi une région pour laquelle le panache s'élève graduellement sous l'effet conjugué du mouvement vertical impulsé à l'origine (selon les conditions de vent et de turbulence) et de sa flottabilité. La formulation gaussienne originale ne prenant pas en compte ces effets, des théories ont parallèlement été élaborées afin d'estimer la hauteur d'élévation du panache en fonction des conditions de rejet, également appelée surhauteur, ainsi que la trajectoire propre au panache dans cette région d'élévation. Ces théories s'avèrent primordiales puisqu'une erreur sur la hauteur effective H du panache peut conduire à d'importants écarts en terme de concentration jusqu'au niveau du sol (le maximum de concentration au sol est en effet inversement proportionnel à H^2). Ces théories remontent au milieu des années cinquante parmi lesquelles Briggs a apporté une contribution importante en ébauchant progressivement une théorie complète (1969, 1971, 1975, 1984, d'après Arya (1999)). Nous pouvons citer également les travaux de Pasquill et Smith (1983) et Weil (1988).

Briggs employa dans un premier temps une approche fondée sur l'analyse dimensionnelle et la



(a) Mercure

(b) Soufflerie

FIG. 3.24 : Trace au sol du champ de concentration exprimé en CTA (s.m⁻³) pour le rejet en cheminée et la direction de vent de Sud : a) : simulations Mercure, b) : mesures en soufflerie (in Mejean (2003).

théorie de similitude pour mettre en oeuvre une table de formulations en fonction des conditions de rejet des effluents et des conditions météorologiques et faisant intervenir des paramétrisations empiriques. Ces formulations s'avérèrent en bonne adéquation avec les observations et les modèles théoriques fondés sur la résolution des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Elles constituent une autre approche ayant abouti aux lois dites en "1/3" et "2/3", respectivement pour une trajectoire dominée par l'influence de la condition initiale sur la vitesse verticale et par les effets de flottabilité. Sous l'influence prépondérante de la quantité de mouvement en sortie de cheminée, comme c'est le cas dans notre étude, le paramètre essentiel est le flux de quantité de mouvement noté F_m qui s'écrit en fonction de la vitesse ascensionnelle W_s et de la densité ρ_s des effluents ainsi que du diamètre hydraulique D_s de sortie :

$$F_m = \left(\frac{\rho_s}{\rho}\right) \frac{D_s^2}{4} W_s^2 \tag{3.5.4}$$

Pour un traceur passif, on obtient : $F_m = \frac{D_s^2}{4} W_s^2$

Soit z_c l'altitude décrivant la trajectoire transitoire du panache étant définie comme le lieu des maximums de concentration dans l'axe du rejet. La loi en "1/3" s'écrit :

$$z_c \approx 2 F_m^{1/3} U_c^{-2/3} x^{1/3} \tag{3.5.5}$$

où U_c est la vitesse moyenne du vent au niveau du rejet. La loi paramétrée par Briggs (1975, 1984) donne :

$$z_c = \left[\frac{3}{\beta_m^2} \frac{F_m x}{U_c^2}\right]^{1/3}$$
(3.5.6)

avec $\beta_m \approx 0.4 + 1.2 \frac{U_c}{W_s}$

La turbulence d'origine mécanique limite l'élévation du panache, en diluant la quantité de mouvement issue de la source. Il existe ainsi une hauteur maximale atteinte par le panache correspondant à l'abscisse z_{max} qui est nommée surhauteur et notée Δ_H . Pour un rejet dominé par sa quantité de mouvement initiale, celle-ci a été estimée par Briggs, d'abord par simple analyse dimensionnelle (1968) :

$$\Delta_H \approx 3.0 F_m^{1/2} U_c^{-1} \tag{3.5.7}$$

Il en a donné ensuite une version plus précise à travers la formulation suivante (1975) :

$$\Delta_H \approx 1.5 \left(\frac{F_m}{U_c u_{**}}\right)^{1/2} \tag{3.5.8}$$

où u_{**} est équivalent à une vitesse de frottement définie à l'aide d'un coefficient C_f par : $u_{**}^2 = C_f U_c^2$, la valeur de C_f étant comprise entre 0.002 et 0.004 en fonction de la rugosité surfacique.

L'application de la formule (3.5.8) à notre cas du rejet en cheminée conduit à une surhauteur appartenant à l'intervalle [36.3; 43.5] en fonction de la valeur du coefficient C_f choisi, ce qui correspond à une hauteur effective totale comprise entre 91.3 m et 98.5 m.

La surhauteur déduite des profils verticaux de concentration en soufflerie et mesurés près du rejet (entre y = 100 m et y = 240 m) est très voisine de 35 m, correspondant à la limite inférieure de la plage de valeurs obtenue théoriquement. Elle est atteinte à une distance comprise entre 200 et 250 m. Les premières simulations réalisées avec *Mercure* pour le maillage initial ne permirent pas d'atteindre une surhauteur raisonnable par rapport à celle observée, avec un déficit de 15 m, soit presque moitié moins que la surhauteur observée. Ce déficit est dû au manque de résolution dans la description du jet puisque le terme source de masse ne comporte alors qu'une



(a) Maillage raffiné autour du rejet



FIG. 3.25 : Visualisation de la phase d'ascension initiale du panache à travers le champ de concentration exprimé en CTA (s.m⁻³) et obtenu pour un plan de coupe dans l'axe du rejet : a) rejet modélisé en imposant la surhauteur et en ne conservant qu'une seule cellule de rejet, b) rejet modélisé à l'aide de 8 cellules prises comme termes sources pour un maillage raffiné localement dans la zone de rejet.

seule cellule, similaire à un cube de 4 m de côté, valeur presque deux fois supérieure au diamètre réelle de la cheminée. Une conséquence directe est l'entraînement d'une partie du panache dans les recirculations entre les bâtiments, se traduisant par des valeurs au sol significatives à partir de 300 m.

En vue de pallier ce problème, les possibilités suivantes ont été envisagées :

- l'utilisation du même maillage en prenant en compte la surhauteur du rejet à l'origine, c'est à dire en décalant la cellule de rejet d'environ 35 m dans la verticale, en accord avec la surhauteur calculée par Briggs, ceci en fonction de l'extension verticale du maillage. Les termes sources dynamiques sont alors nécessairement supprimés.
- l'utilisation d'un nouveau maillage, plus fin, notamment au niveau du rejet.

Pour cette dernière option, deux techniques ont été retenues en tenant compte des contraintes propres au maillage :

- la réalisation d'un maillage dit "intermédiaire" issu à la fois d'un raffinement surfacique du maillage dans la zone des bâtiments (et contenant ainsi le rejet) et d'un raffinement dans la verticale en augmentant le nombre de tranches appartenant à la couche contenant le rejet. Cette technique a permis d'atteindre une longueur caractéristique de cellule de 2 m dans cette zone, le rejet étant alors représenté par une seule cellule mais de dimension identique à celle de la cheminée. Le maillage global est alors constitué de près de 1.500.000 cellules, ce qui est très proche du maximum permis pour le calcul mono-processeur sur station de travail.
- la réalisation d'un maillage raffiné localement au niveau du rejet, en utilisant les possibilités de maillage non structuré et non conforme, pour mieux capturer la trajectoire initiale du panache. Une boîte a ainsi été définie s'étendant jusqu'à 300 m en aval du rejet et jusqu'à 40 m dans la verticale depuis le point de rejet. Chacun des éléments de cette boîte a été découpé en 16 éléments identiques permettant de décrire le rejet à l'aide de 8 cellules quasicubiques de 1 m de côté. Ce maillage contient 1.150.000 éléments. L'amélioration apportée par ce maillage est illustrée par la figure 3.25.

3.5 Étude détaillée de la dispersion pour le rejet en cheminée par vent de Sud 116

La figure 3.26 permet de suivre l'évolution du profil vertical de concentration dans la zone d'ascension du panache pour les différentes solutions retenues. Elle met en évidence différentes points :

- Le maillage raffiné localement permet d'atteindre une surhauteur de 30 m vers 150 m. La phase d'ascension est donc légèrement raccourcie par rapport à celle observée, entraînant un déficit de 5 m sur la surhauteur. Toutefois, le gain substantiel par rapport à la configuration initiale et également par rapport aux résultats obtenus avec le maillage "intermédiaire" ne permet pas encore de décrire avec suffisamment de précision le jet, induisant un effondrement plus rapide du panache dans la zone bâtie (Fig. 3.26(b)).
- En terme de valeurs de concentration, nous remarquons que l'augmentation du volume (pour le maillage "intermédiaire") et du nombre de cellules de rejet (pour la maillage raffiné localement) va dans le sens d'une surestimation des concentrations le long de la trajectoire du panache très près de la source (Fig. 3.26(a)). Cette diffusion sous-estimée dans les premières dizaines de mètres s'atténue progressivement, les valeurs maximales étant progressivement en meilleure concordance avec les observations (Fig. 3.26(b)).



(a) Profil vertical en y = 120 m et x = 0 (b) Profil vertical en y = 300 m et x = 0

FIG. 3.26 : Profils verticaux de concentration en CTA $(s.m^{-3})$ pris en x = 0 pour les différentes modélisations de la phase de rejet (cercles bleus : maillage raffiné localement autour de la zone de rejet définissant 8 cellules comme termes sources, croix noires et ligne verte : maillage intermédiaire avec une seule cellule de rejet, ligne rouge : surhauteur imposée à la valeur théorique estimée). a) : en y = 120 m, b) : y = 300 m.

Nous introduisons maintenant dans notre comparaison les résultats issus des simulations ADMS. Les figures 3.27 a et b comparent ainsi les profils obtenus avec *Mercure*, pour les cas avec maillage localement raffiné et surhauteur imposée, et ADMS, pour la configuration "BUsud5", aux mesures. Nous pouvons formuler les remarques suivantes :

- l'ascension du panache se fait plus lentement pour ADMS, avec une nette sous-estimation de la hauteur du panache à 120 m (Fig. 3.26(a)). Néanmoins, la surhauteur finale est atteinte à une distance équivalente à celle observée dans l'essai en soufflerie et est sensiblement égale (35 m) (Fig. 3.27(b)).
- une sous-estimation progressive des maximums le long de la trajectoire du panache apparaît (Figures 3.27 a et b), ADMS fournissant les CTA les plus faibles à 300 m.



(a) Profil vertical en y = 120 m et x = 0

(b) Profil vertical en y = 300 m et x = 0

FIG. 3.27 : Profils verticaux de concentration en CTA $(s.m^{-3})$ pris en x = 0 respectivement pour le modèle Mercure avec la surhauteur calculée (points bleus), le modèle Mercure avec la surhauteur imposée (croix vertes), ADMS (trait continu rouge) et l'essai en soufflerie (carrés noirs)

Dispersion dans la zone de bâtiments

Nous décrivons ici quelques profils situés en aval de la tranche 4-5 et entre les aéroréfrigérants (Fig. 3.28), localisations où la dispersion du panache est sensiblement influencée par ces obstacles. Nous notons une meilleure adéquation entre *Mercure* et les mesures en soufflerie pour les profils situés en y = 400 m (Fig. 3.28(a) et 3.28(b)), due à une meilleure estimation du rapport entre la diffusion du panache dans la verticale et celle dans l'horizontale. ADMS, de son côté, semble disperser le panache de manière plus importante dans la direction transverse. La trace au sol en y = 450 m (Fig. 3.28(c)) montre que *Mercure* reproduit de manière identique le maximum de l'impact au sol mais la localisation diffère d'une centaine de mètre et le panache est moins évasé que dans le cas de la soufflerie. Les profils ADMS, de leur côté, ne montrent pas, ou très faiblement, l'impact au sol du panache dans cette zone, si bien que l'on peut s'attendre à une réelle sous-estimation des maximums de CTA au sol par ce modèle. Les comparaison en y = 625 m sont dépourvues des résultats ADMS puisque l'on se situe exactement à l'emplacement du bloc représentant pour ce modèle les quatre aéroréfrigérants. Néanmoins, ces profils sont intéressants car ils mettent en lumière la capacité de *Mercure* à décrire avec précision la dispersion dans une zone complexe, étant ici véritablement proche des observations.

Dispersion en aval des aéroréfrigérants

La figure 3.29 permet de suivre l'évolution des profils verticaux et des traces au sol en fonction de la distance à la source y à l'arrière immédiat des aéroréfrigérants puis plus en aval dans le domaine. Le bloc formé des quatre aéroréfrigérants dont celui placé dans le plan du rejet constitue une perturbation majeure dans la dispersion du panache et le sillage influence encore la dispersion plus en aval. D'une manière générale, nous observons une détérioration des résultats issus des simulations *Mercure* par rapport aux mesures en soufflerie au passage des aéroréfrigérants. Les différences juste en aval des aéroréfrigérants (Fig. 3.29(a) et) peuvent être expliquées en partie



(a) Profil vertical en y = 400 m et x = 0

(b) Profil transverse en y = 400 m et z = 100



(c) Trace au sol en y = 450 m



(d) Profil transverse en y $=625~{\rm m}$ et z $=25~{\rm m}$

(e) Profil vertical en y = 625 m et x = 0

FIG. 3.28: Profils de concentration exprimée en CTA $(s.m^{-3})$ issus des simulations Mercure, ADMS et de l'étude en soufflerie pris en aval de la tranche 4-5 (y = 400 m) et au milieu des aéroréfrigérants (y = 625 m)

par la moindre production de turbulence à leur niveau fournie par *Mercure* qui va dans le sens d'une moindre homogénéisation du profil dans la verticale. Plus en aval (Fig. 3.29(c) et), les causes de ces écarts peuvent trouver leur origine d'une part dans la légère sous-estimation de turbulence observée dans le sillage *Mercure* mais surtout dans le déficit en vitesse mis en évidence dans la partie sur la comparaison des champs cinématiques. Ces faits conduisent à un panache moins homogène dans la verticale et un peu moins étendu dans la direction transverse. Cette dernière remarque devient d'autant plus vraie lorsque l'on s'éloigne de la zone des bâtiments et que l'effet de sillage est moins marqué (Fig. 3.29(e) et). Nous observons alors un manque de diffusion latérale plus important, que l'on retrouve dans des cas de dispersion en terrain plat, ainsi qu'il l'a été mis en évidence dans l'étude sur la campagne Prairie-Grass (chapitre 3) et comme il a pu être noté sur des cas simples non présentés dans ce manuscrit de rejet surélevé sans bâtiments. Nous retiendrons ici que *Mercure* surestime d'un facteur 2 les maximums de CTA au niveau du sol.

Le modèle ADMS utilisé dans la configuration "BUsud5" traite quant à lui la dispersion de manière conforme à ce qui a été introduit dans la section 1.3.5. Le logiciel calcule une longueur de recirculation à l'arrière du bloc représentant les aéroréfrigérants (bloc AERO), et répartit la masse "entrante" en amont du bloc AERO dans les différentes zones du sillage. Ainsi, en y = 850 m, nous retrouvons la quantité attribuée à la zone de recirculation qui est répartie uniformément dans le volume considéré. On note alors une importante sous-estimation des CTA, supérieure à un facteur 3. Le maximum de concentration est atteint à la distance correspondant à la longueur de recirculation qui est ici proche de 350 m et qui coïncide ainsi avec le point de mesure y = 850 m. La trace au sol est à ce niveau en parfaite concordance avec le profil expérimental mais cette distance ne correspond pas au maximum de CTA pour la soufflerie. Plus en aval, une surestimation de la dispersion du panache dans les deux directions apparaît à nouveau, de la même manière que cela était vrai en amont du bloc AERO. Elle se traduit par un panache quasi uniforme dans la verticale et un écart-type latérale nettement supérieur et conduit également à une importante sous-estimation des maximums de concentration le long de l'axe de rejet, proche d'un facteur 2.

Impact du panache au sol

Nous rendons compte dans ce paragraphe de l'évolution de la trace au sol du panache depuis la source jusqu'en fin de domaine, à travers quelques variables souvent utilisées dans les études de la dispersion. Il s'agit du maximum de CTA au sol nommé ici C_{max} qui est pris en compte dans la définition des doses équivalentes à fournir aux autorités de sûreté, de la concentration intégrée dans la direction transverse à l'écoulement $C_y = \int_{-\infty}^{\infty} C(x) dx$ et de l'écart-type latéral σ_y dont une estimation est réalisée sur chacun des profils transverses au niveau du sol : $\sigma_y = \left[\int_{x_{min}}^{x_{max}} x^2 C(x) dx / \int_{x_{min}}^{x_{max}} C(x) dx\right]^{1/2}$. Notons qu'il est fait ici usage d'un abus de notation pour rester cohérents avec les notations de la bibliographie, notre axe principal étant en réalité l'axe y.

Nous retrouvons ici les principales remarques émises dans les paragraphes précédants, à savoir :

- un relativement bon comportement de Mercure en champ très proche illustré par une bonne correspondance sur les C_y (Fig. 3.30(b)) et des comparaisons correctes sur les C_{max} , (Fig. 3.30(a)), à l'exception du premier point qui correspond à l'affaissement un peu plus rapide du panache pour Mercure, induit par le léger écart sur la surhauteur. Nous noterons également que la trace au sol est plus étalée transversalement (Fig. 3.30(c))
- l'incapacité d'ADMS à rendre compte de l'influence des bâtiments (Fig. 3.30(a) et 3.30(b)).
- l'écart entre le modèle *Mercure* et l'essai en soufflerie apparaissant au passage des aéroréfrigérants, cet écart se fixant à un facteur 2 dans le sens d'une surestimation de la part de



(a) Profil vertical en y = 850 m et x = 0









(d) Trace au sol en y = 1150 m



(e) Profil vertical en y = 1450 m et x = 0

(f) Trace au sol en y = 1450 m

FIG. 3.29 : Profils verticaux et traces au sol de la concentration exprimée en CTA $(s.m^{-3})$ pris en x = 0 issus des simulations Mercure, ADMS et de l'étude en soufflerie en aval des aéroréfrigérants.





(a) Maximums de concentration exprimés en CTA (en $s.m^{-3})$

(b) Concentration C_y intégrée transversalement (en $s.m^{-2}$)



(c) Écart-type latérale de la dispersion (en m)

FIG. 3.30 : Comparaison des maximums de concentration C_{max} , de la concentration C_y intégrée transversalement et de l'approximation de l'écart-type latérale σ_y pris sur les traces au sol à différentes distances de la source issus des simulations Mercure et ADMS et de l'étude en soufflerie.

Mercure. Nous retrouvons également l'observation faite sur la moindre dispersion dans la direction latérale.

• le maximum de concentration trouvé en y = 1150 m pour ADMS, le modèle sous-estimant en aval les C_{max} d'un facteur 2, dû à une trop grande diffusion dans les deux directions.

3.5.3 Analyse des champs moyens d'écart-type de concentration

Nous présentons dans ce paragraphe les principaux résultats concernant la modélisation des écarts-type de concentration $\sqrt{c'^2}$, -encore dénommés rms de l'anglais root mean square)-, à l'aide de Mercure fondée sur la résolution de l'équation de transport sur la variance $\overline{c'^2}$. Nous n'intégrons pas ici les résultats issus des simulations ADMS, le mode de calcul propre à la version 3.3 ne permettant pas de prendre en compte les bâtiments. Nous faisons remarquer toutefois que les calculs réalisés en terrain dépourvu de bâtiments ont montré une sous-estimation significative des rms, ce résultat ne pouvant de fait être véritablement pris en considération.

Comparaison des champs Mercure aux données en soufflerie

Les résultats sont comparés aux fluctuations mesurées en soufflerie pour une valeur du paramètre D_f (éq. 1.4.52) de 0.5 et une initialisation de la rms à 10 % de la concentration moyenne.

La figure 3.31 représente l'évolution des profils verticaux et transverses le long de l'axe de rejet. La comparaison des profils *Mercure* à ceux mesurés révèle un assez bon accord près du rejet (Fig. 3.31(a) et 3.31(b)), à la fois en terme d'allure du profil (dans l'horizontale et la verticale), comparable à celui observé pour la concentration moyenne, qu'en terme d'intensité, en notant toutefois des valeurs plus élevées des maximums dans l'axe pour *Mercure*. Ces observations restent valables jusqu'à la zone des aéroréfrigérants où le déficit de turbulence peut expliquer les valeurs moins élevées dans la partie basse du profil vertical, soit en-dessous de la hauteur des aéroréfrigérants (Fig. 3.31(c)). Cependant, nous notons que les profils transverses sont en assez bonne concordance (Fig. 3.31(d)). Plus en aval (Fig.3.31(e) et 3.31(f)), nous remarquons des fluctuations plus grandes dans la verticale de la part de *Mercure*, l'écart entre les deux profils ayant tendance à s'accentuer le long de l'axe y. L'allure des profils verticaux est assez similaire même si le "ventre" n'est pas positionné exactement à la même altitude. Dans la direction transverse, le profil est moins étalé d'après *Mercure*, traduisant une moindre diffusion dans cette direction. Nous noterons qu'au niveau du sol l'écart sur les maximums est relativement restreint (de l'ordre de 30 %) et est inférieur à celui observé sur les maximums de concentration.

Influence de la paramétrisation de l'équation de transport sur les champs Mercure

Ainsi que nous l'avons introduit dans le paragraphe 1.4.4 du **chapitre 1**, la fermeture du terme de dissipation est un point délicat dans le traitement des différents termes de l'équation sur $\overline{c'^2}$ (éq. 1.4.48). Un moyen assez simple d'y parvenir est l'utilisation d'une échelle de temps caractéristique du taux de dissipation de la variance $\overline{c'^2}$, directement proportionnelle à celle de la turbulence par l'intermédiaire du coefficient D_f . Le questionnement porte alors sur la valeur attribuée à ce coefficient. Dans la plupart des domaines d'application de la CFD (notamment les écoulements internes), une valeur de 0.8 est très souvent utilisée. Cette valeur est également couramment utilisée par la communauté CFD atmosphérique. Cependant, certains auteurs, s'appuyant sur des observations *in situ* ou en laboratoire, estiment qu'une valeur plus faible peut conduire à une meilleure estimation du terme de dissipation (e.g. Hsieh *et al.* (n.d.)). Dans notre étude, les valeurs de 0.5, 0.6, 0.7 et 0.8 ont été testées. Dans cette comparaison, la valeur initiale de la variance est fixée à 0.01, soit une rms égale à 10 % de la concentration moyenne.

La figure 3.32 montre qu'une diminution de D_f entraîne une diminution des valeurs de rms, ce qui est logique puisqu'on introduit alors une augmentaion du terme puits dans l'équation de



(a) Profil vertical en y = 300 m et x = 0



(b) Profil transverse en y = 300 m et z = 100 m



(c) Profil vertical en y = 850 m et x = 0



(d) Profil transverse en y = 850 m et z = 100 m



(e) Profil vertical en y = 1750 m et x = 0

(f) Profil transverse en y = 1750 m et z = 100 m

FIG. 3.31 : Comparaison entre les observations et les prédictions des modèles Mercure et ADMS concernant l'estimation des rms de concentration (exprimées en $s.m^{-3}$) pour le rejet en cheminée et le vent de Sud.

3.5 Étude détaillée de la dispersion pour le rejet en cheminée par vent de Sud 124

transport. Observant une surestimation globale dans l'espace et générale pour l'ensemble des valeurs testées, l'écart minimal par rapport aux observations est obtenu pour une valeur de 0.5, ce qui justifie la valeur retenue pour les comparaisons. Il est par ailleurs difficile de se prononcer quant à la raison de la surestimation constatée pour la gamme de valeurs "standard" du coefficient D_f , qui apparaît ici comme un facteur particulièrement sensible. Cette sensibilité avait déjà été mise en évidence par Milliez & Carissimo (2006a) dans l'étude sur MUST, pour laquelle une valeur optimale de 0.7 avait été mise en évidence.

Influence de la valeur de la variance au rejet sur les champs Mercure

Nous donnons ici les conclusions relatives à l'étude de sensibilité sur la valeur fixée au rejet de la variance de concentration, cette étude ayant également été réalisée par Milliez & Carissimo

(2006a). Quatre valeurs ont été envisagées, telles que $\sqrt{\left(\overline{c'^2}/\overline{C}\right)_{source}} = 1\%, 10\%, 25\%$ et 100%. Ces conclusions sont similaires à celles avancées par Milliez, à savoir :

- une sensibilité décroissante lorsque l'on s'éloigne de la source,
- peu d'écart sur les prédictions lorsque le taux d'émission n'excède pas une dizaine de pourcents,
- une meilleure qualité de la prédiction pour les faibles valeurs du taux d'émission,
- une dégradation importante des résultats pour une valeur de 100 % caractérisée par une forte surestimation des fluctuations.

3.5.4 Études de sensibilité pour les simulations Mercure

Conditions limites

Profils amont

Les profils amont de vitesse et de turbulence utilisés en conditions à la limite peuvent présenter un caractère incertain car sont souvent mal connus les paramètres physiques qui les définissent. Dans notre cas précis, disposant des profils cinématiques détaillés en entrée de la veine d'essai, il est intéressant de voir comment les différentes possibilités qui s'offrent à nous pour définir ces profils influencent les résultats sur la dynamique et, le cas échéant, sur le champ de concentration.

Nous rappelons les relations appliquées en conditions à la limite d'entrée du domaine de calcul pour la vitesse et les variables turbulentes du modèle k- ε :

• pour la vitesse U :

$$\overline{u(z)} = \frac{u_L(z)}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{z+z_0}{z_0}\right) + 5\frac{z}{L_{MO}} \right]$$
(3.5.9)

où $u_L(z)$ est la vitesse de frottement locale exprimée à l'aide de la vitesse de frottement au sol u_* et de la hauteur de la couche limite H_{CL} :

$$u_L(z) = u_* \left(1 - \frac{z}{H_{CL}} \right)$$
 (3.5.10)

La valeur de H_{CL} peut être approchée par la formule $H_{CL} = \lambda \sqrt{u_* L_{MO}/|f|}$, où le coefficient λ varie selon les auteurs entre 0.2 et 0.4. La valeur de 0.3 a été retenue.

• pour les variables turbulentes :





(a) Profil vertical en y = 300 m et x = 0

(b) Profil transverse en y = 300 m et z = 100 m



(c) Profil vertical en y = 1750 m et x = 0

(d) Profil transverse en y = 1750 m et z = 100 m

FIG. 3.32 : Résultats de l'étude de sensibilité sur la valeur du coefficient D_f pour la prédiction des rms de concentration selon Mercure_Saturne, pour le rejet en cheminée et par la direction de vent de Sud, pour les quatre valeurs du coefficient D_f suivantes : 0.5, 0.6, 0.7 et 0.8.



FIG. 3.33 : Différents profils utilisés comme conditions limites en entrée du domaine de calcul Mercure : a) pour la vitesse U (en $m.s^{-1}$), b) : pour l'énergie cinétique turbulente (TKE, en $m^2.s^{-2}$). z_0 représente la rugosité et L_{MO} la longueur de Monin-Obukhov.

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

$$\varepsilon(z) = \frac{u_L(z)^3}{\kappa} \left(\frac{1}{z} + \frac{4}{L_{MO}}\right)$$
(3.5.11)

Le tracé logarithmique des mesures de vitesse réalisé par le LMFA permet d'estimer les paramètres d'une loi logarithmique pure, à savoir la vitesse de frottement u_* et la rugosité z_0 . Les valeurs fournies dans le rapport du LMFA (Mejean (2003)) pour ces deux paramètres sont respectivement de $0.21 \ m.s^{-1}$ et $0.04 \ m$. Notre propre exploitation des profils mesurés confirment la valeur de $0.04 \ m$ qui permet de coller au mieux aux mesures dans la basse-couche. Cependant, la valeur de $0.20 \ m$ permet d'être plus juste dans la partie haute du profil. Le choix $z_0 = 0.15 \ m$ peut ici apparaître comme intermédiaire. Le tracé du profil de vitesse pour une valeur de z_0 égale à $0.04 \ m$ dans des conditions de stratification exactement neutre (c'est à dire $1/L_{MO} \rightarrow 0$) ne permet pas de retranscrire correctement la partie supérieure du profil expérimental (Figure 3.33a). Il en est de même pour les rugosités $0.15 \ et 0.20 \ m$. Par contre, un ajustement de L_{MO} permet de coller au mieux à la courbe de mesures pour les différentes rugosités (cf Fig. 3.33(a)).

Si l'on s'intéresse aux profils d'énergie cinétique turbulente (Figure 3.33b), nous pouvons remarquer une assez nette sous-estimation de la turbulence obtenue pour la rugosité de 0.04 m. En revanche, l'utilisation d'un coefficient C_{μ} égal à 0.03, soit similaire au modèle de Duynkerke (Duynkerke (1988)) et préconisée par certains auteurs pour traiter des écoulements atmosphériques, permet d'atteindre la turbulence observée en soufflerie. En revanche, pour les rugosités de 0.15 et 0.20 m, les profils sont en meilleure concordance avec le profil mesuré en amont de la maquette, tout en gardant la valeur "standard" de C_{μ} .

Suite à ces observations préliminaires, les différents profils amont suivants ont été testés :

• $z_0 = 0.04 \text{ m avec } 1/L_{MO} \rightarrow 0 \text{ (profil } P_1\text{)}$



(a) Profils verticaux en y = 450 m et x = 0

(b) Profils verticaux en y = 1750 m et x = 0

- **FIG. 3.34 :** Étude de sensibilité portant sur la nature des profils en entrée pour la direction de vent de Sud : comparaison des profils verticaux de vitesse (en $m.s^{-1}$) et d'écart-type de vitesse longitudinale $\sqrt{u'^2}$ (en $m.s^{-1}$) issus des simulations Mercure et des données soufflerie. trait continu bleu : valeur infinie de L_{MO} , trait discontinu noir : $L_{MO} = 1000$ m, trait mixte rouge : profils amont de la soufflerie.
 - $z_0 = 0.04$ m avec $L_{MO} = 1000$ m (profil P_2)
 - $z_0 = 0.15$ m avec $L_{MO} = 2000$ m (profil P_3)
 - $z_0 = 0.20$ m avec $L_{MO} = 2000$ m (profil P_4)
 - application des profils de la soufflerie (profil P_5)
 - $z_0 = 0.04 \text{ m}, L_{MO} = 1000 \text{ m et } C_{\mu} = 0.03 \text{ (profil } P_6\text{)}$

Nous présentons successivement les résultats concernant l'influence de L_{MO} puis celle de z_0 . Nous discuterons des résultats fournis par le profil avec $C_{\mu} = 0.03$ dans un paragraphe suivant.

Influence de L_{MO}

Les profils P_1 et P_2 sont ici appliqués. Sans être réellement dissemblables, les profils obtenus pour une condition d'entrée totalement neutre diffèrent pour la partie supérieure du profil, la sous-estimation de la vitesse en amont du domaine restant effective plus loin dans l'écoulement, aussi bien au sein de la zone de bâtiments (Fig. 3.34(a)) qu'en aval des aéroréfrigérants (Fig. 3.34(b)). Par ailleurs, sans être significatif, nous notons une turbulence générée par les bâtiments un peu plus faible (Fig.3.34(a)), ce léger écart persistant plus en aval dans l'écoulement (Fig. 3.34(b)). Ces légères modifications sur la dynamique n'entraînent pas de différences significatives sur les champs de concentration qui restent très proches.

Influence de z_0

Les calculs *Mercure* sont réalisés pour les profils amont P_2 P_3 et P_4 , en appliquant pour chacun d'eux une rugosité identique dans le domaine, pour l'utilisation des lois de paroi rugueuses. Aucune différence notable n'est observée sur les champs cinématiques. En effet, même si un léger déficit en turbulence est observé en amont de la zone bâtie pour la plus petite rugosité, nous constatons que la turbulence atteint des niveaux très proches pour les trois rugosités une fois les bâtiments abordés, seule la zone en-dehors du sillage présentant encore les différences d'origine. Dans le sillage en aval des aéroréfrigérants, il n'y a pas de restauration des écarts sur les valeurs de turbulence. La comparaison des champs de concentration fournit alors très peu d'écart.

Modélisation de la turbulence

L'attention est focalisée ici sur la sensibilité des résultats aux modifications apportées au modèle $k - \varepsilon$ dans sa version classique. Deux modifications ont été testées. La première a été introduite dans le paragraphe précédent et concerne la valeur de C_{μ} et du paramètre qui en dépend σ_{ε} . Afin d'atteindre un niveau de turbulence correspondant à celui mesuré en amont de la maquette, une valeur de 0.03 a été envisagée. Par ailleurs, nous avons appliqué la version RNG du modèle $k - \varepsilon$ (cf paragraphe 1.4.4), afin de la tester sur ce cas d'étude et d'en observer les performances vis à vis de la fermeture standard.

Peu de modifications majeures concernant la description des structures complexes dans la zone bâtie sont observées. La figure 3.35 rend compte des différences les plus importantes. D'une manière générale, les différences sur le champ de vitesse sont quasi nulles entre le modèle RNG et le modèle à constante C_{μ} modifiée et elles sont légères ou infimes avec le modèle standard. Par contre, des différences sont observées sur le niveau de turbulence. Le modèle RNG est celui sous-estimant le plus la turbulence, l'abaissant dans la zone amont et ne compensant pas ce déficit dans la zone de bâtiments, bien au contraire, conduisant à une sous-estimation en aval. Par ailleurs, nous constatons que l'écart entre les résultats fournis par les deux valeurs distinctes de C_{μ} est très faible dans la zone de production turbulente et le reste plus en aval. Enfin, les profils de vitesse varient peu en aval des aéroréfrigérants. Remarquons toutefois que le déficit de vitesse est plus faible dans le cas du modèle RNG, devant la version modifiée puis la version standard, ces dernières étant véritablement très proches.

Maillage

Une version modifiée du maillage a été testée dans le but d'estimer la sensibilité des résultats en terme de dynamique. En cela, un raffinement dans la zone de bâtiments a été réalisée, de sorte que les éléments du maillage surfacique ont vu leur dimensions être divisées par un facteur 2, la longueur caractéristique des plus petits éléments étant alors de deux mètres. La maillage ainsi modifié est constitué de 1.350.000 éléments. Aucune modification majeure dans la qualité des résultats n'a été observée.



(a) Profils transverses de U, V, W et $\sqrt{u'^2}$, $(m.s^{-1})$ en y = 160 m et z = 50 m



(b) Profils verticaux de vitesse et $\sqrt{u'^2}~(m.s^{-1})$ en y = 660 m et x = 0

(c) Profils verticaux de vitesse et $\sqrt{u'^2}~(m.s^{-1})$ en y = 1450 m et x = 0

FIG. 3.35 : Étude de sensibilité portant sur la modélisation de la turbulence dans Mercure : comparaison de différents profils cinématiques issus des simulations Mercure et des données soufflerie. Trait continu bleu : modèle standard $C_{\mu} = 0.09$, trait discontinu noir : modèle modifié avec $C_{\mu} = 0.03$, trait mixte rouge : modèle RNG.

3.6 Autres configurations de rejet

Nous décrivons dans cette section les comparaisons réalisées pour les autres configurations de rejet, en insistant plus sur les points de dissemblance mis en évidence par rapport à la configuration précédemment étudiée. L'étude de l'ensemble des configurations nous permettra *in fine* d'évaluer les performances globales de *Mercure* et ADMS pour cette étude.

3.6.1 Rejet diffus par vent de Sud

Les caractéristiques du panache émis depuis l'enceinte du réacteur n°2 diffèrent du cas précédant car celui-ci intéresse une zone de vitesse plus faible et affectée par la turbulence de sillage de tous les bâtiments, y compris les plus bas, et par les recirculations associées. Nous observons des valeurs de CTA au niveau du sol supérieures à celles pour le rejet en cheminée, ce qui était attendu. Nous notons que la déviation du panache vers l'Est dans la zone de bâtiments pour *Mercure*, conforme à ce qui est observé en soufflerie, est plus importante que pour le rejet en cheminée. La comparaison des profils à proximité du réacteur n°2 fait état d'un panache plus haut dans le cas *Mercure*, ceci étant en partie lié à l'impossibilité de modéliser la partie basse du rejet sur la surface du réacteur exposée au Nord, à cause des simplifications géométriques.

Dans la zone de bâtiments, les modèles *Mercure* et ADMS présentent des résultats en assez bon accord avec les données en soufflerie. Même si *Mercure* surélève le panache à l'arrière du réacteur n°2 (Fig. 3.36(a)) induisant un affaissement plus lent de celui-ci vers le sol (Fig. 3.36(d)), il permet de modéliser avec précision l'effet du bâti sur l'étalement transversal du panache (Fig. 3.36(c)). ADMS parvient ici à bien représenter la dispersion du panache près de la source. Nous observons néanmoins une moindre diffusion à la fois latérale et verticale (Fig. 3.36(b) et 3.36(d)).

Le passage des aéroréfrigérants conduit à la même altération des résultats Mercure que celle notée sur le cas de rejet en cheminée et nous retrouvons exactement les mêmes écarts par rapport aux mesures, allant dans le sens d'une surestimation d'un facteur 2 des maximums de CTA au sol (Fig. 3.36(e) et 3.36(f)). Ces divergences sont également illustrées par le tracé de l'évolution de l'écart-type latéral σ_y en fonction de la distance à la source qui met en évidence une sous-estimation de σ_y par Mercure (Fig. 3.37(b)), celui-ci restant quasi-constant en aval des aéroréfrigérants. ADMS présente de bien meilleurs résultats par rapport au cas de rejet en cheminée et se compare bien aux mesures (Fig. 3.36(f) et 3.37(a)). On note toutefois l'apparition d'un excès de diffusivité latérale aux plus grandes distances (Fig. 3.36(e)) et 3.37(b)).

3.6.2 Rejets diffus et en cheminée par vent de Nord

Caractéristiques de l'écoulement et comparaison des champs dynamiques

Les caractéristiques globales de l'écoulement sont similaires à celles évoquées pour la direction de vent de Sud : maintien des profils jusqu'aux premiers bâtiments (ici les aéroréfrigérants), effet de sillage de grande échelle induit par l'ensemble des bâtiments au premier rang desquels les aéroréfrigérants, multiples déflexions et écoulements secondaires, recirculations.

La comparaison des profils verticaux et transverses de vitesse et de fluctuation de vitesse issus des simulations *Mercure* et de l'étude en soufflerie conduit à des remarques similaires à celles avancées pour la direction de Sud que nous énumérons ici brièvement :

- la passage des aéroréfrigérants conduit à une production de turbulence plus importante dans le cas de l'étude en soufflerie
- le sillage de grande échelle créé par la zone bâtie apparaît plus marqué dans le cas *Mercure*, avec notamment un déficit de vitesse plus grand
- les structures de plus petite taille sont bien reproduites par *Mercure* même si quelques écarts dans leur localisation spatiale peuvent être observés


(a) Profil vertical en y = 160 m et x = 0



(b) Profil transverse en y = 300 m et z = 25 m



(c) Profil transverse en y = 625 m et z = 25 m



(d) Profil vertical en y = 625 m et x = 0



(e) Profil transverse en y $=1750~{\rm m}$ et z $=25~{\rm m}$

(f) Profil vertical en y = 1750 m et x = 0

FIG. 3.36 : Comparaison des profils de concentration exprimée en CTA (s.m⁻³) pour le rejet diffus à travers la paroi du réacteur n°2 par vent de Sud issus des simulations Mercure, ADMS et de l'essai en soufflerie.



(a) Maximums de concentration exprimés en CTA (en $s.m^{-3}$)



FIG. 3.37 : Comparaison de l'évolution des maximums de concentration et de l'écart-type latérale σ_y estimé pour les traces au sol à différentes distances de la source pour le rejet à travers le réacteur n°2 et le vent de Sud, entre les modèles Mercure, ADMS et l'essai en soufflerie.

Les différences notées par rapport à la direction de vent de Sud concernent l'intensité légèrement plus faible du sillage en aval des bâtiments, ceci étant lié au fait que les aéroréfrigérants ne constituent pas dans cette configuration le dernier obstacle rencontré par l'écoulement. Cette remarque est valable pour le cas *Mercure* et l'étude en soufflerie et conduit à des profils de vitesse plus proches de l'équilibre d'origine en fin de domaine pour *Mercure*.

Champs moyens de concentration

Les résultats ADMS présentés ici correspondent à la configuration "BUnord6" où ont été conservés les aéroréfrigérants en amont et le bâtiment UNGG en aval, celui-ci étant désigné comme bâtiment "principal" pour la dispersion. Par ailleurs, les simulations *Mercure* ont nécessité la réalisation d'un nouveau maillage raffiné localement autour de la cheminée, en définissant cette fois un volume s'étendant vers la partie Sud du site.

Principales caractéristiques des panaches

Par rapport au cas de vent de Sud où l'écoulement au niveau des rejets a été perturbé en amont uniquement par le bâtiment UNGG, le cas présent conduit à une plus grande perturbation de l'écoulement, en premier lieu due au bloc d'aéroréfrigérants puis à la tranche 4-5. Ces perturbations sont à même de modifier la trajectoire initiale des panaches. En aval des rejets, l'influence des bâtiments est moindre même si le bâtiment UNGG induit une déviation des panaches vers l'Ouest, moins importante pour *Mercure* qu'elle n'est observée en soufflerie. Pour sa part, le modèle ADMS ne révèle pas de déviation importante du panache même si l'influence des bâtiments est perceptible.

Rejet en cheminée

Les résultats de soufflerie pour le rejet en cheminée montrent un comportement différent de celui observé pour le vent de Sud, qui est caractérisé par une phase d'ascension du panache nettement moins marquée et une diffusion horizontale à proximité de la source plus importante. Ces différences n'apparaissent pas pour les modèles *Mercure* et ADMS (Fig 3.38(a) et 3.38(b))

qui décrivent le panache de manière semblable à la direction de vent de Sud (même surhauteur, même intensité des CTA dans l'axe du panache). La présence de la tranche 4-5 en amont du rejet induit donc un effet de rabattement du panache important en soufflerie qui n'est retranscrit ni par *Mercure*, ni par ADMS. Par ailleurs, le déficit de turbulence en aval des aéroréfrigérants noté sur les simulations *Mercure* peut expliquer la moindre diffusion transverse au niveau du rejet.

Les différences à l'origine du rejet perdurent plus en aval. Ainsi, alors que les profils expérimentaux présentent rapidement une forme monotone, sans maximum marqué, et la conservent dans le domaine, les profils *Mercure* et ADMS montrent un ventre dans la verticale qui se gomme progressivement (Fig. 3.38(d) et 3.38(f)). Les profils transverses (Fig. 3.38(c) et 3.38(e)) révèlent une nette sous-estimation de la diffusion latérale de la part de *Mercure*, ce qui entraîne une surestimation des maximums de CTA plus loin dans l'écoulement, proche d'un facteur 2.5 en fin de domaine. Le modèle ADMS se révèle encore une fois plus diffusif, surtout dans la verticale, et sous-estime les maximums de CTA au sol. Nous remarquons enfin qu'aucun des panaches ne sont alignés, les panaches étant déviés toutefois dans la même direction pour *Mercure* et l'étude en soufflerie.

La figure 3.39(a) montre enfin que l'évolution du maximum de CTA au sol, bien que décalée spatialement, est comparable entre *Mercure* et l'essai en soufflerie jusqu'à hauteur du bâtiment UNGG et illustre en aval à la fois la surestimation du modèle *Mercure*, liée en partie à un déficit de diffusivité (Fig. 3.39(b)), et la sous estimation du modèle ADMS.

Rejet diffus à travers le réacteur n°2

Les comparaisons entre *Mercure* et l'essai en soufflerie sont similaires à celles discutées pour la direction de vent de Sud près de la source et révèlent une bonne adéquation entre les résultats (Fig. 3.40(a) et 3.40(b)). Plus en aval, nous retrouvons les différences observées pour les trois autres configurations (Fig. 3.40(c) et 3.40(d)) :

- un manque de diffusion progressive dans la direction transverse observée pour *Mercure*, avec un panache plus développé dans la verticale.
- une surestimation d'un facteur 2 des maximums de concentration dans l'axe du rejet quand l'on s'éloigne de la source.

La configuration présente est celle fournissant les meilleures comparaisons pour le modèle ADMS qui décrit de manière assez cohérente avec les résultats expérimentaux l'expansion du panache tant dans la direction verticale que transverse (Fig. 3.40(a) à 3.40(d)), ne reproduisant toutefois pas la déviation du panache (Fig. 3.40(c)). La "réussite" d'ADMS trouve en partie son explication dans l'absence de structures d'écoulement trop complexes en aval du rejet et dans la plus grande simplicité liée à la description d'un rejet en bloc.

3.6.3 Evaluation des performances des modèles *Mercure* et ADMS pour les champs de CTA au sol

Nous fournissons dans cette sous-section une évaluation globale de la performance des modèles *Mercure* et ADMS sur la prédiction du champ de concentration au sol pour l'ensemble des configurations de rejet et appliquons dans ce but la même méthodologie que celle introduite dans le chapitre 2 dans l'étude sur la campagne *Prairie Grass*. Nous donnons les "scatter-diagrammes" relatifs à à la variable pronostique C_{max} (Fig. 3.41), qui est le maximum de CTA rencontré sur chaque profil transverse au sol, ainsi que la variable diagnostique C_y , l'intégrale dans la direction transverse de la concentration estimée sur ce même profil. Les indicateurs statistiques définis dans la section 2.5 sont également utilisés pour ces deux variables.

Les scatter-diagrammes permettent d'avoir une vision globale des résultats concernant la prédiction des C_{max} et l'estimation des C_y et mettent en lumière certaines caractéristiques générales que nous énumérons ci-dessous pour chacun des deux modèles :



(a) Profil vertical en y = -120 m et x = 0



(b) Profil transverse en y = -120 m et z = 50 m



(c) Trace au sol en y = -1150 m $\,$



(d) Profil vertical en y = -1150 m et x = 0



(e) Trace au sol en y = -2100 m

(f) Profil vertical en y = -2100 m et x = 0

FIG. 3.38 : Profils de concentration en CTA $(s.m^{-3})$ pour le rejet en cheminée par vent de Nord



(a) Maximums de concentration exprimés en CTA (en $s.m^{-3})$

(b) Estimation de l'écart-type latérale de la dispersion (en m)

FIG. 3.39 : Comparaison de l'évolution des maximums de CTA et de l'écart-type latérale σ_y estimé pour les traces au sol à différentes distances de la source pour le rejet en cheminée et le vent de Nord, entre les modèle Mercure et ADMS et l'essai en soufflerie.

comparaison Mercure vs soufflerie :

- pour la prédiction de C_{max} (Figure 3.41(a)) : un groupement assez dense de points apparaît à la limite inférieure des frontières du facteur 2, très légèrement en dehors, et correspondant à la surestimation observée en aval de la zone de bâtiments et de la zone de concentration maximale, quel que soit le cas de rejet. Un autre groupe de points, plus dispersé, apparaît pour les fortes concentrations. Il se situe à l'intérieur de la zone de validité du facteur 2 et témoigne de la bonne qualité de prédiction des zones de concentration maximale et de celle des maximums locaux au sein du milieu bâti (notamment pour la direction de vent de Sud).
- pour la prédiction de Cy (Figure 3.41(b)) : une grande partie des points intègrent la zone de respect du facteur 2. Les résultats vont également dans le sens d'une surestimation moyenne des C_y .

comparaison ADMS vs soufflerie :

- pour la prédiction de C_{max} (Figure 3.41(c)) : nous retrouvons la caractéristique générale du modèle, à savoir la sous-estimation des C_{max} . Un premier ensemble de points assez étendu situé à l'intérieur de la zone de validité ou se rapprochant de la limite supérieure correspondant à une sous-estimation du modèle apparaît. Une autre partie des points pour les faibles concentrations se trouve nettement en dehors de cette zone correspondant aux cas de sous-estimation importante (dans la zone de bâtiments et loin de la source pour les cas de rejet en cheminée).
- pour la prédiction de Cy (Figure 3.41(d)) : les résultats sont très dispersés, les valeurs médianes de C_y étant les mieux prédites.

Les indicateurs expriment de manière quantitative nos observations (Tableau 3.4). En terme de C_{max} , nous notons que les indicateurs *Mercure* sont meilleurs, en dehors de FAC2. Les valeurs de FB et MG confirment que *Mercure* surestime globalement les C_{max} et les valeurs de NMSE et VG montrent que l'erreur locale produite n'est pas considérable. D'ailleurs, même si *Mercure* ne



FIG. 3.40 : Profils de concentration exprimée en CTA $(s.m^{-3})$ pour le rejet diffus à travers la paroi du réacteur n° 2 et par vent de Nord.



(a) Comparaison Mercure vs soufflerie pour C_{max}



(b) Comparaison Mercure vs soufflerie pour Cy



(c) Comparaison ADMS vs soufflerie pour C_{max}



(d) Comparaison ADMS vs soufflerie pour Cy

FIG. 3.41 : Comparaison entre les observations et les prédictions des modèles Mercure et ADMS pour les quatre configurations de rejet pour les variables C_{max} (maximum de CTA enregistré sur chaque profil transverse au niveau du sol) et C_y (concentration intégrée sur ces mêmes profils transverses).

			C_{max}			
	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
modèle Mercure	-0.13	0.68	4.52	2.36	0.425	0.936
modèle ADMS	0.76	3.22	4.72	81.4	0.510	0.787
			C_y			
	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
modèle Mercure	-0.002	0.97	0.48	1.78	0.851	0.957
modèle ADMS	0.636	3.50	1.37	135.4	0.532	0.830

TAB. 3.4 : Comparaison des indicateurs statistiques de performance pour les quatre configurations de rejet entre le modèle Mercure et le modèle ADMS pour les variables C_{max} (maximum de concentration enregistrés sur les profil transverses au niveau du sol) et C_y (concentration intégrée sur ces mêmes profils transverses).

vérifie pas en toute rigueur les critères de bonne performance définis par Chang & Hanna (2004), il s'en approche réellement. La faiblesse de l'indicateur FAC2 tient au fait qu'une partie des points se trouve légèrement en dehors de la limite imposée. Les indicateurs propres à ADMS révèlent la sous-estimation globale dont fait preuve ce modèle (FB > 0 et MG > 1). La forte valeur de l'indicateur VG traduit l'importance de l'erreur locale portant sur les faibles concentrations, notamment pour celles observées dans la zone de bâtiments. Les valeurs de FAC2 et FAC5 apportent néanmoins une certaine crédibilité à ce modèle dans ce cas.

Le calcul des mêmes indicateurs pour la variable C_y valident nos précédentes conclusions. Nous notons les très bonnes performances de *Mercure* qui répondent toutes aux critères de performance, mis à part le facteur VG qui est légèrement supérieur au seuil fixé (VG = 1.78 alors que VG (seuil) = 1.6). Les indicateurs relatifs au modèle ADMS restent dans la gamme de ceux observés pour les Cmax et les mêmes conclusions s'appliquent.

3.7 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons comparé l'approche eulérienne de type RANS à l'approche gaussienne sous une forme évoluée pour la modélisation de la dispersion en présence d'un ensemble de bâtiments. Pour cela, nous nous sommes appuyés sur une étude en soufflerie réalisée par le LMFA ayant simulé des scenarii de rejets accidentels sur le site CNPE de Bugey. Les deux rejets considérés, l'un en cheminée et le second à travers la paroi d'un des réacteurs, sont en effet soumis à l'influence des bâtiments localisés dans l'axe des panaches pour les deux directions de vent (Sud et Nord). Ils modifient alors la dispersion à la fois en champ très proche, entre et autour des bâtiments, et plus en aval sous l'effet du sillage de grande échelle induit par l'ensemble du bâti.

La richesse de jeu de données disponible (champs de vitesse, écart-type de vitesse σ_u , de concentration moyennée et d'écart-type associé) a permis de confronter en détail le modèle *Mercure* aux mesures et d'analyser de manière détaillée les points de similitude et de divergence entre les deux types de modélisation.

3.7 Conclusions

L'analyse des champs dynamiques a montré que *Mercure*, utilisé avec son modèle de turbulence $k - \varepsilon$, retranscrivait correctement les grandes structures de l'écoulement ainsi que les plus petites, même si celles-ci ne sont pas rigoureusement identiques. Une étude de sensibilité au raffinement du maillage autour des bâtiments a mise en évidence que la solution était précise. Les principales dissemblances, importantes vis à vis de la modélisation de la dispersion, concernent la description du sillage de grande échelle, notamment dans le cas de vent de Sud où le groupement de quatre aéroréfrigérants constitue le dernier obstacle rencontré par l'écoulement. Il y est conjointement observé un déficit en vitesse (de l'ordre de 20 %) et en turbulence, quoique plus faible.

L'analyse des champs de concentration moyenne et leur comparaison aux mesures fournit des conclusions différentes en fonction de la zone considérée. Ainsi, les champs fournis par *Mercure* sont d'une manière générale en bonne adéquation avec les observations dans le champ très proche où l'impact des bâtiments situés au niveau du rejet et juste en aval est bien décrit (effets de rabattement, recirculations, étalement latéral du panache). Plus en aval, dans le sillage de la zone bâtie, des différences sont en revanche observées quant à l'amplification de la dispersion. Alors que l'on observe une assez nette augmentation de la diffusion en soufflerie, celle-ci apparaît peu marquée pour *Mercure* et conduit à une surestimation systématique des CTA au sol, d'un facteur 2, loin dans le domaine.

Enfin, un dernier élément de comparaison a concerné les écarts-types (ou rms) de concentration. Cette étude a confirmé que *Mercure*, s'appuyant sur la résolution d'une équation de transport pour la variance, se révèle un modèle efficace pour traiter ce genre de problème. La comparaison aux données en soufflerie a montré en effet que ce modèle est capable de retranscrire de manière assez cohérente en intensité et en localisation les effets des perturbations liées aux bâtiments sur les rms. Nous notons toutefois que la valeur du coefficient D_f la plus adaptée pour reproduire les mesures est relativement faible ($D_f = 0.5$) par rapport aux valeurs habituellement retenues.

Les simulations ADMS, effectuées en tenant compte des bâtiments, ont fourni des performances différentes en fonction de la configuration de rejet étudiée. Assez performant pour reproduire la dispersion des panaches à source volumique près du sol (rejet diffus au niveau de la paroi du réacteur n°2), et ce dans les deux directions de vent, il l'est beaucoup moins dans les cas de rejet en cheminée pour lesquels l'influence des bâtiments en champ proche sur un panache surélevé est plus difficile à décrire. D'une manière générale, nous avons noté qu'il était difficile de modéliser la dispersion dans un zone où plusieurs bâtiments entrent en jeu, et ce même en jouant sur les différentes configurations permises par ADMS. Enfin, l'impossibilité de modéliser les rms de concentration en présence de bâtiments ne nous a pas permis d'effectuer des comparaisons avec le modèle *Mercure*.

Chapitre 4

Étude comparative de la dispersion en terrain complexe sur le site CNPE de Flamanville

4.1 Objectifs de l'étude

L'évaluation et la comparaison des modèles *Mercure* et ADMS se poursuit dans ce chapitre à travers l'étude de la dispersion sur un site à topographie complexe. Le site retenu est celui du CNPE de Flamanville, localisé dans le département de la Manche (51), le long des côtes, sur une plateforme à 12.4 m NGF d'altitude et dont la particularité est de se situer en contrebas d'une falaise abrupte dont le sommet est à une altitude d'environ 80 m NGF. Ce site fut notamment choisi pour d'implantation de la nouvelle centrale EPR. Dans le cadre du dossier de demande d'autorisation et de création de ce dernier ainsi que dans celui de la mise à jour du dossier de demande d'autorisation de rejets et prise d'eau de Flamanville, une étude en soufflerie a préalablement été confiée par EDF au LMFA (Mejean (2006)) suivie par de premières modélisations numériques synthétisées dans Bilbault *et al.* (2007). Ces études avaient pour objectif d'évaluer les conséquences radiologiques des rejets émis aux cheminées de ventilation sur les bâtiments des ilôts nucléaires des tranches 1 et 2 de la centrale ainsi que du futur EPR, en réactualisant les valeurs anciennement utilisées à l'aide de méthodes plus récentes. La richesse de la base de données fournie par le LMFA pour trois directions privilégiées du vent (229°, 289° et 329°) a également pour objectif l'évaluation et la validation des modèles numériques utilisés par EDF.

Dans cette perspective, nous proposons dans ce chapitre une comparaison des modèles Mercure et ADMS par rapport aux résultats récents de soufflerie, dans le but d'évaluer leur utilisation sur un site offrant une topographie complexe à orographie marquée, ce qui n'était pas le cas pour le site CNPE de Bugey. La singularité du site étant telle que l'emploi de simples modèles gaussiens n'est pas rendue possible, les modèles Mercure et ADMS représentent à cet égard deux alternatives différentes. Mercure offre la possibilité de prendre en compte explicitement l'influence de la falaise sur l'écoulement et ainsi sur la dispersion au-dessus de celle-ci alors qu'ADMS, par l'intermédiaire de son module de terrain complexe, est aussi en mesure de quantifier l'impact de la falaise sur la dispersion, bien que, dans le cas présent, sa pente moyenne se situe au-delà des limites préconisées par le guide utilisateur (CERC (2004)).

Après avoir introduit les principales caractéristiques de l'étude en soufflerie ainsi que les expériences retenues dans la présente étude, nous fournirons les caractéristiques propres aux simulations *Mercure* et ADMS. La première analyse concernera les champs dynamiques issus des simulations *Mercure* qui seront comparés aux données de soufflerie. En second lieu, la comparaison sera étendue aux champs de concentration en intégrant les simulations ADMS, avant que l'on fournisse une synthèse des résultats pour les trois directions de vent privilégiées et les trois cheminées de ventilation du site ainsi qu'une évaluation des performances des deux modèles. Pour clore ce chapitre, les principales conclusions seront dressées.

4.2 Description de l'étude en soufflerie 2006

4.2.1 Maquette du site

Le site CNPE de Flamanville est situé en bordure de la Manche, en contrebas d'une falaise abrupte de 80 m de hauteur. Le site comprend deux tranches REP de 1300 MW que nous nommerons par la suite FLA1 et FLA2 et l'emplacement du futur réacteur EPR. L'étude en soufflerie a nécessité la construction d'une maquette reproduisant à la fois la topographie du site et les principaux bâtiments adossés à la falaise (plateforme du site, bâtiments FLA1, le plus au Sud, FLA2, au centre, et EPR, le plus au Nord), sur la base des prescriptions techniques fournies par EDF au concepteur de la maquette. Comme pour l'étude sur le site de Bugey, l'échelle retenue est de 1/500 ème.

Les principaux bâtiments d'une hauteur supérieure à 10 m ont été pris en compte ainsi que le relief présent sur le site jusqu'à une distance d'environ 1.8 km en aval des rejets. Une partie amovible a été conçue pour permettre de compléter la maquette en aval de la partie fixe pour chaque direction de vent étudiée. La maquette a été découpée à l'origine pour permettre l'étude pour des directions de vent allant de 229° à 9° avec un pas de 20°. Une vue d'ensemble de la maquette installée en soufflerie pour la direction de vent 289° est représentée Figure 4.1.



FIG. 4.1 : Visualisation de la maquette installée dans la veine d'essai pour la direction 289° (d'après Mejean (2006).

La rugosité à la surface de la maquette est constituée d'écrous de 10 mm d'épaisseur pour les zones non habitées et de cubes de 20 mm de coté pour les zones représentant les zones d'habitation. L'instrumentation de la maquette permet de simuler les rejets d'effluents gazeux au niveau des cheminées des trois bâtiments réacteurs (FLA1, FLA2 et EPR). Comme pour l'étude sur le CNPE de Bugey, le rejet en cheminée est constitué d'un mélange de gaz traceur (éthane) et d'air.

Le système de coordonnées sur la maquette et sur lequel nous nous appuierons dans nos comparaisons est défini de la manière suivante :

- L'origine est centrée sur la cheminée du bâtiment réacteur n°2 (FLA2).
- L'axe des abscisses x est orienté dans le sens du vent.
- L'altitude est repérée par rapport au niveau de la mer.

Une représentation du système de coordonnées sur le site est fournie Figure 4.2.



FIG. 4.2 : Système de coordonnées et repérage de la direction du vent. Le repère est centré sur le réacteur central nommé FLA2 et l'axe est orienté selon la direction du vent (ici pour la direction 289°) (d'après Mejean (2006)

4.2.2 Conditions météorologiques et caractéristiques de l'écoulement amont

Les résultats de l'étude des conditions météorologiques sur le site de Flamanville réalisées par Gilbert (2006) ont montré que la vitesse de référence du vent prise sur le mât à une hauteur de référence de 20 m (99 m NGF) est de 6.8 $m.s^{-1}$ et de 9.0 $m.s^{-1}$ à 80 m du sol (159 m NGF). Par conséquent, il a été décidé de fixer la vitesse de référence à 7 $m.s^{-1}$ au niveau du rejet, soit à environ 110 m NGF. Compte-tenu des contraintes imposées par la soufflerie, celle-ci ne pouvant délivrer une vitesse non perturbée supérieure à 6 $m.s^{-1}$, une vitesse de référence de $3.7 m.s^{-1}$ a été retenue pour une vitesse non perturbée de 5 $m.s^{-1}$, induisant l'utilisation d'un facteur d'échelle de vitesses correspondant au ratio entre les vitesses en soufflerie et réelle dans le calcul des CTA (Coefficients de Transfert Atmosphérique définis dans le chapitre 3, sous-section 3.5.2). Les caractéristiques générales de la couche limite simulée en soufflerie ont été déterminées pour un profil vertical de vitesse situé à 6 m de l'entrée de la veine d'essai et correspondant à une distance réelle de 1500 m en amont de la cheminée du réacteur FLA2. Les caractéristiques déduites du tracé du profil logarithmique de vitesse sont les suivantes :

- une vitesse de frottement u_* de 0.22 $m.s^{-1}$.
- une rugosité de 2.6.10 $^{-4}$ m correspondant à 0.13 m après application du facteur d'échelle.

Par ailleurs, les écarts-types de vitesse en amont de la maquette, adimensionnés par la vitesse de frottement u_* , sont en bon accord avec les valeurs couramment admises dans la littérature pour une atmosphère neutre (Garratt (1992)), soit :

	Soufflerie	Valeurs typiques
u'/u_*	2.2	2.4
v'/u_*	1.5	1.9
w'/u_*	1.2	1.25

TAB. 4.1 : Écarts-types adimensionnés pour l'écoulement en soufflerie en comparaison des valeurs usuelles obtenues sur une paroi plane, in Mejean (2006).

4.2.3 Caractéristiques des rejets

Les rejets ont lieu au niveau des trois cheminées FLA1, FLA2 et EPR, toutes trois situées à 98 m du sol, soit 110.5 m NGF. Les vitesses réelles en sortie de cheminée sont de 7 $m.s^{-1}$. Compte-tenu de la similitude sur les rejets à respecter ainsi que de l'échelle de vitesse introduite, la vitesse imposée en sortie de cheminée est identique à la vitesse de référence et vaut 3.7 $m.s^{-1}$. Cette vitesse correspond à un débit d'éthane de 66 l/h et à un débit d'air de 311 l/h. Ainsi, le rapport W_s/U_s en sortie de cheminée est égal à 1, de même qu'en conditions réelles. Enfin, la température des rejets est proche de la température ambiante et n'est pas prise en compte dans les essais en soufflerie.

4.2.4 Les moyens de mesures

La mesure des grandeurs dynamiques de l'écoulement est réalisé au moyen d'un **anémomètre** à fil chaud qui permet d'accéder aux trois composantes de la vitesse ainsi que les composantes du tenseur de Reynolds. Un anémomètre à température constante à deux composantes est utilisé, étant très courant en mécanique des fluides pour caractériser les écoulements turbulents grâce au faible temps de réponse de la sonde et de son équipement électronique pour détecter les changements rapides de l'écoulement. Les deux fils croisés des sondes permettent de mesurer deux composantes de la vitesse en même temps. Afin de mesurer les trois composantes, il est ainsi nécessaire d'effectuer deux fois les mesures après avoir tourné de 90° le dispositif. La limite d'utilisation inhérente à cette technique réside dans la prise de mesures au sein d'écoulements recirculants. Pour cette raison précise, celle-ci s'avéra inadaptée aux mesures dans la zone de bâtiments pour le site de Bugey. Dans le cas présent, les mesures ne sont pas réalisées dans la zone bâtie, hormis au sommet des cheminées, mais en aval de celles-ci sur la falaise et également en amont du site sur la mer.

Pour les mesures de concentration instantanées, les expérimentateurs ont eu également recours ici à l'analyseur d'hydrocarbures par ionisation de flamme qui permet d'accéder aux mesures de concentration à haute fréquence. Notons que les très grandes structures turbulentes de l'atmosphère ne peuvent être reproduites en soufflerie, les concentrations obtenues peuvent être considérées comme des concentrations moyennées sur une dizaine de minutes.

4.2.5 Description du jeu de données

La base de données fournie par le LMFA contient des éléments portant sur les champs cinématiques et sur les champs scalaires pour chacune des directions de vent considérées dans cette étude (229°, 289° et 329°).

En terme de mesures dynamiques (vitesse et turbulence) sont fournis des profils verticaux en différents points du domaine d'étude : sur la mer (en amont des bâtiments), au sommet des cheminées, sur le mât météorologique localisé au sommet de la falaise et sur la falaise à différentes distances des rejets. La direction 289° est la plus décrite avec une quinzaine de profils verticaux exploitables. Une carte des différents emplacements de ces profils sur le domaine *Mercure* sera donné lors de l'analyse des champs dynamiques (section 4.4).

Concernant les grandeurs scalaires (concentrations exprimées en CTA et fluctuations associées), la dispersion pour chaque direction de vent et chacun des rejets (FLA1, FLA2 et EPR) est décrite au moyen de sept profils verticaux pris dans l'axe du panache à différentes distances de la source et sept profils transverses à cet axe pris juste au-dessus du sol. Par ailleurs, le suivi des maximums de concentration au sol en fonction de cette même distance à la source a été réalisé pour chacun des rejets et des directions de vent.

4.3 Description des simulations

4.3.1 Description des simulations Mercure

Domaine de calcul et maillage

Le domaine maillé englobe l'ensemble du domaine de mesures et correspond à une zone de 5 km dans la longueur et 3 km dans la largeur. Le domaine a été choisi de sorte que le port de Dielette soit dans la zone maillée et qu'il y ait environ 500 m de mer à l'Ouest de la centrale. Le maillage a été confié à la société Incka (Quémerais (2005)), sur la base de documents comprenant : le modèle numérique de terrain de l'IGN du site avec une résolution de 25 m, les plans 2D du CNPE, les plans 2D du futur EPR et la hauteur des bâtiments. Furent pris en compte les bâtiments susceptibles d'influer sur la dispersion, à savoir : les tranches FLA1, FLA2 et EPR, les stations de pompage et la salle de cantine au sommet de la falaise. Par ailleurs, les travaux de terrassement occasionnées par l'implantation de l'EPR ont occasionné une modification du relief dont il a été tenu compte.

Le maillage volumique est réalisé par couches successives dans la verticale dont les cotes sont fixées lorsque l'on rencontre le toit d'un bâtiment. Les couches du maillage suivent le niveau du sol dans la zone de relief jusqu'à une hauteur de 116 m puis s'adaptent progressivement au sommet du domaine. Le maillage est raffiné dans la zone de bâtiments et est relâché dans les directions x et y lorsque l'on s'en éloigne. Néanmoins, pour ne pas obtenir de faces présentant une très faible dimension caractéristique dans la verticale par rapport à celles dans l'horizontale, notamment au niveau de la falaise, un raffinage de la ligne de côte par rapport à la version originale du maillage, réalisé dans Bilbault *et al.* (2007), a été utilisé pour les directions 289° et 229°, nécessitant également une modification de la répartition des couches dans la verticale. La hauteur de la première maille dans la verticale est alors de 2 m, et les plus petites mailles près des bâtiments ont des dimensions transverses proches de 3 m. Le maillage ainsi réalisé compte environ 1.300.000 éléments. Pour la direction 329°, ces mêmes difficultés numériques nous ont obligé à surélever le premier niveau au-dessus du sol à la hauteur de 4 m, tout en découpant encore un peu plus la ligne de côté, ce maillage étant alors constitué de près d'1.600.000 éléments.

Une vue du domaine global est fournie Figure 4.3 alors que la Figure 4.4 illustre le maillage autour des bâtiments.

Paramètres de simulation et conditions limites

Paramètres numériques



FIG. 4.3 : Visualisation de la surface du domaine de calcul Mercure pour le site de Flamanville.



FIG. 4.4 : Visualisation du maillage surfacique dans une zone comprenant les bâtiments utilisé pour les simulations Mercure sur le site de Flamanville.

4.3 Description des simulations

Les simulations *Mercure* ont été réalisées avec la version 1.2 de *Mercure* sur des stations de travail (calculs mono-processeurs sur processeur Intel Xeon(TM) 3.4 GHz). La méthode de convergence en pas de temps variable en temps et en espace fut adoptée. La convergence des champs dynamiques fut obtenue pour approximativement 600 pas de temps, alors que la résolution des grandeurs scalaires a nécessité 900 pas de temps. Le temps C.P.U correspondant est compris entre 1.5 jours pour le maillage relatif aux directions 289° et 229° et 2 jours pour le maillage correspondant à la direction 329°. La résolution des champs de concentration (en ppm) et de variance des fluctuations de concentration ($\overline{c'^2}$) a été effectuée pour les trois cheminées. Le nombre de Schmidt pour les grandeurs scalaires est fixé à 0.9.

Modélisation et initialisation des rejets

La méthode de rejet par termes source volumiques est adoptée pour tous les rejets en cheminée. Chaque rejet est constitué d'une seule cellule de rejet similaire à un cube de 2 m de côté (Fig. 5.2). L'impossibilité de mieux discrétiser la source tient aux limitations en terme de nombre de noeuds. Ainsi, suite aux conclusions de l'étude sur Bugey, la hauteur du rejet a été fixée de telle sorte que soit prise en compte la surhauteur du panache. Néanmoins, pour un rapport W_s/U_s égal à un, celle-ci n'est pas comparable à celle obtenue pour le site CNPE de Bugey, valant entre 4 et 5 m. Les cellules sources ont alors été décalées de 2 cellules dans la verticale.

Les conditions initiales sur les variables turbulentes au niveau des rejets sont définies de façon identique à la section 3.3.2, soit :

$$k_s \approx 0.002 W_s^2$$

$$\varepsilon_s = \frac{k_s^{3/2}}{l}, \qquad (4.3.1)$$

ce qui conduit aux valeurs suivantes : $k_s = 0.0275 \ m^2 \cdot s^{-2}$ et $\varepsilon_s = 4.5 \ 10^{-3} \ m^2 \cdot s^{-3}$.



FIG. 4.5 : Visualisation des points de rejet (en rouge) pour les trois cheminées FLA1, FLA2 et EPR du site CNPE de Flamanville définis dans les simulations Mercure.

Conditions aux limites

• Conditions à la limite en entrée

Le profil de vent est calé sur celui en entrée de la soufflerie pour simplifier la comparaison notamment pour les champs cinématiques, ce qui impose d'utiliser une rugosité identique au facteur d'échelle près qui est de 0.13 m. Le profil logarithmique dans un cas neutre est alors imposé avec une référence de vitesse de $3.7 m.s^{-1}$ à 110 m d'altitude à laquelle correspond une vitesse non perturbée en haut de domaine proche de $5.5 m.s^{-1}$. Par ailleurs, afin d'être en meilleure adéquation en haut de la couche simulée, la longueur de Monin-Obukhov a été fixée à 1000 m. Les profils de quantités turbulentes k et ε sont issus de l'application des formules déjà décrites au paragraphe 3.5.4. La vitesse de frottement est celle extrapolée à partir des profils expérimentaux et vaut $0.22 m.s^{-1}$.

• Autres conditions aux limites

Deux des quatre côtés du domaine suivant l'orientation du vent sont de type **sortie libre**, un gradient nul étant imposé pour toutes les variables, alors que les deux autres côtés sont de type **entrée**, des conditions de Dirichlet étant imposées pour toutes les variables. Sur le sommet du domaine est imposée une condition de type symétrie. Au niveau du sol, les lois de couche limite rugueuse sont appliquées pour une rugosité constante de 0.13 m correspondant à celle préconisée par l'essai en soufflerie. Les parois des bâtiments sont traitées également avec des lois rugueuses pour des rugosités valant 0.01 m sur l'ensemble des bâtiments.

Nous insistons enfin sur le fait que les simulations présentées ici diffèrent de celles réalisées dans Bilbault *et al.* (2007) qui fait état de problèmes numériques liés à l'application des lois de paroi rugueuses sur la surface complexe. La résolution de ces problèmes, en partie dans le cadre de ce travail de thèse, a abouti à une mise à jour des résultats discutés en 4.5.2.

4.3.2 Description des simulations ADMS

Les simulations ADMS modélisent les panaches émis aux cheminées FLA1, FLA2 et EPR pour un traceur passif et une vitesse de rejet de 7 $m.s^{-1}$. Nous travaillons ici à vitesse réelle, avec une vitesse de référence de 5 $m.s^{-1}$ à 10 m du sol et pour un flux net de chaleur au sol nul, en conformité avec les spécifications d'ADMS pour simuler une couche neutre (cf CERC (2004)). Cette vitesse de référence permet d'atteindre une valeur très proche de 7 $m.s^{-1}$ à la hauteur de référence de 110 m. Par ailleurs, la rugosité est identique au cas *Mercure* et égale à 0.13 m.

Les simulations sont réalisées pour une durée physique de 10 minutes ("short term simulation"), permettant de se comparer aux mesures en soufflerie et aux concentrations fournies par Mercure, en considérant les mêmes échelles de la turbulence dans les trois cas.

Deux configurations sont retenues : un terrain plat de dimension 3 km ainsi qu'un terrain complexe en utilisant le module approprié d'ADMS 3.3 (cf paragraphe 1.3.6) lié au modèle dynamique diagnostique FLOWSTAR. Les bâtiments ne sont pas ici pris en compte par souci de simplification, leur influence étant jugée secondaire par rapport à celle de la falaise. Le fichier de terrain lu en entrée d'ADMS est issu du fichier de relief IGN du site avec une résolution de 25 m. Le maximum de points de grille admissible par le logiciel a été considéré, soit une grille de calcul de 99 points. Il est important de noter ici que l'extrême déclinaison de la falaise (jusque 108 % de déclinaison) entraîne le dépassement du seuil maximum de pente autorisé qui est de 33 %.

4.4 Étude détaillée de l'écoulement pour les directions 229°, 289° et 329° : comparaison *Mercure* vs soufflerie

4.4.1 Caractéristiques générales de l'écoulement selon Mercure

L'écoulement sur le site CNPE de Flamanville est un écoulement complexe dû à la présence d'une falaise abrupte faisant face aux bâtiments pour un vent venant de la mer. Cette falaise représente un obstacle majeur pour l'écoulement et induit une modification importante de celuici.

Pour toutes les directions de vent apparaît une zone de sur-vitesse sur les arrêtes situées à son sommet, accompagnée d'une production de turbulence à laquelle s'ajoute celle induite par les bâtiments situés en contrebas. La figure 4.6 pour la direction de vent 289° illustre ces observations. Cette accélération au sommet de la falaise entraîne toute la couche d'air située au-dessus d'elle jusqu'en sommet de domaine (Fig. 4.7(a)). La turbulence générée au niveau de la zone de bâtiments et au sommet immédiat de la falaise est pour sa part transportée par l'écoulement plus en aval sur le plateau (Fig. 4.7(b)), si bien que le niveau de turbulence y atteint un niveau deux fois supérieur à celui observé en amont sur la mer pour la direction 289°. La falaise induit par ailleurs une déviation de l'écoulement dans l'horizontale lorsque le vent est en incidence par rapport à celle-ci, ce qui est visible pour les directions 229° et 329°. Cette déviation de l'écoulement s'accompagne également d'une accélération. Pour la direction 289°, le vent est quasi perpendiculaire à la falaise dans la zone d'intérêt, ce qui pousse l'écoulement à passer au-dessus d'elle, sans être véritablement dévié.

Enfin, les figures 4.8(a) et 4.8(b) montrent que la discrétisation du maillage autour des bâtiments est suffisante pour capturer les petites structures de l'écoulement (recirculations et déflexions).

4.4.2 Évolution des profils dans le domaine

Nous comparons dans ce paragraphe l'évolution des profils verticaux de vitesse et de turbulence (TKE) dans la direction de l'écoulement issus des simulations *Mercure* et des données en soufflerie, les profils étant contenus dans un plan vertical passant par l'origine du repère Ocoïncidant avec le centre du réacteur du bâtiment FLA2. La figure 4.9 permet de visualiser l'emplacement des différents profils dans le domaine de calcul *Mercure* pour la direction de vent de 289°. Les emplacements pour les deux autres directions sont obtenus par rotation de centre O.

Dans l'ensemble, nous observons que l'effet de la falaise est bien reproduit en vitesse et turbulence pour les trois directions de vent. Plus particulièrement, pour la direction 289° où le vent est pratiquement perpendiculaire au relief, nous observons que la falaise induit une accélération pour *Mercure* et que le profil de vitesse sur la falaise reste quasi-uniforme. L'essai en soufflerie montre au contraire un déficit en vitesse par rapport au profil en amont. Par ailleurs, les profils de turbulence sont en relativement bon accord (Fig. 4.10(c) et 4.10(c)), l'effet de la falaise induisant dans les deux cas une production de turbulence en basse-couche perceptible loin dans le domaine sur la falaise. Le niveau de turbulence y apparaît légèrement plus important dans l'essai en soufflerie que dans le cas *Mercure*, sauf à la plus petite distance (x = 200 m).

Pour la direction 329° (Fig. 4.11), l'écart de vitesse au franchissement de la falaise pour cette direction de vent est plus important, proche de 20 %. En terme de TKE, nous notons une turbulence de basse-couche sur la falaise assez sensiblement inférieur à celui relevé en soufflerie. Concernant le direction 229° , la figure 4.12(a) révèle une décélération plus rapide sur la falaise (Fig. 4.12(a)). Selon *Mercure*, l'accélération au sommet de la falaise est suivie par un affaissement plus progressif du profil de vitesse (Fig. 4.12(b)). Les profils de TKE et leur évolution sont pour



(a)



(b)

FIG. 4.6 : Visualisation du champ de vitesse (module) (a) et du champ de turbulence TKE (b) modélisés par Mercure au niveau du sol et des bâtiments sur le site CNPE de Flamanville pour la direction de vent 289°.



FIG. 4.7 : Visualisation des champs dynamiques issus des simulations Mercure pour la direction 289° : plans de coupe verticaux suivant l'axe x (a) : passant par le bâtiment FLA1 et représentant le champ de vitesse, (b) : passant par le bâtiment EPR et représentant le champ de turbulence.



(a)

(b)

FIG. 4.8 : Visualisation de l'écoulement modélisé par Mercure au niveau des bâtiments du site CNPE de Flamanville pour la direction de vent 289° - a) : plan de coupe vertical dans l'axe du bâtiment FLA1 représentant les lignes de courant colorées en intensité du vecteur vitesse - b) : plan de coupe horizontal situé en z = 25 m représentant le champ de vitesse ainsi que les vecteurs vitesse.



FIG. 4.9 : Visualisation de l'emplacement des différents profils verticaux exploités dans la comparaison des simulations Mercure aux mesures en soufflerie pour la direction de vent de 289° (en rouge : profils au-dessus des cheminées FLA1, FLA2 et EPR, en bleu : profil au niveau du mât météorologique, en vert : profils en amont et au-dessus de la falaise.)



FIG. 4.10 : Comparaison de l'évolution des profils verticaux de vitesse et de turbulence (TKE) situés dans le plan passant par le centre du réacteur du bâtiments FLA2 (origine du repère) et orienté dans la direction principale du vent issus des simulations Mercure et des mesures en soufflerie sur le site CNPE de Flamanville pour la direction de vent 289.

leur part en bonne concordance, même si le niveau atteint par *Mercure* y est ici légèrement supérieur (Fig. 4.12(c) et 4.12(d)).



FIG. 4.11 : Comparaison de l'évolution des profils verticaux de vitesse et de turbulence (TKE) situés dans le plan passant par le centre du réacteur du bâtiments FLA2 (origine du repère) et orienté dans la direction principale du vent issus des simulations Mercure et des mesures en soufflerie sur le site CNPE de Flamanville pour la direction de vent 329°.

Dans les paragraphes qui suivent, nous donnons une analyse plus détaillée des écarts et similitudes observées en fonction de la localisation : en amont de la falaise, au niveau des cheminées, sur la falaise et au niveau du mât météorologique.

4.4.3 Comparaison en amont de la falaise

La figure 4.13 compare les profils 500 m en amont du bâtiment FLA2 pour les trois directions de vent. Pour les trois directions, nous observons une vitesse plus élevée selon *Mercure* qu'elle ne l'est en soufflerie. Ceci est faiblement perceptible pour la direction 289° mais l'est de façon beaucoup plus nette pour les directions 229° et 329°. Pour la direction 289°, l'écoulement passe



FIG. 4.12 : Comparaison de l'évolution des profils verticaux de vitesse et de turbulence (TKE) situés dans le plan passant par le centre du réacteur du bâtiments FLA2 (origine du repère) et orienté dans la direction principale du vent issus des simulations Mercure et des mesures en soufflerie sur le site CNPE de Flamanville pour la direction de vent 229.

au-dessus de la falaise sans que celle-ci n'induise une importante déviation de l'écoulement amont. Le profil reste donc en équilibre jusqu'au niveau des bâtiments. En revanche, lorsque le vent est en incidence avec la falaise, *Mercure* fournit une déviation de l'écoulement liée à une accélération de grande échelle. Les résultats de soufflerie suggèrent que la déviation de l'écoulement n'entraîne pas une accélération de l'air.



FIG. 4.13 : Comparaison des profils verticaux de vitesse et de turbulence (TKE) en x = -500 m (en amont de la falaise) issus des simulations Mercure et des mesures en soufflerie pour les trois directions de vent (229°, 289° et 329°)

4.4.4 Comparaison au niveau des cheminées

Les profils verticaux situés au-dessus des cheminées sont essentiels pour estimer le rapport de vitesse W_s/U_s pour chacune des directions de vent et mesurer la variabilité de ce paramètre en fonction de la cheminée considérée, ainsi que connaître le niveau de turbulence qui peut jouer un rôle dans la dilution initiale du panache. Il est alors intéressant de voir si l'essai en soufflerie et *Mercure* retranscrivent de la même manière les différences qui pourront être observées entre les cheminées.

Dans cette optique peuvent être comparés pour chacune des cheminées les profils de vent obtenus pour chacune des directions. D'une manière générale, nous constatons un écart dans les profils de vitesse entre *Mercure* et l'essai en soufflerie, avec des valeurs plus élevées de vitesse pour *Mercure*, de l'ordre de 20 %, l'écart étant localement plus réduit juste au niveau de la cheminée. Ceci conduit à un rapport W/U proche de 1.0 dans la soufflerie alors qu'il est en moyenne inférieur à cette valeur pour *Mercure*. Ces écarts peuvent directement être reliés à ceux observés sur les profils amont de vitesse. Nous notons que la direction 229°, en forte incidence par rapport à la ligne de côte, entraîne des vitesses un peu plus élevées dans les deux cas. Les profils de turbulence sont quant à eux en bonne concordance. En fonction de la direction du vent, une turbulence plus élevée peut être ponctuellement observée au niveau d'une cheminée placée dans le sillage d'un bâtiment situé en amont, notamment dans le cas de la direction 229° pour les cheminées FLA2 et EPR.

Pour la cheminée FLA2 plus particulièrement (Fig. 4.14), nous observons en soufflerie un léger freinage de l'écoulement pour les trois directions qui peut s'expliquer par le blocage induit par la présence de la falaise située juste en aval des cheminées (Mejean (2006)). Dans le cas *Mercure*, nous observons des vitesses plus élevées pour toutes les directions. En sortie immédiate de la cheminée, les vitesses sont dans le cas *Mercure* proches de 4 $m.s^{-1}$ pour les directions 229° et 289° conduisant à un rapport W_s/U_s proche de 1, à l'exception de la direction 329° pour laquelle la vitesse est supérieure. La figure 4.14(b) montre que les profils de turbulence sont en assez bonne concordance. Nous observons des profils similaires pour les directions 329° et 289°. La turbulence est plus importante pour la direction 229°, ce qui peut s'expliquer par la présence du bâtiment FLA1 en amont.



FIG. 4.14 : Comparaison des profils verticaux de vitesse (a) et de turbulence (b) issus des simulations Mercure et de l'essai en soufflerie au-dessus de la cheminée FLA2 pour les trois directions de vent (229°, 289° et 329°).

4.4.5 Comparaison au niveau du mât météorologique

Les profils de vitesse et de turbulence au niveau du mât météorologique, situé au sommet immédiat de la falaise, permettent d'évaluer l'effet de la direction du vent sur les mesures et les simulations *Mercure*. Ces comparaisons sont importantes pour faire le lien avec les études sur le site réel où les seules mesures disponibles y sont localisées. La figure 4.15 compare ces profils pour les trois directions de vent. Les mesures en soufflerie montrent en effet que la vitesse au sommet de la falaise est étroitement liée à l'orientation du vent par rapport à la falaise : plus sa direction est perpendiculaire à la celle-ci, plus la vitesse est élevée. Ce constat se vérifie en partie avec *Mercure* qui présente effectivement une vitesse supérieure pour la direction 289° par rapport à 229°. En revanche, la direction 329° conduit à la plus grande sur-vitesse dans les premiers niveaux. Par ailleurs, nous retrouvons ici l'écart de vitesse entre les simulations *Mercure* et les mesures en soufflerie, qui est toutefois moins important que celui observée au niveau des cheminées. Les profils de turbulence sont en relativement bon accord même si nous notons pour *Mercure* un déficit assez net en basse-couche pour la direction 329°.



FIG. 4.15 : Comparaison des profils verticaux de vitesse et de turbulence (TKE) au niveau du mât météorologique (au sommet immédiat de la falaise) issus des simulations Mercure et de l'essai en soufflerie pour les trois directions de vent (229°, 289° et 329°).

4.4.6 Comparaison sur le sommet de la falaise, en aval des rejets

La dernière comparaison concerne les profils situés sur la falaise, pris en s'éloignant progressivement du site (voir Figure 4.9 pour la direction 289°). Les figures 4.16(a) et 4.16(b) montrent une meilleure comparaison des profils de vitesse, notamment en basse-couche, pour les directions 229° et 289° par rapport aux écarts enregistrés sur la falaise. Cette remarque est à associer à la très bonne comparaison des profils de turbulence pour ces deux mêmes directions qui illustrent la décroissance progressive de la turbulence produite au franchissement des bâtiments et de la falaise le long de l'axe x. En revanche, les profils Mercure propres à la direction 329° se comparent moins bien aux mesures et aux autres directions simulées par Mercure avec l'observation d'une surestimation de la vitesse parallèlement à une sous-estimation de la turbulence. Cette observation confirme le constat déjà fait dans le paragraphe précédant sur la comparaison des profils au niveau du mât météorologique. Les moins bons résultats pour cette direction de vent peuvent s'expliquer par l'utilisation du maillage modifié, uniquement pour cette direction, en vue de remédier aux problèmes numériques. Ce maillage présente une hauteur de première maille deux fois plus élevée que celle du maillage d'origine, ce qui peut avoir son incidence dans la description de la couche limite de surface, notamment lorsque de forts gradients de vitesse et de variables turbulentes sont observés, comme c'est le cas ici.

4.5 Etude de la dispersion pour les directions 229°, 289° et 329° : comparaison *Mercure* - ADMS vs soufflerie

Cette section est dévolue à la comparaison des résultats de simulations *Mercure* et ADMS par rapport aux mesures réalisées en soufflerie pour la dispersion. La comparaison s'appuie sur des profils verticaux pris dans l'axe du panache expérimental, des profils transverses au niveau du sol ainsi que le suivi du maximum de concentration au sol en fonction de la distance au rejet. Les profils verticaux et transverses ont été mesurés pour les rejets aux cheminées FLA2 et EPR



(a)



(b)

FIG. 4.16 : Comparaison des profils verticaux de vitesse (a) et de turbulence (b) issus des simulations Mercure et de l'essai en soufflerie sur la falaise (en x = 400 m et x = 900 m) pour les trois directions de vent (229°, 289° et 329°).

alors que le suivi des maximums de concentration au sol a été réalisé pour les trois cheminées.

4.5.1 Caractéristiques générales de la dispersion et principaux résultats de soufflerie

La particularité de la dispersion sur le site de Flamanville réside dans la présence de la falaise qui perturbe la trajectoire initiale des panaches et modifie les caractéristiques de la dispersion en champ très proche par comparaison à la dispersion sur terrain plat. De plus, la dispersion initiale du panache peut également, selon les directions de vent, être influencée par la présence des bâtiments voisins. Notamment, pour les directions 329° et 229° surtout, les rejets aux cheminées FLA2 et FLA1 dans le premier cas et FLA2 et EPR dans le second cas sont nécessairement soumis à l'influence des bâtiments situés en amont dans l'écoulement qui *a priori* induisent un rabattement du panache plus rapide. Par ailleurs, il est fait état dans Mejean (2006) d'une déviation des panaches dans toutes les configurations, la direction perpendiculaire (289°) entraînant cependant une déviation moindre.

Il est par ailleurs intéressant de se focaliser sur les valeurs maximales de CTA au niveau du sol et notamment de suivre l'évolution du CTA maximal local en fonction de la distance à la source. En effet, le suivi de cette variable donne des indications pertinentes quant à la nature des phénomènes dispersifs pour chacune des configurations étudiées.

La figure 4.17 représente ainsi l'ensemble des courbes décrivant le maximum local du CTA en fonction de la distance au rejet pour les trois directions de vent et les trois cheminées. Cette figure révèle une grande dispersion dans l'allure des courbes, la valeur des maximums absolus ainsi que la distance à laquelle ils sont atteints. Plus précisément, nous observons en premier lieu des comportements différents en fonction de la direction du vent. Alors que l'on note un plus faible impact au sol pour la direction quasi-perpendiculaire à la falaise (289°) et ce quelle que soit la cheminée, l'impact pour les deux autres directions de vent est plus important (de l'ordre d'un facteur 2). D'autre part, en fonction de la direction du vent, nous pouvons observer des différences selon les cheminées. Pour la direction 289°, les panaches provenant des cheminées suivent l'écoulement et passent au-dessus du relief sans être trop influencés par les bâtiments situés en amont des cheminées, conduisant à une dispersion identique quel que soit le rejet. Pour les cas 229° et 329°, il est plus délicat de dissocier l'influence des bâtiments et celle de la falaise. Par exemple, le cas du rejet au niveau de l'EPR montre un niveau de CTA deux fois plus important pour la direction 229° que pour la direction 329°, ce qui est lié à la présence des autres bâtiments réacteurs en amont qui accentuent le rabattement du panache (Mejean (2006)). Le niveau de CTA obtenu pour le rejet FLA2 (au centre parmi les trois réacteurs) se situe d'ailleurs à un niveau intermédiaire.

4.5.2 Les simulations Mercure

Caractéristiques générales

Ainsi qu'il est observé expérimentalement, la dispersion en champ proche est soumise à la double influence des bâtiments et de la falaise et suivant le cas considéré le panache a tendance à atteindre le sol plus ou moins rapidement. La direction de vent de 289° constitue un cas où le panache, bien qu'influencé par la falaise, n'est pas rapidement rabattu vers le sol (cf Fig. 4.18). Un moyen de mettre en lumière les différences observées selon la configuration d'étude est de visualiser l'impact au sol des panaches (Fig. 4.19(a) et 4.19(b)). Nous remarquons ainsi que les maximums de concentration sont obtenus assez loin en aval des cheminées pour la direction de vent 289° (Fig. 4.18) et d'une manière homogène suivant la cheminée considérée. En revanche, les directions 229° et 329° conduisent ponctuellement à des zones de maximum localisées bien plus tôt sur la falaise, notamment pour les cheminées FLA1 et FLA2 pour la direction 229°.



FIG. 4.17 : Évolution du maximum de CTA (en s.m⁻³) au sol en fonction de la distance à la source pour les directions de vent 229°, 289° et 329° et les cheminées FLA1, FLA2 et EPR issue de l'étude en soufflerie (Mejean (2006)).

Ces observations vont ainsi dans le sens des remarques faites dans le paragraphe précédent par rapport aux résultats de soufflerie.



FIG. 4.18 : Plan de coupe dans l'axe du rejet FLA1 du champ de concentration exprimé en CTA (s.m⁻³) associée au rejet FLA1 issu des simulations Mercure pour la direction de vent de 289°.

Analyse des profils verticaux et transverses

Nous présentons les principaux résultats portant sur la comparaison des profils transverses, pris au niveau du sol, et verticaux issus des simulations *Mercure* et des mesures réalisées en soufflerie pour les trois directions de vent et les cheminées EPR et FLA2 pour lesquelles les mesures ont été réalisées.

Direction 289°

La comparaison des traces au sol pour le rejet FLA2 (Fig. 4.20(a)) montre une très bonne concordance dans la prédiction du maximum pour chaque profil dans les deux cas de rejet. Elle confirme par ailleurs nos observations du paragraphe précédant quant à l'écart sur la direction des



FIG. 4.19 : Impact au sol des trois panaches FLA1, FLA2 et EPR d'après les simulations Mercure : a) pour la direction de vent de 289° b) pour la direction de vent de 329°.

panaches entre les simulations et les mesures. Même si l'on peut noter une très légère déviation des panaches vers la droite par rapport à la direction de l'écoulement d'après *Mercure*, celle-ci est nettement plus marquée dans le cas de la soufflerie, même si elle tend à se réduire plus en aval. Pour cette raison, la comparaison des profils verticaux pris dans l'axe du panache mesuré est rendue délicate et n'est pas abordée ici. Enfin, nous pouvons remarquer un étalement transversal du panache moins important selon *Mercure*. Cette remarque est confirmée par la figure 4.20(b) qui décrit l'évolution de l'écart-type latéral en fonction de la distance à la source estimé sur chacun des profils transverses. Les conclusions sont similaires pour le rejet EPR.

Direction 229° Pour cette direction, nous observons encore une très bonne concordance dans les profils transverses au niveau du sol et l'on note encore une sous-estimation de l'étalement transverse du panache. À la différence de la direction 289°, nous observons ici une déviation des panaches équivalente dans les deux cas, vers la "droite" de l'écoulement. Nous sommes alors en mesure de comparer les profils verticaux (Fig. 4.21(a) et 4.21(b)). Ces derniers montrent que les panaches ont un comportement légèrement différent près du rejet : dans un cas (FLA2), le panache impacte le sol plus tardivement selon *Mercure* alors que dans l'autre (EPR), le contraire est observé. L'effondrement plus ou moins rapide des panaches dépend des conditions à l'origine, à travers l'influence des autres bâtiments (effet de rabattement), le rapport W_s/U_s et l'impact de la falaise dans la phase d'élévation du panache. La différence dans le rapport W_s/U_s observé ne semble pas être la cause de ces différences puisque dans les deux cas de rejet celui-ci est supérieur pour *Mercure* et conduit pourtant à deux écarts contraires selon la cheminée. De même pour la turbulence qui présente des niveaux équivalents. Ces différences s'expliquent ainsi plus sûrement par l'effet des bâtiments et l'impact de la falaise sur la trajectoire initiale du panache. La com-



(a) Comparaison des profils transverses au sol de CTA (en $s.m^{-3}$) en différentes positions en aval du rejet

(b) Estimation de l'écart-type latéral de la dispersion σ_y (en m) d'un panache gaussien équivalent en fonction de la distance à la source

FIG. 4.20 : Comparaison des champs de concentration issus des simulations Mercure et de l'étude en soufflerie pour la direction 289° et le rejet FLA2.

paraison à ce niveau est délicate, du fait notamment que le rejet est modélisé dans *Mercure* en tenant compte à l'origine de la surhauteur du rejet dans la position de la source. Cependant, en dehors de l'écart enregistré en champ proche, les profils sont en assez bonne corrélation plus en aval.



FIG. 4.21 : Comparaison des profils verticaux de CTA (s.m⁻³) en différentes positions en aval du rejet issus des simulations Mercure et des mesures en soufflerie pour la direction de vent 229° et pour les cheminées EPR et FLA2.

Direction 329°

L'analyse des profils pour cette direction de vent montre plus d'écarts entre les simulations *Mercure* et les mesures en soufflerie, surtout pour le rejet EPR. Les figures 4.22(a) et 4.23(a) révèlent un effondrement du panache émis depuis la cheminée EPR retardé pour *Mercure* par rapport à la soufflerie, dû à une moindre diffusion vers le sol. Le déficit de turbulence observé pour cette direction de vent dans les basses-couches peut en être une des causes, induisant un moindre mélange du panache près du sol. Les écarts sont cependant moins importants pour le rejet FLA2 (Fig. 4.22(b) et 4.22(b)), le rabattement du panache lié à la présence en amont de l'EPR gommant peut-être en partie le manque de turbulence. Enfin, une dernière différence réside dans l'impact de la falaise sur la trajectoire générale des panaches, puisqu'alors qu'une déviation vers la "gauche" de l'écoulement est enregistrée pour *Mercure*, les panaches restent dans l'axe d'après les mesures en soufflerie.



FIG. 4.22 : idem Fig. 4.21 pour les profils transverses au sol et la direction de vent 329°.

Maximums de CTA au niveau du sol

La figure 4.24 fournit l'évolution du CTA en fonction de la distance à la source. Nous retrouvons une très grande partie des caractéristiques observées en soufflerie (Fig. 4.17), à savoir :

- une grande variabilité des résultats en fonction de la direction du vent et de la cheminée
- des valeurs de CTA près de deux fois moins élevées pour la direction 289 ainsi qu'une dispersion uniforme quelle que soit la cheminée pour cette même direction

Par ailleurs, il semble que l'allure des courbes et les niveaux de CTA atteints (aussi bien pour le maximum local que plus en aval dans le domaine) sont en bonne concordance avec les mesures en soufflerie. Le point de divergence que l'on peut avancer concerne la dispersion initiale des panaches FLA1 et FLA2 pour la direction 229°, comme entrevu dans le paragraphe précédent.

Études de sensibilité

Influence de la vitesse de vent non perturbée



(a) rejet EPR



FIG. 4.23 : idem Fig. 4.21 pour la direction de vent 329°



FIG. 4.24 : Évolution du maximum de CTA (en s.m⁻³) au sol en fonction de la distance à la source pour les directions de vent 229°, 289° et 329° et les cheminées FLA1, FLA2 et EPR, issu des simulations Mercure.

4.5 Étude de la dispersion pour les directions 229°, 289° et 329° : comparaison *Mercure* - ADMS vs soufflerie

Deux vitesses de référence du vent à 110 m NGF ont été utilisées pour la direction de vent de 289° afin de vérifier l'identité des champs de dispersion exprimés en CTA $(s.m^{-3})$ déduit du principe de similitude et utilisés en soufflerie. La première vitesse est celle de la soufflerie, utilisée jusqu'à maintenant ($U_{ref} = 3.7 m.s^{-1}$), le seconde est la vitesse réelle sur site, issue des moyennes météorologiques ($U_{ref} = 7.0 m.s^{-1}$). Les figures 4.25(a) et 4.25(b) montrent que les champs ainsi obtenus sont en bon accord, les différences existant en terme d'intensité et de déviation des panaches étant très faibles en champ relativement proche et quasi négligeables plus en aval. Ces très légères différences près de la source peuvent être attribuées au non respect de la similitude sur le nombre de Reynolds qui peut induire de légères modifications de la dynamique de l'écoulement, notamment dans la zone complexe comprenant les bâtiments et la pente de la falaise.



(a) rejet EPR

(b) rejet FLA2

FIG. 4.25 : Comparaison des profils transverses au sol de CTA (en $s.m^{-3}$) en différentes positions en aval du rejet issus des simulations Mercure, respectivement pour des vitesses de références à 110 m NGF de $3.7 m.s^{-1}$ et 7.0 $m.s^{-1}$, pour la direction de vent 289° et pour les cheminées EPR et FLA2.

Influence de la rugosité du domaine

En vue d'observer la variabilité que peut induire un changement de la valeur de rugosité imposée dans le domaine de calcul et en conditions limites en entrée sur les champs de concentration, deux rugosités ont été testées. La première est celle utilisée dans le reste de l'étude et qui provient de la rugosité déduite des profils expérimentaux au facteur d'échelle près ($z_0 =$ 0.13 m), la seconde a été fixée à la valeur double $z_0 = 0.25$ m. Les figures 4.26(a) et 4.26(b) rendent compte du peu de variabilité observé. Notons toutefois que les légers écarts constatés ne vont pas dans le même sens, avec, comme on pouvait l'envisager, des valeurs moins élevées des maximums pour le rejet FLA2 avec la rugosité $z_0 = 0.25$ m alors que le contraire apparaît pour $z_0 = 0.13$ m. Cette différence illustre l'influence non uniforme de la rugosité sur des écoulements complexes.


FIG. 4.26 : Comparaison des profils transverses au sol de CTA (en $s.m^{-3}$) en différentes positions en aval du rejet issus des simulations Mercure respectivement pour des rugosités $z_0 = 0.13 m$ et 0.25 m, pour la direction de vent 229° et pour les cheminées EPR et FLA2

Comparaison aux résultats 2006 (Bilbault et al. (2007))

Un des objectifs de l'étude était de revenir sur les résultats des simulations rapportés dans Bilbault *et al.* (2007) réalisées avec la version antérieure 1.1 de *Mercure* et de comprendre les écarts observés à l'époque avec la soufflerie, qui allaient dans le sens d'une sous-estimation importante des CTA au sol sur la falaise, environ d'un facteur 2. La figure 4.27 qui compare l'évolution des CTA pour la direction 289° montre comment les modifications apportées au traitement des lois de couche rugueuse a permis d'améliorer sensiblement les résultats. Il est difficile de donner en toute rigueur la raison précise expliquant les écarts antérieurs mais nous pouvons incriminer néanmoins la mauvaise prédiction de la turbulence près du sol, à la fois sur les grandeurs k et ε , qui a conduit à une inhomogénéité importante du champ de diffusivité turbulente.

Modélisation des moments statistiques d'ordre 2 associés au champ moyen de concentration

Les champs de variance associés à chacun des rejets a été modélisé avec Mercure au moyen de l'équation de transport introduite dans le chapitre 1 (éq. 1.4.53) pour les trois directions de vent. Une valeur du coefficient D_f , propre à la fermeture du terme de dissipation, valant 0.8 a été utilisée. Les conclusions étant communes aux trois directions, nous illustrons nos remarques pour la direction 229°. Les figures 4.28(a) et 4.28(b) montrent une bonne concordance des profils transverses au niveau du sol et l'écart observé au plus près du rejet correspond à celui observé sur les concentrations surfaciques. Toutefois, l'observation des profils verticaux (Figure 4.28(b)) met en défaut ce premier constat. En effet, nous observons un "ventre" très marqué dans les profils Mercure, conduisant à une très nette surestimation des fluctuations $\sqrt{c'}^2$ dans la verticale. Le comportement de Mercure et les écarts observés par rapport aux mesures sont directement à rapprocher de ceux mis en évidence dans le chapitre 3 sur le cas de Bugey. Les remarques qui y sont faites sont donc identiques ici et concernent la non pertinence de la valeur coefficient D_f prise à 0.8 pour modéliser correctement le taux de dissipation de la variance, cette valeur étant pourtant couramment utilisée dans la littérature et fixée par défaut dans Mercure.



FIG. 4.27 : Évolution du maximum de CTA (en s.m⁻³) au sol en fonction de la distance à la source pour la directions de vent 289° et les cheminées FLA1, FLA2 et EPR issu des simulations Mercure respectivement pour les versions 1.2 et 1.1 ainsi que l'étude en soufflerie



FIG. 4.28 : Comparaison des profils de $(\sqrt{\vec{c'}^2}, en s.m^{-3})$ en différentes positions en aval du rejet issus des simulations Mercure et des mesures en soufflerie pour la direction de vent 229° et pour le rejet EPR.

4.5.3 Les simulations ADMS

Nous présentons ici les résultats de simulation ADMS qui prirent en compte explicitement le relief complexe du site. L'observation des courbes d'évolution des CTA en fonction de la distance à la source (Fig. 4.29) révèle une grande uniformité des résultats pour toutes les directions de vent et quelle que soit la cheminée. Néanmoins, la direction 229° fournit la plus grande variabilité parmi les trois. Nous remarquons par ailleurs que le niveau global atteint par le CTA est largement inférieur à celui fourni par les mesures en soufflerie et les simulations *Mercure* et que les maximums absolus sont atteints entre 600 et 800 m.



FIG. 4.29 : Coefficient de Transfert Atmosphérique (CTA, exprimé en s.m⁻³) maximum au sol en fonction de la distance à la source pour les directions de vent 229°, 289° et 329° et les cheminées FLA1, FLA2 et EPR issu des simulations ADMS

4.5.4 Intercomparaison et performances des modèles Mercure et ADMS

L'un des objectifs principaux de l'étude de la dispersion sur le site de Flamanville, à l'instar de tout autre étude d'impact sur des problématiques de pollution atmosphérique, et ainsi qu'il apparaît dans Bilbault *et al.* (2007), est d'évaluer l'impact du panache au sol selon les directions de vent et la cheminée considérée. Nous poursuivons dans ce but l'analyse des champs de concentration surfaciques pour les deux modèles *Mercure* et ADMS en les comparant aux mesures et en fournissant pour chacun d'eux les mesures statistique de performance associées.

Analyse comparative des courbe CTA = f(d) au niveau du sol

Les figures 4.30(a) à 4.30(f) comparent l'évolution des maximums de CTA au sol issus des simulations *Mercure* et ADMS par rapport aux mesures en soufflerie. Nous fournissons ici par direction de vent les courbes $C_{max} = f(d)$, où d est la distance à la source, pour deux des trois cheminées illustrant au mieux les différences observées. Par ailleurs, le tableau 4.2 synthétise les

		$CTA_{max} (s.m^{-3}.10^{-5})$			$\mathbf{Y}_{\mathbf{max}}(m)$	
229°	Soufflerie	Mercure	ADMS	Soufflerie	Mercure	ADMS
EPR	1.2	1.2	0.25	1000	850	800
FLA1	2.05	1.05	0.25	400	400	550
FLA2	1.7	1.65	0.25	550	400	500
289°	Soufflerie	Mercure	ADMS	Soufflerie	Mercure	ADMS
EPR	0.68	0.62	0.20	1000	1000	700
FLA1	0.58	0.58	0.20	800	1100	700
FLA2	0.70	0.68	0.20	850	1050	800
329°	Soufflerie	Mercure	ADMS	Soufflerie	Mercure	ADMS
EPR	0.55	0.30	0.25	700	1200	700
FLA1	1.8	1.3	0.25	650	850	750
FLA2	1.35	0.85	0.25	700	800	700

résultats en terme de maximum absolu CTA_{max} et d'estimation de l'abscisse Y_{max} à laquelle est atteint ce maximum pour les trois modélisations et l'ensemble des configurations étudiées.

TAB. 4.2 : Maximum absolu du Coefficient de Transport Atmosphérique (CTA_{max}) et abscisse (Y_{max}) où ce maximum est atteint selon les mesures en soufflerie, les simulations Mercure et les simulations ADMS pour l'ensemble des directions de vent et l'ensemble des rejets en cheminée sur le site CNPE de Flamanville

<u>Les simulations Mercure</u> :

Les résultats *Mercure* sont globalement en bon accord avec les mesures en soufflerie. Plus particulièrement, la direction 289° (Figures 4.30(c) et 4.30(d)) présente les meilleurs résultats tant pour la prédiction de la valeur du maximum local C_{max} que pour le niveau atteint par les CTA plus en aval. Une telle qualité dans les résultats peut s'expliquer par la moindre influence des bâtiments sur la dispersion des panaches comparativement aux deux autres directions de vent, enlevant ainsi un degré de complexité dans la description par *Mercure* de la dispersion en champ rapproché. Nous observons toutefois un léger retard sur la localisation du maximum, le panache impactant le sol un peu plus loin dans le domaine. L'excédant de quantité de mouvement propre aux simulations *Mercure* mis en évidence dans l'analyse de la dynamique de l'écoulement (cf section 4.4) peut en être la cause.

Les deux autres directions révèlent quelques différences. Pour la direction 229°, le panache issu de FLA1 (Figure 4.30(a)) atteint une valeur du maximum absolu assez nettement inférieure à celle mesurée même si la localisation est bonne. Malheureusement, une analyse plus détaillée à l'aide de profils expérimentaux verticaux ou transverses pouvant nous éclairer sur cet écart n'était pas disponible pour ce rejet. La comparaison des courbes pour la direction 329° et le rejet EPR (Figure 4.30(e)) montre par ailleurs une assez nette sous-estimation de la part de *Mercure*, liée à l'obtention du maximum absolu nettement plus en aval dans le domaine. Dans cette configuration où le réacteur EPR n'est pas sous l'influence de bâtiments situés en amont par rapport à l'écoulement, le panache est moins rapidement rabattu vers le sol, ce qui est également visible sur la courbe expérimentale. En dehors des divergences enregistrées pour ces cas particuliers, les comparaisons restent de qualité bien que la localisation du maximum absolu n'est pas nécessairement identique (Figures 4.30(b) et 4.30(f)).

<u>Les simulations ADMS</u> :

D'une manière générale, comme il l'avait été suggéré au paragraphe précédant, ADMS sousestime pour toutes les configurations les CTA d'un facteur 2 à 5, les écarts étant plus ou moins



(e) 329° et rejet EPR

(f) 329° et rejet FLA2

FIG. 4.30 : Comparaison de l'évolution du Coefficients de Transfert Atmosphérique en fonction de la distance à la source issu des simulations Mercure et ADMS par rapport aux mesures en soufflerie pour différentes directions de vent et rejets en cheminée.

marqués en fonction de la variabilité observée en soufflerie. Les maximums locaux sont toutefois correctement prédits en terme de localisation.

Scatter-diagrammes et indices de performance

Nous reprenons ici la procédure utilisée dans le chapitre 3 (paragraphe 3.6.3) pour caractériser les performances des modèles comparés en s'appuyant sur la donnée des maximums de concentration locaux obtenus au niveau du sol (notés C_{max}). Ont ainsi été rassemblés dans un échantillon proche de 130 éléments l'ensemble des C_{max} pour les trois directions de vent et les trois cheminées.

Les figures 4.31(a) et 4.31(b) fournissent les scatter-diagrammes et le tableau 4.3 les valeurs des indices FB, MG, NMSE, VG, FAC2 et FAC5 pour les deux modèles *Mercure* et ADMS. Ces données synthétisent l'ensemble des comparaisons détaillées établies dans les paragraphes précédents. Les très bons indices statistiques obtenus par *Mercure*, tous respectant les critères de bonne performance introduits par Chang & Hanna (2004), confirment la bonne qualité générale de ses résultats et sa pertinence quant à la description de la dispersion quelle que soit la configuration étudiée. En revanche, ADMS présente de mauvaises performances pour les indices MG et VG (caractérisant respectivement les erreurs globales et locales en ne prenant en compte l'effet des plus faibles valeurs) et un indice nul pour FAC2. Le facteur FAC5 à peine supérieur à 0.5 montre à quel point l'utilisation d'ADMS pour ce cas d'étude spécifique (pente supérieure à la limite autorisée) et en excluant les bâtiments s'avère inadaptée.

	FB	MG	NMSE	VG	FAC2	FAC5
modèle Mercure	0.108	1.181	0.159	1.990	0.846	0.962
modèle ADMS	1.332	5.073	4.281	23.078	0.000	0.523

TAB. 4.3 : Comparaison des indicateurs statistiques de performance entre le modèle Mercure et le modèle ADMS pour les variables CTA_{max} (maximum de concentration enregistrés sur les profil transverses au niveau du sol).

4.6 Conclusions

Afin de répondre aux objectifs concernant la qualification et la validation des approches gaussiennes et RANS pour la modélisation de la dispersion en champ proche dans des situations complexes, nous avons étendu la comparaison des modèles *Mercure* et ADMS à l'étude de la dispersion sur le site CNPE de Flamanville. Alors que l'étude du chapitre 3 a apporté un premier élément de réponse quant à leur capacité à rendre compte de l'influence d'un ensemble de bâtiments sur la dispersion, celle-ci avait pour but de valider leur utilisation sur un cas de topographie complexe. En effet, le site de Flamanville est caractérisé par une falaise abrupte, localisée à l'aval immédiat des bâtiments réacteurs pour un vent provenant de la mer, celle-ci présentant ainsi un obstacle majeur pour l'écoulement.

En s'appuyant sur les jeux de mesures fournis par l'étude en soufflerie réalisé au LMFA, l'impact des émissions en fonctionnement normal aux cheminées des deux anciens réacteurs REP et du futur EPR a été étudié pour trois situations de vent de mer.

Les simulations *Mercure* reproduisent globalement bien la dynamique de l'écoulement bien que l'on note une accélération systématique de la vitesse sur la falaise et légèrement en amont induite par le contournement (transversal et vertical) de celle-ci qui n'est pas observée expérimentalement. Cette différence peut être imputée à la différence de conditions limites sur les parois latérales du domaine. L'analyse des champs de concentration a montré une bonne adéquation



FIG. 4.31 : Comparaison des Coefficients de Transfert Atmosphériques maximums locaux au niveau du sol pour l'ensemble des directions de vent (229°, 289° et 329°) et des cheminées (FLA1, FLA2 et EPR) - a) : entre les simulations Mercure et les mesures en soufflerie - b) : entre les simulations ADMS et les mesures en soufflerie.

avec les mesures en soufflerie sur de nombreux points : la variabilité de la dispersion en fonction de la direction du vent, l'influence non négligeable des bâtiments réacteurs voisins sur le rejet étudié, les maximums absolus de CTA ainsi que l'évolution des maximums locaux en fonction de la distance plus en aval sur la falaise. Les différences constatées concernent ponctuellement l'orientation du panache ainsi que le manque de diffusion dans la direction transverse qui est ici encore visible alors que la turbulence est correctement estimée, ce qui renvoie aux conclusions du chapitre 2 sur la sous-estimation de la diffusion latérale. L'évaluation des performances de *Mercure* pour les maximums locaux de CTA au sol rend compte de la qualité des résultats *Mercure* (par exemple nous relevons des indices FAC2 et NMSE respectivement de 0.85 et 0.159).

L'utilisation du modèle ADMS en dehors des conditions requises ne s'est pas avérée concluante sur ce cas. En effet, une très forte sous-estimation des maximums de CTA au sol a été observée ainsi que peu de différence sur les champs de concentration suivant les directions de vent, révélant la difficulté du modèle à rendre réellement compte de l'influence de la falaise. La sous-estimation des concentrations était cependant prévisible au vu des résultats sur l'étude de Bugey pour les rejets en cheminée. Ces résultats ne vont donc pas dans le sens d'un utilisation d'ADMS sur des cas à relief fortement accidenté. Néanmoins, son emploi pour traiter des cas à topographie moins complexe reste envisageable et pourra être testé dans de futures études.

Chapitre 5

Analyse d'incertitudes pour la modélisation de la dispersion avec *Mercure*

5.1 Introduction

L'ingénierie, avec le soutien de la communauté scientifique, a su se doter de modèles de plus en plus élaborés pour répondre à ses besoins, ceci étant facilité par l'extension des moyens de calcul ces dernières décades. Cette remarque s'applique à tous les domaines scientifiques et est notamment valable pour les études d'impact en qualité de l'air et dans le domaine du nucléaire en particulier.

Cependant, la pertinence des modèles à retranscrire une réalité physique cache des incertitudes plus ou moins grandes liées d'une part aux paramètres d'entrée des modèles (caractéristiques physiques, géométriques, hypothèses de modélisation, degré de résolution, etc ...), et d'autre part à certaines de leurs données internes (paramètres physiques ou numériques). Ces incertitudes peuvent induire une variabilité significative des résultats recherchés qu'il peut sembler important non seulement de quantifier mais également de caractériser, c'est à dire déterminer quels paramètres influencent le plus la prédiction. On parle alors d'analyse d'incertitudes et de hiérarchisation (ou étude de sensibilité). Cette approche est aujourd'hui fortement recommandée dans toutes les études où la notion de risque est présente et qui servent d'appui aux instances décisionnelles (Jakeman *et al.* (2006)). Dans le domaine de l'environnement notamment, à la fois pour les thématiques liées à l'eau et l'air, une prise de conscience de l'importance des incertitudes dans la modélisation s'est opérée au cours des années 80 et conduit aujourd'hui à mettre en pratique des méthodologies précises et des techniques sophistiquées (Isukapalli & Georgopoulos (2001), van der Sluijs *et al.* (2005), Refsgaard *et al.* (2007)).

Dans le domaine de la modélisation de la météorologie méso-échelle et de la qualité de l'air, l'accent est également mis aujourd'hui sur cette thématique (Pielke (1998), Dabberdt & Miller (2000)). Pour ce faire, différentes approches existent, dépendant du degré de complexité des modèles et des coûts de calcul nécessaires aux études. Irwin *et al.* (2001) dresse précisément les besoins et attentes dans ce domaine ainsi que les solutions apportées à ce jour.

L'approche par modélisation d'ensemble, largement employée dans la communauté météorologique, est aujourd'hui une solution retenue dans l'utilisation des modèles de chimie-transport, aussi bien aux échelles méso (Dabberdt & Miller (2000)) que continentales (par exemple Galmarini *et al.* (2004), Mallet & Sportisse (2006)). Toutefois, certains auteurs mettent en oeuvre d'autres méthodes, Schöpp *et al.* (2005) ayant par exemple mis en place une méthode analytique pour propager les incertitudes dans le modèle RAINS (*"Regional Air Pollution Information and* Simulation" model) en vue d'estimer l'incertitude relative aux données d'émission. Les méthodes de Monte-Carlo peuvent également être appliquées, à l'exemple de Hanna *et al.* (1998) qui évalue la variabilité des prédictions du modèle de photochimie régional UAM-IV suivant l'incertitude sur les données météorologiques, les conditions initiales et aux limites et les émissions.

Une première approche dans l'utilisation de ces méthodes à l'échelle locale se tourne naturellement vers les modèles gaussiens, relativement simples et surtout peu onéreux numériquement. Nombre d'études ont été ainsi réalisées à l'aide de tels outils depuis une dizaine d'années. La méthode de Monte-Carlo est par exemple mise en oeuvre par Irwin & Hanna (2004) avec le modèle SCIPUF et Sullivan *et al.* (2004) pour les modèles ISCST3 et TOXST de l'USEPA. Elle est également comparée à celle des moments par Yegnan *et al.* (2002), encore sur le modèle ISCST. Le modèle ADMS-Urban fait également l'objet d'une approche probabiliste dans Colvile *et al.* (2002).

L'extension des ressources informatiques permet aujourd'hui d'envisager l'application de ces méthodes sur des modèles plus coûteux numériquement parmi lesquels figurent les outils CFD. En effet, même si la problématique liée aux incertitudes en CFD a été mise en lumière il y a assez longtemps (Metha (1991)), peu d'études ont été réalisées jusque ces dernières années. En dehors des coût de calcul élevés, ceci s'explique également par la nature fortement non-linéaire des équations de Navier-Stokes ainsi que du modèle de turbulence employé qui rétrécit le choix des méthodes applicables. Les sources d'erreurs ont été complètement identifiées et concernent à la fois les données aux conditions aux limites ou initiales, les caractéristiques physiques et géométriques, le maillage et les erreurs numériques, ces dernières donnant lieu à des méthodes spécifiques (Roache (1997)). Les méthodes applicables sont dorénavant bien connues et des guides à l'attention des utilisateurs ont été rédigés. Faragher (2004) dresse par exemple de manière très pédagogique une liste des différentes méthodes envisageables. En dehors de la méthode de Monte-Carlo, les méthodes entrevues dans la littérature sont celle des moments (par exemple Xiu & Karniadakis (2003) et Souhar et al. (2007)), les méthodes de différentiation automatique permettant de développer un modèle adjoint sur des cas simples (Alekseev & Navon (2002) et Alekseev & Navon (2003)) et celles de chaos polynomial (Knio & Maître (2006)). Toutefois, ces travaux ont été réalisés sur des cas relativement simples et ne traitent pas de la problématique générale où l'écoulement est tridimensionnel et turbulent et où plusieurs sources d'incertitude entrent en jeu. Dans ce dernier cas, nous pouvons mentionner l'approche préliminaire de Douce (2006) qui a cherché à estimer une probabilité de dépassement de seuil en température sur un coude de dilution du circuit primaire d'un coeur de réacteur nucléaire.

Nous proposons dans ce chapitre d'aborder la thématique "Analyse d'incertitudes" en l'appliquant à la modélisation de la dispersion atmosphérique à l'aide de l'outil CFD *Mercure*. À cet égard, l'étude que nous développons ici doit être perçue comme une première tentative en la matière et présente plusieurs objectifs. Il s'agit d'une part de quantifier l'incertitude globale sur le champ de concentration prédit, par rapport aux incertitudes que l'on peut avoir sur certaines données d'entrée de notre modèle. Il s'agit ensuite de parvenir à une hiérarchisation de l'influence des facteurs d'entrée, cette connaissance s'avérant essentielle dans une utilisation courante et "opérationnelle" du modèle. Enfin, il s'agit surtout de mettre en oeuvre une méthodologie et des outils qui pourront être utilisables postérieurement dans d'autres analyses d'incertitudes et pour un plus grand nombre de paramètres incertains.

L'analyse d'incertitudes qui est ici réalisée concerne l'étude de la dispersion sur le site CNPE de Bugey, développée dans le chapitre 3. Deux méthodes adaptées à nos besoins et nos contraintes sont ici employées. Une première méthode, peu répandue dans la communauté atmosphérique, et connue sous le nom de méthode de Morris, permet de répondre de manière qualitative à la question relative à l'influence des différents facteurs retenus sur les prédictions. La seconde méthode, plus connue, est celle de Monte-Carlo. Celle-ci permet à la fois de décrire l'incertitude globale propre à l'ensemble des sources d'incertitude et de définir quantitativement l'influence de chacune d'entre elles sur les prédictions. Le choix d'appliquer ces méthodes à la modélisation de la dispersion sur le CNPE de Bugey se justifie par la volonté de poursuivre ainsi l'étude développée dans le chapitre 3, en vue de l'enrichir d'une approche non déterministe, et de prolonger les études de sensibilité déjà menées sur certaines données tels que les profils amont ou la rugosité propre au domaine de calcul.

Après avoir introduit les principales bases méthodologiques et notations propres à l'analyse d'incertitudes, nous présenterons le cadre d'application retenu puis comment ont été mises en oeuvre sur ce cas d'étude chacune des deux méthodes choisies. Enfin, nous synthétiserons et comparerons les résultats fournis par les deux méthodes avant de dresser quelques conclusions.

5.2 Méthodologie générale

Nous présentons la méthodologie générale relative au calcul d'incertitudes et à la hiérarchisation des facteurs d'entrée mise en oeuvre par le *Réseau Incertitudes* d'EDF R&D et destiné à toutes les équipes d'ingénierie. L'outil Open-Turns (EADS-EDF-Phimeca (2007)), développé en partie par EDF R&D, constitue dans cette optique une plateforme complète dédiée à l'analyse et la propagation d'incertitudes applicable à tout modèle, y compris les grands codes de calcul. N'ayant pu bénéficier de l'outil dans les délais de nos travaux, nous en reprenons néanmoins la méthodologie, qui reste commune à celle trouvée dans la littérature (Saltelli *et al.* (2000), Helton & Davis (2003)).

Une analyse de sensibilité et d'incertitudes peut être découpée en quatre étapes successives :

- étape A : spécification du cas d'étude, des sources d'incertitude et critères de sortie.
- étape B : quantification des sources d'incertitudes.
- étape C : propagation d'incertitudes.
- étape C' : hiérarchisation des sources d'incertitudes.

Nous détaillons dans les paragraphes suivants chacune de ces étapes

5.2.1 Étape A : spécification du cas d'étude

La première étape de l'étude d'incertitudes peut être vue simplement comme la définition du problème, c'est à dire la formulation des objectifs de l'ingénieur en termes mathématiques appropriés.

Variables d'intérêt, modèle et variables d'entrée

Dans le cadre théorique introduit dans ce chapitre, nous nommons variable d'intérêt une variable pour laquelle l'incertitude est quantifiée. Un modèle représente simplement une fonction mathématique reliant ces variables d'intérêt aux variables d'entrée, encore appelées facteurs d'entrée dont l'incertitude propre peut être estimée soit sur la base de données statistiques, soit sur celle d'une expertise. Ainsi, le problème peut être représenté par la formulation mathématique suivante :

$$\underline{y} = g\left(\underline{x}, \underline{d}\right) \tag{5.2.1}$$

avec :

- $\underline{y} = [y_1(\underline{x}), y_2(\underline{x}), ..., y_{nY}(\underline{x})] \in \mathbb{R}^{N_y}$ est le vecteur regroupant les variables d'intérêt.
- $\underline{x} = [x_1(\underline{x}), x_2(\underline{x}), ..., x_{nX}(\underline{x})] \in \mathbb{R}^{N_x}$ est le vecteur regroupant les variables d'entrée présentant une source d'incertitude.
- $\underline{d} = [d_1(\underline{x}), d_2(\underline{x}), ..., d_{nD}(\underline{x})] \in \mathbb{R}^{N_x}$ est le vecteur regroupant les variables d'entrée supposées certaines.

5.2 Méthodologie générale

Les questions à l'origine de la démarche peuvent ainsi être formulées de la manière suivante : étant donné l'incertitude sur le vecteur \underline{x} , quelle est celle propre au vecteur \underline{y} ?. Et étant donné l'incertitude globale sur le vecteur \underline{y} , quelle est la part due à chacun des éléments de \underline{x} ? Une analyse d'incertitudes complète a pour objectif de répondre à ces deux questions successivement lors des étapes C et C'.

Critères probabilistes d'une étude d'incertitudes

Une question préliminaire mais essentielle concerne l'objectif de l'étude, celui-ci conditionnant a posteriori le choix des méthodes propres à l'étape C. Deux approches probabilistes existent :

Le critère probabiliste de dépassement de seuil

Une grande partie des méthodes constituant l'étape C utilisent le cadre probabiliste. Dans ce contexte, le vecteur \underline{y} est ici perçu comme un objet mathématique appelé vecteur aléatoire, couramment noté en lettres capitales \underline{Y} . La mesure complète de l'incertitude propre au vecteur aléatoire \underline{Y} peut d'une manière générale être représentée par sa distribution de probabilité. Un moyen de caractériser cette distribution de probabilité passe par la définition d'une fonction que l'on note F_Y appelée fonction cumulative de distribution telle que :

$$F_Y(y_1, y_2, ..., y_{nY}) = P(Y_1 \le y_1, ..., Y_{nY} \le y_{nY})$$
(5.2.2)

Dans une étude d'incertitude, l'ingénieur peut désirer accéder à cette fontion F_Y , au moins en certains points. Il peut aussi se focaliser plus précisément sur les quantités suivantes

• probabilité de dépassement de seuil : l'objectif est d'estimer la probabilité qu'un évènement tel que "la variable d'intérêt Y_k dépasse le seuil critique défini par les besoins industriels ou les règles de sûreté", soit :

$$P(Y_k \ge \text{seuil critique}) = 1 - F_{Y_k}(\text{seuil critique})$$
 (5.2.3)

• quantiles : le but est de déterminer le seuil qu'une variable d'intérêt peut dépasser avec une probabilité égale à une valeur fixée. Pour $\alpha \in]0, 1[$, le quantile $q_{Y_k}(\alpha)$ de niveau α relatif à la variable d'intérêt Y_k est défini par :

$$P\left(Y_{k} \leq q_{Y_{k}}\left(\alpha\right)\right) = F_{Y_{k}}\left(q_{Y_{k}}\left(\alpha\right)\right) = \alpha,$$

où E désigne l'espérance mathématique.

Le critère probabiliste de dispersion centrale

Dans bon nombre de cas, il peut être intéressant ou suffisant de quantifier l'incertitude à l'aide de l'espérance μ_i et de l'écart-type σ_i associés à chaque variable Y_i , qui permettent finalement de décrire "l'ordre de grandeur" de l'incertitude. Ces deux quantités sont calculées de la manière suivante :

$$\mu_{i} = E(Y_{i}) \sigma_{i}^{2} = E\left[(Y_{i} - \mu_{i})^{2}\right]$$
(5.2.4)

5.2.2 Étape B : quantification des sources d'incertitude

Cette étape a pour objet la définition du vecteur \underline{x} contenant les variables d'entrée incertaines et de définir la loi de probabilité du vecteur aléatoire \underline{X} associé. Le cas le plus simple est celui de variables indépendantes : il suffit alors de choisir une loi de probabilité indépendamment pour chaque X_i ; l'analyse reste ainsi unidimensionnelle. La détermination de chaque distribution élémentaire dépend alors des données dont l'on dispose et peut être réalisée à partir de méthodes adaptées que nous ne détaillons pas ici, ou bien également sur simple jugement d'expert. Dans le cas de variables non-indépendantes, une loi multidimensionnelle doit être formulée. Il est rare dans les études industrielles de disposer des données suffisantes à une analyse statistique multidimensionnelle. Pour contourner cette difficulté, de nombreux auteurs proposent une démarche en deux étapes :

- 1. choix de la loi de probabilité pour chaque X_i (comme dans le cas indépendant)
- 2. détermination d'un indicateur de dépendance (exemple : coefficient de corrélation de Pearson ou Spearman), par analyse statistique ou par dire d'expert

Des outils mathématiques (exemple : méthode des copules (Nelsen (1999)) permettent alors de reconstruire la loi de probabilité multidimensionnelle sur la base d'hypothèses fortes . Le choix de ces hypothèses est évidemment crucial pour ne pas fausser les résultats. Dans notre application, les variables seront supposées indépendantes, ce qui simplifie ce point méthodologique potentiellement délicat.

5.2.3 Étapes C et C': propagation et hiérarchisation des incertitudes

L'objectif de l'étape C est de propager les incertitudes propres aux variables d'entrée au sein du système, par l'intermédiaire de la relation : $\underline{y} = g(\underline{x}, \underline{d})$. La méthode appliquée dépend alors du type de critère retenu lors de l'étape A (dépassement de seuil, quantiles, espérance et variance). Pour un critère de dépassement de seuil ou de définition du couple espérance/écart-type, il existe d'une part des méthodes d'approximation relativement peu coûteuses numériquement qui sont applicables dés lors que des hypothèses fortes sur les propriétés du modèle g peuvent être faites (monotonie, quasi-linéarité, etc ...), d'autre part des méthodes robustes d'échantillonnage de type Monte-Carlo.

Une meilleure compréhension des incertitudes sur les variables d'intérêt peut ensuite être apportée par l'analyse de la contribution des différentes sources d'incertitudes en entrée, ce qui constitue l'étape C'. En fonction de la méthode retenue pour l'étape C, différentes procédures existent pour mettre en évidence ces contributions et parvenir ainsi à hiérarchiser les variables d'entrée selon leur degré d'importance ou d'influence.

Nous énumérons ci-dessous les principales méthodes existant à ce jour pour la réalisation des étapes C et C' tout en donnant leurs principales caractéristiques. Celles ci sont notamment décrites plus en détails dans Saltelli *et al.* (2000), Helton & Davis (2002) et EADS-EDF-Phimeca (2007).

Plans d'expérience et surface de réponse

L'objectif est de développer une surface de réponse qui approxime le modèle considéré. La surface de réponse remplace alors le modèle pour l'analyse d'incertitudes. Une fois les variables d'entrée sélectionnées, la méthode peut être subdivisées en cinq étapes élémentaires (Saltelli *et al.* (2000)) :

- le développement d'un plan d'expérience définissant la combinaison des valeurs des variables d'entrée pour lesquelles le modèle sera évalué.
- les évaluations du modèle sur le plan d'expérience ainsi défini
- la construction d'une surface de réponse à partir de l'approximation issue du modèle original
- l'analyse d'incertitudes
- la hiérarchisation des sources d'incertitude

La définition du plan d'expérience, qui est cruciale pour la bonne suite de l'étude, dépend de plusieurs facteurs tels que le nombre de variables d'entrée indépendantes, la possible présence

5.2 Méthodologie générale

d'effets quadratiques ou d'ordre supérieur, l'interaction entre les différentes variables ainsi que le coût de calcul. Ces plans d'expérience peuvent être définis comme la sélection de combinaisons de valeurs de variables d'entrée qui doivent *in fine* fournir le plus d'information possible sur la relation existant entre variables d'entrée et variables de sortie.

Cumul quadratique (ou cumul des Variances)

La méthode de cumul quadratique (encore appelée cumul des variances et plus anciennement analyse différentielle) est fondée sur le calcul des dérivées partielles du modèle g par rapport à chacun des éléments x_i , $i = \{1, ..., N_x\}$. Cette méthode implique la reformulation du modèle g au moyen d'une approximation de Taylor et l'emploi de techniques de propagation de la variance. La principale difficulté rencontrée dans son application réside dans l'évaluation des dérivées partielles qui nécessite l'emploi de méthodes spécifiques (méthodes de forçage brut, de l'adjoint, approximations polynomiales, fonctions de Green, etc ...). Pour les modèles présentant des nonlinéarités, à l'image de la résolution des équations de Navier-Stokes couplées à un modèle de turbulence, l'utilisation de cette méthode devient problématique et peut induire des erreurs importantes sur l'estimation des moyennes et écart-types (si $i \geq 2$).

Screening designs

La famille des techniques de *screening design* a vu le jour dans les années 80. Certains auteurs ont associé ce terme aux cas précis où le nombre de simulations envisagées est inférieur à celui des variables d'entrée, -on parle alors de "*supersaturated models*". Pour d'autres, au contraire, le nombre de facteurs est inférieur au nombre de simulations. Par exemple, Rahni *et al.* (1997) utilisent ce terme pour évoquer l'équivalent d'un plan d'expérience à deux niveaux. D'une manière plus générale, *screening design* peut juste désigner des méthodes qui, indépendamment du nombre de simulations envisagées et du nombre de facteurs retenus, ont pour objectif de décrire qualitativement la sensibilité des variables d'intérêt aux facteurs d'entrée. De par leur relativement faible exigence en terme de coût de calcul, elles sont particulièrement adaptées aux cas où est considéré un grand nombre de variables d'entrée. Plusieurs sous-familles avec des caractéristiques propres ont été développées et sont par exemple introduites dans Saltelli *et al.* (2000). Parmi celles-ci, nous pouvons notamment citer les "one-at-a-time" expériences (*OAT experiments*) qui évaluent l'influence des variables d'entrée par une succesion de simulations pour lesquelles un seul des facteurs varie à chaque fois.

Monte-Carlo

La méthode de Monte-Carlo est fondée sur l'évaluation systématique des variables d'intérêt à partir d'un ensemble de N_x -uplets de variables d'entrée sélectionnées aléatoirement. Elle permet à la fois de déterminer l'incertitude globale sur les variables d'intérêt Y_i , à travers l'estimation d'une moyenne m_{Y_i} , de son écart-type σ_{Y_i} ainsi que d'un intervalle de confiance associé, de déterminer une probabilité de dépassement de seuil ou un quantile et enfin d'évaluer la contribution de chacun des facteurs d'entrée sur les variables de sortie. Elle est applicable quel que soit le modèle employé et le nombre N de simulations conditionne la qualité des résultats. Ainsi, le niveau de confiance accordé aux estimations de m_{Y_i} et σ_{Y_i} augmente-t-il proportionellement à \sqrt{N} alors que l'évaluation d'une probabilité de dépassement de seuil peut nécessiter une valeur de N très élevée. Cette méthode, retenue dans notre cas d'étude pour la somme d'informations fournie, sera abordée plus en détails dans la section 5.4.

Méthode des moments : FAST et Sobol'

Une autre famille de méthodes, pouvant être perçues comme un prolongement possible aux méthodes de Monte-Carlo classiques, est celle fondée sur l'analyse de la variance et qui porte souvent le nom générique de méthode des moments. Ces méthodes prennent différentes formes dans la littérature mais toutes ont pour objectif l'estimation de facteurs de corrélation encore dénommés facteurs d'importance en évaluant les variances conditionnelles des différentes variables d'intérêt. Les méthodes les plus connues sont celle de Sobol' et la méthode FAST (*The Fourier amplitude sensitivity test*). La première fournit des facteurs de corrélation d'ordre multiple est ainsi particulièrement adaptée aux cas non-linéaires. Cependant, elle est très exigeante en terme de coût de calcul. La seconde permet d'accéder aux facteurs d'ordre premier sous leur forme la plus simple alors que des méthodes "étendues" rendent possible l'estimation des ordres supérieurs.

FORM / SORM

Les méthodes FORM et SORM sont toutes deux adaptées au cas où l'on s'intéresse à la probabilité d'un évènement du type *dépassement de seuil*. Leur formalisme est assez compliqué et une première familiarisation avec celui-ci peut se faire à l'aide de Saltelli *et al.* (2000) et EADS-EDF-Phimeca (2007). Pour ce type de critère probabiliste, elles n'exigent pas un grand nombre de simulations, contrairement à la méthode de Monte-Carlo. Outre la probabilité associée à l'évènement considéré, la sensibilité de l'évènement à chacun des facteurs peut être également estimée. La qualité des résultats obtenus par ces méthodes dépend de la fonction de transformation envisagée, de l'algorithme d'optimisation utilisé pour trouver le point de fonctionnement, des méthodes de calcul des gradients employées et également du modèle physique.

5.3 Application à la modélisation de la dispersion sur le site CNPE de Bugey

5.3.1 Cas d'étude

Le cadre d'application retenu pour la mise en oeuvre d'une analyse d'incertitudes est le cas de l'étude de la dispersion sur le site CNPE de Bugey. Ce choix est conditionné par le fait que l'étude a préalablement été mise en oeuvre en amont (chapitre 3), permettant ainsi de reprendre nombre d'éléments du cas de référence. Par ailleurs, l'analyse de sensibilité et d'incertitudes fera ainsi suite aux premières études de sensibilité réalisées au cours de l'étude (nature des profils amont, rugosité).

Nous reprenons une seule des configurations de l'étude en soufflerie qui est celle du rejet en cheminée par vent de Sud. Le rejet est ici modélisé au moyen d'un terme source à une seule cellule. Afin d'optimiser le temps de calcul, le domaine est amputé d'une large partie en amont du bâtiment UNGG, le domaine s'étendant de -500 m dans la direction longitudinale y jusque 2700 m. La partie supprimée du domaine a engendré quelques modifications du maillage et a permis de réduire de 25 % le nombre d'éléments. Le profil amont est alors imposé aux nouvelles faces d'entrée. Le test réalisé avec le profil utilisé dans le chapitre 3 ($z_0 = 0.04$ et $L_{MO} = 1000$ m) n'entraîne aucune modification d'importance sur la dynamique de l'écoulement due à cette réduction de domaine.

5.3.2 Variables d'intérêt (étape A)

Étant donné la complexité liée à l'analyse de champs tridimensionnels, tout particulièrement lorsqu'il s'agit d'y observer une variabilité, il a été décidé de se focaliser sur le champ "2D" surfacique au niveau du sol de concentrations moyennes (au sens de Reynolds) que l'on note $\overline{C_s}$ et qui est exprimé en Coefficients de Transfert Atmosphérique (CTA), variable de première importance dans les études de sûreté. Par ailleurs, nous avons introduit des variables d'intérêt locales situées sur une partie des traces au sol (profils TS) déjà utilisées dans le chapitre 3 et dont nous rappelons la localisation sur la figure 5.1. Au nombre de dix et localisées aux abscisses y = 240 m - 300 m - 450 m - 625 m - 850 m - 1150 m - 1450 m - 1750 m - 2100 m - 2500 m, il s'agit de :

- C_{max} , le maximum de CTA pris sur le profil (exprimé en $s.m^{-3}$)
- Y_{max} , l'abscisse dans la direction transverse à l'écoulement pour laquelle le maximum est observé (en m)
- C_y , le CTA intégré le long du profil TS (en $s.m^{-2}$)



FIG. 5.1 : Visualisation de la surface du domaine de calcul Mercure et des différents profils transverses au sol sur lesquels sont estimées les variables d'intérêt C_{max} , Y_{max} et C_y .

5.3.3 Variables d'entrée (étape A)

Le choix et le nombre des variables d'entrée sélectionnées répondaient à deux souhaits : d'une part avoir un nombre de facteurs assez réduit pour une phase d'étude méthodologique ne nécessitant pas des coûts de calcul démesurés, d'autre part répondre aux premières interrogations que l'on peut avoir en terme de données d'entrée du modèle *Mercure*, à savoir la spécification des conditions à la limite en entrée de domaine, question d'ordre général, et la modélisation du terme source dans le cas précis d'un rejet en cheminée. En effet, cette dernière question répond au besoin de connaître l'impact d'une erreur sur la localisation de la cellule de rejet lorsqu'est modélisée implicitement la surhauteur. Cette approche peut en effet être retenue dans les études "opérationnelles" pour lesquelles un maillage raffiné autour de la source n'est pas envisagé (par exemple, dans le cas des rejets en cheminée sur le site de Flamanville, cf chapitre 4). Les facteurs incertains que l'on met ici en avant sont en réelle correspondance avec les principales sources d'incertitude liées aux problèmes de dispersion définies dans la littérature. Elles ont été rappelées récemment par Hanna (1997) (données météorologiques, localisation de la source, trajectoire initiale du panache). Cinq variables d'entrée ont ainsi été choisies que nous énumérons ci-dessous :

- α : angle de déviation du vent par rapport à la direction moyenne (dans l'axe Sud-Nord), propre à la spécification du profil amont.
- $1/L_{MO}$: inverse de la longueur de Monin-Obukhov, propre à la spécification de la stabilité du profil amont.
- z_{01} : rugosité dynamique utilisée dans la spécification du profil amont.
- z_{02} : rugosité dynamique du domaine de calcul, utilisée dans le traitement des conditions à la limite au niveau du sol. La possibilité est ici offerte d'imposer une rugosité surfacique dans le domaine différente de celle appliquée en entrée.
- (Xs, Ys, Zs) : position de la cellule de rejet.

5.3.4 Formulation du problème et critère associé à l'étude (étape A)

Ayant défini les variables d'entrée et les variables d'intérêt, nous sommes en mesure de formuler le problème :

- vecteur des variables d'intérêt : $\underline{y} = [\overline{C_s}, C_{max}, Y_{max}, C_y]$
- vecteur des variables d'entrée : $\underline{x} = [\alpha, 1/L_{MO}, z_{01}, z_{02}, (Xs, Ys, Zs)]$
- problème à résoudre :

$$y = g\left(\underline{x}, \underline{d}\right),\tag{5.3.1}$$

où la fonction g représente le calcul effectué avec le modèle *Mercure*. Le vecteur \underline{d} est représentatif des autres entrées du modèle supposées ici parfaitement connues.

Enfin, il reste à définir le critère de l'étude. Nous adoptons ici une approche probabiliste. Il apparaissait par ailleurs délicat dans cette première approche de s'intéresser à une probabilité de dépassement de seuil ou de détermination de quantiles, toujours plus coûteuse. Aussi a-t-il été choisi de chercher à définir la dispersion globale des résultats (critère probabiliste de dispersion centrale) à travers l'estimation des moyenne et écart-type de la distribution des variables d'intérêt.

5.3.5 Quantification des incertitudes liées aux variables d'entrée (étape B)

Nous donnons pour chacun des facteurs sa loi de distribution :

- α : Loi normale centrée sur 0 et d'écart-type $\sigma_{\alpha} = 5^{\circ}$.
- $1/L_{MO}$: loi triangulaire centrée sur 0, cette valeur étant exclue, les limites de l'intervalle de variation étant fixées aux limites des plages stables et instables, soit $1/L_{MO} \in$ [-1/100; 1/100]. Nous permettons ainsi d'imposer en amont un profil légèrement stable ou instable, s'écartant de la neutralité au sens strict $(1/L_{MO} \rightarrow 0)$.
- z_{01} et z_{02} : lois log-normales centrées sur $z_{0m} = 0.1$ m et $z_{0i} \in [0.001 \text{ m}; 1 \text{ m}]$
- (*Xcel*, *Ycel*, *Zcel*) : l'ensemble des cellules de rejet possibles est nécessairement ici un ensemble discret de cellules dont chacune est affectée d'un poids de vraisemblance. Une boîte constituée de 5 niveaux dans la verticale et de trois niveaux dans chaque direction horizontale a été choisie, soit un total de 45 cellules dont celle centrale (cellule 23) est la cellule de rejet utilisée dans le chapitre 3 correspondant à celle la plus vraisemblable. Dans chacune des directions est appliquée une loi triangulaire centrée sur la cellule 23 permettant d'affecter *in fine* un poids global, produit des trois poids élémentaires, à chacune des cellules (cf Fig. 5.2).

5.3.6 Les simulations Mercure

L'étape de propagation d'incertitudes est tout simplement la réalisation d'un nombre déterminé N de simulations Mercure pour chacun des vecteurs $\underline{X}^{(k)}$, $\mathbf{k} = \{1, ..., N\}$. Le nombre N



FIG. 5.2 : Ensemble des cellules de rejet et définition de leur poids probabiliste dans les trois directions X, Y et Z (rejet en cheminée par vent de Sud sur le site CNPE de Bugey).

dépendra de la méthode appliquée et des contraintes imposées par le temps de calcul. Les simulations *Mercure* sont réalisées sur le cluster du département MFEE à Chatou (cluster équipé de 128 processeurs). Un calcul monoprocesseur pour le maillage utilisé est proche de 24 heures. La réalisation des calculs en chaîne a nécessité ici la réalisation d'un script de lancement adapté au cluster.

5.4 Calcul d'incertitudes et hiérarchisation par la méthode de Monte-Carlo

La première méthode appliquée dans notre étude est celle de Monte-Carlo qui permet, comme on l'a vu, de quantifier dans le même temps l'incertitude obtenue sur les variables d'intérêt et la sensibilité aux différents facteurs d'entrée considérés. En cela, cette méthode fournit une très grande quantité d'informations. La contrepartie est qu'elle nécessite un coût de calcul élevé si l'on souhaite atteindre un haut niveau de confiance sur les résultats. L'ensemble des éléments théoriques et des techniques relatives à l'échantillonnage des données d'entrée et à l'exploitation des simulations dont nous en reprenons une partie ici sont notamment détaillés dans Helton (2005), Helton & Davis (2002), Helton & Davis (2003), Saltelli *et al.* (2000), et EADS-EDF-Phimeca (2007). L'US-EPA a également émis nombre de recommandations sur la démarche à suivre dans le cadre d'application de cette méthode, par exemple à travers USEPA (1997).

5.4.1 Objectifs et mise en oeuvre de la méthode

Le but de la méthode de Monte-Carlo est double :

- évaluer les caractéristiques de la partie centrale de la distribution de probabilité associée à la variable Y_i à travers l'espérance m_{Y_i} et son écart-type σ_{Y_i} , à partir de la distribution de probabilité du vecteur aléatoire \underline{X} .
- analyser l'influence du vecteur aléatoire \underline{X} sur les variables Y_i à travers la contribution de chacune de ses composantes, permettant ainsi de hiérarchiser les facteurs d'entrée en terme d'influence ou d'importance.

La méthode de Monte-Carlo est simple à mettre en oeuvre et comporte les étapes suivantes :

1. la sélection des variables d'entrée et des lois de distribution associées (déjà réalisée dans les paragraphes 5.3.3 et 5.3.5)

- 2. la génération d'un échantillon de $N N_x$ -uplets (voir paragraphe suivant) puis l'évaluation des variables d'intérêt pour chacun d'eux
- 3. la propagation d'incertitudes (paragraphe 5.4.3)
- 4. la hiérarchisation des incertitudes (paragraphe 5.4.4)

Le nombre de simulations N, égal à la dimension des échantillons de variables aléatoires, est limité par le coût de calcul des simulations *Mercure*. Dans ce but, une valeur N = 100 a été choisie, permettant de ne pas avoir un temps de calcul trop excessif tout en étant *a priori* suffisant pour donner des informations de qualité sur la sensibilité des différents facteurs.

5.4.2 Échantillonage

La phase d'échantillonnage est une étape essentielle dans l'application de la méthode de Monte-Carlo et conditionne la qualité et la confiance que l'on pourra accorder dans l'estimation de l'incertitude et de l'influence des facteurs d'entrée. Cette étape nécessite ainsi un véritable travail sur les données d'entrée, comme il l'est mentionné dans USEPA (1999). Elle consiste en la sélection de $N N_x$ -uplets de variables d'entrée pour les distributions associées à chacune d'elles. Plusieurs procédures d'échantillonnage éprouvées et largement détaillées dans Helton & Davis (2002) et Helton & Davis (2003) existent :

- l'échantillonnage aléatoire (random sampling) : un échantillon de composantes $[\underline{x}^1, \underline{x}^2, ..., \underline{x}^N]$ est choisi de manière aléatoire parmi l'ensemble des valeurs possibles pour chacune des composantes x_i à partir de sa distribution. On parle d'échantillonnage pseudo-aléatoire lorsque les nombres aléatoires sont générés par des processus déterministes.
- l'échantillonnage stratifié (stratified sampling) ou d'importance : le but est de parvenir à mieux couvrir l'ensemble des distributions propres à chacune des composantes x_i . Soit S l'espace d'échantillonnage du vecteur \underline{X} . Une décomposition de l'espace S en k sous-espaces disjoints S_k ne présentant pas nécessairement une probabilité cumulée p_k identique, et le tirage aléatoire dans chacun des sous-espaces S_k permet en effet de mieux décrire l'ensemble de l'espace de départ, en prenant mieux en compte la loi de distribution propre à chacune des composantes.
- l'échantillonnage Hypercube Latin (Latin Hypercupe sampling, LHS) : ce type d'échantillongage peut être perçu comme un cas particulier de l'échantillonnage stratifié. La plage de valeurs propre à chaque composante X_i , $i = \{1, ..., N_x\}$, est décomposée en k intervalles d'égale probabilité 1/N et un tirage est opéré dans chaque intervalle pour chacun des facteurs donnant naissance à N_x vecteurs X_k^s , $k = \{1, ..., N\}$. La combinaison aléatoire sans remise des composantes des vecteurs X_k^s permet ainsi de générer N N_x -uplets.

La comparaison des procédures aléatoire et Hypercube réalisée par certains auteurs et synthétisés par Helton & Davis (2003) ou Saltelli *et al.* (2000) a mis en évidence que la technique LHS est mieux adaptée aux cas où la variable d'intérêt est dominée par seulement quelques variables d'entrée. Par ailleurs, cette technique fournit également de meilleurs résultats que l'échantillonnage aléatoire lorsque la variable d'intérêt est décrite de manière monotone en fonction des variables d'entrée. Enfin, il a été prouvé que LHS donne asymptotiquement un estimateur présentant un écart-type plus petit que la procédure purement aléatoire. Il existe toutefois des cas dans la littérature pour lesquels le modèle n'est ni monotone, ni additif et où LHS fournit des performances semblables aux deux autres méthodes.

Dans notre étude, la méthode LHS à été retenue. Les échantillons élémentaires pour chacune des variables α , $1/L_{MO}$ et z_{01} sont illustrés par les figures 5.3(a) à 5.3(c). Ils comportent chacun 100 éléments. Le tirage relatif au facteur z_{02} , bien que différent, présente une distribution équivalente à z_{01} et n'est pas ici illustré.



(c) Variable z_{01}

FIG. 5.3 : Représentation des échantillons des variables d'entrée α (angle de déviation du vent), $1/L_{MO}$ (inverse de la longueur de Monin-Obukhov) et z_{01} (rugosité du profil amont de vitesse) obtenus par tirage LHS (N = 100).

5.4.3 Analyse des incertitudes

Moyennes et variances du champ de concentration surfacique

La moyenne m_{Y_i} et l'écart-type σ_{Y_i} des distributions de variables aléatoires Y_i issues des N simulations sont définis par :

$$m_{Y_{i}} = \int u f_{Y_{i}}(u) du$$

$$\sigma_{Y_{i}} = \sqrt{\int (u - m_{Y_{i}})^{2} f_{Y_{i}}(u) du}$$
(5.4.1)

où f_{Y_i} représente la fonction densité de probabilité associée à la variable Y_i .

L'estimation par la méthode de Monte-Carlo consiste alors à approximer les moyennes et écart-type théoriques par les moyenne et écart-type empiriques suivants :

$$\widehat{m_{Y_i}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} y_i^j$$

$$\widehat{\sigma_{Y_i}} = \sqrt{\sum_{j=1}^{N} \left(y_i^j - \widehat{m_{Y_i}}\right)^2}$$
(5.4.2)

S'il ne s'agit que d'estimations, leur convergence vers les grandeurs m_{Y_i} et σ_{Y_i} est assurée par la loi des grands nombres lorsque N tend vers l'infini. Par ailleurs, le Théorème de la Limite Centrale rend possible le contrôle de l'écart entre estimation et valeur théorique au moyen d'un intervalle de confiance pour N suffisamment grand. Pour une probabilité α fixée, il est ainsi possible d'estimer avec un niveau de confiance γ que l'estimateur se situe entre les bornes $\widehat{m_{i,inf}}$ et $\widehat{m_{i,sup}}$ calculées analytiquement. Par exemple, pour $\gamma = 0.95$, nous pouvons définir la probabilité suivante : P $(\widehat{m_{i,inf}} \leq \widehat{m_{Y_i}} \leq \widehat{m_{i,sup}}) = 0.95$. Dans le cas d'un échantillonnage aléatoire simple, ces bornes s'écrivent (EADS-EDF-Phimeca (2007)) :

$$\widehat{m_{i,inf}} = \widehat{m_{Y_i}} - 1.96 \frac{\widehat{\sigma_{Y_i}}}{\sqrt{N}}$$
(5.4.3)

$$\widehat{m_{i,sup}} = \widehat{m_{Y_i}} + 1.96 \frac{\widehat{\sigma_{Y_i}}}{\sqrt{N}}$$
(5.4.4)

Celles correspondant à un échantillonnage LHS sont plus délicates à évaluer. Nous garderons ainsi l'intervalle de confiance relatif à l'échantillonnage aléatoire, sachant qu'il s'agit nécessairement d'un majorant par rapport à celui obtenu par LHS.

En appliquant ces résultats aux valeurs de CTA obtenues en chacune des faces de bord (comprenant le sol et les bâtiments) pour les 100 simulations *Mercure*, il est alors possible de déterminer l'espérance et la variance du champ moyen de concentrations (exprimé en CTA). Les figures 5.4 et 5.5 illustrent les champs ainsi obtenus. En comparant le champ "moyen" de concentration issu des N simulations (on fait ici l'abus de notation à travers le terme "moyen", ce terme correspondant à la moyenne d'ensemble des 100 simulations et non relatif à l'approche RANS) au champ obtenu dans le chapitre 3 (Fig. 5.4(b)), nous pouvons faire plusieurs remarques. En premier lieu, nous observons un panache beaucoup plus étalé, ce qui est vraissemblablement lié

à la variabilité introduite sur la direction principale du vent. Nous notons par ailleurs une zone de concentrations maximales de valeurs assez proches à celles observées dans la simulation de référence (supérieures à $2.10^{-5} \ s.m^{-3}$). Elle est localisée autour du réacteur n°5, traduisant un impact moyen du panache à ce niveau, jusqu'à un peu plus en aval à hauteur des aéroréfrigérants. Nous remarquons également l'influence des aéroréfrigérants sur la trajectoire moyenne du panache. Plus en aval, nous observons deux trajectoires privilégiées de celui-ci, une plus pronon-cée vers l'Ouest par rapport à l'axe Sud-Nord, l'autre vers l'Est. En cela, nous ne retrouvons pas la direction principale du panache dans l'axe Sud-Nord tel qu'observée sur le champ de référence, ainsi que la zone de concentrations maximales en aval du dernier aéroréfrigérant. Il semble ainsi que la direction de vent Sud-Nord soit à l'origine d'une configuration singulière quant à la localisation du maximum de concentration.

L'observation du champ de variance (Fig. 5.5) montre que la dispersion des données de simulation est importante dans le sillage ou en champ proche de la source avec un ordre de grandeur comparable aux concentrations moyennes. Nous observons par ailleurs que la plus grande variabilité absolue est observée près de la source, ce qui était attendu puisque les valeurs du champ moyen y sont les plus élevées.



FIG. 5.4 : Visualisation de la trace au sol du panache exprimé en CTA (s.m⁻³). a) : issue des 100 simulations Monte-Carlo après application de l'opérateur de moyenne à chacune des faces de bord - b) : issue de la simulation déterministe (chapitre 3).

Distribution des variables d'intérêt C_{max} , Y_{max} et C_y

L'analyse porte désormais sur les variables d'intérêt C_{max} , Y_{max} et C_y définies sur chacun des profils au sol. Le tracé des fonctions de distribution cumulative (CFD) (ou de leur complément défini par CCDF = 1 - CDF) et des histogrammes est un des moyens utilisés pour représenter l'ensemble des valeurs issues des simulations pour chacune des variables et d'en extraire des probabilités événementielles, telles qu'un dépassement de seuil. La figure 5.6 en donne deux



FIG. 5.5 : Visualisation du champ d'écart-type surfacique relatif à la distribution de concentrations moyennes en chaque face de bord issue des 100 simulations Monte-Carlo

illustrations pour la variable C_{max} aux distances y = 300 m et y = 2500 m. Cependant, l'obtention d'une probabilité de dépassement de seuil requiert un nombre de simulations plus important que celui envisagé dans notre étude. La figure 5.6 permet cependant d'observer que la distribution est beaucoup plus uniforme en aval de la zone de bâtiments qu'elle ne l'est à l'intérieur de celle-ci. Cette remarques peut être étendue à l'ensemble du domaine.

L'analyse se poursuit par l'analyse des "boxplots" qui donnent une autre vision, synthétique et précise, de la dispersion des résultats. Les figures 5.7(a) à 5.7(c) fournissent ainsi les boxplots pour les trois variables C_{max} , C_y et Y_{max} . Pour chacun d'entre eux, les limites de la barre représentent les quartiles inférieur et supérieur nommés $x_{0.25}$ et $x_{0.75}$. La ligne verticale à l'intérieur de la barre correspond à la valeur médiane $(x_{0.5})$. La barre à droite de la boîte s'étend du minimum $x_{0.75} + 1.5 (x_{0.75} - x_{0.25})$ jusqu'à la valeur maximale alors que la barre de gauche s'étend pour sa part du maximum $x_{0.25} + 1.5 (x_{0.75} - x_{0.25})$ jusqu'à la valeur minimale. Enfin, les observations se situant en dehors de ces limites sont repérées par un signe distinctif.

Chacun des boxplots fournit des informations intéressantes. La figure 5.7(c) montre que le panache est effectivement dévié en moyenne vers l'Ouest près du rejet sous l'influence des bâtiments et que les cas de déviation vers l'Est sont marginaux (situés à droite de la borne supérieure). La déviation maximale est observée en y = 450 m, soit en aval de la tranche 4-5. Cette figure met également en évidence la très grande dispersion des Y_{max} s'amplifiant avec la distance, qui est *a priori* directement corrélée à la variabilité sur α . Enfin, les cas de déviation vers l'Ouest en aval des aéroréfrigérants sont plus fréquents, comme le laissait penser l'analyse du champ moyen (au sens de la moyenne d'ensemble) réalisée précédemment.

Concernant les C_{max} , nous observons une dispersion des résultats plus importante près du rejet au sein de la zone de bâtiments, ces derniers induisant nécessairement une variabilité plus grande liée à la complexité de l'écoulement. Nous retrouvons bien la distance à laquelle est observé le maximum moyen absolu, soit à la distance y = 625 m, au milieu des aéroréfrigérants. En fonction des conditions dynamiques en amont des aéroréfrigérants, le passage de ces derniers entraîne quelques cas singuliers (points rouges en dehors de la limite supérieure). En aval, nous



FIG. 5.6: Fonctions de distribution cumulative et histogrammes de distribution pour la variable C_{max} aux distance y = 300 m et y = 2500 m issus des 100 simulations Mercure.



FIG. 5.7 : Boxplot représentant la distribution des variables d'intérêt C_{max} , C_y et Y_{max} aux différentes distances en aval du rejet.

observons la décroissance des C_{max} et une dispersion assez significative des résultats.

L'influence de la zone de bâtiments sur la variable C_y est encore plus significative (notamment en y = 450 m), la figure 5.7(b) montrant une très large dispersion des résultats jusqu'à la distance y = 850 m. Le maximum est d'ailleurs observé à cette distance, correspondant à un étalement maximal du panache induit par le passage des aéroréfrigérants. Plus en aval, les remarques sont semblables à celles évoquées pour la variable C_{max} .

Incertitudes relatives à la variable C_{max}

Nous refermons cette analyse d'incertitudes en se focalisant sur la variable C_{max} . Sur la figure 5.8 ont été tracées les courbes d'évolution des indices paramètres statistiques suivants :

- la moyenne estimée suivant la formule 5.4.2
- les bornes inférieure et supérieure de l'intervalle de confiance à 95 % associé à l'estimation de la moyenne (Ed. 5.4.4) pour un échantillonnage aléatoire simple (étant respectivement un minorant et un majorant des bornes correspondant à la technique LHS)
- la médiane des distributions
- le quantile à 95 % ainsi que la borne supérieure de l'intervalle de confiance à 95 % pour l'estimation de ce quantile, le mode de calcul étant fourni dans EADS-EDF-Phimeca (2007).

La courbe correspondant au cas déterministe issue du chapitre 3 a par ailleurs été ajoutée.

Cette figure est intéressante à plusieurs titres. Elle montre d'une part que les comportements médian et moyen sont identiques une fois le bloc des aéroréfrigérants franchi (y = 850 m) et d'autre part que le moyenne est supérieure dans la zone des bâtiments, comme le laissait supposer le boxplot (certains cas conduisent à un dépôt extrême au sol). Ces observations sont confirmées par l'évolution du quantile à 95 % qui vaut près de 3 fois les valeurs movenne et médiane aux plus courtes distances et moins de 2 en fin de domaine. D'autre part, nous sommes en mesure de mettre en parallèle les résultats issus de la simulation de référence et ceux probabilistes. Il est notamment intéressant de constater que les valeurs "déterministes" restent comparables aux moyenne et médiane jusqu'à hauteur des aéroréfrigérants puis qu'une nette différence s'établit à partir de ces derniers. Les valeurs "déterministes" obtenues sont alors largement supérieures aux valeurs probabilistes, quasiment d'un facteur 2. Le niveau atteint par les valeurs "déterministes", supérieur au quantile à 95 %, laisse supposer que le cas de référence est réellement singulier et se révèle pénalisant dans l'évaluation des maximums de CTA au sol. En se remémorant l'écart d'un facteur 2 sur les maximums de CTA au sol entre les simulations Mercure et l'essai en soufflerie, nous voyons ici que les valeurs moyenne et médiane de maximum de CTA sont ainsi très proches des mesures.

5.4.4 Hiérarchisation des incertitudes

Nous développons ici le deuxième volet de l'exploitation des 100 simulations qui concerne la hiérarchisation des facteurs d'entrée sélectionnés (étape C').

Approche qualitative de l'influence des facteurs d'entrée

Le tracé et l'analyse des "scatter-diagrammes" (ou "scatterplots") représentant l'ensemble des N valeurs prises par la composante Y_i $(1 \le i \le N_y)$ du vecteur \underline{Y} en fonction des N données initiales de la variable d'entrée X_j $(1 \le j \le N_x)$ est une procédure incontournable de l'étude de sensibilité. Cette approche très simple permet en effet de discerner si une variable d'entrée a une influence sur la variable d'intérêt et le cas échéant quelle est la nature de celle-ci (monotonie, linéarité). Notamment, l'utilisation de la technique d'échantillonnage LHS est particulièrement adaptée à l'exploitation des scatter-diagrammes grâce à la bonne couverture de l'ensemble des valeurs possibles prises par la variable d'entrée.



FIG. 5.8 : Évolution dans le domaine des paramètres statistiques définis en chaque profil TS pour la variable C_{max} et comparaison à la simulation de référence. Les paramètres statistiques utilisés sont les suivants : moyenne (et les bornes inférieure et supérieure de son intervalle de confiance à 95 %), médiane et quantile à 95 % (et la borne supérieure de son intervalle de confiance à 95 %).

Les "scatter-diagrammes" ont ici été tracés pour chacune des relations $Y_i = g(X_j)$. La valeur absolue de $1/L_{MO}$ a été utilisée pour mettre en avant la monotonie des relations liant C_{max} et C_y à celle-ci. Par ailleurs, la variable d'entrée *Cel* est ici dissociée en trois sous-variables *Xcel*, *Ycel* et *Zcel* afin d'observer l'influence séparée de la hauteur de rejet et des autres coordonnées spatiales. Nous passons en revue chacune des variables d'entrée et donnons le résultat de notre observation pour chacune des variables de sortie (Tableau 5.1). Le cas échéant, quelques figures illustreront nos conclusions. L'ensemble des figures est fourni en Annexe F.

	$\mathbf{C}_{\mathbf{max}}$	C_y	Y_{max}	
α	pas de signal	signal faible	signal fort, linéarité ≥ 850 m	
		entre 450 et 850 m	(Fig. 5.9)	
$1/L_{MO}$	signal fort ≥ 1150 m (Fig. 5.10)	signal fort ≥ 1150 m	pas de signal	
z ₀₁	pas de signal	pas de signal	pas de signal	
z ₀₂	pas de signal	pas de signal	pas de signal	
Xcel	pas de signal	pas de signal	pas de signal	
Ycel	pas de signal	pas de signal	pas de signal	
Zcel	signal fort ≤ 1150 m (Fig. 5.11)	signal fort ≤ 1150 m	pas de signal	

TAB. 5.1 : Qualification de l'influence des facteurs d'entrée sur les variables d'intérêt issue de l'analyse des "scatter-diagrammes" (signal = influence visible à partir du scatter-diagramme)



FIG. 5.9 : Scatter-diagramme représentant la distribution de la relation $Y_{max} = f(\alpha)$ issu des 100 simulations Mercure pour les différentes distances en aval du rejet.



FIG. 5.10 : Scatter-diagramme représentant la distribution de la relation $C_{max} = f(|1/L_{MO}|)$ issu des 100 simulations Mercure pour les différentes distances en aval du rejet.



FIG. 5.11 : Scatter-diagramme représentant la distribution de la relation $C_{max} = f(Zcel)$ issu des 100 simulations Mercure pour les différentes distances en aval du rejet.

Hiérarchisation des facteurs d'entrée

Méthodes disponibles :

Les différentes méthodes applicables dans le cadre d'une méthode de Monte-Carlo en vue d'analyser quantitativement l'influence des facteurs d'entrée sur les variables d'intérêt dépendent généralement du type de relation existant entre celles-ci. Nous énumérons brièvement les méthodes les plus couramment utilisées, le lecteur pouvant en trouver une description détaillée dans Helton & Davis (2002), Saltelli *et al.* (2000) ou EADS-EDF-Phimeca (2007)

- Méthode de Sobol' : Le calcul des indices de Solbol' est la manière la plus complète pour décrire l'influence des variables d'entrée. Elle s'applique aussi bien à des variables indépendantes que dépendantes et n'exige pas d'hypothèse sur les relations entre variables d'entrée et d'intérêt. Néanmoins, elle nécessite un grand nombre de simulations.
- Régression multilinéaire : Cette méthode mesure les relations de linéarité existant entre les composantes X_j et Y_i . Elle est surtout appropriée aux cas où des relations proche de la linéarité entre les variables Y_i et les composantes du vecteur d'entrée sont observées.
- Hiérarchisation à travers le calcul des coefficients de Pearson : La méthode est également applicable aux cas où des relations de linéarité existent entre facteurs d'entrée et variables de sortie. L'estimation des coefficients de Pearson, compris entre -1 et 1, permet de hiérarchiser les différents paramètres en fonction de leur valeur absolue.
- Hiérarchisation à travers le calcul des coefficients de Spearman : L'approche est similaire à l'utilisation des coefficients de Pearson, à ceci près que les coefficients de Spearman décrivent des relations de monotonie entre les composantes X_j et les variables Y_i .
- Hiérarchisation à travers le calcul des coefficients partiels de Pearson : Cette méthode s'applique au cas où la variable Y_i peut encore être décrite à travers une formulation multilinéaire en fonction des variables d'entrée, mais elle ne fait pas l'hypothèse de l'indépendance des variables d'entrée. Ainsi, des dépendances statistiques ou des corrélations entre variables d'entrée peuvent être prises en compte.
- Hiérarchisation à travers le calcul des coefficients partiels de Spearman : La démarche est équivalente à la précédente en considérant ici des relations de monotonie entre variables d'entrée X_i et variables d'intérêt Y_i et en évaluant les coefficients de Spearman.

Application à notre cas :

Dans notre cas, mise à part l'influence de l'angle α sur la variable Y_{max} , aucune réelle relation de linéarité n'apparaît. L'utilisation des coefficients de Spearman, adapté au cas présent où les variables sont supposées indépendantes, peut alors s'avérer comme la plus pertinente, sachant que le coût de calcul introduit par la méthode de Sobol' nous interdit de l'utiliser.

Le calcul des coefficients de Spearman n'utilise pas directement les vecteurs X_j et Y_i mais les vecteurs transformés $[X_j]$ et $[Y_i]$ constitués des indices correspondant à la position des composantes des vecteurs X_j et Y_i lorsque celles-ci sont rangées par ordre croissant. Les coefficients de Spearman notés $\hat{\rho}_{X_iY_i}^S$ s'écrivent alors :

$$\widehat{\rho}_{X_jY_i}^S = \frac{\sum_{k=1}^N \left([X_j]^k - \overline{[X_j]} \right) \left([Y_i]^k - \overline{[Y_i]} \right)}{\sqrt{\sum_{k=1}^N \left([X_j]^k - \overline{[X_j]} \right)^2 \left([Y_i]^k - \overline{[Y_i]} \right)^2}}$$
(5.4.5)

où $\overline{[X_j]}$ et $\overline{[Y_i]}$ représentent la moyenne empirique des échantillons $([X_j]^1, ..., [X_j]^N)$ et $([Y_i]^1, ..., [Y_i]^N)$.

Les coefficients de Spearman prennent une valeur comprise entre -1 et 1. En utilisant la valeur absolue, il est alors possible de hiérarchiser les différents paramètres selon leur degré

d'importance. Par ailleurs, le signe du coefficient apporte une information supplémentaire sur la monotonie de la dépendance. Enfin, il est défini un seuil de confiance α en-dessous duquel les valeurs des coefficients de Spearman ne peuvent être considérées comme fiables et qui correspond à du bruit d'estimation statistique. Ces valeurs seuils évoluent de manière décroissante en fonction de la taille de l'échantillon N. Elles sont regroupées dans une table disponible dans Saporta (1990).

Dans le cas présent, la valeur absolue des coefficients de Spearman $\widehat{\rho_{Y_iX_j}^S}$ est utilisée. Les coefficients sont calculés pour chacune des variables d'intérêt C_{max} , C_y et Y_{max} et chacun des facteurs d'entrée α , $1/L_{MO}$, z_{01} , z_{02} et Ccel, aux dix différentes positions en aval du rejet. Une hiérarchisation des différents facteurs est alors possible : plus grande est la valeur de $|\widehat{\rho_{Y_iX_j}^S}|$, plus grande est l'influence du facteur X_j sur la variable Y_i .

La première analyse concerne l'influence de la position de la cellule de rejet Ccel à travers chacune de ses composantes Xcel, Ycel et Zcel. La figure 5.12 décrit l'évolution des coefficients de Spearman de la variable C_{max} pour ces trois "sous-variables" en fonction de la distance à la source. Nous observons une forte influence de la hauteur de rejet Zcel près de la source alors que les coefficients de Pearson relatifs aux positions dans le plan (x, y) figurent en-dessous du seuil de confiance à 95 %. En fin de domaine, les trois facteurs ont une relativement faible influence, l'erreur dans la position longitudinale y entraînant alors le plus de variabilité sur la prédiction de C_{max} . Par conséquent, dans les comparaisons globales qui suivront, nous conserverons une seul de ces "sous-variables" à travers la hauteur de rejet Zcel.



FIG. 5.12 : Évolution des coefficients de Spearman relatifs à chacune des variables Xcel, Ycel et Zcel pour la variable d'intérêt C_{max} en fonction de la distance à la source.

La figure 5.13 rend compte de manière univoque de la dépendance de la variable Y_{max} à la direction du vent. Les valeurs très élevées des coefficients de Spearman obtenues (proches de 0.9 en moyenne) témoignent de la forte relation de monotonie existant entre les variables Y_{max} et α , quelle que soit la position dans le domaine. Les quatre autres facteurs ont une influence négligeable.

Un premier coup d'oeil sur ces mêmes courbes pour la variable d'intérêt C_{max} (Fig. 5.14) montre une variabilité importante de l'influence des différents facteurs d'entrée en fonction de la



FIG. 5.13 : Évolution des coefficients de Spearman relatifs à chacune des variables α , $1/L_{MO}$, z_{01} , z_{02} et la hauteur de la cellule de rejet Zcel pour la variable d'intérêt Y_{max} en fonction de la distance à la source.

distance à la source et permet de distinguer deux régions du domaine. Nous pouvons situer cette scission à 850 m, soit précisément à la première distance en aval des aéroréfrigérants.

Dans la zone comprenant les bâtiments (de 240 m à 850 m), nous notons que l'influence de la hauteur de rejet Zcel est la plus grande à proximité immédiate de la source et se fait ressentir jusqu'au niveau des aéroréfrigérants. Nous observons par ailleurs que le facteur α est ponctuellement un facteur d'importance, avec une valeur de coefficient supérieure à 0.4 aux distances 450 m (entre les tranches 2-3 et 4-5) et 850 m (au milieu des aéroréfrigérants). Celles-ci coincident avec des zones où la nature de l'écoulement est particulièrement complexe et telles qu'une variation dans l'angle d'incidence du vent peut modifier sensiblement les recirculations ou écoulements de contournement des bâtiments, induisant ainsi une variabilité dans l'impact au sol du panache. Le troisième facteur d'importance est l'inverse de la longueur de Monin-Obukhov $1/L_{MO}$ dont l'influence apparaît à partir de 625 m (premier facteur à cette distance). Aucune influence des deux rugosités n'est mise en évidence par cette méthode.

En aval des aéroréfrigérants (de 850 m à 2100 m), nous remarquons l'influence décroissante de la hauteur de rejet Zcel qui reste cependant le second facteur le plus influent jusqu'en y = 1450 m. Le premier facteur d'importance est ici $1/L_{MO}$ caractérisé par des coefficients de Spearman assez élevés (proches de 0.6) et constants dans l'axe du panache. Nous pouvons noter par ailleurs que le facteur z_{02} , bien que ses coefficients sont situés dans la zone de bruit statistique, y apparaît comme le troisième facteur le plus important et le second en toute fin de domaine, révélant une influence non négligeable qu'il faudrait affiner avec un plus grand nombre de simulations. Enfin, les coefficients de Spearman pour les deux dernières variables (α et z_{01}) ne révèlent pas d'influence dans le sillage.

Les résultats relatifs à la variable C_y sont très proches de ceux évoqués précédemment pour C_{max} . Dans la zone de bâtiments, Zcel conserve une influence prédominante très près de la source mais s'avère concurrencé par le facteur α ensuite, dont l'influence s'avère plus marquée que pour C_{max} dans les zones d'écoulement complexe. Ceci confirme l'importance de ce facteur sur l'impact et l'étalement au niveau du sol du panache. L'influence de $1/L_{MO}$ est par ailleurs



FIG. 5.14 : Évolution des coefficients de Spearman relatifs à chacune des variables α , $1/L_{MO}$, z_{01} , z_{02} et la hauteur de la cellule de rejet Zcel pour la variable d'intérêt C_{max} en fonction de la distance à la source.

moindre jusqu'au niveau des aéroréfrigérants à partir desquels il devient le premier facteur en terme d'importance. Nous retrouvons par ailleurs l'influence décroissante de Zcel.

5.4.5 Conclusions sur la méthode de Monte-Carlo

La méthode de Monte-Carlo mise en oeuvre sur les simulations *Mercure* a permis dans un premier temps de quantifier l'incertitude sur les variables d'intérêt. Nous avons ainsi pu voir que le champ de CTA moyen au sol diffère sensiblement du calcul de référence, ceci étant principalement lié à la variabilité introduite sur la direction du vent incident. En s'intéressant plus particulièrement aux variables d'intérêt C_{max} , C_y et Y_{max} définies sur les profils transverses au sol, nous avons pu définir la dispersion de nos résultats de simulation qui rend compte d'une plus grande variabilité en champ proche et dans la zone bâtie. L'analyse a également montré que le calcul de référence appartenait au quantile à 5 % des cas présentant les valeurs les plus élevées de C_{max} (et C_y) en aval des aéroréfrigérants.

Dans une seconde étape, la hiérarchisation des variables d'entrée en terme d'importance a été réalisée à l'aide des coefficients de Pearson. Comme envisagé, l'influence de la hauteur de rejet effective en champ proche sur les variables C_{max} et C_y a ainsi été mise en évidence ainsi que celle de $1/L_{MO}$ une fois la zone de bâtiments franchie. Le calcul de référence semble donc pénalisant de par la valeur élevée de L_{MO} imposée. Les rugosités définies dans le domaine et au niveau du profil amont sont apparues ici comme des paramètres d'influence secondaire. Toutefois, la plage de variabilité n'a peut-être pas été suffisamment étendue pour pouvoir observer de réelles différences sur les résultats de simulation. Ce point pourra faire l'objet d'une vérification dans une étude ultérieure.

5.5 Hiérarchisation par la méthode de Morris

5.5.1 Présentation

En 1991, Morris (1991) proposa une méthode dérivée des OAT screening methods, celles-ci permettant de mesurer la variabilité des composantes de la variable d'intérêt globale \underline{X} en faisant varier un facteur à la fois. La méthode de Morris a pour seul objectif de rechercher et classer les facteurs d'intérêt parmi un nombre relativement important de variables d'entrée. Elle est fondée sur le calcul pour chaque composante du vecteur \underline{X} d'un nombre donné de variations élémentaires que l'on nommera effets élémentaires (EE) et pour lesquels seront estimés des paramètres statistiques simples. La comparaison des indicateurs obtenus pour chaque famille d'EE permet alors de hiérarchiser les facteurs d'entrée en terme d'influence et, le cas échéant, de caractériser celle-ci. Ainsi, la méthode de Morris est à même de déterminer parmi les variables d'entrée lesquelles présentent une influence négligeable, linéaire et additive ou enfin non linéaire ou impliquant des interactions entre elles. Un nouvel algorithme permet par ailleurs de caractériser ces possibles interactions (Cropp & Braddock (2002)).

Cette méthode se révèle être un bon compromis entre efficacité et précision, notamment lorsque sont utilisés de grands codes de calcul (Campolongo *et al.* (1999)). Malgré son intérêt, elle ne fut que rarement mise en oeuvre jusque ces dernières années avant d'éveiller à nouveau la curiosité. Nous citons ici les travaux récents de Braddock & Screider (2006), qui la met en pratique sur un modèle d'optimisation d'un système d'irrigation en prenant en compte 9 facteurs incertains, de Alam *et al.* (2004), dans l'application d'un modèle de simulation de combat où une dizaine de variables sont également étudiées, et enfin de Zador *et al.* (2006) dans la modélisation de la cinétique chimique adaptée aux processus photochimiques dans l'atmosphère.

Dans le cadre de notre étude, il est apparu intéressant de tester cette méthode qui fournit une approche qualitative et simple, du moins dans la partie de post-traitement, de la hiérarchisation des facteurs d'entrée. Sous réserve de son efficacité et de son applicabilité aux études CFD tridimensionnelles, celle-ci pourra dans le futur s'avérer intéressante pour étudier l'influence d'un nombre plus important de paramètres.

5.5.2 Méthodologie et mise en oeuvre

Méthodologie générale

La méthodologie de la méthode de Morris est décrite en détails dans Morris (1991). Elle est également synthétisée dans Saltelli *et al.* (2000) et Alam *et al.* (2004).

Soit \underline{x} le vecteur constitué des variables d'entrée x_j , $j = [1, ..., N_x]$ tels que chacune d'entre elles puisse prendre \mathbf{p} valeurs discrètes dans la liste [0, 1/(p-1), 2/(p-1), ..., 1]. Nous supposons ainsi que chaque variable d'entrée x_j est adimensionnée par une grandeur caractéristique de telle sorte que chaque x_j est comprise dans l'intervalle [0; 1] et est uniformément distribuée sur celuici. Le plan d'expérience Π ainsi généré est une grille constituée de \mathbf{p} niveaux et de dimension N_x . Soit Δ un multiple prédéfini de 1/(p-1). Morris définit un *effet élémentaire* (EE) $d_j(\underline{x})$ pour le j-ème facteur d'entrée au point \underline{x} par :

$$d_j(\underline{x}) = \left[g(x_1, \dots, x_{j-1}, x_j + \Delta, x_{j+1}, \dots, x_{N_x}) - g(\underline{x})\right] / \Delta$$
(5.5.1)

où g est la fonction représentative du modèle.

L'objectif final de la méthode de Morris est d'estimer la moyenne $\mu_{m,j}$ et l'écart-type $\sigma_{m,j}$ de chaque famille F_j d'effets élémentaires associées à la variable x_j . Dans sa forme la plus simple, le principe est de sélectionner au hasard une valeur de chacune des composantes x_j parmi les **p** possibles et d'évaluer la fonction g deux fois, une première fois à la valeur sélectionnée, une

202

seconde après avoir augmenté x_j de la quantité Δ . Cette opération peut être renouvelée **r** fois pour produire un échantillon de **r** effets élémentaires F_j . En réitérant la procédure pour l'ensemble des N_x familles d'effets élémentaires, on obtient alors un nombre $N = 2rN_x$ de simulations.

Sur cette base, Morris a formulé une méthode plus efficace permettant d'optimiser le coût de calcul. La constante de grille **p** est fixée à une valeur paire de sorte que $\Delta = p/[2(p-1)]$. La méthode intègre alors les étapes suivantes :

- 1. Un vecteur d'origine \underline{x}^* est aléatoirement choisi, chaque composante étant sélectionnée parmi [0, 1/(p-1), 2/(p-1), ..., 1]. Le modèle n'est pas évalué en \underline{x}^* .
- 2. Au moins une des N_x composantes de $\underline{x^*}$ est augmentée de Δ conduisant à un vecteur $\underline{x^1}$ appartenant toujours à Π .
- 3. L'effet élémentaire relatif à la j-ème composante du vecteur $\underline{x^1}$ est calculé, soit :

$$d_j(\underline{x^1}) = [g(x_1^1, \dots, x_{j-1}^1, x_j^1 + \Delta, x_{j+1}^1, \dots, x_{N_x}^1) - g(\underline{x^1})] / \Delta$$

si $\underline{x^1}$ a été augmenté de Δ , ou :

$$d_j(\underline{x^1}) = [g(x_1^1, \dots, x_{j-1}^1, x_j^1 - \Delta, x_{j+1}^1, \dots, x_{N_x}^1) - g(\underline{x^1})] / \Delta$$

si $\underline{x^1}$ a été diminué de Δ .

4. Soit \underline{x}^2 le nouveau vecteur qui diffère de \underline{x}^1 par sa *j*-ème composante ($\underline{x}^2 = [x_1^1, ... x_{j-1}^1, x_j^1 \pm \Delta, x_{j+1}^1, ... x_{N_x}^1]$) et sélectionnons un autre vecteur \underline{x}^3 qui diffère de \underline{x}^2 par une seule de ses composantes $k \ (k \neq j)$, qui a été augmentée ou diminuée de la quantité Δ . L'effet élémentaire relatif au *k*-ème facteur est alors :

$$d_k(\underline{x^2}) = [g(\underline{x^3}) - g(\underline{x^2})] / \Delta$$

si $\Delta > 0$, ou :

$$d_j(\underline{x^1}) = [g(x_1^1, \dots, x_{j-1}^1, x_j^1 - \Delta, x_{j+1}^1, \dots, x_{N_x}^1) - g(\underline{x^1})] / \Delta$$

autrement.

La quatrième étape peut être répétée jusqu'à ce qu'une succession de $(N_x + 1)$ N_x -uplets différant d'une seule de ses composantes soit générée. Ces vecteurs forment alors une matrice \mathbf{B}^* appelée matrice d'orientation et définissant une trajectoire élémentaire dont les lignes représentent les différents vecteurs $\underline{x}^1, \underline{x}^2, ..., \underline{x}^{N_x+1}$. Cette matrice correspond finalement à une trajectoire de N marches dans l'espace des facteurs d'entrée débutant par le point \underline{x}^1 et donne à chaque fois un élément par facteur.

La construction d'une telle matrice peut être réalisée "automatiquement" à l'aide de la formulation matricielle suivante :

$$\mathbf{B}^{*} = \mathbf{M}_{N+1,k}\mathbf{x}^{*} + (\Delta/2) \left[(2\mathbf{B} - \mathbf{M}_{N+1,k}) \mathbf{D}^{*} + \mathbf{M}_{N+1,k} \right] \mathbf{P}^{*}$$
(5.5.2)

où les différents éléments matriciels impliqués sont les suivants :

- **B** est une matrice pouvant être arbitrairement choisie comme une matrice triangulaire inférieure constituée de 1.
- $\mathbf{M}_{k+1,k}$ est une matrice de dimension $(N_x + 1) \times N_x$
- $\bullet~\mathbf{x}^*$ est un vecteur de base
- \mathbf{D}^* est une matrice diagonale de dimension N_x composée de +1 ou -1 avec une probabilité équivalente.
• \mathbf{P}^* est une matrice de permutation aléatoire de dimension $N_x \times N_x$.

Enfin, l'ensemble du processus à l'origine de la réalisation d'une trajectoire peut être réitéré **r** fois pour créer N_x familles contenant chacune **r** EE et dont on pourra en déduire une moyenne et une variance associées. L'ensemble de ces **r** trajectoires est alors représenté par une matrice **X**, concaténation des **r** matrices d'orientation élémentaires, soit :

$$(X) = \begin{bmatrix} B_1^* \\ B_2^* \\ \dots \\ B_r^* \end{bmatrix}$$

La figure 5.15 donne un exemple de la méthode dans un cas très simple où sont considérées deux variables et trois trajectoires, pour un nombre de niveaux de la grille p = 8.



FIG. 5.15 : Exemple d'application de la méthode de Morris dans un cas simple $(N_x = 2, p = 8, r = 3)$. La méthode réitère trois fois le processus suivant : 1) choix aléatoire d'un point d'origine sur la grille et évaluation du modèle en ce point 2) déplacement sur la grille suivant l'axe X1 de la distance $\pm \Delta$ et évaluation du modèle en ce nouveau point, permettant de définir l'EE F_1^k 3) déplacement sur la grille à partir du dernier point suivant l'axe X2 de la distance $\pm \Delta$ et évaluation du modèle en ce nouveau point, permettant de définir l'EE Δ et évaluation du modèle en ce nouveau point, permettant de définir l'EE F_2^k .

Mise en oeuvre sur le cas d'étude

Avant de définir la valeur du pas de grille **p** pour nos $N_x = 5$ variables, nous insistons sur le fait que la méthode de Morris telle qu'initialement proposée (Morris (1991)) ne prévoit pas

explicitement la prise en compte de distributions probabilistes associées à chacune des variables d'entrée. En effet, une variable prend *a priori* **p** valeurs discrètes sur la grille de manière équiprobable. Cette approche simple peut être tout à fait justifiée lorsqu'aucune hypothèse quant à la distribution du facteur d'entrée n'est faite. Elle est ainsi mise en oeuvre par Alam *et al.* (2004) ou par Campolongo & Saltelli (1997). Dans notre cas, il paraissait opportun de garder les informations préalablement établies quant à la distribution envisagée de nos facteurs d'entrée, définies dans le paragraphe 5.3.3. Cette démarche est envisageable, ainsi qu'il l'est mentionné par exemple dans Campolongo *et al.* (1999) dont nous reprenons la démarche. Pour ce faire, la valeur réelle prise par un facteur d'entrée est dérivée de la valeur initiale sélectionnée sur la grille (comprise entre 0 et 1) par l'intermédiaire de sa loi de distribution inverse.

L'échantillonnage du facteur lié à la cellule de rejet est plus délicat puisqu'est alors considérée une distribution probabiliste discrète d'éléments (cf paragraphe 5.3.3). La distribution comprenant 45 éléments, une valeur minimale $\mathbf{p} = 45$ s'impose. Par ailleurs, en vue de ne pas perdre l'information relative au poids probabiliste de chacun des éléments, il a été décidé d'affecter un ou plusieurs niveaux sur la grille à chacun des éléments de manière à répartir sur la grille l'ensemble des poids. Ainsi, la cellule n° 23 qui a la plus grande probabilité d'être la cellule de rejet est décrite par 12 niveaux alors que les cellules présentant les plus faibles probabilités sont représentées par un seul niveau. Par rapport à la distribution des poids introduite paragraphe 5.3.3, une approximation a été faite quant aux deux poids les plus faibles auxquels correspodent une unique valeur de \mathbf{p} . La valeur ainsi définie est $\mathbf{p} = 74$.

Il est par ailleurs nécessaire de fixer le nombre \mathbf{r} de trajectoires désirées qui va déterminer le nombre de simulations N à réaliser. Dans la littérature, il est préconisé une valeur de \mathbf{r} supérieure à 10 (par exemple Campolongo *et al.* (1999)). Toutefois, à partir d'une valeur initiale de \mathbf{r} , il est tout à fait envisageable de poursuivre les simulations en ajoutant ultérieurement d'autres trajectoires à celles déjà simulées puisqu'elles sont indépendantes. Ainsi a-t-il semblé pertinent de rendre compte de la stabilité de la méthode en exploitant les résultats pour les trois valeurs de \mathbf{r} suivantes : 8, 11 et 14, correspondant aux nombres de simulations 48, 66 et 84.

Dans le tableau 5.2, nous présentons les deux premières trajectoires de la matrice globale \mathbf{X} qui permettent de définir deux effets élémentaires (EE) par facteur. Nous signalons qu'une seule des composantes du vecteur \underline{x} varie bien d'une ligne à l'autre, conformément à ce qu'exige la méthode.

trajectoire	Ν	α	L_{mo}	z_{01}	z_{02}	Cel	\mathbf{EE}
$\mathbf{r} = 1$	1	<u>-3.426</u>	158.76	0.0864	0.2723	<u>29</u>	-
	2	<u>3.426</u>	158.76	0.0864	0.2723	29	F_{1}^{1}
	3	3.426	158.76	<u>0.3131</u>	0.2723	29	F_2^1
	4	3.426	158.76	0.3131	0.0819	29	F_{3}^{1}
	5	3.426	<u>-1275.23</u>	0.3131	0.0819	29	F_{4}^{1}
	6	3.426	-1275.23	0.3131	0.0819	<u>21</u>	F_{5}^{1}
$\mathbf{r} = 2$	7	<u>4.111</u>	<u>-140.19</u>	<u>0.1813</u>	0.1221	23	-
	8	<u>-2.801</u>	-140.19	0.1813	0.1221	23	F_{1}^{2}
	9	-2.801	-140.19	0.0631	0.1221	23	F_{2}^{2}
	10	-2.801	-140.19	0.0631	0.0367	23	F_{3}^{2}
	11	-2.801	2034.45	0.0631	0.0367	23	F_{4}^{2}
	12	-2.801	2034.45	0.0631	0.0367	<u>23</u>	F_{5}^{2}

TAB. 5.2: Données correspondant à la réalisation des deux premières trajectoires de la méthode de Morris. L'effet élémentaire (EE) pour la variable d'entrée j et la trajectoire r est notée F_i^r .

À partir des familles F_j $(j = \{1, ..., N_x\})$ d'effets élémentaires propres à chacune des composante x_j , il est possible d'évaluer la moyenne empirique de la distribution μ_j ainsi que sa variance σ_j^2 qui fournissent des informations quant à l'influence de chacun des facteurs. Ainsi, une valeur élevée de μ_j traduit une grande influence de la variable x_j alors qu'une valeur élevée de σ_j rend compte de la non-constance de l'effet qui est dû soit à une interaction entre au moins deux des facteurs d'entrée, soit à l'existence de non-linéarités.

Notons enfin que pour s'affranchir des effets de non-monotonie qui rendent plus délicat l'analyse des moyennes $\mu_{m,j}$ et variance $\sigma_{m,j}^2$, les auteurs utilisent parfois la valeur absolue dans le calcul des EE (équation 5.5.1). Compte-tenu du caractère essentiellement non-monotone des relations entre variables d'entrée et d'intérêt mis en évidence dans la méthode de Monte-Carlo, nous en faisons de même dans cette étude.

5.5.3 Résultats

Le premier résultat concerne la stabilité de la méthode en fonction du nombre \mathbf{r} de simulations. Nous observons une totale correspondance dans la hiérarchisation des facteurs d'entrée pour les trois valeurs de \mathbf{r} . La valeur $\mathbf{r} = 11$ a été arbitrairement choisie dans la présentation des résultats qui suit. Toutefois, le lecteur pourra consulter en Annexe G un panel représentatif des figures obtenues pour $\mathbf{r} = 8$ et 14.

D'un point de vue pratique, l'analyse de sensibilité consiste "uniquement" à placer sur un graphique d'abscisse μ et d'ordonnée σ^2 l'ensemble des couples $(\mu_j, \sigma_j^2), j = \{1, ..., N_x\}$ relatifs à chacune des familles élémentaires F_j pour la variable d'intérêt considérée Y_i . La hiérarchisation des variables d'entrée en terme d'importance est alors automatique. La méthode génère ainsi un nombre de graphiques correspondant au nombre de variables d'intérêt N_y , soit 30 en considérant les trois indices C_{max}, Y_{max} et C_y , chacun d'eux évalués aux dix distances successives depuis le rejet : à y = 240 m, 300 m, 450 m, 625 m, 850 m, 1150 m, 1450 m, 1750 m, 2100 m et 2500 m. L'ensemble de ces figures est fourni Annexe G.

La figure 5.16 décrit l'influence des différents paramètres sur la variable C_{max} pour les positions y = 300 m (à proximité du réacteur n°5), y = 850 m (immédiatement en aval du dernier aéroréfrigérant), y = 1450 m et enfin en fin de domaine (y = 2500 m). D'une manière générale, entre la source et les aéroréfrigérants, la hauteur de rejet Zcel est le facteur le plus influent. Plus précisément, à proximité immédiate de la source (y = 240 et 300 m), la hauteur de rejet Zcel se révèle clairement être le seul facteur d'importance, les quatre autres facteurs apparaissant négligeables. En y = 450 m, les facteurs $1/L_{MO}$ et α sont tous deux des facteurs de seconde importance. Juste en aval des aéroréfrigérants, le facteur Zcel devient le second facteur d'influence derrière $1/L_{MO}$ et son influence diminue jusqu'à devenir négligeable en y = 1450 m. La longueur de Monin-Obukhov reste quant à elle la première variable d'importance jusqu'en toute fin de domaine et pilote ainsi la variabilité observée. Notons par ailleurs que les facteurs prépondérants sont tous caractérisés par une variance élevée, ce qui traduit des effets de non-linéarité imputables ici à la nature non-linéaire du modèle Mercure.

L'analyse des résultats pour la variable C_y (Fig. 5.17) apporte globalement des conclusions semblables à celles avancées ci-dessus pour C_{max} . Nous retrouvons deux zones distinctes : la région à proximité du rejet dans le milieu bâti est sous l'influence prépondérante de Zcel (Fig. 5.17(a)) alors que celle située en aval des aéroréfrigérants est dominée par l'influence de $1/L_{MO}$ (Fig. 5.17(d)). Nous retrouvons par ailleurs l'influence locale de α en y = 450 m (Fig. 5.17(b)), ce paramètre y étant même le premier facteur d'importance.

Enfin, concernant la variable Y_{max} , nous retrouvons bien l'influence prépondérante de α à toute distance du rejet (Fig. 5.16). Nous notons par ailleurs qu'un facteur de seconde importance apparaît à travers la rugosité z_{01} , les trois derniers facteurs n'ayant aucune influence.



FIG. 5.16 : Évolution des moyennes et variances propres aux distributions d'effets élémentaires pour les cinq variables d'entrée α , $1/L_{MO}$, z_{01} , z_{02} et la hauteur de la cellule de rejet Z cel en fonction de la distance à la source, pour la variable d'intérêt C_{max} , dans le cadre de l'application de la méthode de Morris.



(a) en y = 300 m (à proximité du réacteur n°5)



(c) en y = 850 m (immédiatement en aval du dernier aéroréfrigérant)



(b) en y = 450 m (en aval de la tranche 4-5)



(d) en y = 2500 m (en fin de domaine)

FIG. 5.17 : Idem Fig. 5.16 pour la variable d'intérêt C_y .



FIG. 5.18 : Idem Fig. 5.16 pour la variable d'intérêt Y_{max}.

5.5.4 Conclusions sur la méthode de Morris

Les informations sur la sensibilité des variables d'intérêt aux facteurs d'entrée fournies par la méthode de Morris nous ont permis de dresser une hiérarchisation de ces facteurs en terme d'importance ou d'influence en fonction de la localisation dans le domaine de calcul. Notamment, la méthode met en évidence deux zones distinctes situées en amont et en aval des aéroréfrigérants quant à la sensibilité des variables C_{max} et C_y . Dans la première zone, la variabilité est essentiellement pilotée par l'incertitude sur la hauteur de la cellule de rejet alors qu'elle est due à celle portant sur la variable $1/L_{MO}$ dans la seconde. L'utilisation de la variable d'intérêt Y_{max} nous permet par ailleurs de contrôler la pertinence de la méthode puisque nous observons, comme escompté, une influence prépondérante et linéaire de l'angle de déviation du vent α . Dans la zone de bâtiments, ce facteur α a également une influence locale non négligeable sur les variables C_{max} et C_y , ce qui est compréhensible au vue de la complexité de l'écoulement à ce niveau.

5.6 Synthèse et comparaison des hiérarchisations

Nous proposons dans ce paragraphe une comparaison et une synthèse des résultats fournis par l'application des deux méthodes, celles de Morris et de Monte-Carlo, sur la hiérarchisation des facteurs incertains de notre étude.

5.6.1 Comparaison des méthodes de Morris et Monte-Carlo

Concernant la variable d'intérêt Y_{max} , les deux méthodes mettent en évidence l'influence prépondérante du facteur α sur toute la longueur du domaine. La comparaison est un peu plus délicate à réaliser pour la variable C_{max} , aussi avons nous synthétisé les résultats sous la forme d'un tableau donnant l'influence de chacun des paramètres selon les deux méthodes pour les deux régions situées en amont et en aval des aéroréfrigérants (Tableau 5.3). Dans chacune de ces deux régions, les deux méthodes isolent un seul facteur prépondérant : la hauteur de rejet Zcel près de la source et l'inverse de la longueur de Monin-Obukhov $1/L_{MO}$ à partir des aéroréfrigérants. Les mêmes facteurs secondaires se dégagent par ailleurs des deux méthodes : l'angle de déviation du vent α dans la zone de bâtiments, même s'il n'y a pas concordance parfaite sur la localisation où cette influence est observée, et encore la hauteur de rejet Zcel quelques centaines de mètres en aval des aéroréfrigérants. Les deux méthodes mettent également en avant les mêmes facteurs ayant une très faible ou négligeable influence. Seule l'influence du facteur z_{02} est décrite légèrement différemment, étant visible à partir des aéroréfrigérants pour Monte-Carlo et pas selon la méthode de Morris. Notons enfin que les conclusions relatives à la variable C_y sont en tous points identiques à celles qui viennent d'être données pour C_{max} .

Suite à ces remarques, nous pouvons conclure que les méthodes de Morris et de Monte-Carlo s'avèrent de manière générale en bon accord quant à la hiérarchisation des facteurs d'entrée. Elles donnent les mêmes facteurs prépondérants et les mêmes facteurs les plus négligeables quelle que soit la variable d'intérêt. Des différences peuvent cependant apparaître pour les variables d'importance intermédiaire dont les effets ne sont pas nécessairement perçus conjointement par les deux méthodes. En effet, la méthode de Morris semble à la vue de cette étude particulièrement efficiente pour dégager les paramètres de première importance, mais moins à même de décrire plus finement des influences secondaires.

	$\mathbf{y} \leq 625\mathbf{m}$	$\mathbf{y} \leq 625\mathbf{m}$	$y \ge 850 m$	$\mathbf{y} \ge 850\mathbf{m}$
facteurs	Morris	Monte-Carlo	Morris	Monte- $Carlo$
α	+	+	-	-
$1/L_{MO}$	- → +	$- \rightarrow +$	++	++
z_{01}	-	-	-	-
z_{02}	-	-	-	?
Zcel	++	++	$+ \rightarrow -$	$+ \rightarrow -$

TAB. 5.3 : Comparaison qualitative de l'influence des différents facteurs d'entrée sur la variable d'intérêt C_{max} fournie par les méthodes de Morris et Monte-Carlo (++ : forte influence, + : influence secondaire, - : pas d'influence, ? : influence possible, \rightarrow : en s'éloignant du rejet.

5.6.2 Conclusions relatives à l'influence des facteurs d'entrée

Nous fournissons enfin quelques remarques quant à la sensibilité des différents facteurs d'entrée mis en évidence par les deux méthodes. Par rapport aux résultats escomptés, l'importance de la hauteur effective du rejet en cheminée, clairement mis en lumière par les deux méthodes, était en effet envisageable à proximité de la source ainsi que son influence décroissante en aval. L'analyse de sensibilité portant sur la variable α , angle de déviation du vent par rapport à la direction moyenne, montre la forte variabilité qui peut être observée dans une zone d'écoulement complexe présentant recirculations et déflexions lorsque le champ dynamique en entrée diffère. Par ailleurs, il est intéressant de constater que la longueur de Monin-Obukhov, ou son inverse, pilote la dispersion en aval de la zone de bâtiments où la turbulence de l'atmosphère environnante reste importante. En général, il s'agit en effet d'un paramètre de première importance lorsque le terrain est dépourvu de bâtiments puisqu'il décrit la turbulence atmosphérique qui elle-même conditionne les processus de dispersion dans la couche limite. En cela, le résultat n'est pas surprenant, mais il montre néanmoins à quel point la nature du profil d'entrée a un rôle important sur la modélisation de la dispersion d'un rejet surélevé avec l'outil Mercure Saturne, même lorsque l'on se place dans des situations quasi neutres. Enfin, cette double analyse de sensibilité confirme les résultats du chapitre 3 quant à la faible sensibilité à la rugosité, à travers la faible variabilité liée aux facteurs z_{01} et z_{02} . Néanmoins, l'influence de ces facteurs se fait suivant leur logarithme et peut-être la plage de valeurs définie en amont ne fut elle pas assez grande pour réellement rendre compte de la variabilité à $\log(z_0)$. Il pourra être ainsi intéressant de reconsidérer ce facteur dans les études futures en définissant un intervalle de variabilité plus grand. Enfin, nous pouvons recommander de conserver à l'avenir uniquement la hauteur Zcel comme source d'incertitude dans le choix de la cellule de rejet.

5.7 Conclusions

Une première approche pour l'analyse d'incertitudes à l'aide du modèle Mercure concernant la modélisation de la dispersion sur un site complexe a été proposée dans ce chapitre, à travers la quantification de la variabilité du champ surfacique de concentration. Deux méthodes ont été appliquées, la méthode de "screening" propre à Morris, encore peu utilisée jusqu'à présent pour ce type d'étude, ainsi que la méthode plus répandue de Monte-Carlo. La première permit d'aborder de manière qualitative la problématique liée à la hiérarchisation de facteurs incertains (l'angle de déviation du vent par rapport à la direction principale Sud-Nord α , l'inverse de la longueur de Monin-Obukhov $1/L_{MO}$, les rugosités des profils amont z_{01} et du domaine de calcul z_{02} ainsi que la cellule de rejet Ccel) selon leur degré d'influence sur les variables d'intérêt considérées (le maximum de concentration C_{max} pris sur les profils transverses au sol en différentes distances successives depuis la cheminée, l'abscisse Y_{max} en laquelle ce maximum est atteint et enfin la concentration intégrée sur ces profils C_y). La seconde a fourni une analyse complète en donnant dans le même temps l'incertitude globale induite par les variables d'entrée ainsi qu'une mesure de la sensibilité des variables d'intérêt aux différents facteurs. En cela, l'application des deux méthodes a répondu aux objectifs formulés en préalable à notre étude et a en effet permis de mesurer la variabilité spatiale du champ de concentration surfacique à ces facteurs d'entrée. Elle a par ailleurs permis de mettre en oeuvre des outils qui pourront être réutilisés pour de prochaines études.

Les facteurs les plus importants quant à l'observation des maximums de concentration C_{max} sont la hauteur de rejet en champ proche et la variable $1/L_{MO}$ en aval du principal obstacle rencontré par l'écoulement et consitué des aéroréfrigérants, ces facteurs ayant été unanimement désignés comme tels par les deux méthodes. Même si quelques différences peuvent être observées dans l'influence de facteurs secondaires, celles-ci fournissent ainsi des informations comparables, ce qui est un gage de qualité.

Certains avantages et inconvénients des deux méthodes peuvent être avancés à la suite de cette étude. La méthode de Morris, même si elle offre l'avantage de ne pas nécessiter dans l'absolu un nombre très important de simulations, n'a pas permis de diminuer véritablement le coût de calcul par rapport à l'emploi de la méthode de Monte-Carlo, étant donné les limites que nous nous

étions fixées en nombre de simulations Mercure. Toutefois, pour un nombre de variables d'entrée supérieur, l'emploi de la méthode pourrait représenter un bon compromis entre temps de calcul et qualité de l'analyse, ayant notamment mis en évidence la stabilité de la hiérarchisation fournie avec la dimension des familles d'effets élémentaires retenue. Par ailleurs, un attrait de la méthode de Morris réside dans le fait qu'elle ne nécessite pas d'hypothèse préalable quant à l'indépendance des variables d'entrée, ni d'hypothèse sur les relations entre variables d'entrée et de sortie. En revanche, elle reste moins facile à mettre en oeuvre que la méthode de Monte-Carlo, -nous l'avons vu notamment à travers la complexité induite par la prise en compte d'une distribution finie d'éléments pour la variable Ccel-, et ne fournit pas autant d'informations que celle-ci (incertitude globale et hiérarchisation des incertitudes). La méthode de Monte-Carlo a également pour mérite d'être générique et de permettre l'application d'une multitude de méthodes pour analyser les données de simulation. La qualité de la hiérarchisation dépendra alors fortement de la pertinence de la méthode employée qui est fonction des relations supposées ou existantes entre variables d'entrée et de sortie et également du coût de calcul envisagé. La possible complexité des relations entre variables, ainsi que l'a montré notre cas d'étude, peut alors constituer un obstacle important et nécessiter des méthodes plus coûteuses à l'image de Sobol'.

Conclusions générales et perspectives

Conclusions

Utilisation de Mercure en milieu complexe

Le premier objectif de ce travail concernait la validation du modèle de CFD atmosphérique *Mercure*, utilisé avec une approche RANS, pour la modélisation de la dispersion atmosphérique dans un environnement complexe incluant la présence de bâtiments et d'un relief accidenté. Dans cette optique, deux cas ont été traités, s'appuyant sur les études en soufflerie correspondantes réalisées par le LMFA (Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique). La première étude a consisté en la modélisation de la dispersion pour des scenarii de rejets accidentels sur le site CNPE de Bugey. La particularité du site réside dans l'alignement des bâtiments avec la direction du vent dominant qui renforce leur influence sur la dispersion des panaches. La seconde étude traitait de la modélisation de la dispersion de rejets en fonctionnement normal sur le site CNPE de Flamanville dont la singularité est la présence d'une falaise abrupte adossée aux bâtiments du site. Celle-ci représente un obstacle d'importance pour l'écoulement et entraîne une modification de la dispersion par rapport au cas en terrain plat.

La modélisation de la dispersion sur le site CNPE de Bugey à l'aide de *Mercure* a montré que ce modèle, s'appuyant sur la possibilité d'utiliser des maillages non-structurés et non-conformes, était capable de représenter finement l'écoulement complexe autour des bâtiments et de décrire les différentes structures qui peuvent interagir avec les rejets émis à leur hauteur ou en amont. Ainsi, l'analyse comparative des champs de concentration a révélé de bons résultats au sein même de la zone des bâtiments et en champ très proche. Des différences ont été mises cependant en évidence plus en aval dans le sillage de la zone bâtie où a été noté un déficit de diffusion par rapport à l'étude en soufflerie, conduisant à une surestimation des CTA (Coefficients de Transfert Atmosphérique) au sol proche d'un facteur 2, et ce pour les quatre configurations mises en oeuvre (rejets en cheminée et diffus à travers la paroi d'un des réacteurs, vent de Nord ou de Sud). Enfin, *Mercure* s'est montré à même de modéliser finement les moments statistiques d'ordre 2 associés au champ de concentration, dans la zone bâtie et plus en aval, une fois que la paramétrisation du terme de dissipation de ces moments d'ordre 2 est optimale.

L'étude similaire portant sur le site de Flamanville a prouvé qu'un outil tel que Mercure était réellement adapté pour représenter avec pertinence l'effet d'un relief accidenté sur les processus dispersifs. L'influence de la falaise sur l'écoulement et la dispersion des panaches issus des cheminées de ventilation des réacteurs a été clairement identifiée par l'analyse des champs dynamiques et de concentration pour trois directions de vent venant de la mer. Ce relief entraîne en effet une déviation de l'écoulement et donc des panaches pour les deux directions de vent en incidence par rapport à la falaise alors que dans le cas d'un vent perpendiculaire les panaches restent dans l'axe du vent incident, l'écoulement passant directement au-dessus de la falaise. Concernant la dynamique de l'écoulement, un écart a été observé quant à l'accélération se produisant au sommet de la falaise et par contournement de celle-ci, qui se traduit par un gain en vitesse au niveau et en aval des rejets dans les simulations Mercure. Par ailleurs, Mercure a globalement correctement reproduit la production de turbulence sur les bâtiments et le relief, même si pour une des trois directions, en utilisant un maillage plus relâché dans les premiers niveaux verticaux, il fournit des résultats légèrement moins bons. La comparaison des champs de concentration a pourtant révélé une bonne adéquation générale avec les résultats expérimentaux, montrant que *Mercure* retranscrivait bien l'influence de la falaise, mais également celle des différents bâtiments.

Comparaison des approches CFD et gaussienne

Le second objectif était de comparer les approches gaussiennes, utilisées couramment par les autorités de réglementation pour les études d'impact et les situations accidentelles, et l'approche CFD pour la modélisation de la dispersion en environnement complexe. L'évaluation comparative des modèles de dispersion atmosphérique est devenue systématique ces derniers temps et s'appuie dorénavant sur des bases de données précises (par exemple la très connue Model Validation Kit issue de l'initiative HARMO) regroupant des campagnes en milieu rural ou urbain. Dans cette optique, une première comparaison a été réalisée sur la campagne de mesures Prairie Grass, expérience de rejet d'un traceur passif en terrain plat et près du sol, qui a été à l'origine de la formulation de certaines paramétrisations des écarts-types de la dispersion et qui reste largement utilisée dans un cadre de validation et d'évaluation, intégrée par exemple dans le cadre ASTM D6589 (Irwin et al. (2003)). Deux formulations à panache gaussien ont été utilisées dans notre travail : celle de Briggs, en partie fondée sur cette campagne, et celle de Doury, très répandue jusqu'à présent dans les études de sûreté françaises. Elles ont été ainsi comparées au modèle Mercure sur l'ensemble des cas neutres. L'étude a mis en lumière les lacunes inhérentes au modèle eulérien à diffusivité turbulente qui ne peut décrire correctement l'expansion du panache en champ proche, ce qui est caractérisé notamment par une sous-estimation de la diffusion horizontale. Néanmoins, le modèle présente des performances globalement supérieures à celles de Doury et comparables à celles trouvées dans la littérature pour la validation d'autres modèles RANS. Une paramétrisation très simple de la diffusivité horizontale permet même de fournir de meilleures performances que cette formulation, moins élevées toutefois que celles de la formulation de Briggs.

La comparaison a ensuite été étendue aux sites complexes de Bugey et Flamanville. Il était alors nécessaire d'utiliser un modèle gaussien de 'dernière génération", à même de décrire la dispersion en prenant en compte les bâtiments et le relief. Le choix s'est porté sur le modèle ADMS, qui est à l'heure actuelle couramment utilisé par nombre de services d'ingénierie, notamment dans un cadre opérationnel, dans les domaines de l'énergie et de l'industrie. Avec un coût de calcul négligeable par rapport aux simulations *Mercure*, ADMS a présenté des performances hétérogènes sur le cas de Bugey, en fonction du type de rejet. En effet, assez performant pour décrire la dispersion du panache diffus à travers le réacteur n°2, il n'est pas apparu à même de rendre compte de l'influence des bâtiments sur les rejets surélevés, émis en sortie de cheminée. Plus généralement, l'analyse des résultats a montré d'une part une moindre capacité à décrire finement la dispersion au sein de la zone bâtie, ce qui était attendu, et a mis en évidence une surestimation quasi systématique de la diffusion dans le sillage des bâtiments, induisant une sous-estimation importante des CTA au sol pour les rejets en cheminée.

La qualité des performances d'ADMS sur le cas de Flamanville a été profondément altérée par son incapacité à décrire la réelle influence de la falaise sur les panaches. Il faut souligner toutefois que nous sortions de son cadre d'application, le module diagnostique dynamique utilisé s'appliquant en principe à des pentes inférieures à celles relevées sur la falaise de Flamanville. Ce cas d'étude confime qu'il est difficile d'envisager l'utilisation d'ADMS pour des configurations à topographie complexe, alors que le modèle *Mercure* fournit ici d'excellentes performances (un facteur FAC2 par exemple de 85 %, celui-ci indiquant le pourcentage de prédictions inférieures à deux fois et supérieures à .5 fois les valeurs observées).

Évaluation de la variabilité du champ de concentration

Le dernier volet de la thèse s'inscrivait dans la volonté de quantifier la variabilité des résultats en terme de concentrations moyennes fournies par *Mercure*. La première approche passait par l'estimation de la variabilité propre à la nature turbulente de l'atmosphère, en modélisant les moments statistiques d'ordre 2 du champ de concentration. Nous avons alors vu que le modèle *Mercure* permettait de décrire avec précision le champ de variance des fluctuations dans un environnement complexe.

La seconde voie suivie sur cette problématique a concerné l'évaluation des incertitudes liées aux données d'entrée du modèle. L'objectif a alors été double : répondre en effet à la question portant sur la variabilité globale des variables de sortie et apporter une information supplémentaire concernant l'influence des facteurs incertains sur celles-ci. Dans ce but, nous avons repris l'étude de la dispersion sur le site de Bugey pour une configuration de rejet (en cheminée, par vent de Sud) et avons axé notre travail sur la quantification de la variabilité du champ de concentration au sol. Deux méthodes ont alors été envisagées pour répondre à nos objectifs, en fonction des limites inhérentes au modèle *Mercure* (forte non-linéarité, coût de calcul élevé).

Le premier choix s'est porté sur la méthode de Monte-Carlo, pour la simplicité de sa mise en oeuvre et la somme des informations qu'elle peut fournir. La difficulté de cette méthode tient finalement plus dans la définition de l'incertitude sur les données d'entrée et dans l'exploitation des résultats de simulations. Elle a permis de décrire précisément la variabilité en terme de CTA, plus importante en champ très proche dans la zone bâtie, et d'identifier parmi cinq facteurs les plus influents en champ proche (prise en compte de la surhauteur) et dans le sillage global (longueur de Monin-Obhukov). Cette approche probabiliste a également montré que le cas déterministe était extrême par rapport à ces résultats d'ensemble, les valeurs médiane et moyenne de maximums de CTA dans le sillage des aéroréfrigérants étant deux fois inférieures à celles relevées dans la simulation d'origine.

La seconde méthode, dont la mise en oeuvre s'est avérée plus délicate, a permis de répondre uniquement à la question relative à l'influence des différentes variables d'entrée. Il s'agit de la méthode de Morris, qui, à l'image des autres méthodes dites de *screening design*, évalue pas à pas l'impact de chacun des facteurs d'entrée sur les variables d'intérêt. La constitution de familles de variations élémentaires pour chacun de ces facteurs aboutit alors à leur hiérarchisation en terme d'importance. Cette méthode a dégagé les mêmes facteurs d'importance que la méthode de Monte-Carlo, ceci indépendamment du nombre de calculs réalisés. L'intérêt réel apporté par cette méthode est qu'elle ne nécessite par d'effectuer d'hypothèse sur la dépendance des variables d'intérêt par rapport aux facteurs incertains, contrairement aux méthodes de hiérarchisation appliquées dans une approche Monte-Carlo.

Perspectives

Sur l'utilisation de Mercure

Un des premiers objectifs concerne l'utilisation du modèle *Mercure* pour les cas thermiquement stratifiés. En effet, suite aux problèmes résiduels sur les lois de paroi, résolus en partie au cours de cette thèse dans le cas neutre, certaines modifications restent à effectuer pour les cas stratifiés. Ceci sera facilité par l'évolution du modèle *Mercure* en tant que physique particulière à part entière du modèle Code_Saturne. Une première étape dans la validation pourra alors être de reprendre la campagne Prairie Grass en simulant les cas stables et instables, permettant d'évaluer en totalité *Mercure* sur cette expérience de référence. Dans un second temps, *Mercure* pourra alors être mis en oeuvre pour simuler toutes les conditions météorologiques rencontrées dans les études d'impact. Toutefois, la comparaison à des études en soufflerie sera plus problématique. A moyen terme, *Mercure* bénéficiera de la modélisation LES, abordée actuellement dans la thèse de A. Dipankar en collaboration avec le Pr. Sagaut. La comparaison des approches RANS et LES pourra alors être abordée à la fois sur le cas simple *Prairie Grass* et sur les problèmes de dispersion en environnement complexe. Une autre perspective concerne la possibilité de coupler le modèle *Mercure* à des modèles d'impact. Cette possibilité est en effet actuellement envisagée dans le cadre des projets de la R&D d'EDF. Elle implique entre autres la nécessité de poursuivre les travaux sur la modélisation des phénomènes de dépôt.

Sur l'évaluation et la comparaison de modèles

La comparaison et l'évaluation des approches gaussiennes et RANS en milieu complexe a été uniquement abordée au cours de ce travail à travers les modèles *Mercure* et ADMS. Pour avoir une vue plus large des possibilités offertes par les modèles gaussiens de nouvelle génération, il peut être intéressant d'élargir la comparaison à d'autres modèles pour rendre compte notamment des limites réelles inhérentes à ce type d'approche lorsque l'environnement est particulièrement complexe. Nous pouvons penser par exemple à des modèles tels que AERMOD (USEPA) ou ARIA IMPACT (Aria Technologies), déjà comparés sur des cas "académiques" et plus complexes par Perkins *et al.* (2005b) ou Irwin *et al.* (2003).

Par ailleurs, une comparaison vraiment exhaustive pourrait intégrer les modèles lagrangiens qui représentent un moyen terme entre les modèles à formulations gaussiennes, à faible coût de calcul mais plus limités, et les modèles fins de CFD plus onéreux. Le modèle SPRAY couplé avec le modèle météorologique Minerve peut constituer une possibilité ainsi que la plateforme de couplage HYPACT/RAMS. L'approche lagrangienne, couplée à une modélisation eulérienne de la dynamique, peut également être à terme entreprise avec Mercure en adaptant le module lagrangien de Code_Saturne à la dispersion atmosphérique, faisant suite aux travaux de Radicchi (2007).

Sur l'analyse d'incertitudes et de sensibilité

L'approche Monte-Carlo déjà réalisée sur l'étude de Bugey va être à très court terme complété par une approche quasi similaire sur le modèle ADMS, qui fournira des informations intéressantes quant à la dispersion des résultats et la sensibilité de certaines données d'entrée.

Il apparaît par ailleurs important de continuer dans la voie de l'approche probabiliste, y compris avec des outils de type CFD, et de répondre ainsi aux demandes des décideurs. Comme on l'a vu, la méthode de Monte-Carlo permet de répondre à l'ensemble des questions qui peuvent être formulées, y compris sur l'estimation d'une probabilité de dépassement de seuil, et si le coût de calcul peut faire peur, le passage à une version parallèle de *Mercure* à court-terme, le nouveau super-calculateur Blue-Geen acquéri par EDF et l'extension des moyens de calcul à plus long terme permettent d'espérer une mise en oeuvre plus systématique de ce type de méthode.

Par ailleurs, il semble intéressant de valoriser l'investissement sur la méthode de Morris, en l'appliquant à un grand nombre de paramètres incertains et en introduisant des variables d'entrée "internes" au modèle (par exemple la constante C_{μ} du modèle $k - \varepsilon$. Enfin, à l'heure où sort l'outil Open TUNRS (EADS-EDF-Phimeca (2007)), dévolu aux études d'incertitudes et de sensibilité dans l'ingénierie, il semble opportun de mettre en oeuvre un plus large panel de méthodes et de s'intéresser notamment à l'estimation des probabilité de dépassement de seuil à l'aide d'une méthode FORM/SORM qui, à précision égale, nécessite un coût de calcul nettement moins prohibitif qu'une méthode Monte-Carlo.

Bibliographie

- ALAM, F.M., MCNAUGHT, K.R., & RINGROSE, T.J. 2004. Using Morris' randomized OAT design as a factor sreening method for developing simulation metamodels. Pages 949-657 of : R.G. INGALLS, M.D. ROSSETTI; J.S. SMITH, & PETERS, B.A. (eds), Proceedings of the 2004 Winter Simulation Conference. 201, 204
- ALBRIET, B. 2007. Modélisation des aérosols à l'échelle locale et régionale. Ph.D. thesis, École Nationale des Ponts et Chaussées, CEREA, Centre de Recherche et d'Enseignement en Environnement Atmosphérique. 42
- ALEKSEEV, A.K., & NAVON, I.M. 2002. On Estimation of Temperature Uncertainty Using the Second Order Adjoint Problem. Int. J. of Comp. Fluid. Dyn., 16, 113–117. 176
- ALEKSEEV, A.K., & NAVON, I.M. 2003. Calculation of Uncertainty Propagation using Adjoint Equations. Int. J. of Comp. Fluid. Dyn., 17, 283–288. 176
- ALLWINE, K.J., SHINN, J.H., STREIT, G.E., CLAWSON, K.L., & BROWN, M. 2002. A Multiscale Field Study of Dispersion through an Urban Environment. Bull. Amer. Meteor. Soc., 83, 521–536. 58
- ANDRONOPOULOS, S., GRIGORIADIS, D., ROBINS, A., VENETSANOS, A., RAFAILIDIS, S., & BARTZIS, J.G. 2002. Three-Dimensional Modelling of Concentration Fluctuations in Complicated Geometry. *Env. Fluid Mech.*, 1, 415–440. 45
- ARCHAMBEAU, F., MÉCHITOUA, N., & SAKIZ, M. 2003. Code_Saturne : a Finite Volume Code for the Computation of Turbulent Incompressible Flows - Industrial Applications. International Journal on Finite Volumes. 42, 48
- ARYA, S.P. 1999. Air Pollution Meteorology and Dispersion. Oxford University Press. 15, 24, 36, 37, 60, 66, 74, 112
- BAIK, J.J., KIM, J.J., & FERNANDO, H.J.S. 2003. A CFD Model for Simulating Urban Flow and Dispersion. J. Appl. Meteorol., 42, 1636–1648. 47
- BAIRD, B.F. 1989. Managerial Decisions Under Uncertainty. New-York : John Wiley and Sons, Inc. 2
- BAKLANOV, A. 2000. Application of CFD methods for modelling in air pollution problems : possibilities and gaps. *Environmental Monitoring and Assessment*, **65**, 181–189. **41**
- BARAD, M.L. 1958. Project Prairie Grass, a field program in diffusion. In : Geopys. Res. Papers, vol. I-II. U.S. Air Force Cambridge Research Center. 3, 57, 59
- BARAD, M.L., & HAUGEN, D.A. 1959. A preliminary of Sutton's hypothesis for diffusion from a continuous point source. J. Meteorol., 16, 12–20. 59, 61

- BILBAULT, D., CARISSIMO, B., & GILBERT, E. 2007. Synthèse des études de dispersion pour le site de Flamanville. Tech. rept. H-I88-2006-02126-FR. EDF R&D, Département Mécanique des Fluides, Énergies et Environnement, groupe Météorologie appliquée et environnement atmosphérique. 141, 145, 148, 167, 169
- BLOCKEN, B., & CARMELIET, J. 2004 (October). Modelling atmospheric boundary-layer flow with Fluent : curring the wall-function roughness incompatibility. In : Fluent Benelux User Group Meeting. 45
- BLOCKEN, B., STATHOPOULOS, T., & J.CARMELIET. 2006. CFD simulations of the atmospheric boundary layer wall function problems. *Atmospheric Environment*, **41**, 238–252. **45**
- BORNOFF, R.B., & MOKHTARZADEH-DEHGHAN, M.R. 2001. A numerical study of interacting buoyant cooling-towers plumes. *Atmos. environ.*, **35**, 589–598. 96
- BOTTEMA, M. 1997. Turbulence closure model 'constants' and the problems of 'inactive' atmospheric turbulence. J. of Wind Eng., 67-68, 897-908. 39
- BOUZEREAU, E. 2004. Représentation des nuages chauds dans le modèle météorologique « MER-CURE » : Application aux panaches d'aéroréfrigérants et aux précipitations orographiques.
 Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, CEREA, Centre de Recherche et d'Enseignement en Environnement Atmosphérique. 42
- BRADDOCK, B.D., & SCREIDER, S.Y. 2006. Application of the Morris algorithm for sensitivity analysis of the REALM model for the Goulburn irrigation system. *Env. Model. and Assess.*, 11, 297–313. 201
- BRIGGS, G.A. 1973. Diffusion estimation of small emissions. Tech. rept. Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory, Oak Ridge, TN. 1, 61, 63
- BRIGGS, G.A. 1982. Similarity forms for ground-source surface-layer diffusion. Boundary Layer Meteorol. 62
- BRIGGS, G.A. 1985. Analytical Parameterizations of Diffusion : The Convective Boundary Layer. J. Clim. and Appl. Meteorol. 62
- BRITTER, R.E., HANNA, S.R., BRIGGS, G.A., & ROBINS, A. 2003. Short-range vertical dispersion from a ground level source in a turbulent boundary layer. *Atmos. Environ.* 62
- BROWN, M.J., ARYA, S.P., & SNYDER, W.H. 1993. Vertical Dispersion from Surface and Elevated Releases : An Investigation of a Non-Gaussian Plume Model. J. Appl. Meteorol., 32, 490-505. 62
- BRZOSKA, M.A., STOCK, D., & LAMB, B. 1997. Determination of plume capture by the building wake. J. Wind Eng. Ind. Aerodyn., 67-68, 909-922. 40
- BUTY, D. 1988. Paramétrisation de la turbulence atmosphérique dans un code mésométéorologique tridimensionnel et non-hydrostatique. Ph.D. thesis, Université Claude Bernard
 Lyon I. 42
- CAMPOLONGO, F., & SALTELLI, A. 1997. Sensitivity analysis of an environmental model : a worked application of different analysis methods. *Reliability Eng. & Syst. Safety*, 57, 49–69. 204
- CAMPOLONGO, F., TARANTOLA, S., & SALTELLI, A. 1999. Tackling quantitatively large dimensionality problems. *Comp. Phys. Comm.*, 117, 75–85. 201, 204

- CARISSIMO, B., DUPONT, E., MUSSON-HENON, L., & MARCHAND, O. 1995. Note de principe du code Mercure, version 3.1, Rapport interne. Tech. rept. EDF R&D, Groupe Météorologie Appliquée et Climat. 9, 42, 74
- CARRUTHERS, D.J., & DYSTER, S.J. 2003. Boundary layer structure specification, in ADMS 3 Technical Specification. Tech. rept. Cambridge Environmental Research Consultants (CERC). 26
- CARRUTHERS, D.J., WENG, W.S., HUNT, J.C.R., MCHUGH, C.A., & DYSTER, S.J. 2003. *Plume / Puff spread and mean concentration module specifications, in ADMS 3 Technical Specification.* Tech. rept. Cambridge Environmental Research Consultants (CERC). 28
- CARRUTHERS, D.J., WENG, W.S., DYSTER, S.J., SINGLES, R., & HIGSON, H. 2004. Complex Terrain Module, in ADMS 3 Technical Specification. Tech. rept. Cambridge Environmental Research Consultants (CERC). 32
- CASTELLI, S., FERRERO, E., ANFOSSI, D., & OHBA, R. 2005. Turbulence Closure Models and their Application in RAMS. *Env. Fluid Dynamics*, 5, 169–192. 38
- CERC. 2004. ADMS 3 User Guide. Cambridge Environmental Research Consultants (CERC). 1, 14, 26, 30, 141, 148
- CHAN, S.T. 1988. FEM3A : A finite element model for the simulation of gas transport and dispersion : User's manual. Tech. rept. U.S. Department of Energy by Lawrence Livermore National Laboratory. 76
- CHANG, J.C., & HANNA, S.R. 2004. Air quality model performance evaluation. *Meteorology* and Atmospheric Physics, 87, 167–196. 70, 71, 78, 138, 172
- CIMORELLI, A., PERRY, S.G., VENKATRAM, A., WEIL, J.C., PAINE, R.J., WILSON, R.B., LEE, R.F., PETERS, W.D., BRODE, R.W., & PAUMIER, J.O. 2004. AERMOD : Description of Model Formulation. Tech. rept. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina. 1
- CIMORELLI, A.J., PERRY, S.G., VENKATRAM, A., WEIL, J.C., PAINE, R.J., WILSON, R.B., LEE, R.F., PETERS, W.D., & BRODE, R.W. 2005. AERMOD : A dispersion Model for Industrial Source Applications. Part I : General Model Formulation and Boundary Layer Characterization. J. Appl. Meteorol., 44, 694-708. 63
- COIRIER, W.J. 2004 (August 13-15). Validation of CFD-Urban using Accepted Open Field and Urban Area Transport and Dispersion Test Data. 8th Annual George Mason University Conference on Transport and Dispersion Modeling, Fairfax, Washington. 63, 84
- COIRIER, W.J., FRICKER, D.M., FURMANCZYK, M., & KIM, S. 2006. A Computational Fluid Dynamics Approach for Urban Area Transport and Dispersion Modeling. *Env. Fluid Dynamics*, 5, 443–479. 2, 41, 48, 104
- COLVILE, R.N., WIIDFIELD, N.K., CARRUTHERS, D.J., FISHER, B.E.A., RICHARD, A., NE-VILLE, S., & HUGHES, A. 2002. Uncertainty in dispersion modelling and urban air quality mapping. *Env. Sci. & Pol.*, 5, 207–220. 176
- CRAFT, T.J., LAUNDER, B.E., & SUGA, K. 2000. Development and application of a cubic eddy-viscosity model of turbulence. Int. J. Heat and Fluid Flow, 17, 108-115. 41
- CROPP, R., & BRADDOCK, R. 2002. The New Morris Method : an efficient second order screening method. *Reliability Eng. & Syst. Safety*, **78**, 77–83. 201

- DABBERDT, W.J., & MILLER, E. 2000. Uncertainty, ensembles and air quality dispersion modeling applications and challenges. *Atoms. Environ.*, **34**, 4667–4673. **175**
- DEARDOFF, J.W. 1972. Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers. J. Atmos. Sci., 17, 108–115. 61
- DEMAËL, E., & CARISSIMO, B. 2007. Comparative evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian Plume models based on Prairie Grass dispersion experiment, à paraître. J. Appl. Clim. and Meteorol. 3, 58
- DEMUREN, A.O., & RODI, W. 1987. Three dimensional numerical calculations of flow and plume spreading past cooling towers. J. Heat Trans., 109, 113–119. 97
- DOSIO, A., ARELLANO, J.V.G., HOLTSLAG, A.A.M., & BUILTJES, P.J.H. 2000. Dispersion of a Passive Tracer in Buoyancy- and Shear-Driven Boundary Layers. J. Appl. Meteorol., 17, 108–115. 63
- DOUCE, A. 2006. évaluer les incertitudes de données d'entrée en cfd. exemples d'applications. Tech. rept. EDF R&D, Département Mécanique des Fluides, Énergies et Environnement. 176
- DOURY, A. 1976. Une méthode de calcul pratique et générale pour la prévision des pollutions véhiculées par l'atmosphère. Tech. rept. R-4280 (Rév. 1). CEA. 1, 63
- DOURY, A. 1983. Une méthode d'approximation instantannée de la dispersion atmosphèrique. Tech. rept. SR-85. CEA / IPSN / IAEA. 63
- DRAXLER, R.R. 1984. Diffusion and transport experiments. In : RANDERSON, D. (ed), Atmospheric Science and Power Production. 63
- DU, S., & VENKATRAM, A. 1998. The effect of streamwise diffusion on ground-level concentrations. Atmos. Environ., 32, 1955–1961. 63
- DUYNKERKE, P.G. 1988. Application of the *E*-ε Turbulence Closure Model to the Neutral and Stable Atmospheric Boundary Layer. J. Atmos. Sci., 45, 865–880. 39, 126
- EADS-EDF-PHIMECA. 2007. Open TURNS Reference Guide Open TURNS v1.0, http://www.openturns.org. 177, 179, 181, 184, 187, 192, 197, 216
- EHRHARD, J., KUNZ, R., & MOUSSIOPOULOS, N. 2000. On the performance and applicability of nonlinear two-equation turbulence models for urban air quality modelling. *Environmental Monitoring and Assessment*, 65, 201–209. 39, 41
- ELKHAFI, A. 1992. Comparaison hydrostatique et non-hydrostatique avec le code Mercure sur les écoulements orographiques. Ph.D. thesis, École Centrale de lyon. 42
- FARAGHER, J. 2004. Probabilistic Methods for the Quantification of Uncertainty and Error in Computational Fluid Dynamics Simulations. Tech. rept. Air Vehicles Division, Plateforme Sciences Laboratory, Departement of Defense, Defense Science and Technology Organisation. 176
- FRANKE, J., HIRSCH, C., JENSEN, A.G., KRUS, H.W., SCHATZMANN, M., WESTBURY, P.S., MILES, S.D., WISSE, J.A., & WRIGHT, N.G. 2004. Recommendations on the use of CFD in wind engineering. In : J.P.A.J. (ed), Proceedings of the International Conference on Urban Wind Engineering and Buildings Aerodynamics. Von Karman Institute. 39, 47

- GALMARINI, S., BIANCONI, R., ADDIS, R., ANDRONOPOULOS, S., ASTRUP, P., & BARTZIS, J.C. 2004. Ensemble dispersion forecasting-Part I : Concept, approach and indicators. Atmos. Environ., 38, 4607–4617. 175
- GARRATT, J.R. 1992. The atmospheric boundary layer. Cambridge Atmospheric and Space Sciences Series. 7, 15, 90, 144
- GAVRILOV, V.P., & KLEPIKOVA, N.V. 1995. Trial of a nonlinear diffusion equation as a model of turbulent diffusion. *Atmos. Environ.* 62
- GILBERT, E. 2006. Étude complémentaire des conditions de dispersion pour le site de Flamanville. Tech. rept. H-I88-2006-0218-FR. EDF R&D, Département Mécanique des Fluides, Énergies et Environnement, groupe Météorologie appliquée et environnement atmosphérique. 143
- GRYNING, S.E. 1999. Some aspects of atmospheric dispersion in the stratified atmospheric boundary layer over homogeneous terrain. Boundary Layer Meteorol., 90, 479–494. 57, 62
- HANNA, S.R. 1982. Handbook on Atmospheric Diffusion. Technical Information Center, U.S. Department of Energy. 18, 24, 32, 66, 68
- HANNA, S.R. 1984. Concentration fluctuations in a smoke plume. Atmos. Environ., 18, 1091– 1106. 43
- HANNA, S.R. 1989. Confidences limits for air quality model evaluations, as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmos. Environ.*, 23, 1385–1398. 28
- HANNA, S.R. 1997. Causes of uncertainties in dispersion models for ground-based dense gas clouds. Pages 331-334 of : Proceedings of the 10th Conference on AIr Pollution Meteorology. American Meteorological Society. 182
- HANNA, S.R., & CHANG, J.C. 2001. Use of the Kit Fox field data to analyze dense gas modeling issues. Atmos. Environ., 35, 2231–2242. 58
- HANNA, S.R., CHANG, J.C., & STRIMAITIS, D.G. 1993. Hazardous gas model evaluation with field observations. *Atmos. Environ.*, **27A**, 2265–22857. 70
- HANNA, S.R., CHANG, J.C., & FERNAU, M.E. 1998. Monte Carlo estimates of uncertainties in prediction by a photochemical grid model (UAM-IV) due to uncertainties in input variables. *Atmos. Environ.*, 32, 3619–3628. 176
- HANNA, S.R., HANSEN, O., & DHARMAVARAM, S. 2004. FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations. Atmos. Environ., 38, 4675–4687. 63, 70, 74, 84
- HARGREAVES, D.M., & WRIGHT, N.G. 2006. On the use of the k-ε model in commercial cfd software to model the neutral atmospheric boundary layer. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 6, 213–228. 45, 46, 51
- HAUGEN, D.A. 1958. Project Prairie Grass, a field program in diffusion. In : Geopys. Res. Papers, vol. III. U.S. Air Force Cambridge Research Center. 59
- HELTON, J.C. 2005. Sampling-based Methods for Uncertainty and Sensitivity Analysis. Pages 221-229 of : HANSON, K.M., & HEMEZ, F.M. (eds), Sensitivity Analysis of Model Output. 184

- HELTON, J.C., & DAVIS, F.J. 2002. Latin Hypercube Sampling and the Propagation of Uncertainty in Analyses of Complex Systems. Tech. rept. SAND2001-0417. Sandia National Laboratories. 179, 184, 185, 197
- HELTON, J.C., & DAVIS, F.J. 2003. Latin Hypercube Sampling and the Propagation of Uncertainty in Analyses of Complex Systems. *Reliability Eng. & Syst. Safety*, 81, 23-69. 177, 184, 185
- HORST, T.W. 1979. Lagrangian Similarity Modeling of Vertical Diffusion from a Ground-Level Source. Boundary Layer Meteorol., 18, 733-740. 61
- HSIEH, K.J., LIEN, F.S., & YEE, E. Numerical modeling of passive scalar dispersion in an urban camopy layer. J. Wind Eng. Ind. Aerodyn., à paraître. 122
- HUBER, A.H., TANG, W., FLOWE, A., & BELL, B. 2004 (August 23-26). Development and applications of CFD simulations in support of air quality studies involving buildings. 13th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the Air & Waste Management Association, Vancouver, British Columbia, Canada. 74
- IRWIN, J. 1983. Estimating Plume Dispersion A Comparison of Several Sigma Schemes. J. Clim. and Appl. Meteorol., 22, 92–114. 57, 62
- IRWIN, J.S., & HANNA, S.R. 2004 (June 1-4). Characterizing uncertainty in plume dispersion models. 9th International Conference on Harmonization within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK-IFU), Garmisch Parkenkirchen, Germany. 176
- IRWIN, J.S., KAKKARINEN, C., & FELMAN, H. 2001 (April 4-6). Uncertainty in air quality modeling for risk calculations. Guideline on Air Quality Models : A New Beginning. Air & Waste Management Association, Newport, Rhode Island. 2, 175
- IRWIN, J.S., CARRUTHERS, D., STOCKER, J., & PAUMIER, J. 2003. Application of ASTM D6589 to evaluate dispersion model performance. Int. J. Environ. and Pol., 20, 4–10. 2, 58, 214, 216
- ISLITZER, N.F., & SLADE, D.H. 1968. Diffusion and transport experiments. Pages 117-188 of: SLADE, D.H (ed), Meteorology and Atomic Energy. 1
- ISUKAPALLI, S.S., & GEORGOPOULOS, P.G. 2001. Computational Methods for Sensitivity and Uncertainty Analysis for Environmental and Biological Models. Tech. rept. EPA/600/R-01-068. U.S. Environmental Protection Agency. 175
- JAFFE, S. 1967. A three-layer diffusion model as applied to unstable atmospheric conditions. J. Clim. and Appl. Meteorol. , 6, 297–302. 62
- JAKEMAN, A.J., LETCHER, R.A., & NORTON, J.P. 2006. Ten iterative steps in development and evaluation of environmental models. *Env. Model. & Soft.*, 21, 602–614. 175
- JAMET, N. 2005. Maillage de la centrale de Bugey avec Simail. Tech. rept. INCKA. 91, 93
- KNIO, O.M., & MAÎTRE, O.P. LE. 2006. Uncertainty Propagation in CFD Using Polynomial Chaos Decomposition. *Fluid. Dyn. Research*, **38**, 616–640. **176**
- KÖNIG, C.S., & MOKHTARZADEH-DEHGHAN, M.R. 2002. Numerical study of buoyant plumes from a multi-flue chimney released into an atmospheric boundary layer. *Atmos. Environ.*, **36**, 2951–3962. 96

- LACOUR, S., SCHMITT, H., & CARISSIMO, B. à paraître dans Atmos. Environ.. Detailed modelling of NOx and NO2 dispersion in a street canyon. 42
- LAUNDER, B.E., & KATO, M. 1993. Modeling flow-induced oscillations in turbulent flow around square cylinder. Page 20 of : ASME Fluid Eng. Conference. 40
- LAUNDER, B.E., & SPALDING, D.B. 1974. The numerical computation of turbulent flows. Comp. meth. app. mech. and eng., 3, 269–289. 38
- LEE, R.F., & IRWIN, J.S. 1997. Improving Concentrations Measures Used for Evaluating Air Quality Models. Boundary Layer Meteorol., 36, 1107–1112. 57, 63
- LEE, W.S., & TESKE, M.E. 1976. Second-order closure modeling of diffusion in the atmospheric boundary layer. Boundary Layer Meteorol., 10, 69–90. 42
- LIEN, F.S., CHEN, W.L., & LESCHZINER, M.A. 1996. Engineering Turbulence and Experiments 3. Elsevier Science Publishing Co. Chap. Low-Reynolds-number eddy-viscosity modelling based on non-linear stress-strain/vorticity relations. 41
- LIU, C.H., & LEUNG, D.Y.C. 1997. Numerical study of atmospheric dispersion under unstably stratified atmosphere. J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn. 42
- LIU, C.H., & LEUNG, D.Y.C. 2000. Turbulence and Dispersion Studies Using a Threedimensional Second-Order Closure Eulerian Model. J. Appl. Meteorol., 40, 92–113. 42
- LUMLEY, J.L., & PANOFSKY, H.A. 1964. The Structure of Atmospheric Turbulence. New-York : Wiley-Interscience. 7
- MACDONALD, R.W., & EJIM, C.E. 2006. Flow and Dispersion Data from a Hydraulic Simulation of the MUST array. *Boundary Layer Meteorol.* 58
- MALLET, V., & SPORTISSE, B. 2006. Uncertainty in a chemistry-transport model due to physical parameterizations and numerical approximations : An ensemble approach applied to ozone modeling. J. Geopys. Res., 111(D01302), 538-543. 175
- MEJEAN, P. 2003. Dispersion atmosphérique sur le site de la centrale EDF de Bugey Essais en soufflerie. Tech. rept. LMFA - UMR 5509 CNRS / ECL / UCB. 85, 86, 88, 90, 91, 92, 113, 126, 231
- MEJEAN, P. 2006. Étude en soufflerie de la dispersion autour du site de Flamanville. Tech. rept. LMFA UMR 5509 CNRS / ECL / UCB. 89, 141, 142, 143, 144, 157, 160, 161
- MENTER, F.R. 1993. Zonal two equation $k \omega$ turbulence model predictions. AIAA Paper No 93-2906. 41
- METHA, U.B. 1991. Some aspects of uncertainty in computational fluid dynamics results. J. Fluids Eng., 113, 538-543. 176
- MILLIEZ, M. 2007. Modélisation thermique au sein du modèle Mercure_Saturne. Application à la modélisation de l'environnement urbain. Ph.D. thesis, École Nationale des Ponts et Caussées, CEREA, Centre de Recherche et d'Enseignement en Environnement Atmosphérique. 71
- MILLIEZ, M., & CARISSIMO, B. 2006a. CFD modelling of concentration fluctuations in an idealized urban area. *Boundary Layer Meteorol.* 42, 43, 45, 124
- MILLIEZ, M., & CARISSIMO, B. 2006b. Numerical simulations of pollutant dispersion in an idealized urban area, for different meteorological conditions. *Boundary Layer Meteorol.* 42

- MORRIS, M.D. 1991. Factorial sampling plans for preliminary computational experiments. *Pages* 161-174 of : Technometrics, vol. 33. 3, 201, 203
- MURAKAMI, S. 1998. Overview of turbulence models applied in CWE-1997. J. of Wind Eng., 74-76, 1-24. 40
- MUSSON-GENON, L. 1995. Comparison of Different Simple Turbulence Closures with a One-Dimensional Boundary Layer Model. Mon. Wea. Rev., 123, 163–180. 39
- NELSEN, R.B. 1999. An introduction to copulas. SPRINGER. 179
- NIEUWSTADT, F.T.M. 1980. Application of Mixed-Layer Similarity to the Observed Dispersion from a Ground-Level Source. J. Appl. Meteorol., 19, 157–162. 61
- OGURA, Y., & PHILLIPS, N. 1962. Scale analysis of deep and shallow convection in the atmosphere. J. Atmos. Sci., 19, 73-79. 8
- PANOFSKY, H.A., & DUTTON, A. 1984. Atmospheric Turbulence. Wiley. 26
- PASQUILL, F. 1961. Estimation of the dispersion of windborne material. *Meteorol. Mag.*, 90, 33-49. 1, 24, 60
- PASQUILL, F. 1976. Atmospheric dispersion parameters in Gaussian plume modeling. Part II. Possible requirements for change in the Turner Workbook values. Pages 196-211 of : Report No. EPA-600/4-76-030b, U.S. Environmental Protection Agency edn. 60
- PERKINS, R., SOULHAC, L., & MEJEAN, P. 2002. Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur. 1ère partie : État de l'art. Association R.E.C.O.R.D edn. Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique. UMR CNRS 5509 - UCBL1 - ECL. 18, 19, 24, 57
- PERKINS, R., SOULHAC, L., MEJEAN, P., & RIOS, I. 2005a. Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel Vers un guide de l'utilisateur. 2ème partie : Évaluation des modèles. Rapport de synthèse. Association R.E.C.O.R.D edn. Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique. UMR CNRS 5509 UCBL1 ECL. 63
- PERKINS, R., SOULHAC, L., MEJEAN, P., & RIOS, I. 2005b. Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur. 2ème partie : Évaluation des modèles. Rapport Final. Association R.E.C.O.R.D edn. Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique. UMR CNRS 5509 - UCBL1 - ECL. 2, 61, 63, 216
- PIELKE, R.A. 1984. Mesoscale meteorological modeling. Academic Press Inc. 8, 10, 37
- PIELKE, R.A. 1998. The need to assess uncertainty in air quality evaluations. Atmos. Environ., 32, 1467–1468. 2, 175
- POPE, S.B. 2000. Turbulent flows. Cambridge University Press. 22, 39
- QUÉMERAIS, E. 2005. Maillage de la centrale de Flamanville avec Simail. Tech. rept. SPIST/DOC/2006/FLAM/001. INCKA. 145
- RADICCHI, A. 2007. Modeling of concentration pdf in canopy-generated turbulence. Ph.D. thesis, Facolta di Scienze Ambientali, Universita Degli Studi di Urbino.
- RAHNI, N., RAMDANI, N., CANDAU, Y., & DALICIEUX, P. 1997. Application of group screening to dynamic building energy simulation models. J. Statist. Comput. Simul., 57, 285–304. 180

- REFSGAARD, J.C., VAN DER SLUIJS, J.P., HOJBERG, A.L., & VANROLLEGHEM, P.A. 2007. Uncertainty in the environmental modelling process - A framework and guidance. *Env. Model.* & Soft., 22, 1543–1556. 175
- RICHARDS, P.J., & HOXEY, R.P. 1993. Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the k-ε turbulence model. Journal of Wind Engneering and Industrial Aerodynamics, 46 & 47, 145–153. 45, 46, 51
- RICHARDS, P.J., QUINN, A.D., & PARKER, S. 2002. A 6m cube in an atmospheric boundarylayer flow. part 2. computational studies. *Wind Structures*, 2-4, 177–192. 51
- RIDDLE, A., CARRUTHERS, D., SHARPE, D., MCHIGH, A., & TOCKER, C. 2004. Comparisons between Fluent and ADMS for atmospheric dispersion modelling. *Atmos. Environ.*, 38, 1029– 1038. 45
- ROACHE, P.J. 1997. Quantification of uncertainty in Computational Fluid Dynamics. Annu. Rev. Fluid. Mech., 29, 123–160. 176
- ROBINS, A.G., & APSLEY, D.D. 2004. Modelling of building effects in ADMS, in ADMS 3 Technical Specification. Tech. rept. Cambridge Environmental Research Consultants (CERC). 30, 31, 32
- RODI, W. 1993. Turbulence Models and their Application in Hydraulics. A State-of-the-Art Review, third ed. 42
- ROUBIN, P. 2005. Simulation avec Trio-U de la dispersion atmosphérique sur le site de Bugey. Tech. rept. DEN/DTN/SMTM/LMTE/2005/118 indice 0. CEA. 111
- ROUBIN, P. 2006. Simulation avec le logiciel Star-CD de la dispersion atmosphérique sur le site de Bugey. Tech. rept. DEN/DTN/SMTM/LMTE/2006/30 indice 0. CEA. 111
- SAGAUT, P. 2002. Large Eddy Simulation for Incompressible Flows. An Introduction. Springer Ed. 22
- SALTELLI, A., CHAN, K., & SCOTT, E.M. 2000. Sensitivity Analysis. Wiley Ed. 177, 179, 180, 181, 184, 185, 197, 201
- SAPORTA, G. 1990. Probabilités, analyse des données et statistiques. Technip Ed. 198
- SAÏD, N.M., MHIRI, H., PALEC, G. LE, & BOURNOT, P. 2005. Experimental and numerical analysis of pollutant dispersion from a chimney. Atmos. Environ., 39, 1727–1738. 96
- SCHATZMANN, M., RAFAILIDIS, S., & PAVAGEAU, M. 1997. Some remarks on the validation of small-scale dispersion models with field and laboratory data. J. Wind Eng. Ind. Aerodyn., 67-68, 885-893. 58
- SCHÖPP, W., KLIMONT, Z., SUUTARI, R., & COFALA, J. 2005. Uncertainty analysis of emission estimates in the RAINS integrated assessment model. *Env. Sci. & Pol.*, 8, 601–613. 175
- SHIH, T.-H., ZHU, J., & LUMLEY, J.L. 1995. A new reynolds stress algebraic equation model. Comp. Meth. App. Mech. and Eng., 125, 287–302. 41
- SOUFFLAND, D. 1985. Développement et validation d'un modèle non-hydrostatique d'écoulements méso-météorologiques en terrain complexe - Le code MERCURE. Ph.D. thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble. 42

- SOUHAR, O., FAURE, J.-B., & PAQUIER, A. 2007. Automatic sensitivity analysis of a finite volume model for two-dimensional shallow water flows. *Env. Fluid. Dyn.*, 7, 303–315. 176
- STULL, S.R. 1988. An Introduction to atmospheric boundary layer. Technical Information Center, U.S. Department of Energy, Jean S. Smith Ed. 11, 12, 13, 14, 15, 16
- SULLIVAN, D.A., HOLDSWORTH, M.T., & HLINKA, D.J. 2004. Monte Carlo-based dispersion modeling of off-gassing releases from the fumigant metam-sodium for determinating distances to exposure endpoints. *Atmos. Environ.*, 38, 2471–2481. 176
- SYKES, R.I., LEWELLEN, W.S., & PARKER, S.F. 1984. A turbulent-transport model for concentration fluctuations and flux. J. Fluid Mech., 139, 193–218. 42, 45
- TANG, W., HUBER, A.H., BELL, B., KUEHLERT, K., & SCHWARTZ, W. 2005 (June 21-25). Example application of CFD simulations for short range atmospheric dispersion over the open fields of Project Prairie Grass. Air & Waste Management Association 98th Annual Conference, Minneapolis, MN. 63, 74
- TANG, W., HUBER, A.H., BELL, B., & SCHWARTZ, W. 2006 (Jan 30 Feb 2). Application of CFD simulations for short range atmospheric dispersion over open fields and within arrays of buildings. AMS 14th Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, Atlanta, GA. 74
- THOMSON, D.J. 1992. The fluctuations module. ADMS 1.0. Tech. rept. Cambridge Environmental Research Consultants (CERC). 29
- THOMSON, D.J. 1996. Averaging time and fluctuations in ADMS versions 1 and 2. Tech. rept. Cambridge Environmental Research Consultants (CERC). 29
- TIRABASSI, T., & RIZZA, U. 1995. A Practical Model for the Dispersion of Skewed Puffs. J. Appl. Meteorol., 34, 989–993. 62
- TROUDE, F., DUPONT, E., CARISSIMO, B., & FLOSSMANN, A.I. 2002. Relative influence of urban and topographic effects in the Paris area on selected days in the ECLAP experiment. Boundary Layer Meteorol., 103, 493–505. 42
- TSUCHIYA, M., MURAKAMI, S., MOCHIDA, A., KONDO, K., & ISHIDA, Y. 1997. Overview of turbulence models applied in CWE-1997. J. of Wind Eng., 67-68, 169–182. 40
- TURNER, D.B. 1997. The Long Lifetime of the Dispersion Methods of Pasquill in U.S. Regulatory Air Modeling. J. Appl. Meteorol., 36, 1016–1020. 60
- ULDEN, A.P. VAN. 1978. Simples estimates for vertical dispersion from sources near the ground. Atmos. Environ., 12, 2125–2129. 62
- ULDEN, A.P. VAN, & HOLTSLAG, A.A.M. 1985. Estimation of Atmospheric Boundary Layer Parameters for Diffusion Applications. J. Clim. and App. Meteorol., 24, 1196–1207. 26, 62
- U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, OFFICE OF AIR QUALITY PLANNING AND STANDARDS. 2001. Guideline on Air Quality Models. Tech. rept. U.S. Environmental Protection Agency. 19
- USEPA. 1997. Guiding Principles for Monte-Carlo Analysis. Tech. rept. EPA/630/R-97/001. Risk Assessment Forum, U.S. Environmental Protection Agency. 184

- USEPA. 1999. Report of the Workshop on Selecting Input Distributions for Probabilistic Assessments. Tech. rept. EPA/630/R-68/004. Risk Assessment Forum, U.S. Environmental Protection Agency. 185
- VACHON, G. 2001. Transferts des polluants des sources fixes et mobiles dans la canopée urbaine : évaluation expérimentale. Ph.D. thesis, Université de Nantes, France. 58
- VAN DER SLUIJS, J.P., CRAYE, M., FUNTOWICZ, S., KLOPROGGE, P., & RISBEY, J.S. 2005. Combining quantitative and qualitative measures of uncertainty in model based environmental assessment : the NUSAP System. *Risk Anal.*, 25, 481–492. 175
- VENKATRAM, A. 1980. Estimating the Monin-Obukhov length in the stable boundary-layer for disperion calculations. *Boundary Layer Meteorol.*, **19**, 481–485. **62**
- VENKATRAM, A. 1996. An examination of the Pasquill-Gifford-Turner dispersion scheme. Atmos. Environ., **30**, 1283–1290. 60
- VENKATRAM, A., & DU, S. 1997. An analysis of the asymptotic behavior of cross-windintegrated ground-level concentrations using lagrangian stochastic simulation. Atmos. Environ., 31, 1467–1476. 62
- WALSHE, J. 2003. CFD modelling of wind flow over complex and rough terrain. Ph.D. thesis, University of Loughborough. 45
- WANG, X., KEVIN, F., & MCNAMARA, F. 2006. Evaluation of CFD Simulation using RANS Turbulence Models for Building Effects on Pollutant Dispersion. *Env. Fluid Dyn.*, 6, 181–202. 41, 42
- WEIL, J.C. 1985. Updating Applied Diffusion Models. J. Clim. and Appl. Meteorol. . 28, 62
- WILCOX, D.C. 1988. Re-assessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. AAIA Journal, 26, 1414–1421. 39
- WILCOX, D.C. 2004. Turbulence Modeling for CFD. DCW Industries, Inc. 39
- WILSON, J.D. 1981. Numerical simulation of particle trajectories in inhomogeneous turbulence,
 III : Comparison of predictions with experimental data for the atmospheric surface layer.
 Boundary Layer Meteorol. 62
- WILSON, J.D. 1982. An approximate analytical solution to the diffusion equation for short-range dispersion from a continuous ground-level source. *Boundary Layer Meteorol.*, 23, 85–103. 62
- WRIGHT, N.G., & EASOM, G.J. 2003. Non-linear k-ε turbulence model results for flow over a building at full-scale. Appl. Math. Mod., 27, 1013–1033. 41
- XIU, D., & KARNIADAKIS, G.E. 2003. A new stochastic approach to transient heat conduction modeling with uncertainty. Int. J. of Heat & Mass Trans., 24, 4681–4694. 176
- YAKHOT, V., & ORSZAG, S.A. 1986. Renormalization group analysis of turbulence : I. Basic theory. J. Sci. Comput., 1, 1–51. 40
- YAMAMOTO, G., & SHIMANUKI, A. 1964. The Determination of Lateral Diffusivity in Diabatic Conditions near the Ground from Diffusion Experiments. J. Atmos. Sc., 21, 187–196. 62
- YEE, E., & BILTOFT, C.A. 2004. Concentration fluctuation measurements in a plume dispersion through a regular array of obstacles. *Boundary Layer Meteorol.*, **111**, 363–415. 58

- YEGNAN, A., WILLIAMSON, D.G., & GRAETTINGER, A.J. 2002. Uncertainty analysis in air dispersion modeling. Env. Model. & Soft., 17, 639-649. 176
- ZADOR, J., ZSELY, I.G., & TURANYI, T. 2006. Local and global uncertainty of complex chemical kinetics systems. *Reliability Eng. & Syst. Safety*, **91**, 1232–1240. 201

Annexe A

Emplacement des profils de mesure sur la maquette du site CNPE de Bugey



FIG. A.1 : Emplacement des profils cinématiques pour la direction de vent de Sud (en coordonnées Lambert absolues et en coordonnées relatives par rapport à l'origine (0,0) située au centre du bâtiment réacteur n°2).



profils transverses (u, v, w, u') à z = 25, 50, 100, 150 m

FIG. A.2 : Emplacement des profils cinématiques pour la direction de vent de Nord (en coordonnées Lambert absolues et en coordonnées relatives par rapport à l'origine (0,0) située au centre du bâtiment réacteur n°2).



FIG. A.3 : Emplacement des profils de mesure de concentration et rms associée pour la direction de vent de Sud et le rejet en cheminée et visualisation des isocontours de concentration exprimée en CTA (s.m⁻³) déduits des mesures en soufflerie, in Mejean (2003).



FIG. A.4 : Idem Fig. A.5 pour le rejet diffus à travers la paroi du réacteur n°2.



FIG. A.5 : Idem Fig. A.5 pour la direction de vent de Nord.



FIG. A.6 : Idem Fig. A.5 pour la direction de vent de Nord et le rejet diffus à travers la paroi du réacteur n°2.

Annexe B

Configurations d'étude pour les simulations ADMS sur le site CNPE de Bugey

Nous fournissons ici les grilles de calcul ADMS utilisées pour la modélisation de la dispersion sur le site de Bugey dans le cas de vent de Sud et qui correspondent aux configurations décrites dans le paragraphe 3.4.1).





(b) la tranche 4-5 est prise en compte (configuration référencée "BUsud1")





2500

2000

1500-

1000

500-



500

quatre aéroréfrigérants sont pris en compte (configurations référencées "BUsud2" et "BUsud3")

 (d) tous les bâtiments sont pris en compte à l'exception de la tranche 2-3 (configurations référencées "BUsud4" et "BUsud5")

urations référencées "BUsud2" et "BUsud3") référencées "BUsud4" et "BUsud5")

FIG. B.1 : Grilles de calcul ADMS utilisées pour la modélisation de la dispersion sur le site de Bugey.

____237

Annexe C

Champs de concentration surfacique issus des simulations ADMS sur le site de Bugey pour le cas de vent de Sud et de rejet en cheminée

Sont données dans cette annexe les champs de concentration surfacique issus des simulation ADMS 3.3 pour le cas du rejet en cheminée par vent de Sud et pour les différentes configurations étudiées. Les résultats sont présentés sous la forme d'iso-contours.



FIG. C.1 : Isocontours de CTA au sol pour la simulation du rejet en cheminée par vent de Sud sur le site de CNPE de Bugey à l'aide d'ADMS 3.3 : configuration BUsud6 (terrain plat).


FIG. C.2 : Isocontours de CTA au sol pour la simulation du rejet en cheminée par vent de Sud sur le site de CNPE de Bugey à l'aide d'ADMS 3.3 : configuration BUsud5 (tous les bâtiments pris en compte à l'exception de la tranche 2-3, les aéroréfrigérants étant considérés comme le bâtiment principal pour la dispersion).

Annexe D

Intégralité des profils analysés pour la direction de Vent de Sud

Nous fournissons l'ensemble des profils exploités pour la comparaison du modèle *Mercure* aux mesures en soufflerie en terme de champs cinématiques pour la direction de vent de Sud. L'équivalent pour la direction de vent de Nord n'est pas présenté ici mais a été constitué.

De même est donné l'ensemble des profils caractéristiques de la dispersion pour le rejet en cheminée et la direction de vent de Sud, qui comparent les modèles *Mercure* et ADMS aux données de soufflerie pour le champ moyen de concentration et *Mercure* aux mesures pour le champ de rms. Les résultats des simulations ADMS sont celles correspondant à la configuration "BUsud5" (ensemble de bâtiments pris en compte à l'exception de la tranche 2-3, le bâtiment représentant les quatres aéroréfrigérants étant défini comme le plus influent sur la disperion).

D.1 Profils dynamiques pour le vent de Sud

D.1.1 Profils verticaux



(a) Profil vertical en y = -750 m et x = 0



(b) Profil vertical en y = 0 m et x = 0



(c) Profil vertical en y = -37 m et x = 0



(d) Profil vertical en y = 120 m et x = 0



(e) Profil vertical en y = 160 m et x = 0

(f) Profil vertical en y = 200 m et x = 0

FIG. D.1 : Comparaison des profils verticaux de vitesse $(\overline{u}, \overline{v}, \overline{w} \text{ en } m.s^{-1})$ et de TKE (en $m^2.s^{-2}$) pour la direction de vent de Sud issus des simulations Mercure et de l'essai en soufflerie. Pour Mercure, le trait continu rouge en gras correspond au profil pris exactement en x = 0, les traits discontinus représentant les profils localisés entre l'origine et $\Delta x = \pm 40$ m.



(a) Profil vertical en y = 300 m et x = 0

W (m/s)

urms (m/s)



(b) Profil vertical en y = 450 m et x = 0



(c) Profil vertical en y = 660 m et x = 0



(d) Profil vertical en y = 850 m et x = 0





(f) Profil vertical en y = 1450 m et x = 0

FIG. D.2 : *idem Fig.* <u>D.1</u> (*suite*).



(a) Profil vertical en y = 1750 m et x = 0

(b) Profil vertical en y = 2100 m et x = 0



(c) Profil vertical en y = 2500 m et x = 0

FIG. D.3 : *idem Fig.* <u>D.1</u> (*suite*).

D.1.2 Profils transverses



(a) Profil transverse en y = -1000 m et z = 50 m



(c) Profil transverse en y = 160 m et z = 50 m



(b) Profil transverse en y = 160 m et z = 25 m



(d) Profil transverse en y = 450 m et z = 25 m

450

Profil 5 - BUGEY Sud



(e) Profil transverse en y = 450 m et z = 50 m

50 400 ∎∎∎ souffleri 400 . 000 distance (m) 001-100 300 200 100 -100 -20 -200 -300 ١ -300 2 3 U (m/s) V (m/s) 500 50 400 300 200 100 distance (m) ³⁰⁰ ⁰ ¹⁰⁰ ⁰ 1 -100 -200 30 -зор W (m/s) urms (m/s)

(f) Profil transverse en y = 450 m et z = 100 m

FIG. D.4 : Idem Fig. D.1 pour les profils transverses.



(a) Profil transverse en y= 850 m et z= 50 m



(b) Profil transverse en y = 850 m et z = 100 m



(c) Profil transverse en y = 1150 m et z = 50 m



(d) Profil transverse en y = 1150 m et z = 100 m

1450 ; z = 100



Profil 11 - BUGEY Sud ■■■ soufflerie 40 o 200 distance (m) 0 -200 200 -200 -40 U (m/s) V (m/s) 400 400 o 007 distance (m) 0 007-200 -200 -40 -40 W (m/s) urms (m/s)

(e) Profil transverse en y $=1450~{\rm m}$ et z $=50~{\rm m}$

(f) Profil transverse en y $=1450~{\rm m}$ et z $=100~{\rm m}$

FIG. D.5 : Idem Fig. D.4 (suite).





50

400

Profil 12 - BUGEY Sud : y = 1750 ; z =

(a) Profil transverse en y = 1750 m et z = 50 m



(b) Profil transverse en y = 1750 m et z = 100 m





(c) Profil transverse en y = 2100 m et z = 50 m

(d) Profil transverse en y = 2100 m et z = 100 m



(e) Profil transverse en y = 2100 m et z = 150 m

FIG. D.6 : Idem Fig. D.4 (suite).

D.2 Profils de CTA moyen pour le vent de Sud et le rejet en cheminée

D.2.1 Profils verticaux



(a) Profil vertical en y = 120 m et x = 0



(c) Profil vertical en y = 240 m et x = 0



(e) Profil vertical en y = 400 m et x = 0



(b) Profil vertical en y = 200 m et x = 0



(d) Profil vertical en y = 300 m et x = 0



(f) Profil vertical en y = 625 m et x = 0

FIG. D.7 : Comparaison des profils verticaux de CTA (en s.m⁻³) pour la direction de vent de Sud et le rejet en cheminée issus des simulations Mercure et ADMS et de l'essai en soufflerie.



(a) Profil vertical en y = 850 m et x = 0



(c) Profil vertical en y = 1450 m et x = 0



(e) Profil vertical en y = 2100 m et x = 0



(b) Profil vertical en y = 1150 m et x = 0



(d) Profil vertical en y = 1750 m et x = 0



(f) Profil vertical en y = 2500 m et x = 0

FIG. D.8 : idem Fig. D.7 (suite).



(a) Profil transverse en y = 300 m et z = 25 m



(b) Profil transverse en y = 400 m et z = 25 m



(c) Profil transverse en y $=450~{\rm m}$ et z $=25~{\rm m}$



FIG. D.9 : Idem Fig. D.7 pour les profils transverses.



(a) Profil transverse en y = 850 m et z = 25 m



(c) Profil transverse en y = 1450 m et z = 25 m



(e) Profil transverse en y $=2100~{\rm m}$ et z $=25~{\rm m}$



(b) Profil transverse en y = 1150 m et z = 25 m



(d) Profil transverse en y = 1750 m et z = 25 m



(f) Profil transverse en y= 2500 m et z= 25 m

FIG. D.10 : Idem Fig. D.9.





(b) Profil transverse en y = 400 m et z = 0



(c) Profil transverse en y = 450 m et z = 0



FIG. D.11 : Idem Fig. D.7 au sol.



(a) Profil transverse en y = 850 m et z = 0



(c) Profil transverse en y = 1450 m et z = 0



(e) Profil transverse en y = 2100 m et z = 0



(b) Profil transverse en y = 1150 m et z = 0



(d) Profil transverse en y $=1750~{\rm m}$ et z=0



(f) Profil transverse en y $=2500~{\rm m}$ et z=0

FIG. D.12 : Idem Fig. D.11 (suite).

- (a) Profil vertical en y = 120 m et x = 0



(c) Profil vertical en y = 240 m et x = 0



(e) Profil vertical en y = 400 m et x = 0



(b) Profil vertical en y = 200 m et x = 0



(d) Profil vertical en y = 300 m et x = 0



(f) Profil vertical en y = 625 m et x = 0

FIG. D.13 : Comparaison des profils verticaux de rms de CTA (en $s.m^{-3}$) pour la direction de vent de Sud et le rejet en cheminée issus des simulations Mercure et l'essai en soufflerie.

D.3.1 Profils verticaux

D.3



(a) Profil vertical en y = 850 m et x = 0



(c) Profil vertical en y = 1450 m et x = 0



(b) Profil vertical en y = 1150 m et x = 0



(d) Profil vertical en y = 1750 m et x = 0



(e) Profil vertical en y = 2100 m et x = 0

(f) Profil vertical en y = 2500 m et x = 0

FIG. D.14 : idem Fig. D.13 (suite).

D.3.2 Profils transverses en z = 25 m



(a) Profil transverse en y = 300 m et z = 25 m



(b) Profil transverse en y = 400 m et z = 25 m





(d) Profil transverse en y = 625 m et z = 25 m

FIG. D.15 : Idem Fig. D.13 pour les profils transverses.



(a) Profil transverse en y= 850 m et z= 25 m



(c) Profil transverse en y = 1450 m et z = 25 m



(e) Profil transverse en y $=2100~{\rm m}$ et z $=25~{\rm m}$



(b) Profil transverse en y= 1150 m et z= 25 m



(d) Profil transverse en y = 1750 m et z = 25 m



(f) Profil transverse en y= 2500 m et z= 25 m

FIG. D.16 : Idem Fig. D.15.





(a) Profil transverse en y = 300 m et z = 0



(b) Profil transverse en y = 400 m et z = 0



(c) Profil transverse en y = 450 m et z = 0

(d) Profil transverse en y = 625 m et z = 0

FIG. D.17 : Idem Fig. D.13 au sol.



(a) Profil transverse en y = 850 m et z = 0



(c) Profil transverse en y = 1450 m et z = 0



(b) Profil transverse en y = 1150 m et z = 0



(d) Profil transverse en y=1750m et z=0



(e) Profil transverse en y = 2100 m et z = 0

(f) Profil transverse en y $=2500~{\rm m}$ et z=0

FIG. D.18 : Idem Fig. D.17 (suite).

Annexe E

Simulations ADMS sur le site de Flamanville

E.1 Champs de vent pour la direction 289°



FIG. E.1 : Champ de vent (en module et direction) modélisé par FLOWSTAR à 1 m au-dessus du sol pour la direction de vent 289°.



FIG. E.2 : Champ de vent (en module et direction) modélisé par FLOWSTAR à 30 m au-dessus du sol pour la direction de vent 289°.



FIG. E.3 : Champ de vent (en module et direction) modélisé par FLOWSTAR à 200 m au-dessus du sol pour la direction de vent 289°.

E.2 Champs de CTA (isocontours) pour la direction 289°



FIG. E.4 : Isoncontours de CTA (exprimé en s.m⁻³) issus des simulations ADMS pour la direction de vent 289° et le rejet en sortie de cheminée EPR.



FIG. E.5 : Idem Fig. E.4 pour le rejet FLA1.



FIG. E.6 : Idem Fig. E.4 pour le rejet FLA2.

Annexe F

Méthode de Monte-Carlo : Scatter-diagrammes complémentaires



FIG. F.1 : Scatter-diagramme représentant la distribution de la relation $C_{max} = f(\alpha)$ issu des 100 simulations Mercure pour les différentes distances en aval du rejet.



FIG. F.2 : idem Fig. F.4 pour la relation $C_{max} = f(z_{01})$.



FIG. F.3 : idem Fig. F.4 pour la relation $C_{max} = f(z_{02})$.



FIG. F.4 : Scatter-diagramme représentant la distribution de la relation $C_y = f(\alpha)$ issu des 100 simulations Mercure pour les différentes distances en aval du rejet.

Annexe G

Méthode de Morris : ensemble des résultats

La méthode de Morris a été appliquée pour trois valeurs du nombre d'effets élémentaires par facteur d'entrée : r = 8, 11 et 14. La méthode étant apparue stable en fonction de ce paramètre, les résultats ont été discutés dans le chapitre 5 à partir d'une sélection de figures pour la valeur r = 11. Nous en donnons ici la totalité, pour chaque variable d'intérêt (C_{max} , C_y et Y_{max}) et à chaque distance prise en s'éloignant de la source. Par ailleurs, nous fournissons pour r = 8 et r = 11 trois figures illustrant la stabilité de la méthode (pour la variable d'intérêt C_{max}).

G.1.1 Variable C_{max}



FIG. G.1 : Évolution des moyennes et variances propres aux distributions d'effets élémentaires pour les cinq variables d'entrée α , $1/L_{MO}$, z_{01} , z_{02} et la hauteur de la cellule de rejet Z cel en fonction de la distance à la source, pour la variable d'intérêt C_{max} , dans le cadre de l'application de la méthode de Morris







(b)







(d)



FIG. G.2 : Idem Fig. G.1 (suite)



FIG. G.3 : Évolution des moyennes et variances estimées à partir des distributions d'effets élémentaires pour les cinq variables d'entrée α , $1/L_{MO}$, z_{01} , z_{02} et la hauteur de la cellule de rejet Zcel en fonction de la distance à la source, pour la variable d'intérêt C_y , dans le cadre de l'application de la méthode de Morris







(b)







(d)



FIG. G.4 : Idem Fig. G.3 (suite)



FIG. G.5 : Évolution des moyennes et variances estimées à partir des distributions d'effets élémentaires pour les cinq variables d'entrée α , $1/L_{MO}$, z_{01} , z_{02} et la hauteur de la cellule de rejet Zcel en fonction de la distance à la source, pour la variable d'intérêt Y_{max} , dans le cadre de l'application de la méthode de Morris







(b)







(d)



FIG. G.6 : Idem Fig. G.5 (suite)



FIG. G.7 : Évolution des moyennes et variances propres aux distributions élémentaires pour les cinq variables d'entrée α , $1/L_{MO}$, z_{01} , z_{02} et la hauteur de la cellule de rejet Z cel pour la variable d'intérêt C_{max} , à 3 distances de l'origine : y = 240, 850 et 2100 m. La méthode de Morris est ici appliquée avec r = 8.









(c)

FIG. G.8 : Idem Fig. G.7 avec r = 14