



PHENOMENOLOGIE ET MODELISATION DES TRANSFERTS DE POLLUANTS DANS L'ATMOSPHERE

Franck JOURDAIN
(franck.jourdain@cea.fr)

CEA Cadarache
Département de Technologie Nucléaire
Service de Modélisation des Transferts et de Mesures Nucléaires
Laboratoire de Modélisation des Transferts dans l'Environnement



PROBLEMATIQUE ET CONTEXTE REGLEMENTAIRE

*Qualité de l'air - Effet de serre - Trou d'ozone - Accidents chimiques ou nucléaires
Ces phénomènes ont en commun d'être liés à la composition chimique de l'atmosphère et
à la dispersion atmosphérique de polluants*



Problématique ancienne

Lao Tseu (VI ème siècle avant J-C)

« L'argent est le nerf de la guerre, et l'O2 est le nerf de la vie »

Hippocrate (IV et V ème siècle avant J-C)

traité « des Airs, des Eaux et des Lieux » : l'air est le vecteur unique des maladies

Moses Maimonides (1135 - 1204)

description documentée de la qualité de l'air

John Evelyn (1620 - 1706)

1661 : premier grand texte spécifiquement consacré à la pollution atmosphérique à Londres

D'un contexte règlementaire vers la modélisation

Loi du 30 décembre 1996 sur l'air et l'utilisation rationnelle de l'énergie

Article 2 : définition d'une pollution atmosphérique

Définition d'indices règlementaires pour préserver la qualité de l'air

Directive européenne 96/62 du 27 septembre 1996

Article 6 : évaluation de la qualité de l'air

Les mesures environnementales prévues peuvent être complétées par des techniques de modélisation pour fournir une information adéquate sur la qualité de l'air ambiant



La modélisation peut être utilisée à titre prédictif mais aussi comme outil de représentation d'épisodes de pollution

LES MECANISMES DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE

La dispersion atmosphérique caractérise le devenir dans le temps et l'espace des espèces relâchées dans l'atmosphère



Principales conditions de la dispersion de polluants dans l'atmosphère

Les conditions de rejet

nature des espèces rejetées

mode d'émission (rejets instantanés vs continus, ponctuel vs étendu)

Les conditions météorologiques

structure verticale de l'atmosphère

champ de vent, de température, etc.

L'environnement

nature du sol (rugosité)

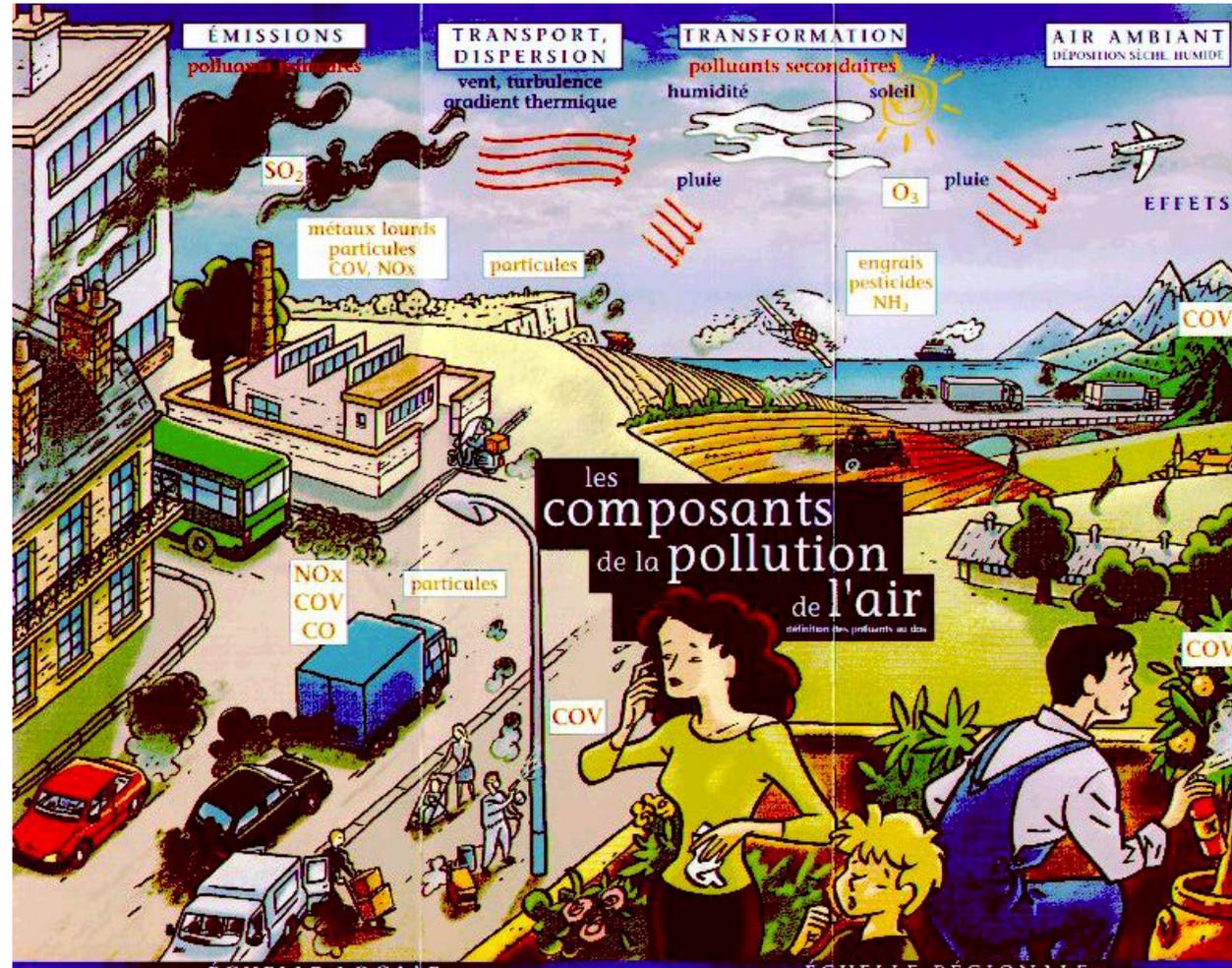
la présence d'obstacles (bâtiments)

l'orographie (prise en compte des effets de relief)



LES MECANISMES DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE

Les principales espèces considérées dans les processus de pollution atmosphérique



Source : Ministère en charge de l'environnement



Les radioéléments :
 Origine naturelle (Rn), Essais nucléaires (Sr)
 Accidents (I, Cs), Fonctionnement des centrales civiles (Kr)

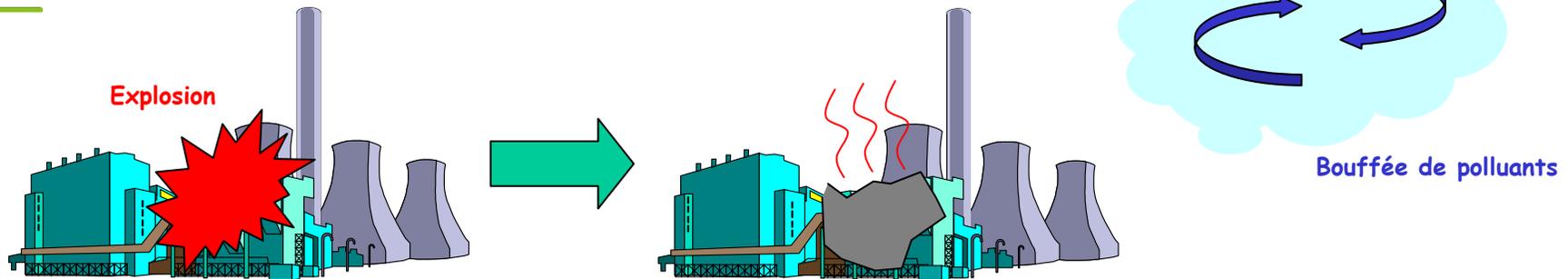
Les gaz à effet de serre :
 CO_2 , CH_4 , N_2O ...

LES MECANISMES DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE

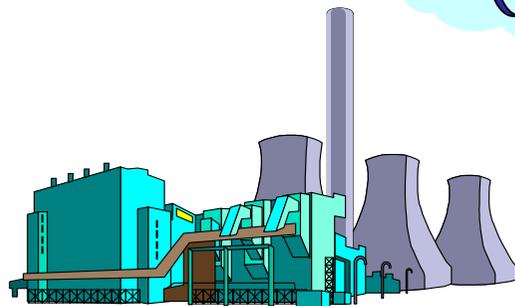
Les principaux modes d'émission de polluants atmosphériques



Les rejets instantanés :
relâchement immédiat de la totalité d'un polluant
notion de bouffée de polluant



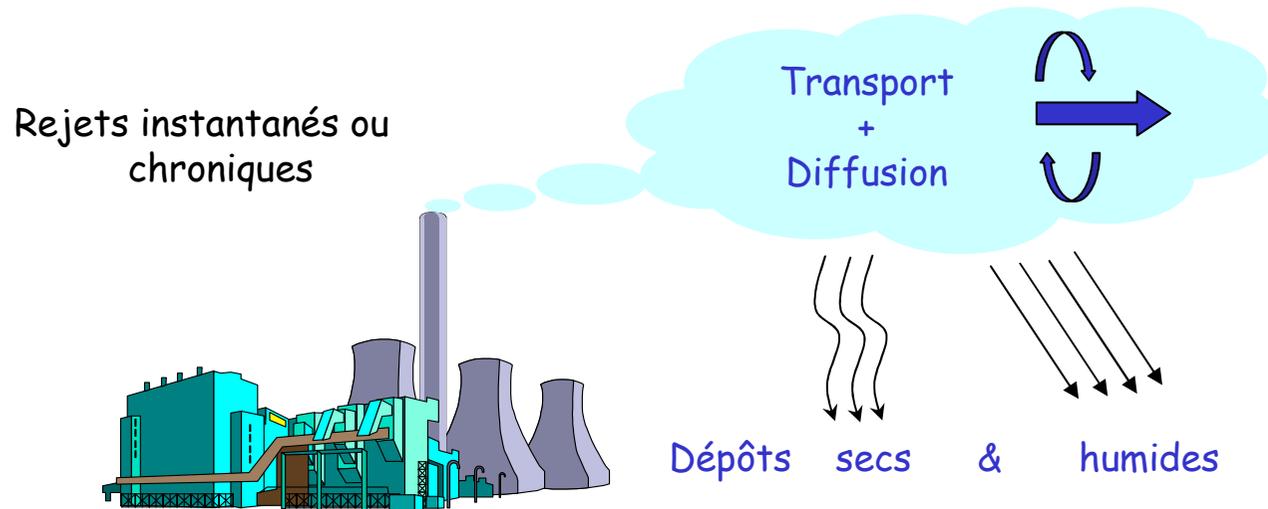
Les rejets continus :
relâchement de polluants lié au procédé de l'installation (rejets de routine)
fuite continue (conduite, cuve de stockage, etc.)



Selon la durée des rejets (ques heures ou annuels),
Le rejet peut être traité comme une succession de
bouffées unitaires ou un véritable panache continu

LES MECANISMES DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE

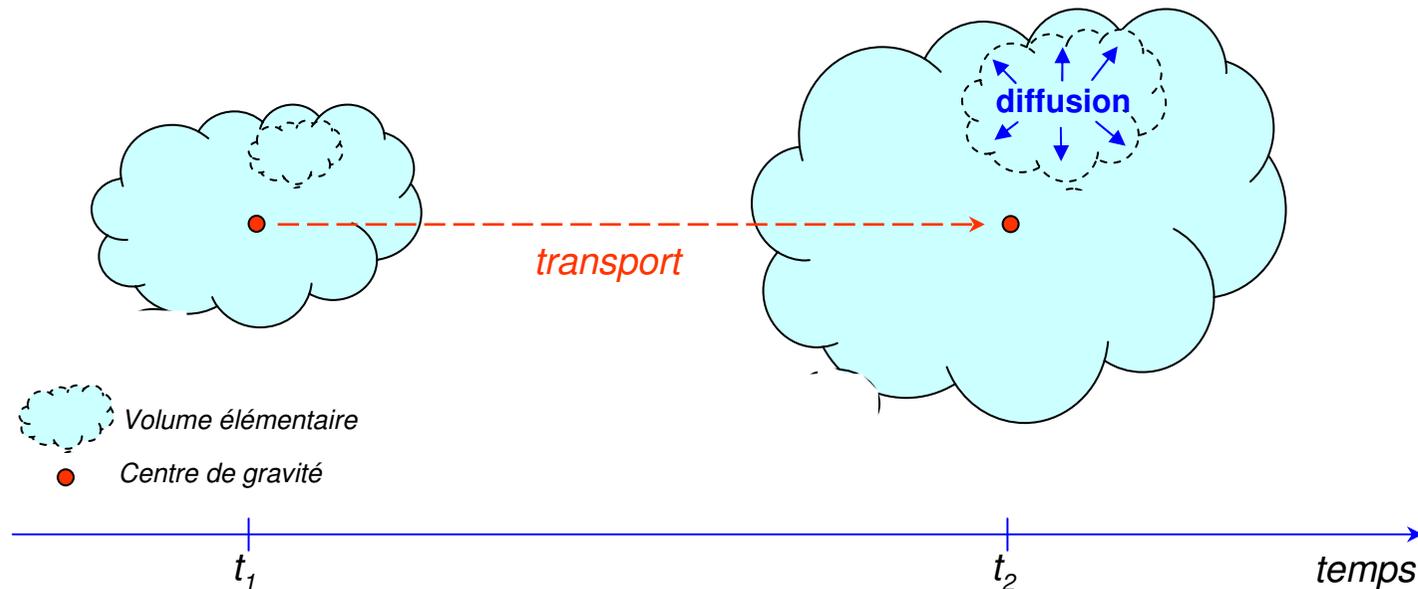
Un polluant rejeté dans l'atmosphère est soumis aux différents mécanismes qui régissent les écoulements de l'atmosphère. Les 3 processus principaux sont :
Transport – Diffusion – Dépôt au sol



La dispersion d'une pollution par voie atmosphérique est très dépendante des conditions météorologiques
Les paramètres météorologiques interviennent au sein même des 3 processus de la dispersion atmosphérique



LES MECANISMES DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE



Le transport :

→ déplacement essentiellement horizontal par le champ de vent des polluants les plus stables sur de longues distances

La diffusion :

→ brassage tridimensionnel par la turbulence de l'atmosphère associée à la couche limite atmosphérique (CLA)

→ deux origines pour la turbulence dans la CLA:

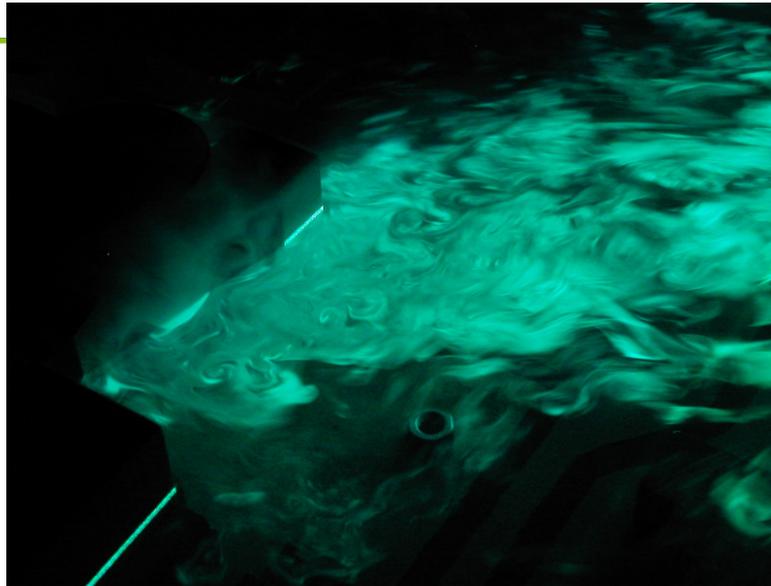
- mécanique (cisaillement du vent en contact avec le sol)
- thermique (gradient vertical de température)



LA TURBULENCE ATMOSPHERIQUE

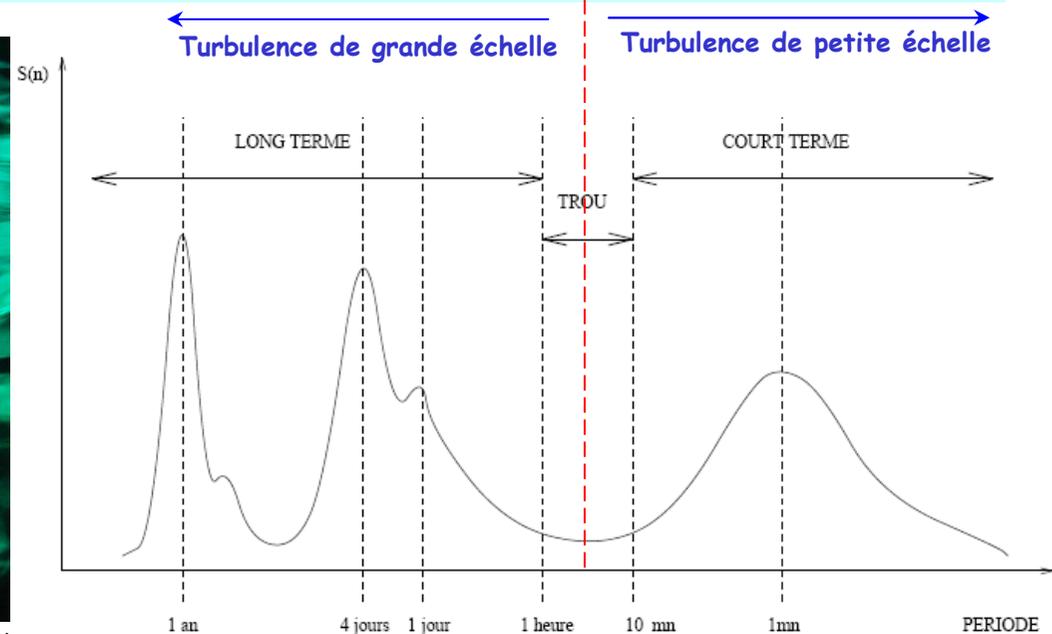
La turbulence atmosphérique peut être illustrée par l'existence de « tourbillons » au sein d'un écoulement.

La turbulence est ainsi constituée de mouvements parfaitement aléatoires balayant un large spectre d'échelles spatiales et temporelles.



d'après MEJEAN P. (2003)

Visualisation de la turbulence sur une maquette en soufflerie sous le vent d'un bâtiment



Caractérisation statistique de la turbulence par la représentation spectrale de l'énergie des « tourbillons »
Spectre de Van der Hoven - 1957

La **turbulence de grande échelle** est à relier aux conditions météorologiques de l'échelle synoptique (échelle planétaire)

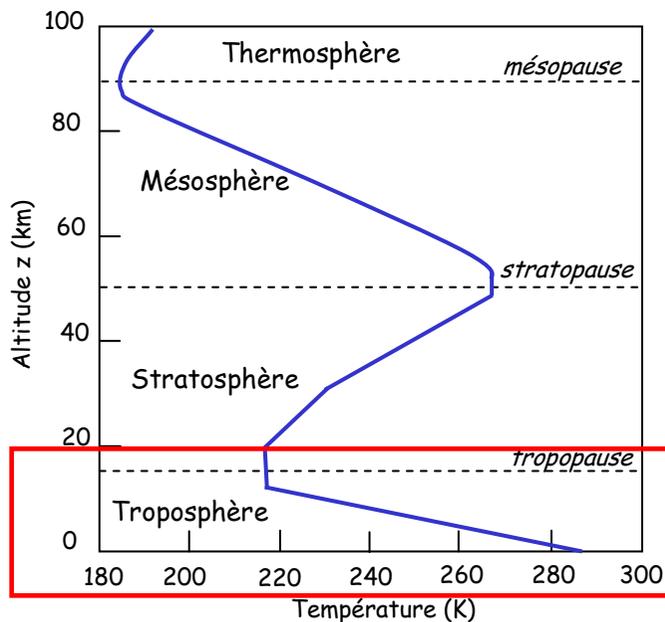
La **turbulence de petite échelle** est influencée par différents facteurs comme les conditions météorologiques, le gradient thermique vertical, la vitesse moyenne du vent, la rugosité des sols (végétation, bâtiments), etc.



LA STRUCTURE DE L'ATMOSPHERE

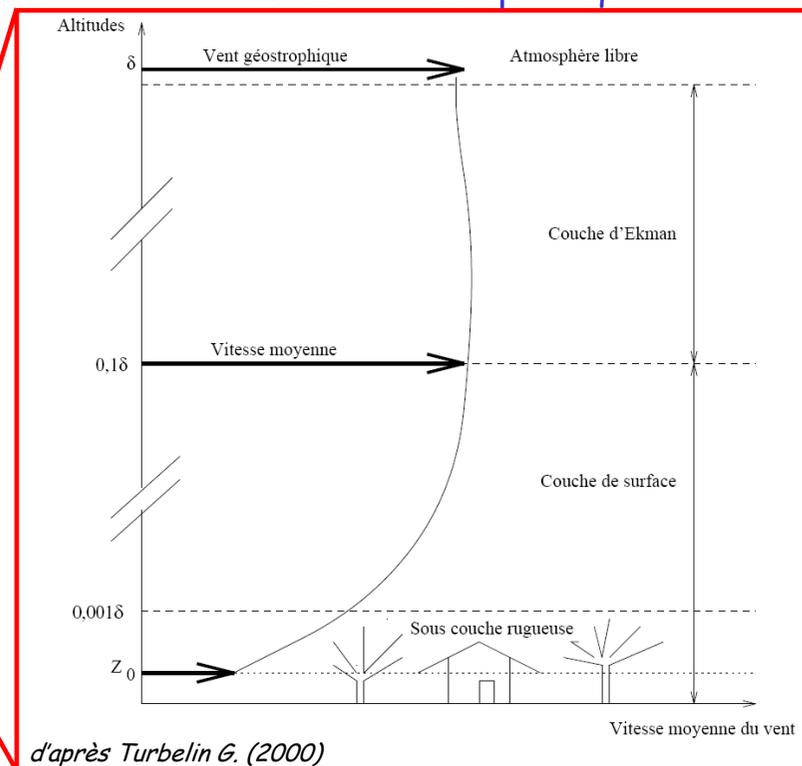


Profil vertical de température



Pour la majorité des risques de pollutions industrielles le suivi du nuage de pollution se fait dans les basses couches de la troposphère

→ **Couche Limite Atmosphérique**



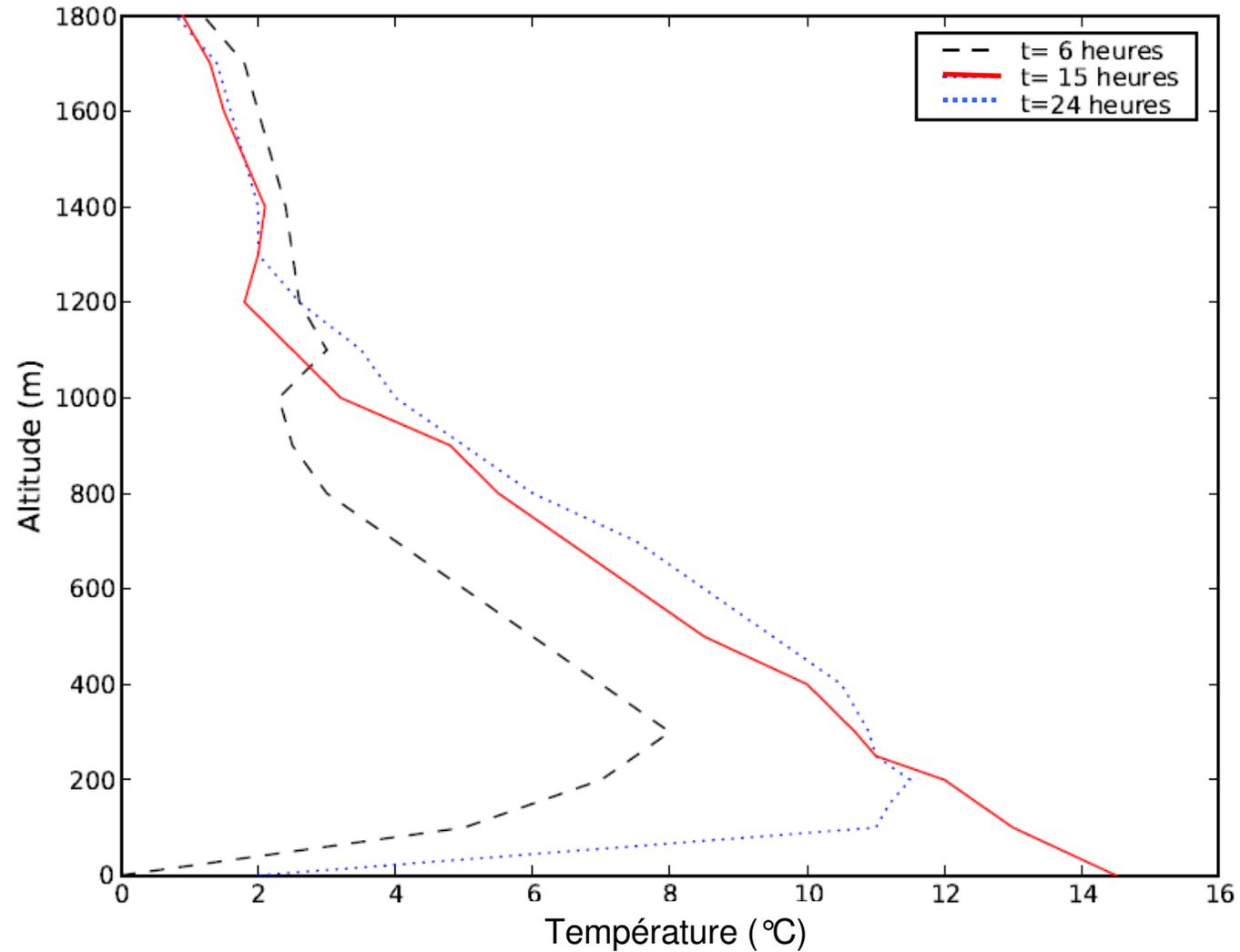
La CLA est définie comme la partie de la Troposphère qui interagit directement avec le sol :

- Cycle diurne
- Perturbation du champ de vitesse
- Hauteur δ fonction de la vitesse du vent, rugosité des sols, ensoleillement (~100 m à ~km)



CYCLE DIURNE

Evolution typique du profil de température au cours d'une journée



d'après Sportisse B. (CEREA)

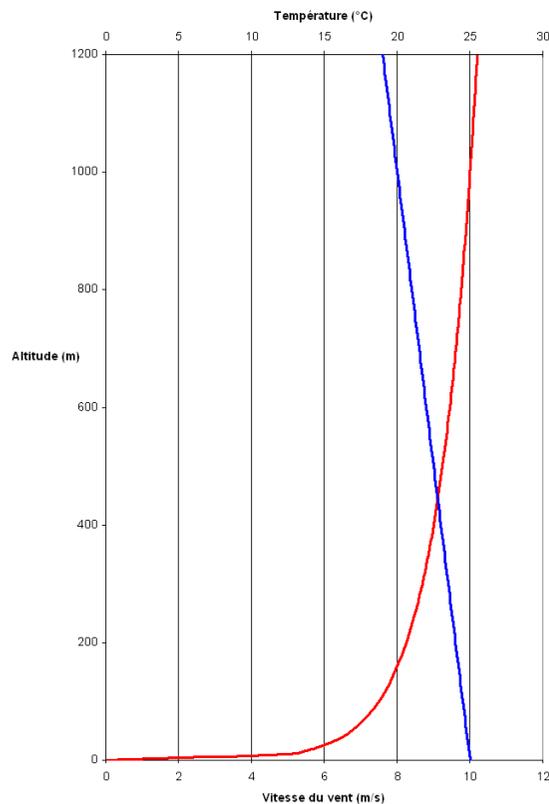


LES ETATS DE LA COUCHE LIMITE ATMOSPHERIQUE

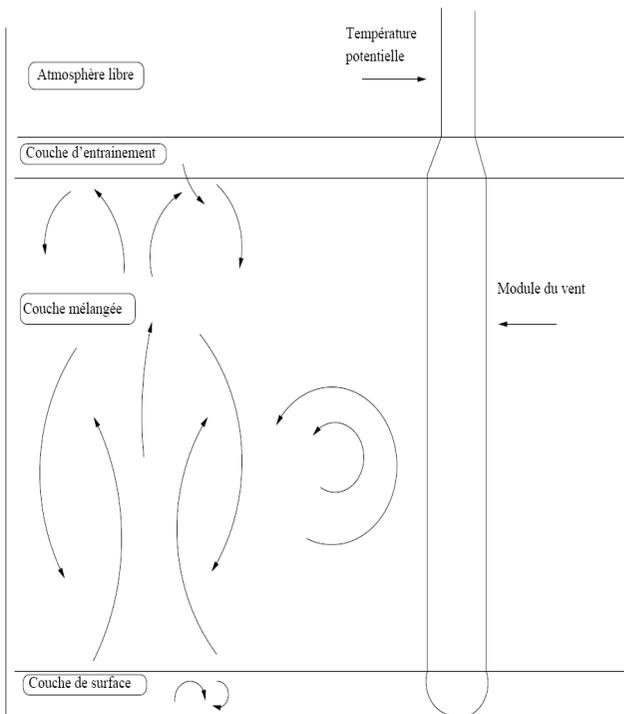
Selon le rapport entre effets mécaniques et thermiques on peut schématiquement décrire trois états de la couche limite atmosphérique :
L'atmosphère est dite instable, neutre ou stable selon que le mouvement d'une particule d'air soumise à une impulsion sur la verticale se voit amplifié ou amorti



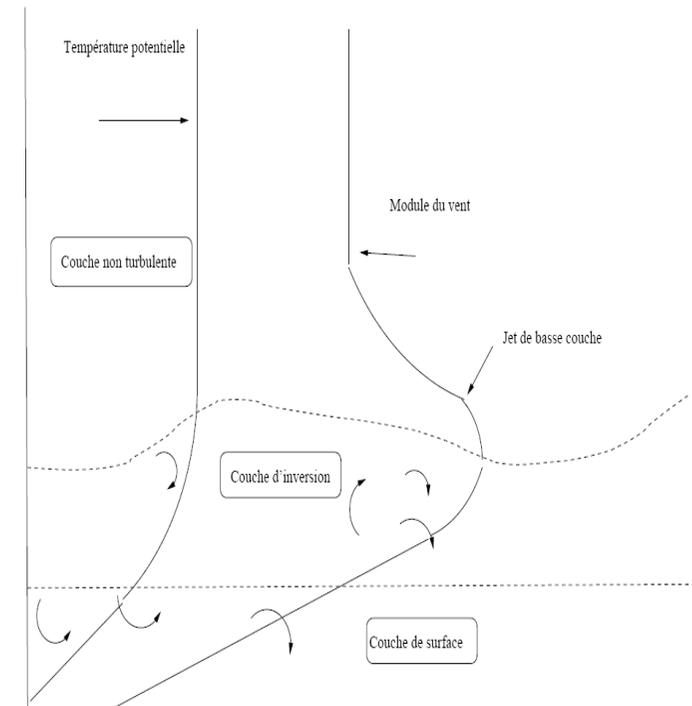
Etat Neutre



Etat Instable



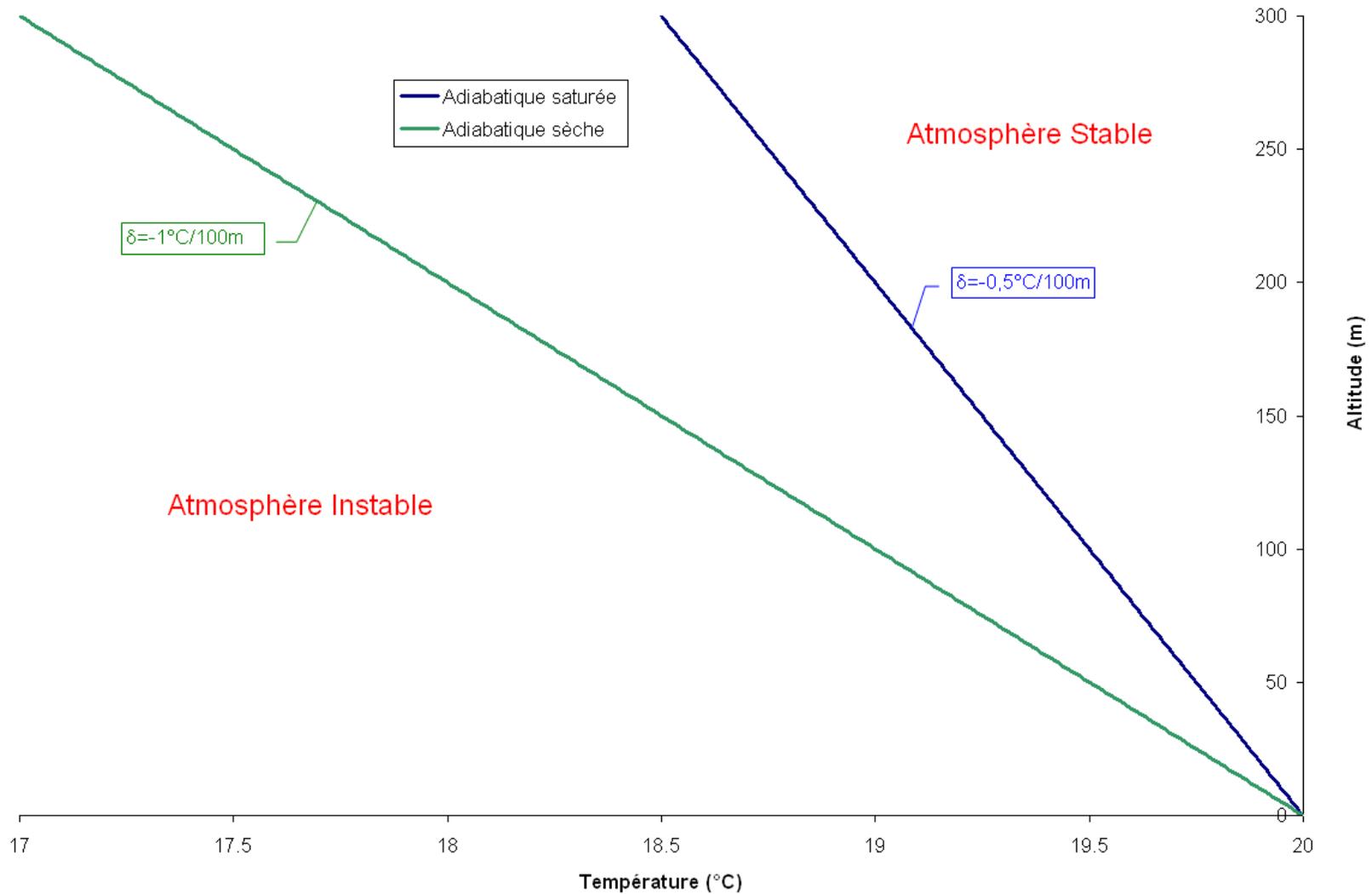
Etat Stable



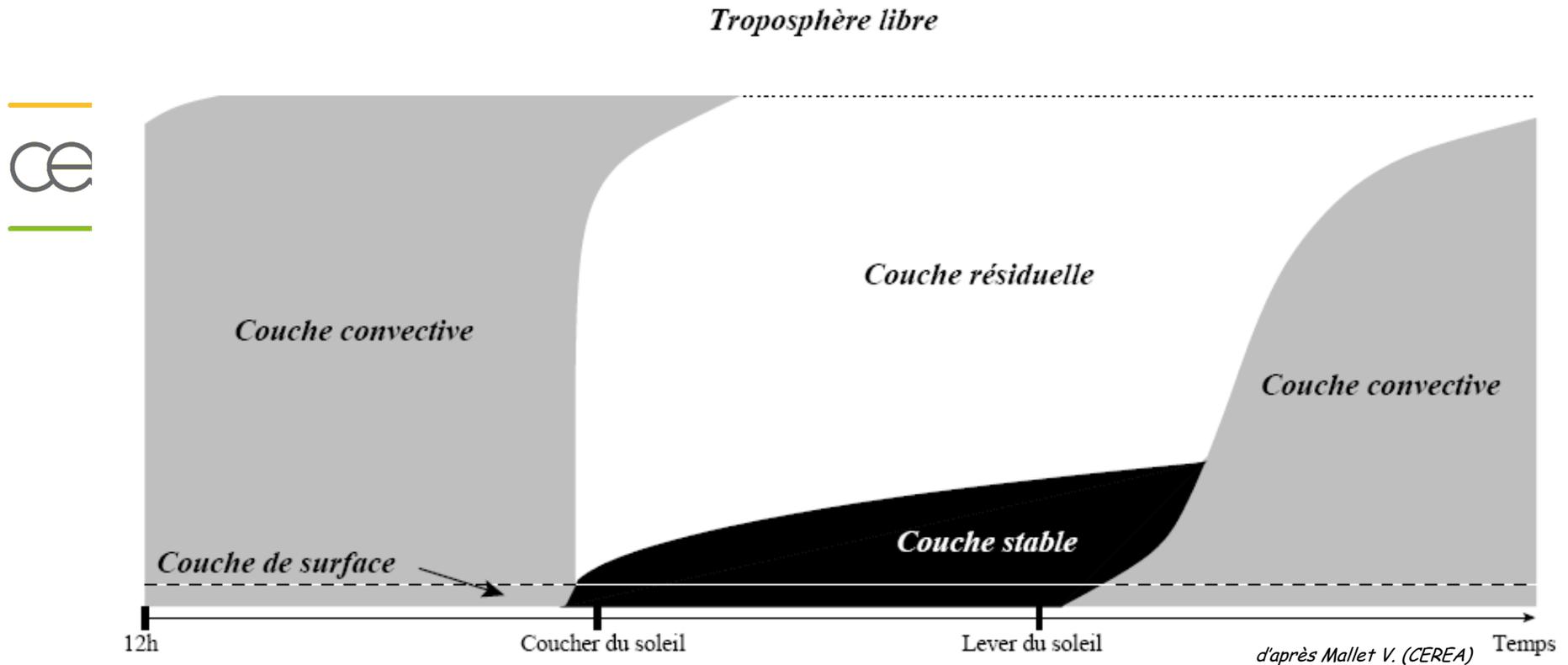
d'après Sportisse B. (CEREA)



LES ETATS DE LA COUCHE LIMITE ATMOSPHERIQUE



LES ETATS DE LA COUCHE LIMITE ATMOSPHERIQUE



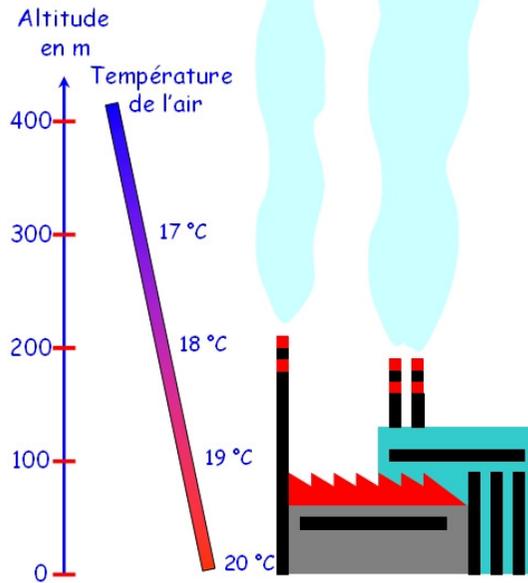
Au lever du Soleil, le sol est réchauffé → les masses d'air chaudes ascendantes vont homogénéiser la CLA : **couche de mélange** ou **couche convective**.

Au cours de la journée la couche convective va croître.

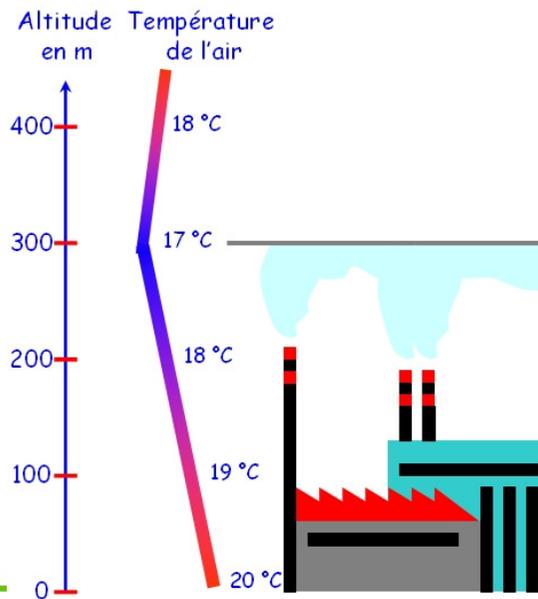
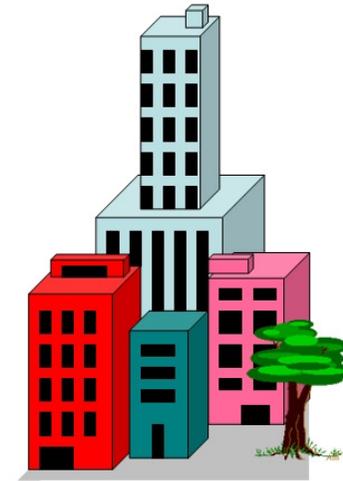
La nuit, le sol se refroidit plus vite que l'atmosphère → une inversion de température se développe en surface : **couche stable**.

Au dessus de cette couche, la couche convective de la journée devient une **couche résiduelle**, en générale neutre, qui contient des polluants mélangés de la veille.

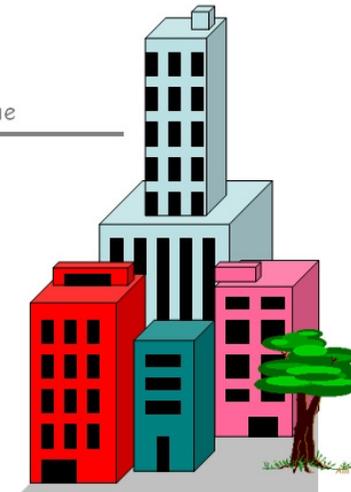
LES ETATS DE LA COUCHE LIMITE ATMOSPHERIQUE



Atmosphère Instable
Couche convective



Atmosphère Stable
Couche stable



INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT SUR LA DISPERSION

L'environnement influence également la dispersion de polluants dans l'atmosphère. On distingue des perturbations mécaniques liées à la nature des sols, la présence d'obstacles ou la topographie des perturbations liées à de fortes discontinuités du sol conduisant à des effets thermiques (brise de mer, brise de pente, etc.)



La rugosité

Influence de la nature des sols : **notion de rugosité aérodynamique**

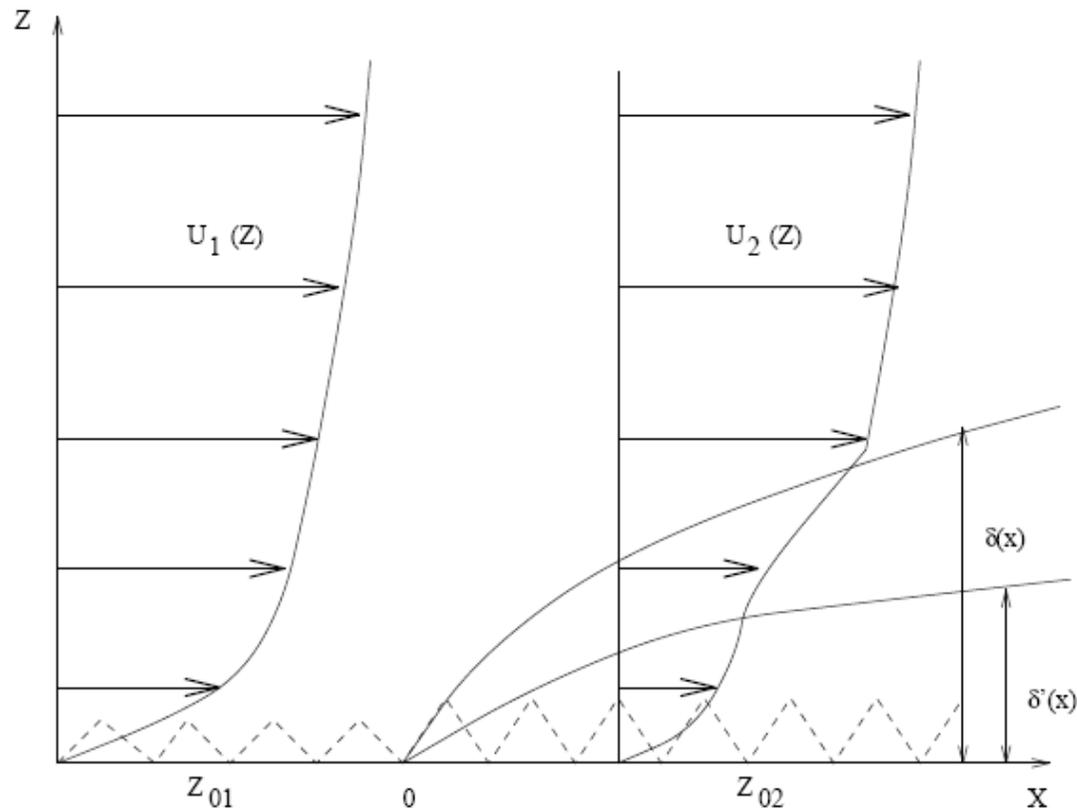
La longueur de rugosité, exprimée en mètre, caractérise l'influence globale de la sous-couche rugueuse (couche de surface) sur le profil de vent. On parle également de taille caractéristique des tourbillons au niveau du sol. Cette rugosité est corrélée à la hauteur des obstacles au sol.

Sites caractéristiques	Classes de rugosité	z_0 (m)
Grandes étendues d'eau (mer, océan, lac)	I	de 0,001 à 0,01
Rases campagnes, aéroports	II	de 0,01 à 0,10
Zones faiblement urbanisées, bocages	III	de 0,10 à 0,50
Zones urbanisées, industrielles ou forestières	IV	de 0,50 à 1,50
Centres des villes	V	de 1,50 à 2,50

d'après Turbelin G. (2000)



INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT SUR LA DISPERSION



Effet d'un changement de rugosité sur le champ de vent



$\delta(x)$: couche limite interne affectée par la discontinuité
 $\delta'(x)$: sous couche limité interne, l'écoulement est en équilibre vis-à-vis des nouvelles conditions de sol

INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT SUR LA DISPERSION

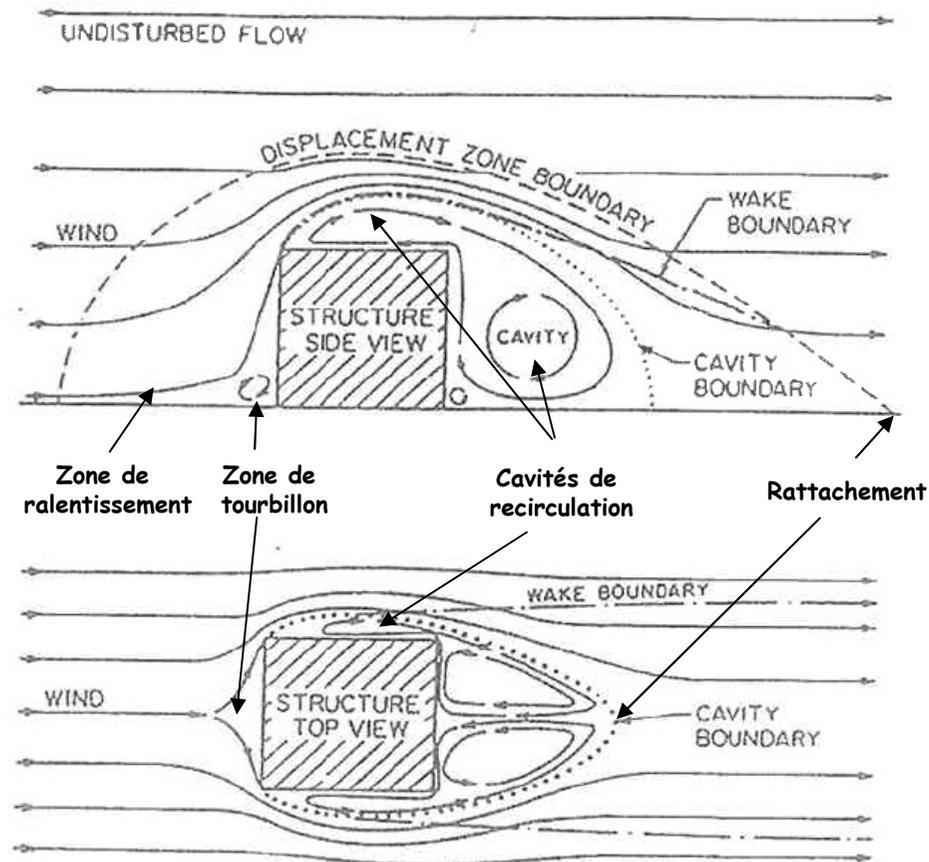
La présence d'obstacles



L'écoulement autour d'un bâtiment ou d'un groupe de bâtiments est un phénomène très complexe. La présence d'un obstacle modifie de manière importante le champ de vitesses à l'aval ET à l'amont de l'obstacle.

En amont :

- Accroissement des concentrations
- Augmentation du temps d'exposition
- Présence de zones de recirculation



En aval :

- Décroissement des concentrations
- Augmentation du temps d'exposition
- Diminution de la largeur du panache
- Homogénéité verticale des concentrations

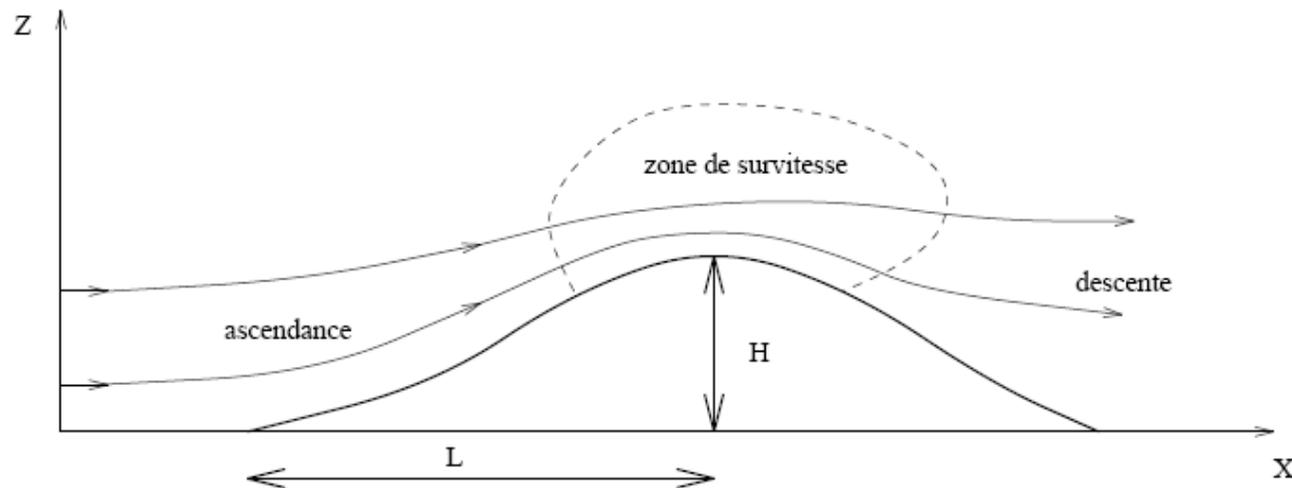


INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT SUR LA DISPERSION

La topographie (l'orographie)



Les reliefs accidentés (vallées, falaises, collines etc.) canalisent les écoulements atmosphériques modifiant de fait ses caractéristiques physiques (grandeurs moyennes et turbulentes). L'importance de ces modifications est liée à la taille et à la forme de l'obstacle.



En atmosphère instable ou neutre (cf. schéma ci-dessus) :

Le panache suit les variations du relief → en tout point de l'axe du panache la distance verticale au sol est constante et égale à la hauteur effective du rejet.

En atmosphère stable :

Le panache reste approximativement dans le même plan horizontal et contourne le relief si la hauteur de celui-ci est supérieure à la hauteur du rejet.



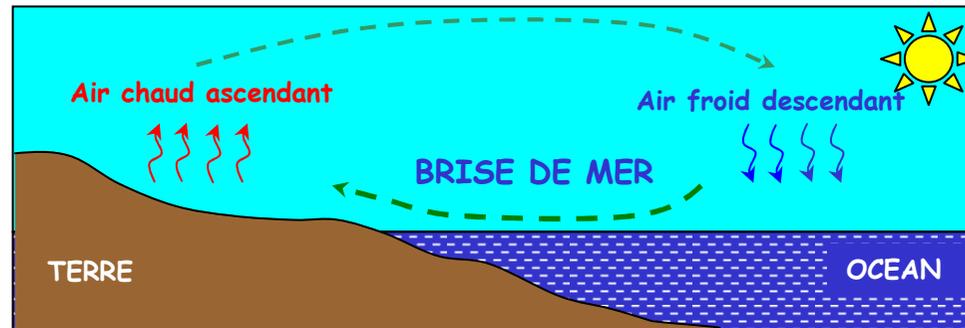
INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT SUR LA DISPERSION

Les effets thermiques



On parle généralement de brise thermique qui se définit comme un vent à caractère local ou régional et à alternance diurne, qui s'établit à proximité des lacs, mers, montagnes, etc., et qui résulte des différences de température dans les basses couches de l'atmosphère.

Brise de mer / de terre



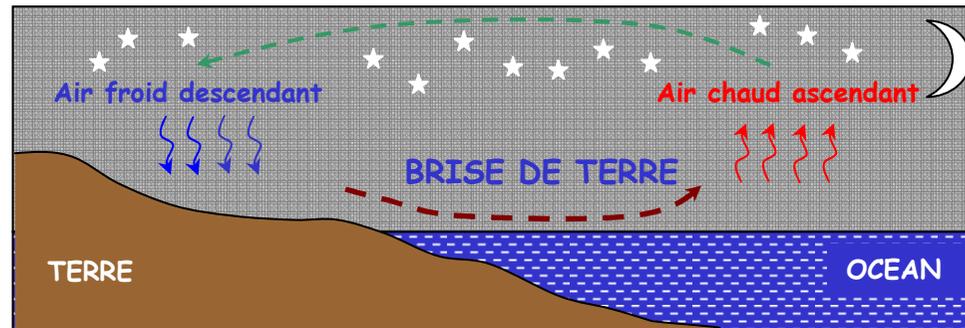
INFLUENCE DE L'ENVIRONNEMENT SUR LA DISPERSION

Les effets thermiques

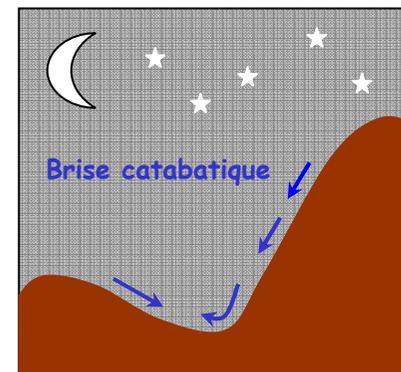
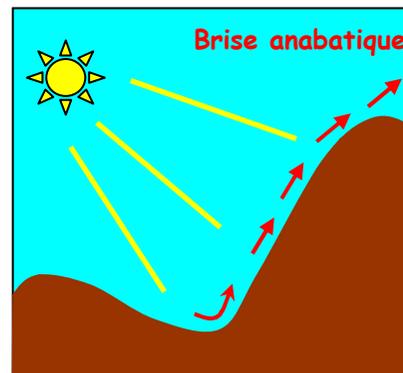
On parle généralement de brise thermique qui se définit comme un vent à caractère local ou régional et à alternance diurne, qui s'établit à proximité des lacs, mers, montagnes, etc., et qui résulte des différences de température dans les basses couches de l'atmosphère.



Brise de mer / de terre



Brise de pente



MODELISATION DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE

Les effets d'une pollution atmosphérique peuvent être perçus à plusieurs échelles, allant d'un îlot d'habitations (quartier ou installation), d'un site industrielle, d'une ville, d'une région à un continent.



Deux types de méthodes de résolution de la dispersion atmosphérique à ces échelles :

- Méthodes numériques
- Méthodes expérimentales (support indispensable aux méthodes numériques)

L'étude de la dispersion atmosphérique de polluants doit permettre de connaître à tout instant et en tout point les concentrations des espèces relâchées dans l'atmosphère.



MODELISATION DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE

Les effets d'une pollution atmosphérique peuvent être perçus à plusieurs échelles, allant d'un îlot d'habitations (quartier ou installation), d'un site industrielle, d'une ville, d'une région à un continent.



Deux types de méthodes de résolution de la dispersion atmosphérique à ces échelles :

- Méthodes numériques
- Méthodes expérimentales (support indispensable aux méthodes numériques)

L'étude de la dispersion atmosphérique de polluants doit permettre de connaître à tout instant et en tout point les concentrations des espèces relâchées dans l'atmosphère.

Le processus de dispersion d'un contaminant passif (de concentration C) émis dans l'atmosphère à partir d'une source S est décrit par l'équation bilan de conservation de C en négligeant la diffusion moléculaire

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{C} \bar{U}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial (-\overline{C' u'_i})}{\partial x_i} + S$$

Taux d'accumulation

Flux convectif
moyen

Flux diffusif
turbulent

Source



MODELISATION DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE

Les outils de modélisation numérique tentent de reproduire les différents mécanismes de la dispersion atmosphérique aux différentes échelles



Les **outils ou modèles** de dispersion atmosphérique peuvent être classés selon 2 catégories :

- les modèles statistiques, incluant des équations diagnostiques ou des équations empiriques pour calculer les grandeurs physiques liées à la dispersion atmosphérique (vent, turbulence, etc.)
- les modèles déterministes, basés sur la description des mécanismes physiques de la dispersion atmosphérique

Les 2 grandes **méthodes** d'approche de la dispersion de polluants atmosphériques :

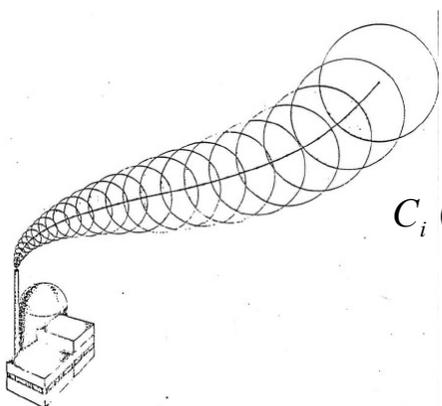
- la méthode Eulérienne consistant à étudier la variation de grandeurs physiques (concentration par exemple) dans une grille à plusieurs dimensions dans un référentiel fixe
- la méthode Lagrangienne consistant à étudier les variations de concentrations en suivant les particules fluides dans leur mouvement



Les outils ou modèles peuvent intégrer l'une, l'autre ou les deux méthodes d'approche de la dispersion de polluants dans l'atmosphère

Les modèles dits « Gaussiens » (modèles statistique - méthode eulérienne/lagrangienne)

Ces modèles sont basés sur l'équation de transport-diffusion d'un polluant utilisée dans des conditions simplificatrices pour lesquelles il existe une solution analytique sous forme de gaussienne



Le processus de rejet de polluants dans l'atmosphère est discrétisé en une succession de bouffées atmosphériques.

$$C_i(x, y, z, t) = \frac{Q_i Fe}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left[-\frac{(x - x_0 - \bar{U}t_i)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z - z_0)^2}{2\sigma_z^2} \right]$$

Quantité de polluant dans la bouffée i (dépôt, décroissance, etc.) Appauvrissement

Ecarts-types de la distribution gaussienne de Q (Doury, Pasquill, Gifford)

Limitations de ces modèles :

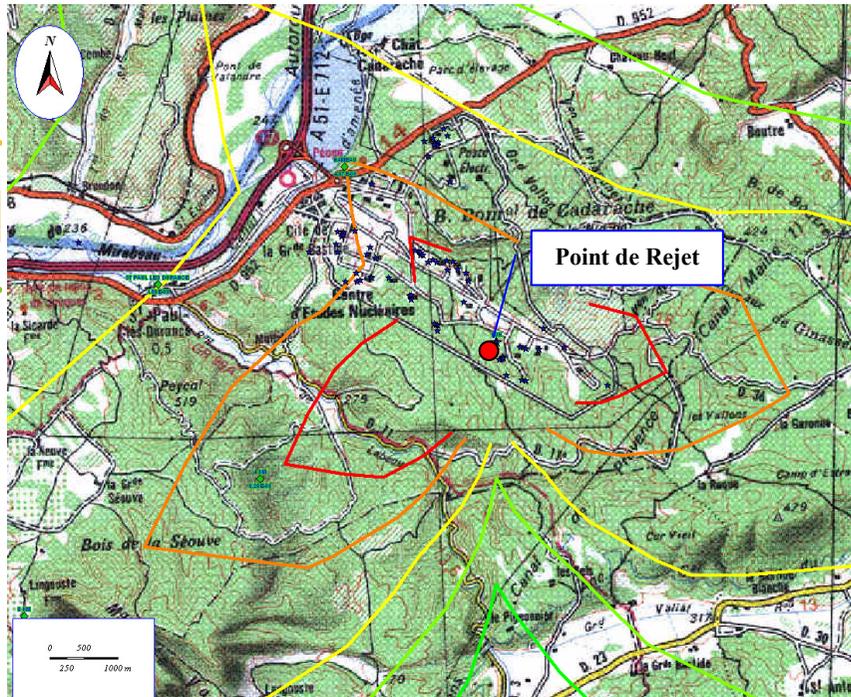
- polluant ayant les mêmes propriétés que l'air (densité et température)
- la diffusion moléculaire étant négligée $\rightarrow V_{\text{vent}} > 1$ à 2 m/s
- terrain homogène et plat \rightarrow pas de calcul en champ proche de la source
- étude de la dispersion de polluant sur des distances de l'ordre de la dizaine de kilomètres

Avantages et domaines d'utilisation :

- simplicité d'utilisation, données d'entrée simples, rapidité d'exécution
- études de type « sûreté »
- gestion des situations d'urgence \rightarrow outil puissant d'aide à la décision



Les modèles Gaussiens de première génération



Rejets Chroniques :

- Données météorologiques sous forme de roses des vents
- Activité volumique instantanée moyenne
- Impact des rejets des installations en fonctionnement normal

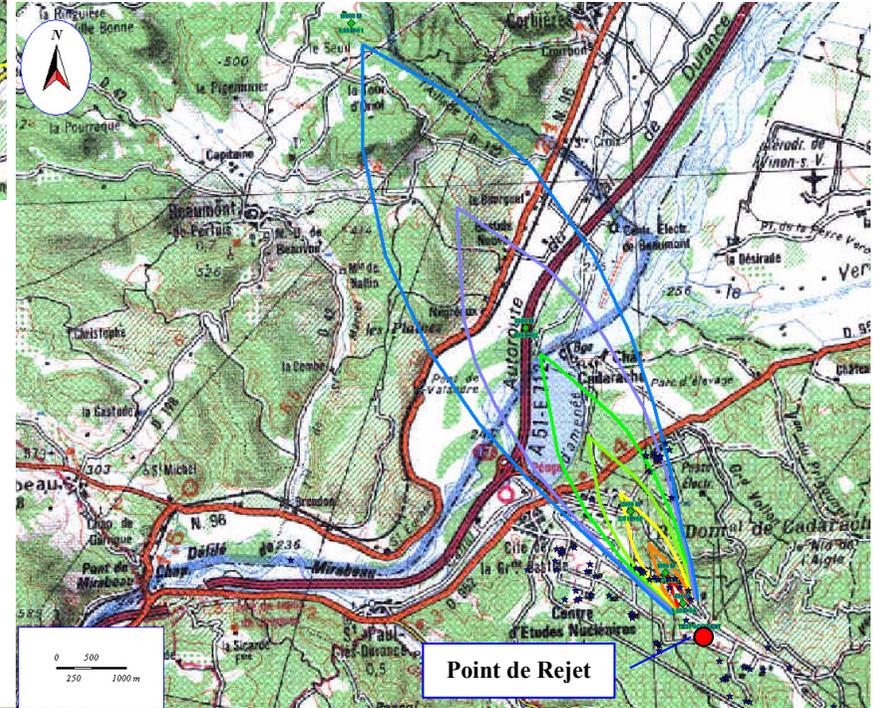
Rejets Accidentels :



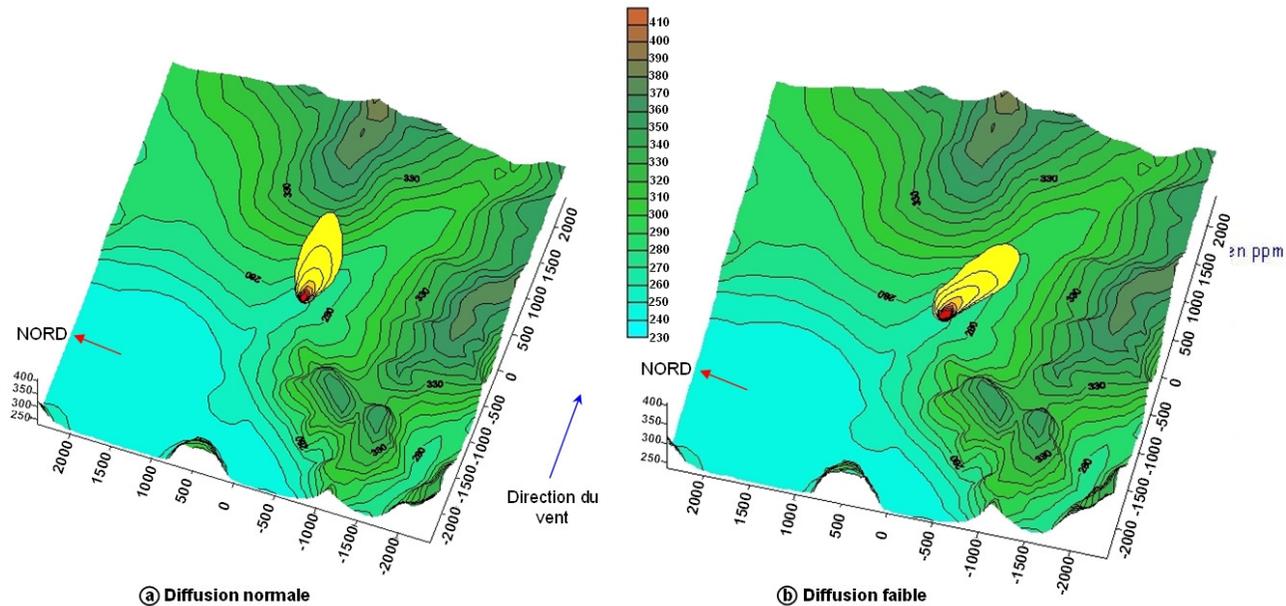
- Données météorologiques associées à la période du rejet
- Activité volumique intégrée sur la durée du rejet
- Impact des rejets des installations pour des situations accidentelles - gestion des situations de crise



Plateforme CERES du CEA (codes GASCON ET MITHRA)

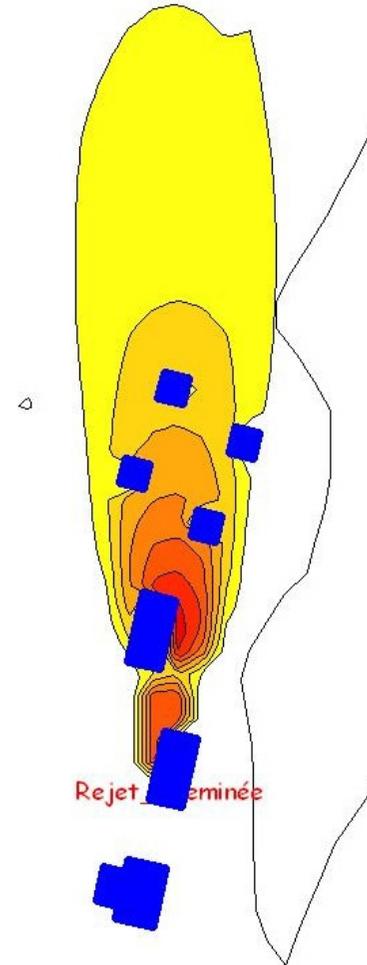


Les modèles Gaussiens de seconde génération



ADMS 4 - CERC (Numtech pour la France)

- Prise en compte notamment de l'orographie et des bâtiments
- En haut : forte influence de l'orographie sur la dispersion de polluants en conditions peu diffusives
- A droite : influence des bâtiments sur la répartition des concentrations en aval du rejet



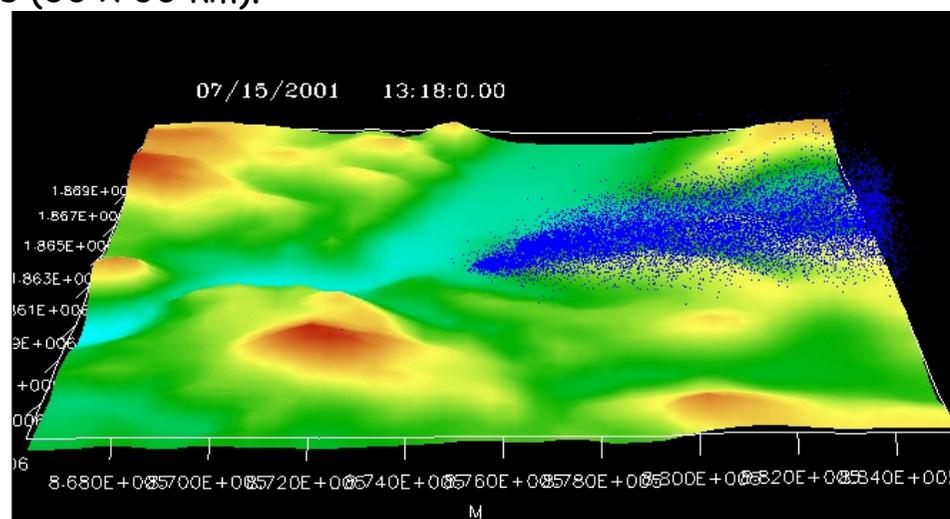
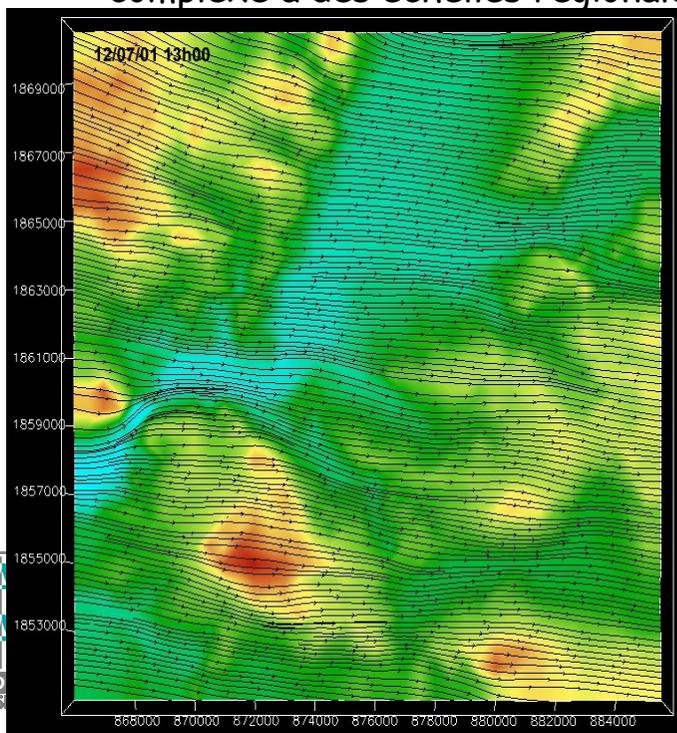
Les modèles mixtes : approche Eulérienne et Lagrangienne

Ces modèles déterministes utilisent par exemple une approche eulérienne pour la génération des champs 3D météorologiques et une approche lagrangienne pour le calcul de la dispersion atmosphérique.



Ces modèles décrivent par conséquent les phénomènes atmosphériques plus finement que les codes gaussiens : possibilité de définir une variabilité temporelle ET spatiale des conditions météorologiques.

Ces modèles sont utilisés pour l'étude de chroniques de rejets sur des sites à orographie complexe à des échelles régionales (30 x 30 km).



MINERVE - SPRAY (ARIA)

- Minerve : préprocesseur météorologique (eulérien)
- Spray : dispersion atmosphérique (lagrangien)
- Suivi de particules (bleues) caractéristiques



Les modèles numériques de dynamique des fluides (CFD en anglais)

Ces modèles déterministes procèdent à la résolution du champ de vitesse local et instantané du mélange air-polluant(s), et éventuellement du champ de température associé si besoin (cas de la thermoconduction, chimie-transport, etc.).



Ces modèles font appel aux équations de Navier Stokes (ENS) construites dans le cadre de la mécanique des milieux continus.

Les ENS sont complétées par autant d'équation de transport qu'il y a d'espèces à disperser + une équation pour la température ou l'enthalpie du mélange.

Ces modèles résolvent des équations statistiquement moyennées (équations de Reynolds), introduisant de nouvelles variables → besoin de nouvelles équations → introduction de modèles de turbulence pour fermer le problème.

Domaines d'utilisation de ces modèles :

- mise en évidence de phénomènes locaux
- dispersion autour des bâtis
- étude de la dispersion de polluant à l'échelle d'un bâtiment jusqu'à un petit site industriel (1 à 2 km)

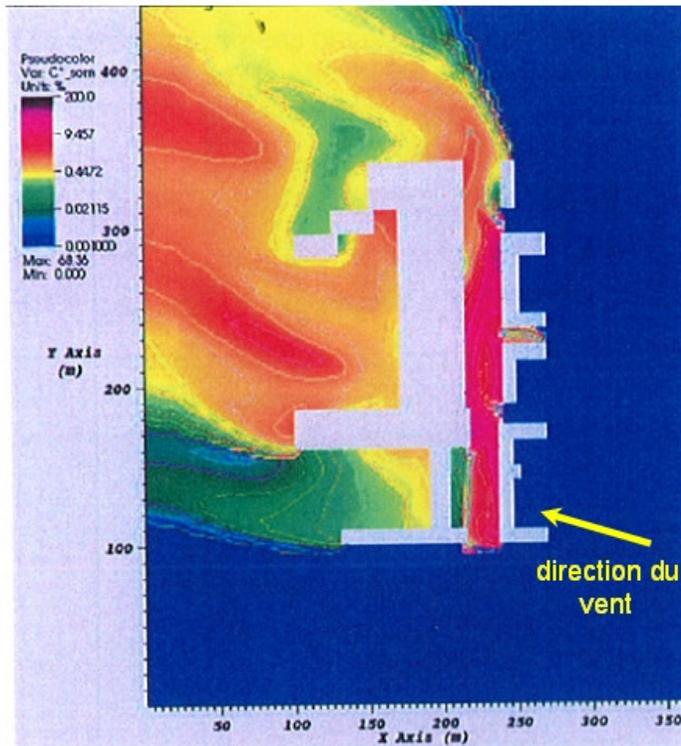
Limitations de ces modèles :

- temps de mise en forme des données d'entrée important
- temps de calcul important : de qqes heures à plusieurs jours
- difficulté de reconstruction des champs de vent en conditions aux limites à partir de données locales (stations météorologiques).

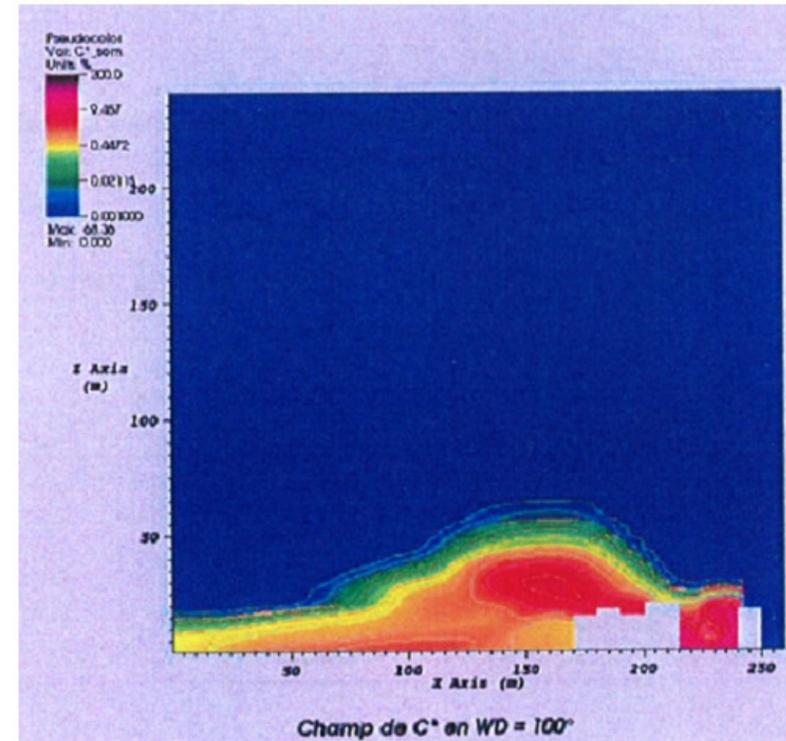


Modélisation en champ proche

A l'échelle d'une rue



Ⓐ Coupe dans le plan Oxy



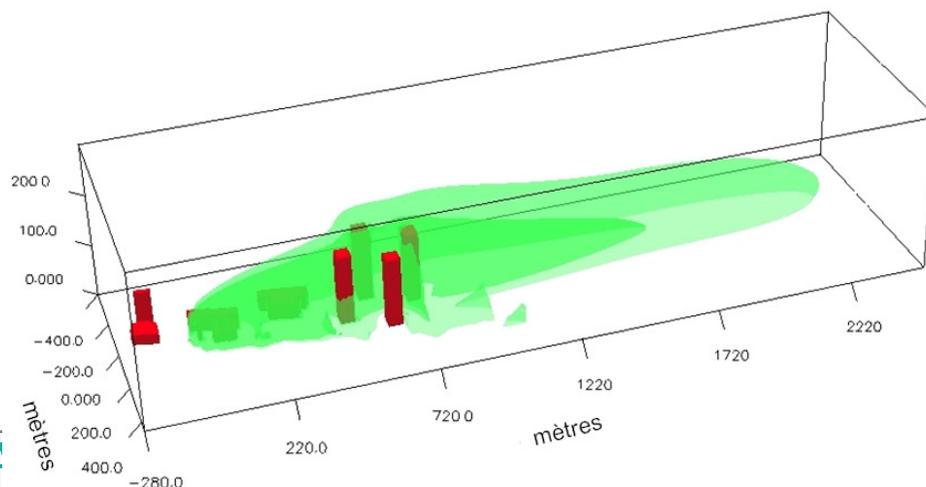
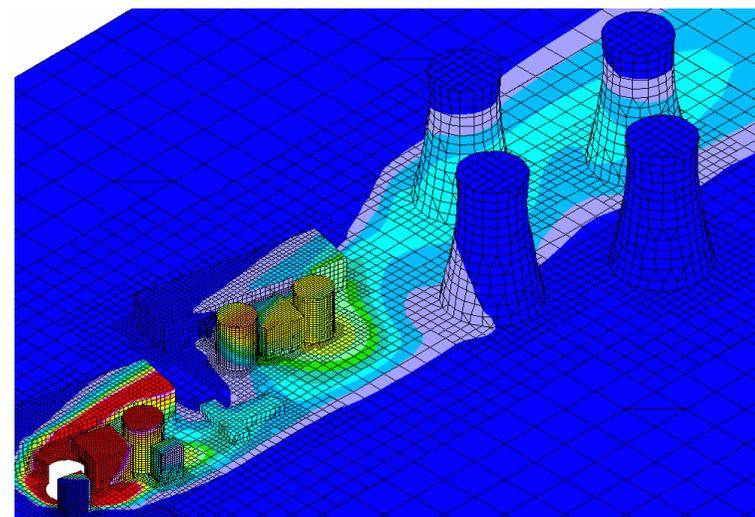
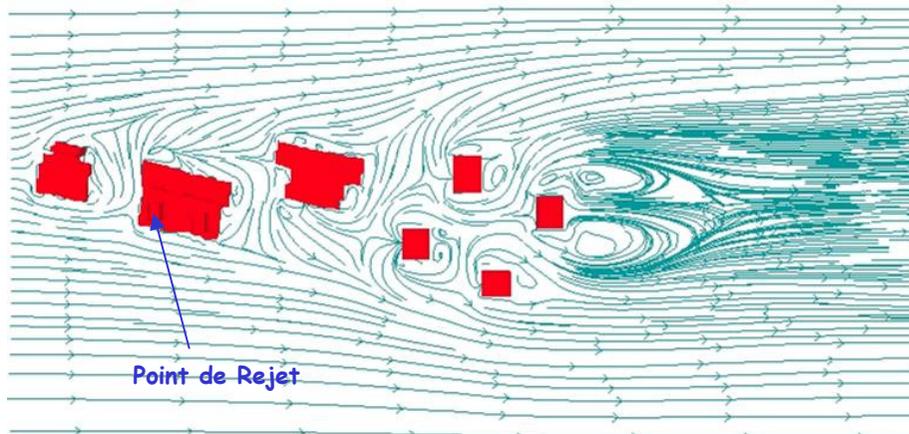
Ⓑ Coupe dans le plan Oxz



Dispersion des gaz d'échappement émis depuis les véhicules empruntant une rue à 4 voies de circulation.
Zones de forte hétérogénéité à prendre en compte dans les études de risque

Modélisation en champ proche

A l'échelle d'un site



ⓑ Dispersion d'un polluant au travers de l'enceinte d'un bâtiment

Modélisation de la dispersion de polluants à l'échelle d'un site

Mise en évidence des zones de récirculation → zone probable d'accumulation de polluants

Modélisation pouvant aboutir au dimensionnement d'un réseau de qualité de l'air par exemple



L'apport des modèles de CFD vs modèles gaussiens



Conclusions et Perspectives

La modélisation est aujourd'hui couramment utilisée pour l'évaluation de la dispersion de polluants dans l'environnement (air, sol, eau).

Elle s'avère être un outil précieux pour l'évaluation a priori des conséquences d'un éventuel rejet de polluants.



- Il existe une multitude d'outils permettant de modéliser la dispersion de polluants dans l'atmosphère
- Ces outils sont développés à des fins opérationnelles et/ou de recherche
- Il convient de les utiliser à bon escient en veillant à garder un esprit critique sur les résultats obtenus

Il apparaît clairement qu'il n'existe pas d'outil « idéal » permettant de traiter tous types de situations (rejets, environnement, météorologie, etc.).

Les orientations aujourd'hui :

- Combinaison de différents types de modélisation (couplage d'outils, plateforme de calcul)
- Codes Open Source

Merci pour votre attention !

