

RAPPORT D'ÉTUDE

04/07/2006

N° DRC – 06– 76476 MECO / Fto n°117

**MODÉLISATION :
DIFFUSION DANS L'ATMOSPHÈRE ET
IDENTIFICATION D'UNE SOURCE DE
LÉGIONELLES**

**MODÉLISATION :
DIFFUSION DANS L'ATMOSPHÈRE ET IDENTIFICATION
D'UNE SOURCE DE LÉGIONELLES**

Lieu et département de l'étude : Verneuil-en-Halatte, Oise

Client : Ministère de l'Ecologie et du Développement Durable.

Liste des personnes ayant participé à l'étude : Frédéric Tognet, Laurence Rouil, Jean-Marc Lacome

PRÉAMBULE

Le présent rapport a été établi sur la base des informations fournies à l'INERIS, des données (scientifiques ou techniques) disponibles et objectives et de la réglementation en vigueur.

La responsabilité de l'INERIS ne pourra être engagée si les informations qui lui ont été communiquées sont incomplètes ou erronées.

Les avis, recommandations, préconisations ou équivalent qui seraient portés par l'INERIS dans le cadre des prestations qui lui sont confiées, peuvent aider à la prise de décision. Etant donné la mission qui incombe à l'INERIS de par son décret de création, l'INERIS n'intervient pas dans la prise de décision proprement dite. La responsabilité de l'INERIS ne peut donc se substituer à celle du décideur.

Le destinataire utilisera les résultats inclus dans le présent rapport intégralement ou sinon de manière objective. Son utilisation sous forme d'extraits ou de notes de synthèse sera faite sous la seule et entière responsabilité du destinataire. Il en est de même pour toute modification qui y serait apportée.

L'INERIS dégage toute responsabilité pour chaque utilisation du rapport en dehors de la destination de la prestation.

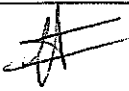
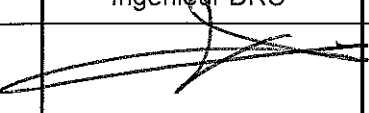
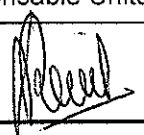
	Rédaction	Vérification	Approbation
NOM	TOGNET Frédéric LACOME Jean – Marc	TARNAUD Éric	ROUIL Laurence
Qualité	Ingénieur DRC/DRA	Ingénieur DRC	Responsable Unité MECO
Visa			

TABLE DES MATIÈRES

1. INTRODUCTION	5
2. MODÉLISATION DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE DES LÉGIONELLES	5
2.1 Grandeurs physiques décrivant l'émission de microorganismes (terme source) :	5
2.2 Grandeurs physiques décrivant l'état de l'atmosphère :	6
2.3 Les mécanismes physiques décrivant le transport et la microphysique des gouttelettes :	6
3. LE MODÈLE ACTUEL DE L'INERIS : ADMS 3.....	6
3.1 Le module « Plume visibility »	7
3.2 Le module de transport des microorganismes.....	8
3.2.1 Méthodologie de calcul de la concentration en microorganismes	8
3.2.2 Conditions d'utilisation et restrictions	9
3.3 Exemple de simulation d'un épisode de contamination par la légionelle avec ADMS avec et sans activation du module « Plume Visibility »	9
4. DÉVELOPPEMENTS REALISES EN 2005	13
5. DÉVELOPPEMENTS PREVUS ET REALISES EN 2006.....	14
5.1 Modélisation de la physique des gouttelettes	14
5.2 Modélisation inverse	14
5.3 Validation des modèles par la mesure	14
5.4 Recherche d'informations sur le terme source	15
5.5 Modèle Bactériologique	15
6. REFERENCES	15
7. LISTE DES ANNEXES	16
1. INTRODUCTION	2
1.1 Organisation du document.....	3
2. PRÉSENTATION DU PRÉPROCESSEUR MÉTÉOROLOGIQUE.....	4
2.1 Champ d'étude météorologiques	4
2.2 Formulation pour le champ de vent	5

2.3	Description de la turbulence	5
3.	LE MODULE D'EMISSION	6
3.1	Les sources ponctuelles	6
3.2	Les sources surfaciques (et par extension linéiques)	6
3.3	Les sources volumiques	6
3.4	Données d'entrée pour la description des sources	7
4.	PRÉSENTATION DES FORMULATIONS UTILISÉES POUR LE CHAMP PROCHE	8
4.1	Le module diagnostique	8
4.2	Le Module de jet	9
4.2.1	Rappels sur les jets di-phasiques	9
4.2.2	Présentation synthétique du modèle de jet de la DRA	10
4.2.3	Entrées et sorties du modèle de jet	11
4.3	Module de surhauteur de panache	12
4.4	Conclusion sur les paramétrisations du champ proche	12
5.	PRÉSENTATION DU MODULE DE TRANSITION CHAMP PROCHE / CHAMP LOINTAIN	13
5.1	Description	13
5.2	entrées et sorties du module de transition	14
6.	APPROCHE GAUSSIENNE POUR LE CHAMP LOINTAIN	15
6.1	Coefficients de dispersion	15
6.2	Paramétrisations du dépôt sec et humide	15
7.	MODÈLE INTÉGRAL	16
7.1	approche intégrale	16
7.1.1	Méthode numérique d'intégration	16
7.1.2	Distribution transversale au sein du panache	16
7.1.3	Calculs des coefficients de dispersion	17
7.2	Paramétrisations du dépôt sec et humide	17
8.	CONCLUSION	18
9.	REFERENCES	19

1. INTRODUCTION

Dans le cadre du projet « Développement et validation de méthodes et d'outils pour la maîtrise des réservoirs, des sources de diffusion des légionelles et des contaminations humaines », l'unité MECO de l'INERIS est investie dans l'opération E : « Modélisation : Diffusion dans l'atmosphère et identification d'une source de légionelles ». Le présent rapport fait état des travaux entrepris à l'INERIS dans le cadre de cette opération durant l'année 2005.

Les grandeurs et phénomènes physiques actifs dans le processus de transport et diffusion des légionelles dans l'atmosphère sont décrits au chapitre 1. Cette partie du document permet donc d'établir les bases d'un modèle de référence.

Le chapitre 2 dresse l'état des lieux des modèles disponibles à l'INERIS. Une simulation de l'épisode de contamination de Lens a été réalisée avec deux de ces modèles. Les résultats sont comparés dans ce chapitre.

Le chapitre 3 fait état des développements effectués en 2005 en collaboration avec le CEREAs (Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique, Laboratoire Commun ENPC - EDF R&D).

Le chapitre 4 propose les développements prévus pour l'année 2006 avec le CEREAs ainsi que d'autres organismes.

2. MODÉLISATION DE LA DISPERSION ATMOSPHÉRIQUE DES LÉGIONELLES

La modélisation du transport des légionelles par voie atmosphérique a pour but d'estimer la concentration en microorganismes au niveau du sol après dispersion du panache émis par la source. Les principaux mécanismes physiques et grandeurs physiques décrivant le transport de légionelles sous forme d'aérosols sont décrits ci-dessous.

2.1 GRANDEURS PHYSIQUES DÉCRIVANT L'ÉMISSION DE MICROORGANISMES (TERME SOURCE) :

- ✓ Part des microorganismes contenus dans les gouttelettes d'eau en suspension,
- ✓ Température des gouttelettes d'eau et de la vapeur d'eau émise,
- ✓ Quantité de vapeur d'eau émise dans l'atmosphère,
- ✓ Quantité d'eau liquide sous forme d'aérosol et spectre de répartition de la taille des gouttelettes mises en suspension par la source.

2.2 GRANDEURS PHYSIQUES DÉCRIVANT L'ÉTAT DE L'ATMOSPHÈRE :

- ✓ Température de l'air,
- ✓ Humidité relative,
- ✓ Paramètres météorologiques usuels (Stabilité atmosphérique, vitesse et direction du vent...)

2.3 LES MÉCANISMES PHYSIQUES DÉCRIVANT LE TRANSPORT ET LA MICROPHYSIQUE DES GOUTTELETTES :

- ✓ Evaporation des gouttelettes mises en suspension,
- ✓ Condensation dans l'atmosphère de la part de vapeur d'eau émise par la source,
- ✓ Apport en eau de l'atmosphère : le panache se mélange avec l'air ambiant contenant une part d'humidité relative susceptible d'interagir avec la part d'eau contaminée par les microorganismes,
- ✓ Accrétion des gouttelettes d'eau entre elles et évolution du spectre de répartition de la taille des gouttelettes transportées,
- ✓ Chute des gouttelettes,
- ✓ Transport et diffusion du panache dans l'atmosphère.

Le modèle de référence permettant un diagnostic rapide et efficace de la zone contaminée en cas d'accident devrait théoriquement prendre en compte les mécanismes décrits ci-dessus. Dans l'idéal, ce modèle devrait également être couplé à un module régissant la survie des microorganismes en fonction des conditions atmosphériques (modèle de survie).

En premier lieu, une évaluation de l'un des modèles de dispersion utilisés à l'INERIS de manière opérationnelle pour les études d'impact atmosphérique a été menée. Il s'agit du logiciel ADMS3, déjà mis en œuvre dans le cadre de l'étude NOROXO à Lens.

3. LE MODÈLE ACTUEL DE L'INERIS : ADMS 3

Le modèle présenté ici est le logiciel ADMS3, développé par le CERC (Cambridge Environmental Research Consultants - www.cerc.co.uk) et commercialisé en France par la société NUMTECH (www.numtech.fr). Il s'agit d'un modèle gaussien de deuxième génération qui met en œuvre un préprocesseur météorologique capable de décrire de manière continue l'état de stratification de l'atmosphère, en opposition aux modèles classiques utilisant une représentation discrète sous forme de classes de stabilité atmosphérique (classes de Pasquill).

Le module de trajectoire du modèle ADMS permet le calcul de la trajectoire de la ligne moyenne du panache ainsi que la diffusion du panache à proximité de l'émission. Ce module est mis en œuvre pour les sources d'émissions continues qui rejettent des effluents chauds ($T_{\text{émission}} > T_{\text{air}}$) ou qui ont une vitesse d'éjection non nulle. La théorie mise en œuvre est le calcul intégral de 3 propose deux modules : le module Plume Visibility et le module de transport de microorganismes qui sont présentés ci-dessous.

3.1 LE MODULE « PLUME VISIBILITY »

Dans le cadre de la microphysique, le module Plume Visibility permet le calcul en chaque point de la ligne moyenne du panache de :

- ✓ L'enthalpie spécifique qui permet la prise en compte de l'apport de chaleur générée par l'évaporation et la condensation de la quantité d'eau émise par la source,
- ✓ Le rapport de mélange d'eau liquide dans le panache,
- ✓ Le rapport de mélange de vapeur d'eau dans l'air,
- ✓ Le rapport de mélange total d'eau dans la ligne moyenne du panache qui est la somme de la part d'eau initiale dans le panache et de l'apport d'eau de l'air ambiant.

Pour les points autres que ceux appartenant à la ligne moyenne du panache, la température ambiante et l'humidité relative en un point quelconque sont calculées en supposant que les profils verticaux et horizontaux sont identiques aux profils de concentrations pour la dispersion d'un polluant passif (sans interaction avec la microphysique). **Ce module ne permet donc pas la modélisation de microorganismes en interaction avec la microphysique.**

3.2 LE MODULE DE TRANSPORT DES MICROORGANISMES

ADMS 3 propose une option de simulation du panache pour lequel les conditions de la température et de l'humidité relative sont telles que la survie de microorganismes est possible. Pour utiliser cette option, il est indispensable de donner en entrée du modèle deux valeurs seuils propres aux microorganismes dispersés :

- ✓ La première valeur seuil concerne la température minimale(en °C) au-dessus de laquelle les micro-organismes peuvent survivre.
- ✓ La seconde donnée contient la valeur seuil de l'humidité relative (en %) correspondant à l'humidité minimale au-dessus de laquelle, les microorganismes modélisés peuvent survivre. Si les micro-organismes étudiés peuvent survivre quelle que soit l'humidité relative, mais au-dessus d'une certaine température, alors l'utilisateur peut choisir d'activer uniquement ce paramètre et inversement.

Les autres données d'entrée nécessaires au fonctionnement du module sont :

- ✓ La température de l'air à 2 m.
- ✓ L'humidité relative ou l'humidité spécifique au niveau du sol.
- ✓ La part de **vapeur d'eau** dans l'air au niveau de l'émission.

3.2.1 MÉTHODOLOGIE DE CALCUL DE LA CONCENTRATION EN MICROORGANISMES

Pour chaque condition météorologique, le modèle procède par calculs successifs en s'éloignant de la source. La température et l'humidité relative au centre du panache sont vérifiées étape par étape. Si, pour une distance particulière X de la source, la température ou l'humidité relative ne dépassent pas leur valeur seuil, alors toutes les concentrations simulées aux points situés à une distance supérieure à X sont considérées comme nulles. Les concentrations simulées aux points situés à une distance inférieure à X sont calculées de la manière habituelle,.

On notera que lorsque la température à l'intérieur du panache est plus chaude que l'air ambiant, il est possible que les concentrations soient différentes de zéro au centre du panache et nulles au niveau du sol.

3.2.2 CONDITIONS D'UTILISATION ET RESTRICTIONS

- ✓ Le module de microphysique « Plume visibility » et le module de transport de microorganismes n'autorisent pas la modélisation d'une émission diphasique incluant un rapport de mélange initial de vapeur d'eau et un rapport de mélange d'eau liquide (alors qu'il s'agit là précisément de la problématique qui nous occupe avec les Tours Aéroréfrigérantes (TAR). De plus, aucune valeur seuil pour la température maximale ne peut être prise en compte.
- ✓ L'accrétion des gouttelettes n'est pas prise en compte ainsi que leur chute éventuelle (pluie).
- ✓ Le modèle de trajectoire et donc de microphysique est utilisé uniquement si la vitesse d'éjection à l'émission est non nulle.
- ✓ Le module « plume visibility » ne doit pas être utilisé avec le module de terrain complexe (Recommandation ADMS user guide, technical summary).
- ✓ Le module « plume visibility » ne fonctionne pas si le module Building est activé.

En conclusion, les modules proposés par ADMS ne permettent pas de prendre en compte les émissions d'eau liquide et donc de microorganismes transportés par des panaches diphasiques. Dans ce contexte, on ne peut simuler directement le transport des micro-organismes contenus dans l'eau liquide. ADMS propose cependant, une option de simulation de la température et de l'humidité relative permettant de donner une information sur le volume du panache dans lequel la survie de microorganismes est possible. En recoupant l'information fournie par le module de transport de microorganismes avec les résultats de simulation du transport de gouttelettes (modélisées sous la forme de particules de diamètre fixé : (traceur passif sans interaction avec la microphysique), on restreint la zone d'impact du panache contaminé (cf. l'exemple ci-dessous).

Les perspectives de développement du CERC ne laissent pas présager une amélioration de ces modules pour qu'ils soient capables de prendre en compte les émissions d'eau liquide et donc de répondre à la problématique propre à la dispersion de légionelles.

3.3 EXEMPLE DE SIMULATION D'UN ÉPISODE DE CONTAMINATION PAR LA LÉGIONELLE AVEC ADMS AVEC ET SANS ACTIVATION DU MODULE « PLUME VISIBILITY »

La situation modélisée est la période relative à la première vague de l'épidémie de légionelle survenue dans la région de Lens entre le 06 novembre 2003 et le 04 janvier 2004. Le premier épisode de dispersion d'aérosol contaminé s'étend du 06 novembre au 28 novembre 2003. Les résultats de la modélisation sont comparés à ceux présentés dans le rapport INERIS 'Evaluation de la dispersion atmosphérique d'aérosols potentiellement contaminés dans la région de Lens – Mission d'appui pour la préfecture du Pas de Calais' de février 2004 sous référence DRC - 04 - 56022 - DRCG/LRo-FMa/037/DRCG04_037LRoFMa.

Les hypothèses de calculs réalisées dans le cadre de cette première modélisation sont rappelées ici :

- ✓ La simulation repose sur l'hypothèse que la source d'émission du contaminant est une TAR de la société NOROXO
- ✓ Les calculs présentés portent sur la dispersion de gouttelettes d'eau potentiellement porteuses de légionelle. Les concentrations calculées se réfèrent à ce traceur, et n'expriment pas directement une concentration en bactéries.
- ✓ A fortiori aucune considération concernant la durée de vie des bactéries n'est prise en compte. Les résultats de dispersion permettent seulement de confirmer ou d'infirmer la plausibilité de présence de légionelle dans un domaine fixé, et d'estimer des distances d'impact probables.
- ✓ Le traceur dispersé (les gouttelettes) est assimilé à des « particules contenant 100% d'eau ».
- ✓ Les particules sont seulement transportées et éventuellement déposées. Les phénomènes d'évaporation ne sont pas modélisés. Cela ne semble pas choquant étant donné les conditions météorologiques observées durant la période. Les températures étaient relativement basses et le temps très humide. Des périodes durant lesquelles l'humidité relative était supérieure à 95% ont été enregistrées. Cependant les modélisations portant sur la dispersion de l'eau à l'état gazeux permettent de prendre en compte l'impact géographique du panache « évaporé ».
- ✓ Les phénomènes éventuels de coagulation (et donc de grossissement des particules par accumulation) sont également négligés. Ils sont généralement prépondérants en sortie de tour. En revanche, une fois que le panache est dispersé, le temps caractéristique nécessaire à cette opération est plus important. Ainsi l'hypothèse est réaliste, mais a certainement tendance à surestimer le nombre de gouttelettes dispersées.
- ✓ Le traceur se limite donc aux gouttes d'eau potentiellement contaminées. Aucune hypothèse relative à la présence possible de la bactérie n'a été incorporée (durée de vie, condition de développement, fixation éventuelle sur des particules...)
- ✓ **Le module Microphysique n'est pas activé.**

Sachant que le degré de contamination des tours était de l'ordre de 600000 à 700000 UFC/l (unité faisant colonie par litre) d'eau entraînée dans la période incriminée, en posant l'hypothèse d'une répartition uniforme de cette contamination, il est possible de déduire à partir des concentrations dans l'air en gouttelettes potentiellement contaminées, une concentration en nombre de bactéries par m³ d'air. Ceci suppose en outre que les bactéries sont transportées sans transformation et qu'elles ont une durée de vie suffisante. Ce calcul simple permet donc de déduire qu'une concentration en eau contaminée de 1 µg/m³ équivaut grossièrement à 7*10⁻⁴ UFC/m³ d'air.

Les résultats sont présentés ci-dessous :

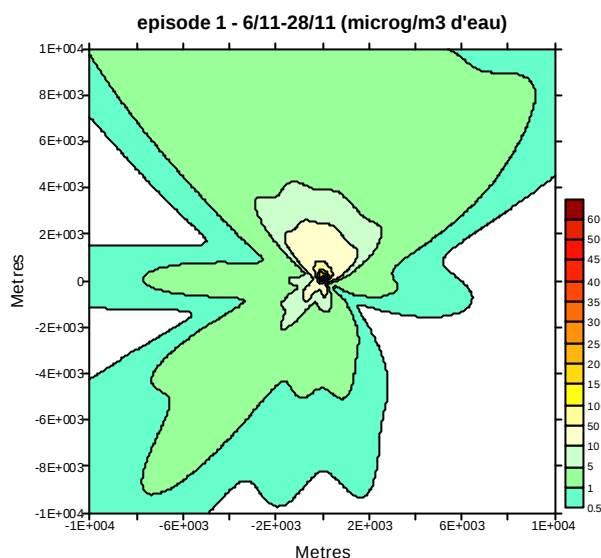


Figure 1 : Concentrations en eau
potentiellement contaminée ($\mu\text{g}/\text{m}^3$), $T_{\text{eject}} = 15^\circ\text{C}$
 $V_{\text{eject}} = 4\text{m/s}$

Apport du module ADMS de transport des microorganismes.

L'utilisation de ce module permet la modélisation du transport de légionelles en faisant l'hypothèse très restrictive que les microorganismes sont émis au sein d'un rejet constitué uniquement de **vapeur d'eau**. On rappelle les autres hypothèses du module :

- ✓ Les changements de phases de l'eau sont pris en compte.
- ✓ La physique des gouttelettes d'eau n'est pas représentée : aucun phénomène d'accrétion (ou coagulation) des gouttes entre elles. La chute des gouttes n'est pas prise en compte (pas de dépôts).
- ✓ Les valeurs seuils d'humidité relative et de température pour la survie des microorganismes constituent des bornes inférieures en deçà desquelles les microorganismes sont sensés mourir. Dans le cas de la légionelle, cette hypothèse n'est pas fondée pour la température, car pour de basses températures les microorganismes ne meurent pas mais s'endorment. En revanche, l'information est pertinente pour l'humidité relative.

En utilisant les mêmes hypothèses en terme de nombre de bactéries émises par litre d'eau, de paramètres météorologiques et de paramètre d'émission de la TAR. On présente les résultats de la simulation pour deux valeurs seuils d'humidité relative, 50% et 90%.

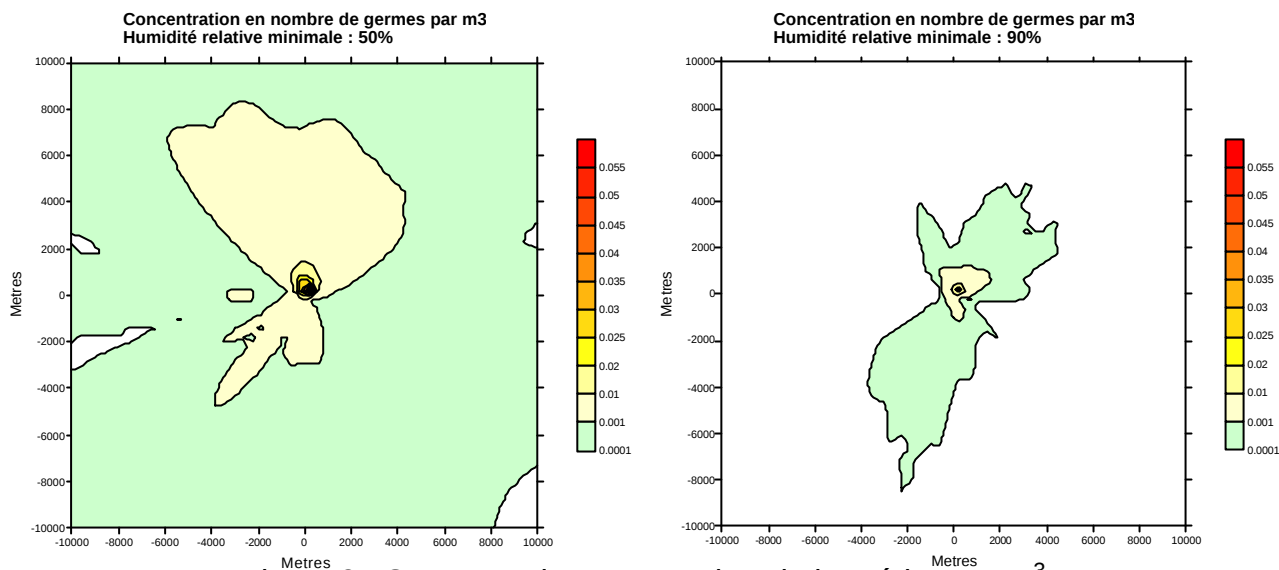


Figure 2 : Concentrations en nombre de bactéries par m³

$$T_{\text{eject}} = 15^{\circ}\text{C}, V_{\text{eject}} = 4\text{m/s}$$

Les résultats montrent une cohérence quantitative entre les simulations d'un traceur passif (gouttelettes modélisées sous la forme de particules de diamètre fixé sans interaction avec la microphysique) et celles du traceur actif (microorganismes émis au sein d'un rejet constitué uniquement de **vapeur d'eau**). On constate cependant que le nombre de microorganismes par mètre cube d'air pour une valeur seuil d'humidité relative de 50% est supérieur à celui trouvé pour la modélisation du traceur passif alors que le nombre de microorganismes par mètre cube d'air pour une valeur seuil d'humidité relative de 90% est inférieur. L'information est donc difficile à interpréter au vu de la dépendance importante des résultats vis à vis de cette valeur seuil d'humidité relative.

Les résultats d'une étude du service R&D de la société EDF, (EDF, 2005), montrent une influence notable du taux d'humidité relative sur la survie des aérosols de légionelles. Un environnement sec (humidité relative de 30%) conduit à une perte de cultivabilité plus importante qu'un environnement saturé en humidité (humidité relative de 95%), la valeur d'humidité relative optimale pour la cultivabilité de la légionelle se situant vraisemblablement entre les deux (Hambleton,1983).

En conclusion, les modules actuels proposés par ADMS ne permettent pas une modélisation satisfaisant les critères énoncés au chapitre 1.

4. DÉVELOPPEMENTS REALISES EN 2005

Suite au constat d'insuffisance des modèles dont dispose l'INERIS dans le cadre de la problématique légionelle, un rapprochement avec le CEREAA (laboratoire spécialisé dans la modélisation des phénomènes de petite échelle) a été effectué en vue du développement de modèles spécifiquement adaptés.

Une étude bibliographique a été menée montrant qu'il n'existait pas dans la littérature de modélisation de type gaussienne intégrant la microphysique des rejets et leurs interactions avec les constituants en eau de l'atmosphère. Le cahier des charges (cf. annexe 1) rédigé en cours d'année fait donc état du développement de deux modèles de types intégraux (3D) permettant la résolution des équations de transport des quantités d'eau dans l'atmosphère susceptible de contenir les microorganismes.

La base du développement est le modèle 3D Polair intégré dans la plate forme de modélisation Polyphémus du CEREAA. Ce modèle intègre un pré-processeur météorologique capable de reconstituer les situations météorologiques en termes de champs de vents, de température, et d'humidité relative sur un domaine dont la taille peut varier entre l'échelle Micro (échelle de la rue) et l'échelle Submeso (10-100 km).

Le premier modèle développé en coopération avec le CEREAA permet :

- ✓ la modélisation d'une émission diphasique en incluant eau liquide et vapeur d'eau,
- ✓ la modélisation du transport et de la diffusion de ces deux quantités,
- ✓ la modélisation des changements de phase entre ces deux quantités.

Il ne permet pas :

- ✓ la modélisation de l'eau liquide sous forme de gouttelettes au niveau de la source comme dans l'atmosphère.

L'eau liquide ainsi que la vapeur d'eau sont donc représentées sous la forme de deux scalaires dont les quantités fluctuent entre elles mais dont la somme est constante. Le passage d'une phase à l'autre est régi par le paramètre de pression de vapeur saturante.

Le développement de cette première version de Polair adaptée à la modélisation des constituants en eau de l'atmosphère s'est achevé fin 2005. Le modèle est actuellement en phase d'évaluation à l'INERIS. Il va permettre la simulation de l'épisode de Lens et la comparaison des résultats obtenus avec les simulations précédentes.

5. DÉVELOPPEMENTS PREVUS ET REALISES EN 2006

5.1 MODÉLISATION DE LA PHYSIQUE DES GOUTTELETTES

Le deuxième modèle développé en coopération avec le CEREa utilise également la base du code Polair. Des travaux du CEREa ont permis le développement de paramétrisations microphysiques décrivant la physique, le transport et la diffusion des gouttelettes d'eau issues des tours aéroréfrigérantes. Ces paramétrisations ont été implantées dans le code MERCURE grâce à la thèse 'représentation des nuages chauds et humides dans le code météorologique « Mercure » : Application aux panaches d'aéroréfrigérants et aux précipitations orographiques', Bouzereau, 2004. Le logiciel Mercure ne permet pas la simulation de plusieurs situations météorologiques représentant plusieurs jours à cause des temps de calculs prohibitifs. Les paramétrisations de Mercure doivent donc être adaptées au code Polair pour disposer d'un outil opérationnel. L'ensemble des phénomènes physiques de transport et de microphysique des gouttelettes décrit au chapitre 1 pourront ainsi être modélisés. Les résultats de simulation de ce modèle permettront de connaître les distances minimum et maximum pour lesquelles on peut trouver des gouttelettes d'eau (issue de la source) de tailles comprises entre 2µm (taille caractéristique d'une légionelle) et 10µm (taille maximale d'une gouttelette inhalée).

5.2 MODÉLISATION INVERSE

Les modèles adjoints des modèles de transport développés seront réalisés courant 2006 en coopération avec le CEREa. Ces modèles permettront l'identification d'une source sous réserve de disposer de mesures de concentrations de légionelles dans l'environnement. On rappelle ici que la modélisation inverse est envisageable uniquement dans le cadre de mesures de légionelles dans l'environnement. Les seules informations de cas avérés de légionellose et de leurs localisations ne permettent pas l'utilisation de ce type de modèle, en l'état actuel des connaissances dont on dispose.

5.3 VALIDATION DES MODÈLES PAR LA MESURE

Le CSTB propose la mise en place d'une tour aéroréfrigérante contenant des bactéries témoins (inoffensives) marquées. Les concentrations à l'émission pourront être ajustées et une campagne de mesure des concentrations de bactéries dans l'environnement pourra être menée.

L'intérêt de cette campagne pour l'aspect modélisation réside :

✓ dans la possibilité de valider les modèles développés : La connaissance des concentrations de microorganismes au sein de la tour ainsi que les mesures de concentration à l'émission (en sortie de tour) permettront le calage du modèle pour le terme source. Les concentrations mesurées dans l'environnement permettront alors l'évaluation des modèles de transport développés.

✓ dans la possibilité de tester et de valider les modèles adjoints pour la modélisation inverse : la connaissance des concentrations mesurées dans l'environnement permettra l'utilisation des modèles inverses développés et l'identification éventuelle de la position (connue) de la source par le modèle.

5.4 RECHERCHE D'INFORMATIONS SUR LE TERME SOURCE

La connaissance des paramètres d'émission des tours aéroréfrigérantes définis au chapitre 1 n'est pas aisée. Ces paramètres sont supposés varier avec le type de dévésiculeur, la dimension des tours, la présence d'extracteurs (ventilateurs)... La qualité des résultats de simulation dépendant fortement de la précision des données d'entrée, l'orientation suivante consiste donc à acquérir des informations sur les caractéristiques d'émission des différents types de dévésiculeurs utilisés. Ceci permettra d'amorcer la réflexion sur l'enrichissement du terme source actuellement peu renseigné.

5.5 MODÈLE BACTÉRIOLOGIQUE

L'intégration d'un modèle de survie des microorganismes fourni par l'INVS est toujours prévue courant 2006. Ce modèle reposera vraisemblablement sur la thèse de Ti Lan Ha (LMEI,CSTB,2005). L'INVS procède actuellement à l'évaluation des hypothèses adaptées dans le cadre de ce travail, mais ces travaux semblent prendre un retard important.

6. REFERENCES

Numtech, 2003. Note n°A3-09.0. ADMS 3.2 : Calcul de la température, de l'humidité et de la concentration en micro organismes.

DJ. Carruthers, S J Dyster and K L Ellis, CERC, 2003. ADMS3, P26/01D/03. Plume visibility.

AG Robins, D D Apsley, DJ. Carruthers, C A McHugh, S J Dyster, 2004. ADMS3 P11/02M/04. Plume Rise Model Specification.

EDF, R&D, Division Production Nucléaire, Service des Etudes Médicales, juin 2005. Survie des légionelles aérosolisées : synthèse des résultats sur l'étude de l'influence de l'humidité relative et du rayonnement solaire.

Hambleton P. et al, 1983. Survival of virulent legionella pneumophila in aerosols: effect of relative humidity. The journal of infectious diseases, vol.141, n°5, 689.

7. LISTE DES ANNEXES

Repère	Désignation	Nombre de pages
Annexe 1	Cahier des charges : spécifications d'un modèle de transport atmosphérique de polluants et de nuages humides	20 A4

ANNEXE 1

SPÉCIFICATIONS D'UN MODÈLE DE TRANSPORT ATMOSPHERIQUE DE POLLUANTS ET DE NUAGES HUMIDES

1. INTRODUCTION

Ce document présente les spécifications non détaillées du modèle de dispersion atmosphérique qui sera développé sur la base de la plate-forme POLYPHEMUS mise au point par le CEREAS. Les paramétrisations choisies par l'INERIS sont issues de la bibliographie, elles ne sont ici qu'énoncées et feront l'objet de discussion avant leur validation par les deux parties.

Le logiciel à développer devra permettre la modélisation :

- ✓ des rejets industriels diffus de type gazeux ou particuliers, provenant de sources multiples, et leurs impacts dans l'environnement
- ✓ des panaches humides d'une unique cheminée industrielle : dispersion des constituants en eau et leur interaction.

Pour ces deux applications, la modélisation envisagée doit permettre l'utilisation de fichiers météorologiques décrivant plusieurs années à des fins de post traitements statistiques (Calcul Long Term) ou de fichiers météorologiques de situations particulières (Calcul Short Term).

La taille du domaine modélisé devra être comprise entre les échelles Micro (échelle de la rue : 100 m) et Submeso (échelle de la ville : 20 km). La simulation devra être possible pour un environnement de type urbain ou rural.

Certains rejets sont parfois sujets à des phénomènes complexes aux abords immédiats de la source, on citera par exemple :

- ✓ émissions de cheminées industrielles avec des vitesses et des températures de rejets élevées générant des effets de sur hauteur,
- ✓ rejets diphasiques,
- ✓ phénomènes de jets.

Par soucis de clarté on différencie les phénomènes qualifiant le champ proche des phénomènes de dispersion en champ lointain. Dans le cas du champ proche, l'ordre de grandeur de l'échelle spatiale variera de quelques mètres à une centaine de mètres.

Les problématiques abordées pour le **Champ Proche** sont les suivantes :

Phénomènes de jet

- ✓ dispersions des quantités rejetées à l'atmosphère (gaz, eau liquide, vapeur d'eau)
- ✓ Interactions des constituants en eau pendant la phase de jet

Phénomènes de sur hauteur de panaches industriels

Les problématiques abordées pour le **Champ Lointain** sont les suivantes :

- ✓ dispersion passive des panaches industriels,
- ✓ évolution des panaches humides,
- ✓ dépôts secs et dépôts humides.

Le développement des formulations décrivant ces problématiques nécessitera le développement des modules ci-dessous :

- ✓ le module pré-processeur météo : constitution des champs météorologiques,
- ✓ le module d'émission,
- ✓ le module champ proche qui comprend :
 - ✓ l'ensemble des formulations du champ proche,
 - ✓ et le module diagnostique qui détermine la formulation la plus appropriée,
- ✓ le module de transition champ proche/champ lointain qui assure l'interface entre les deux champs et la continuité physique des quantités modélisées,
- ✓ le module gaussien qui calcule la dispersion atmosphérique dans le champ lointain,
- ✓ le module qui propose l'approche intégrale pour traiter la dispersion atmosphérique d'un panache (gazeux ou humide) dans le champ proche ou lointain.

Les paramétrisations proposées pour la modélisation des phénomènes du champ proche et du champ lointain doivent pouvoir être laissées au choix de l'utilisateur. L'évolutivité du logiciel devra également permettre le développement par l'INERIS de paramétrisations additionnelles telles que l'implémentation d'un module régissant la survie de microorganismes dans l'atmosphère.

1.1 ORGANISATION DU DOCUMENT

Les différents modules cités précédemment feront chacun l'objet d'un des chapitres de ce présent document qui sera organisé comme suit :

- le chapitre 2 présente le pré-processeur météorologique,
- le chapitre 3 expose le module d'émission,
- le chapitre 4 concerne les formulations proposées pour le champ proche,
- le chapitre 5 traite du module de transition entre le champ proche et le champ lointain,
- l'approche gaussienne est présentée au chapitre 6,
- la formulation intégrale est exposée au chapitre 7,
- le chapitre 8 forme la conclusion de ce rapport.

2. PRÉSENTATION DU PRÉPROCESSEUR MÉTÉOROLOGIQUE

2.1 CHAMP D'ÉTUDES MÉTÉOROLOGIQUES

La DRC réalise des études d'impacts atmosphériques sur des bases de données météorologiques de données horaires ou tri - horaires. Ceci étant, l'INERIS souhaite que le logiciel à développer puisse intégrer des données de mesures météorologiques moyennées sur un temps quelconque et avec une fréquence variable.

Les paramètres météorologiques étudiés dans ces bases de données sont principalement constitués par :

- ✓ la latitude, longitude des points de mesures.
- ✓ date et heure de la mesure
- ✓ la direction et le module du vent,
- ✓ la température
- ✓ l'humidité relative
- ✓ la pression atmosphérique
- ✓ la nébulosité
- ✓ le flux thermique au sol
- ✓ la pluviométrie
- ✓ Hauteur de la couche limite
- ✓ Albédo

En première approche, le pré processeur météorologique doit permettre la reconstitution d'un champ météorologique 3 D uniforme suivant un plan horizontal :

- ✓ sur un domaine à l'échelle sub meso (échelle d'une ville ~20km),
- ✓ en mode diagnostique à l'aide de l'ensemble ou d'une partie des données de la base météorologique décrite ci-dessus
- ✓ sur un terrain plat avec une rugosité variable

Les formulations proposées à l'utilisateur pour composer le champ de vent, le champ de turbulence (...) sont décrites dans les sous-chapitres qui suivent.

2.2 FORMULATION POUR LE CHAMP DE VENT

Le champ de vent pourra être diagnostiqué par une des formulations simples citées ci-dessous :

- ✓ lois de puissance,
- ✓ profil logarithmique,

ou par des formulations plus complexes :

- ✓ Formulation pré-processeur MPP de l'ECN (modèle SUBMESO),
- ✓ Zilitinkevitch et al (1996,1998, 2002) pour les couches limites stables,
- ✓ Formulation pour la couche limite instable à déterminer.

2.3 DESCRIPTION DE LA TURBULENCE

La turbulence dans la couche limite atmosphérique sera appréhendée par :

- ✓ une description continue de la turbulence suivant la théorie de similitude de Monin-Obukhov (1954),
- ✓ ou une description discrète de la turbulence suivant la Classification de Pasquill.

Ces paramétrisations permettront également le calcul des coefficients de dispersion utilisés pour les formulations du champ lointain.

3. LE MODULE D'EMISSION

Le module présenté ici est appelé 'module d'émission', il sera utilisé pour :

- ✓ formater les données récupérées en fonction du type de la source (ponctuelle, surfacique, linéique ou volumique) avant d'appeler le module diagnostique du champ proche,
- ✓ configurer les sources réelles d'émission pour le calcul en champ proche,
- ✓ configurer les sources virtuelles d'émission pour le champ lointain.

3.1 LES SOURCES PONCTUELLES

La source ponctuelle ne demande pas de traitement particulier quelle que soit l'approche utilisée (gaussien ou intégrale).

3.2 LES SOURCES SURFACIQUES (ET PAR EXTENSIONS LINÉIQUES)

L'INERIS souhaite que la solution proposée pour la prise en comptes de sources surfaciques soit valable à la fois pour les formulations gaussiennes et intégrales. Au niveau de la formulation gaussienne, l'INERIS propose la méthodologie décrite ci-dessous :

- ✓ La formulation proposée est celle du modèle ISC3. Le modèle de sources surfaciques est basé sur l'intégration numérique sur la surface physique de la formule pour les sources ponctuelles. Ainsi, les sources surfaciques seront représentées par l'intégration d'une infinité de sources ponctuelles. Les sources polygonales (définies par un nombre de points fixé par l'utilisateur) en opposition aux sources rectangulaires (définies par deux points) doivent également pouvoir être représentées.

Cette méthode pourra être discutée pour son application à la formulation intégrale. On discutera également de la possibilité d'intégrer des sources surfaciques non planes.

3.3 LES SOURCES VOLUMIQUES

Les sources volumiques seront modélisées au moyen de flux sortants d'une surface fermée.

3.4 DONNÉES D'ENTRÉE POUR LA DESCRIPTION DES SOURCES

- ✓ Géométrie de la source (si source surfacique linéique ou volumique),
- ✓ Diamètre et hauteur de la source (si source canalisée),
- ✓ Vitesse d'éjection,
- ✓ Débit volumique,
- ✓ Température du rejet,
- ✓ Débit massique,
- ✓ Eventuellement densité pour les gaz denses.

Pour les particules :

- ✓ Diamètre des particules,
- ✓ Densité,
- ✓ Fraction massique du polluant considéré pour la particule,
- ✓ Vitesse de dépôt (si connue).

4. PRÉSENTATION DES FORMULATIONS UTILISÉES POUR LE CHAMP PROCHE

4.1 LE MODULE DIAGNOSTIQUE

Le module diagnostique permet le choix des paramétrisations pour les deux types de rejets :

- ✓ rejets diffus gazeux industriels,
- ✓ rejets des panaches humides de cheminées industrielles.

L'objectif principal du module diagnostique est d'identifier les types de rejets en fonction des caractéristiques d'émissions :

- ✓ Phénomène de jet (vitesse de rejet prédominante),
- ✓ Rejet caractérisé par les forces de flottabilité (gaz chaud...),
- ✓ Rejet caractérisé à la fois par la dynamique et par les forces de flottabilité.

Le module diagnostique utilise les critères classiques pour l'identification. Ces critères sont basés sur des nombres sans dimensions (nombre de Froude, Richardson de jet,,) et permettent de qualifier l'importance relative de l'inertie, de viscosité et de la gravité, et de situer si le rejet est dans une condition de "jet" ou panache.

4.2 LE MODULE DE JET

Le présent cahier des charges propose d'intégrer le modèle de jet développé à la DRA (Direction des Risques Accidentels). Un rappel sur les jets di-phasiques et une description synthétique de ce modèle sont proposés dans ce sous – chapitre.

4.2.1 RAPPELS SUR LES JETS DI-PHASIQUES

Les études réalisées sur les rejets diphasiques en champ libre décomposent généralement le jet en trois zones comme le présente la Figure 1 suivante :

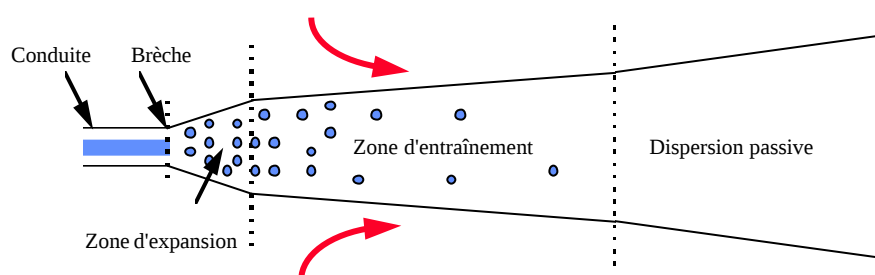


Figure 1 : représentation schématique des différentes zones d'un jet diphasique

Ces trois zones sont respectivement :

- **la zone d'expansion** : c'est dans cette zone, de longueur très faible (entre 0,5 et 4 fois le diamètre de la brèche, Iannello, 89), que se produit la détente du fluide depuis la pression à la brèche à la pression atmosphérique ou "*flash thermodynamique*".
- **la zone d'entraînement** : dans cette zone, le jet turbulent provoque l'entraînement de l'air ambiant au sein du jet.
- **la zone de dispersion passive** : du fait de l'entraînement de l'air, la vitesse du jet va progressivement décroître jusqu'à atteindre la vitesse du vent. A partir de ce moment, la dispersion du jet sera alors de type "passive" dans l'atmosphère.

Les phénomènes de fragmentation du jet qui provoquent la naissance des gouttes ne sont pas complètement identifiés (Touil, 2005), pour les autres connus ils obéissent à des cinétiques extrêmement rapides. Par conséquent la dimension des gouttes, représentée par le diamètre, qui en résulte ne peut être prédite théoriquement et est estimée par des **formules et des corrélations empiriques**.

Les deux types de fragmentation d'un jet liquide en gouttelettes répertoriés dans la littérature sont données ci-dessous :

- ✓ la fragmentation mécanique issue des forces de cisaillement des deux phases à la surface du liquide,
- ✓ la fragmentation thermique si la température du liquide rejeté est suffisamment élevée.

Différentes corrélations sont recensées dans la littérature, et les différents auteurs s'accordent pour admettre que la distribution des diamètres suit une loi log-normale de paramètres $\overline{d_p}$ et s_g ($s_g=1,3$) et pour utiliser une fonction densité de probabilité pour une distribution de diamètre de gouttes.

4.2.2 PRÉSENTATION SYNTHÉTIQUE DU MODÈLE DE JET DE LA DRA

La DRA a mis au point un modèle informatique destiné à évaluer la quantité de produit capturé par un obstacle placé sur la trajectoire d'un jet diphasique. Le modèle a été mis au point pour traiter principalement la zone d'entraînement et la zone d'expansion (cf. Figure 1). Les approches physiques et mathématiques proposées dans le modèle sont issues de la littérature et permettent de calculer l'évolution d'un grand nombre de paramètres depuis le point de rejet jusqu'au niveau de l'obstacle, les plus importants étant :

- ✓ les caractéristiques de l'aérosol (quantité totale de liquide contenu dans l'aérosol, distribution de la taille des gouttelettes et de la masse de liquide) ;
- ✓ la vitesse et la température du jet diphasique.

Les approches proposées pour estimer le diamètre de gouttes :

sont pour la fragmentation mécanique la formulation dite de "l'instabilité de Weber" (Johnson et al,1998),

et pour la fragmentation thermique la formulation de Lanello (1989).

Le modèle présente un caractère original dans la mesure où il couple deux approches distinctes (eulérienne et lagrangienne) en prenant en compte de plus une distribution non uniforme de taille de gouttes. En effet pour modéliser l'évolution du jet entre la fin de la zone d'expansion et le point d'impact, le modèle calcule:

- a) l'évolution du jet (Papadourakis, 1993) au préalable en tenant compte d'une valeur de diamètre moyen de goutte,

- b) puis l'évolution de chaque classe de goutte (Papadourakis, 1993) est calculée en considérant que celle-ci :

se situe au sein du jet di-phasique, l'environnement du jet est connu car les données thermodynamiques du jet ont été préalablement calculées,
se situe dans l'air ambiant dès que la goutte quitte le "jet".

Les principales équations prises en compte pour décrire le jet sont :

- ✓ la modélisation de l'entraînement d'air au sein du jet est basée sur les travaux de Ricou et Spalding (1961),
- ✓ le principe de la conservation de la masse : la somme de la masse initiale et de la masse d'air entraîné,
- ✓ la conservation de l'énergie, le bilan d'enthalpie du jet est donné par la somme du flux d'énergie du fluide rejeté et du flux d'énergie de l'air entraîné,
- ✓ la conservation de la quantité de mouvement permet de déterminer la vitesse du jet $U(z)$,
- ✓ les équations décrivant l'évaporation des gouttes

Le modèle permet de déterminer l'évolution temporelle de la température et de la taille de chaque goutte. Il est décrit par les équations et les hypothèses suivantes pour une goutte projetée dans de l'air :

- ✓ la conservation de la masse de chaque goutte de liquide est établie en effectuant l'hypothèse que la quantité de liquide vaporisée est égale à la quantité de vapeur diffusant de la surface de la goutte vers la phase gazeuse environnante,
- ✓ la conservation de l'énergie,
- ✓ la conservation de la quantité de mouvement projetée dans chaque direction d'un repère cartésien.

Les équations précédentes doivent prendre en compte :

- ✓ la vitesse relative de la goutte (en m/s),
- ✓ le coefficient de traînée,
- ✓ le coefficient d'échange thermique par convection.

4.2.3 ENTRÉES ET SORTIES DU MODÈLE DE JET

Les entrées du modèle sont constituées principalement par :

- ✓ les conditions thermodynamiques du fluide : pression, température,
- ✓ type d'organe de sortie,
- ✓ conditions ambiantes : température,...
- ✓ la distance à l'obstacle,
- ✓ les paramètres suivants s'ils sont connus :
- ✓ le débit de rejet,
- ✓ le diamètre moyen des gouttes.

Les sorties du modèle sont constituées par :

- ✓ l'évolution de l'évaporation des gouttes au sein du jet,
- ✓ l'évolution des diamètres des gouttes,
- ✓ la quantité de rainout de liquide formé au sol,
- ✓ l'état thermodynamique du jet: fraction liquide dans le jet, fraction du gaz, dans la phase gazeuse, température du jet,...

4.3 MODULE DE SURHAUTEUR DE PANACHE

Les autres formulations retenues pour le champ proche sont celles de Briggs et de Holland. D'autres formulations pourront être proposées.

4.4 CONCLUSION SUR LES PARAMÉTRISATIONS DU CHAMP PROCHE

L'approche proposée se base sur le modèle diagnostique qui permet de qualifier le type de rejet et donc de choisir la formulation la plus appropriée. Cette approche modulaire permettra l'ajout de nouvelles formulations pour les panaches.

Il a été abordé ici la modélisation du rejet à la sortie immédiate de l'extrémité de la source, les effets de dilution et la perte de quantité de mouvement vont faire transiter ce rejet vers une dispersion passive. Cet aspect fait l'objet du Chapitre suivant.

5. PRÉSENTATION DU MODULE DE TRANSITION CHAMP PROCHE / CHAMP LOINTAIN

5.1 DESCRIPTION

Ce module assurera la transition entre les formulations du champ proche et celles de du champ lointain (dispersion passive (sans entraînement)) pour toutes les quantités.

L'avantage de disposer d'un module de transition entre le modèle champ proche et le modèle de dispersion passive est de rendre leur utilisation respective possible à d'autres applications.

Le module de transition doit :

- ✓ détecter l'emplacement de la zone de transition,
- ✓ assurer la continuité des quantités physiques entre les deux champs.

Le premier point est résolu à l'aide de critères basés sur des paramètres physiques dont les principaux sont cités ci-dessous :

- ✓ vitesse d'entraînement négligeable par rapport à la vitesse du vent
- ✓ taux d'entraînement de l'air dans le jet
- ✓ densité du panache proche de celle de l'air
- ✓ ...

La résolution du deuxième point est complexe. En première approche, on pourra s'inspirer de la formulation de l'UDM (PHAST).

Le module doit pouvoir traiter ces deux points dans les cas suivants :

- ✓ La transition entre une phase de jet et la phase de dispersion passive
- ✓ La transition entre les élévations de panache qui pourront être traitées par les formules classiques de sur hauteur (Briggs, Holland, ...) et la phase de dispersion passive.

Les critères de transition utilisés dans une première approche pourront être les critères classiques basés sur des nombres adimensionnels (nombre de Richardson de jet...).

Ce module de transition pourra éventuellement faire appel au module d'émission afin de configurer des sources virtuelles pour les formulations de la dispersion passive gaussienne ou intégrale.

5.2 ENTRÉES ET SORTIES DU MODULE DE TRANSITION

Les entrées/sorties du module sont constituées par :

- dans le cas des panaches non/humides :
 - ✓ la concentration des polluants dispersés,
 - ✓ la géométrie du panache,
- dans le cas des panaches humides :
 - ✓ spectre de répartition des gouttelettes pour la modélisation des nuages humides,
 - ✓ quantité d'eau liquide et de vapeur,
 - ✓ humidité relative sur la section du panache,
 - ✓ température sur la section du panache,
 - ✓ la quantité de rainout de liquide formé au sol.

6. APPROCHE GAUSSIENNE POUR LE CHAMP LOINTAIN

Ce chapitre ne traitera que la dispersion des rejets non-humides d'émission continue. L'approche proposée est basée sur la formulation gaussienne classique de panache continu.

6.1 COEFFICIENTS DE DISPERSION

Les coefficients de dispersion sont basés sur les formulations de :

- ✓ Pasquill-Gifford
- ✓ ADMS3 (description continue de la turbulence suivant la longueur de Monin-obhukov). Une description détaillée des coefficients de dispersion est donnée dans ADMS 3 Technical specification, P10/01 et P12/01 ('plume/puff spread and mean concentration module specifications').

Le modèle proposera une correction des coefficients de dispersion :

- ✓ qui permettra la prise en compte du temps d'intégration pour l'estimation du paramètre $\sigma\theta$ décrivant l'effet de serpentement du panache
- ✓ suivant la rugosité (formule de régression proposée par le TNO).

Le temps d'intégration pour le calcul des coefficients doit pouvoir être fixé par l'utilisateur pour une gamme de valeurs comprises entre quelques minutes et quelques heures.

6.2 PARAMÉTRISATIONS DU DÉPÔT SEC ET HUMIDE

Les formulations pour le calcul des vitesses de dépôts sont celles utilisées dans le modèle CHIMERE (IPSL), soit pour les gaz :

- ✓ Seinfeld and Pandis (1998) pour le dépôt sec,
- ✓ Seinfeld and Pandis (1998) pour le gaz dans les nuages,
- ✓ Mircea and Stefan (1998) pour le gaz dans l'eau de pluie.

et pour les particules :

- ✓ Tsyro (2002) and Guelle et al. (1998) pour les particules dans l'eau des nuages,
- ✓ Slinn, 1983 pour les particules dans l'eau de pluie.

La formulation pour le modèle de dépôt prendra en compte l'élimination de la quantité de polluant déposé et la modification du profil vertical de distribution des concentrations.

7. MODÈLE INTÉGRAL

7.1 APPROCHE INTÉGRALE

Le choix de la formulation intégrale s'est porté sur une paramétrisation 1D de calcul de la trajectoire de la ligne moyenne du panache et de la valeur des quantités dispersées sur cette ligne. Le système d'équations est constitué des équations de conservation de la masse, de l'énergie, de la quantité de mouvement, des équations de transports des constituants en eau de l'atmosphère ainsi que des équations de transports des polluants transportés. La température, la densité et le rapport liquide /vapeur étant fortement couplés, les équations de la thermodynamique et de l'énergie seront résolues ensemble.

- ✓ Dans l'hypothèse où les rejets sont continus, la formulation retenue est celle de Ooms (1973) (formulation utilisée par les modèles ADMS3 et PHAST) modifié par Emmerson (1986,1987) pour les gaz denses et les panaches humides.
- ✓ Une autre formulation intégrale suggérée est celle de Zhang et Ghoniem (1993) (Formulation du modèle ISC).
- ✓ Dans l'hypothèse où les rejets sont non continus, le choix de la paramétrisation n'a pas été arrêté.

Pour la microphysique la formulation adoptée est celle de Kessler (1969), si celle-ci est intégrable au système d'équations différentielles. La formulation microphysique pour le modèle de champ lointain doit pouvoir intégrer les paramètres de sortie du modèle pour le champ proche. On discutera également de la possibilité d'intégrer une paramétrisation pour les constituants en eau froide telle que la paramétrisation dite de la glace de Tao et Simpson (pour la vapeur d'eau, l'eau de pluie, la glace, la neige et la grêle).

7.1.1 MÉTHODE NUMÉRIQUE D'INTÉGRATION

Le système d'équations différentielles sera résolu à l'aide **d'un schéma numérique de type Runge-Kutta**.

7.1.2 DISTRIBUTION TRANSVERSALE AU SEIN DU PANACHE

La température ambiante, les rapports de mélange de vapeur d'eau et d'eau liquide ainsi que la répartition des gouttelettes en un point quelconque sont calculés en supposant que les profils verticaux et horizontaux suivent une loi de distribution gaussienne avec comme conditions aux limites la valeur des paramètres météorologiques dans l'air ambiant.

La concentration au point (x,y,z) est donnée par :

$$C(x,y,z) = C_p \times F(y) \times G(z) \quad (5)$$

Où C_p est la concentration au centre du panache, F et G sont les fonctions de transferts gaussiennes transversales et verticales. La température est donnée par :

$$T(x,y,z) = T_a + (T_p - T_a) \times F(y) \times G(z) \quad (6)$$

Où T_a est la température ambiante au point de calcul et T_p la température du point P situé sur la ligne moyenne et calculé à l'aide de la formulation intégrale.

7.1.3 CALCULS DES COEFFICIENTS DE DISPERSION

Les coefficients de dispersions ont identiques à ceux présentés au chapitre 6.1 (approche ADMS).

7.2 PARAMÉTRISATIONS DU DÉPÔT SEC ET HUMIDE

L'approche retenue est identique à celle du chapitre 6.2.

8. CONCLUSION

Les spécifications présentées dans ce document porte sur un modèle de dispersion, à développer sur la base de la plate-forme POLYPHEMUS du CEREAS, qui permettra de traiter :

- ✓ des rejets industriels diffus de type gazeux ou particulaires, provenant de sources multiples, et leurs impacts dans l'environnement,
- ✓ des panaches humides d'une unique cheminée industrielle : dispersion des constituants en eau et leur interaction.

Les spécifications présentées dans ce document préconisent une répartition des formulations pour la modélisation du transfert atmosphérique des polluants et des constituants en eau suivant deux catégories : les formulations pour le champ proche et celles pour le champ lointain. Cette distinction définit :

- d'une part une répartition claire des modules de calcul et de leur appel suivant les phénomènes à simuler,
- d'autre part une cohérence avec l'approche modulaire sur laquelle est basée la plate forme POLYPHEMUS.

La formulation intégrale proposée au chapitre 7 s'affranchit de cette règle car elle peut être utilisée pour la modélisation de l'ensemble des deux champs ou pour la modélisation d'un unique champ (proche ou lointain).

Plus précisément les spécifications ont porté sur le développement des modules ci-dessous :

- ✓ le module pré-processeur météo,
- ✓ le module d'émission,
- ✓ le module champ proche,
- ✓ le module de transition champ proche/champ lointain qui assure l'interface entre les deux champs,
- ✓ le module gaussien qui calcule la dispersion atmosphérique dans le champ lointain,
- ✓ le module qui propose l'approche intégrale pour traiter la dispersion atmosphérique d'un panache (gazeux ou humide) dans le champ proche ou lointain.

Plusieurs formulations proposées (pour le pré-processeur météorologique, le module de transition et les formulations de microphysiques pour le champ lointain,...) devront être discutées avec l'équipe du CEREAS avant leur validation.

Le logiciel développé adoptera une structure modulaire basée sur celle de la plate-forme POLYPHEMUS. Les modules seront développés en langage objet et permettront une représentation UML. Cette structure évolutive permettra l'ajout par l'INERIS de plusieurs paramétrisations sous forme de modules (module microbactériologique, module lagrangien, module de fluctuations statistiques...).

9. REFERENCES

Emerson, M. C., "Dense cloud behaviour in momentum jet dispersion", IMA Conference on Mathematics in Major Accident Risk Assessment, Oxford, July (1986)

Emerson, M. C., "A new unbounded jet dispersion model", 5th Intl. Symp. Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, Cannes, September (1986)

Emerson, M.C., "A model of pressurized releases with aerosol effects", paper presented at the International Conference on Vapor Cloud Modeling, Cambridge, MA, November 2-4 (1987)

G.A. Briggs. Some recent analyses of plume rise observations. Dans H.M. Englund et W.T. Berry. Academic Press, éditeurs, Proc. of the Second International Clean Air Congress.

Guelle, W., Balkanski, Y. J., Schulz, M., Dulac, F., and Monfray, P.: Wet deposition in a global size-dependent aerosol transport model, 1. Comparison of a 1-year 210Pb simulation with ground measurements, J. Geophys. Res., 103, 11 429–11 445, 1998b.

Lanello V., Rothe P.H., Wallis G.B. (1989). Aerosol Research Program : improved source term definition for modeling the ambient impact of accidental release of hazardous liquids. Paper presented at the 6th International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, Oslo, Norway.

Mircea, M. and S. Stefan, 1998: A theoretical study of the microphysical parameterization of the scavenging coefficient as a function of precipitation type and rate, Atmos. Env., 32, 2931-2938.

Mircea, M. and S. Stefan, 1998: Polydisperse aerosol influence on the scavenging coefficient, Aerosols Journal, 40, No. 10, 278.

Monin-Obukhov (1954), The main features of turbulent mixing in the surface atmospheric layer, Trudy Inst. Geophys. Acad. Sci. USSR, vol 24.

Ooms, G., 1972, A New Method for the Calculation of the Plume Path of Gases Emitted by a Stack. Atmospheric Environment, Vol. 6, 1972: p. 899-909.

Ooms, G., Mahieu, A.P., 1980. A comparison between a plume path model and a virtual point source model for a stack plume; Applied Scientific Research 36 (1980) 339-356.

Papadourakis A., Caram H.S., Barner C.L. (1993). Upper and lower bounds of droplet evaporation in two-phase jets. J. Loss Prev. Ind., Vol. 4, p. 93-101.

Pirjola, L., Tsyro, S., Tarrason, L. and Kulmala, M. (2002) A monodisperse aerosol dynamics module - a promising candidate for use in the Eulerian long-range transport model. Journal of Geophysical Research (in press)

Seinfeld J.H., Pandis S.N., 1998, Atmospheric chemistry and physics, From Air Pollution to Climate Change, Wiley-interscience publication.

Slinn, W. G. N.: Precipitation scavenging, in Atmospheric Sciences and Power Production 1979, Chap 11. Division of Biomedical Environmental Research, U.S. Department of Energy, Washington, D.C., 1983.

Zhang, X., and A.F. Ghoniem, 1993: A computational model for the rise and dispersion of wind-blown, buoyancy-driven plumes - I". Neutrally stratified atmosphere, Atmos. Evv., 15, 2295-2311.

Zilitinkevich S, Johansson P-E, Mironov D V and Baklanov A, 1998, A similarity-theory model for wind profile and resistance law in stably stratified planetary boundary layers. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 74-76, 209-218.

Zilitinkevich S, Baklanov A, Rost J, Smedman A-S, Lykosov V and Calanca P, 2002, Diagnostic and prognostic equations for the depth of the stably stratified Ekman boundary layer, Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 128, 25-46.

Zilitinkevich, S and Baklanov A, 2002, Calculation of the height of stable boundary layers in operational models, Boundary-Layer Meteorology, 105, 389-409