

**Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de
modélisations 3D pour des scénarios de dispersion
atmosphérique en situation accidentelle**

**Rapport de synthèse des travaux du Groupe de Travail
National**



N° de version	Date	Commentaire
2.0	Octobre 2016	Prise en compte des remarques utilisateurs formulées lors de la réunion du 13/09/2016
1.0	Juillet 2015	Première version publiée Ref : DRA-15-148997-06852A

Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations 3D pour des scénarios de dispersion atmosphérique en situation accidentelle

Rapport de synthèse des travaux du Groupe de Travail National

Nota : Par convention il est entendu que dans ce document, « modèles et outils 3D » se rapportent exclusivement aux outils et modèles relatifs aux phénomènes de dispersion atmosphérique.

Groupe de travail créé à la demande du ministère en charge de l'écologie, représenté par :
F. Veyssilier et C. Pecoult

Piloté par l'INERIS : Jean Marc Lacome et Benjamin Truchot (INERIS)¹,

Auquel ont participé : A. Albergel (ARIA), P. Armand (CEA), X. Boesflug (CIMES), N. Boisson (INSA Lyon), P. Calot (SPEICHIM PROCESSING), B. Carissimo (EDF/CEREA), A. Carrau (FASIS, EDF), A. Champassith (TECHNIP), B. Chardin (URS), J. Commanay (APSYS), A. Daubarede (SOLVAY), C. Desut Dhaultfoeuille (IRSN), L. Donnat (TOTAL), G. Dussin (UIC), B. Geniaut (GDF), M. Gossin (EUROCFD), M. Ichard (GEXCON), S. Jallais (Air Liquide), C. Lapierre (IRSN), M. Muller (IRSN), M. Nibart (ARIA), C. Olry (ARIA), E. Pacard (SOLVAY), S. Peruccio (PERSTORP), JL Revel (Rhodia), L. Soulhac (EC Lyon), V. Soumoy (EUROCFD), C. Souprayen (FLUIDYN), A. Stassinopoulos (TECHNOVA), M. Till (Air Liquide), A. Tripathi (FLUIDYN), B. N. Vazquez (GDF), E. Vyazmina (Air Liquide).

Ce rapport a été rédigé par l'INERIS, il constitue la synthèse des discussions et travaux du groupe de travail.

¹ Contact : benjamin.truchot@ineris.fr

DEFINITIONS

Cellule (maille) : Élément volumique unitaire du domaine de calcul, voir maillage.

CFD : Abréviation anglaise pour Computational Fluid Dynamics, soit Mécanique des Fluides Numérique en français. Ensemble d'outils numériques impliquant l'utilisation de calculateurs pour la résolution des équations discrétisées de Navier-Stokes, équations décrivant le comportement des fluides, et comprenant donc la simulation de l'écoulement et des phénomènes de dispersion.

Convergence en maillage : Pour certaines approches de modélisation, les résultats obtenus sont dépendants de la taille des cellules du maillage pour des cellules supérieures à une certaine taille critique. L'étude de sensibilité doit permettre de démontrer l'atteinte de cette taille critique au travers l'indépendance des résultats à la taille de maille. L'indépendance est jugée acceptable pour un écart inférieur à 5%.

LPDM (Lagrangian Particle Dispersion Model) : Modèle simulant la dispersion des émissions atmosphériques par le mouvement stochastique de particules virtuelles.

Maillage : Ensemble des éléments de volumes unitaires (cellules) utilisés pour discrétiser le domaine de calcul. Il convient de distinguer plusieurs types de maillages selon leurs caractéristiques géométriques.

Modèle : Un modèle peut être physique ou numérique. Un modèle physique est un ensemble d'équations mathématiques décrivant un phénomène physique. Il sera ainsi fait mention de modèles de turbulence, de conditions limites ou encore de représentation du terme source. Un modèle numérique est une méthodologie utilisée pour résoudre les systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP), schémas de discrétisation spatiale, discrétisation temporelle, méthodes algébriques ou itératives de résolution par exemple.

Modèles et outils tridimensionnels (3D) : Modèles et outils capables de prédire le comportement tridimensionnel d'un rejet atmosphérique en prenant en compte explicitement les obstacles naturels ou anthropiques susceptibles d'influencer la dispersion.

Modèles gaussiens et intégraux pour la dispersion : Modèles et outils basés sur un ensemble d'équations simplifiées et sur des valeurs empiriques permettant une résolution rapide des phénomènes de dispersion sous réserve d'hypothèses.

Nombre de Prandtl : nombre adimensionnel représentant le rapport entre la diffusivité de quantité de mouvement et la diffusivité thermique.

Nombre de Schmidt : nombre adimensionnel représentant le rapport entre la diffusivité de quantité de mouvement et la diffusivité moléculaire.

Outil de simulation : Un outil de simulation est un logiciel de calcul proposant d'utiliser un ou plusieurs modèles physiques. Ces outils peuvent être commerciaux ou libres.

Utilisateur : L'utilisateur est la personne, au sens personne morale, qui réalise les simulations de dispersion atmosphérique dans l'étude réglementaire. C'est cette personne

qui devra justifier du bon usage de l'outil de calcul et en particulier être l'auteur des cas de validation présentés dans l'annexe dédiée. En d'autres termes, les cas de validation ne devront pas être fournis par le développeur du logiciel à ses utilisateurs **mais bien réalisés par chacun de ses clients.**

Abréviations

Symbole	Signification
BP	Bonne Pratique
CL	Conditions aux Limites
CFD	Computational Fluid Dynamics / Mécanique des Fluides Numérique
CLA	Couche Limite Atmosphérique
CLS	Couche Limite de Surface
DNS	Direct Numerical Simulation / Simulation numérique directe
EDD	Etude De Danger
EDP	Equations aux Dérivées Partielles
EFP	équation de Fokker-Planck
ERP	Equivalent Roughness Panel (zone de rugosité de 0,12 à 0,24 m)
PDF	fonction de densité de probabilité (<i>Probability Density Function</i>)
LES	Large Eddy Simulation / Simulation des Grandes Echelles
LIE	Limite Inférieure d'Explosivité
LSE	Limite Supérieure d'explosivité
LPDM	Lagrangian Particles Dispersion Model / Modèle de dispersion lagrangien particules
MEDDE	Ministère de l'Ecologie, du Développement Durable Et de l'Energie
PPRT	Plan de Prévention des Risques Technologiques
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes / Approches moyennées de la turbulence
SEI	Seuil des Effets Irréversibles
SEL	Seuil des Effets Létaux
URA	Uniform Roughness Area (zone de rugosité de 0,01 à 0,02 m)

NOTATIONS

Symbole	Signification
A	Fonctions utilisées pour l'évaluation du profil de vent et également classes de stabilité
B	
b	Constante
c	Vitesse du son
C_p	Chaleur spécifique à pression constante
C_μ	Constante du modèle k- ε permettant de relier la viscosité turbulente aux grandeurs calculées (k et ε)
C	Concentration
D	Diffusivité moléculaire
D_t	Diffusivité turbulente
f	Force de Coriolis
Fr	Nombre de Froude
g	Constante de gravité
h	Hauteur de la CLA
H_0	Flux de chaleur sensible
k	Energie cinétique turbulente
l_m	Longueur de mélange
L_{MO}	Longueur de Monin-Obukhov
L_{MBL}	Correction de longueur pour le calcul des profils de vent
Ma	Nombre de Mach
P	Pression
Pr	Nombre de Prandtl
Pr_t	Nombre de Prandtl turbulent
R	Constante des gaz parfaits
Re	Nombre de Reynolds

Ri	Nombre de Richardson
Sc	Nombre de Schmidt
Sc_t	Nombre de Schmidt turbulent
T	Température
u	Vitesse
U_0	Vitesse à l'altitude de référence
U_p	Vitesse des particules
u^*	Vitesse de frottement
X_p	Position de la particule
$\underline{x}$	Vecteur position
z	Hauteur par rapport au sol
z_i	Hauteur de la couche de mélange
z_0	Hauteur de rugosité
γ	Rapport des chaleurs spécifiques
ε	Taux dissipation scalaire
θ	Température potentielle
θ_{sol}	Température potentielle au sol
κ	Constante de Von Karman
λ	Diffusivité thermique
λ_τ	Diffusivité thermique turbulente
μ	Viscosité dynamique
ν	Viscosité cinématique
ν_t	Viscosité turbulente
ρ	Densité de l'air ambiant
ρ_i	Densité de l'espèce i
σ_{ij}	Tenseur visqueux

τ_{ij}	Tenseur de Reynolds
τ_n	Temps caractéristique de l'échelle de Kolmogorov
ψ_H	Fonction universelle
ψ_M	Fonction universelle

SOMMAIRE

Abréviations	5
NOTATIONS	6
SOMMAIRE	9
0. Résumé non technique	11
0.1 Rappel du contexte	11
0.2 Les différentes familles de modèles utilisés	12
0.2.1 Modèles CFD	12
0.2.2 Modèles « mass consistent » associés à un modèle de dispersion	13
0.3 Points essentiels identifiés	14
0.4 Liste des bonnes pratiques	15
0.5 Données de sortie pour présenter les résultats d'une simulation 3D	25
0.6 Synthèse	25
1. Introduction et contexte	27
1.1 Objectifs et champs d'application du guide	28
1.2 Organisation du document	28
2. Domaines d'application	31
2.1 Intérêt de la modélisation 3D pour les études réglementaires	31
2.2 Situations accidentelles concernées	32
2.2.1 Situations industrielles recensées	33
2.2.2 Résultats de modélisation attendus	33
2.2.3 Représentation des résultats dans les études réglementaires, possibilités de prise en compte de la rose des vents et choix des configurations	34
2.2.4 Sorties attendues d'une modélisation 3D dans une étude réglementaire	34
2.2.5 Mise en œuvre d'une modélisation 3D	36
2.3 Modélisation du terme source	37
2.3.1 Evaluation du terme source	37
2.3.2 Type de perte de confinement	38
2.3.3 Type de produit	38
2.3.4 Evolution du terme source	39
2.4 Intégration du terme source dans un outil 3D	40
2.4.1 Rejet sous haute pression	41
2.4.2 Evaporation de nappe	41
2.4.3 Ruine de capacité	41
2.5 Calcul des distances d'effet toxiques	43
3. Notions fondamentales sur les écoulements atmosphériques	45
3.1 Qualification des écoulements pour les rejets atmosphériques	45
3.2 Structure de l'écoulement atmosphérique	47
3.3 Notions de couche de stabilité atmosphérique	48
3.4 Grandeurs caractéristiques d'un écoulement atmosphérique	51

3.5	Relation entre classes de Pasquill et profils caractéristiques	51
3.5.1	Définition des profils atmosphériques	52
3.5.2	Représentation de la couche limite de surface	53
3.5.3	Transport des profils	54
4.	Brève description des modèles de calcul	57
4.1	Les modèles CFD	57
4.1.1	Modélisation des phénomènes turbulents	58
4.1.2	Spécificité des écoulements turbulents atmosphériques	61
4.2	Autres familles de modèles d'écoulement	65
4.2.1	Modèles Mass consistent pour l'écoulement	65
4.2.2	Fonctionnement	65
4.2.3	Turbulence	66
4.2.4	Modélisation de la dispersion dans ces modèles	66
4.2.5	Développements récents	67
5.	Modèles physiques et numériques	69
5.1	Résolution numérique	69
5.1.1	Discretisation des équations	69
5.1.2	Schémas numériques	70
5.1.3	Domaine de validité	71
5.2	Modélisation de l'environnement	72
5.3	Modélisation des effets d'une mesure de maîtrise des risques	72
6.	Simulations numériques	73
6.1	Etape de mise en données d'une simulation 3D	73
6.2	Cas d'études	74
6.2.1	Cas n°1 – Dispersion en champ libre	74
6.2.2	Cas n°2 – Dispersion en présence d'obstacles	76
6.2.3	Cas n°3 - Validation des bonnes pratiques sur un cas expérimental	78
7.	Conclusions	83
8.	Références	84
9.	Listes des annexes	91

0. RESUME NON TECHNIQUE

Ce résumé non technique présente une synthèse du Guide de Bonnes Pratiques pour la réalisation de modélisations 3D pour des phénomènes dangereux de dispersion atmosphérique en situation accidentelle. Il est principalement destiné aux services instructeurs en charge de l'examen des dossiers et aux industriels réalisant ou faisant réaliser ce type de modélisations. L'ensemble des notions nécessaires est décrit dans les différents chapitres et annexes de ce guide. Il est fait l'hypothèse que le lecteur a une bonne connaissance de la réglementation en vigueur et des connaissances de base en mécanique des fluides. Ce résumé fournit également une brève description des différentes approches 3D, la liste des bonnes pratiques identifiées par un groupe de travail mis en place par le ministère en charge de l'écologie et une grille d'évaluation pour l'instruction des dossiers contenant des modélisations tridimensionnelles.

Les termes soulignés et en italiques dans le présent résumé sont définis dans le glossaire.

0.1 RAPPEL DU CONTEXTE

Depuis plusieurs années, les outils 3D sont de plus en plus utilisés dans la modélisation des conséquences de phénomènes dangereux, incendie, dispersion atmosphérique mais aussi explosion. Concernant la modélisation des phénomènes de dispersion atmosphérique accidentelle, l'utilisation de telles approches dans des études de dangers utilisées pour la définition de Plan de Prévention des Risques Technologiques (PPRT) a non seulement mis en évidence des écarts significatifs entre différents codes 3D mais également avec les modèles Gaussiens et Intégraux utilisés plus traditionnellement. La reconnaissance et la banalisation de l'usage des outils 3D par la communauté scientifique conduisent inévitablement à prévenir toute mauvaise utilisation de ces derniers et nécessitent d'explicitier les raisons ayant conduit à l'observation de tels écarts. Dans ce but et à la demande du ministère en charge de l'écologie, un groupe de travail national a été créé en septembre 2009 afin de constituer un guide des bonnes pratiques pour la modélisation au moyen d'outils tridimensionnels de la dispersion atmosphérique des rejets à caractère accidentel.

Le mandat de ce groupe de travail se focalisait sur les points suivants :

- Expliquer simplement les bases scientifiques des modèles tridimensionnels afin de justifier plus aisément leurs résultats vis-à-vis des données d'entrée et des paramètres sensibles ;
- Constituer un guide de bonnes pratiques pour la mise en œuvre des modèles tridimensionnels pour la prédiction des conséquences d'une dispersion atmosphérique accidentelle d'une substance ou préparation dangereuse ;
- Apporter à l'administration des règles de lecture critique des dossiers techniques.

Le présent résumé indique les points essentiels de ce travail. Il présente les différentes bonnes pratiques proposées ainsi que les raisons et justifications de celles-ci. Enfin, une grille de lecture des modélisations 3D est présentée, en lien avec ces bonnes pratiques.

Il est par ailleurs important de noter que ces bonnes pratiques ont été établies au travers de la réalisation successive de trois cas de modélisation. Les deux premiers, fictifs, ont permis de

mettre en évidence les origines des écarts observés et de construire les bonnes pratiques. L'objectif était de limiter les écarts en prédisant au mieux les phénomènes physiques, et donc l'évolution des concentrations en aval d'un point de rejet.

Les bonnes pratiques ont enfin été mises en pratique sur un cas expérimental. Ce dernier cas a permis de vérifier :

- La capacité des outils de modélisation à prédire l'évolution des valeurs de concentration en aval d'un point de rejet, par comparaison aux mesures expérimentales ;
- L'efficacité des bonnes pratiques pour homogénéiser les résultats des simulations, pour différents utilisateurs avec différents codes de calcul.

A noter qu'au-delà de ces trois cas ayant servi de fils conducteurs au groupe de travail, chaque utilisateur d'outils est amené à réaliser différents cas de validation par ailleurs, comme imposé dans les bonnes pratiques.

0.2 LES DIFFERENTES FAMILLES DE MODELES UTILISES

Deux grandes familles de modèles sont utilisées pour la modélisation 3D des phénomènes de dispersion atmosphérique en situation accidentelle :

- les modèles dits CFD (Computational Fluid Dynamics ou mécanique des fluides numérique en français),
- les approches « mass consistent » associées à un modèle de dispersion spécifique.

Ces deux approches sont décrites brièvement ci-après.

0.2.1 Modèles CFD

Les modèles CFD consistent à résoudre numériquement le système des équations aux dérivées partielles (EDP) dits de Navier Stokes. Ce système décrit le mouvement d'un fluide. Ces équations sont résolues dans un domaine de calcul discrétisé. Cela signifie que le domaine d'intérêt est reproduit numériquement et décomposé en un certain nombre d'éléments volumiques unitaires, les mailles. L'ensemble de ces mailles constitue le maillage.

Le système d'équations de la mécanique des fluides comporte 5 équations fondamentales :

- la conservation de la masse (ou équation de continuité),
- la conservation de la quantité de mouvement (3 équations),
- la conservation de l'énergie.

Associées à une loi d'état, c'est-à-dire une équation reliant entre elles pression, température et densité dans le fluide, leur résolution permet de déterminer la densité, la vitesse, la température et la pression en tous points du domaine de calcul ou, plus exactement, au niveau de chaque maille. Afin de déterminer l'évolution de la concentration en cas de rejet accidentel, une équation aux dérivées partielles de conservation est ajoutée au système pour chacune des substances ou préparations dangereuses introduites.

Enfin, la discrétisation des équations susmentionnées fait disparaître certaines informations, et plus précisément une partie des phénomènes turbulents. Il convient ainsi d'introduire dans l'outil un modèle de turbulence pour considérer ces derniers. Deux grandes familles de modèles sont disponibles avec des avantages et des contraintes différents :

- les approches moyennées, ou RANS (*Reynolds Average Navier Stokes equations*),

- les approches de simulation aux grandes échelles ou LES (*Large Eddy Simulation*).

Dans les modèles RANS, l'ensemble de la turbulence est modélisé en ajoutant des équations de transport supplémentaires, généralement l'énergie cinétique turbulente et la dissipation. Il s'agit couramment d'un modèle dit k- ϵ dont il existe de nombreuses variantes.

Pour les modèles LES, la majeure partie de la turbulence est résolue explicitement. La résolution spatiale et temporelle des équations de Navier Stokes permet de déterminer cette partie de la turbulence. La partie résiduelle est modélisée, ce qui signifie qu'un modèle de turbulence, plus exactement un modèle de sous maille, est nécessaire. Là encore, il existe différentes approches de modélisation pour cette turbulence non résolue. Ces approches nécessitent des maillages plus fins que ceux requis pour les approches de type RANS.

0.2.2 Modèles « mass consistent » associés à un modèle de dispersion

Cette seconde famille de modèles s'appuie sur la succession de deux grandes étapes :

- la résolution de l'écoulement sans prise en compte du rejet accidentel,
- le calcul de la dispersion d'un produit dangereux suite au rejet.

La première étape consiste à calculer le champ de vitesse dans le domaine de calcul. Comme pour les modèles CFD, il convient au préalable de discrétiser le domaine de calcul, c'est-à-dire de construire un maillage.

Dans un premier temps, les données météorologiques fournies en entrée du modèle en charge de l'écoulement sont interpolées dans l'espace.

Dans un second temps, une unique équation aux dérivées partielles est résolue : il s'agit de l'équation de continuité, simplifiée sous l'hypothèse d'un écoulement incompressible. La résolution numérique de cette équation permet de déterminer la vitesse en chaque maille du domaine. Cette démarche permet de corriger et d'ajuster l'écoulement en fonction de la topographie du terrain, cet ajustement dépend notamment de la stabilité atmosphérique.

Enfin, afin de prendre en compte les perturbations générées par la présence d'obstacles dans l'écoulement, des corrélations algébriques permettent également de déterminer la turbulence dans le sillage de ceux-ci. Cette turbulence « locale » associée aux obstacles pris en compte explicitement est alors combinée à la turbulence atmosphérique de plus grande échelle.

Les champs de vent, température et turbulence étant connus, il convient ensuite de modéliser la dispersion d'une substance ou préparation dangereuse en cas de rejet accidentel. Deux approches sont alors possibles, l'approche eulérienne et l'approche lagrangienne à particules (LPDM).

Pour une approche eulérienne, la concentration en substance ou préparation dangereuse est déterminée en résolvant l'équation de conservation pour cette espèce sur le maillage construit précédemment pour calculer l'écoulement. La différence principale avec les modèles CFD réside dans l'interaction plus faible entre le rejet et l'écoulement atmosphérique.

Pour une approche lagrangienne à particules, le rejet est reproduit par une injection de particules fictives qui sont transportées par l'écoulement atmosphérique. Le principe fondamental de la dynamique appliqué aux particules permet de déterminer le mouvement global du panache. La diffusion induite par la turbulence est introduite par des coefficients qui sont fonction de la combinaison entre :

- la turbulence « locale » associée aux obstacles pris explicitement en compte,
- la turbulence atmosphérique de plus grande échelle.

Pour ces approches, l'écoulement ambiant utilisé en conditions initiales est généralement figé et le rejet n'engendre pas de modification de celui-ci. L'écoulement impacte en revanche le comportement du jet. L'impact du rejet sur le champ de vent est pris en compte dans les modèles au niveau des particules mais n'est pas visible en tant que modification du champ de vent.

0.3 POINTS ESSENTIELS IDENTIFIES

En préambule à toute utilisation, il convient de disposer d'une étude de validation réalisée par l'utilisateur de l'outil². La validation par l'utilisateur est un point de passage essentiel car, au-delà de la validation de l'outil, il impose à l'utilisateur de s'interroger sur le contenu et les limites de l'outil.

Au-delà de cette phase cruciale de validation, les paramètres clefs identifiés comme particulièrement influents sur le résultat d'une simulation, et donc sur lesquels il convient d'être particulièrement attentifs, sont :

- la constitution du maillage,
- l'utilisation de conditions aux limites adaptées,
- la définition du terme source et son introduction dans l'outil de modélisation,
- la modélisation de la turbulence.

Comme indiqué précédemment, la résolution numérique des équations de la mécanique des fluides nécessite de découper le domaine de calcul en éléments volumiques unitaires, les mailles. La bonne réalisation d'un calcul de mécanique des fluides impose de respecter certaines règles lors de la génération du maillage, et en particulier de démontrer par une étude de sensibilité au maillage une influence suffisamment faible de celui-ci. Cela signifie que, pour déterminer la taille de maille adapté au cas modélisé, l'utilisateur devra présenter plusieurs calculs avec des maillages de tailles différentes, 0,8 et 1,2 fois la taille du maillage de référence, dans la zone d'intérêt, jusqu'à obtenir des résultats comparables, c'est-à-dire un écart inférieur à 10% pour la distance à la concentration d'intérêt (LIE ou SEI) à. Par ailleurs, pour les maillages cartésiens dans la majorité des cas, le choix sera fait d'un alignement des mailles dans la direction du vent ou, pour des jets sous fortes pressions dans l'axe du jet si la concentration d'intérêt est la LIE.

Le deuxième élément fondamental dans la modélisation de la dispersion atmosphérique d'un produit en situation accidentelle est la représentation du profil de vent. En effet, dans les approches gaussiennes, classiquement utilisées dans les études réglementaires, certains choix ont été faits pour représenter les différentes classes de stabilité et de vent de manière unique. Ces choix ont conduit aux écarts types caractéristiques utilisés dans les études réglementaires. Des choix comparables ont dû être faits pour construire les profils de vent à utiliser pour les modélisations 3D, mais aussi pour les écarts types des modèles s'appuyant sur une approche « mass consistent ». Les points majeurs sont alors de prescrire des profils représentatifs de

² La notion de validation d'un outil est reprise dans la Bonne Pratique Validation et définie plus largement au travers du dossier type de validation présenté en annexe X du présent rapport.

vitesse, de température et de turbulence mais également de démontrer la capacité des outils de modélisation à maintenir ces profils dans le domaine de calcul, en champ libre.

Quelle que soit l'approche retenue pour la modélisation, l'introduction du terme source est le troisième point fondamental identifié. En effet, que ce soit pour les approches gaussiennes classiques ou pour l'utilisation de codes 3D, la prise en compte du terme source nécessite le recours à un modèle dédié. Dans le cas des modèles 3D, les modèles dédiés peuvent également faire intervenir des modèles similaires à ceux des modèles intégraux. Cependant, la physique du rejet diffère de celle de la dispersion à grande échelle et, de ce fait, les modèles physiques utilisés sont différents. Les modèles utilisés pour la dispersion à grande échelle et ceux utilisés pour la modélisation fine du terme source sont donc différents bien qu'étant tous deux des modèles 3D. Il convient également de souligner que modéliser terme source et dispersion atmosphérique dans une même simulation peut s'avérer délicat, les sous modèles physiques ne permettant pas nécessairement de prendre en compte la spécificité des deux phénomènes.

Le dernier point clef souligné dans ce travail concerne la modélisation des phénomènes de turbulence, point central de toute modélisation en mécanique des fluides. De nombreux modèles peuvent être utilisés pour cela, chacun de ces modèles disposant de spécificités qui lui sont propres. Quelle que soit l'approche choisie, elle doit rendre compte des spécificités de la turbulence atmosphérique qui correspond à un régime d'écoulement particulier.

Les réflexions sur ces 4 thématiques fondamentales ont conduit à l'élaboration des bonnes pratiques présentées au paragraphe suivant.

0.4 LISTE DES BONNES PRATIQUES

Afin de cadrer les modélisations qui pourraient être effectuées dans le contexte des études réglementaires et d'assurer la qualité de celles-ci, des bonnes pratiques reprises dans le Tableau 1, ont été identifiées. En parallèle de ces bonnes pratiques, ce tableau présente la grille de lecture associée avec les points qui devront être vérifiés, pour chacune d'elle, lors de l'instruction du dossier.

Les bonnes pratiques suivies d'un astérisque sont similaires à celles identifiées au cours d'un projet européen qui a regroupé différents experts internationaux (projet COST [16]). Afin de faciliter la lecture de ces bonnes pratiques, plusieurs catégories ont été définies. La première série de bonnes pratiques concerne la validation du logiciel et le choix de son domaine d'utilisation. Ces éléments devront être détaillés dans un dossier de validation joint en annexe des études réglementaires pour en faciliter l'analyse. Les bonnes pratiques suivantes sont réparties suivant les points essentiels mentionnés au paragraphe précédent. Pour certaines, des ajustements sont possibles, il conviendra alors de démontrer leur pertinence. Un exemple de démonstration adaptée est proposé en annexe XI.

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
Dossier de validation			
BP-Validation Applicable à tous les modèles	BP16 : La validation d'un outil de modélisation doit comporter plusieurs étapes depuis des cas fondamentaux jusqu'à des cas à grande échelle représentatifs.	L'utilisateur du code démontrera par cette annexe sa capacité à : • Modéliser des configurations de référence ; • Reproduire numériquement les résultats expérimentaux pertinents.	Les points à vérifier sont : • L'exhaustivité des cas modélisés, • Les écarts entre expériences et modèles.
BP-Maintien-des-profils	BP4 : Le profil de vent doit être conservé, en champ libre, entre l'entrée et la sortie du domaine, pour chacune des classes de vent utilisées pour modéliser la dispersion d'un nuage toxique	L'utilisateur devra justifier du maintien des profils atmosphériques utilisés en entrée (vitesse, température et turbulence) sur la longueur d'intérêt, c'est-à-dire la distance d'effet pour le phénomène considéré, dans la limite de 2 km, en champ libre. Le maintien strict étant délicat, il conviendra de s'assurer qu'en sortie du domaine les profils sont bien représentatifs de la même classe de stabilité atmosphérique que celle imposée en entrée. L'utilisateur explicitera la méthodologie retenue pour le maintien de ces profils et, en particulier les ajustements spécifiques s'ils ont été nécessaires et le choix des conditions aux limites.	L'inspecteur vérifiera les comparaisons fournies pour les grandeurs caractéristiques (L_{MO} et vitesse à la hauteur de référence notamment).

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
Construction du maillage			
BP-Indépendance	BP9 : Pour les approches RANS, il conviendra de réaliser une <u>étude de sensibilité</u> montrant la faible influence du maillage sur les résultats, c'est-à-dire un écart de moins de 10% sur les distances calculées (LIE ou distance à la concentration d'intérêt) pour : • Un volume de maille égale à 0,8 fois le volume de référence, • un volume de maille égale à 1,2 fois le volume de référence. Ces modifications de taille ne s'entendent que dans la zone d'intérêt.	Pour les approches RANS le modélisateur fournira une étude de sensibilité au maillage.	Il conviendra de vérifier que la modification de la taille des mailles entre les cas ne modifie pas les résultats dans les critères précisés (10% d'écart sur la distance d'intérêt).
	BP9 : Pour un calcul LES, il conviendra de justifier l'utilisation d'une taille de maille dans la zone inertielle en présentant le ratio turbulence modélisée sur turbulence totale. Une étude de sensibilité sera également présentée sous les mêmes conditions que pour les approches RANS.	Pour les approches LES le modélisateur justifiera que le ratio turbulence modélisée sur turbulence totale est inférieur à 20% [103].	Il conviendra de vérifier que la modification de la taille des mailles entre les cas ne modifie pas les résultats dans les critères précisés (10% d'écart sur la distance d'intérêt).
	BP9 : Pour les approches mass-consistent, justifier l'indépendance des résultats, concentrations et doses d'intérêt (SEI, SEL et SELS ou LIE et LSE), au maillage et au nombre de particules (cas des modèles Lagrangiens). De la même manière que pour un outil CFD, un écart de moins de 10% devra être démontré en doublant le nombre de particules et en modifiant le maillage d'un facteur 0,8 et 1,2 comme spécifié ci-dessus. voir 5.1.1 page 69 Annexe 11	Le modélisateur fournira une étude de sensibilité au nombre de particules.	Il conviendra de vérifier que la modification de la taille des mailles et de nombre de particules entre les cas ne modifie pas les résultats dans les critères précisés (10% d'écart sur la distance d'intérêt).

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
BP-Maillage-Bâtiments	BP11 – Dans la zone d'intérêt, c'est-à-dire dans le panache de concentration supérieur au SEI (produit toxique) ou à la LIE (produit inflammable), le nombre de mailles utilisé dans chacune des directions des bâtiments et dans les espaces les séparant devra être argumenté sur la base des caractéristiques des bâtiments et de l'écoulement. A défaut de justification, une dizaine de mailles devra être utilisée dans chacune des directions. ,	Le modélisateur fournira des vues du maillage permettant de distinguer précisément les choix de maillage au niveau des bâtiments.	L'inspecteur vérifiera que le nombre de mailles au niveau des bâtiments sont en accord avec les préconisations.
BP-Facteur-de-forme	BP13 - Le facteur de forme, rapport entre la plus grande et la plus petite dimension caractéristique d'une <u>maille</u> , devra être inférieur à 10. Les justifications pouvant permettre de s'affranchir de cette BP devront s'appuyer sur les caractéristiques du <u>schéma numérique</u> utilisé ou sur les caractéristiques particulières de l'écoulement. Les éléments à apporter sont explicités en annexe XI.	Le modélisateur présentera les vues nécessaires du maillage pour démontrer le respect de cette BP.	L'inspecteur s'appuiera sur les vues du maillage pour s'assurer du respect de la BP.

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
BP-maillage-et-vent	BP14 - Sauf justification et afin de limiter les phénomènes de <u>diffusion numérique</u>, le maillage devra être construit dans l'axe du vent, pour des <u>maillages</u> cartésiens. Les justifications permettant de s'affranchir de cette BP devront préciser les caractéristiques du schéma permettant de prévenir le phénomène de diffusion numérique excessive. Les éléments à apporter sont explicités en annexe XI. A noter, dans le cas d'un jet sous pression et lorsque la concentration d'intérêt est la LIE, le maillage sera réalisé dans l'axe du jet.	Le modélisateur présentera le maillage utilisé et positionnera sur celui-ci la direction du vent et celle du rejet.	Pour les maillages cartésiens, l'inspecteur s'assurera que l'axe du vent est colinéaire à l'une des directions du maillage.
BP-Schéma-numérique	BP15 - Pour tous les modèles, utilisation de <u>schémas numériques</u> de discrétisation spatiale et temporelle d'ordre 2 ou supérieur. Cette bonne pratique est décrite au § 5.1.1, page 69.	L'utilisateur présentera le détail du schéma numérique utilisé, en temps et en espace.	L'inspecteur vérifiera que l'ordre du schéma est bien supérieur à 2.
BP-Evolution-maillage	BP12 - La raison géométrique entre les mailles doit être inférieure à 1,2. Au niveau du sol, les tailles de maille dans la direction verticale seront choisies en cohérence avec le modèle utilisé (loi de paroi).	L'utilisateur présentera des vues en plan du maillage mettant en évidence l'évolution de la taille de maille, notamment dans le plan vertical.	L'inspecteur vérifiera que les tailles de mailles choisies sont en accord avec cette bonne pratique.
Utilisation de conditions aux limites adaptées			
BP-Profil-de-vent	BP3 – Les profils de vent représentant les différentes classes de stabilité devront être construits sur la base des équations établies par le groupe de travail.	Le modélisateur présentera les profils de vent utilisés, sous forme d'équation et de graphique. Il comparera ces profils aux profils de l'annexe I.	L'inspecteur vérifiera que les profils fournis sont identiques à ceux décrits en annexe I.

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
BP-Eloignement-CL	BP10 - Pour tous les modèles, les <u>conditions aux limites</u> du domaine doivent être suffisamment éloignées des obstacles (§ 5.1.1, page 69), soit : • Une distance supérieure à 10 fois la hauteur maximale de ces obstacles pour la ou les sortie(s) du domaine à l'exception de la surface supérieure du domaine, • une distance supérieure à 5 fois la hauteur maximale de ces obstacles pour toutes les autres conditions aux limites.	Le modélisateur présentera les vues nécessaires de la géométrie permettant de démontrer le respect des bonnes pratiques.	L'inspecteur vérifiera que les distances entre les bâtiments et les limites du domaine sont conformes à la bonne pratique.
Définition du terme source et son introduction dans l'outil de modélisation.			
BP-Terme-source	BP1 - Comme pour toutes les autres approches, la prise en compte du terme source est un élément essentiel de la modélisation 3D. L'utilisateur détaillera et justifiera ses choix en d'intégration du terme source dans l'outil 3D utilisé.	L'étude doit préciser comment ce terme source est intégré dans l'outil 3D (exemple source volumique/surfacique, simplification due au changement de phase, ...). L'utilisateur démontrera sa prise en compte correcte dans la modélisation 3D (démonstration de la conservation des grandeurs fondamentales).	Comme pour les approches Intégrales ou Gaussiennes, il conviendra de s'assurer d'une modélisation correcte du terme source.

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
BP-Champ-de-vent	BP2 - Pour tous les modèles, les effets de densité et de jets liés à l'émission doivent être pris en compte s'ils sont significatifs pour la dispersion, c'est-à-dire s'il s'agit d'un gaz lourd ou léger pour le premier point et dès lors que la vitesse du jet est supérieure à 5 fois la vitesse du vent au niveau du point de rejet pour le second point. La prise en compte des écoulements diphasiques devra être explicitée. Les précisions sont apportées au § 2.4, page 40 et en Annexe 2. Le choix de considérer un rejet comme passif devra être justifié. Les éléments à apporter sont explicités en annexe XI.	L'utilisateur présentera le détail de l'approche utilisée en spécifiant la prise en compte ou non des effets liés au terme source. Si ces effets ne sont pas pris en compte, il apportera la démonstration de la non nécessité de cette prise en compte, par exemple en réalisant une comparaison avec et sans prise en compte de ces effets sur un cas simplifié.	L'inspection vérifiera que les éléments apportés par le modélisateur sont en accord avec la bonne pratique en s'appuyant sur les caractéristiques du terme source et la description fournie du modèle.
BP-Pas-temps-émission	BP7 – Pour les modèles LPDM , le pas de temps d'émission des particules doit être en cohérence avec la dynamique du rejet et les caractéristiques du maillage. § 2.4, page 40 et Annexe 2.	Le modélisateur présentera de manière explicite les choix de pas de temps réalisés.	L'inspecteur s'assurera de la cohérence entre les éléments fournis et le terme source.
BP-Nombre-de-particules	BP8 - L'utilisateur démontrera que le nombre de particules utilisé pour calculer les concentrations permet une incertitude inférieure à 5% (de l'ordre de 400 particules) [104].	Le modélisateur indiquera le nombre de particules dans les mailles de concentration égale à la concentration d'intérêt (LIE ou SEI)	L'inspecteur vérifiera que ce nombre de particules est bien supérieur à 400.

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Modélisateur	A vérifier lors de l'instruction
Modélisation de la turbulence			
BP-Sc-Pr	BP5 - Les <u>nombres de Schmidt et Prandtl</u> turbulents devront être pris égaux à 0,7, sauf justification par l'utilisateur d'une valeur différente au travers des cas de validation spécifiques. La valeur utilisée devra toutefois rester bornée entre 0,7 et 1,0. Ces nombres sont décrits au § 3.1 page 45. Les éléments de justification à apporter sont explicités en annexe XI.	Le modélisateur indiquera ces choix pour ces deux nombres sans dimension.	Il conviendra de vérifier que les valeurs utilisées sont en accord avec les valeurs prescrites.
BP-Turb-atmo	BP6 - Le modèle de turbulence utilisé doit permettre de prendre en compte les spécificités des écoulements atmosphériques.	Le modélisateur fournira une description du modèle de turbulence utilisé.	L'inspecteur vérifiera que ce modèle est compatible en s'appuyant sur le Tableau 4.

Tableau 1 : Synthèse des bonnes pratiques identifiées pour la réalisation des simulations 3D des cas de dispersion atmosphérique en situation accidentelle.

0.5 DONNEES DE SORTIE POUR PRESENTER LES RESULTATS D'UNE SIMULATION 3D

D'une manière générale, toutes les informations qui permettent de comprendre les hypothèses faites et les résultats obtenus devront être indiquées dans l'étude réglementaire. Les sorties pourront être par exemple :

- Des iso-surfaces en 3D pour les concentrations aux valeurs d'intérêt, en fonction du temps lorsque cela est pertinent. Cela permet d'appréhender les dimensions de nuage, à la Limite Inférieure d'Explosivité (LIE) ou au Seuil des Effets Irréversibles (SEI) par exemple.
- Des coupes 2D de concentration permettant de visualiser les concentrations, les écoulements et le niveau de turbulence. Une coupe verticale dans l'axe de l'écoulement et passant par le point de rejet ou encore des coupes horizontales au voisinage des hauteurs d'intérêts seront par exemple une bonne façon de présenter les résultats.
- L'évolution au cours du temps des doses pour les produits toxiques et éventuellement des masses explosibles pour les produits inflammables.

Par ailleurs, afin d'améliorer la lisibilité des résultats, le modélisateur devra présenter toutes les sorties nécessaires à la bonne compréhension des résultats et, en particulier, les distributions et profils de vitesse et des différentes grandeurs caractéristiques de la turbulence.

0.6 SYNTHESE

L'utilisation des outils de modélisation 3D dans les études réglementaires permettant la maîtrise de l'urbanisation autour des sites industriels apparaît aujourd'hui comme nécessaire. Ces outils permettent en effet de réaliser des modélisations intégrant de manière fine les phénomènes physiques mis en jeu lors d'une dispersion atmosphérique et, plus particulièrement, la présence d'obstacles d'origine naturelle ou anthropique.

Ils permettent également de prendre en compte, dimensionner, valider des mesures de maîtrise des risques qui pourraient être identifiées lors de l'analyse des risques, ce qui est impossible avec les logiciels communément utilisés à l'heure actuelle.

La complexité des modèles nécessite toutefois un niveau d'expertise élevé, tant pour leur utilisation que pour l'analyse et l'interprétation des résultats. De plus, la complexité des phénomènes physiques caractérisant une dispersion atmosphérique est telle que leur prise en compte dans de tels modèles nécessite un certain nombre de précautions.

Le présent document réalisé par le groupe de travail a permis de définir une liste de bonnes pratiques limitant la variabilité des résultats obtenus. Il faut noter qu'au cours de ce travail, le groupe s'est appuyé sur l'ensemble de l'état de l'art du domaine et certaines conclusions vont au-delà de ce qui est communément admis pour les outils intégraux. En particulier, les profils de vent définis pour chacune des classes s'appuient sur des travaux de recherche récents et sont bien plus précis que pour les approches actuelles. Lorsqu'ils étaient nécessaires, les arbitrages ont été faits de manière conservatoire.

La liste des pratiques, mais surtout la grille de lecture, devront permettre une lecture critique des études bien plus complètes que ce qu'il est possible de réaliser pour les outils actuellement utilisés.

Il faut enfin noter que ces bonnes pratiques ont été établies via la réalisation de trois cas de dispersion, modélisés par plus de dix personnes avec plus de 10 outils. Les résultats ont permis de démontrer la convergence des résultats sous réserve d'une utilisation correcte des outils de calcul et du respect des bonnes pratiques.

Il faut souligner qu'un tel travail et un tel niveau de réflexion n'ont jamais été réalisés pour les logiciels intégraux.

1. INTRODUCTION ET CONTEXTE

Dans le cadre des études réglementaires des installations classées, l'étude de scénarios accidentels de rejets de produits toxiques et/ou inflammables nécessite l'utilisation et la mise en œuvre de modèles de dispersion atmosphérique afin d'évaluer les zones d'effets potentiels. Les modèles utilisés peuvent être de nature et de complexité différente.

Il apparaît que, pour un même phénomène dangereux traité dans deux études réglementaires distinctes, les résultats pour la prédiction des zones ou distances d'effets peuvent être singulièrement différents.

A la question « Quels peuvent être les paramètres qui permettent d'interpréter les différences obtenues dans les études ? », les réponses sont multiples et de nature différente. Les raisons les plus fréquemment avancées sont, de manière non exhaustive :

1. les différences d'interprétation des hypothèses de base et /ou les difficultés à les retranscrire sous la forme de données d'entrée dans le modèle utilisé,
2. le terme source d'émission est estimé suivant une démarche ou un modèle différent,
3. la nature intrinsèque des modèles de dispersion atmosphérique utilisés est différente (intégral et CFD (Computational Fluid Dynamics) par exemple),
4. Pour des modèles de dispersion atmosphérique utilisés de nature identique, leur mise en œuvre ou certaines valeurs de paramètres du modèle, indépendants des données d'entrée (cités aux points 1 et 2) peuvent différer fortement,
5. les résultats obtenus par les modèles de dispersion atmosphérique sont identiques mais leur traitement et leur interprétation pour évaluer les effets ne sont pas équivalents.

Les points 1, 3 et 4 sont particulièrement cités lors de l'utilisation et la mise en œuvre de modèles de dispersion atmosphérique tridimensionnels. En particulier, il est souvent mis en avant l'utilisation de modèles qui permettent la prise en compte de l'impact d'environnements complexes (plus près de la problématique réelle : obstacles,...) sur le processus de dispersion atmosphérique par opposition aux modèles traditionnels gaussiens ou intégraux. Il est toutefois important de noter que l'utilisation de différents modèles simples peuvent également conduire à des résultats différents.

Les modèles 3D sont de plus en plus utilisés pour la modélisation de la dispersion atmosphérique. Ces modèles permettent de prendre en compte des phénomènes physiques supplémentaires liés, par exemple, à la présence de mesures de maîtrise des risques ou encore la topographie à proximité des sites. Les modèles 3D sont déjà utilisés dans d'autres contextes que les PPRT comme les études spécifiques de danger pour les tunnels ou encore les études spécifiques d'ingénierie incendie en application de l'arrêté du 05 Août 2002.

Fort de ce constat, le MEDDE a souhaité qu'un travail d'homogénéisation sur les pratiques de mise en œuvre des modèles les plus complexes soit réalisé afin :

- de clarifier les pratiques et de constituer un guide de bonnes pratiques de mise en œuvre des modèles *tridimensionnels* pour la modélisation de la dispersion atmosphérique des rejets à caractère accidentel,

- de faciliter la compréhension des écarts possibles entre les différents modèles (Gaussiens, Intégraux et tridimensionnels) sur l'évaluation des zones d'effets dans les études techniques réglementaires.

Le mandat du groupe se compose principalement des points suivants :

- Constituer un guide de bonnes pratiques de paramétrage et de mise en œuvre des modèles tridimensionnels de dispersion atmosphérique ;
- Permettre aux industriels et à l'administration d'avoir confiance dans les modèles de dispersion atmosphérique tridimensionnels et d'expliquer plus aisément leurs résultats.

Il est en outre à souligner que ce groupe de travail possède également un mandat « pédagogique » dans la mesure où il a pour mission la démocratisation et la vulgarisation des bases scientifiques, des avantages et des limites propres aux modèles tridimensionnels.

1.1 OBJECTIFS ET CHAMPS D'APPLICATION DU GUIDE

Les objectifs de ce guide identifiés par le groupe de travail sont :

1. D'identifier les critères qui justifient la mise en œuvre de modèles tridimensionnels ;
2. De définir les bonnes pratiques pour cette mise en œuvre ;
3. D'être accessible à tous, concepteurs de logiciels, bureaux d'études, administration, ...
4. De proposer une cartographie des modèles 3D actuellement utilisés et proposer des critères pour les modèles en développement pour qu'ils soient utilisables dans les études réglementaires en clarifiant leurs hypothèses et leurs limites, et leurs résultats comparés aux tests en grandeur nature disponibles ;
5. De décrire le post traitement des résultats des outils tridimensionnels au regard des objectifs des études réglementaires ;
6. De fournir une grille de lecture qualitative à usage de l'administration synthétisant les points essentiels.

Par contre, ce guide n'a pas pour objectif :

- de préconiser un outil au détriment d'un autre ;
- d'évaluer la pertinence des différents outils nominativement, l'évaluation étant faite sur les modèles.

1.2 ORGANISATION DU DOCUMENT

Le document est organisé de la manière suivante :

- Le chapitre 2 présente les domaines d'applications de la modélisation tridimensionnelle ;

- Le chapitre 3 rappelle les notions fondamentales sur les écoulements atmosphériques ;
- Le chapitre 4 décrit brièvement des modèles de calcul d'écoulement atmosphérique ;
- Le chapitre 5 décrit les modèles physiques et numériques destinés à la simulation de la dispersion atmosphérique accidentelle de produits dangereux ;
- Le chapitre 6 expose les simulations numériques réalisées par le groupe de travail sur 3 cas tests ;
- Une conclusion.

Le présent document comporte par ailleurs 9 annexes qui font partie intégrante du guide.

2. DOMAINES D'APPLICATION

2.1 INTERET DE LA MODELISATION 3D POUR LES ETUDES REGLEMENTAIRES

Dans le cadre des études des dangers, la modélisation des phénomènes dangereux et le calcul des distances d'effets associées sont historiquement réalisés à l'aide de modèles dits intégraux qui peuvent impliquer certaines hypothèses ou simplifications, telles que :

- Un terrain plat : la topographie et les obstacles sont représentés à travers une rugosité;
- La direction du vent et celle de la fuite sont les mêmes dans le plan longitudinal de la fuite,
- La vitesse de vent doit être suffisamment grande (généralement ces logiciels ne sont pas adaptés pour les situations de vent faible, vitesses inférieures à environ 2 m/s),
- Les résultats sont reportés à l'identique dans toutes les directions,

Une des conséquences de ces simplifications est que la distance d'effet calculée peut s'avérer non représentative d'un site. Dans les cas où ces simplifications ne sont pas possibles, il apparaît donc nécessaire de faire appel à d'autres types d'outils, les outils 3D. L'utilisation de ces outils s'avère plus particulièrement pertinente pour les différentes configurations explicitées ci-après.

- La prise en compte de la topographie du site et les différents obstacles.

Lorsque la topographie ou les obstacles n'ont a priori pas d'influence significative sur la dispersion, une approche consistant à considérer un terrain plat avec une hauteur caractéristique de rugosité constante, au moyen d'outils gaussiens ou intégraux reste préférable.

En dehors de ces cas, les phénomènes de dispersion sont beaucoup plus complexes, propres au site et l'utilisation d'un outil 3D est nécessaire. Ce type d'outil permet de prédire, par exemple, les zones de recirculation autour d'obstacles ou les phénomènes d'accélération ou de décélération autour d'une topographie marquée qui jouent un rôle important dans l'accumulation ou la dilution de panache.

Par ailleurs, la topographie ou la répartition d'obstacles n'étant pas isotrope, un modèle 3D permet de calculer une distance d'effet représentative pour chacune des directions choisies et ainsi de mieux prendre en compte les spécificités d'un site. Les modèles gaussiens sont par ailleurs incapables de prendre en compte le confinement du nuage par le tissu urbain ou industriel. Cet effet est pris en compte intrinsèquement dans un outil 3D.

Les outils 3D permettent également de prendre en compte l'influence de l'environnement sur l'évaluation du terme source. A titre d'exemple, ces modèles peuvent permettre d'affiner la modélisation de l'évaporation d'une nappe ou encore de prendre en compte les émissions diffuses d'un bâtiment.

- La prise en compte de conditions atmosphériques particulières,

Dans l'absolu, un outil 3D permet d'étudier une palette plus large de conditions météorologiques et ainsi de considérer des nouveaux scénarios comme des vitesses de vent faibles pour lesquelles les outils intégraux ne sont généralement pas adaptés. Il convient

toutefois de s'assurer de la possibilité physique de telles conditions de vent qui restent très spécifiques.

Un outil 3D permet également de considérer une direction de vent et une direction de fuite d'une manière indépendante. Tous types de scénario peuvent ainsi être étudiés tel que le scénario qui consiste à considérer une direction de vent opposée à la direction de fuite.

- L'étude de la prise en compte de mesures de maîtrise des risques (MMR)

L'aptitude des codes 3D à modéliser des écoulements en champ proche, transitoires et diphasiques le cas échéant, ainsi que la présence d'obstacles permet d'étudier l'efficacité de barrières de sécurité. Dans ce cadre, différentes mesures de maîtrise des risques peuvent être étudiées, comme par exemple :

a) Les murs ou les merlons

Ces mesures sont généralement demandées dans le but de confiner une partie du nuage sur le site. Ce type de mesure ne peut pas être traité avec un outil intégral alors que sa prise en compte par un outil 3D ne pose pas de problème particulier.

b) Les détecteurs de gaz

Un industriel doit être à même de justifier l'implantation des détecteurs de gaz et de leur efficacité. L'outil 3D pourrait être un des éléments entrant dans la stratégie d'implantation des détecteurs lorsque des enjeux particuliers le nécessitent. En effet, la faculté d'un outil 3D à modéliser le champ proche en prenant en compte différentes directions de vent et de fuite permet d'optimiser la position des détecteurs. Par ailleurs, sa faculté à modéliser la cinétique de la fuite peut aider à la définition du temps de réaction attendu du détecteur.

c) Les vannes de sectionnement

L'activation d'une vanne de sectionnement rapide occasionne une fuite de courte durée assimilable à une bouffée. Les outils intégraux présentent des limites certaines pour modéliser ces phénomènes transitoires au contraire des outils 3D.

d) Les rideaux d'eau (liquide ou vapeur)

Les rideaux d'eau sont généralement utilisés comme mesure de maîtrise des risques pour des phénomènes de combustion : confinement ou extinction d'un incendie, diminution de la violence d'une explosion. Ils peuvent également être utilisés pour rabattre et diluer un nuage de produit toxique ou inflammable. L'efficacité d'un tel dispositif peut être analysée par certains outils 3D qui permettent de modéliser diverses phases (liquide, gaz).

2.2 SITUATIONS ACCIDENTELLES CONCERNEES

Ce chapitre a pour objectif de fournir :

- une identification et une définition des configurations industrielles,
- un panorama de la demande en modélisation de rejet atmosphérique,

- une identification des situations susceptibles de faire l'objet de modélisation.

2.2.1 Situations industrielles recensées

Les situations de rejets accidentels susceptibles d'être rencontrées dans des configurations industrielles et pertinentes à traiter dans le cadre du guide de bonnes pratiques sont identifiées. Le présent travail se limite à l'utilisation des outils 3D pour la recherche des seuils d'effets irréversibles et létaux, ou encore les limites d'inflammabilité du nuage, dans des situations de rejet accidentel. Les distances d'intérêt sont au maximum de quelques kms.

Les configurations identifiées sont ainsi, par exemple :

- rejet de gaz,
 - sous pression,

sous très haute pression,

- rejet diphasique avec production et dispersion d'aérosols,
- épandage et évaporation de liquide sous refroidi,
- épandage et évaporation de liquide à température ambiante.

L'identification des situations possibles nécessite par ailleurs de caractériser les gaz dispersés. Ceux-ci peuvent être distingués au travers de leurs caractéristiques de danger :

- toxiques (quelques ppm à quelques %, dose toxique),
- inflammables ou comburants (de l'ordre du %),
- asphyxiants (quelques % à 100%).

Ces gaz peuvent aussi être distingués au travers de la densité par rapport à l'air dans leur condition de rejet (lourd, léger ou neutre). Des rejets diphasiques sont également possibles avec formation d'aérosols.

Ils peuvent également être caractérisés en termes de durée de rejet :

- instantanée (rupture de capacité)
- de courte durée (maîtrise de la fuite par fermeture de vanne par exemple)
- de longue durée (rejet continu).

Il ressort en outre de ces premières réflexions l'importance de la prise en compte des obstacles comme les unités de production, les réseaux de canalisation ou encore les bâtiments dont l'impact sur la dispersion peut être extrêmement complexe (accumulation et émission par d'autres ouvertures), ainsi que la prise en compte des obstacles naturels qui peut être capitale.

2.2.2 Résultats de modélisation attendus

La demande de premier ordre pour un outil de prédiction de la dispersion atmosphérique d'un nuage de produits toxiques ou inflammables est de modéliser avec autant de précision que possible le champ de concentration dans le domaine considéré en fonction du temps. Ce résultat doit ainsi permettre d'identifier les distances d'effets pour chaque direction de vent et pour les différents seuils de toxicité ou d'inflammation ou bien encore de calculer le volume d'un nuage inflammable.

2.2.3 Représentation des résultats dans les études réglementaires, possibilités de prise en compte de la rose des vents et choix des configurations

Si l'intérêt des modèles 3D est de prendre en compte la topographie de manière réaliste, ce point a toutefois comme corollaire direct une dépendance des résultats à la direction du vent. En effet, si la modélisation d'une dispersion accidentelle au moyen d'un outil intégral est indépendante de la direction du vent, ce n'est pas le cas pour un calcul 3D.

Il apparaît ainsi pour l'utilisation des modèles 3D, la nécessité de réaliser un certain nombre de modélisations afin de couvrir l'ensemble des directions de vent possibles. Avec de tels modèles, il est également possible, contrairement aux approches de type intégral, de prendre un compte une direction de rejet non colinéaire à la direction du vent. Ceci ouvre la voie à la cotation en probabilité des conséquences dans chacune des directions en s'appuyant sur la rose des vents par exemple.

2.2.4 Sorties attendues d'une modélisation 3D dans une étude réglementaire

L'objet de ce paragraphe consiste à présenter de manière synthétique :

- les données d'entrée/sortie à produire dans le cadre de modélisations tridimensionnelles de rejets toxiques et/ou inflammables,
- les approches retenues à ce jour pour déterminer les conditions météorologiques et directions de vent associées aux modélisations retenues et présentées notamment pour les EDD.

Les points abordés dans ce chapitre sont en accord avec les bonnes pratiques de modélisation. Afin de permettre une bonne compréhension des modélisations tridimensionnelles et de la rigueur avec laquelle celles-ci ont été mises en œuvre, il est important de présenter les éléments suivants :

- Maquette du domaine de calcul :

Indiquer quels sont les obstacles et éléments topographiques explicitement pris en compte dans la maquette (et non pas un « maillage de peau » qui peut s'avérer différent de la vision que le modèle aura du domaine) avec les représentations graphiques associées et ceux pris en compte implicitement (sous la forme d'une porosité par exemple) ;

Indiquer le type de maillage retenu (non structuré, structuré, structuré par blocs, etc.)³, la géométrie des mailles (hexaèdres, tétraèdres, etc.) et leurs nombres, les zones où le maillage est plus fin ou moins fin et la résolution du maillage au niveau du point de rejet d'une part et au niveau des zones d'intérêt d'autre part ;

Indiquer et justifier les dimensions du domaine de modélisation retenue (calcul préalable pour évaluer grossièrement la zone d'intérêt ou définition du domaine en fonction d'éléments cibles)

Indiquer les conditions limites retenues (entrée, sortie, symétrie, parois lisses, parois rugueuses, etc.) et notamment faire apparaître de façon explicite les valeurs de rugosité retenue (sol, bâtiment, ...)

³ Voir annexe 4 pour la définition des différents types de maillage

- Paramètres de calcul et données d'entrée :

Type de modèle mis en œuvre (CFD, LPDM, etc.),

Type de formulation de turbulence retenu (Modèle spécifique, tant en RANS que pour la LES),

Durée de « moyenne » des concentrations retenue pour l'estimation des effets et lien avec la définition des effets toxicologiques (en particulier dans le cas d'utilisation de la LES),

Profils de vent, turbulence et températures utilisés au niveau des conditions limites et/ou pour initialiser l'écoulement dans le domaine de calcul,

Pour les modèles mass-consistent, corrélations utilisées pour le calcul des turbulences et des sillages,

Position du point de rejet par rapport à l'entrée du domaine

Type d'implémentation du terme source dans le modèle :

Gaz, diphasique, pseudo-gaz, etc,

Injection des débits dans des mailles ou des surfaces (indiquer les volumes et surfaces associés),

Conservation de la vitesse d'un jet ou de sa quantité de mouvement

Si nécessaire, méthode de calcul d'un terme source équivalent

Indicateurs sur la « qualité » des modélisations réalisées :

Approche LPDM :

- ✓ pas de temps d'émission de particules et nombre de particules émises par pas de temps,
- ✓ nombres de particules dans les mailles de concentration d'intérêt (LIE ou SEI),
- ✓ tests sur la sensibilité du maillage,
- ✓ prise en compte explicite ou implicite des obstacles
- ✓ pas de temps de synchronisation des particules pour calcul des concentrations/doses,

Approche CFD :

- ✓ approche stationnaire ou instationnaire,
- ✓ durée d'initialisation du domaine de calcul (si approche instationnaire),
- ✓ règles de construction du maillage (précision en fonction du modèle utilisé, ...)
- ✓ indications sur la convergence de la modélisation,
- ✓ tests sur la sensibilité du maillage : prise en compte explicite ou implicite des obstacles,
- ✓ valeur et méthode de contrôle du pas de temps,
- ✓ écoulement figé ou pas lorsque l'émission s'effectue.

- Types de sorties attendues

D'une manière générale, toutes les informations qui permettent une bonne compréhension de l'écoulement et des phénomènes dangereux représentés et des résultats obtenus (paragraphe explicatif notamment). Les sorties pourront être par exemple :

les distributions de vitesse, température et grandeurs turbulentes dans le domaine,
des isosurfaces 3D des concentrations aux valeurs d'intérêt, en fonction du temps pour un rejet instationnaire,
des coupes 2D de concentration de type coupe verticale dans l'axe de l'écoulement et horizontale au voisinage des hauteurs d'intérêt,
évolution au cours du temps des doses pour les produits toxiques et éventuellement des masses explosibles pour les produits.

La spécificité des outils de modélisation 3D est de donner accès à des distances différenciées en fonction de la direction de rejet. Le choix des conditions représentatives de vent doit ainsi à la fois s'appuyer sur la réglementation en vigueur mais également intégrer les spécificités de ces outils, que sont les distances différenciées pour chacune des directions de vent modélisées et un temps de calcul plus important. Il convient ainsi, lors de l'emploi d'un outil 3D pour un ou plusieurs scénarios de l'étude de dangers :

- Soit, de considérer des classes de vent identiques, le cas échéant, à celles retenues pour les autres scénarios de l'étude de dangers modélisés avec des outils Gaussiens ou Intégraux ;
- Soit, de modéliser la configuration de vent conduisant aux distances d'effet enveloppes lorsqu'une étude de sensibilité préalable permet de déterminer la condition enveloppe ;
- Soit de ne modéliser que les conditions de vent susceptibles d'engendrer des distances d'effets à l'extérieur des limites du site, sous réserve d'avoir discriminé les configurations possibles au préalable au moyen, par exemple, d'une approche simplifiée.

Il convient ainsi, afin de déterminer les conditions et directions de vent pertinentes :

- D'identifier les cibles potentielles aux alentours du point de rejet (habitations, ERP, voies de circulation, limites de propriété les plus proches, ...) et de choisir la ou les directions de rejet en conséquence ;
- De réaliser des modélisations en modifiant successivement la direction du vent de N degrés afin de modéliser les conséquences pour toutes les directions de vent possibles, la valeur de N est communément prise égale à 20° ;
- De choisir les conditions de vent représentatives en s'appuyant sur une rose des vents caractéristique du site et en application de la circulaire du 10 mai 2010, il convient de rappeler pour mémoire que, pour un site donné, direction de vent et classe de stabilité ne sont pas indépendantes.

Le choix doit être réalisé en fonction des enjeux spécifiques au site et reste à la charge de l'industriel sous réserve d'une justification d'une couverture suffisante des situations à risque.

2.2.5 Mise en œuvre d'une modélisation 3D

La caractérisation des effets d'une situation de rejet accidentel d'une substance toxique nécessite, indépendamment du modèle, 3 grandes étapes, schématisées sur la Figure 1.

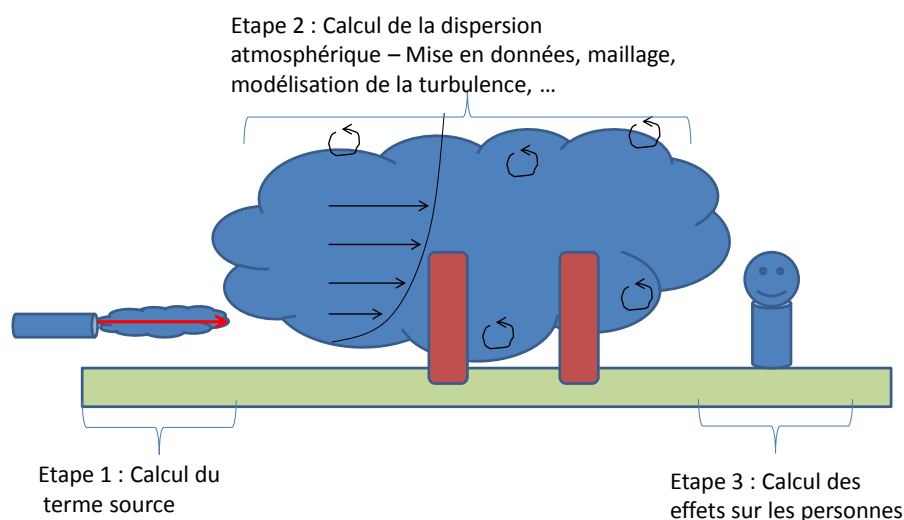


Figure 1 : Représentation schématique des étapes de modélisation.

L'objet du présent guide est de fournir les éléments pour la modélisation 3D de l'étape 2, la dispersion atmosphérique de la substance. Toutefois, les étapes 1 et 3 ne peuvent être totalement dissociées de ce calcul. Ces deux phases sont brièvement traitées dans les paragraphes suivants en préalable à la discussion concernant la modélisation de la dispersion atmosphérique, cœur de ce document.

2.3 MODELISATION DU TERME SOURCE

La définition du terme source constitue l'étape primordiale de toute modélisation de dispersion atmosphérique, quel que soit le niveau de complexité du modèle utilisé (modèle intégral, 3D, etc). Il s'agit d'un paramètre d'ordre 0 qui conditionne par conséquent la qualité des résultats finaux. Il convient donc d'accorder un soin tout particulier à cette étape de calcul et de veiller à la cohérence globale des résultats vis-à-vis de la réalité physique des phénomènes décrits.

La physique complexe à proximité du rejet et les évolutions continuelles de la compréhension des phénomènes rendent la modélisation du terme source très délicate. Ainsi, ce guide n'a pas pour vocation d'établir un modèle de référence pour les différents termes sources rencontrés dans les études réglementaires des installations classées pour l'environnement. Néanmoins, en raison de la très forte influence dans les résultats de modélisation, il apparaît nécessaire de préciser quelques éléments relatifs à la détermination du terme source ainsi qu'à son intégration dans un modèle tridimensionnel.

2.3.1 Evaluation du terme source

L'évaluation amont d'un terme source consiste à spécifier, en plus de la géométrie du rejet :

- le débit massique à la brèche pour les fuites continues (alimentées) ou quasi-instantanées (bouffée),
- la masse totale de produit relâchée dans le cas d'un relâchement instantané,

- la durée de fuite,
- la vitesse « finale », c'est-à-dire après expansion (détente à l'atmosphère),
- la température « finale », après expansion et changement de phase éventuel,
- la répartition et la composition des phases liquide et gazeuse, après expansion.

Ces paramètres peuvent évoluer au cours du temps pour les rejets instationnaires. Ce sont ces paramètres qui seront intégrés, en tant que données d'entrée, dans un modèle tridimensionnel de dispersion atmosphérique. Ils doivent donc être précisés clairement dans tout rapport d'étude de dispersion atmosphérique. Il est toutefois important de souligner que l'intégralité des éléments discutés dans la suite de ce paragraphe ne s'applique pas uniquement au cas des modèles tridimensionnels mais reste valable pour tout modèle de dispersion atmosphérique.

Il convient de définir le type de perte de confinement en fonction de la séquence accidentelle considérée. Puis il s'agit de déterminer le type d'écoulement à étudier pour ensuite caractériser les paramètres listés ci-dessus. Naturellement, des limites de validité et des contraintes numériques associées aux valeurs des données d'entrée du terme source à intégrer dans la modélisation tridimensionnelle existent. Il est donc nécessaire de réaliser au mieux le couplage entre le terme source et le modèle de dispersion utilisé. Il conviendra en particulier de s'assurer de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie lors de l'introduction du terme source dans le domaine 3D.

2.3.2 Type de perte de confinement

Selon les séquences accidentelles envisagées, plusieurs configurations de mise à l'atmosphère sont envisageables :

- La **rupture catastrophique**, ou relâchement instantané, consécutivement à la ruine d'un équipement (ballon, colonne, bac, etc...). Dans ce cas, l'intégralité de l'inventaire est immédiatement mise à l'atmosphère.
- La **fuite alimentée**, générée par une brèche sur un équipement (canalisation, pompe, colonne, etc...). Dans ce cas, la durée de fuite est déterminée sur la base du débit à la brèche, de l'inventaire de produit à disperser et des organes d'isolement disponibles.

Les caractéristiques spécifiques à chacun de ces rejets doivent être correctement introduites dans l'outil de modélisation utilisé.

2.3.3 Type de produit

Il est possible d'avoir à modéliser trois types de fuite :

- fuite de gaz,
- fuite de liquide,

- fuite diphasique⁴ (fraction de liquide flashant à la brèche et/ou formation d'aérosols à partir de la phase liquide).

Chacun de ces trois types de fuite nécessite un traitement spécifique, adapté à la nature de l'écoulement correspondant :

- Pour les fuites de gaz et de liquides non surchauffés ne produisant pas d'aérosols, il est possible d'utiliser des corrélations simples pour déterminer l'ensemble des caractéristiques du terme source.
- Au contraire, un traitement spécifique doit être accordé aux fuites diphasiques, impliquant un changement d'état (flash thermodynamique et/ou vaporisation partielle de la phase liquide sous forme d'aérosols) du produit considéré. Quel que soit le modèle retenu pour déterminer le terme source, il doit permettre de définir les phases gaz et liquides à la brèche ainsi que la fraction d'aérosols entraînée. La prise en compte des aérosols dans la modélisation est nécessaire pour ne pas sous-estimer la dispersion du nuage inflammable ou toxique. Pour y parvenir, plusieurs techniques sont envisageables :
 - Assimilation et ajout de la fraction aérosolisée à la phase gazeuse dispersée, à l'instar de ce qui est réalisé par certains modèles intégraux
 - Considération d'une espèce spécifique supplémentaire dans la dispersion. Dans ce cas, il est possible de modéliser la vaporisation de cette espèce au cours de sa dispersion.

En outre, il est possible de modéliser l'impact des obstacles sur les gouttelettes ainsi que leur éventuelle coalescence avec un modèle tridimensionnel, ce que ne permettent pas les modèles intégraux.

Au final, la prise en compte des aérosols et la description de leur dispersion est une problématique commune à tous les modèles et elle n'est pas plus complexe avec un code tridimensionnel qu'avec un code intégral, dès lors que les caractéristiques de la fraction d'aérosols sont connues.

2.3.4 Evolution du terme source

Au cours d'une fuite, trois phases peuvent être distinguées :

- Une phase de **dépressurisation du système**, qui a lieu si le débit de fuite initial est supérieur au débit stationnaire du système, et au cours de laquelle le débit va chuter pour converger vers la valeur du débit stationnaire. Dans un tel cas, considérer la valeur initiale du débit total de fuite pour la modélisation des phénomènes dangereux

⁴ Les fuites diphasiques peuvent être distinguées entre les gaz liquéfiés sous pression, les produits réfrigérés et les produits liquides sous conditions ambiantes, les conditions, notamment d'atomisation, sont différentes entre ces deux configurations.

s'avère non seulement majorant, mais ne traduit pas non plus correctement l'écoulement qui aurait réellement lieu au niveau de la brèche, ni la durée de fuite.

- Une phase d'**alimentation** durant laquelle la fuite est alimentée au débit stationnaire du système considéré. Ce débit d'alimentation peut être conditionné par différents organes en amont de la brèche (régulation du procédé, pompe, ...). Cette phase se termine soit par l'activation des organes d'isolement du système, soit par l'arrêt de la production, soit par la vidange totale de l'inventaire mobilisable.
- Une phase de **vidange gravitaire**, correspondant à l'écoulement résiduel des canalisations et équipements en aval des organes d'isolement, une fois que ceux-ci ont été actionnés. Cette phase est généralement négligeable devant les deux autres.

Naturellement, la considération d'une ou plusieurs de ces phases est conditionnée par l'importance de leur contribution ainsi que par les enjeux associés à la modélisation. Dans le cas d'une fuite de liquide provoquant la formation puis l'évaporation d'une nappe, il conviendra de prendre en compte le terme source correspondant.

2.4 INTEGRATION DU TERME SOURCE DANS UN OUTIL 3D

Afin de ne perdre aucune information du terme source au moment de son intégration dans un modèle tridimensionnel, il convient d'accorder le plus grand soin à cette étape de la modélisation. Il conviendra ainsi de justifier les hypothèses simplificatrices éventuelles pour la prise en compte du terme source dans le modèle 3D. L'objectif visé est de satisfaire aux contraintes suivantes :

- Introduire le modèle de terme source dans le code 3D pour permettre la résolution du phénomène de dispersion au moyen de celui-ci ;
- Rester dans le domaine de validité du modèle tridimensionnel utilisé, notamment en ce qui concerne la résolution des équations de l'écoulement ;
- Ne pas générer de perturbations dans la résolution numérique du code en raison de valeurs trop extrêmes, autrement formulé, l'introduction du terme source ne doit alors pas altérer le modèle 3D.

Comme indiqué dans la description des termes sources, la physique des rejets peut varier de manière importante. Toutefois, il convient de caractériser les plus représentatifs afin de pouvoir comparer ces caractéristiques à ceux de l'écoulement atmosphérique. Trois situations ont été caractérisées :

- un rejet gazeux à haute pression,
- un rejet diphasique à haute pression,
- une ruine massive.

Pour chacun de ces cas, la physique du rejet est particulièrement complexe en soi et il semble aujourd'hui délicat de modéliser à la fois cette physique du rejet et la dispersion atmosphérique sur de grandes distances. Une modélisation 3D spécifique du rejet peut toutefois être envisagée.

L'objectif de ce guide est de proposer une méthodologie pour l'utilisation des outils de modélisation 3D, la modélisation des rejets à proprement parler ne fait donc pas partie du

cœur de la problématique. Toutefois, la diversité des approches pour introduire un terme source dans un code 3D étant par ailleurs source de divergence, il est apparu nécessaire de proposer une méthodologie pour la modélisation de ces rejets dans une optique de modélisation de la dispersion atmosphérique. Des éléments de physiques des différents termes sources sont proposés en annexe 2. Ce paragraphe indique la méthode retenue pour introduire ces différents termes sources dans les outils de modélisation 3D.

Quelle que soit la nature du terme source, il conviendra de valider son introduction dans l'outil CFD en démontrant notamment de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie entre les calculs préliminaires de rejet et le terme source introduit dans l'outil.

2.4.1 Rejet sous haute pression

Différentes stratégies sont possibles pour introduire le terme source de jet dans un outil de modélisation 3D :

- Une modélisation CFD à partir de la brèche. Le modèle CFD reproduit alors les effets de compressibilité et, le cas échéant, les phénomènes diphasiques.
- Une modélisation CFD après la zone d'expansion du jet. Le modèle CFD reproduit alors l'ensemble des phénomènes au-delà de cette zone d'expansion incluant l'ensemble de l'entraînement d'air par le jet et les phénomènes diphasiques.
- Une modélisation CFD après la zone d'évaporation des gouttes, le jet comporterait alors une proportion d'air entraîné.

Une attention particulière doit être portée dans le cas des jets impactant des obstacles ou le sol, avec notamment un effet de dilution conséquent qui aura tendance à augmenter le volume du nuage inflammable. L'annexe 2 présente les phénomènes physiques associés à ce type de rejet et les équations à considérer pour la construction du terme source à introduire dans un code 3D, tant pour un jet de gaz sous pression que pour un rejet diphasique. Il est évident qu'un certain nombre d'incertitudes subsistent à propos de ces termes sources mais celles-ci ne sont nullement propres aux modèles 3D.

2.4.2 Evaporation de nappe

Différentes corrélations sont disponibles dans la littérature pour évaluer le taux d'évaporation d'une nappe de liquide [64][65]. Ces modèles permettent de déterminer le débit d'évaporation total pour une flaque de produit avec pour paramètres principaux la pression de vapeur de celui-ci et la vitesse de l'air au dessus de la flaque.

Afin d'être utilisé dans un outil CFD, ce débit doit être distribué sur l'ensemble de la flaque dont la surface réelle doit être représentée.

2.4.3 Ruine de capacité

Dans le cas de perte de confinement explosive ou associée à une ruine de capacité, la dispersion opère depuis une source massive, composée de l'ensemble ou d'une partie conséquente du fluide stocké, injectée dans un temps très court dans l'atmosphère, et donc considérée comme instantanée. Pour les gaz liquéfiés sous pression, cette source suivra les mêmes étapes que celles issues des rejets diphasiques, à savoir une phase d'expansion d'un

mélange diphasique, un « rainout » qui peut former une nappe au sol et enfin l'évaporation des aérosols contenus dans le nuage.

L'estimation de la masse injectée, de sa température et éventuellement d'une pression résiduelle après éclatement et détente partielle est l'objet de phases préalables à la modélisation 3D. Cependant, la formulation des résultats de cette phase de calcul du terme source peut s'avérer assez éloignée de la physique réelle du phénomène et rendre difficile sa représentation dans le modèle numérique 3D. En effet, les formulations autour des explosions de capacité proposent des volumes sphériques ou hémisphériques de gaz après détente, en particulier pour une ruine de stockage de gaz liquéfié. Ces volumes ne peuvent pas toujours être insérés géométriquement à la maquette numérique. Par ailleurs, la dynamique de l'expansion, vitesses radiales des gaz, n'est en général pas décrite dans ces sorties de modèles de termes source. Enfin, les éventuels obstacles en champ proche ne sont pas pris en compte par de telles approches.

Deux stratégies sont alors possibles pour introduire un tel rejet dans un code 3D :

Introduction après expansion : les résultats en volume de gaz (et/ou en masse de produit pur) obtenus par les formulations existantes sont injectés en répartissant ce volume dans une forme semblable à celle de la capacité si le volume libre disponible le permet (volume disponible supérieur au volume du gaz) ou dans l'espace libre entre les obstacles par découpage. Cette procédure reste potentiellement fastidieuse et arbitraire car l'expansion du nuage n'est pas calculée. Une attention particulière doit être portée à la température, qui doit être compatible avec un gaz à pression atmosphérique ainsi qu'à la conservation de la masse totale. Les approches les plus simples ne décrivent pas l'interaction entre l'expansion et l'atmosphère et ne tient pas compte des vitesses de gaz mais elle est conservative pour les mêmes raisons puisque sans dilution et sans vitesse verticale initiale. A noter toutefois l'existence de méthodes plus élaborées permettant de prendre en compte les deux phases consécutives à l'éclatement, expansion initiale liée à la pression et au flash puis phase de mélange turbulent avec l'air environnant [67].

Introduction avant expansion : Dans ce cas, un volume plus réduit pour la même masse en bilan adiabatique, car choisi avant détente définitive, est intégré dans la maquette sous une géométrie plus simple. La pression résiduelle peut être suffisamment élevée, de l'ordre de quelques centaines de millibars, pour que l'expansion du gaz calculée par la résolution des équations de Navier-Stokes représente correctement la réalité de l'explosion. Les trajectoires entre obstacles et vers le haut du gaz en expansion sont alors reproduites par la modélisation.

Quelle que soit l'approche retenue, l'utilisateur démontrera de la bonne prise en compte du terme source dans le code de calcul 3D. Deux bonnes pratiques sont liées à la modélisation du terme source.

BP1	L'utilisateur détaillera et justifiera ses choix d'intégration du terme source dans l'outil 3D utilisé.
------------	--

BP2	Pour tous les modèles, les effets de densité et de jets liés à l'émission doivent être pris en compte s'ils sont significatifs pour la dispersion, c'est-à-dire s'il s'agit d'un gaz lourd ou léger pour le premier point et dès lors que la vitesse du jet est supérieure à 5 fois la vitesse du vent pour le second point. L'impact des écoulements diphasiques devra également être pris en compte le cas échéant. Les précisions sont apportées au § 2.4, page 40 et en Annexe 2. Le choix de considérer un rejet comme passif devra être justifié. Les éléments à apporter sont explicités en annexe XI.
-----	---

2.5 CALCUL DES DISTANCES D'EFFET TOXIQUES

Les outils de modélisation permettent, comme brièvement décrit précédemment, de calculer la distribution de concentration dans un domaine de calcul au cours du temps, soit le champ $C(\underline{x}, t)$. La conversion de cette distribution de concentration en distance d'effet nécessite de pouvoir comparer cette valeur, soit à un seuil d'effet, soit à une dose toxique : $d = \int C(t)^n dt$.

Cette conversion peut être rendue délicate, dans le cas des outils 3D, soit par la prise en compte du caractère fortement instationnaire du rejet, soit par l'utilisation d'un modèle décrivant explicitement les fluctuations turbulentes, de type LES. L'impact toxicologique sur les personnes de ces fluctuations à haute fréquence ne pouvant être pris en compte à l'heure actuelle, il conviendra de calculer les distances d'effet en utilisant une valeur moyenne glissante sur une durée de 1 minute. Cette durée correspond à la valeur minimale pour le dimensionnement des effets sur les personnes.

3. NOTIONS FONDAMENTALES SUR LES ECOULEMENTS ATMOSPHERIQUES

Ce chapitre a pour objectif de présenter, de manière synthétique, les éléments caractéristiques principaux des écoulements atmosphériques. Ces notions sont utilisées par la suite pour établir le lien avec les choix de modélisation qui peuvent être faits. Les nombres adimensionnels représentatifs des écoulements atmosphériques sont présentés en préambule.

3.1 QUALIFICATION DES ECOULEMENTS POUR LES REJETS ATMOSPHERIQUES

Tout choix de modèle nécessite de qualifier l'écoulement d'intérêt au moyen, par exemple, des nombres sans dimension caractéristiques. Ces nombres sans dimension permettent de caractériser à priori l'écoulement et d'évaluer ainsi la pertinence des différentes approches disponibles.

Les écoulements à modéliser peuvent comporter trois grandes zones :

- l'écoulement atmosphérique, plus exactement, la couche limite atmosphérique (CLA),
- l'écoulement local lié à la présence du site industriel,
- l'écoulement de rejet lié au terme source.

Chacun de ces écoulements possède des caractéristiques qui lui sont propres et qu'il convient donc de détailler avant d'évaluer la pertinence des modèles physiques existants et leur capacité à représenter de manière réaliste ces trois phénomènes.

Les nombres sans dimensions sont construits sur la base des propriétés moléculaires des fluides, des nombres adimensionnels dits turbulents sont construits par analogie.

L'un des moyens de caractériser un écoulement est donc d'évaluer les nombres sans dimensions tels que le nombre de Reynolds, Re , le nombre de Prandtl, Pr , le nombre de Froude, Fr , ou encore le nombre de Schmidt, Sc .

Le nombre de Reynolds⁵ représente le rapport entre les forces d'inertie et les effets visqueux et traduit l'intensité de la turbulence, il est basé sur une vitesse, U , et une longueur caractéristique, L :

$$Re = \frac{U.L}{\nu} \quad \text{Eq- 1}$$

Pour un écoulement atmosphérique la vitesse est celle du vent, entre 1 et 10 m/s, la dimension caractéristique peut être prise égale à la hauteur de la CLA, h , et la viscosité est celle de l'air. Les écoulements atmosphériques peuvent être considérés comme turbulents. A titre d'illustration, le nombre de Reynolds pour un vent faible (1 m/s) dans un régime stable, donc une faible hauteur de CLA (≈ 10 m), la valeur de ce nombre atteint environ 5.10^5 . A noter que dans le cas d'un rejet à l'atmosphère d'une substance, une turbulence

⁵ Il existe par similarité un nombre de Reynolds turbulent basé sur les grandeurs caractéristiques de la turbulence.

propre au rejet peut se développer. E'est le cas par exemple en cas de rejet sous pression. Dans ce cas, les propriétés de la turbulence atmosphérique et celle du jet peuvent être différentes, les nombres de Reynolds associés à chacun de ces phénomènes étant différents.

Le nombre de Froude Fr_j permet d'estimer, dans le cas des jets gazeux, le rapport entre les forces d'inertie et les effets de gravité :

$$Fr_j = \frac{\rho_j \times U_j^2}{|\rho_j - \rho| \times g \times L} \quad Eq- 2$$

Le nombre de Richardson de gradient permet d'évaluer la stratification des couches atmosphériques. Ce nombre est le rapport entre l'énergie potentielle gravitationnelle d'un fluide et son énergie cinétique. Pour un écoulement atmosphérique il s'écrit ainsi :

$$Ri = \frac{g}{\theta} \frac{\frac{\partial \theta}{\partial z}}{\left(\frac{\partial U}{\partial z}\right)^2} \quad Eq- 3$$

Une valeur négative de ce nombre de Richardson traduit une atmosphère instable, une valeur nulle, une atmosphère neutre et une valeur positive une atmosphère stable.

Le nombre de Prandtl représente le rapport entre la diffusivité de quantité de mouvement et la diffusivité thermique, il représente ainsi le ratio entre l'épaisseur de couche limite thermique et de couche limite dynamique :

$$Pr = \frac{\nu}{\lambda} \quad Eq- 4$$

Enfin, le nombre de Schmidt moléculaire traduit le rapport entre la viscosité cinématique et la diffusivité moléculaire, il s'écrit :

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad Eq- 5$$

La diffusivité moléculaire dépend du gaz ambiant et du gaz dispersé. Des tables donnent ainsi les diffusivités moléculaires pour des mélanges binaires ou tertiaires (à titre d'exemple, $Sc \approx 0,8$ pour la vapeur d'eau et HF, et $Sc \approx 2$ pour le benzène).

A noter que ces deux derniers nombres sont également définis pour les grandeurs turbulentes, il s'agit alors des nombres de Prandtl turbulent, Pr_t et du nombre de Schmidt turbulent, Sc_t . Le nombre de Prandtl turbulent s'écrit ainsi comme le rapport entre la viscosité turbulente, ν_t , et la diffusivité turbulente γ_t :

$$Pr = \frac{\nu_t}{\lambda_t} \quad Eq- 6$$

Le nombre de Schmidt turbulent est le rapport entre la viscosité turbulente et le coefficient de diffusion turbulente D_t :

$$Sc = \frac{\nu_t}{D_t} \quad Eq- 7$$

3.2 STRUCTURE DE L'ÉCOULEMENT ATMOSPHERIQUE

La structure des écoulements atmosphériques est particulièrement complexe. Dans le cadre d'une modélisation des effets d'un rejet accidentel dans l'atmosphère, l'intérêt principal sera porté sur la couche limite atmosphérique (CLA). Toutefois, pour certaines configurations, il peut être nécessaire de modéliser l'écoulement au-delà de cette CLA, cela peut être le cas pour des configurations particulières d'incendie et notamment par fortes stabilités.

La CLA peut être séparée en trois parties : la sous couche rugueuse, la couche limite de surface (CLS) et la couche d'Ekman, Figure 2.

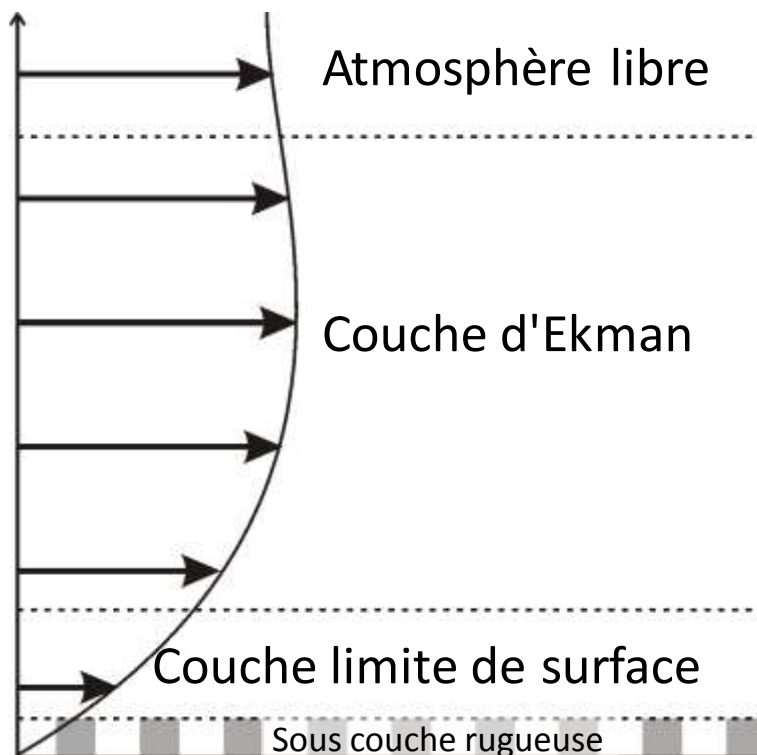


Figure 2 : Structure de la CLA.

Au-delà de cette CLA, les caractéristiques de l'écoulement sont celles de l'atmosphère libre. En fonction de l'état de stabilité de l'atmosphère et de l'objectif de la modélisation, il peut être nécessaire de modéliser une partie de l'atmosphère libre dans la partie supérieure du domaine. Toutefois, les phénomènes physiques au-delà de la CLS deviennent complexes, intégrant les forces de Coriolis et les effets de pression et de réchauffement différentiel à échelle météorologique régionale.

Sous l'effet de la rotation de la Terre, la direction dans la couche d'Ekman n'est ainsi pas colinéaire à celle du vent dans la CLS. Au vu des rejets et des distances considérées lors

d'une modélisation de dispersion accidentelle locale dans l'atmosphère, la zone d'intérêt est majoritairement localisée dans cette CLS.

Cette couche limite est par ailleurs directement influencée par le rayonnement solaire et varie donc ainsi notablement au cours de la journée, Figure 3.

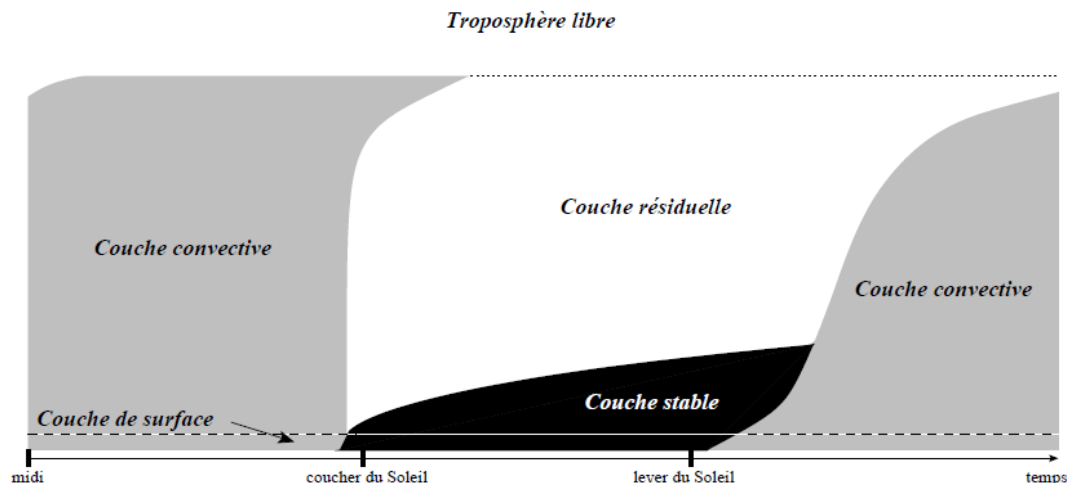


Figure 3 : Evolution schématique de la CLA au cours de la journée [1].

La première grandeur caractéristique qui apparaît est ainsi la hauteur, notée h , de la CLA. L'épaisseur de la CLS est de l'ordre de 10% de l'épaisseur de la CLA.

3.3 NOTIONS DE COUCHE DE STABILITE ATMOSPHERIQUE

Au cours d'une journée ensoleillée, par vents faibles, le sol s'échauffe par rayonnement beaucoup plus rapidement que l'air et il peut apparaître une couche de mélange caractérisée par une turbulence très forte. Des tourbillons convectifs apparaissent introduisant une instabilité qui a tendance à amplifier les mouvements verticaux et à homogénéiser les grandeurs associées au fluide (température, polluants,...). L'atmosphère est en situation de stratification instable.

Au cours d'une nuit claire, avec des vents faibles, le sol se refroidit par rayonnement plus rapidement que les couches d'air adjacentes. La température du sol est inférieure à la température de l'air. Les flux turbulents sont faibles, particulièrement dans la direction verticale. L'atmosphère est en situation de stratification stable.

Au-dessus, la couche de mélange de la journée devient une couche résiduelle, où en général le gradient vertical de température est nul. L'atmosphère est qualifiée de neutre. Durant la journée, ces situations neutres se rencontrent par vent fort ou par vent modéré et ciel couvert.

La stratification de l'atmosphère ou stabilité dépend des caractéristiques thermiques et mécaniques de l'écoulement au travers du flux thermique au sol, des gradients verticaux de vitesse et de température et de la rugosité du sol. Pasquill et Turner [2] ont proposé une première classification de cette stabilité, de A (instable) à F (très stable) en utilisant comme paramètres déterminants le flux thermique (au travers de la couverture nuageuse et du rayonnement solaire) et la vitesse du vent, Tableau 2.

Vitesse du vent à 10m [ms ⁻¹]	Jour Rayonnement solaire			Nuit Couverture nuageuse	
	Fort	Moyen	Faible	$\geq \frac{1}{2}$	$< \frac{1}{2}$
<2	A	A-B	B		
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Tableau 2 : Relation entre vitesse de vent, rayonnement solaire, couverture nuageuse et classe de stabilité, d'après[2].

Ce tableau ne présente pas de classification pour les vents faibles de nuit bien que cette situation puisse physiquement exister.

Ces différentes classes ont été établies pour obtenir les paramètres de dispersion en observant les différents comportements d'un panache issu d'un rejet à l'atmosphère. Il convient toutefois de garder à l'esprit que ces classes ne représentent pas un état figé mais une infinité d'états possibles de l'atmosphère pour différentes situations. Une classe de Pasquill donnée peut ainsi correspondre à différentes valeurs de grandeurs caractéristiques. Il est ainsi possible de positionner les classes de Pasquill en fonction de ces grandeurs, comme proposé par [3], Figure 4. Cette relation est par ailleurs reprise dans le Yellow Book, ouvrage diffusé par le TNO, [4].

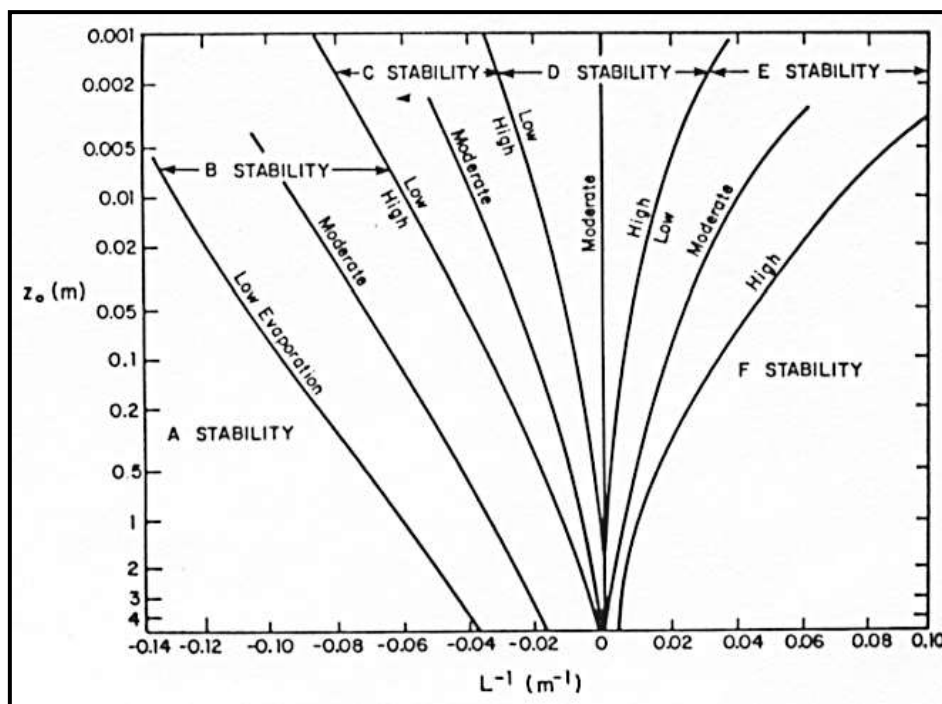


Figure 4 : Relation entre la longueur de Monin-Obukhov L_{MO} et la rugosité z_0 pour différentes classes de stabilité de Pasquill, d'après [4].

A partir de ces grandeurs caractéristiques, il est ensuite possible de déterminer les profils de vitesse, turbulence et température. Toutefois, ce graphe fait apparaître l'une des difficultés majeures de ce travail. Il n'y a en effet pas de bijection entre la notion de classe de stabilité, reprise dans les textes réglementaires [6], et les grandeurs caractéristiques utilisées pour construire les différents profils.

La construction des profils de vitesse, turbulence et température nécessitant de déterminer une valeur unique, une hypothèse supplémentaire est nécessaire. Ainsi, afin d'établir les profils représentatifs des différentes classes utilisées pour les modélisations réglementaires, le groupe de travail a choisi de s'appuyer sur la formulation qui représente un état médian parmi ceux affichés sur la Figure 4.

Cet état médian peut être numériquement représenté à partir de la relation suivante [3][4]:

$$\frac{1}{L_{MO}} = \frac{1}{L_s} \log_{10} \left(\frac{z_0}{z_s} \right) \quad (6)$$

Dans cette relation, avec les paramètres $L_s(m)$ et $z_s(m)$ sont donnés dans le Tableau 3 pour une gamme de valeur de $0,001 \leq z_0 \leq 5$.

En condition neutre, la longueur étant infinie, il est fait l'hypothèse que $1/L_{MO} = 0$.

Pasquill stability	$L_s(m)$	$z_s(m)$
--------------------	----------	----------

A	33,162	1117
B	32,258	11,46
C	51,787	1,324
D	$1,00.10^{99}$	$1,00.10^{-99}$
E	- 48,330	1,262
F	- 31,325	19,36

Tableau 3 : Calcul de la LMO à partir des classes de Pasquill.

A titre d'information, ces valeurs sont très proches de celles proposées par Haven et Spicer [5] et utilisées par le logiciel PHAST, outil communément utilisé pour la modélisation des rejets atmosphériques.

3.4 GRANDEURS CARACTERISTIQUES D'UN ECOULEMENT ATMOSPHERIQUE

Pour déterminer l'état de la CLS, il convient de connaître deux grandeurs fondamentales :

- la vitesse de frottement, u_0^* ,
- le flux de chaleur sensible, H_0 .

Ces éléments sont donnés pour un terrain particulier, c'est-à-dire une valeur de la rugosité, z_0 , et la nature du sol. Ces grandeurs permettent ensuite de calculer la longueur de Monin-Obukhov (LMO) :

$$L_{MO} = \frac{\rho.C_p.\theta.u_0^{*3}}{\kappa.g.H_0} \quad \text{Eq- 8}$$

La longueur de Monin-Obukhov définit l'épaisseur de la couche au contact du sol dans laquelle les processus de flottabilité dominant le cisaillement vertical du vent pour produire de la turbulence.

Pour une atmosphère en condition neutre ou stable, cette longueur permet ensuite d'évaluer la hauteur de la CLA. Plusieurs corrélations sont disponibles dans la littérature.

3.5 RELATION ENTRE CLASSES DE PASQUILL ET PROFILS CARACTERISTIQUES

La relation entre classes de Pasquill et profils caractéristiques, au sens de la théorie de la similitude, est difficile à établir car les classes de Pasquill représentent une large variété d'états possibles de l'atmosphère, comme indiqué précédemment sur la Figure 4.

Cette complexité est caractérisée par un nombre important de paramètres définissant un état de stabilité parmi lesquels :

- des paramètres définissant les conditions météorologiques :
 - la vitesse du vent,

- le rayonnement au sol,
- la couverture nuageuse.
- des paramètres définissant les caractéristiques d'un site :
 - la rugosité,
 - l'albédo⁶,
 - les paramètres reliant le flux de chaleur sensible et le rayonnement.

Des relations issues de la bibliographie scientifique permettent de diminuer ce nombre de paramètres. A titre d'exemple, en situation stable de nuit, la relation proposée par [11] permet de tracer des domaines de couples (U_{10} : Vitesse de référence à 10 m ; PG : Classe de Pasquill-Gifford) en fonction de la vitesse de frottement et de la LMO.

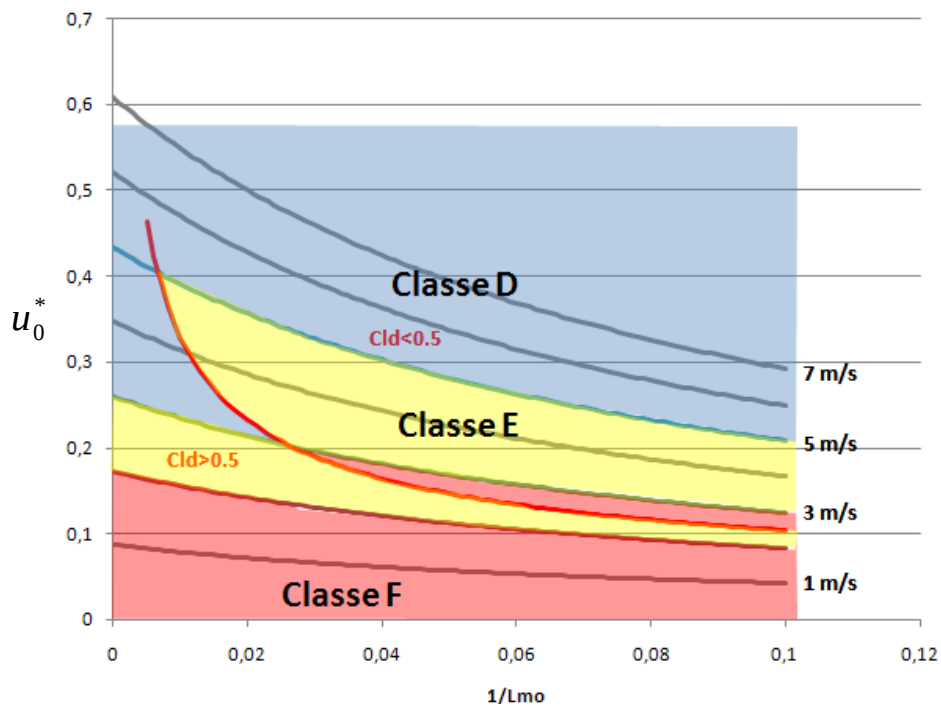


Figure 5 : Relation entre U_{10} -PG et u_0^* et LMO suivant une gamme de couverture nuageuse en conditions nocturnes

Le schéma exposé ci-dessus montre que, d'une part, pour un couple de valeur (U_{10} -PG) il existe une gamme assez large de valeurs de LMO , et d'autre part pour une valeur de LMO donnée, différentes classes de Pasquill peuvent être associées suivant la valeur de la couverture nuageuse.

3.5.1 Définition des profils atmosphériques

Comme indiqué précédemment, il n'existe pas de relation unique entre les classes de Pasquill et la définition d'un profil de vent. Toutefois, dans le cadre de l'application des modèles 3D pour la dispersion atmosphérique dans les études réglementaires, il est

⁶ Pour mémoire, l'Albédo est le rapport entre l'énergie solaire réfléchie par une surface et l'énergie solaire incidente.

nécessaire de proposer une correspondance entre ces classes et les conditions aux limites de modèles 3D.

La représentation détaillée de la CLA est extrêmement complexe. Aussi, il est important de recentrer cette représentation sur les objectifs de modélisation. L'objet d'un calcul de dispersion atmosphérique est, pour un produit toxique, d'évaluer les effets au sol et à des altitudes correspondant aux constructions voisines, les Immeubles de Grandes Hauteurs (IGH) étant représentatifs des cibles de grande taille, et, pour un produit inflammable, d'évaluer la distance à la LIE et la masse de produit inflammable.

De ce fait, les phénomènes complexes intervenant dans la partie supérieure de la CLA n'ont, généralement, que peu d'influence sur les résultats de ces simulations. Ainsi, il est possible de proposer une représentation simplifiée de la CLA afin de prendre en compte les phénomènes influant sur la dispersion sans pénaliser les simulations par l'introduction de phénomènes météorologiques extérieurs. Toutefois, le profil de vitesse de vent classiquement représenté sous la forme d'une loi puissance ou logarithmique sans correction conduit généralement à une surestimation des vitesses dans la partie supérieure du domaine et à ce titre ces approches ne sont pas préconisées.

3.5.2 Représentation de la couche limite de surface

Afin de représenter cette couche limite de surface, il est nécessaire de choisir un jeu de paramètres caractéristiques pour reconstruire des profils de vitesse et de température en utilisant la théorie de similitude [7]⁷ et les corrections nécessaires pour reproduire une extension correcte de la couche limite au-dessus de la CLS [8].

$$\frac{u(z)}{u_0^*} = \frac{1}{\kappa} \left(\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) + \frac{bz}{L_{MO}} \left(1 - \frac{z}{2z_i} \right) + \frac{z}{L_{MBL}} - \frac{z}{z_i} \left(\frac{z}{2L_{MBL}} \right) \right) \quad \text{Eq- 9}$$

$$\begin{cases} \theta(z) = \theta_{sol} + \frac{\theta_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_T} \right) - \Psi_H(\zeta) \right] & \text{si } z < z_i \\ \theta(z) = \theta_{sol} + \frac{\theta_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z_i}{z_T} \right) - \Psi_H(\mu) \right] + \gamma_{ext}(z - z_i) & \text{si } z \geq z_i \end{cases} \quad \text{Eq- 10}$$

Il est ensuite possible de dériver les profils pour les différentes grandeurs caractéristiques de la turbulence, ces profils dépendent du modèle de turbulence utilisé pour la résolution de l'écoulement.

BP3	Les profils de vent représentant les différentes classes de stabilité devront être construits sur la base des équations établies par le groupe de travail. L'annexe I présente en détail la méthodologie retenue par le groupe de travail pour représenter les profils atmosphériques. Cette annexe présente également les profils de vitesse, turbulence et température résultants pour les classes de vent F3 et D5.
-----	--

⁷ Plusieurs écritures existent pour ces relations. L'écriture de cette formule est à mettre en relation avec le modèle numérique utilisé.

3.5.3 Transport des profils

Les modèles 3D utilisés pour la modélisation du transport de substances toxiques à l'atmosphère en cas de rejet accidentel ont pour intérêt majeur, comme indiqué précédemment, de permettre la prise en compte d'obstacles. Ces obstacles, outre de faire barrage à l'écoulement, sont une source de turbulence, la turbulence étant elle-même à l'origine du mélange permettant de diluer le produit. L'importance d'une bonne prise en compte des différents niveaux de turbulence apparaît ainsi explicitement. L'une des difficultés de telles approches est de modéliser suffisamment finement plusieurs échelles de turbulence, les échelles de turbulence atmosphérique sont en effet sans commune mesure avec les échelles de turbulence liées aux rejets.

Il apparaît de fait que le mélange turbulent du produit à l'atmosphère est piloté par deux niveaux de turbulence. Il convient de s'assurer que ces deux niveaux sont correctement reproduits dans l'ensemble du domaine. La turbulence en aval des obstacles est prédite localement par le modèle de turbulence. La turbulence atmosphérique est fixée par la classe de stabilité au travers des profils entrants. A ce titre, il convient de s'assurer que ces profils sont correctement transportés dans le domaine de calcul. En effet, si les obstacles pilotent très certainement le mélange dans leur proximité immédiate, la turbulence atmosphérique reste le vecteur de mélange principal en dehors de la zone d'influence des obstacles. Cela est représenté schématiquement sur la Figure 6.

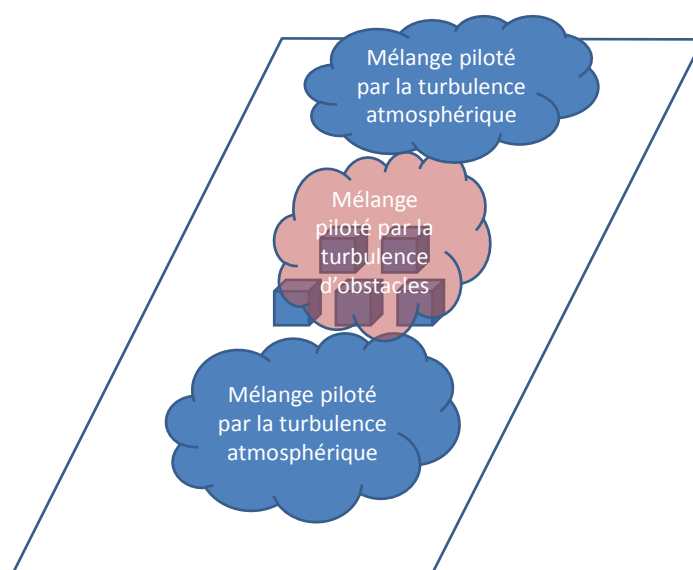


Figure 6 : représentation schématique des zones d'influence des différentes turbulences.

Ainsi, afin de s'assurer que l'écoulement en champ libre ne génère pas artificiellement de la turbulence, et donc du mélange, il en ressort la bonne pratique suivante :

BP4	L'utilisateur devra justifier du maintien des profils utilisés comme conditions aux limites du domaine sur la longueur de son domaine de calcul, dans la limite de 2 km, en champ libre. Il conviendra de s'assurer que les grandeurs caractéristiques en sortie du domaine sont bien représentatives de la même classe de stabilité atmosphérique que celle imposée en entrée de domaine. Cela sera démontré en comparant les profils de U , θ , et
-----	--

	des grandeurs caractéristiques de la turbulence. Il conviendra par ailleurs de calculer la L_{MO} en sortie du domaine et de la comparer à la valeur utilisée pour construire les profils en entrée de domaine.
--	---

Si cette justification peut être réalisée une seule fois pour différentes études, il convient toutefois de s'assurer que :

- le maintien est justifié pour le modèle de turbulence utilisé,
- les simulations permettant de justifier ce maintien ont été réalisées par l'utilisateur du code.

Cette démonstration sera à réaliser pour chaque nouvelle version d'outil.

A noter que le maintien de la classe de vent avec les hypothèses de base d'un modèle $k-\varepsilon$ apparaît difficile et qu'ainsi, des ajustements sont souvent nécessaires [9] [10]. Il conviendra ainsi que les ajustements nécessaires soient explicitement mentionnés dans le rapport de démonstration d'utilisation des bonnes pratiques comme indiqué en Annexe 11.

4. BREVE DESCRIPTION DES MODELES DE CALCUL

Pour modéliser les phénomènes de dispersion atmosphérique de substances dangereuses, les modèles numériques 3D sont basés sur la résolution des équations de comportement des fluides. De ce fait, ils doivent permettre de prendre en compte l'ensemble des phénomènes intervenant de façon significative sur la dispersion, qu'ils soient liés à l'atmosphère comme la turbulence thermique, ou au site comme les obstacles ou le relief. Différents modèles et les hypothèses associées sont ensuite introduits pour permettre la résolution de ce système d'équations au moyen d'outils de calcul.

Le système décrivant le modèle physique est composé de :

- une équation de conservation de la masse,
- trois équations de conservation de la quantité de mouvement,
- une équation de conservation de l'énergie,
- une équation de conservation des espèces,
- la loi d'état du mélange gazeux.

Sous l'appellation de modèles 3D, il convient de distinguer les modèles CFD et les modèles mass-consistent couplés à des modèles de dispersion. Il convient de citer également l'existence des modèles de type « shallow layer » [49][50], approche intermédiaire entre les approches intégrales et la modélisation 3D. Ces modèles permettent de prendre en compte certains effets mais sans la précision des modèles 3D. Ils ne sont pas détaillés dans le présent document.

Sans détailler la méthodologie de chacune de ces approches, ce chapitre décrit les grandes lignes de ces différents modèles, leurs avantages mais aussi leurs limitations sur la base de leurs hypothèses fondatrices. Ces différentes hypothèses pour chacun des modèles, et sous modèles physiques associés, seront comparées aux caractéristiques des écoulements atmosphériques pour juger de l'applicabilité ou non de ces modèles.

4.1 LES MODELES CFD

Les modèles CFD résolvent les équations de transport des différentes grandeurs aérothermochimiques et permettent ainsi de déterminer ainsi leur distribution dans le domaine au cours du temps. La résolution exacte de ce système d'équations aux dérivées partielles étant impossible pour les configurations réelles, différents sous-modèles doivent être introduits. En particulier, la présence de phénomènes turbulents nécessite l'usage de filtres ou de moyennes pour permettre la résolution des équations. Ces opérations font apparaître des corrélations entre les fluctuations des différentes grandeurs. La résolution de ces corrélations nécessite le recours à un modèle de turbulence. Etant entendu que le mélange est majoritairement piloté par les phénomènes turbulents, il est clair que la modélisation de ces phénomènes est fondamentale.

4.1.1 Modélisation des phénomènes turbulents

La turbulence dans un fluide est un phénomène complexe difficilement prédictible. Lesieur [13] propose la définition suivante :

- « Premièrement un écoulement turbulent doit être imprévisible au sens où une petite incertitude sur la connaissance de l'état initial va s'amplifier en rendant impossible une prédiction déterministe précise de son évolution.
- Deuxièmement, il doit satisfaire la propriété d'accroissement du mélange. Cela signifie qu'un écoulement turbulent doit engendrer un mélange plus rapide que sous le seul effet de la diffusion moléculaire.
- Troisièmement, il doit impliquer une large gamme d'échelles spatiales ».

Si les phénomènes turbulents restent extrêmement complexes, différentes théories ont été développées pour permettre sa compréhension. Ainsi, suivant la théorie de Kolmogorov, Figure 7, il ressort que :

- La majeure partie de l'énergie cinétique turbulente est contenue dans les plus grandes échelles de la turbulence ;
- les petites échelles sont responsables des phénomènes de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ;
- Les transferts d'énergie s'effectuent des grandes échelles vers les petites.

Il est également important de noter que, généralement, les grandes échelles sont anisotropes alors que les petites sont isotropes. C'est en particulier le cas pour les écoulements atmosphériques.

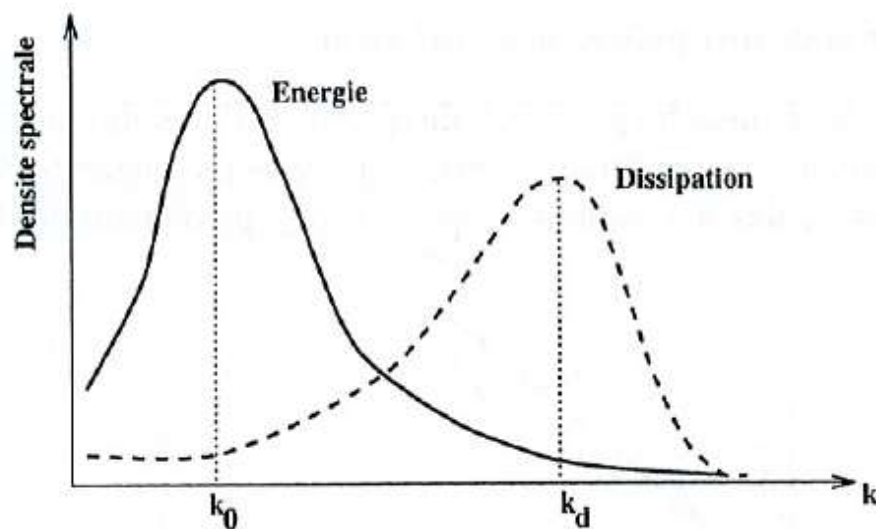


Figure 7 : Distribution spectrale de l'énergie cinétique turbulente et de la dissipation scalaire en fonction du nombre d'onde.

Sur la base de ces éléments, il est possible de distinguer trois grandes familles de modélisation des phénomènes turbulents :

- La modélisation numérique directe (SND ou DNS en anglais), qui consiste à résoudre de manière explicite toutes les échelles de la turbulence ;

- La Simulation des grandes échelles (SGE ou LES en anglais), qui résout explicitement les plus grandes échelles (celles qui contiennent l'énergie de la turbulence) et modélise les petites ;
- Les approches moyennées (RANS en anglais), qui modélisent toutes les échelles de la turbulence.

Il est possible de représenter, de façon schématique, les résultats issus de ces différentes approches, Figure 8.

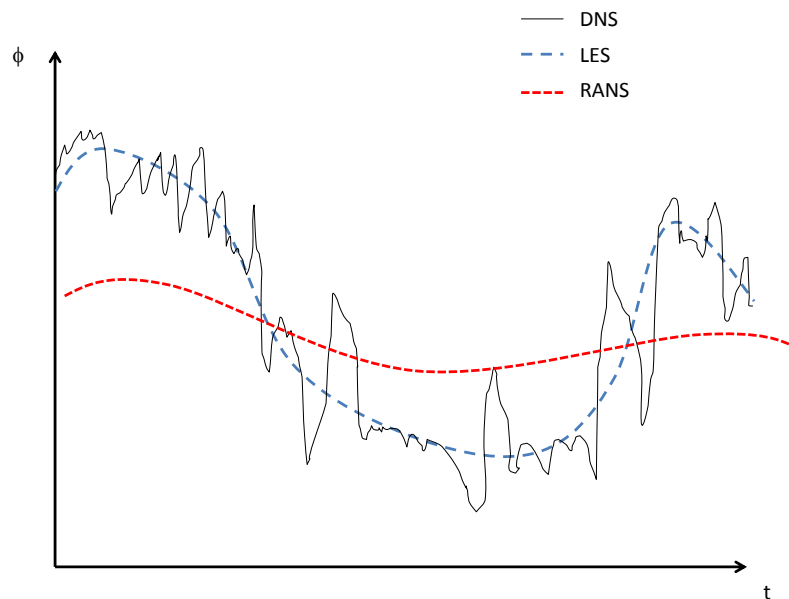


Figure 8 : Représentation schématique de l'évolution d'une grandeur physique au cours du temps selon les différentes modélisations de la turbulence.

Comme le montre cette figure, la DNS permet de capturer toutes les fréquences de l'écoulement et ainsi l'ensemble des fluctuations. La LES consiste à filtrer les fréquences les plus élevées mais reproduit les fluctuations liées aux plus grandes échelles. Enfin, l'approche RANS ne fournit que l'information du mouvement moyen. Il convient de noter que les deux premières approches correspondent à une réalisation alors que l'approche RANS correspond à la moyenne statistique d'un grand nombre de simulations. Ce point est discuté plus en détail par la suite, notamment pour ce qui concerne l'impact sur l'utilisation et le traitement des résultats pour ces différentes approches.

Le corollaire de cette figure est lié au maillage. Ainsi, la DNS requiert un maillage capable de capturer toutes les échelles de la turbulence, donc y compris l'échelle de Kolmogorov, ce qui impose des maillages conséquents. L'ordre de grandeur du nombre de points total pour une telle simulation est de l'ordre de $Re^{9/4}$, soit pour un écoulement atmosphérique avec $Re \approx 5 \cdot 10^5$, 10^{12} mailles.

La précision d'un calcul LES dépend du maillage. L'échelle de coupure doit impérativement se situer dans la zone dite inertielle du spectre de turbulence, zone correspondant au transfert d'énergie entre grandes et petites échelles. A l'extrême, une échelle de coupure au-delà de l'échelle de Kolmogorov fait tendre la simulation vers la DNS.

Les approches de type RANS ne représentant que l'écoulement moyen, les simulations deviennent, au-delà d'un certain seuil, indépendante du maillage. Ce dernier point doit être vérifié avant l'exploitation d'un résultat en réalisant des simulations pour plusieurs tailles de mailles.

Une description plus détaillée des méthodes LES et RANS est présentée en Annexe III.

Les approches de type RANS sont aujourd'hui les plus utilisées dans le monde industriel car elles permettent de minimiser les efforts de maillage et donc les temps de simulation. Ces approches consistent à simplifier la résolution du système d'équations aux dérivées partielles en ne s'intéressant qu'aux grandeurs moyennes. Chaque variable (ϕ) est décomposée, suivant la préconisation de Reynolds [30], en la somme d'une valeur moyenne statistique ($\bar{\phi}$), sur un ensemble de réalisations d'écoulement, et d'une fluctuation (ϕ'). Le système d'équations alors obtenu fait apparaître des termes supplémentaires, tels que les flux turbulents de vitesse $\overline{u'_i u'_j}$, de température $\overline{u'_i T'_j}$ et de masse $\overline{u'_i C'_j}$. Une modélisation de ces différents termes est nécessaire pour fermer le système d'équations. Parmi les modèles les plus utilisés pour modéliser les flux turbulents, l'hypothèse de diffusivité de Boussinesq (1877) postule que le frottement turbulent est responsable d'échanges de quantité de mouvement de l'écoulement moyen. Cette hypothèse introduit la notion de viscosité turbulente, propriété de l'écoulement et non du fluide, à l'inverse de la viscosité moléculaire. Il convient donc de modéliser cette viscosité turbulente. La viscosité et la diffusivité turbulente sont reliées, par un nombre de Prandtl turbulent (Pr_t) pour la relation du flux de chaleur, et par un nombre de Schmidt turbulent (Sc_t) pour la relation du flux de masse suivant :

$$\overline{u'_i T'_j} = \frac{\nu}{Pr_t} \nabla \bar{T}$$

et

$$\overline{u'_i C'_j} = \frac{\nu}{Sc_t} \nabla \bar{C}$$

Les valeurs des nombres de Prandtl turbulent et de Schmidt turbulents, sont généralement comprises entre 0,7 et 1 dans les travaux recensés dans la bibliographie scientifique ([41]). Il convient toutefois de souligner que ce nombre n'est en fait pas une constante mais une quantité variable au travers de la CLA [39]. L'impact sur les résultats des valeurs retenues a conduit à fixer une plage de valeurs acceptables.

BP5	Les nombres de Schmidt et Prandtl turbulents devront être pris égaux à 0,7, sauf justification par l'utilisateur d'une valeur différente au travers des cas de validation demandés (BP12), la valeur utilisée devant toutefois rester bornée entre 0,7 et 1,0.
------------	---

L'approche LES s'appuie également sur une décomposition mais présente l'intérêt de ne pas nécessiter de moyenne statistique. Chacune des variables est ainsi décomposée en une grandeur filtrée et une partie dite de sous maille. La partie filtrée est résolue directement,

les valeurs de sous maille sont modélisées. Ces approches permettent de capturer plus finement les phénomènes physiques sous réserve de réaliser un maillage suffisamment fin. Dans ce cas, la majeure partie des échelles turbulentes sont résolues explicitement, assurant une meilleure prédiction des phénomènes de mélange turbulent. A noter que, dans le cas d'une utilisation d'une approche de type LES, le modélisateur justifiera l'approche utilisée pour moyennée la concentration.

4.1.2 Spécificité des écoulements turbulents atmosphériques

La turbulence atmosphérique est une turbulence qui peut être qualifiée de particulière en ce sens qu'elle met en jeu des écoulements stratifiés. Un gradient de température caractérise les premières couches de l'atmosphère, ce gradient de température a un impact important sur la turbulence atmosphérique. L'écriture classique des modèles de turbulence de type RANS, et en particulier des équations de transports pour les grandeurs turbulentes, (k - ϵ) par exemple, ne prend pas en compte ce terme qui peut être source de production ou de dissipation d'énergie selon la stabilité atmosphérique. Le gradient thermique diffère en effet entre une atmosphère stable pour laquelle la température augmente avec l'altitude, et une atmosphère instable pour laquelle la température diminue avec l'altitude. Ce point est explicité en détail en annexe III, annexe décrivant les modélisations de la turbulence.

Il convient de retenir la nécessité d'utilisation de modèles de turbulence adaptés aux spécificités de ces écoulements atmosphériques. Cette spécificité a conduit à l'écriture de la bonne pratique suivante :

BP6	Le modèle de turbulence utilisé doit permettre de prendre en compte les spécificités des écoulements atmosphériques selon l'annexe III.
------------	--

Le Tableau 4 donne un aperçu des différents modèles disponibles dans la littérature et l'application qui peut en être faite pour la modélisation des phénomènes de turbulence atmosphérique.

	Approche théorique des modèles			Application pratique		Synthèse
Approche	Modèle / Type de fermeture	Hypothèses et Limites	Domaine d'application	Dans le cadre du GT	Dans la littérature	Utilisation pour la dispersion atmosphérique
DNS	-	Résolution directe des équations nécessitant la capture de toutes les échelles de la turbulence	Cas théoriques	Aucune	Aucune	Maillages requis incompatibles avec les moyens de calcul actuels.
LES	Modèle de Smagorinsky [14]	Taux de transfert d'énergie des grandes vers les petites échelles constant Nécessité de positionner la taille du filtre dans la zone inertielle du spectre de la turbulence	Permet de prendre en compte l'anisotropie de la turbulence atmosphérique Une représentation instantanée rendant l'interprétation difficile dans le cas réglementaire	Les cas tests réalisés dans le cadre du GT ont permis de démontrer la bonne prise en compte du caractère anisotrope des écoulements. Ils ont également permis de se focaliser sur le point majeur lié à ces approches qu'est la définition des conditions aux limites.	Quelques papiers sur le sujet [51] [52]	Bonne prise en compte des phénomènes physiques. Maillages requis important nécessitant des moyens de calcul conséquents Interprétation des résultats complexe. Le faible retour d'expérience sur ces approches témoigne de la nécessité de développements complémentaires et notamment pour la définition de CL.
	Modèles dynamique [15]	Nécessité de positionner la taille du filtre dans la zone inertielle du spectre de la turbulence Calcul dynamique du taux de transfert d'énergie entre grandes et petites échelles	Permet de prendre en compte l'anisotropie de la turbulence atmosphérique		Aucune	
RANS	Contraintes algébriques turbulentes, types R_{ij} - ϵ	Résolutions de nombreuses équations de transport supplémentaires Résolution de l'écoulement moyen	Permet de prendre en compte l'anisotropie de la turbulence atmosphérique	Quelques cas tests dans le but d'appréhender le comportement de ces modèles et notamment leur capacité à reproduire l'anisotropie de la turbulence atmosphérique.	Quelques papiers de comparaison entre différentes modélisations de la turbulence [53].	Maillages acceptables Bonne prise en compte des phénomènes physiques. L'applicabilité de ces modèles à des situations concrètes de dispersion atmosphérique reste toutefois à démontrer.
	2-équations k- ϵ	Turbulence isotrope Résolution de l'écoulement moyen	Re très élevé	La majeure partie des simulations réalisées dans le cadre du sous groupe Fil Rouge l'ont été avec des modèles de type k- ϵ . De fait, les bonnes pratiques de ce guide s'appuient majoritairement sur ce type de modèle. La construction des profils d'entrée en est l'exemple le plus explicite. Ce choix ne lève pas les limitations de ces modèles.	De nombreux papiers s'appuient sur des modélisations réalisées avec une approche de type k- ϵ en soulignant les adaptations portées à ce type de modèle pour une meilleure prise en compte de la turbulence atmosphérique [55]. De ce fait, de nombreuses comparaisons ont été réalisées entre ces approches et des mesures expérimentales [53][55].	Besoin en maillages limité Une partie de la physique n'est pas résolue. Le retour d'expérience sur l'utilisation de ces modèles a aujourd'hui permis de lever certaines questions théoriques. L'hypothèse d'isotropie de la turbulence reste le handicap principal de ces approches

	Approche théorique des modèles			Application pratique		Synthèse
Approche	Modèle / Type de fermeture	Hypothèses et Limites	Domaine d'application	Dans le cadre du GT	Dans la littérature	Utilisation pour la dispersion atmosphérique
	2-équations : k- ω	Turbulence isotrope Résolution de l'écoulement moyen		Quelques cas ont été réalisés dans le cadre du sous groupe fil rouge pour évaluer l'impact de cette approche.	Approche moins utilisée que le modèle k- ε .	Ce modèle possède les mêmes limitations que les modèles k- ε et le faible retour d'expérience et la faible émulation de la communauté scientifique le rend aujourd'hui moins mûr pour ce type d'application.
	1-équation : k-l	Turbulence isotrope Difficulté de prise en compte des obstacles pour la turbulence	Turbulence de jet Turbulence de paroi	Non utilisé car difficilement applicable à une turbulence atmosphérique.	Peu de référence dans la littérature [56]	Non applicable pour un écoulement atmosphérique Peut être utilisé pour la modélisation de la turbulence de jet
	0-équation : longueur de mélange	Turbulence isotrope Pas de prise en compte des obstacles pour la turbulence	Turbulence de jet	Non utilisé car difficilement applicable à une turbulence atmosphérique.	Aucune	

Tableau 4 : synthèse du domaine de validité pour les différentes approches de modélisation de la turbulence.

4.2 AUTRES FAMILLES DE MODELES D'ÉCOULEMENT

4.2.1 Modèles Mass consistent pour l'écoulement

Les modèles « mass consistent » ou « à divergence nulle » encore appelé « analyse objective » sont des modèles 3D permettant de caractériser l'écoulement atmosphérique. Ils ne traitent pas la partie dispersion et ne pronostiquent pas, typiquement, les variables décrivant vitesse, turbulence, température, humidité. Ils sont appelés modèles diagnostiques à conservation de la masse car l'écoulement est obtenu en ne résolvant qu'une seule des équations du système d'EDP, l'équation de conservation de la masse, généralement sous l'hypothèse d'un écoulement incompressible. Ces modèles produisent une interpolation sur le domaine, depuis des profils de vitesse en conditions limites ou distribués dans le domaine, sous une contrainte de divergence locale nulle. Ces modèles permettent de tenir compte de la topographie, d'une rugosité et d'une hauteur de canopée non uniformes mais également des obstacles au moyen de corrélations algébriques

4.2.2 Fonctionnement

La première étape de ces modèles est l'initialisation d'un champ vent 3D sur un maillage. Les méthodes peuvent varier suivant les modèles et faire appel à l'interpolation et l'extrapolation horizontale et verticale d'une ou plusieurs données.

Cette étape d'initialisation existe aussi pour les modèles CFD mais y a moins d'impact. Contrairement aux modèles à conservation de la masse, les valeurs d'initialisation des modèles CFD sont rapidement écrasées par les valeurs advectées depuis les conditions limites entrantes. A l'inverse, les valeurs obtenues in fine par un modèle à conservation de la masse dépendent fortement des valeurs d'initialisation et des formulations de correction introduites pour les bâtiments (vitesses verticales, avec ou sans recirculation, turbulence de sillage). A partir de cette initialisation, un écoulement à divergence nulle est calculé sur le maillage par résolution numérique avec des conditions limites pouvant être :

- Imperméabilité au sol
- Vitesse verticale nulle au sommet du domaine de calcul.

La résolution de ce champ de vent n'est pas couplée à la turbulence et à la stratification thermique. Afin de toutefois prendre en compte la dépendance du contournement des obstacles (topographie ou bâtiment) à la stabilité atmosphérique, certains modèles possèdent un paramètre fonction de la stratification thermique qui intervient lors du calcul de la divergence nulle. Ce paramètre va autoriser plus ou moins de vitesse verticale et donc de contournement.

Les modèles à conservation de la masse prenant en compte les obstacles sont basés sur les travaux de Røkle[31]. Entre l'étape d'initialisation et le calcul de la divergence nulle, le champ de vent est modifié analytiquement dans différentes zones autour des obstacles. Le contournement en amont de l'obstacle et la recirculation et le sillage en aval sont ainsi forcés par ces corrélations. Les dimensions des différentes zones sont ainsi fonction des dimensions de l'obstacle et du vent incident, Figure 9.

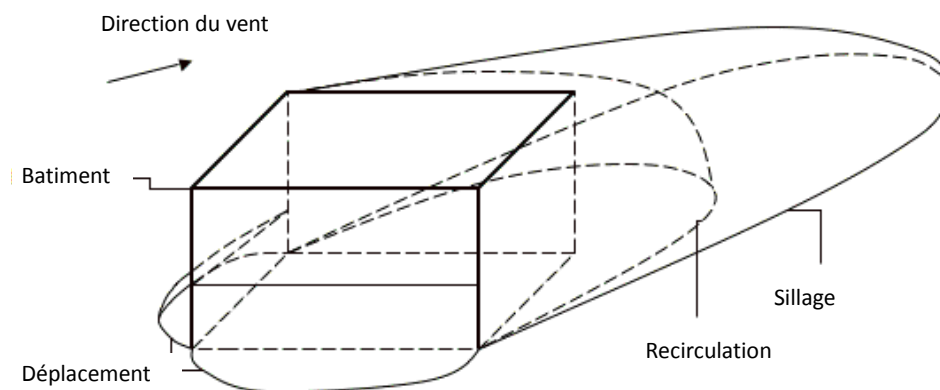


Figure 9 : représentation schématique des différentes zones pour un écoulement autour d'un obstacle.

4.2.3 Turbulence

Afin de caractériser la turbulence nécessaire aux modèles de dispersion, les modèles à conservation de la masse peuvent intégrer différentes approches, notamment l'utilisation de lois analytiques fonction des grandeurs caractéristiques (longueur de Monin-Obukhov, vitesse de frottement, hauteur de couche de mélange,...)[32][33][34], des calculs dérivés de la déformation du champ de vent permettant de prendre en compte les effets locaux ou bien encore une combinaison des deux approches.

4.2.4 Modélisation de la dispersion dans ces modèles

4.2.4.1 Modèles LPDM : Modèle de dispersion lagrangien à particules

Dans un modèle de dispersion lagrangien à particules, les émissions dans l'atmosphère sont simulées à l'aide de particules fictives, représentant chacune une masse donnée de polluant. Ces particules suivent de manière passive le mouvement turbulent de la phase porteuse dans lesquelles elles sont introduites. A partir de leur distribution spatiale à un instant donné, on peut donc reconstituer la concentration de substance émise. Le mot particule désigne ici une portion de fluide contenant la substance émise, suffisamment petite pour suivre le mouvement des plus petits tourbillons existants dans l'atmosphère.

Les polluants sont simulés par ces particules fictives dont le mouvement dans un domaine tridimensionnel est défini par le vent local et dont la dispersion est obtenue par l'intermédiaire de fluctuations de vitesse aléatoires solution des équations différentielles stochastiques, qui reproduisent les caractéristiques de la turbulence atmosphérique locale.

BP7	Le pas de temps des particules doit être en cohérence avec la dynamique du rejet et les caractéristiques du maillage.
BP8	L'utilisateur démontrera que le nombre de particules utilisé pour calculer les concentrations permet une incertitude inférieure à 5% (de l'ordre de 400 particules)

4.2.4.2 Spécificité

Les trajectoires des particules étant résolues explicitement, ces modèles sont peu sensibles au maillage et présentent peu de diffusion numérique. Les algorithmes utilisés sont inconditionnellement stables, c'est-à-dire qu'un pas de temps grand ne va pas faire diverger la solution. Cela ne signifie pas que la précision des résultats est indépendante du pas de temps, il s'agit uniquement d'une propriété numérique du schéma.

4.2.5 Développements récents

Les développements récents ont porté sur la spécification et le traitement des conditions aux limites, la caractérisation et la vérification du coefficient de transport dans le modèle, l'application à différents flux turbulents, le développement de modèles pour les fluctuations de concentration dues à la diffusion turbulente, la prise en compte des effets de jet et de densité et les changements de phase. Ces modèles devront être précisés et justifiés dans les rendus.

5. MODELES PHYSIQUES ET NUMERIQUES

5.1 RESOLUTION NUMERIQUE

La résolution numérique des EDP nécessite le recours à des méthodes numériques. L'importance des techniques de résolution numérique spatiale et temporelle des équations est grande car le système d'équations aux dérivées partielles (EDP), ne peut être résolu exactement. Le continuum espace-temps est ainsi découpé en éléments discrets spatiaux (mailles) et temporels (pas de temps) sur lesquels les représentations algébriques des équations sont intégrées. Cette discrétisation peut être réalisée selon plusieurs principes et chaque discrétisation n'est pas équivalente aux autres du point de vue de la qualité de la représentation algébrique et de la résolution associée. Ainsi les bonnes pratiques concernant les techniques numériques sont primordiales pour s'assurer d'une bonne représentation des phénomènes physiques. De mauvais choix de méthodes numériques peuvent conduire à une augmentation des phénomènes de diffusion numérique qui conduise à minimiser les distances d'effet calculées.

5.1.1 Discrétisation des équations

Les différentes notions associées à la génération d'un maillage sont décrites en annexe 4. La notion de maillage est une part importante de la modélisation et nécessite à ce titre plusieurs préconisations et notamment la bonne pratique suivante.

BP9	Pour un calcul LES, justifier la taille des mailles choisies sur la base des échelles caractéristiques de l'écoulement. Il convient également de justifier que la fraction modélisée ((énergie modélisée)/(énergie totale) est inférieure à 20% [103]. Pour un calcul RANS, il est nécessaire de justifier de l'indépendance des résultats au maillage (convergence en maillage). Pour une approche mass-consistent, il conviendra également de démontrer que l'écoulement est indépendant du maillage.
------------	---

Avant de présenter la notion de maillage à proprement parler, il faut noter que ce maillage se rapporte à un domaine restreint de l'espace physique. Un écoulement fluide, et plus encore un écoulement atmosphérique, n'est bien évidemment pas borné sur un domaine fini. A ce titre, les frontières du domaine de calcul précisent les échanges entre ce volume fini dans lequel sont résolues les équations aux dérivées partielles et le milieu environnant. La définition de ces conditions limites est un point essentiel pour la mise en place d'une simulation numérique. La notion de profils de vent, de turbulence et de température a été abordée précédemment. Ces profils permettent ainsi de définir des conditions limites physiquement acceptables en entrée du domaine de calcul.

La définition d'une condition limite correcte ne suffit toutefois pas, celle-ci ne devant pas être modifiée par des effets à l'intérieur du domaine. La présence d'un obstacle à proximité immédiate de l'entrée du domaine entraîne par exemple la remontée d'information dans l'écoulement qui peut perturber le profil entrant. Ce point a été très spécifiquement mis en évidence sur l'un des cas de modélisation réalisés dans le cadre du GT et décrit en annexe 8 et, ce cas a conduit à proposer la bonne pratique suivante :

BP10	Les conditions aux limites doivent être éloignées des obstacles d'une distance supérieure à 5 fois la hauteur de ces obstacles pour l'entrée du domaine et 10 fois pour les sorties.
-------------	---

Comme cela a indiqué au préalable, la taille des mailles doit être en accord avec le modèle de turbulence choisi, paragraphe 4.1.1. Si cette taille de maille peut être estimée au préalable par un utilisateur averti, la justification ne peut toutefois n'être réalisée qu'à posteriori. Il convient ainsi toutefois d'avoir en tête quelques critères de construction de ce maillage.

BP11	BP11 – Dans la zone d'intérêt, c'est-à-dire dans le panache de concentration supérieur au SEI (produit toxique) ou à la LIE (produit inflammable), le nombre de mailles utilisé dans chacune des directions des bâtiments et dans les espaces les séparant devra être argumenté sur la base des caractéristiques des bâtiments et de l'écoulement. A défaut de justification, une dizaine de mailles devra être utilisée dans chacune des directions [16].
BP12	La raison géométrique utilisée pour la variation de la taille des mailles devra être inférieure à 1,2.
BP13	Sauf justification, le facteur de forme des cellules devra être inférieur à 10. Les justifications pouvant permettre de s'affranchir de cette BP devront s'appuyer sur les caractéristiques du schéma numérique utilisé ou sur les caractéristiques particulières de l'écoulement.
BP14	Sauf justification et afin de limiter les phénomènes de diffusion numérique, le maillage devra être construit dans l'axe du vent, pour des maillages cartésiens. Les justifications permettant de s'affranchir de cette BP devront préciser les caractéristiques du schéma permettant de prévenir le phénomène de diffusion numérique excessive.

5.1.2 Schémas numériques

Plusieurs types de discrétisation des EDP sont possibles. Il existe trois grandes familles de discrétisation spatiale :

- méthodes des différences finies,
- méthodes des éléments finis,
- méthodes des volumes finis.

Ces trois méthodes présentent des caractéristiques propres [24]. Les codes de mécanique des fluides utilisent généralement une discrétisation en volumes finis, de ce fait, seule cette approche est plus spécifiquement détaillée en annexe 5. Toutefois, il est intéressant de noter l'existence de codes s'appuyant sur des schémas en éléments finis [25] ou encore en différences finies [26].

Ces schémas ont pour objet de transformer les gradients continus en différences discrètes en s'appuyant sur les développements de Taylor. Ces développements sont utilisés de manière tronquée, générant une erreur numérique, le niveau de troncature donnant l'ordre du schéma. Plus l'ordre est élevé, moins le schéma est diffusif, la diffusion numérique liée au schéma créant un phénomène artificiel purement numérique favorisant le mélange. Il convient ainsi d'utiliser des schémas permettant de minimiser ce phénomène de diffusion numérique. Si les schémas d'ordre 1 sont inconditionnellement stables, ce qui n'est pas le cas des schémas d'ordre supérieurs, ils induisent en revanche un niveau de diffusion numérique ne permettant pas d'assurer une modélisation correcte des phénomènes physiques. De tels schémas peuvent être utilisés en première approche, les temps de calcul étant plus faibles, avant d'affiner les modélisations avec des schémas d'ordre supérieur.

En résumé, il ressort les bonnes pratiques suivantes :

BP15	Utilisation de schémas numériques d'ordre 2 ou supérieur
-------------	---

Les schémas d'ordre strictement supérieur à 1 nécessitent l'utilisation d'outils numériques, appelés limiteurs de flux, permettant de limiter les gradients afin d'assurer leur stabilité. Il conviendra de s'assurer que ces limiteurs ne dégradent pas de manière abusive l'ordre du schéma comme c'est le cas des limiteurs les plus simples. L'ordre effectif du schéma pourra être retrouvé au moyen des méthodes usuelles [58].

5.1.3 Domaine de validité

Du point de vue théorique, la validation des modèles CFD est plus facile à effectuer que celle des modèles de type intégral car les résultats se présentent sous la forme de variations spatio-temporelles des grandeurs physiques.

La modélisation tridimensionnelle apporte des informations qualitatives en plus des résultats quantitatifs : elle permet d'observer très facilement l'évolution du nuage que se soit en perspective ou dans des coupes.

Dans tous les cas et dans la mesure où il est impossible de traiter l'ensemble des modèles de manière exhaustive, il conviendra de justifier la validité des modèles au cas par cas au travers de la bonne pratique n°11, cette phase de validation des outils étant détaillée en annexe 10.

BP16	La validation d'un outil de modélisation doit comporter plusieurs étapes depuis des cas fondamentaux jusqu'à des cas à grande échelle représentatifs. <u>L'utilisateur</u> de l'outil réalisera pour ce faire une comparaison de résultats numériques avec différents cas analytiques ou expérimentaux pour lesquels des données expérimentales sont disponibles. Des cas de comparaison pertinents sont cités en annexe X du présent document.
-------------	--

5.2 MODELISATION DE L'ENVIRONNEMENT

L'environnement (bâtiments, merlons, relief, etc.) est une des données d'entrée importantes pour tout outil de dispersion atmosphérique 3D. L'ensemble des éléments de topographie, d'origine naturelle ou anthropique, devront être pris en compte, implicitement ou explicitement.

5.3 MODELISATION DES EFFETS D'UNE MESURE DE MAITRISE DES RISQUES

Dans le contexte des PPRT (Plan de Prévention des Risques Technologiques), si l'impact de la prédiction des distances d'effet est considérable en raison des conséquences humaines et financières (expropriation, mesures compensatoires, ...), l'évaluation de la probabilité d'un évènement l'est également.

Dans ce contexte, un des intérêts des outils tridimensionnels de modélisation est de permettre une évaluation de l'efficacité de certaines mesures de maîtrise des risques. Il convient par ailleurs de préciser que, si des variabilités peuvent être observées avec les outils CFD, c'est, de la même manière, le cas des outils intégraux dont les modèles de dispersion nécessitent également l'utilisation de nombreux paramètres. Ces variations sont par ailleurs à rapprocher des incertitudes sur les seuils d'effets pour les différentes substances d'intérêt.

6. SIMULATIONS NUMERIQUES

Le nombre de paramètres nécessaires à la modélisation d'un écoulement au moyen d'un outil 3D étant important et chaque utilisateur pouvant avoir des références variées, une même simulation peut conduire, avec un même outil, à des résultats différents en fonction des choix réalisés par l'utilisateur (modèles et paramètres associés, discrétisation du domaine de calcul). A noter toutefois que ce constat est similaire pour les outils Intégraux ou Gaussiens.

Des outils habituellement utilisés par les participants du GT ont été mis en œuvre sur des cas correspondant aux domaines d'applications présentés au chapitre précédent. Ces cas ont été choisis pour mettre en évidence les variations possibles dans les choix de modélisation, modèle de turbulence, lois de parois ou encore profils de vent. La comparaison des résultats sur les deux premiers cas fictifs a permis de cibler les bonnes pratiques nécessaires. Le dernier cas a permis de valider le choix de bonnes pratiques par comparaison de l'ensemble des résultats à des données expérimentales. A noter que ces cas ont été réalisés au cours de l'élaboration du guide et ne prennent pas en compte celles-ci, ainsi le profil de vent par exemple n'est pas celui spécifié par le groupe, ... La majeure partie des cas présentés dans ce chapitre ont été réalisés par une approche de type CFD en utilisant une approche de type RANS.

6.1 ETAPE DE MISE EN DONNEES D'UNE SIMULATION 3D

La mise en œuvre des simulations nécessite la réalisation de différentes étapes, comme illustré sur la Figure 10.

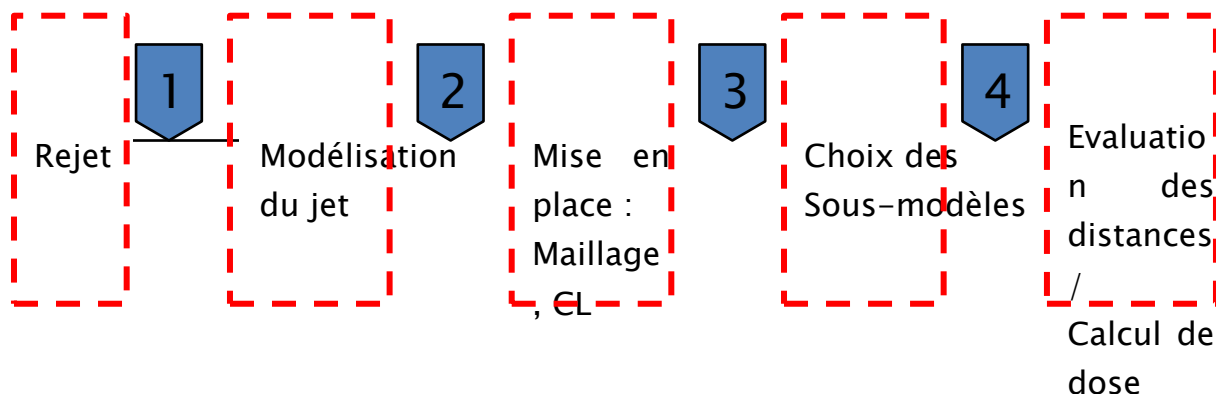


Figure 10 : Principales étapes de calcul d'un exemple d'un rejet accidentel.

Afin d'évaluer l'impact de ces différentes étapes de la modélisation sur les résultats de modélisation obtenus, trois cas de calcul ont été réalisés par différents participants s'appuyant sur de nombreux codes de calcul au cours de ce groupe de travail. L'ensemble des étapes de mise en données ont été spécifiquement étudiées lors de la réalisation et du post traitement comparatif de ces différents cas. Les étapes identifiées comme importantes pour la mise en données d'un cas de modélisation sont :

- l'introduction du terme source,

- le choix du domaine de calcul,
- la création du maillage,
- la mise en place des conditions aux limites du domaine,
- le choix des sous modèles physiques et notamment la turbulence.

Les cas présentés dans ce chapitre ont ainsi servi de support à l'élaboration des bonnes pratiques pour chacune de ces étapes.

6.2 CAS D'ETUDES

Trois cas ont été utilisés en support des réflexions dans le cadre du groupe de travail. Outre cette fonction support, les objectifs de ces modélisations étaient multiples :

- Evaluer la dispersion des résultats obtenus entre différents utilisateurs ;
- Déterminer les points clefs conduisant à ces divergences ;
- Evaluer le comportement des différents outils de calcul ;
- Valider les bonnes pratiques établies au cours du travail ;
- Valider l'usage de la modélisation 3D sur des configurations expérimentales.

Les deux premiers sont des cas totalement fictifs, le dernier reproduit une configuration expérimentale.

6.2.1 Cas n°1 – Dispersion en champ libre

La configuration étudiée est un rejet en champ libre pour différents types de gaz. Cette situation est représentative d'une rupture guillotine sur une canalisation de 2 pouces issue d'une cuve en pression, Figure 11.

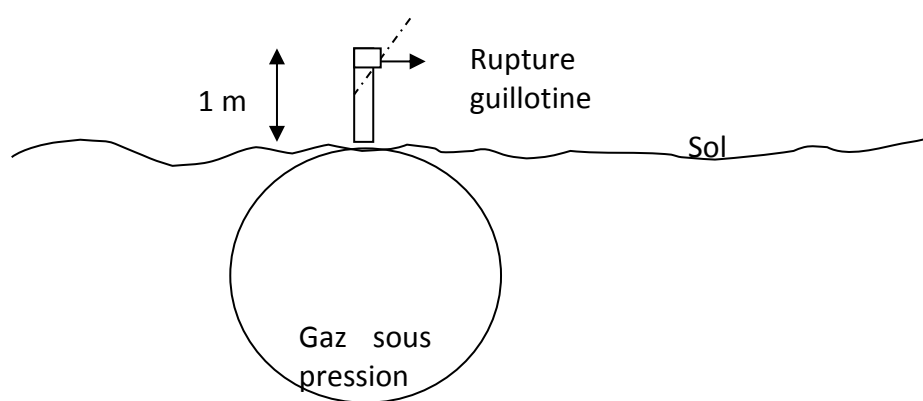


Figure 11 : Géométrie du rejet, cas de modélisation n°1.

Le gaz provient d'une capacité à 8 bars située 1 m en amont de la rupture. Un rejet constant sur une durée de 10 minutes a été modélisé dans l'axe du vent pour deux classes de vent. Les classes de vent retenues sont les classes F3 et D5, classes demandées dans les études

réglementaires [6]. Ce gaz provient d'une cuve située en amont et non prise en compte dans les modélisations. Trois types de gaz ont été étudiés :

- un gaz lourd (C_3H_8), de masse molaire 44 g/mol. Le débit de fuite est alors de 4,5 kg/s. Après détente la vitesse d'éjection est de 250 m/s pour une densité de 1,83 kg/m³ ce qui fait un diamètre virtuel de 0,112 m.
- un gaz léger (NH_3), de masse molaire 17 g/mol. Le débit de fuite est alors de 2,8 kg/s. Après détente la vitesse d'éjection est de 402 m/s pour une densité de 0,707 kg/m³, soit un diamètre virtuel de 0,112.
- un gaz neutre (CO), de masse molaire 28 g/mol. Le débit de fuite est alors de 3,6 kg/s. Après détente la vitesse d'éjection est de 349 m/s pour une densité de 1,16 kg/m³, soit un diamètre virtuel de 0,107 m.

Les données fournies pour ce premier cas se limitaient aux caractéristiques du terme source et aux préconisations de classes de vent. Les différents utilisateurs étaient ensuite totalement libres de fixer l'ensemble des autres paramètres nécessaires à la modélisation. Les résultats détaillés pour ce cas sont présentés en annexe 7. A titre d'illustration, la Figure 12 présente les profils verticaux de concentration en ammoniac et en propane à 500 m en aval du point de rejet, 10 minutes après le début de celui-ci.

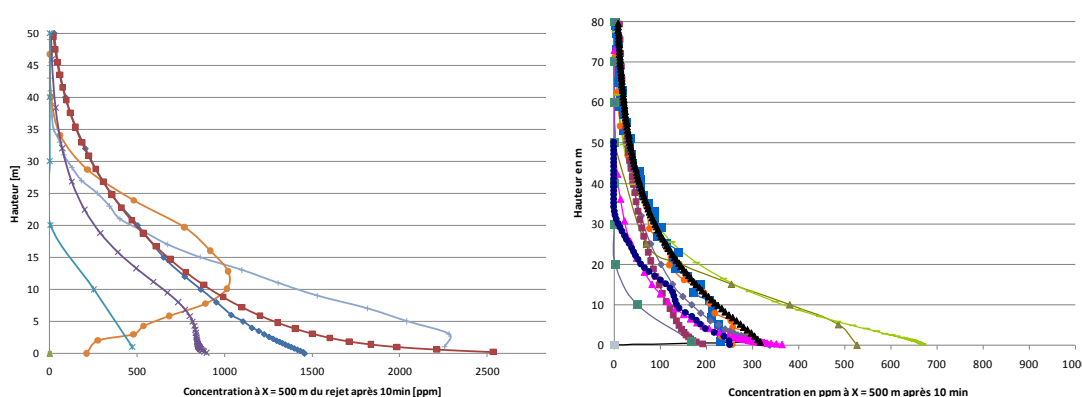


Figure 12 : Exemples de résultats obtenus sur le cas n°1. A gauche, concentration en ammoniac à 500 m en aval du point de rejet après 10 minutes pour une classe de vent F3 – A droite, concentration en propane à 500 m en aval du point de rejet après 10 minutes pour une classe de vent D5.

Ces courbes montrent la variété des niveaux de concentration obtenus 50 m en aval du point de rejet. Si le niveau de concentration est un indicateur, il convient d'étudier également l'impact sur le calcul de distance d'effet. Les valeurs de distance d'effet obtenues par rapport à des seuils de 100 et 1 000 ppm sont illustrées par l'évolution de la concentration en fonction de la distance au point de rejet et comparaison à des valeurs seuils. Les courbes obtenues pour la dispersion de CO sont reproduites Figure 13. Ce cas est celui ayant conduit aux disparités les plus importantes.

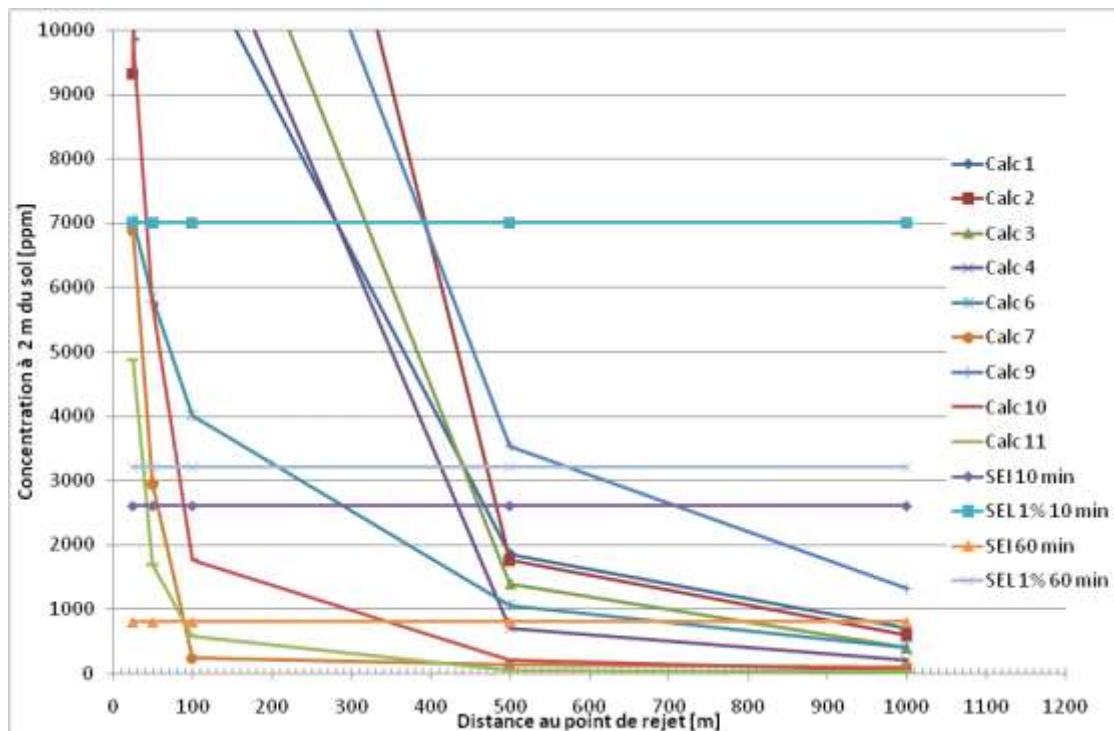


Figure 13 : Distances d'effet obtenues par les différentes modélisations.

Outre la relation entre concentration et distance d'effet, cette courbe met en évidence la forme typique des courbes de dispersion. Dans une première zone, la décroissance de la concentration en fonction de la distance est relativement rapide, les écarts de distance correspondent à de très fortes disparités de concentration prédite. Les courbes présentent ensuite une décroissance plus faible de la concentration en fonction de la distance. Dans cette partie du domaine, de faibles écarts de concentration peuvent ainsi conduire à des différences importantes pour les distances d'effet. L'ensemble des résultats obtenus pour ce second cas sont reproduits en annexe 7.

Les divergences observées sur ce cas, représentatif d'une situation susceptible d'être modélisée dans une étude réglementaire témoignent de la nécessité d'homogénéiser les pratiques. En analysant les pratiques de modélisation, ce cas a permis d'identifier 4 causes principales d'écart :

- la prise en compte du terme source,
- le profil de vent représentatif des classes de stabilité atmosphérique.
- le maillage, à titre indicatif, le nombre de mailles utilisés pour ce cas variait de 200 000 à 6 000 000 cellules, soit un facteur 30 sur le nombre de mailles,
- le modèle de turbulence.

Ces quatre points ont fait l'objet d'une étude préalable au cas suivant dans le but d'homogénéiser les pratiques avant ce deuxième cas.

6.2.2 Cas n°2 – Dispersion en présence d'obstacles

Le second cas est un rejet accidentel propane avec un débit de 45 kg/s. L'objectif était de déterminer la masse inflammable obtenue pour une telle fuite dans un milieu encombré d'obstacles et la distance à la LIE, paramètres qui pourraient être ensuite utilisés pour un calcul

d'explosion. La géométrie modélisée est schématisée sur la Figure 14. Par ailleurs, comme indiqué sur cette figure, un mur a été positionné 120 m en aval du point de rejet.

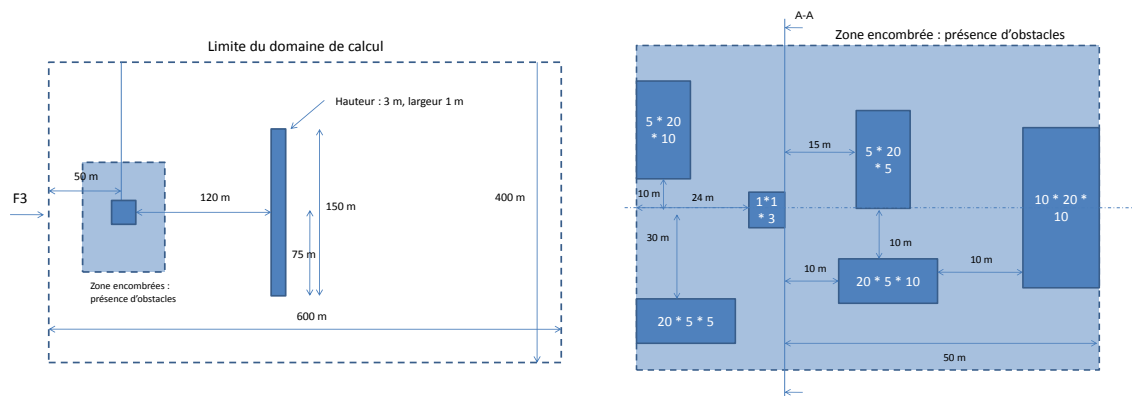


Figure 14 : Géométrie numérique utilisée pour le second cas de modélisation, à gauche domaine de calcul – à droite, précisions sur la zone encombrée.

La configuration précédente a permis de cibler quatre points de divergence, deux de ces quatre points ont été précisés en amont de la réalisation du cas n°2 afin d'évaluer plus en détail l'impact des deux autres. Il a ainsi été décidé pour ce second cas de modélisation :

- Profil atmosphérique : des profils de vitesse, turbulence et température ont été imposés pour limiter les divergences de conditions aux limites. Les équations représentant ces profils sont données en annexe 8. Ces profils n'avaient pour seul but que d'homogénéiser les pratiques, n'étant pas ceux finalement proposés.
- Rejet : la vitesse d'injection a été réduite pour s'affranchir de l'impact d'une modélisation d'un rejet avec une vitesse importante, pour ce faire, la section du rejet a été fixée à 1 m². La vitesse d'injection est alors de 24 m/s environ.

La taille du domaine de calcul était également imposée. Les choix de maillage et de modèle de turbulence ont été laissés à l'initiative de l'utilisateur. Comme indiqué précédemment, les résultats attendus pour ce cas étaient la distance à la LIE et la masse inflammable. Les valeurs obtenues sont synthétisées dans le Tableau 5.

		Masse inf	Dist LIE
U1	C1	1660	132
U2	C2 - run 1	3 850	225
U2	C2 - run 2	2 550	155
U2	C3	3 000	135
U3	C4	757	145
U3	C5	923	118
U3	C6	1 194	120
U4	C5	3 370	250
U5	C2 - Run 1	-	140
U5	C2 - Run 2	1 667	150
U5	C2 - Run 3	2 639	130
U5	C3	3 100	130
U6	C7	4 045	258
U7	C4	3 464	68
U8	C8	1 690	163
U9	C8	1 250	150
U10	C2	2 193	162
E(X)		2335	155
$\sigma / E(X)$ en %		46	31

Tableau 5 : Synthèse des valeurs obtenues.

Les notations UX et CX dans ce tableau se réfèrent à l'utilisateur et au code utilisé, le suffixe run permettant de différencier plusieurs modélisations d'un même utilisateur avec le même code mais sous des hypothèses différentes. L'intérêt est de montrer la diversité des utilisateurs et des codes mais également les divergences entre plusieurs utilisateurs d'un même code, témoignant que l'outil utilisé n'est pas un critère pour préjuger des résultats.

Au vu de ces divergences, différents travaux ont été réalisés pour évaluer plus spécifiquement les causes de divergences. L'ensemble des travaux et résultats sont présentés en annexe 8. Le paramètre majeur qui est ressorti comme crucial de ces modélisations est la modélisation de la turbulence atmosphérique, spécificités décrites au paragraphe 4.1.2. Ce cas a ainsi permis l'élaboration des bonnes pratiques n°4, 5 et 6.

6.2.3 Cas n°3 - Validation des bonnes pratiques sur un cas expérimental

Les deux premiers cas de modélisation mis en place dans le cadre du groupe de travail étaient volontairement fictifs pour les raisons évoquées précédemment. Si ces cas ont permis de mettre en place un certain nombre de bonnes pratiques, ils n'en demeurent pas moins abstraits. De ce fait, ils n'ont pas permis d'évaluation de ces cas par rapport à des rejets réels. Le dernier cas de modélisation mis en place consiste ainsi à reproduire une expérience à grande échelle. Le choix de l'expérience à reproduire s'est appuyé sur les éléments suivants :

- rejet continu d'un gaz intrinsèquement lourd⁸,
- présence d'obstacles dans le domaine en aval du point de rejet,

⁸ Les quantités rejetées ne permettent toutefois pas de reproduire l'ensemble des phénomènes associés aux rejets massifs de gaz lourd.

- disponibilité de valeurs expérimentales à distance raisonnable du point de rejet,
- profil de vent caractéristique d'une atmosphère stable.

La configuration retenue est l'expérience de « Kit Fox Field » datant de 1995 au Nevada, qui a consisté à émettre du gaz CO₂ durant des conditions atmosphériques neutres à stables pour un total de 52 essais [60]. Lors de cette campagne, le gaz, du CO₂ possédant donc une densité 1,5 fois plus importante que l'air, a été émis par une source de 1,5 m sur 1,5 m horizontale. La Figure 15 présente une vue globale de l'expérience.

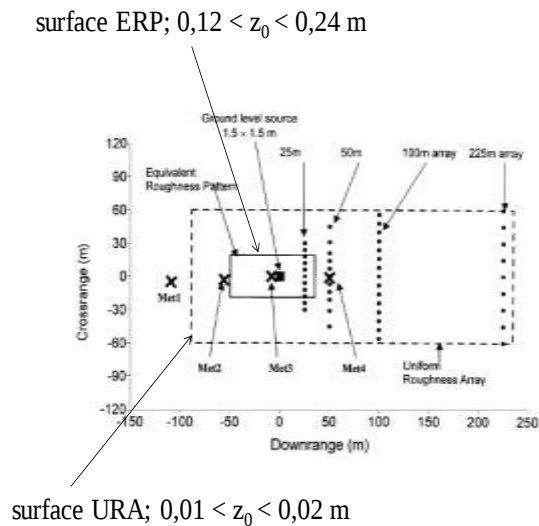


Figure 15 : Vue générale schématique de la configuration expérimentale. ERP : Equivalent Roughness Panel, zone de rugosité de 0,12 à 0,24 m - URA : Uniform Roughness Area, zone de rugosité de 0,01 à 0,02 m.

Le point de rejet est positionné au point de coordonnées (0,0). Des mâts de mesure du profil de vitesse et température sont disposés en amont et en aval du point de rejet. Des mesures de concentrations sont placées à 25, 50, 100 et 225 m en aval du point de rejet. Des obstacles de taille différente sont disposés autour du point de rejet, Figure 16.

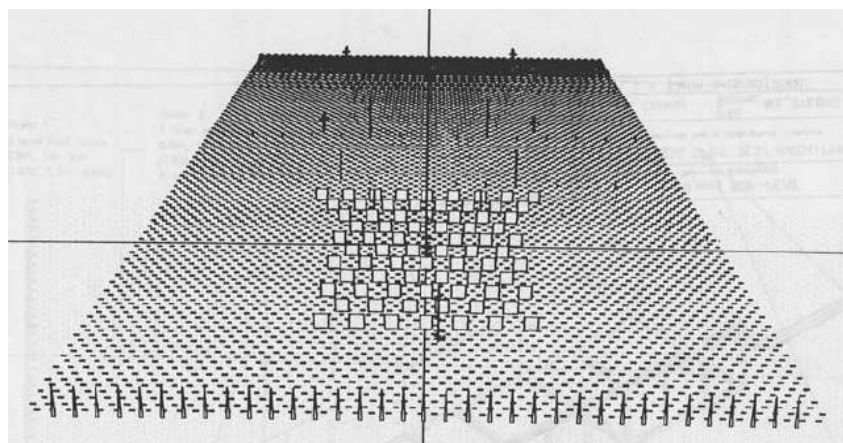


Figure 16 : Représentation des obstacles pour le cas modélisé.

L'expérience n°5-8 a été retenue, elle correspond à un écoulement atmosphérique présentant une forte stabilité, la LMO est estimée à 8 m.

L'ensemble des données relatives à ce cas sont reproduites en annexe 9. Parmi les différentes bonnes pratiques proposées dans ce guide, deux points ont spécifiquement été évalués sur cette comparaison expérimentale :

- la prise en compte des obstacles de manière explicite par rapport à une prise en compte implicite via des zones de rugosité,
- la représentation du profil de vent par la comparaison des résultats obtenus avec le profil expérimental et ceux obtenus en utilisant le profil tiré des bonnes pratiques.

Les résultats obtenus sur ce cas ont ainsi permis de comparer non seulement les simulations entre elles mais également de positionner les résultats obtenus par rapport aux valeurs expérimentales. En préambule, il convient de rappeler que toute mesure expérimentale est entachée d'incertitude. La Figure 17 montre ainsi l'évolution de la concentration en fonction de l'éloignement au point de rejet dans l'axe du vent pour les différentes simulations mais également pour les valeurs expérimentales. Cette courbe fait de nouveau ressortir deux zones distinctes, la première correspondant à une décroissance rapide de la concentration avec la distance, la seconde à une décroissance beaucoup plus lente.

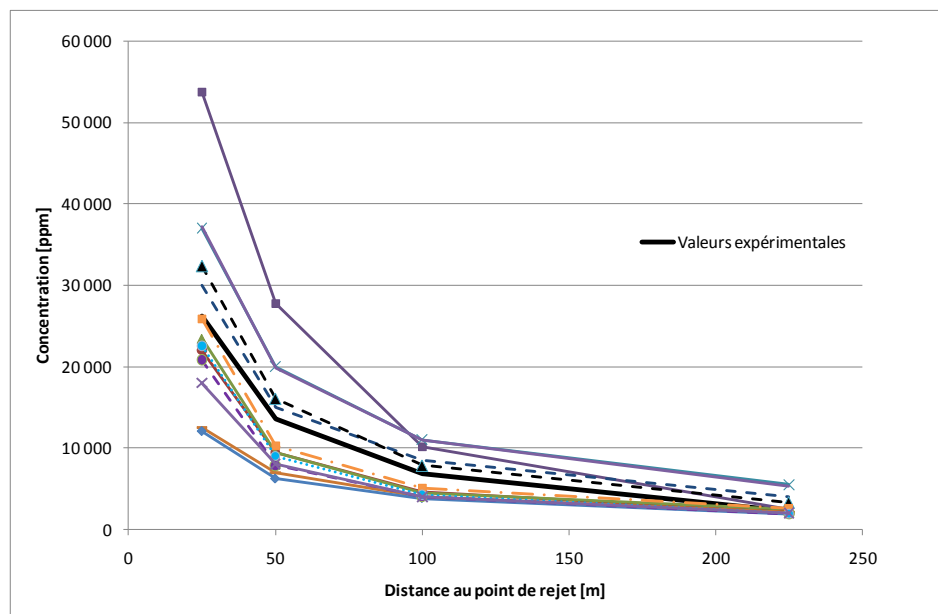


Figure 17 : Evolution de la concentration en CO_2 en fonction de la distance dans l'axe du rejet.

Cette courbe montre de nouveau des écarts notables entre les différentes simulations. Les écarts de concentration calculées peuvent être directement traduits en écarts de distance en se fixant un seuil, par exemple à 5 000 ppm, Figure 18.

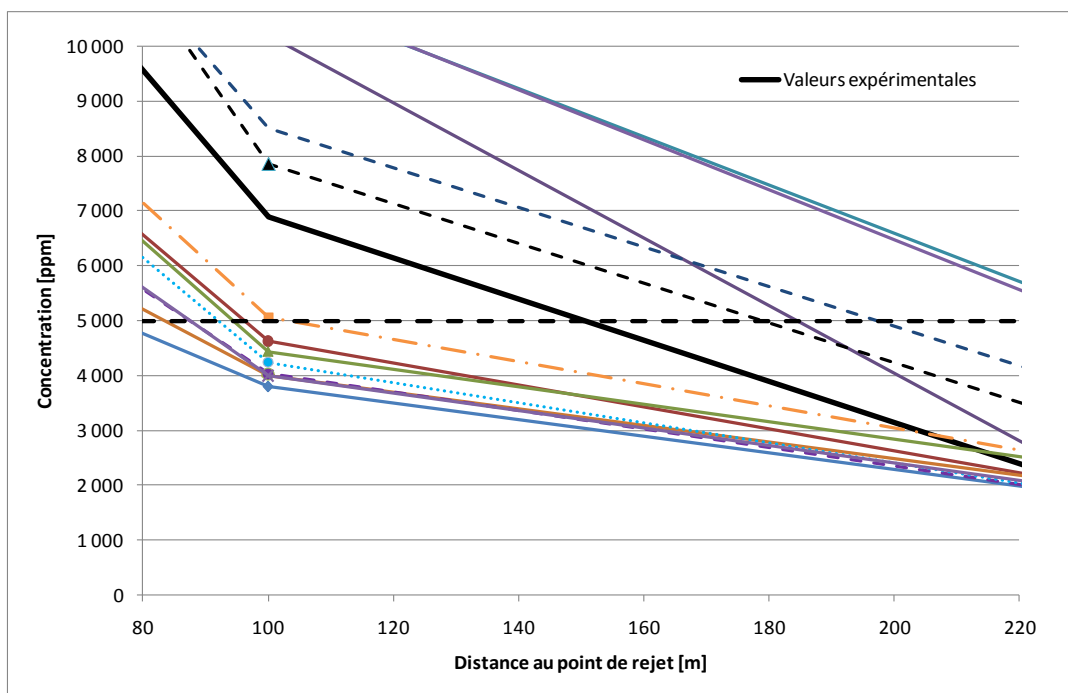


Figure 18 : Relation concentration, distance d'effets, zoom sur la courbe de la Figure 17 pour des valeurs de concentration de 5 000 ppm.

Cette figure montre ainsi une variation de la distance associée à la concentration de 5 000 ppm entre 80 et 250 m. Il faut noter que cette valeur de concentration est élevée par rapport aux seuils de toxicité des produits habituellement rencontrés. Cette courbe fait toutefois ressortir des familles de résultats. La première regroupe les courbes sous estimant la distance d'effet, la seconde la surestimant.

Les résultats sont synthétisés dans le Tableau 7 sous la forme de moyenne et écarts types entre les résultats obtenus.

Distance [m]	Mesures [ppm]	Moyenne des concentrations modélisées $E(x)$	$\sigma / E(x)$ [%]
25	26187	25 756	38%
50	13569	9 727	24%
100	6896	4 929	29%
225	2212	2 591	51%

Tableau 6 : Bilan des concentrations modélisées.

7. CONCLUSIONS

Le contexte réglementaire impose aujourd'hui de dimensionner aussi précisément que possible les zones de dangers autour des installations industrielles et ce, pour tous types de phénomènes dangereux, incendie, explosion et dispersion de produits toxiques. Dans le cas particulier des phénomènes de dispersion atmosphérique de produits toxiques, ces zones d'effet sont généralement évaluées au moyen d'outils Intégraux ou Gaussiens, méthodes basées sur un système d'équations simplifiées et calés sur des essais à grande échelle. Si ces outils sont performants et pertinents pour des rejets en champ libre, ils montrent leurs limites en présence de relief ou d'obstacles. Dans une telle situation, les approches 3D apportent l'avantage indéniable de prendre en compte ces éléments. Ces outils s'appuient sur la résolution des équations aux dérivées partielles pour décrire le mouvement des fluides dans un environnement encombré.

Il convient toutefois de souligner que ces approches 3D nécessitent à la fois des méthodes numériques précises mais également la paramétrisation de sous modèles physiques essentiels comme la représentation des phénomènes turbulents. Les divergences de pratique à l'origine du GT ayant donné lieu à ce document ont mis en évidence l'importance de ces points. Toutefois, un élément essentiel reste la représentation des profils de vent correspondant aux classes de stabilité atmosphérique qu'il convient d'utiliser dans les études réglementaires.

Les travaux du groupe de travail ont permis de définir les bonnes pratiques à utiliser pour reproduire, de manière satisfaisante les phénomènes de dispersion atmosphérique en situation accidentelle. Ces bonnes pratiques sont réparties en 5 grands thèmes :

- la validation de l'approche utilisée,
- les choix relatifs à la construction du maillage,
- l'utilisation de conditions aux limites adaptées,
- la définition du terme source et son intégration dans l'outil de modélisation 3D,
- la modélisation des phénomènes turbulents.

La réalisation de 3D cas de dispersion accidentelle, dont un s'appuyant sur des données expérimentales, ont permis de mettre en évidence l'importance de ces bonnes pratiques et leur effet sur la convergence des résultats entre les outils. Il convient toutefois de rappeler que, quelle que soit l'approche utilisée, des écarts sont toujours possibles entre les résultats des outils au regard de l'incertitude entourant la modélisation. A ce titre, la validation des outils de modélisation utilisés, quelle que soit l'approche, reste le point essentiel pour la prédiction de distances de sécurité.

Enfin, il faut souligner que les travaux réalisés par le groupe de travail et le niveau d'exigence atteint vont bien au-delà de ce qui est classiquement exigé pour les outils Intégraux ou Gaussiens.

8. REFERENCES

- [1] Stull, R.. An Introduction to Boundary Layer meteorology.
- [2] Pasquill, F., (1961). « The estimation of the dispersion of windborne material ». Meteor. Mag., 90, 33–49.
- [3] “Relations among stability parameters in the surface layer”, D. Golder, Boundary-Layer Meteorology 3, 1972.
- [4] TNO – Yellow Book”: “Methods for calculation of physical effects”, published by CPR 14^E. Commission for the Prevention of Disasters caused by Hazardous Materials.
- [5] Haven, J, and Spicer, T., “Development of an atmospheric dispersion model for heavier than air gas mixtures” (1985).
- [6] Circulaire du 10 Mai 2010 récapitulant les règles méthodologiques applicables aux études de dangers, à l’appréciation de la démarche de réduction du risque à la source et aux plans de prévention des risques technologiques (PPRT) dans les installations classées en application de la loi du 30 juillet 2003.
- [7] Businger JA, Wyngaard JC, Izumi Y, Bradley EF (1971) Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer. J Atmos Sci 28: 181–189.
- [8] Gryning, S., Batchvarova, E., Brümmner, B., Jorgensen, H. and Larsen, S., “On the extension of the wind profile over homogeneous terrain beyond the surface boundary layer”, Boundary-Layer Meteorol (2007) 124:251–268.
- [9] Alinot C. and Masson C., 2005, k-e model for the atmospheric boundary layer under various thermal stratifications, Journal of Solar Energy Engineering, vol 127, 438 – 443.
- [10] Pontiggia, M., Derudi, M., Busini; V. and Rota, R., “Hazardous gas dispersion: A CFD model accounting for atmospheric stability classes”, Journal of Hazardous Materials 171 (2009) 739–747.
- [11] Hostlag, A. and A. Van Ulden, A simple scheme for daytime estimates of surface fluxes from routine meteorological data, J. Clim. Appl. Meteor., 22, 517-529, 1983.
- [12] Ricou, F.P. and Spalding, D.B., “Measurements of entrainment by axisymmetric turbulent jets”, J. Fluid Mech., 21-32 (1961).
- [13] Turbulence in Fluids, M. LESIEUR, Second revised Edition, Kluwer Academic Publishers, 1990.
- [14] Smagorinsky, J., “General circulation experiments with the primitive equations. I: The basic experiment. Month. Weath. Rev. 91(3), 99-165.
- [15] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. “A Dynamic Subgrid-Scale Eddy Viscosity”, Model. Physics of Fluids A, 3(7):1760–1765, 1991. 26
- [16] “Best Practice Guideline for the CFD simulation of flows in the urban environment” Action COST 732 – Quality Assurance and Improvement of MicroScale Meteorological Models. Ed. J. Franke, A. Hellsten, H. Schlünzen, B. Carissimo. May 2007.

- [17] "Best Practice Guidelines". ERCOFTAC Special Interest Group on "Quality and Trust in Industrial CFD" Version 1.0, Editors : M. Casey and T. Wintergerste January 2000.
- [18] WRIGHT, N.G. and HARGREAVES, D.M., 2006. Unsteady CFD simulations for natural ventilation International Journal of Ventilation. 5(1), 13-20
- [19] D.M. Hargreaves, N.G. Wright. "On the use of the $k-\epsilon$ model in commercial. CFD software to model the neutral atmospheric boundary layer", Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics 95 (2007) 355–369.
- [20] Birch A.D. (1984). The structure and concentration decay of high pressure jets of natural gas. Combustion science and technology, Vol. 36, pp 249-261.
- [21] Ewan, B.C.R. and Moodie, K., "Structure and Velocity Measurements in Underexpanded Jets", Combustion Science and Technology, Vol. 45, pp. 275-288, 1986.
- [22] Britter, R., Weil, J., Leung, J. , Hanna, S., "Toxic industrial chemical (TIC) source emissions modeling for pressurized liquefied gases", Atmospheric Environment, Volume 45, Issue 1, January 2011.
- [23] Chaîneaux J., EMERGE project, 1st Progress report. July 1994.
- [24] Hirsch, Numerical computation of internal and external flows, 2nd edition, 2007.
- [25] Colin, O., Rudgyard, M., Development of high order Taylor Galerkin schemes for LES, J. of computational Physics 162 (2000), 338-371.
- [26] MacGrattan et al., "Fire Dynamics Simulator (Version 5) – Technical Reference Guide" NIST special publication 1018-5 (2008).
- [27] R.W. Schefer, W.G. Houf, T.C. Williams. Investigation of small-scale unintended releases of hydrogen: Buoyancy effects. International journal of hydrogen energy 2008.
- [28] Chen C.J., Rodi W. (1980). Vertical turbulent buoyant jets – A review of experimental data. H.T.M., The science & applications of heat and mass transfer, Pergamon Press.
- [29] S E. Gryning et al. On the extension of the wind profile over homogeneous terrain beyond the surface boundary layer. Boundary Layer Meteorology, 2007.
- [30] Reynolds, O. (1894), « On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion, » Phil. Trans. Roy. Soc. (A) 186, 123-164.
- [31] Rökle, R. (1990). Bestimmung der Strömungsverhältnisse im Bereich komplexer Bauwerksstrukturen. Dissertationsschrift, Univ. Darmstadt.
- [32] O'Brien, J., "A note on the vertical structure of the eddy exchange coefficient in the planetary boundary layer", J. Atmos. Sci., 27, 1970.
- [33] Louis, J. F., 1979: A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere. Bound.-Layer Meteor., 17, 187–202.

- [34] Hanna, S.R., 1982. Applications in Air Pollution Modelling. Edited by Nieuwstadt, F.T.M. and Van Dop, H. Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling, Reidel Publishing Co., Dordrecht, Holland, pp 275-310.
- [35] Sawford, B. L. and Guest, F. M.: 1988, 'Uniqueness and Universality in Lagrangian Stochastic Models of Turbulent Dispersion', in 8th Symposium on Turbulence and Diffusion, American Meteorological Society, Boston, MA, pp. 96–99.
- [36] Borgas, M. S. and B. L. Sawford, 1991: The small-scale structure of acceleration correlations and its role in the statistical theory of turbulent dispersion. J. Fluid Mech., 228, 295–320.
- [37] Introduction à la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide incompressible, P. SAGAUT. Springer 1998.
- [38] Probabilités, Analyse de données et statistiques, G. SAPORTA. TECHNIP (1992).
- [39] Konrad Koeltzsch. The height dependence of the turbulent Schmidt number within the boundary layer. Atmospheric Environment 34 (2000) 1147-1151.
- [40] Kisa, Jelemensky. (2009). « CFD dispersion modeling for emergency preparedness ». Journal of Loss prevention in the Process Industries, 22 (2009) 97-104.
- [41] Tominaga Y. Ted Stathopoulos, (2007). Turbulent Schmidt numbers for CFD analysis with various types of flowfield. Atmospheric Environment 41, 8091–8099.
- [42] The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence, W. JONES and B. LAUNDER, Int. J. Heat and Mass Transfer, Vol. 15, 1972.
- [43] « Application of the E- ϵ Turbulence Closure Model to the Neutral and Stable Atmospheric Boundary Layer ». Duynkerke, P. G.: J. Atmos. Sci. 45, 865–880, 1988.
- [44] Hanjalic, K., Launder, B., "Modelling turbulence in Engineering and the Environment – second moment routes to closure", Cambridge university press, 2001.
- [45] Test of turbulence models for wind flow over terrain with separation and recirculation, H. KIM and V. PATEL, Boundary Layer Meteorology, 94, 2000.
- [46] Rodi, W. 1993. Turbulence Models and their Application in Hydraulics. A State-of-the-Art. Review, third ed. 42
- [47] 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
- [48] Reynolds, O. (1894), « On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion, » Phil. Trans. Roy. Soc. (A) 186, 123-164.
- [49] Hankin, R., "Heavy gas dispersion: Integral models and shallow layer models", Journal of Haz. Mat., A103(2003).
- [50] http://s177835660.websitehome.co.uk/research/lisbona_mcgillivray_saw_gant_bilio_wardman_2014_pre-print.pdf

- [51] Mouilleau, Y., Champassith, A., « CFD simulations of atmospheric gas dispersion using the Fire Dynamics Simulator (FDS) », J. of Loss Prevention in the Process Industries 22 (2009) 316-323.
- [52] Salim, M., Cheah, S., Chan, A., "Numerical simulation of dispersion in urban street canyons with avenue-like tree planting: Comparison between RANS and LES", Building and Environment 46 (2011) 1735-1746.
- [53] Gousseau, P., Blocken, B., Van Heijst, G., 'CFD simulation of pollutant dispersion around isolated buildings: On the role of convective and turbulent mass fluxes in the prediction accuracy', J. of Hazardous materials 194 (2011) 422-434.
- [54] Labovsky, J., Jelemensky, L., "Verification of CFD pollution dispersion modeling based on experimental data", J. of Loss Prevention in the Process Industries 24 (2011) 166-177.
- [55] Pontiggia, M. et al, "CFD model simulation of LPG dispersion in urban areas", Atmospheric environment 45 (2011) 3913-3923.
- [56] Mazzoldi, Hill and Colls (2008)
- [57] Hanna, S., Hansen, O. Dharmavarani, S., "Flacs CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, Must, Prairie Grass and EMU observations", Atmospheric Environment 38 (2004) 4675-4687.
- [58] Celik, I., "Procedure for estimation and reporting of discretization error in CFD applications", Journal of Fluids Engineering.
- [59] Biltoft, C.A.,. Customer Report for Mock Urban Setting Test (MUST). DPG Doc. No. WDTC-FR-01-121, West Desert Test Center, U.S. Army Dugway Proving Ground, Dugway, UT 84022-5000. 2001
- [60] Hanna, S., Chang, J., Use of the Kit Fox field data to analyze dense gas modeling issues. Atmospheric Environment. 35 (2001) 2231–2242.
- [61] Barad, M.L.(Ed.). Project Prairie Grass. A field program in diffusion. Geophys. Res. Paper No. 59, Vols. I and II, AFCRF-TR-58-235, Air Force Cambridge research Center, Bedford, MA (1958).
- [62] User Manual fluidyn-PANACHE version 4.0.3. Ed. Transoft International – Fluidyn France. July 2008.
- [63] Cours FLUENT. Mécanique des Fluides 1. S. Ducruix. 2004.
- [64] Mackay and Matsugu, "Evaporation Rates of Liquid Hydrocarbon Spills on Land and Water", Canadian Journal of Chemical Engineering vol 51, August 1973
- [65] Brighton P.W., "Evaporation from a plane liquid surface into a turbulent boundary layer », Journal of Fluids Mechanics 159 , pp 323-345.
- [66] « Méthodes aux différences finies en énergétique » N. Darabiha, T. Poinso Ed. Ecole Centrale Paris, 1996.

- [67] Coldrick, S., further validation of the ACE instantaneous source model, HSE Books, 2014.
- [68] Aide mémoire technique n°6058 de l'INRS, « Evaluation de la vitesse d'évaporation et de la concentration d'un composé organique volatil dans l'atmosphère d'un local de travail », juin 2009.
- [69] Committee for the prevention of disasters, Methods for the calculation of physical effects, CPR 14E, « Yellow book », Third edition, 1997.
- [70] J. C. Chang and S. R. Hanna. Air Quality model performance Evaluation. Meteorol. Atmos. Phys. 87, 167–196, 2004.
- [71] E. Demael, B. Carissimo. Comparative evaluation of an Eulerian CFD and Gaussian Plume models based on Prairie Grass dispersion experiment. Journal of Applied Meteorology. 2008, vol. 47, no3, pp 888-900.
- [72] Efron B (1987) Better bootstrap confidence intervals. J AM Stat Assoc 82: 171–185.
- [73] Hanna, Chang and Strimaitis. Hazardous Gas Model Evaluations with Field Observations", Atmospheric Environment, Vol 27A, No. 15, pp 2265-2285, 1993.
- [74] Hanna Steven R., Olav R. Hansenb, Seshu Dharmavaram. FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations. Atmospheric Environment 38 (2004) 4675–4687.
- [75] Konrad Koeltzsch. The height dependence of the turbulent Schmidt number within the boundary layer. Atmospheric Environment 34 (2000) 1147-1151.
- [76] Spalding, D.B., 1971. Concentration fluctuations in a round turbulent free jet. Journal of Chemical Engineering Science 26, 95–107.
- [77] Tominaga Y. Ted Stathopoulos, (2007). Turbulent Schmidt numbers for CFD analysis with various types of flowfield. Atmospheric Environment 41, 8091–8099.
- [78] Nielsen, M. (1996). Surface concentrations in the FLADIS field experiments. Roskilde: Riso National Laboratory.
- [79] Rémy Bouet, Stéphane Duplantier, Olivier Salvi. Ammonia large scale atmospheric dispersion experiments in industrial configurations. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 18 (2005) 512–519.
- [80] Michal Kisa, Ludovic Jelemenski. CFD dispersion modelling for emergency preparedness. Journal of Loss Prevention in the Process Industries 22 (2009) 97–104.
- [81] Iannello 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.
- [82] Fauske, 1985. Flashing flows: some practical guidelines for emergency releases. Plant/Operations Progress, vol. 4, n° 3, p. 132.

- [83] HODIN A. (1996) Modélisation du débit à la brèche et du jet généré par une fuite d'ammoniac en phase liquide : état des connaissances et modélisation des rejets diphasiques .EDF-Centre Lyonnais d'Ingénierie, Note d'étude.
- [84] RAZZAGHI M., 1988. Droplet size estimation of two-phase flashing jets. Nuclear Engineering and Design, No. 114, p.115-124.
- [85] Woodward, J.L., 1995. Aerosol drop correlation and corrected rainout data using models of drop evaporation, pool absorption, and pool evaporation. In: CCPS/ AIChE Int. Conf. and Workshop on Modeling and Mitigating the Consequences of Accidental Releases of Hazardous Materials. AIChE/CCPS, 345 East 47th St., New York, NY 10017, pp. 117-148.
- [86] CCPS/AIChE, 1999. RELEASE: a Model with Data to Predict Aerosol Rainout in. Accidental Releases. AIChE/CCPS, 345 East 47th St., New York, NY 10017, ISBN 0-8169-0745-5, 184 pp.
- [87] Melhem, G.A., Comey, K.R., Gustafson, R.M., 1995. The Texaco/UOP HF alkylation additive technology: aerosolization reduction effects. In: Proc. Int. Conf. and Workshop on Modeling and Mitigating the Consequences of Accidental Releases of Hazardous Materials, September 26e29, 1995. AIChE/CCPS, 345 East 47th St., New York, NY 10017, pp. 611-662.
- [88] Sven-Erik Gryning, Ekaterina Batchvarova, Burghard Brümmner, Hans Jørgensen, Søren Larsen. On the extension of the wind profile over homogeneous terrain beyond the surface boundary layer. Boundary-Layer Meteorol (2007) 124:251–268.
- [89] Hanna, S.R., Chang, J.C., Briggs, G.A., 1999. Dense gas dispersion model modifications and evaluations using the Kit Fox Field observations. Hanna Consultants Report No. P011F for the American Petroleum Institute, Washington, DC, 110pp. and appendices.
- [90] Steven R. Hanna, Joseph C. Chang. Use of the Kit Fox Field data to analyze dense gas dispersion modeling issues. Atmospheric Environment 35 (2001) 2231-2242.
- [91] Tennekes H (1973) Similarity laws and scale relations in planetary boundary layers. In: Haugen (ed). Workshop on Micrometeorology, American Meteorological Society, pp 177–216.
- [92] Ruck, B. and Makiola, B., « Flow separation over the inclined step », In: K. Gerstan (Eds), Numerical Fluid Mechanics (Vol 40), Physics of separated flows : Numerical experiments and theoretical aspects, Vieweg, Berlin (1989).
- [93] Meinders, E. and Hanjalic, K., "Vortex structure and heat transfer in turbulent flow over a wall-mounted matrix of cubes", Heat and fluid flow 20 (1999) 255-267.
- [94] Hanna, Chang and Strimaitis. Hazardous Gas Model Evaluations with Field Observations", Atmospheric Environment, Vol 27A, No. 15, pp 2265-2285, 1993.
- [95] Refsgaard et al. (2004)

- [96] Ruck, B. and Makiola, B., « Flow separation over the inclined step », In: K. Gerstan (Eds), Numerical Fluid Mechanics (Vol 40), Physics of separated flows : Numerical experiments and theoretical aspects, Vieweg, Berlin (1989).
- [97] Meinders, E. and Hanjalic, K., "Vortex structure and heat transfer in turbulent flow over a wall-mounted matrix of cubes", Heat and fluid flow 20 (1999) 255-267.
- [98] Hanna, Chang and Strimaitis., "Hazardous Gas Model Evaluations with Field Observations", Atmospheric Environment, Vol 27A, No. 15, pp 2265-2285, 1993.
- [99] Warner, S., Platt, N., Heagy, J., "User-Oriented Two-Dimensional Measure of Effectiveness for the Evaluation of Transport and Dispersion Models", J. of Applied Meteorology, vol 43 (2003).
- [100] Khurshudyan, L., Snyder, W. et Nekrasov, I., "Flow and dispersion of pollutants over two-dimensionnal hills", rapport EPA-600/4-81-067.
- [101] Robins, A., "A wind tunnel study of dense gas dispersion in a stable boundary layer over a rough surface", Atmospheric Environment 35 (2001) 2253-2263.
- [102] Robins, A., "A wind tunnel study of dense gas dispersion in a neutral boundary layer over a rough surface", Atmospheric Environment 35 (2001) 2243-2252.
- [103] Pope, S., "Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows", New Journal of Physics, 6 (2004).
- [104] Vendel, F., "Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes : application à l'étude de sites industriels", PhD 2011.
- [105] Anton Beljaars, "The parametrization of the planetary boundary layer", European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (1992)
- [106] Clarke, R. H., and G. D. Hess. "Geostrophic Departure and the Functions A and B of Rossby-Number Similarity Theory." Boundary-Layer Meteorology 7, n°. 3 (1974): 267-87
- [107] Zilitinkevich, S. Esau, I., « Bulk resistance and heat transfer laws for geophysical stable boundary layers », Quart. J. Roy. Met. 131 (2005)
- [108] Han, J., ARIA,, P., Shen, S. Lin, Y., "An Estimation of Turbulent Kinetic Energy and Energy Dissipation Rate Based on Atmospheric Boundary Layer Similarity Theory", NASA/CR-2000-210298.

9. LISTES DES ANNEXES

Numéro	Titre
1	Construction des profils météorologiques pour le calcul 3D
2	Physique des jets
3	Description des modèles de turbulences
4	Discrétisation, notions de maillage
5	Schémas numériques
6	Autres familles de modèles de dispersion
7	Synthèse détaillée du cas n°1
8	Synthèse détaillée du cas n°2
9	Synthèse détaillée du cas n°3.
10	Guide de constitution du dossier de validation à destination des utilisateurs et concepteurs d'outils
11	Guide de lecture critique de la démonstration de la mise en œuvre des bonnes pratiques

ANNEXE 1 : Construction des profils météorologiques pour le calcul 3D

Construction des profils à utiliser en CL

L'un des points clefs dans la modélisation des écoulements atmosphériques réside dans l'utilisation de conditions aux limites adaptées et, en particulier, de profils de vitesse, température et turbulence représentatifs des différentes classes de stabilité atmosphérique. La construction des profils de vent F3 et D5 est détaillée ci-après. La méthodologie à employer est identique pour toutes les autres classes de stabilité atmosphérique.

Concernant le profil de turbulence, la construction des profils est donnée ici, pour l'exemple, pour une approche RANS basée sur un modèle k-ε. Pour les autres approches, la méthodologie utilisée devra être similaire.

Profil de vitesse

Le profil de vitesse est déterminé suivant l'approche de Gryning [8] :

$$\frac{u(z)}{u_{*0}} = \frac{1}{k} \left(\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) + \frac{bz}{L_{MO}} \left(1 - \frac{z}{2z_i} \right) + \frac{z}{L_{MBL}} - \frac{z}{z_i} \left(\frac{z}{2L_{MBL}} \right) \right)$$

Dans cette relation :

- $u(z)$ est la vitesse à l'altitude z ,
- u_0^* est la vitesse de frottement, elle est calculée à partir de la valeur connue de $u(z)$ à l'altitude de référence, par exemple 3 m/s à 10 m dans le cas d'un profil F3 et 5 m/s à 10 m pour une classe de vent D5.
- k est la constante de von Karman (=0,4),
- z_0 est la hauteur de rugosité,
- b est une constante qui vaut 5 [1], [104],
- L_{MO} est la longueur de Monin Obukov,
- z_i est la hauteur de la couche de mélange calculée par :

$$z_i = 0.4 \sqrt{\frac{u_0^* \cdot L_{MO}}{f}} \text{ avec } f = 1.10^{-4} \text{ s}^{-1} \text{ pour un vent stable}$$

$$z_i = \frac{c \cdot u_0^*}{f} \text{ avec } f = 1.10^{-4} \text{ s}^{-1} \text{ pour un vent neutre avec } c, \text{ constante, prise égale à } 0,4 \text{ [108]}$$

- L_{MBL} est une hauteur modifiée calculée selon les relations :
 - En régime stable

$$\frac{z_i}{L_{MBL}} = 2 \left[\left[\left(\ln \left(\frac{u_0^*}{f \cdot z_0} \right) - B \right)^2 + A^2 \right]^{1/2} - \ln \left(\frac{z_i}{z_0} \right) - \frac{b \cdot z_i}{2 \cdot L} \right]$$

- En régime neutre

$$\frac{z_i}{L_{MBL}} = 2 \left[\left[\left(\ln \left(\frac{u_0^*}{f \cdot z_0} \right) - B \right)^2 + A^2 \right]^{1/2} - \ln \left(\frac{z_i}{z_0} \right) \right]$$

- En régime instable

$$\frac{z_i}{L_{MBL}} = 2 \left[\left[\left(\ln \left(\frac{u_0^*}{f \cdot z_0} \right) - B \right)^2 + A^2 \right]^{1/2} - \ln \left(\frac{z_i}{z_0} \right) + \Psi \left(\frac{z_i}{L_{MO}} \right) \right]$$

Les coefficients A et B sont des fonctions de $\frac{u_0^*}{f \cdot z_0}$ et valent respectivement 10 et -10 pour une atmosphère stable et valent respectivement 5 et 2 pour une atmosphère neutre [105][106]. Il convient toutefois de souligner que d'autres jeux de valeurs sont possibles, notamment pour les configurations d'atmosphères stables [107]. La constante b utilisée pour le calcul en atmosphère stable vaut 5.

Au-dessus de la couche limite atmosphérique ($z > z_i$) la vitesse $u(z)$ est fixée à la valeur atteinte à z_i .

Méthode détaillée pour la construction d'un profil F3

Par similarité, tous les autres profils pourront être construits.

Etape 1 : détermination de la LMO

Les grandeurs nécessaires sont la classe de stabilité et la hauteur de rugosité. La classe de stabilité est un choix de modélisation, ici la classe F. La hauteur de rugosité est à considérer en fonction de la configuration locale du terrain, ici le choix est fait d'une valeur de 0,1 m. En se rapportant au graphe reproduit sur la Figure 19, il est possible de déterminer la LMO. En l'absence de bijection entre classe de vent et LMO, plusieurs valeurs sont possibles. La valeur considérée ici pour 1/LMO est 0,1, soit une LMO de 10.

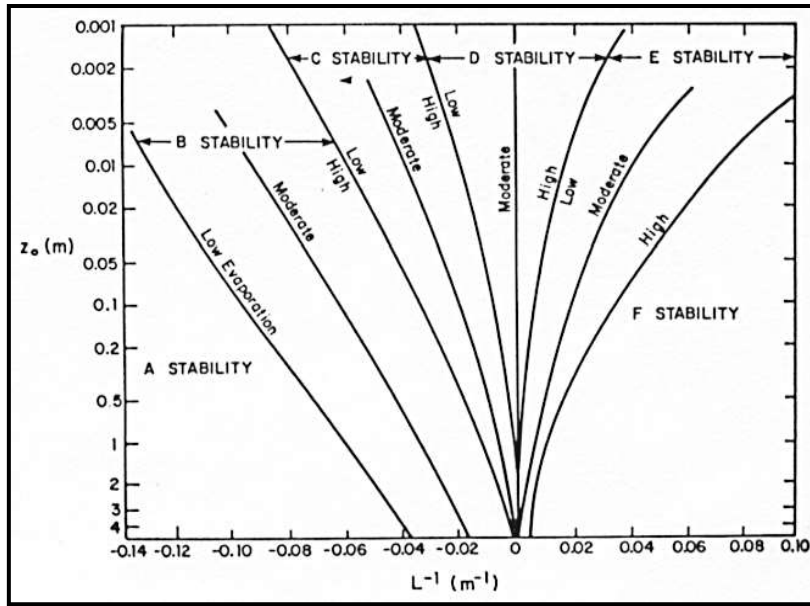


Figure 19 : Relation entre classe de stabilité, rugosité et LMO [4].

Etape 2 : Détermination de u_0^*

U_{*0} est déterminée conjointement avec L_{MBL} et z_i en résolvant le système de trois équations à 3 inconnues suivant :

$$z_i = 0.4 \sqrt{\frac{u_0^* \cdot L_{MO}}{f}}$$

$$\frac{u(z)}{u_0^*} = \frac{1}{k} \left(\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) + \frac{bz}{L_{MO}} \left(1 - \frac{z}{2 \cdot z_i} \right) + \frac{z}{L_{MBL}} - \frac{z}{z_i} \left(\frac{z}{2 \cdot L_{MBL}} \right) \right)$$

$$\frac{z_i}{L_{MBL}} = 2 \left[\left[\left(\ln \left(\frac{u_0^*}{f \cdot z_0} \right) - B \right)^2 + A^2 \right]^{1/2} - \ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \frac{b \cdot z_i}{2 \cdot L_{MO}} \right]$$

Dans le cas présent, u_0^* vaut 0,11 m/s, L_{MBL} vaut 3,83 et z_i 41,2 m.

Etape 3 : construction du profil

Toutes les valeurs étant à présent connues, il est possible de déterminer le profil de vitesse selon z . Ce profil est reproduit sur la Figure 20.

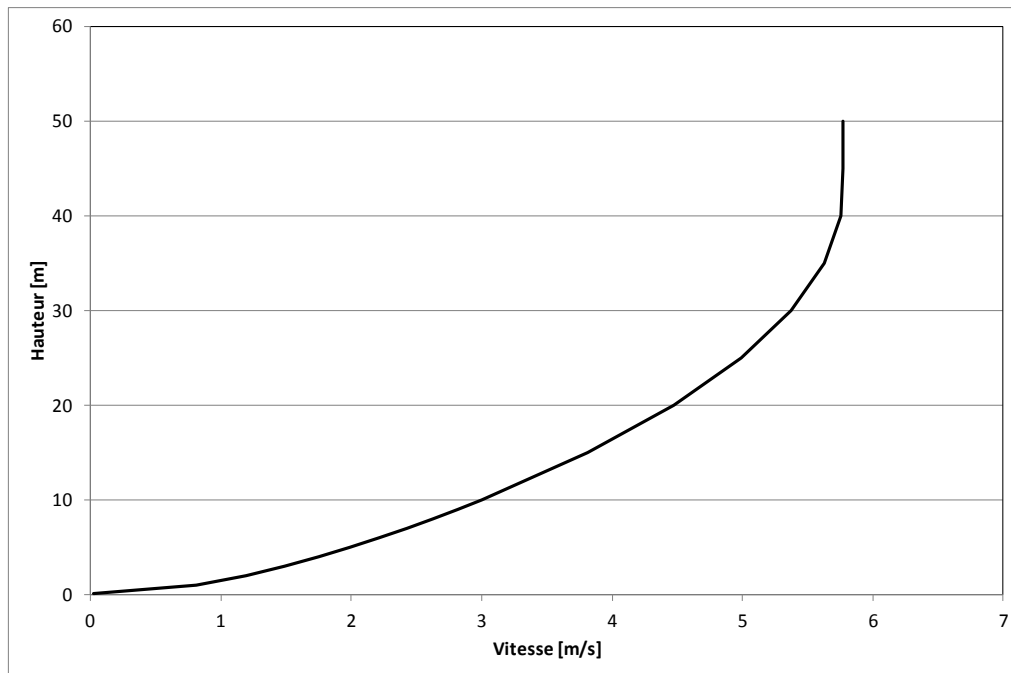


Figure 20 : Profil de vitesse obtenu pour une classe de vent F3.

Profil de turbulence

Le profil de k doit obéir, selon la stabilité atmosphérique, à l'une des lois suivantes :

- En régime stable

$$k(z) = \frac{\max(u_0^*(1 - z/z_i); 0,1 \cdot u_0^*)^2}{\sqrt{C_\mu}} \sqrt{\frac{1 + 4z/L_{MO}}{1 + 5z/L_{MO}}}$$

Et le profil de ε doit alors suivre la loi :

$$\varepsilon(z) = \frac{\max(u_0^*(1 - z/z_i); 0,1 \cdot u_0^*)^3}{\kappa} \left(\frac{1}{z} + \frac{4}{L_{MO}} \right)$$

A noter que pour de tels profils de turbulence, le profil la viscosité turbulente, quantité essentielle pour évaluer le taux de mélange lié à la turbulence, a la forme représentée sur la Figure 21. Les valeurs indiquées sur cette figure sont représentatives d'une stabilité atmosphérique de type F3.

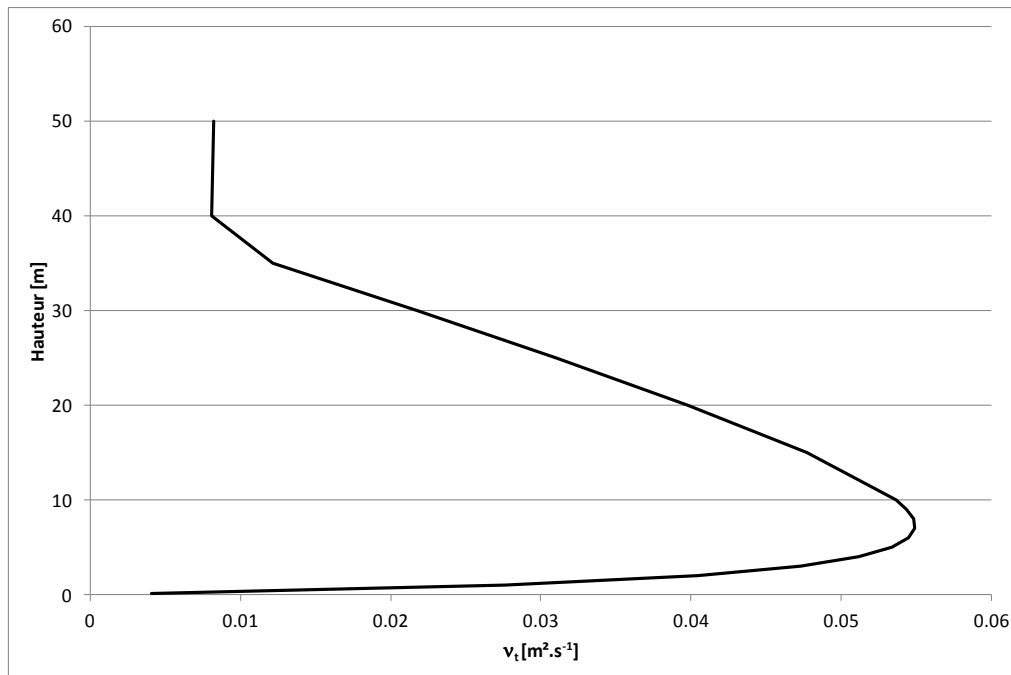


Figure 21 : Exemple de forme de viscosité turbulente, v_t .

- En régime neutre

$$k(z) = \frac{\max(u_0^*(1 - z/z_i); 0,1.u_0^*)^2}{\sqrt{C_\mu}}$$

Et le profil de ε doit alors suivre la loi :

$$\varepsilon(z) = \frac{\max(u_0^*(1 - z/z_i); 0,1.u_0^*)^3}{K.z}$$

- En régime instable

$$k(z) = \frac{\max(u_0^*(1 - z/z_i); 0,1.u_0^*)^2}{\sqrt{C_\mu}} \sqrt{1 - \frac{z}{L_{MO}}}$$

Et le profil de ε doit alors suivre la loi :

$$\varepsilon(z) = \frac{\max(u_0^*(1 - z/z_i); 0,1.u_0^*)^3}{K.z} \cdot \frac{(1 - \frac{z}{L_{MO}})}{(1 - 16 \cdot \frac{z}{L_{MO}})^{1/4}}$$

Pour la construction de ces profils, la valeur de C_μ sera adaptée, 0,033 en champ libre, 0,09 pour un domaine encombré.

Profil de température

Le profil de température potentielle en entrée de domaine est ensuite calculé par la relation :

- En régime stable

$$\begin{cases} \theta(z) = \theta_{sol} + \frac{\theta_*}{k} \left[\ln\left(\frac{z}{z_T}\right) - \Psi_H\left(\frac{z}{L_{MO}}\right) \right] & si \quad z < z_i \\ \theta(z) = \theta_{sol} + \frac{\theta_*}{k} \left[\ln\left(\frac{z_i}{z_T}\right) - \Psi_H\left(\frac{z_i}{L_{MO}}\right) \right] + \gamma_{ext}(z - z_i) & si \quad z \geq z_i \end{cases}$$

Dans cette relation,

- Θ_{sol} est la température potentielle au niveau du sol,
- $\gamma_{ext} = + 0,0033 \text{ K.m}^{-1}$

Avec les formules suivantes pour les fonctions universelles :

$$\Psi_M\left(\frac{z}{L_{MO}}\right) = \Psi_H\left(\frac{z}{L_{MO}}\right) = -5 \cdot \frac{z}{L_{MO}} \quad si \quad 0 < \frac{z}{L_{MO}} < 1$$

Θ^* est déterminée par la relation :

$$\theta_* = - \frac{H_0}{\rho C_p u_*^*}$$

et H_0 par :

$$L_{MO} = - \frac{\rho C_p \theta_*^{*3}}{k.g.H_0}$$

Avec $\Theta = \Theta_{sol}$

Ces éléments permettent de construire le profil de température pour une classe de vent (F3-15), Figure 22.

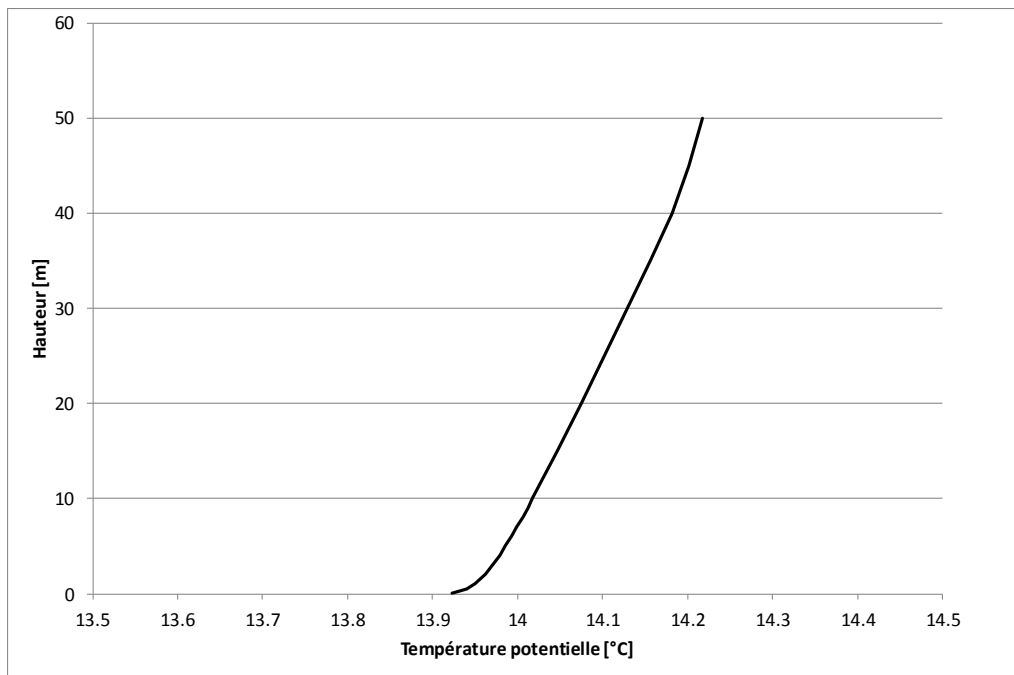


Figure 22 : Profils de température potentielle pour une classe de vent (F3-15).

- En régime neutre

$$\theta(z) = \theta_{sol} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{-R}{C_p} i}$$

Où P est la pression à l'altitude z et P₀ la pression au niveau du sol.

- En régime instable

$$\theta(z) = \theta_{sol} + \frac{\theta_*}{k} \left[\ln\left(\frac{z}{z_T}\right) - \Psi_H\left(\frac{z}{L_{MO}}\right) \right]$$

Avec les formules suivantes pour les fonctions universelles :

$$\Psi_H\left(\frac{z}{L_{MO}}\right) = 2 \cdot \ln \left(\frac{(1 - 16 \cdot \frac{z}{L_{MO}})^{1/2} + 1}{2} \right)$$

Θ* est déterminée par la relation :

$$\theta_* = - \frac{H_0}{\rho C_p u_0^*}$$

et H₀ par :

$$L_{MO} = -\frac{\rho C_p \theta_0^{*3}}{k.g.H_0}$$

Les profils de vitesse, diffusion turbulente et température obtenus pour une classe de vent (D5-20) au niveau du sol sont reproduits sur la *Figure 23*.

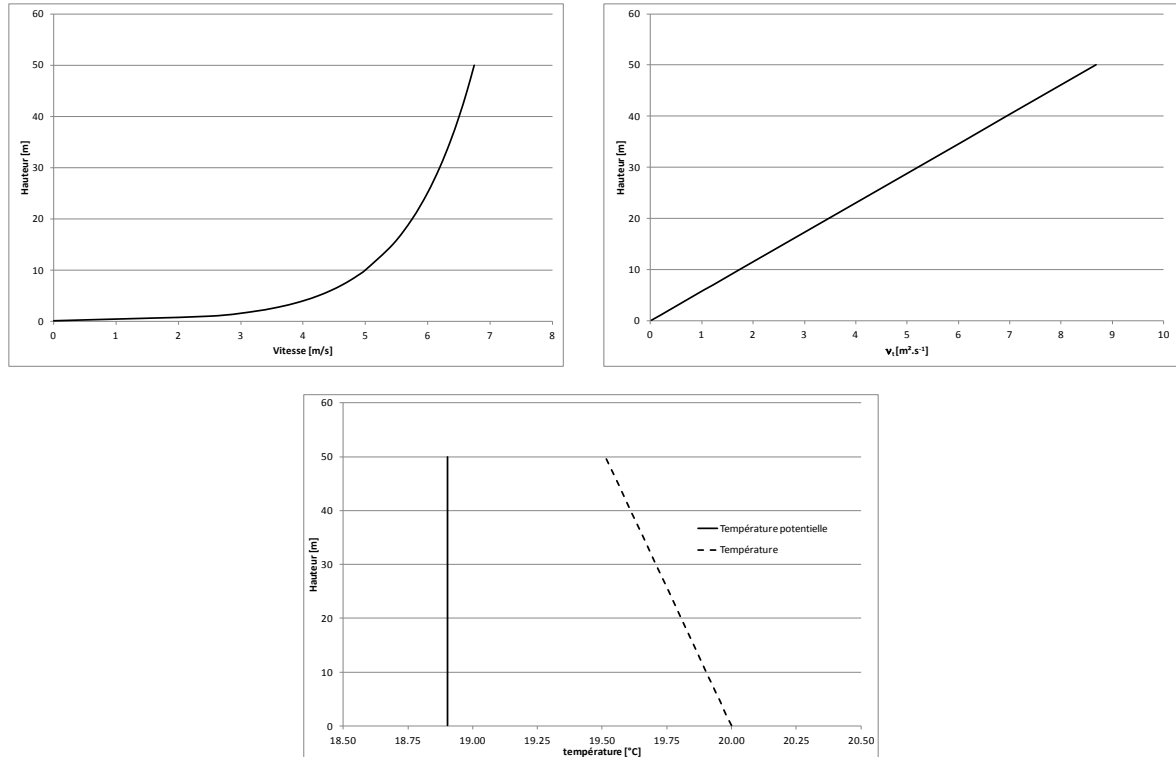


Figure 23 : Profils de vitesses, viscosité turbulente et température obtenus pour une classe de vent (D5-20).

Annexe 2
Physique des jets

A. Jets monophasiques

1. Considérations générales

L'ouverture d'une brèche sur un réservoir ou sur une canalisation de gaz sous haute-pressure entraîne la formation d'un jet gazeux générant une irruption brutale d'un fluide dans l'atmosphère. Cette irruption, appelée jet, génère un écoulement par entraînement des particules du fluide ambiant. Suivant les natures différentes de ces entraînements, quatre types de jets sont distingués :

- Les jets libres, caractérisés par la pénétration d'un fluide dans une atmosphère au repos ou en mouvement en l'absence de tout obstacle solide.
- Les jets pariétaux qui diffèrent des jets libres par la présence d'une paroi parallèle au jet et en contact avec lui. L'entraînement du fluide de l'atmosphère ambiante se fait sur toutes les autres parties du jet sauf celle au contact du sol.
- Les jets de sillage, le jet libre rencontre sur son parcours un obstacle contournable et crée dans le sillage de celui-ci un écoulement particulier avec entraînement du fluide de l'atmosphère ambiante.
- Les jets impactants, le jet libre rencontre sur son parcours un obstacle incontournable (jet impactant le sol, un mur,...).

La Figure 24 illustre les trois premières catégories.

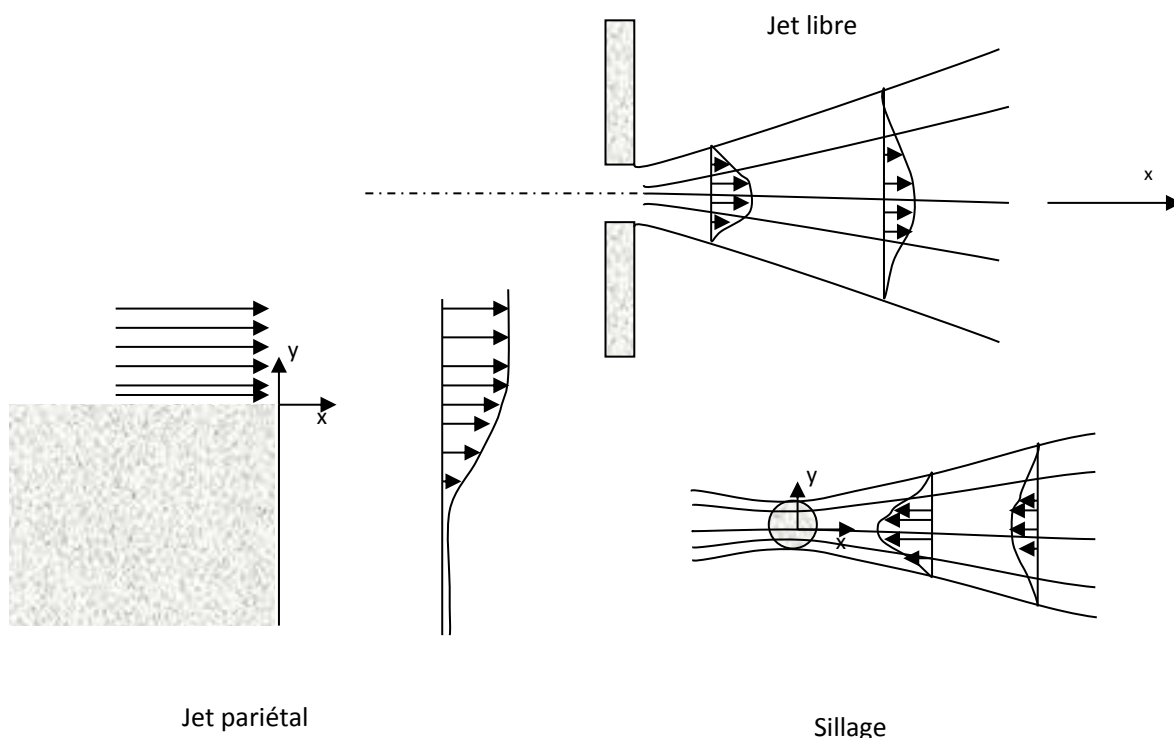


Figure 24 : Différents types de jets

L'entraînement d'air généré par le jet induit sa dilution et la baisse progressive de la vitesse et de la concentration. Etudier l'écoulement du jet revient à étudier principalement l'évolution

des grandeurs physiques telles que la vitesse, la turbulence, la concentration, la température dans le jet.

Les jets de gaz dans un milieu ambiant, mobiles ou au repos, dépendent de paramètres tels que la taille de l'orifice d'où s'échappe le gaz ou encore la vitesse initiale de rejet.

Le nombre adimensionnel le plus utilisé pour les jets vis-à-vis de leur régime de turbulence est le nombre de Reynolds⁹.

Pour les orifices circulaires, le régime d'un jet répond aux critères suivants :

- Régime laminaire dissipatif : $Re < 300$,
- Régime laminaire complet : $300 < Re < 1000$,
- Régime de transition : $1000 < Re < 3000$,
- Régime turbulent : $Re > 3000$.

Dans le cas des jets ronds axisymétriques, il a été montré [12] que les jets gazeux comportent systématiquement trois zones principales :

- la zone de «jet pur», dominée par les forces d'inertie,
- la zone intermédiaire, dite de «panache forcé», où les forces de gravité et d'inertie sont comparables,
- la zone de «panache pur» où les forces de gravité peuvent être dominantes.

Les dimensions de ces zones peuvent être estimées au moyen des nombres de Reynolds et de Froude. Le nombre Mach dans le jet est défini comme suit :

$$Ma = \frac{u}{c}$$

Dans cette relation, u est la vitesse dans le jet, et c est la célérité du son dans le jet dans les conditions thermodynamiques de l'écoulement et est donnée par :

$$c = \sqrt{\gamma RT}$$

Les jets turbulents peuvent être scindés en deux ensembles selon que leur vitesse est :

- inférieure à la vitesse du son (**subsonique**). Le jet est caractérisé par un nombre de Mach inférieur à 1.
- supérieure (**supersonique** ou critique). Ces jets sont caractérisés par un nombre de Mach supérieur à 1 à proximité de l'orifice. En augmentant la pression en amont d'une fuite, la vitesse de fuite augmente jusqu'à être bloquée à la vitesse du son et ne varie plus. L'orifice se comporte comme un col sonique. En fonction de la géométrie de l'orifice ou du rapport de la pression statique au niveau de l'orifice sur la pression environnante des morphologies d'écoulements assez différentes peuvent être rencontrées.

⁹ $Re = \frac{U.D}{\nu}$

Dans l'industrie, les gaz sont en général stockés sous une pression supérieure à 2 bar, or cette pression est souvent suffisante pour générer en cas d'accident un jet critique.

A titre d'exemple, pour l'hydrogène à 20°C, $\gamma_{H_2} = 1,38$, le régime devient critique quand la pression dans le réservoir est égale à **1,84** fois la pression aval. En dessous de ce rapport l'écoulement est subsonique, au-delà l'écoulement est supersonique.

2. Evolution des paramètres dans le jet

Des travaux expérimentaux ont permis des mesures de concentrations et de turbulence au sein des jets de gaz sous pressions (H_2 , CH_4 ,...) à moyenne ou grande échelle [23], [27].

Des développements théoriques ont permis de démontrer qu'au-delà de la zone d'expansion, dans bien des cas de jets gazeux, les profils de concentration, de vitesse sont autosembables¹⁰ [28]. En effet les profils de vitesse et de concentration suivent une loi hyperbolique suivant l'axe du jet et une forme «gaussienne» suivant le rayon du jet lorsque celui-ci n'est pas perturbé.

B. Rejets diphasiques

1. Rappels sur la phénoménologie et définitions

Les causes possibles de rejets diphasiques à l'atmosphère sont multiples dans le domaine de l'industrie : fuite sur un réservoir, brèche ou rupture guillotine d'une conduite, ouverture d'un disque de rupture, ruine d'une enceinte, etc... La majorité des problématiques rencontrées dans les études de dangers associe les rejets diphasiques à des mélanges liquide/gaz.

Sont traités ici les rejets diphasiques composés de deux phases gaz et liquide simultanément, voire de liquide dont une partie notable des gouttelettes se vaporisera avant d'avoir atteint le sol (rejet dont l'évaporation primaire ne peut être considérée comme négligeable). Le graphique, Figure 25, qui suit présente un schéma de principe associé aux rejets diphasiques dans le cas d'une brèche sur une canalisation et illustre les phénomènes pouvant survenir lors d'un rejet accidentel diphasique. La description de l'ensemble des phénomènes intervenants dans le champ proche de la fuite est couramment appelée terme source.

¹⁰ Une zone jet auto-semblable est une zone dans laquelle les valeurs moyennées de vitesse, ou de concentration, ou de température et une échelle de longueur peuvent être reliées à une variable géométrique par une fonction sans dimension.

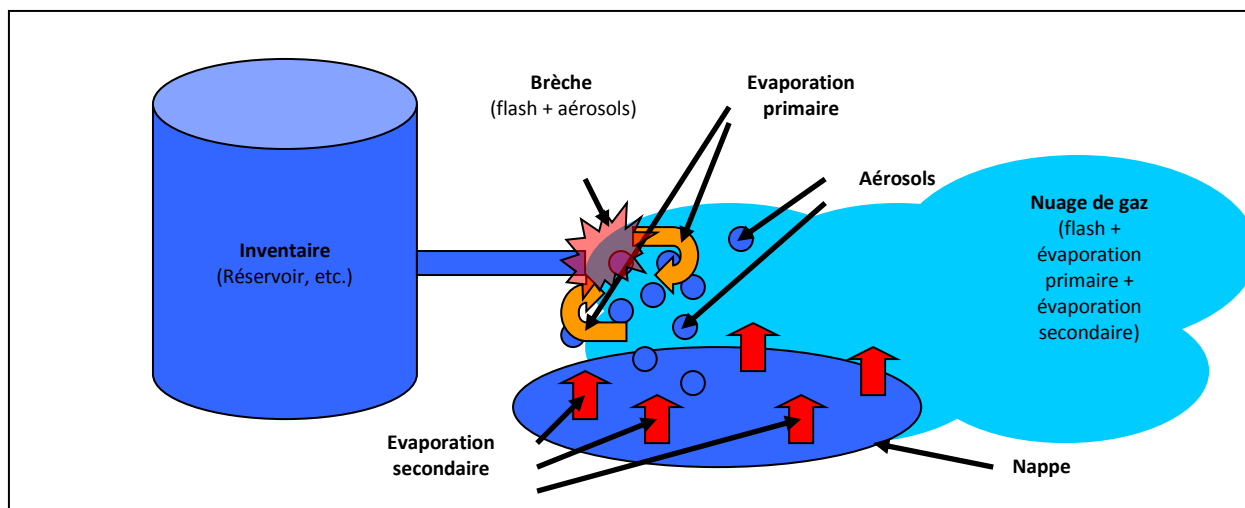


Figure 25 : Illustration des phénomènes pouvant survenir lors d'un rejet accidentel diphasique

Sont notamment concernés par ce chapitre les produits liquéfiés sous pression, Figure 26, les gaz liquéfiés par abaissement de leur température, etc. Plus précisément nous considérons les principaux cas où le produit est initialement diphasique ou le devient du fait d'une fuite accidentelle.

Il s'agit des configurations :

- où le produit est stocké sous pression saturante comme un liquide ou un mélange de liquide et de gaz,
- où le produit est stocké sous forme de liquide uniquement : cela inclut les cas d'un produit à l'état liquide à température et à pression ambiantes et d'un produit stocké à une pression égale ou au dessus de sa pression de vapeur saturante à la température de stockage (par pressurisation à l'azote par exemple), dans ce dernier cas le produit est dit sous refroidi.

D'une manière générale, un rejet sous forte pression d'un produit liquide entraîne un fractionnement en gouttelettes. La vaporisation de celles-ci est d'autant plus importante que la pression de vapeur saturante du produit est élevée, et que le diamètre des gouttelettes est petit.

Dans le cas où le produit est gazeux à la pression atmosphérique et à la température de stockage, il se retrouve surchauffé dès lors qu'il est libéré accidentellement à la pression atmosphérique. La dépressurisation place le liquide en état de surchauffe, sa température est supérieure à sa température d'équilibre à la pression atmosphérique. Le produit peut alors brutalement se vaporiser en partie ou totalement pour atteindre son état d'équilibre, cette transition brutale est appelée flash.

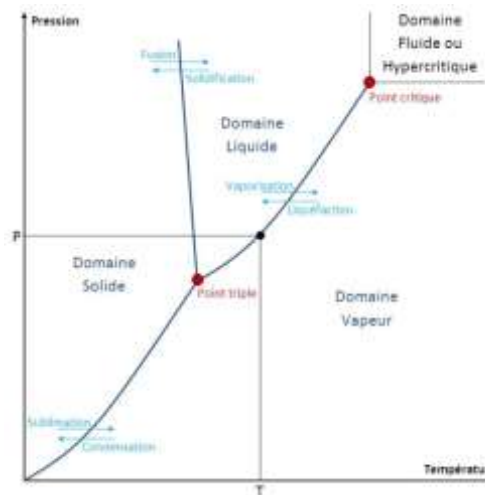


Figure 26 : Diagramme de phase d'un corps pur

C. Modélisation du terme source

Les principaux paramètres qui caractérisent le rejet à la fin de la zone d'expansion et qui sont à introduire dans l'outil de modélisation 3D sont :

- le débit massique (kg/s),
- la vitesse du jet (m/s),
- la température (K).
- la fraction massique liquide (-),
- la densité du jet (kg/m³),
- le diamètre de la zone d'expansion (m),
- le diamètre moyen des gouttelettes ou/et un spectre de gouttelettes (μm).

Le point essentiel est ensuite de valider l'introduction du terme source dans l'outil de calcul en évaluant notamment la conservation des grandeurs caractéristiques.

Annexe 3 : Description des modèles de turbulence

Cette annexe décrit les différentes approches existantes pour la modélisation de la turbulence.

A. Simulation Numérique Directe (SND ou DNS)

L'approche DNS consiste à résoudre explicitement les équations discrétisées de la mécanique des fluides avec un maillage suffisamment fin pour résoudre le spectre complet des échelles de turbulence. Il est alors nécessaire que la taille des mailles soit inférieure aux plus petites échelles de la turbulence, soit l'échelle de Kolmogorov. Cela impose des maillages conséquents. Le nombre de mailles alors requis pour de telles simulations est fonction du nombre de Reynolds, Re , et de l'ordre de $Re^{9/4}$, soit pour un écoulement atmosphérique où l'on peut avoir $Re \approx 5.10^5$, le nombre de points du maillage est de l'ordre de 10^{12} .

Ce type d'approche est employé pour modéliser des phénomènes de faibles tailles et de nombre de Reynolds limité dans le but, par exemple, de développer ou valider les sous modèles introduits dans les approches présentées ci-après.

B. Simulation aux grandes échelles (SGE ou LES)

Développé par Smagorinsky [14], l'approche LES consiste à résoudre explicitement les grandes échelles de la turbulence en modélisant les plus petites échelles. Cette stratégie se base sur le constat que l'énergie de la turbulence est majoritairement portée par les grosses structures, les petites étant responsables de la dissipation. Cette méthodologie a été développée initialement pour la modélisation des écoulements atmosphériques.

De manière générale, dans un écoulement turbulent, les tourbillons de grande taille sont créés par les gradients de vitesse du mouvement moyen et dépendent de la géométrie du domaine et des paramètres physiques du fluide. Cela leur donne un caractère instationnaire et anisotrope. A l'inverse, les petites structures créées par interactions non-linéaires présentent un comportement global uniforme et ont une durée de vie assez courte du fait de la dissipation visqueuse. Ces petites échelles sont par ailleurs isotropes. Les grands tourbillons sont responsables, en majeure partie, du transport des paramètres aérothermochimiques du fluide (masse, quantité de mouvement, énergie, ...) alors que les petits tourbillons accroissent la dissipation des fluctuations de ces paramètres tout en ne modifiant que légèrement leur valeur moyenne. De ces observations, applicables à la majeure partie des écoulements turbulents classiques, est née l'idée d'un calcul explicite des grandes structures alors que l'effet des petites dont le comportement est isotrope.

L'utilisation d'une telle approche nécessite de filtrer les équations de transport de la mécanique des fluides, les équations filtrées sont présentées ci après.

- Equation d'état

Soit la loi des gaz parfait : $P = \rho r T$

En appliquant l'opérateur de filtrage : $\bar{P} = \bar{\rho} \bar{r} \bar{T}$

Et par définition du filtrage au sens de Favre : $\bar{P} = \bar{\rho} \tilde{r} \tilde{T} \bar{P} = \bar{\rho} \tilde{r} \tilde{T}$

- Conservation de la masse

Le filtrage de l'équation de la masse volumique permet d'obtenir immédiatement en utilisant le filtrage au sens de Favre

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i}{\partial x_i} = 0$$

- Equation de Navier-Stokes

L'équation filtrée de la quantité de mouvement est donné ci-dessous

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \mathbf{f}$$

Avec σ , selon l'hypothèse de Boussinesq :

$$\tilde{\sigma}_{ij} = \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{U}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \tilde{\sigma}_{ij} = \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{U}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}$$

Et

$$\tau_{ij} = \bar{\rho} (\overline{U_i U_j} - \tilde{U}_i \tilde{U}_j)$$

Dans ces modèles, la majeure partie des phénomènes turbulents est explicitement résolue. Seule une faible partie est modélisée.

C. L'approche RANS et les modèles de turbulence associés

1. Description

L'approche RANS consiste à simplifier la résolution du système d'équations en ne s'intéressant qu'aux grandeurs moyennes. Chaque variable (ϕ) est ainsi décomposée, suivant la préconisation de Reynolds [30], en la somme d'une valeur moyenne statistique ($\bar{\phi}$), sur un ensemble de réalisations d'écoulement, et d'une fluctuation (ϕ') par rapport à celle-ci dont la contribution moyenne est nulle. Il est alors possible d'écrire la variable ϕ comme la somme :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi'$$

Il est cependant impossible de résoudre une moyenne statistique car cela implique de calculer un grand nombre de cas pour réaliser cette moyenne. Toutefois, le théorème d'ergodicité permet de démontrer l'équivalence de la moyenne statistique et d'une moyenne temporelle, sous certaines conditions. Pour vérifier cette condition, il convient d'une part que la période définissant la moyenne couvre l'ensemble des échelles caractéristiques de la turbulence et

que, d'autre part le pas de temps de simulation assure l'indépendance de toutes les réalisations [34][38].

En décomposant la vitesse, la pression, l'énergie, la concentration suivant la relation donnée précédemment, les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie (ou d'un scalaire) sont formulées ainsi sous forme moyennées. Ajouter à cela habituellement s'ajoute l'équation d'état de sorte que l'on dispose de quatre équations pour quatre inconnues $\bar{\rho}$, $\bar{u}$, $\bar{P}$ et $\bar{T}$.

Le système d'équations alors obtenu, fait apparaître un grand nombre de termes supplémentaires, tels que les flux turbulents de vitesse $\overline{u'_i u'_j}$ ($\rho \overline{u'_i u'_j}$ est appelé tenseur de Reynolds), de température $\overline{u'_i T'_j}$ et de masse $\overline{u'_i C'_j}$.

Il existe principalement 2 grands types de modèles :

- les premiers modèles sont appelés à viscosité turbulente car les flux turbulents sont alors directement proportionnels au gradient des valeurs moyennes (soit l'analogie entre les flux turbulents et les flux de masse de type diffusif régis par la loi de Fick) et le coefficient de proportionnalité possède la dimension d'une diffusivité ou d'une viscosité ν ($m^2.s^{-1}$). Cette approche est basée sur l'hypothèse de diffusivité de Boussinesq (1877), qui postule que le frottement turbulent est responsable d'échanges de quantité de mouvement de l'écoulement moyen. Cette hypothèse introduit la notion de viscosité turbulente, propriété de l'écoulement et non du fluide. Il convient donc de modéliser cette viscosité turbulente. La viscosité et la diffusivité turbulente sont reliées, par un nombre de Prandtl (Pr) pour la relation du flux de chaleur, et par un nombre de Schmidt (Sc) pour la relation du flux de masse suivant :

$$\overline{u'_i T'_j} = \frac{\nu}{Pr} \nabla \bar{T}$$

et

$$\overline{u'_i C'_j} = \frac{\nu}{Sc} \nabla \bar{C}$$

Bien que souvent considérés constants dans les outils de calculs ces deux nombres dépendent de plusieurs paramètres : hauteur par rapport au sol [39], stabilité atmosphérique,... La sensibilité des outils à ces paramètres a été démontrée ([40],[41]) dans certains cas. Les valeurs des nombres de Prandtl turbulent et de Schmidt turbulent, sont généralement comprises entre 0,7 et 1 dans les travaux recensés dans la bibliographie scientifique ([41]).

- les modèles aux tensions de Reynolds (ou « Reynolds stress model », RSM) dans lequel est résolue une équation de transport pour chacune des composantes du tenseur des contraintes turbulentes.

Les niveaux d'approches disponibles sont donnés ci-dessous :

- approche à 0 équation de transport supplémentaire (longueur de mélange Prandtl (1925)),
- approche à 1 équation de transport supplémentaire (k - l),
- approche à 2 équations de transport supplémentaires (k - ε , k - ω , ...),
- approche à plus de 2 équations de transport supplémentaires, (R_{ij} , ...)

2. Modèle de longueur de mélange

Prandtl a proposé en 1925 une analogie entre le transport moléculaire et le transport turbulent qui permet d'évaluer la viscosité turbulente sans introduire d'équation supplémentaire. La viscosité turbulente s'écrit alors directement :

$$\nu_t = l_m^2 \left| \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right|$$

Le problème se réduit alors « simplement » au calcul de la longueur de mélange. Cette grandeur est toutefois une caractéristique de l'écoulement et non du fluide, rendant nécessaire une adaptation empirique.

3. Modèle à une équation de transport

Le modèle k - l est issu de l'analyse dimensionnelle qui montre qu'il est possible d'écrire :

$$\nu_t = C_\mu k^{1/2} l_m$$

Ce modèle a l'intérêt de faire apparaître l'énergie de la turbulence, k , dans cette équation mais reste lié à la prédiction de la taille des structures turbulentes. Ce modèle nécessite la résolution de l'équation de transport pour k .

4. Modèle à deux équations de transport

Afin de s'affranchir de la longueur de mélange, plusieurs approches ont été développées pour supprimer cette grandeur des expressions de la viscosité turbulente. Les modèles k - ε et k - ω sont parmi les plus connus.

Le premier modèle k - ε a été présenté par Jones et Launder en 1972[42]. La viscosité turbulente est alors écrite en fonction des deux grandeurs transportées, k et ε :

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

Ces modèles k - ε font apparaître un jeu de six constantes à déterminer par l'expérience ou l'analyse dimensionnelle. Toutefois, il apparaît que ces constantes doivent être ajustées à la modélisation envisagée, d'où l'existence de nombreux jeux de constantes. Cela souligne par

ailleurs les limites de la validation d'un modèle. Le jeu de constante choisi pour le cas de validation peut être inadapté à une autre situation. Ce modèle a l'intérêt d'être utilisable pour des géométries complexes et des nombres de Reynolds élevé. Ainsi, pour les écoulements atmosphériques, Duynkerke [43] a par exemple proposé un jeu de constantes. L'influence de ces constantes sur les résultats de simulation est conséquente, comme l'ont montré Kim et Patel [45].

Toutefois, d'un point de vue spectral, le spectre d'énergie de la turbulence est réduit à son intégrale, k . Les informations liées aux structures de la turbulence sont donc perdues et notamment les phénomènes anisotropes associés aux grandes structures. Il a ainsi été montré que certaines configurations ne pouvaient être modélisées de cette manière en raison de la méconnaissance de l'évolution instationnaire des tourbillons de grande taille.

Cette question se pose pour un écoulement atmosphérique régi par le comportement instationnaire des structures anisotropes de la turbulence atmosphérique.

1. Cas particulier de la stratification thermique

Dans la CLA il peut y avoir des cas particuliers de stratification thermique pour lesquels la température et la masse volumique ne sont pas homogènes verticalement. Ces effets de stratifications thermiques peuvent être introduits dans l'équation de k par un nouveau terme de production (cas instable) ou de destruction (cas stable) de la turbulence selon la présence ou l'absence de mouvement engendrés par les forces d'Archimède. Il s'exprime ainsi :

$$G = \beta g_i \overline{w_i \theta'_v}$$

avec β un terme qui exprime la flottabilité $\beta = \frac{g}{\theta_v}$.

Le terme de production d'énergie mécanique par cisaillement Pr peut s'exprimer ainsi :

$$Pr = -\overline{u'_i u'_j} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}$$

L'équation de transport de l'énergie turbulent k s'exprime, sous l'hypothèse d'un écoulement iso volume et d'homogénéité horizontale [47] :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{w} \frac{\partial k}{\partial z} = \underbrace{-\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial (\overline{w'p'})}{\partial z}}_A - \underbrace{\frac{\partial (\overline{w'k})}{\partial z}}_B - \underbrace{\overline{u'w'} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} - \overline{v'w'} \frac{\partial \bar{v}}{\partial z}}_C + \underbrace{\frac{g}{\theta_v} (\overline{w'\theta'_v})}_D - \underbrace{\varepsilon}_E$$

et fait apparaître la compétition entre les termes G (exprimé par le terme C dans l'équation) et Pr (terme D).

2. Les modèles de tenseur de Reynolds (rsm ou Rij)

Ce type de modèle intègre consiste en la résolution d'une équation de transport pour chacun des flux turbulents ce qui permet de s'affranchir de l'hypothèse de Boussinesq. L'avantage par ce type de fermeture est qu'il décrit les flux turbulents de manière anisotrope. Aux six équations portant sur les tensions de Reynolds s'ajoute une équation de transport pour la variable ε . Rodi [46] ont proposé un jeu de constantes des coefficients pour ce système d'équations.

Annexe 4 : Discrétisation, notions de maillage

L'objectif du maillage est de fournir une représentation discrète du domaine de calcul permettant la discrétisation, puis la résolution, des EDP. Il existe de nombreuses possibilités de discrétisation du domaine. Chacune ayant présentant avantages et inconvénients. L'objet est ici de proposer une brève description de ces différentes solutions afin de guider l'utilisateur dans ses choix.

A. Notions fondamentales

La discrétisation de l'espace peut se concevoir de deux manières différentes :

- par un ensemble ordonné d'éléments, les maillages structurés,
- par un ensemble arbitraire d'éléments, les maillages non-structurés.

La discrétisation spatiale utilise comme brique élémentaire soit des hexaèdres, soit des tétraèdres [24]. Si les maillages structurés sont nécessairement réalisés au moyen d'hexaèdres, les maillages non structurés peuvent être composés de l'un ou l'autre de ces types d'éléments.



Figure 27 : Exemple de maillages structuré et non-structuré.

Ces éléments peuvent être tous identiques, c'est la notion de maillage uniforme, mais il est possible de raffiner localement le maillage afin de capturer plus précisément les phénomènes physiques dans la zone d'intérêt, Figure 28.

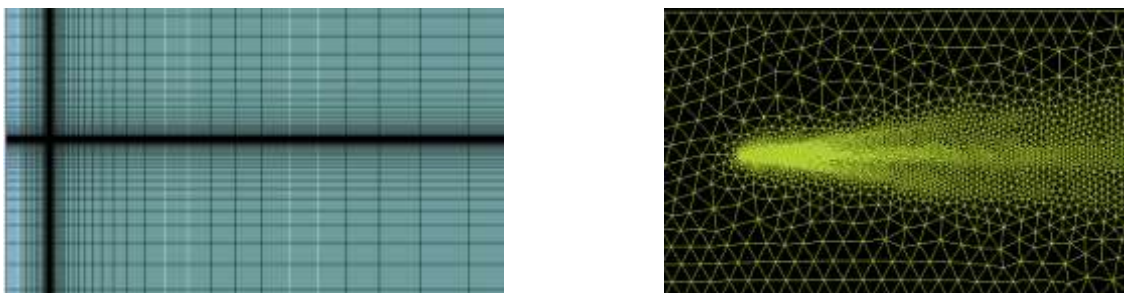


Figure 28 : Deux exemples de maillages raffinés (plan de mailles au sol).

La notion de maillage curviligne permet de suivre exactement le relief. Un maillage cartésien suivra les pentes par des marches d'escalier, les écoulements nécessairement tangents au sol dans la couche limite y seront moins bien représentés.

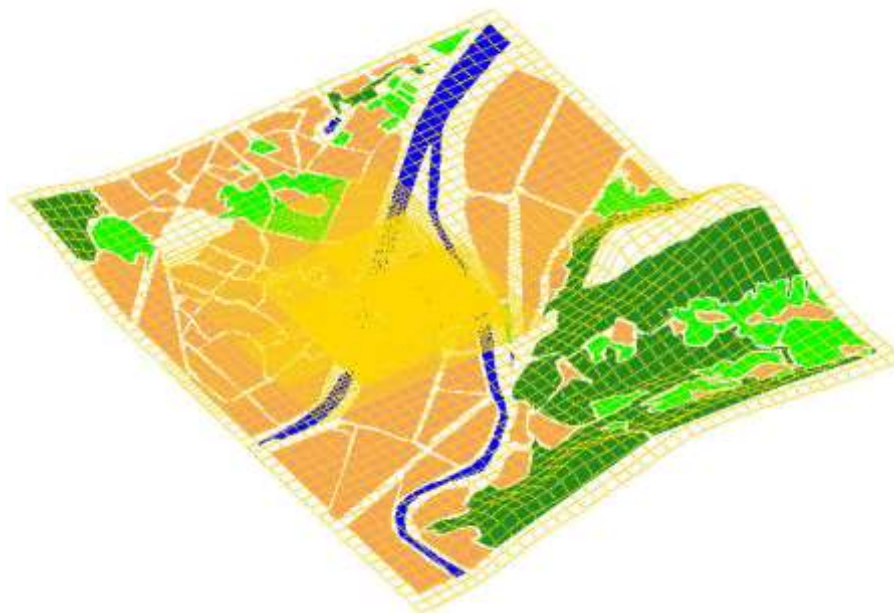


Figure 29 : Exemple de maillage curviligne (plan de mailles au sol)

Dans certains cas, le domaine peut être subdivisé en domaines plus petits possédant chacun son maillage propre. On parle alors de maillages imbriqués. La Figure 30 présente un exemple tiré des exercices de Fil-Rouge menés.

Le domaine en vert sur la Figure 30 comprend la source et les premiers obstacles proches de la source.

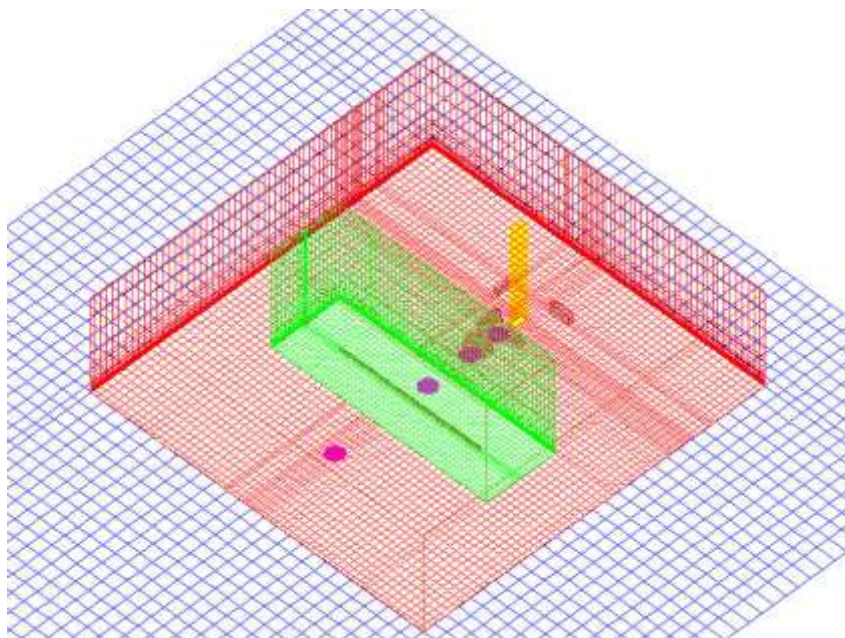


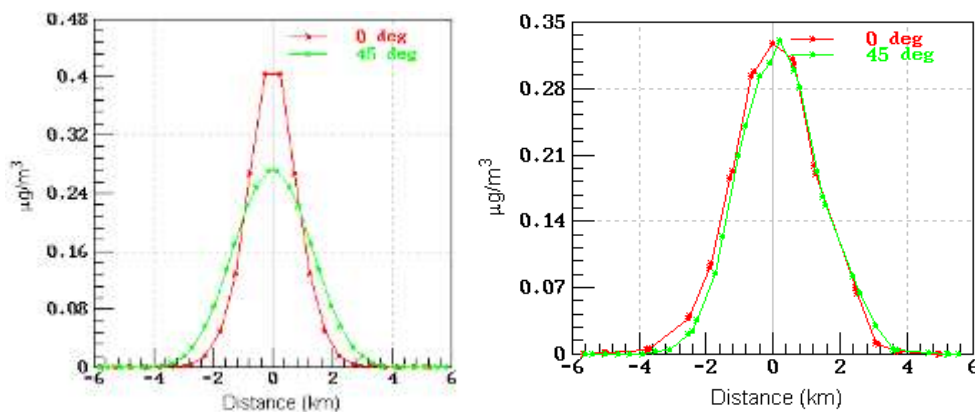
Figure 30 : Exemple de maillages imbriqués.

Choix d'une représentation structurée ou non structurée

Les facteurs qui prévalent dans le choix du type de maillage (structuré ou non-structuré) sont :

- La nécessité de suivre exactement une source étendue (par exemple une source surfacique de forme arbitraire, une source linéaire telle une route).
- L'angle entre l'alignement des conditions limites du domaine (x ou y) et la direction du vent.
- La présence éventuelle de bâtiments de forme arbitraire et demandant une précision importante.

Ainsi, le maillage structuré est en général préféré quand l'angle entre la direction du vent et la direction du maillage est de 0° ou de 90° (modulo 180°). Il est particulièrement bien adapté quand les obstacles sont également alignés avec le repère du domaine (direction x ou y) ainsi que le vent. A contrario, les effets de la diffusion numérique liés à la représentation algébrique des gradients sont plus importants quand le vent souffle à un angle de 45° avec le repère du domaine, particulièrement si le maillage n'est pas suffisamment fin.



*Figure 31 : Effet de la direction du vent par rapport au repère du domaine sur la concentration au sol à 15 km de la source pour deux maillages équivalents peu raffinés.
Maillage structuré à gauche, non structuré à droite*

La Figure 31 présente sur une section transversale à l'axe du panache à une distance de 1.5 km d'une source ponctuelle, les concentrations attendues pour un maillage structuré et non-structuré suivant la direction de vent : alignée avec l'axe x du domaine ou à 45° . Les deux maillages sont équivalents en nombre et en taille de maille et ne sont pas suffisamment raffinés. De cette figure, il est clair que le cas avec un maillage structuré et avec le vent dans l'axe du maillage donne les meilleurs résultats car la diffusion numérique est moindre. La différence avec un vent de direction 45° est de 30%. Le maillage non-structuré présente une diffusion numérique importante, bien qu'elle soit plus faible que dans le cas du maillage structuré avec le vent à 45° (15% d'erreur relative). Les résultats en non-structuré sont par contre cohérents quelque soit la direction. Bien que la diffusion numérique existe également pour le maillage non-structuré, elle présente l'avantage d'être toujours du même ordre de grandeur quelle que soit la direction du vent.

Dans le cas du maillage non-structuré, les objets sont capturés exactement, les faces de cellules suivent en effet leur frontière. Le maillage non-structuré, à l'inverse, est particulièrement adapté pour capturer des écoulements autour de formes complexes. Dans

le cas du maillage structuré, le maillage est raffiné autour des objets pour que la frontière de l'objet soit approchée correctement. En d'autres termes, les hexaèdres fournissent une bonne solution avec des maillages moins importants mais les objets sont moins bien décrits. Les tétraèdres aboutissent à la même précision que les hexaèdres avec le même nombre de cellules, lorsque l'écoulement ne présente pas de direction privilégiée.

A. Discrétisation spatiale : notion de maillage

1. Définition du maillage (volumes finis)

Le maillage est la discrétisation de l'espace dans lequel le calcul doit être réalisé (domaine de calcul) en un nombre fini de volumes, les mailles. Le système d'EDP de Navier-Stokes est discrétisé et intégré sur ces mailles pendant un pas de temps. Les variables simulées sont supposées uniformes dans une maille au cours d'un pas de temps. Ainsi, la précision avec laquelle le modèle représentera les équations mathématiques dépend de la taille de ces éléments discrets. Comme indiqué précédemment, il existe une forte relation entre le modèle de turbulence utilisé et la finesse du maillage. Ainsi, une approche de type DNS nécessite une discrétisation du domaine en des mailles de la taille de l'échelle de Kolmogorov. Une approche de type RANS permet l'utilisation d'un maillage plus large, sous réserve d'une indépendance des résultats au maillage. Il convient de la même manière de garder à l'esprit que le coût en temps de calcul et d'espace mémoire, augmente avec le nombre de mailles et peut devenir prohibitif. Le temps CPU nécessaire est approximativement proportionnel au carré du nombre total de mailles. Le maillage est donc un paramètre important du calcul pour un bon compromis entre la précision du calcul et le temps de calcul. Les capacités des machines de calcul, donc en termes de nombre de mailles, doivent ainsi guider le choix du modèle de turbulence.

1. Résolution spatiale

La résolution peut être définie comme le nombre de mailles dédiées à la description des phénomènes physiques. Il convient ainsi de distinguer la capture des phénomènes intrinsèques à l'écoulement, tels que discuté précédemment pour les différentes approches de la turbulence des éléments géométriques.

Le premier jet du maillage est souvent fait avec un nombre important de mailles. Le nombre de mailles doit être cohérent avec les dimensions du domaine et sa complexité afin que le maillage ne soit ni trop lâche ni trop fin. Ce critère est retenu à la fois par rapport aux dimensions du domaine (horizontal et vertical) ainsi que sur examen des éléments présents à l'intérieur de celui-ci (éléments/obstacles 3 D, courbes d'altitudes...).

Quand les émissions sont localisées à des endroits différents sur le site et que le panache suit des directions différentes suivant les conditions de vent, un domaine spécifique doit être défini pour chaque scénario (couple émission – direction de vent) avec un raffinement de mailles dans la direction de la dispersion sur le plan horizontal (XY) et sur le plan vertical (Z).

Afin de considérer les éléments volumiques présents dans le domaine, ces derniers doivent avant tout être traversés par des lignes de mailles. Une première vérification se fait visuellement et par l'expérience de l'utilisateur. Le principe est d'évaluer d'après la taille et la forme de l'objet s'il y a suffisamment de mailles pour le décrire.

Les préconisations du projet COST 732 indiquent d'utiliser au moins 10 mailles sur la dimension caractéristique associée au volume du bâtiment et 10 mailles entre les bâtiments. Ces recommandations sont reprises en valeur par défaut dans les bonnes pratiques, il est toutefois recommandé en pratique de choisir le nombre de maille sur la base des caractéristiques de l'écoulement cible et des bâtiments afin de ne conserver des maillages compatibles avec les objectifs de la modélisation.. A noter que, dans certaines zones, les bâtiments peuvent également être représentés via un niveau de porosité introduit dans les mailles.

Le maillage doit également être raffiné au niveau des sources pour prendre en compte de manière suffisamment précise l'apport de quantité de mouvement, de chaleur et de matière, traduisant l'effet de jet associé à la source. Comme pour la capture des obstacles et sur les critères définis précédemment, il convient de vérifier que le nombre de mailles est suffisant pour discrétiser le jet et les phénomènes physiques associés à la source et aux caractéristiques de l'émission (vitesse, géométrie).

L'utilisation de maillages incorrects peut générer plusieurs types de problèmes dont :

- une accumulation de matière non-physique dans une maille jouxtant un obstacle (même pour des versions conservatives et incompressibles de Navier-Stokes),
- une source mal traduite en particulier pour les sources surfacique pour laquelle le produit sera émis par sur une partie seulement de la surface voulue par l'utilisateur (avec des débits concentrés et plus importants),
- un lissage des gradients élevés des champs dynamiques au voisinage des sources ou autour des bâtiments

Enfin, la résolution verticale dépend de la hauteur des obstacles, de la source, des points cible et de la description de la couche limite et des lois de surface associées. Le projet COST 732 notamment indique que la première maille doit être dans la région logarithmique dans le cas de l'utilisation d'une loi logarithmique à une distance correspondant à une distance au mur non-dimensionnelle supérieure à 30 [17], ce qui est automatiquement satisfait pour les rugosités importantes [18].

1. Lissage

Le lissage est le rapport de taille entre deux mailles adjacentes. Une valeur importante entraînera un maillage très peu uniforme et une mauvaise estimation des gradients. La précision du résultat augmente avec la diminution du rapport (lissage plus important). Cependant, il est également important de capturer les petits éléments et la taille nécessaire pour cette capture est en général inapplicable à l'ensemble du domaine en raison de la taille du maillage complet. De ce fait, des maillages raffinés sont souvent nécessaires, générant une non-uniformité.

Le critère de qualité d'un maillage consiste donc en général à appliquer une loi géométrique de raison comprise entre 1.1 et 1.2 à la variation de taille entre deux mailles adjacentes. Le projet COST 732 a permis de remarquer que cette loi n'est pas universelle car des lois de variations plus importantes peuvent être utilisées avec des schémas numériques d'ordre élevé, l'erreur de troncature étant alors plus faible.

Ce facteur de lissage est également important pour les domaines imbriqués, le nombre des mailles en bordure du domaine imbriqué ne devant pas être plus du double ou éventuellement du triple des mailles dans le domaine l'englobant.

2. Dissymétrie

Le facteur de dissymétrie décrit le degré de déformation d'une cellule. Plus ce degré est important et plus des problèmes de convergence peuvent émerger. Les formes de références entraînant le meilleur facteur de dissymétrie sont le triangle équilatéral et le carré. En résumé, il est bon de retenir les ordres de grandeurs suivants :

- Dissymétrie $< 0.8 \Rightarrow$ bon maillage
- $0.8 < \text{Dissymétrie} < 0.95 \Rightarrow$ mauvaises cellules tolérées
- Dissymétrie $> 0.95 \Rightarrow$ risques de problèmes de convergence

3. Facteur de forme

Le facteur de forme est le rapport entre la plus petite et la plus grande dimension d'une maille. Un rapport important ne peut être toléré que si l'écoulement est aligné avec la dimension la plus importante de l'élément.

- Facteur de forme < 5 , si la cellule se trouve dans une zone de recirculation,
- De façon générale, facteur de forme < 10 ,
- Facteur de forme pouvant aller jusqu'à 30 pour des configurations d'écoulement particulières (écoulements canalisés avec une direction privilégiée).

4. Vérification du maillage

La plupart des maillages intégrés dans les logiciels CFD respectent de façon inhérente les critères de lissage, de dissymétrie et de facteur de forme. L'utilisateur doit cependant garder ces règles en tête s'il opère des modifications manuelles du maillage comme le proposent certains outils.

Les premières étapes de calcul permettent également de vérifier que le maillage permet une convergence correcte ou non. Les critères de convergence numériques type nombre de Courant (CFL) liant pas de temps et taille de maille et qui définissent la résolution des équations sont non respectés si le maillage ne respecte pas certaines règles d'uniformité. Ceci peut engendrer une divergence du calcul. La convergence du calcul sur les premiers pas de temps permet de vérifier donc indirectement le maillage réalisé.

Une fois les étapes précédentes réalisées, des premiers essais de simulation à convergence correcte sont effectuées et ces essais permettent de vérifier le maillage généré pour les points suivants (après quelques itérations):

- Les bâtiments correctement pris en compte : le vent contourne les éléments bloquants et le polluant ne s'accumule pas de manière non-physique devant les bâtiments. (ce phénomène apparaît si les gradients de vitesse en paroi de l'obstacle ne sont pas suffisamment bien discrétisés et le produit pénétrant une maille par une face amont ne ressort pas latéralement) ;
- Les phénomènes physiques de l'émission et notamment les gradients sont correctement décrits : visualisation de l'éjection de matière au niveau de la source, taille et élargissement de la zone d'expansion du jet et de la zone inertielle post expansion (lorsque les gradients de pression sont redevenus faibles) ;
- pas de « saut » de concentration d'une maille à l'autre traduisant un nombre suffisant de mailles dans le panache pour modéliser les forts gradients de concentrations. Les forts gradients concentrés sur les quelques cellules adjacentes sont ainsi à éviter.
- Le nombre de cellules dans la couche limite et dans la recirculation ou devant les bâtiments est suffisant.

En conclusion le principe de validation du maillage est basé sur un processus itératif de contrôle. A chaque étape de modélisation, le maillage est remis en cause et modifié si besoin.

BP2	• Saut justification, il convient d'utiliser au moins 10 mailles sur la dimension caractéristique associée au volume du bâtiment et 10 mailles entre les bâtiments.
BP3	• Raison géométrique de la variation des tailles de maille inférieure à 1,2
BP4	• Facteur de forme des mailles inférieur à 10. Une valeur supérieure doit être argumentée sur la base de conditions particulières d'écoulement ou de propriétés du schéma numérique.

Annexe 5 : Schémas numériques

Cette annexe décrit les schémas de discrétisation selon la méthode des volumes finis. Cette méthode est la plus utilisée, mais pas la seule, utilisée dans les codes de calcul de mécanique des fluides. Il convient de distinguer les schémas de discrétisation spatiale des schémas d'intégration temporelle.

A. Généralités

La résolution des équations aux dérivées partielles par les méthodes aux volumes finis est basée sur une approximation discrète des champs et des opérateurs de dérivation de ces équations. Les EDP sont ainsi tout d'abord intégrées sur le volume des mailles. Les dérivées en espace et en temps sont ensuite discrétisées à l'aide des développements en séries de Taylor. L'erreur de troncature est définie comme la différence entre la solution exacte de l'équation aux dérivées partielles et la solution de l'équation discrétisée aux volumes finis.

Différentes approximations sont possibles pour les opérateurs spatiaux [24]. A titre d'exemple, il est possible de citer, pour les termes d'advection, les schémas décentrés amont (upwind forward), centrés ou décentrés aval (upwind backward), suivant les pas utilisés pour le développement et la recherche de stabilité du schéma. Des schémas d'ordre supérieur sont nécessaires pour les cas d'écoulement violents avec effets compressibles. (Exemple : Schémas avec limiteur de flux de type MUSCL, Van Leer, SuperBee). En général les schémas retenus utilisent un mélange du schéma Upwind et de schéma d'ordre supérieur.

Il existe trois méthodes distinctes d'intégration temporelle :

- La méthode explicite consiste à discrétiser les dérivées spatiales à l'instant t . Ainsi, en tenant compte des conditions initiales, toutes les inconnues peuvent être calculées explicitement en avançant dans l'espace et le temps.
- La méthode implicite consiste à discrétiser les dérivées spatiales à l'instant $t+1$. Les inconnues sont alors résolues simultanément dans tout l'espace spatial et temporel par inversion d'une matrice.
- Les méthodes semi-implicites qui combinent ces deux approches.

Quand le phénomène modélisé présente des échelles de temps différentes, par exemple dans un cas de dispersion violente ou pour des recirculations, un schéma explicite exige l'emploi du pas de temps correspondant au phénomène le plus rapide, soit le pas de temps le plus petit. Le schéma implicite, dans les mêmes conditions, et s'il est bien adapté au phénomène en question, pourra apporter un gain de temps très élevé (jusqu'à un facteur 100) par rapport au schéma explicite.

Par ailleurs, plus il y a de termes dans les séries de Taylor et plus l'ordre de précision est élevé, soit en temps, soit en espace. L'approximation la plus importante est celle qui est faite pour le terme d'advection (ou terme de convection). Les schémas du premier ordre doivent être évités, sauf pour l'initialisation ou pour une première approximation du résultat, en raison d'une trop grande diffusion numérique.

Un schéma numérique doit être capable de donner la solution la plus précise possible d'un problème physique sans parasite. Les critères pour juger de la qualité sont les suivantes :

- La consistance est la condition selon laquelle le schéma discret doit tendre vers l'équation différentielle. Elle est quasiment naturelle pour tous les schémas et doit être vérifiée avant inclusion dans un logiciel. Cette condition ne sera donc pas rediscutée ci-dessous.
- La convergence signifie que la répétition de l'algorithme ne doit pas engendrer d'erreurs appréciables. Le schéma numérique doit tendre vers la solution exacte avec un pas de temps suffisamment faible.
- La condition de stabilité indique qu'aucune perturbation parasite ne doit être amplifiée. En pratique, les conditions limites constituent la première source d'instabilités numériques. Les méthodes implicites sont intrinsèquement stables.

Les équations liées aux phénomènes de convection (phénomènes d'intérêt majeur pour la dispersion atmosphérique) sont des équations paraboliques incomplètes ou hyperboliques. Pour ces équations, une condition de stabilité pour un schéma explicite est la condition de Courant-Friedrich-Levy (CFL) : qui doit être inférieure à 1. Ce critère relie les pas de temps et d'espace avec la vitesse de l'écoulement.

Comme cela l'a été brièvement introduit précédemment, les différentes méthodes utilisées en volumes finis ont des propriétés intrinsèques différentes et de ce fait, ne sont pas utilisées de la même manière et pour les mêmes objectifs. Une bonne initialisation permettra d'économiser le temps de calcul (notamment pour les schémas semi-implicites) et de prendre une assurance supplémentaire que le calcul convergera vers la bonne solution (notamment pour les schémas implicites).

Annexe 6 : Autres familles de modèles de dispersion

L'objectif de cette annexe est de fournir quelques définitions de concept relatif aux modèles lagrangiens ainsi que leurs justifications. Cette annexe présente également une solution de l'équation de Fokker-Planck (EFP) dans le cas 1D où le couple (x,u) (position, vitesse) est un couple de scalaire.

A. Particules de fluide ou particules marquées

Dans un modèle lagrangien à particules, un élément de fluide peut être considéré comme une "particule de fluide" ou "particule marquée". Ces termes sont utilisés pour désigner la portion du fluide que l'on suit. Ils correspondent à un élément de fluide dont la taille est beaucoup plus grande que l'échelle de longueur moléculaire mais au moins plus petite que la plus petite des échelles étant résolue dans le problème. Dans un contexte de turbulence, cette limite correspond à l'échelle de Kolmogorov (ou échelle de dissipation visqueuse).

Lorsqu'elle existe dans un flux, la particule de fluide se déplace le long d'une ligne de courant, ceci n'est plus valable lorsque l'on rajoute un terme de diffusion.

B. Processus de Markov

Pour décrire l'évolution du flux turbulent d'une particule de fluide on fait l'hypothèse que le couple (x_p, u_p) de la particule évolue selon un processus de Markov. Cette hypothèse est acceptable aux échelles de temps considérées pour les modèles lagrangien car l'accélération des particules de fluide est auto-corrélée pour des temps de l'ordre de τ_n (échelle de temps de Kolmogorov), ce qui est petit pour un flux turbulent avec un grand nombre de Reynolds.

Définition d'un processus de Markov

Un processus de Markov est un processus dont l'évolution future $\{X_s : s > t\}$ ne dépend de son passé qu'à travers son état à l'instant t :

$$\forall s > t, \quad L(X_s | X_r : r \leq t) = L(X_s | X_t)$$

où $L(X_s | X_t)$ désigne la loi de X_s sachant X_t . Cette définition signifie que, pour le futur, l'histoire du processus jusqu'à l'instant t est entièrement résumée par son état à l'instant t ; ou encore que le présent étant connu, le futur est indépendant du passé.

Par exemple, le cours d'une action n'est vraisemblablement pas un processus de Markov : la "mémoire" du processus est probablement plus longue (par exemple une tendance saisonnière). La fortune du joueur au jeu du "Pile ou Face" est un processus de Markov si les tirages sont indépendants.

C. Formulation des modèles

Les modèles lagrangiens à particules reposent essentiellement sur l'hypothèse selon laquelle l'évolution future du couple $(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p)$ (position, vitesse) de la particule dans un flux turbulent évolue de façon continue dans le temps selon un processus de Markov.

En trois dimensions, le processus peut s'exprimer grâce à l'**équation de Langevin**, qui correspond à l'équation différentielle stochastique (EDS) suivante :

$$\begin{aligned} dx_i &= u_i dt \\ du_i &= a_i dt + b_{ij} dW_j \end{aligned} \quad \text{Eq- 11}$$

Dans cette équation, i et j ($= 1, 2$ et 3) sont les indices des directions cartésiennes, $a_i \equiv a_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ est le **coefficient d'advection** dans la direction i , $b_{ij} \equiv b_{ij}(\mathbf{x}_p, t)$ est le composant (i, j) du **coefficient de diffusion** indépendant de la vitesse, et dW_j est le différentiel d'un processus de Wiener dans la direction j (Annexe II).

Le terme $b_{ij}(\mathbf{x}, t)$ peut être dérivé de la théorie de Kolmogorov. Dans la « gamme inertielle intermédiaire », qui correspond à une gamme d'échelle de temps Δt petites comprises entre l'échelle de temps de Kolmogorov (τ_n) et l'échelle de temps lagrangienne (T_L), b_{ij} peut s'écrire de la façon suivante :

$$b_{ij} = \delta_{ij} \sqrt{C_0 \cdot \varepsilon} \quad \text{Eq- 12}$$

Dans cette relation, δ_{ij} est le symbole de Kronecker, C_0 est une constante universelle sans dimension et ε est le taux de dissipation moyen de l'énergie cinétique turbulente (ECT).

Un processus de Markov continu, décrit par l'équation de Langevin, équation Eq- 11, peut être décrit par une **équation de Fokker-Planck** (EFP) portant sur la **fonction de densité de probabilité** (PDF) eulérienne des particules $P(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p, t)$. A l'état stationnaire, cette équation prend la forme suivante, avec b_{ij} donné par l'équation Eq- 12.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i(\mathbf{x}_p) \cdot P(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p)) = - \frac{\partial}{\partial u_i} (a_i(\mathbf{x}_p) \cdot P(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} (b_{ij}^2(\mathbf{x}_p) \cdot P(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p)) \quad \text{Eq- 13}$$

En 1987, Thomson introduit un concept fondamental appelé « well mixed condition » qui aide à caractériser les LPDM d'une façon systématique et appropriée. Si la position et la vitesse de polluant sont initialement bien distribuées dans le flux, elles le resteront. Concrètement, ceci signifie que la PDF eulérienne des particules, $P(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p)$, est égal à la PDF eulérienne **atmosphérique** : $P(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p) = p_E(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p)$. Cette condition est nécessaire et suffisante.

Les modèles lagrangiens à particules sont généralement des modèles unidimensionnels qui résolvent une, deux, voire trois équations de Langevin, dans chaque direction cartésienne.

L'extension à un modèle entièrement tridimensionnel a été faite [35][36]. Il peut être démontré que l'EFP en trois dimensions n'admet une solution unique que dans le cas d'une

turbulence homogène et isotrope [36]. Il existe généralement plusieurs, voire une infinité de solutions à l'équation. La forme de a_i n'est donc pas unique et il faut faire des hypothèses sur la forme de P (gaussienne, bi-gaussienne, Gram-Charlier).

Le principal apport de données physiques dans les LDPM se fait par le choix de la PDF eulérienne qui, d'après ce qui a été expliqué plus haut, correspond à la PDF eulérienne atmosphérique ('well mixed condition'). Sa forme dépend des caractéristiques de la turbulence dominante. Si cette PDF est gaussienne, elle peut être entièrement décrite par la moyenne et la déviation standard. Autrement, des moments d'ordre supérieur seront nécessaires : leur forme non-gaussienne peut habituellement être décrite avec suffisamment de précision en ajoutant les moments jusqu'à l'ordre 3 ou 4. La Figure 32 montre le schéma de principe de la résolution par de telles approches.

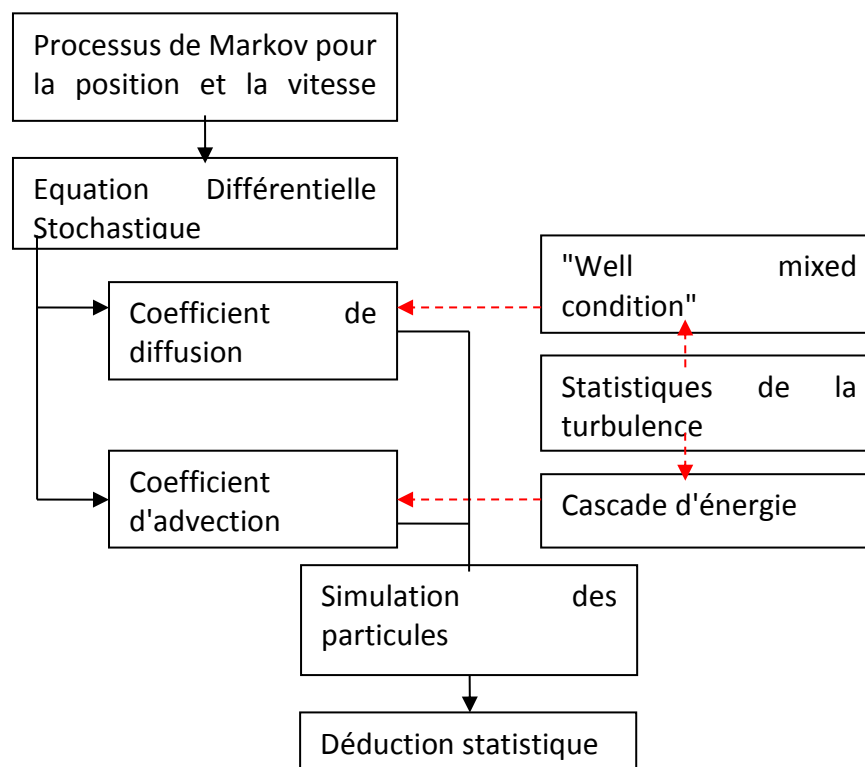


Figure 32 - Schéma des principaux composants d'un modèle lagrangien à particules.

D. Coefficient de diffusion b_{ij} de l'équation de Langevin

Nous avons vu qu'en trois dimensions, le processus de Markov peut s'exprimer grâce à l'équation de Langevin qui correspond à l'équation différentielle stochastique (EDS) suivante :

$$\begin{aligned} dx_i &= u_i dt \\ du_i &= a_i dt + b_{ij} dW_j \end{aligned} \quad \text{Eq- 14}$$

où i et j ($= 1, 2$ et 3) sont les indices des directions cartésiennes, $a_i \equiv a_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ est le coefficient d'advection dans la direction i , $b_{ij} \equiv b_{ij}(\mathbf{x}, t)$ est le composant (i, j) du coefficient de diffusion indépendant de la vitesse, et dW_j est le différentiel d'un processus de Wiener dans la direction j . Le terme b_{ij} peut être dérivé de la théorie de Kolmogorov.

En appliquant quelques propriétés stochastiques du processus de Wiener de l'équation Eq-11, on obtient à l'instant t :

$$\langle (u_i(t + \Delta t) - u_i(t)) \cdot (u_j(t + \Delta t) - u_j(t)) \rangle = b_{ik} b_{jk} \cdot \Delta t + o((\Delta t)^2) \quad \text{Eq- 15}$$

Dans cette relation, Δt est la taille d'un pas de temps à l'instant t .

Dans la gamme intermédiaire inertielle ($\tau_\eta \leq \Delta t \leq T_L$), le terme de droite de l'équation ci-dessus est égal à $\delta_{ij} C_0 \varepsilon \cdot \Delta t$ (Monin et Yaglom, 1975), valeur obtenue à partir de l'équation Eq- 11 pour Δt petit. On en déduit :

$$b_{ij} = \delta_{ij} \sqrt{C_0 \cdot \varepsilon} \quad \text{Eq- 16}$$

Relation dans laquelle δ_{ij} est le symbole de Kronecker, C_0 est une constante universelle sans dimension et ε est le taux de dissipation moyen de l'énergie cinétique turbulente (ECT).

Définition d'un processus de Wiener

Le processus de Wiener est un forçage gaussien non corrélé, ayant pour moyenne 0 et pour variance dt . Son différentiel représente une accélération aléatoire externe (agissant sur la particule de fluide) ayant les caractéristiques suivantes :

$$\begin{aligned} \langle dW_i(t) dW_j(t) \rangle &= 0 \quad \text{pour } i \neq j \\ \langle dW_i(s) dW_i(t) \rangle &= 0 \quad \text{pour } s \neq t. \end{aligned}$$

Définition : Echelle de temps intégrale lagrangienne T_L

T_L représente le temps moyen durant lequel les grandeurs aléatoires des fluctuations de vitesse de la particule fluide restent corrélées de façon significative.

Dans le cas d'une turbulence homogène, $T_L = \text{constante}$ et en cas de turbulence non homogène, T_L varie en fonction de la position de la particule. Si T_L est faible, le mouvement de la particule est principalement dû au phénomène de diffusion (ceci s'observe plutôt dans les basses altitudes). Si T_L est grand, la diffusion est faible et le vent est le principal responsable du mouvement.

E. Une solution 1D de l'équation de Fokker-Planck (Thomson, 1987)

Soit l'équation de Fokker-Planck (EFP) dans le cas stationnaire portant sur la fonction de densité de probabilité eulérienne de particules $P(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p, t)$:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, \mathbf{u})) = - \frac{\partial}{\partial u_i} (a_i(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, \mathbf{u})) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} (b_{ij}^2(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, \mathbf{u})) \quad \text{Eq- 17}$$

Dans cette relation, b_{ij} est donné par l'équation Eq- 16

Selon Thomson (1987), le modèle est soumis à la "**well-mixed condition**" (si la position et la vitesse des particules de polluant sont initialement bien distribuées dans le flux, elles le resteront). Concrètement, ceci signifie que la FDP eulérienne des particules, $P(\mathbf{x}, \mathbf{u})$, est égal à la FDP eulérienne atmosphérique : $P(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = p_E(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ Cette condition est nécessaire et suffisante.

Or, une FDP est décrite par ses moments. Ce qui signifie que tous les moments de $P(\mathbf{x}, \mathbf{u})$, qui permettent de décrire $P(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ et donc de résoudre l'équation, doivent être égaux aux moments de $p_E(\mathbf{x}, \mathbf{u})$, qui peuvent être mesurés ou paramétrés.

En une dimension, l'EFP a une solution unique et le terme $a(x, u)$ (en 1 dimension, x et u sont des scalaires) peut être calculé pour une FDP donnée selon la formule suivante (Thomson, 1987) :

$$a(x, u) = \frac{1}{p_E(x, u)} \cdot \left(\frac{C_0 \varepsilon}{2} \cdot \frac{\partial p_E(x, u)}{\partial u} \right) + \frac{\phi(x, u)}{p_E(x, u)} \quad \text{Eq- 18}$$

où $\phi(x, u)$ satisfait la relation :

$$\phi(x, u) = - \frac{\partial}{\partial x} \cdot \int_{-\infty}^u u \cdot p_E(x, u) \cdot du \quad \text{Eq- 19}$$

avec la condition aux limites suivante :

$$\phi \rightarrow 0 \quad \text{quand} \quad |\mathbf{u}| \rightarrow \infty \quad \text{Eq- 20}$$

De plus, plusieurs publications montrent que :

$$\frac{C_0 \varepsilon}{2} = \frac{\sigma^2}{T_L} \quad \text{Eq- 21}$$

Où σ est l'écart type de la vitesse du vent.

La valeur de la constante universelle C_0 est évaluée expérimentalement. Différentes publications font état de valeurs allant de 2 à 10.

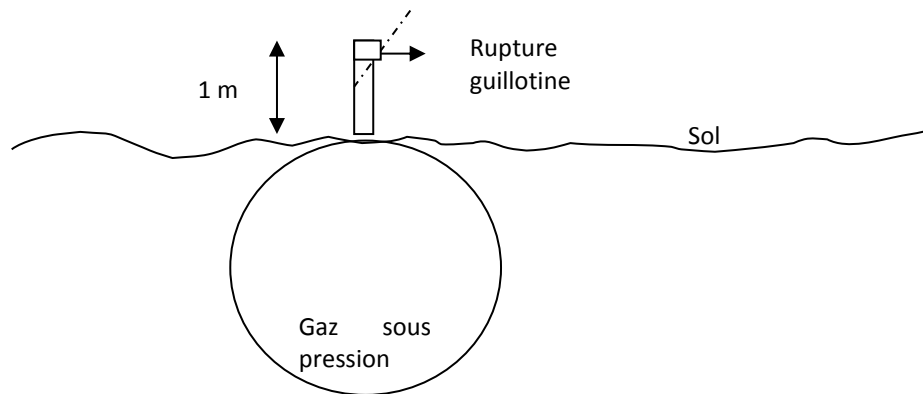
Tableau 7 - Quelques valeurs expérimentales de la constante C_0

Valeurs possibles de C_0	Publications de référence
$2 < C_0 < 4$	Luhar and Britter, 1989 ; Hurley and Physick, 1991 et 1993 ; Physick et al., 1994 ; Tassone et al., 1994 ; Rotach et al., 1996 ; Degrazia and Anfossi, 1998
$C_0 = f(Re)$	Sawford, 1991
C_0 anisotrope dans la CLS : $C_0 = 4,3$ perpendiculairement à l'écoulement $C_0 = 3,2$ dans le sens de l'écoulement	Anfossi et al., 2000 (mesures sur anémomètres soniques)

Annexe 7
Synthèse détaillée du cas n°1

Description du cas fictif

La configuration à étudier est la suivante :

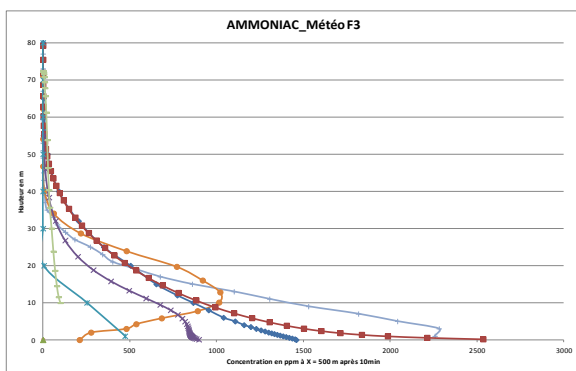


La situation à étudier est la rupture guillotine sur une canalisation de 2 pouces de transport de gaz. Ce gaz provient d'une capacité à 8 bars située 1 m en amont de la rupture. Il conviendra de considérer un rejet de 10 minutes dans l'axe du vent pour deux classes de vent (F3 et D5, classes demandées dans les études par la circulaire du 28 décembre 2006). Ce gaz provient d'une cuve située en amont et non prise en compte dans les modélisations. Trois types de gaz seront étudiés :

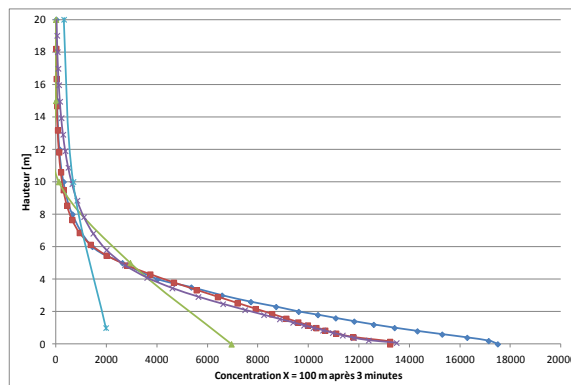
- un gaz lourd : C_3H_8 , de masse molaire 44 g/mol. Le débit de fuite est alors de 4.5 kg/s. Après détente la vitesse d'éjection est de 250 m/s pour une densité de 1.83 kg/m^3 ce qui fait un diamètre virtuel de 0.112 m.
- un gaz léger : NH_3 , de masse molaire 17 g/mol. Le débit de fuite est alors de 2.8 kg/s. Après détente la vitesse d'éjection est de 402 m/s pour une densité de 0.707 kg/m^3 , soit un diamètre virtuel de 0.112 m.
- un gaz neutre : CO , de masse molaire 28 g/mol. Le débit de fuite est alors de 3.6 kg/s. Après détente la vitesse d'éjection est de 349 m/s pour une densité de 1.16 kg/m^3 , soit un diamètre virtuel de 0.107 m.

Résultats principaux

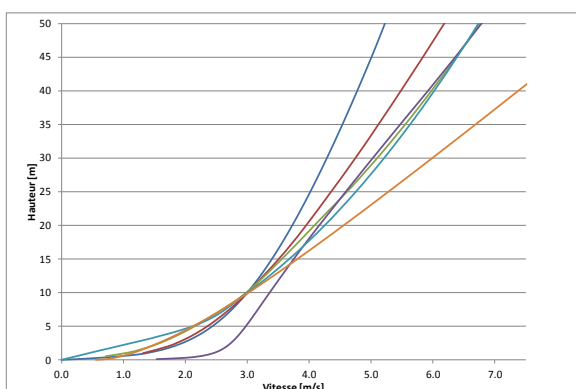
Pour tous les cas modélisés, la comparaison des résultats a mis en évidence de nombreuses disparités comme, par exemple, sur les profils de concentrations en aval du point de rejet dont quelques exemples sont reproduits ci-après.



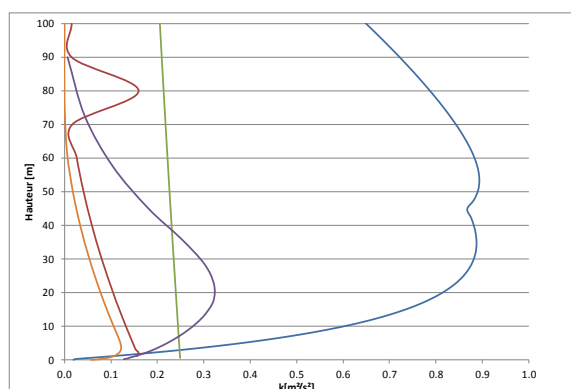
Rejet d'ammoniac en condition F3, concentration 500 m en aval du point de rejet après 10 minutes.



Rejet de propane en condition D5, concentration 100 m en aval du point de rejet après 3 minutes.



Profils de vitesse utilisés en entrée de domaine de calcul pour une classe de vent F3



Profils de turbulence (k) utilisés en entrée de domaine de calcul pour une classe de vent F3

Au-delà de la forte dispersion des résultats mise en évidence par ces simulations, l'intérêt principal a été de distinguer les quatre domaines principaux pour lesquels les pratiques divergeaient entre les utilisateurs :

- la génération du maillage,
- le choix des profils de conditions aux limites du domaine,
- la définition du terme source et son introduction dans l'outil de modélisation,
- la modélisation de la turbulence.

Annexe 8 : Synthèse détaillée du cas n°2

Dans le but d'imposer des modélisations en aveugle, le cas retenu est totalement fictif et aucune donnée expérimentale n'était disponible pour cette configuration. L'objectif d'une telle approche est de déterminer les paramètres d'influence majeure au travers des différences observées entre les résultats. Pour ce cas, de nombreux outils de modélisations différents ont été mis en œuvre. Pour des raisons évidentes, les résultats sont anonymisés.

A. Description du cas

1. Description du rejet

Le choix de modélisation s'est porté sur un gaz lourd explosif, le propane. L'objectif des simulations était de déterminer :

- La masse inflammable, masse de propane avec une concentration supérieure à la LIE,
- La distance à la LIE.

Afin de réduire les écarts dus à ce paramètre, paramètre identifié comme potentiellement majeur à la suite du cas n°1, le terme source a été simplifié. Dans ce but et afin de conserver un débit suffisamment important de propane, ce débit a été réparti sur une surface d'éjection importante. Le terme source est ainsi défini :

Rejet de C_3H_8 gazeux, de masse molaire 44 g/mol. Le débit de fuite est de 45 kg/s. Ce débit était distribué sur une surface d'1 m² et la température du rejet sera égale à la température ambiante, soit 20°C, la masse volumique du gaz étant alors de 1,83 kg/m³. Cela correspond donc à un rejet de 24,6 m³/s et donc une vitesse de rejet, sur cette surface de 1 m² de 24,6 m/s.

La durée du rejet est de **10 minutes** dans l'axe du vent.

2. Géométrie

Deux types d'obstacles étaient positionnés dans le domaine :

- Une série d'obstacles en proximité immédiate du rejet, représentant les bâtiments du site industriel,
- Un mur plus éloigné du point de rejet. Une simulation sera réalisée avec le mur, une autre sans afin d'en étudier l'impact sur la dispersion du nuage de produit inflammable.

La Figure 33 montre en vue de dessus l'implantation et la taille des obstacles. L'origine du repère est le point source. La source est située au centre du domaine Comme présenté sur cette figure, le vent est orienté selon l'axe x. La Figure 34 montre un zoom de la zone encombrée avec les différents bâtiments modélisés. La Figure 35 montre une coupe permettant de visualiser la position du rejet.

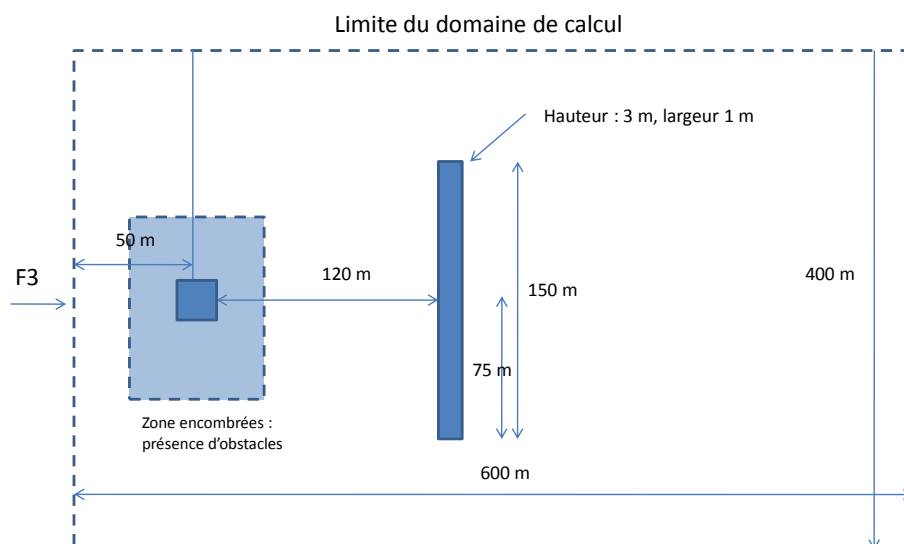


Figure 33 : Plan en vue de dessus de la configuration à étudier.

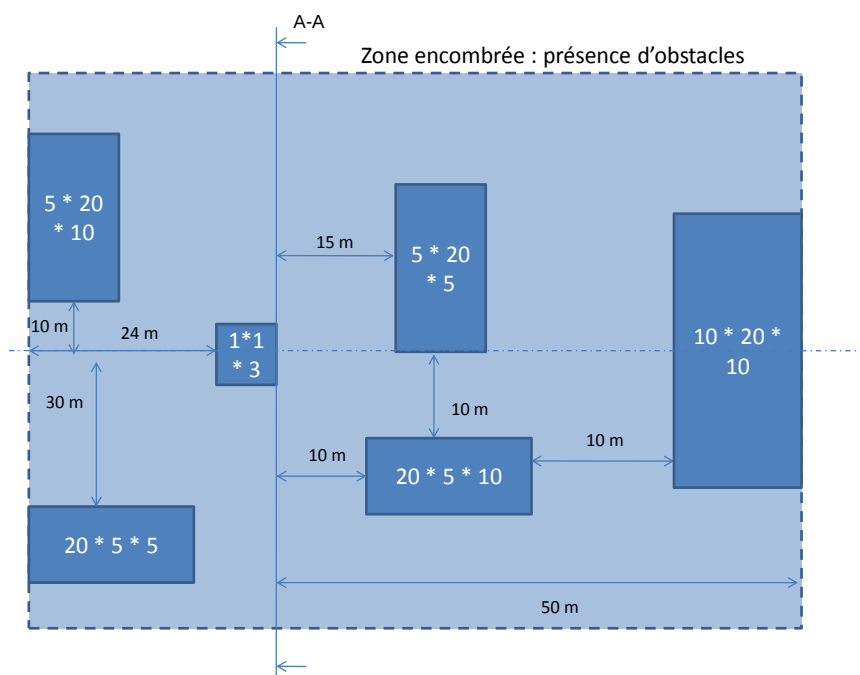


Figure 34 : Détails de la zone encombrée. La dimension des obstacles est donnée sous la forme longueur * largeur * hauteur.

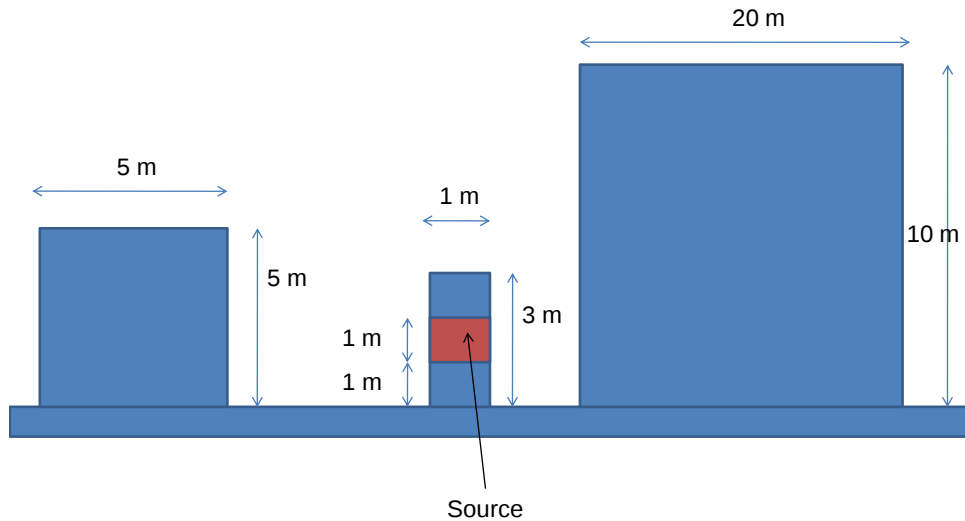


Figure 35 : Coupe A-A.

Afin de limiter la dispersion en termes de maillage, il était conseillé d'utiliser :

- un maillage structuré,
- une capture de la source par un minimum de 4 mailles,
- un nombre maximal de 1,5 millions de mailles.

3. Profil de vent en entrée de domaine

La classe de stabilité considérée est la classe F3. Au vu de la difficulté de représentation des classes de stabilité, les profils de vitesse, turbulence et température permettant de reproduire une situation représentative d'une classe F3 a été imposée. A noter que les profils retenus pour cette modélisation diffèrent des profils finalement prescrits dans les bonnes pratiques.

a. Calcul des grandeurs caractéristiques

i. Profil de vitesse

Le profil de vitesse retenu est basé sur une loi logarithmique :

$$u(z) = \min \left(\frac{u_0^*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_M(\zeta) \right]; u_g \right)$$

Relation dans laquelle :

$$\zeta = \frac{z}{L_{MO}}$$

BP11 – Dans la zone d'intérêt, c'est-à-dire dans le panache de concentration supérieur au SEI (produit toxique) ou à la LIE (produit inflammable), le nombre de mailles utilisé dans chacune des directions des bâtiments et dans les espaces les séparant devra être argumenté sur la base des caractéristiques des bâtiments et de l'écoulement. A défaut de justification, une dizaine de mailles devra être utilisée dans chacune des directions.

$$u_0^* = \frac{U_0 \cdot \kappa}{\ln\left(\frac{z_{ref}}{z_0}\right) - \Psi_u\left(X\left(\frac{z_{ref}}{L_{MO}}\right)\right)}$$

Avec :

$$\Psi\left(X = \left(1 - 16 \frac{z}{L_{MO}}\right)^{1/4}\right) = 2 \ln\left(\frac{(1+X)}{2}\right) + \ln\left(\frac{(1+X^2)}{2}\right) - 2 \tan^{-1}\left(X + \frac{\pi}{2}\right)$$

Et :

$$\begin{cases} \phi_M(\zeta) = \sqrt{\phi_H(\zeta)} = (1 - 16\zeta)^{-1/2} & \text{si } -5 < \zeta < 0 \\ \phi_M(\zeta) = \phi_H(\zeta) = 1 + 5\zeta & \text{si } 0 < \zeta < 1 \end{cases}$$

La longueur de Monin a été fixée égale à 13,7 m et la rugosité à égale à 0,05 m.

Le vent géostrophique est estimé au moyen des formules suivantes :

$$u_g = \sqrt{u_{g,x}^2 + u_{g,y}^2}$$

$$\frac{\kappa u_{g,x}}{u_0^*} = 2,2 \frac{h}{L_{MO}} + \log\left(\frac{h + 30 \cdot z_0}{z_0}\right) + 0,19$$

$$\frac{\kappa u_{g,y}}{u_0^*} = -\max\left(\left(3,55 \cdot \frac{h}{L_{MO}} + 1,87\right); 5,14\right) \cdot \text{sign}(f)$$

La hauteur de la couche limite atmosphérique est estimée à partir de la vitesse de frottement, la force de Coriolis ($f = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$) et la LMO :

$$h = 0,3 \frac{u_0^* / f}{1 + 1,9 \frac{h}{L_{MO}}}$$

ii. Profil de turbulence

Le profil d'énergie cinétique de turbulence est estimé par :

$$k(z) = \max \left(\frac{u_0^{*2}}{\sqrt{C_\mu}} \cdot \sqrt{1 - \frac{\zeta}{\Phi_M(\zeta)}} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1,75} ; k_{ext} \right)$$

Et pour le profil du taux de dissipation scalaire par :

$$\varepsilon(z) = \max \left(\frac{u_0^{*3}}{\kappa \cdot z} \Phi_M(\zeta) \cdot \left(1 - 0,85 \frac{z}{h}\right)^{1,5} ; \varepsilon_{ext} \right)$$

Les valeurs de k_{ext} et ε_{ext} sont calculées au moyen des formules suivantes :

$$k_{ext} = 13,7 \cdot 10^6 \frac{1}{\sqrt{C_\mu}} \frac{u_0^{*8}}{u_g^6}, \text{ avec } C_\mu = 0,033$$

$$\varepsilon_{ext} = 1,88 \cdot 10^{14} \cdot \frac{u_0^{*12}}{u_g^{10}} \cdot f$$

iii. Profil de température

Le profil de température potentielle en entrée de domaine est calculé par la relation :

$$\begin{cases} \theta(z) = \theta_{sol} + \frac{\theta_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_T} \right) - \psi_H(\zeta) \right] & \text{si } z < h \\ \theta(z) = \theta_{sol} + \frac{\theta_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{h}{z_T} \right) - \psi_H(\mu) \right] + \gamma_{ext} (z - h) & \text{si } z > h \end{cases}$$

Avec les formules suivantes pour les fonctions universelles :

$$\begin{cases} \psi_M(\zeta) = \psi_H(\zeta) = -5\zeta & \text{si } 0 < \zeta < 1 \end{cases}$$

B. Résultats obtenus

1. Masse inflammables et profils de concentration

Comme indiqué précédemment, l'objet de ces simulations consistait à prédire la masse inflammable et la distance à la LIE. Le Tableau 8 présente les résultats obtenus par les différentes modélisations.

		Masse inf	Dist LIE
U1	C1	1660	132
U2	C2 - run 1	3 850	225
U2	C2 - run 2	2 550	155
U2	C3	3 000	135
U3	C4	757	145
U3	C5	923	118
U3	C6	1 194	120
U4	C5	3 370	250
U5	C2 - Run 1	-	140
U5	C2 - Run 2	1 667	150
U5	C2 - Run 3	2 639	130
U5	C3	3 100	130
U6	C7	4 045	258
U7	C4	3 464	68
U8	C8	1 690	163
U9	C8	1 250	150
U10	C2	2 193	162
E(X)		2335	155
$\sigma / E(X)$ en %		46	31

Tableau 8 : Synthèse des résultats obtenus.

Ces variations notables des distances et masses inflammables obtenues peuvent également être observées au travers des profils de concentrations à différentes distances. Les profils verticaux de concentration sont tracés à 25 m en aval du point de rejet, Figure 36 et à 100 m en aval du point de rejet Figure 37.

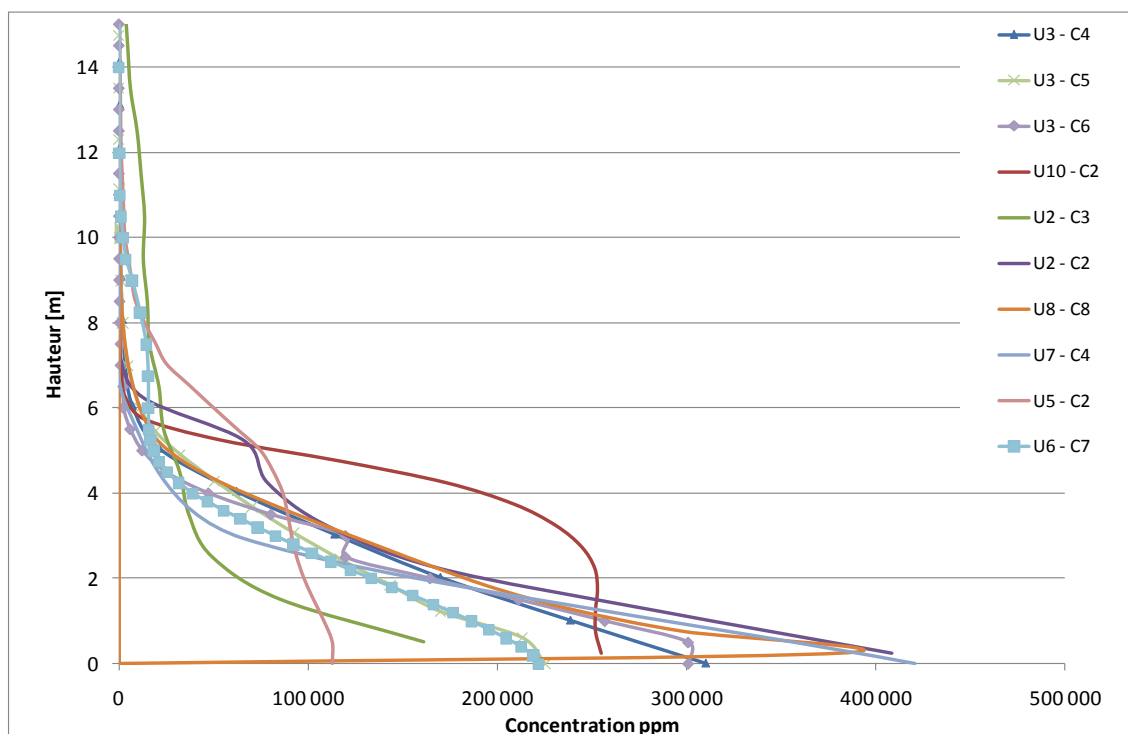


Figure 36 : Profil vertical de concentration 25 m en aval du point de rejet.

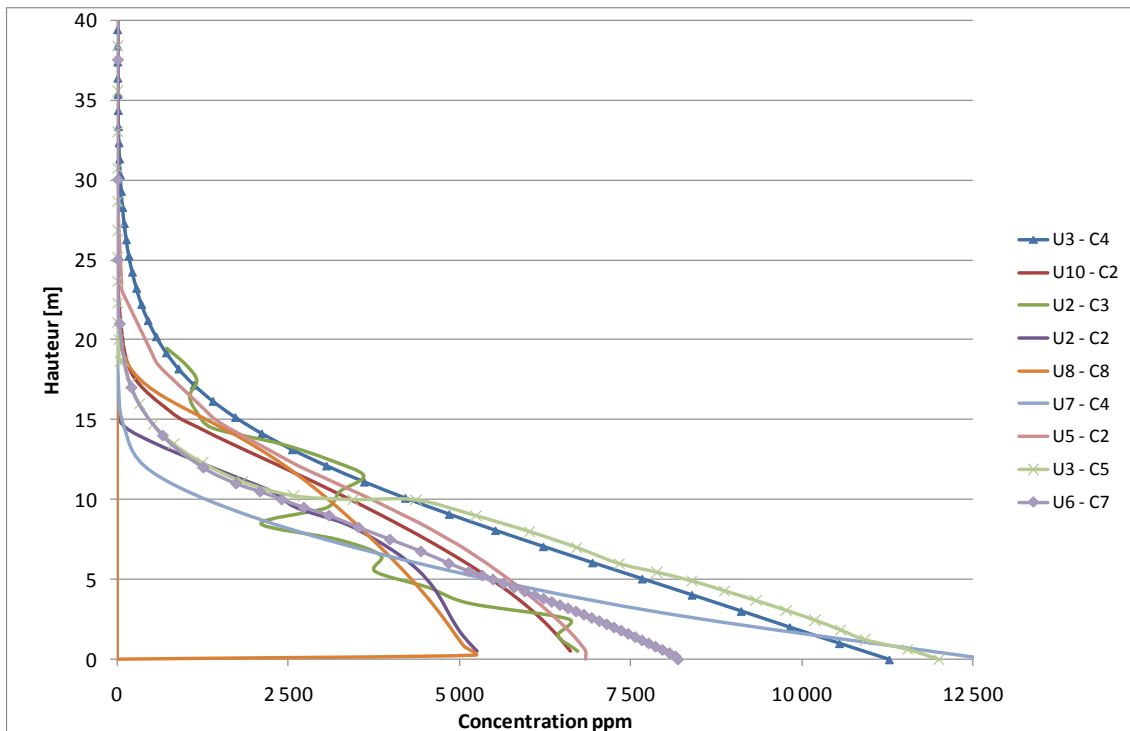
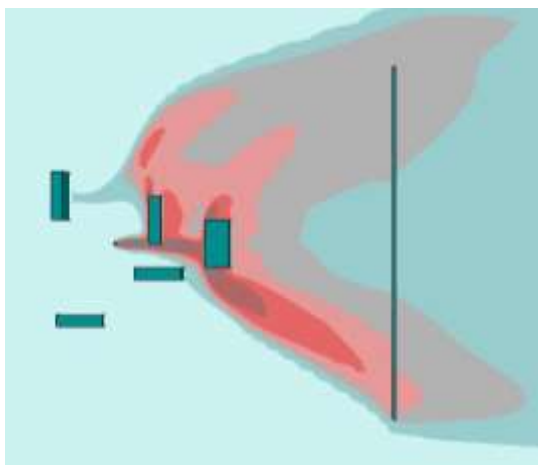


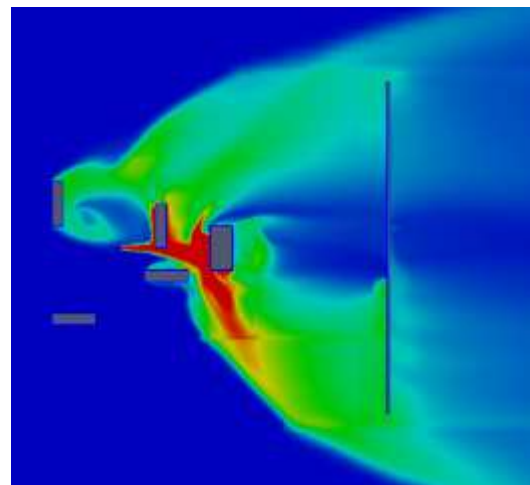
Figure 37 : Profil vertical de concentration 100 m en aval du point de rejet.

2. Champ de valeurs pour les différents cas de simulation

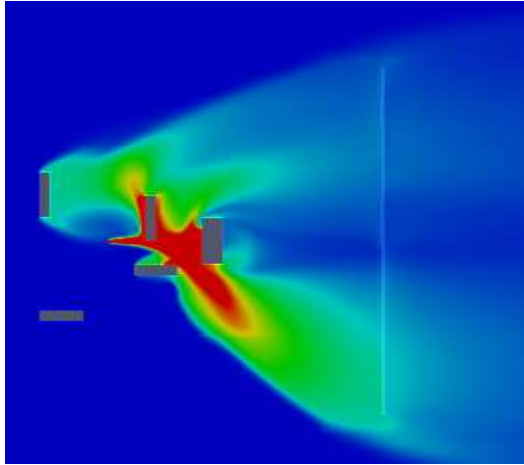
Afin de visualiser les écarts entre les différentes simulations, les valeurs de concentration ont été tracées dans un plan horizontal à 1,5 m du sol, Figure 38. Sur toutes ces figures, si les échelles diffèrent quelque peu, les bornes min et max de ces échelles sont fixées à 0 et 9,5%.



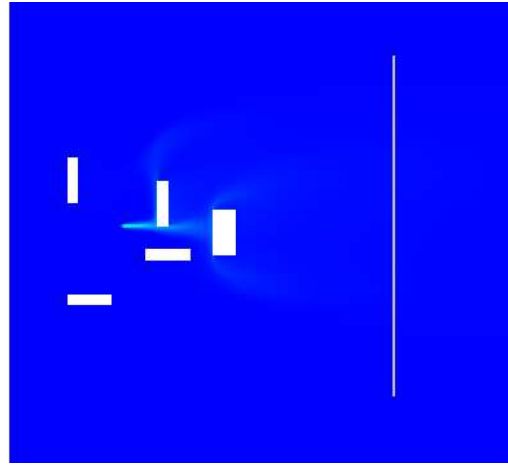
U1 – C1



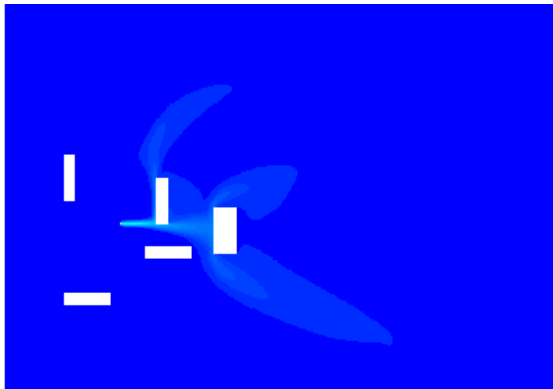
U2 – C2, Run 1



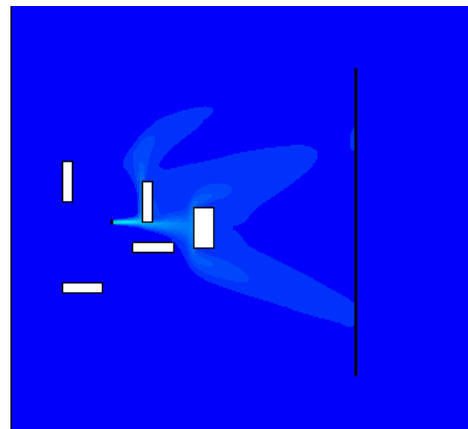
U2 – C2, Run 2



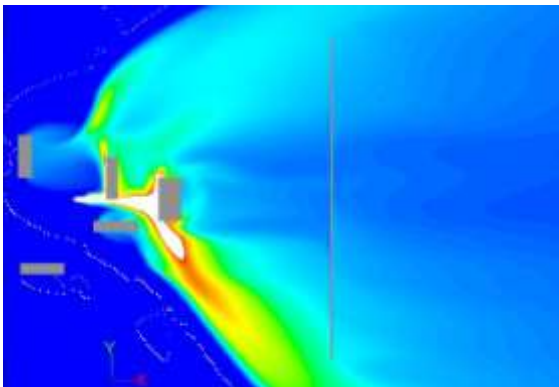
U3 – C4



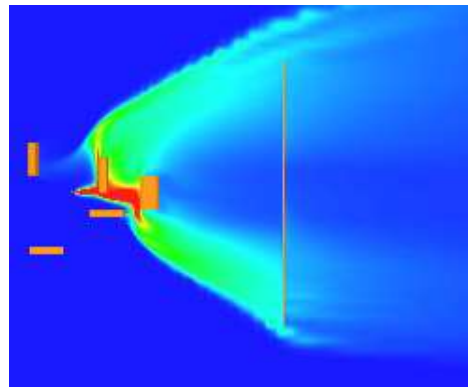
U3 – C5



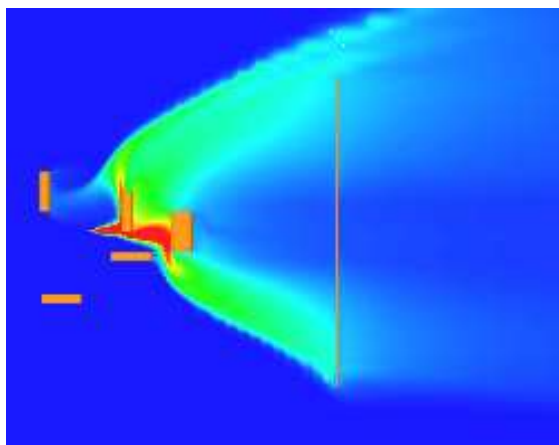
U3 – C6



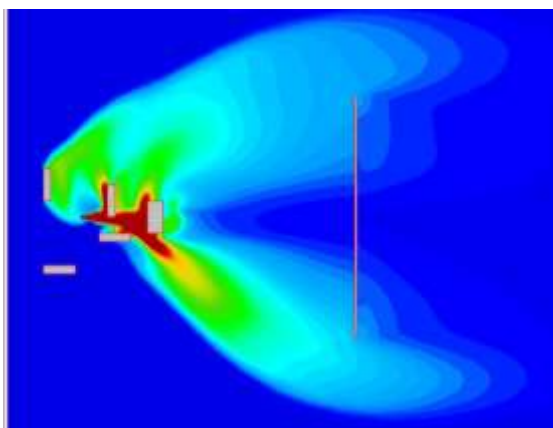
U4 – C5



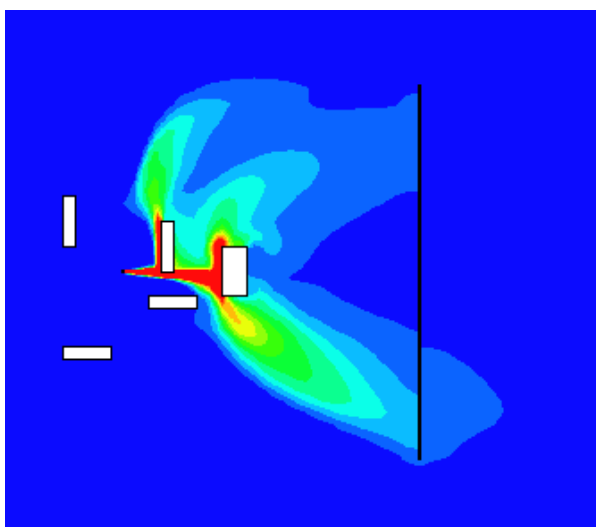
U5 – C2, Run 1



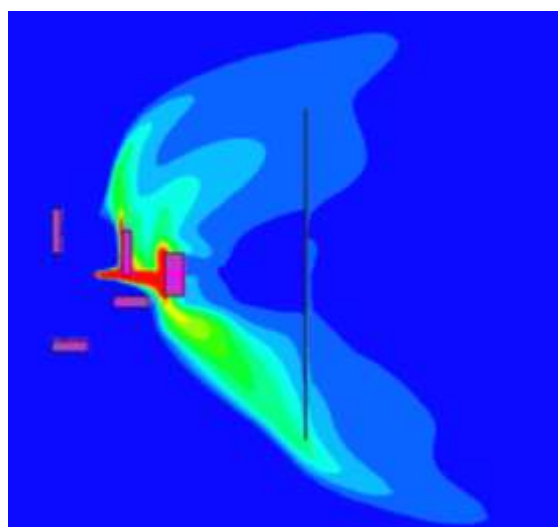
U5 – C2, Run 2



U6 – C7



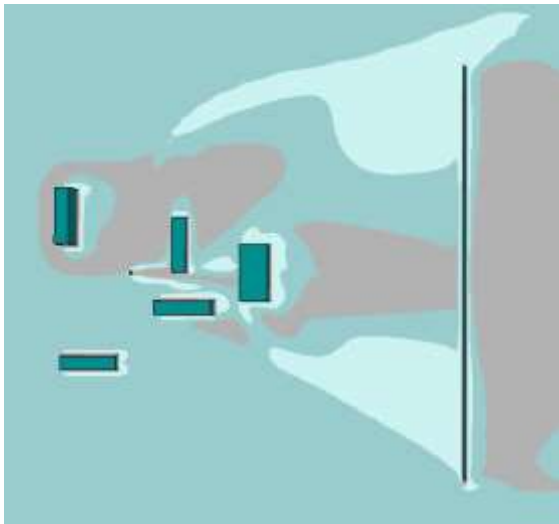
U9 – C8



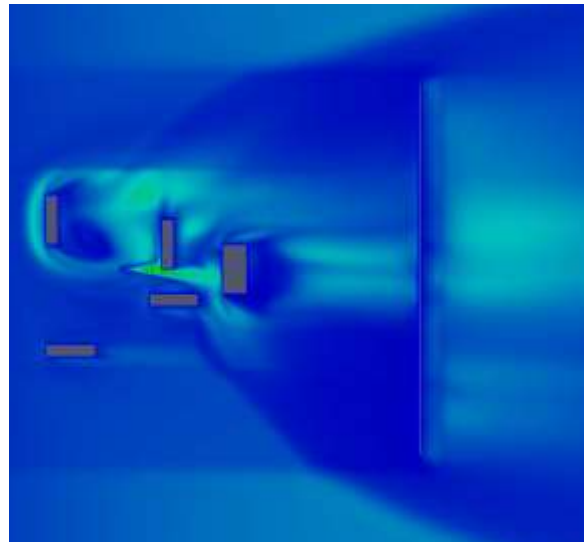
U8 – C8

Figure 38 : Champ de concentration dans un plan horizontal à 1,5 m du sol.

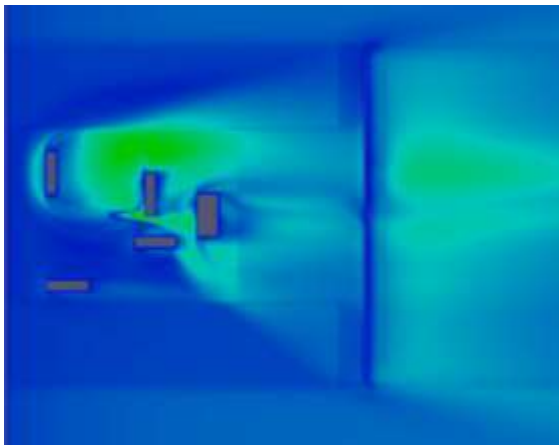
Ces résultats ont permis de faire ressortir des tendances avec des comparaisons d'intérêt plus particulier entre différents utilisateurs d'un même code. Afin d'évaluer, pour chacun de ces cas le niveau de diffusion turbulence, le champ de viscosité turbulente calculé est reproduit sur la Figure 40. Comme pour les concentrations, les valeurs min et max sont fixées respectivement à 0 et 1 pour toutes les représentations.



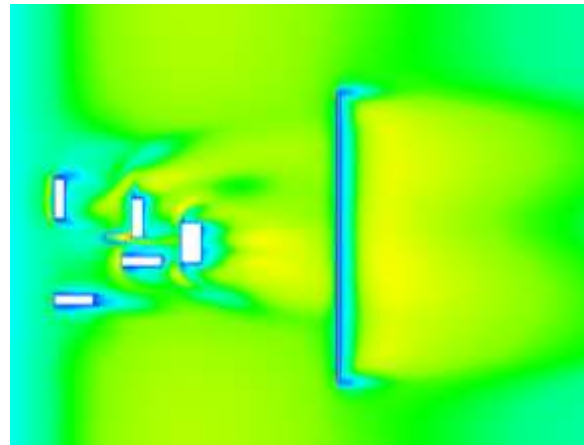
U1 – C1



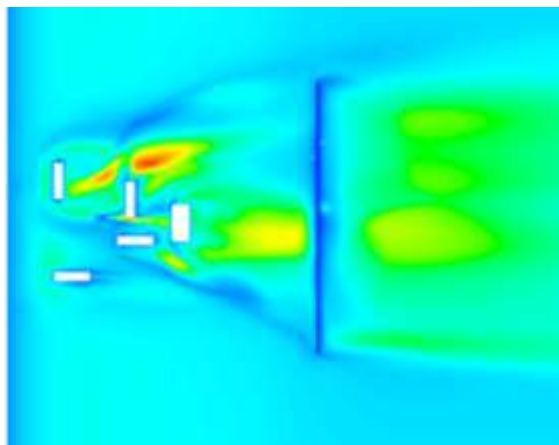
U2 – C2, Run 1



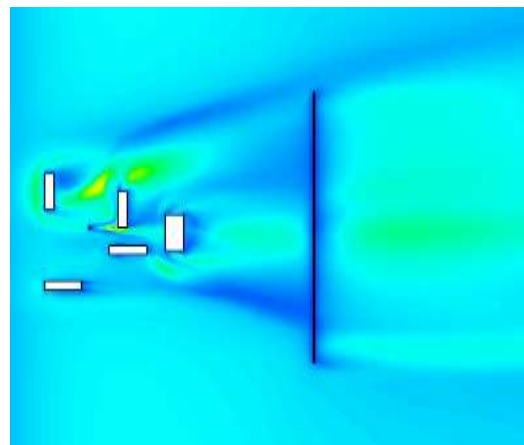
U2 – C2, Run 2



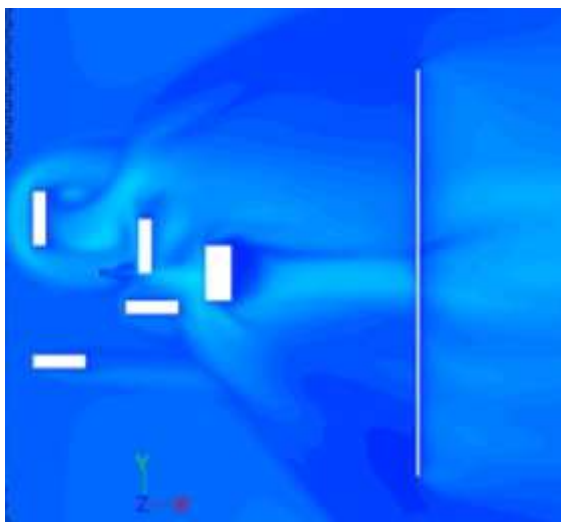
U3 – C4



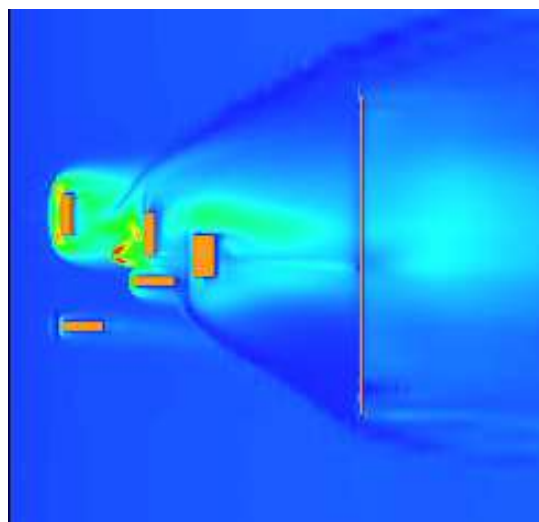
U3 – C5



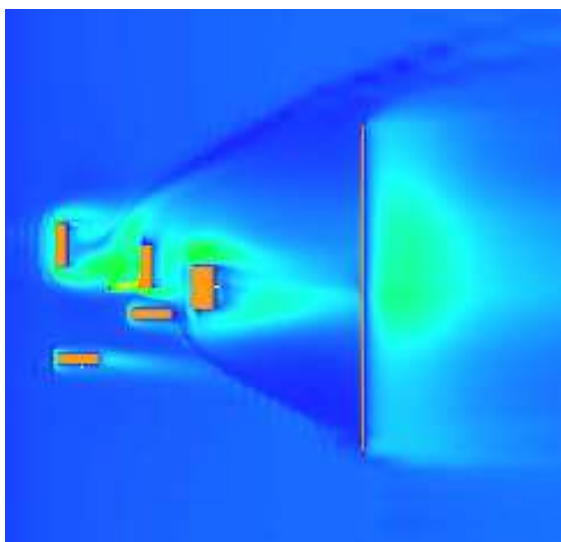
U3 – C6



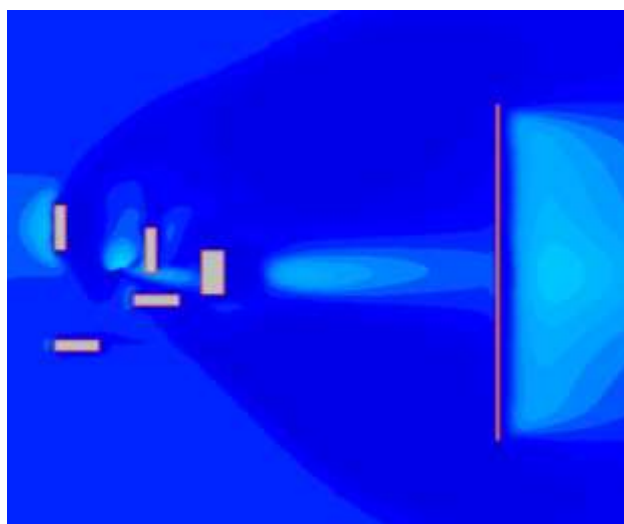
U4 – C5



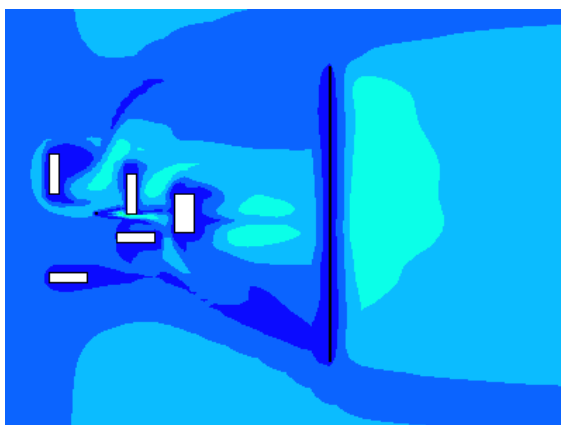
U5 – C2, Run 1



U5 – C2, Run 2



U6 – C7



U9 – C8

Figure 39 : Champ de viscosité turbulente dans un plan horizontal à 1,5 m du sol.

Ces résultats font clairement ressortir les divergences entre les différentes simulations en termes de distribution de viscosité turbulente. Ce paramètre pilotant le mélange entre air et propane, les champs de concentration en sont forcément dépendants. Afin de mieux comprendre l'origine de ces différences, des comparaisons plus fines ont été réalisées entre les différents utilisateurs d'un même code.

3. Recherche des paramètres clés : Comparaison détaillée entre code

Afin de mettre en lumière les paramètres de modélisations critiques, des comparaisons plus avancées ont été effectuées. En particulier, des comparaisons ont été réalisées entre plusieurs utilisateurs d'un même code.

Le code C2 a ainsi été utilisé par les utilisateurs U2, U5 et U10. Les résultats obtenus en première approche, Tableau 9, présentent des divergences importantes d'un utilisateur à l'autre.

Utilisateur	Distance à la LIE [m]	Masse inflammable [kg]
U2	225	3 850
U5	150	2 650
U10	157	2 200
Moyenne	177	2 900
Ecart type	28%	39%

Tableau 9 : Résultats obtenus au moyen du code C2 par les trois utilisateurs l'ayant utilisé.

A noter que les comparaisons concernent avant tous les modèles CFD, modèles les plus représentés dans les simulations réalisées. Les différences principales identifiées lors de cette inter-comparaison sont :

- Maillages plus ou moins différents,
- Différences dans les données d'entrée (Cmu, problème de clipping, etc.),
- Activation ou pas de la physique de l'atmosphère (production de turbulence),
- Injection surfacique/volumique du terme source,
- Parois des bâtiments rugueuses ou lisses,
- Options de calcul différentes (gestion des pas de temps, etc.).

Ces différents paramètres ont ainsi pu être testés afin d'évaluer leur importance relative. Il est apparu que, si la masse inflammable est un paramètre sensible aux options de simulation, le choix de modélisation pour la physique de l'atmosphère est un paramètre de tout premier ordre.

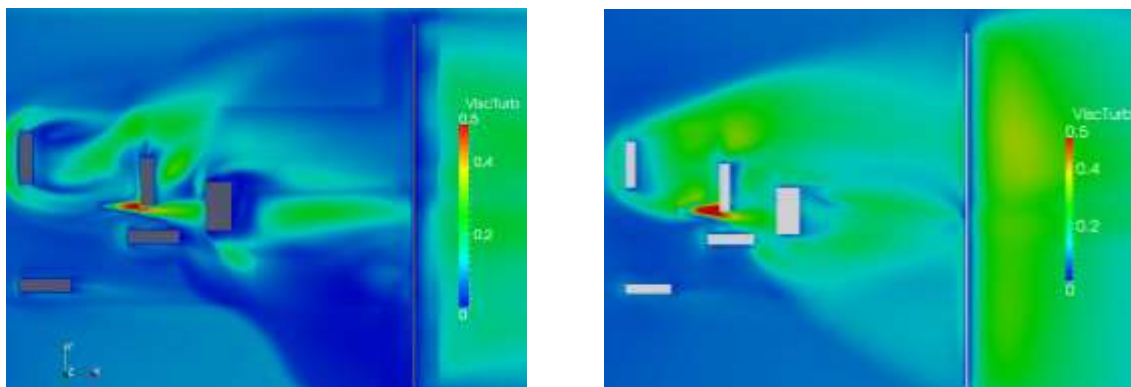


Figure 40 : Résultats obtenus sans (gauche) et avec (droite) modélisation de la physique de l'atmosphère, champ de viscosité turbulente.

Ces figures comparées montrent clairement un niveau de turbulence plus important si la physique de l'atmosphère n'est pas prise en compte. En effet, la prise en compte de ce phénomène se traduit par un terme dissipatif dans l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente.

Les champs de concentration obtenus avec ces deux approches font ressortir l'impact de cette hypothèse sur la distance à la LIE et, indirectement, sur la masse inflammable.

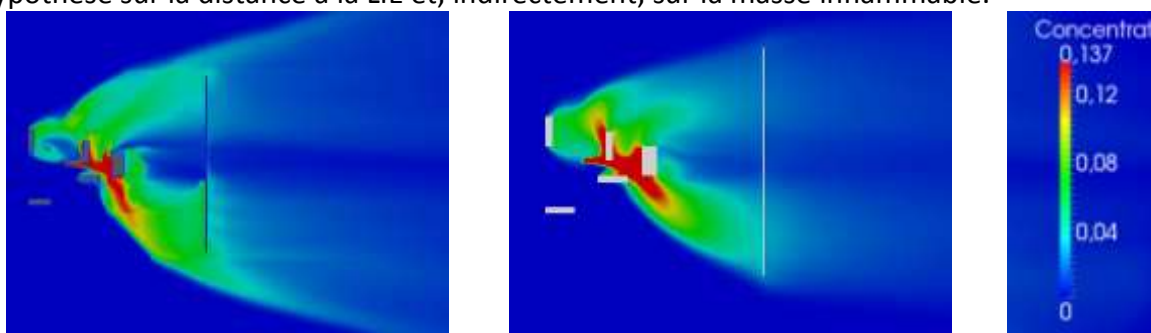


Figure 41 : Résultats obtenus sans (gauche) et avec (droite) modélisation de la physique de l'atmosphère, champ de concentration en C_3H_8 .

Ce travail a également été réalisé par les utilisateurs U3 et U7 au moyen du code C4. Les champs de concentration alors obtenus présentent des divergences très importantes, Figure 42.

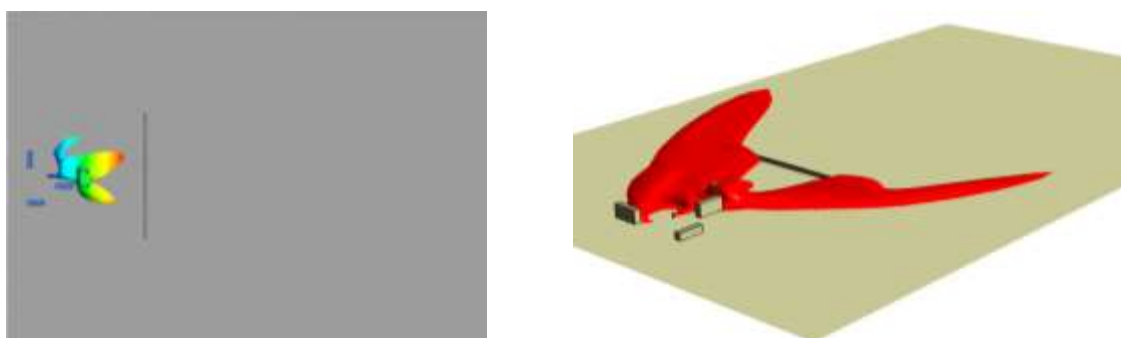


Figure 42 : Résultats obtenus sans (gauche) et avec (droite) modélisation de la physique de l'atmosphère, champ de concentration en C_3H_8 .

Au vu de ces résultats, l'impact de ce terme de physique atmosphérique paraît très important.

4. Impact de la distance en amont du premier obstacle

Parmi les différents paramètres fixés, la distance laissée libre en amont du premier obstacle, pour permettre l'établissement de l'écoulement, a été plus particulièrement discuté. La pertinence de la valeur de 5 fois la hauteur du premier bâtiment préconisée initialement a été étudiée au moyen de l'un des outils.

Afin de réaliser cette étude paramétrique, le maillage initial, avec 50 m de maillage fluide non structuré en amont du premier bâtiment, a été extrudé sur 50 m supplémentaire par des mailles structurées Figure 43.

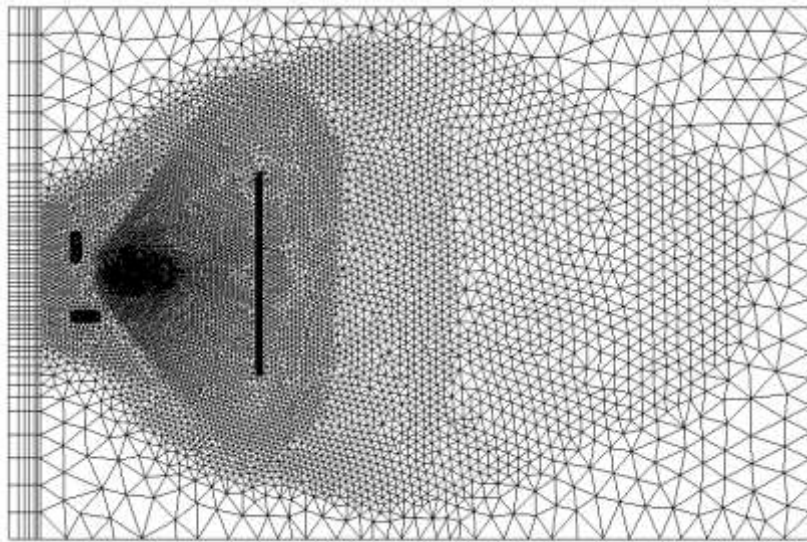


Figure 43 : Maillage extrudé jusqu'à 100 m en amont du premier obstacle.

Le champ de vitesse en amont du premier obstacle avec et sans extrusion est riche d'enseignements,

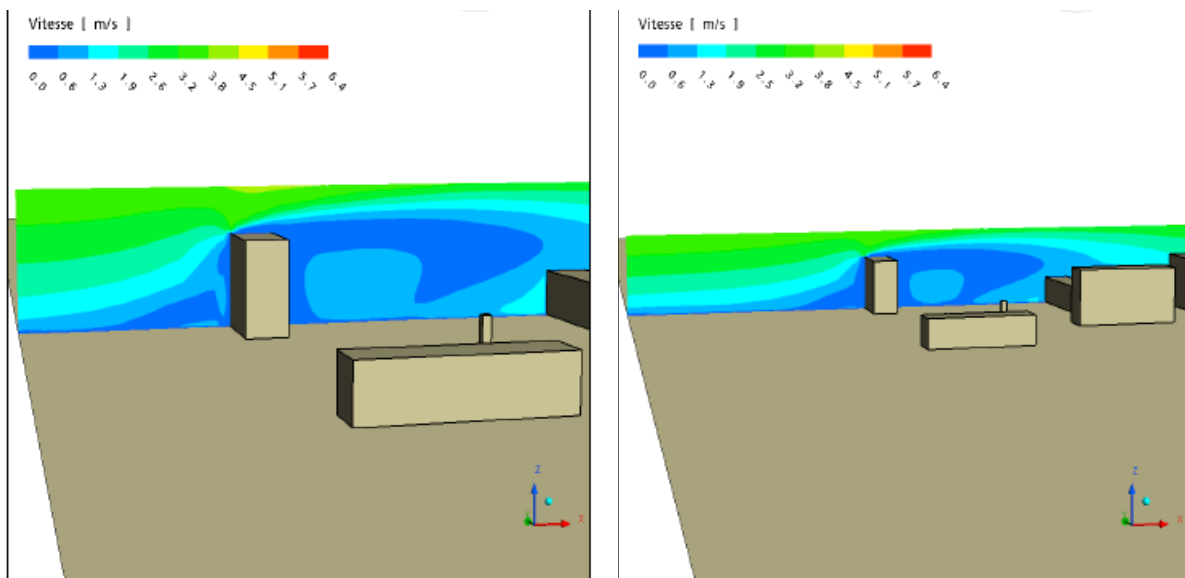


Figure 44 : champ de vitesse en amont du premier obstacle sans (gauche) et avec (droite) extrusion du maillage.

Cette image montre que le point de décollement de l'écoulement en amont du premier obstacle est extrêmement proche de l'entrée du domaine. Les modifications du champ de

vitesse induite par l'extrusion du maillage en amont du domaine est également visible sur le champ de vitesse dans un plan horizontal,

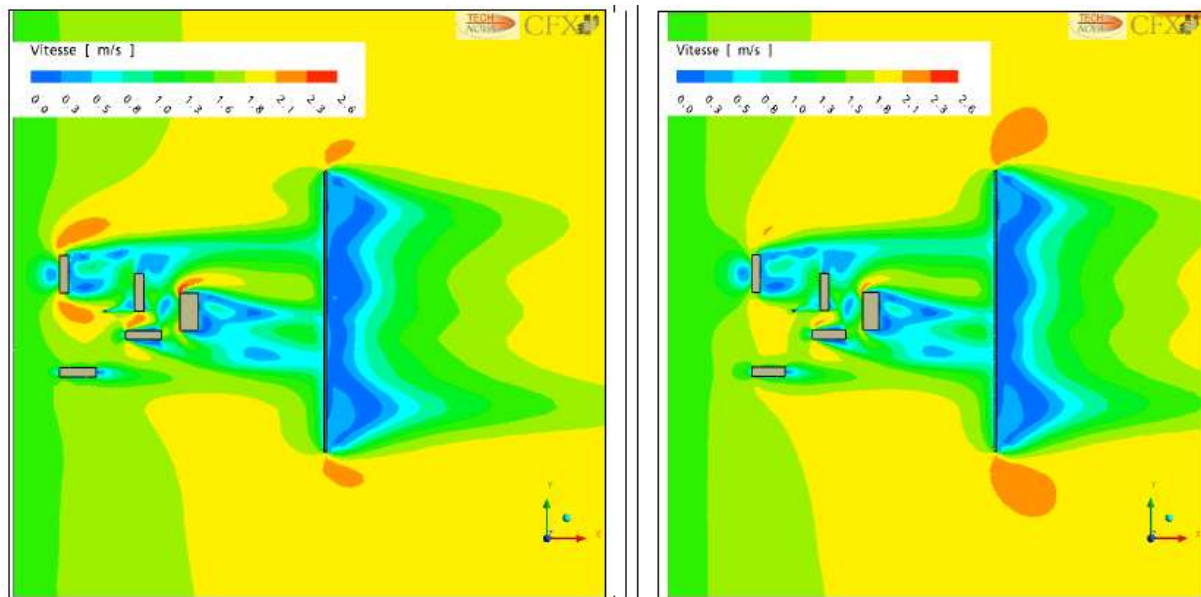


Figure 45 : Champ de vitesse dans un plan horizontal sans (gauche) et avec (droite) extrusion du maillage.

Ces résultats montrent un impact clair de l'extrusion sur le champ de vitesse calculé. Le champ de turbulence, traduit par la viscosité turbulente, est également impacté par cette extrusion, Figure 46.

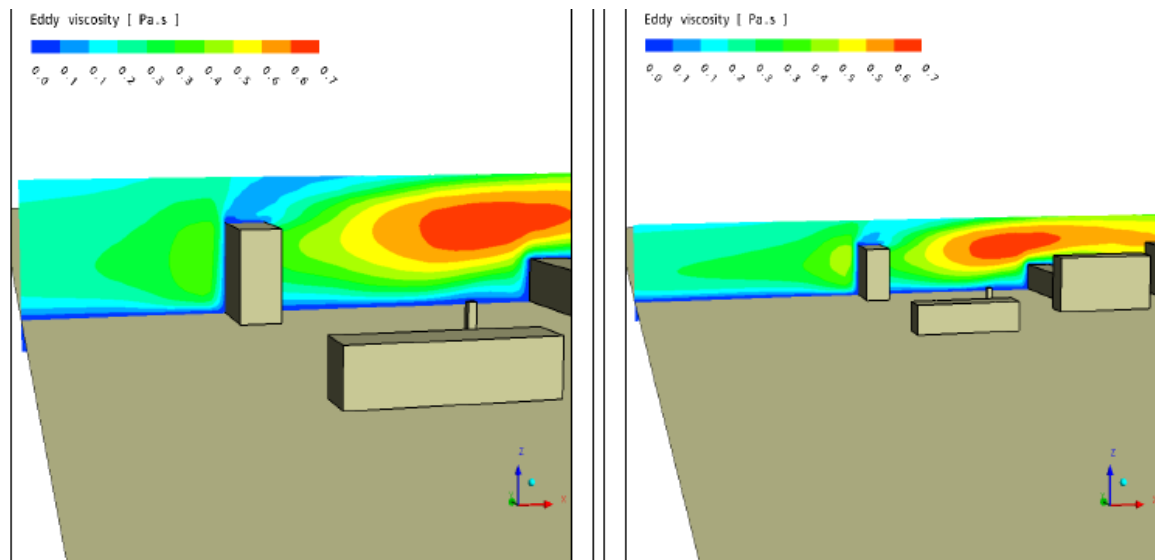


Figure 46 : Champ de viscosité turbulente dans un plan horizontal sans (gauche) et avec (droite) extrusion du maillage.

Au vu de ces résultats, la distance à mailler en amont du premier obstacle revêt une importance capitale. **Ce point devra faire l'objet de préconisation dans les bonnes pratiques.**

5. Influence de la représentation du profil de vent

L'absence de bijection entre les classes de Pasquill et les profils de vitesse et turbulence impose de faire des choix pour la construction des conditions limites en CFD. L'impact de ces choix a été évalué en comparant les résultats d'un même code avec des profils d'entrée différents.

Annexe 9

Synthèse détaillée du cas n°3

A. Description générale du troisième cas

L'objet de ce troisième cas de simulation est de tester, sur un cas expérimental, les pratiques qui résultent des conclusions du deuxième cas du GT Fr et des travaux du GT Sc.

La situation à étudier correspond à un cas expérimental issu de la campagne expérimentales "Kit Fox Field" datant de 1995 au Nevada, qui a consisté à émettre du gaz CO₂ durant des conditions atmosphériques neutres à stables (52 essais au total).

Lors de cette campagne, le gaz émis (CO₂) a été émis par une source émettrice de 1,5 m sur 1,5 m.

L'objet de ce troisième cas de simulation est, entre autres, d'étudier l'impact :

- des obstacles sur un rejet. Ces obstacles peuvent être pris en compte soit explicitement ou soit par l'intermédiaire d'une rugosité du sol.
- des profils météorologiques en entrée du domaine, qui seront élaborés à partir d'une analyse des mesures in situ ou/et à partir des méthodes de reconstruction des profils étudiés en Gt Sc.

La Figure 33 présente une vue d'ensemble du site expérimental, des obstacles et des points de mesures météorologiques.

Le site expérimental avait pour objectif de représenter un site industriel à l'échelle 1/10. Le site est un assemblage de 2 zones de rugosité distinctes :

- la plus grande rugosité se situe sur la zone appelée ERP (Equivalent Roughness Pattern) constituée d'une matrice d'obstacles de 39 m x 85 m. Les obstacles (hauteur : 2,4 m, largeur 2,4 m) sont espacés latéralement de 6,1 m et longitudinalement de 8,5. Les observations des profils de vent suggèrent une rugosité comprise entre 0,12 et 0,24 m (Hanna et al., 2001).
- la plus petite rugosité se situe sur la zone appelée URA (Uniform Roughness Pattern), constituée d'une matrice d'obstacles de 120 m x 314 m. Les obstacles (hauteur : 0,2 m, largeur 0,8 m) sont espacés latéralement de 2,4 m et longitudinalement de 2,4 m. Les observations des profils de vent suggèrent une rugosité comprise entre 0,01 et 0,02 m (Hanna et al., 2001).

Ce site expérimental est situé en plein désert, la rugosité de celui-ci est donnée à 0,0002 m par Hanna et al. (2001).

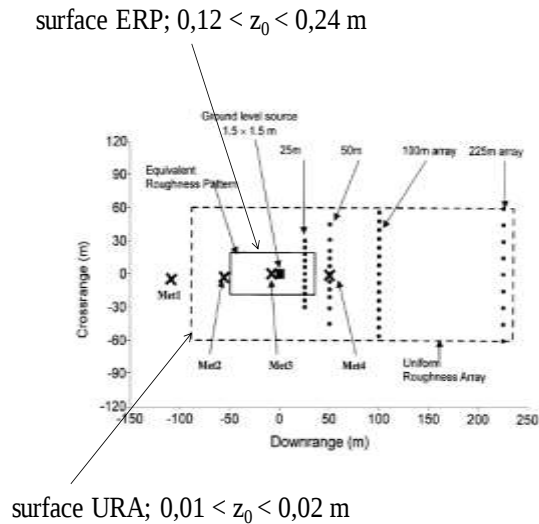


Figure 47 : Plan en vue de dessus de la configuration à étudier (d'après Hanna et al., 2001)

La Figure 48 montre une vue détaillée des zones ERP et URA. Elle montre également la direction du vent à prendre en compte.

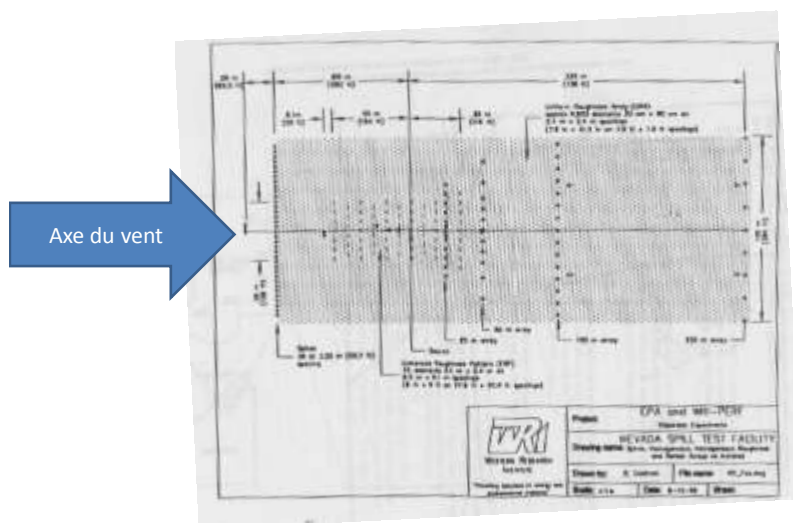


Figure 48 : Plan en vue de dessus du site à étudier et de la position des obstacles et des arcs de capteurs (d'après Hanna et al., 1999)

La Figure 49 présente une vue en oblique du site à étudier et de la position des obstacles

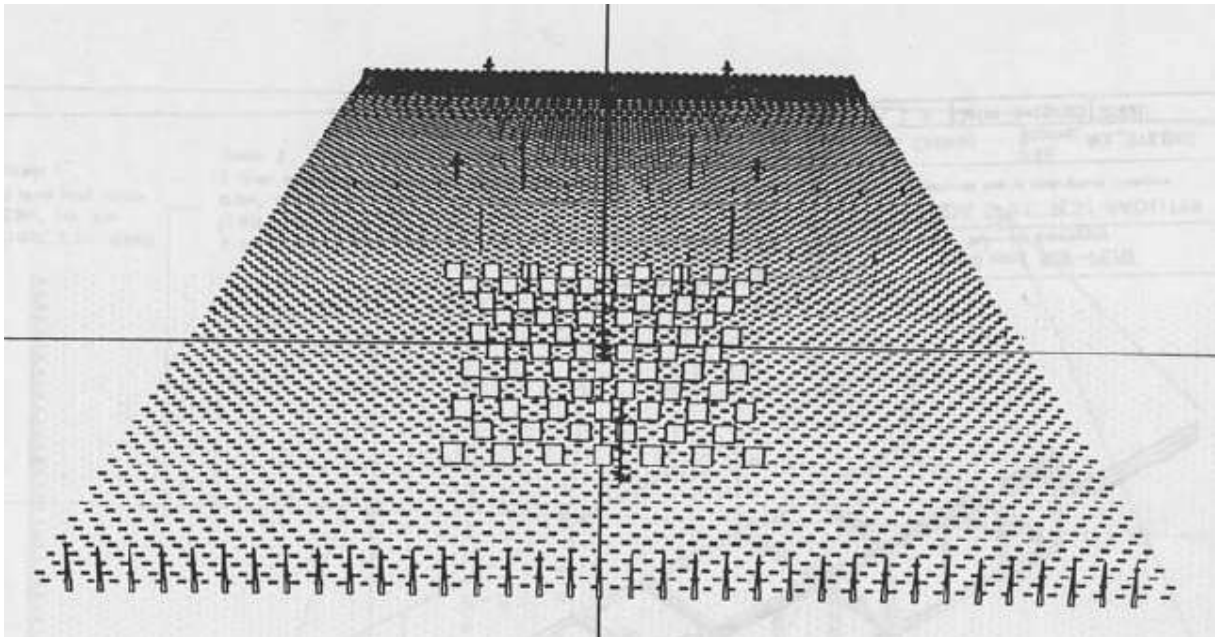


Figure 49 : vue en oblique du site à étudier et de la position des obstacles (d'après Hanna et al., 1999)

1. Présentation du cas test sélectionné pour Kit Fox field

L'essai 5-8 a été sélectionné, les données d'entrée sont détaillées dans le paragraphe ci-dessous.

Dans le cadre de cet exercice, on suppose que l'écoulement est aligné avec l'axe des abscisses.

A) Caractéristiques de la source émettrice :

Rejet de CO_2 gazeux, de masse molaire 44,01 g/mol. Le débit d'évaporation est de 3,77 kg/s pour une durée de rejet de 180 s. Ce débit sera distribué sur une surface émettrice de 1,5 m sur 1,5 m centrée en coordonnées (0 ; 0). La température du rejet est estimée à 296,76 K.

La température du sol est estimée à 301.77 K.

B) Données d'entrée météorologiques

- Mesures météorologiques "brutes" :

Les mesures météorologiques "brutes", au niveau du mat MET1 (situé en amont du domaine d'étude) ou issues de la base MDA, sont synthétisées ci-après :

Profil de vent :

- 2,5 m/s à 1,22 m du sol

- 3,5 m/s à 2,44 m du sol
- 4,1 m/s à 4,88 m du sol

Profil de température :

- 304,39 K à 0,6 m
- 304,55 K à 2,1 m

Profil de turbulence (Sig – U, Sig – V et Sig – W) :

- 0,31 – 0,2 – 0,13 m/s à 1,22 m du sol
- 0,32 – 0,27 - Inconnu m/s à 2,44 m du sol
- 0,3, - 0,22 - Inconnu m/s à 4,88 m du sol

Longueur de Monin-Obukhov : 8 m

Température du sol : 301,77 K

1) Les mesures météorologiques pré analysées ont permis de proposer le diagnostic suivant :

$Z_0 = 0,0002 \text{ m}$

$L_{MO} = 8 \text{ m}$

$u_0^* = 0.125 \text{ m/s}$

$h_i = 40 \text{ m}$

Hauteur (m)	Vitesse (m/s)	K	EPS	Température (°C)
0,1	1,02	9,33E-002	6,28E-002	31,19
1	2,33	8,97E-002	8,36E-003	31,28
2	2,98	8,57E-002	5,26E-003	31,39
3	3,45	8,18E-002	4,17E-003	31,50
4	3,82	7,80E-002	3,58E-003	31,60
5	4,14	7,42E-002	3,20E-003	31,71
6	4,41	7,05E-002	2,93E-003	31,82
7	4,66	6,70E-002	2,71E-003	31,92
8	4,89	6,34E-002	2,52E-003	32,03
9	5,10	6,00E-002	2,37E-003	32,14

DRA-15-148997-06852A

10	5,30	5,67E-002	2,23E-003	32,24
15	6,12	4,12E-002	1,68E-003	32,78
20	6,78	2,79E-002	1,26E-003	33,31
25	7,35	1,68E-002	9,06E-004	33,84
30	7,84	8,29E-003	6,08E-004	34,38
35	8,28	2,46E-003	3,57E-004	34,91

2) Profils météorologiques issus des formulations du GT Sc en entrée de domaine :

Les profils de vent, de k , ε et θ sont fixés en entrée de domaine par les formulations explicitées ci-dessous.

Profil de vitesse

Le profil de vitesse est déterminé suivant l'approche de Gryning (2007) :

$$\frac{u(z)}{u_{*0}} = \frac{1}{k} \left(\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) + \frac{bz}{L_{MO}} \left(1 - \frac{z}{2z_i} \right) + \frac{z}{L_{MBL}} - \frac{z}{z_i} \left(\frac{z}{2L_{MBL}} \right) \right)$$

Avec L_{MBL} qui s'exprime :

$$\frac{z_i}{L_{MBL}} = 2 \left[\left[\left(\ln \left(\frac{u_0^*}{f \cdot z_0} \right) - B \right)^2 + A^2 \right]^{1/2} - \ln \left(\frac{z_i}{z_0} \right) - \frac{b \cdot z_i}{2L} \right]$$

- z_i étant la hauteur de couche de mélange,
- $A = 10$, $B = -10$ [91]

La hauteur de couche de mélange est déterminée par :

$$z_i = 0,4 \sqrt{\frac{u_0^* L_{MO}}{f}}$$

avec $f = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$.

Au-dessus de la couche limite atmosphérique ($z > z_i$) la vitesse $u(z)$ est fixée à la valeur atteinte à z_i .

Profil de turbulence

Profil de k :

DRA-15-148997-06852A

$$k(z) = \frac{\max(u_0^*(1 - z/z_i); 0,1.u_0^*)^2}{\sqrt{C_\mu}} \sqrt{\frac{1 + 4z/L_{MO}}{1 + 5z/L_{MO}}}$$

Profil de ε :

$$\varepsilon(z) = \frac{\max(u_0^*(1 - z/z_i); 0,1.u_0^*)^3}{\kappa} \left(\frac{1}{z} + \frac{4}{L_{MO}} \right)$$

Profil de température

Le profil de température en entrée de domaine est calculé par la relation :

$$\begin{cases} \theta(z) = \theta_{sol} + \frac{\theta_*}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{z}{z_T}\right) - \Psi_H(\zeta) \right] & \text{si } z < h \\ \theta(z) = \theta_{sol} + \frac{\theta_*}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{h}{z_T}\right) - \Psi_H(\mu) \right] + \gamma_{ext}(z - h) & \text{si } z > h \end{cases}$$

$h = z_i$ hauteur couche de mélange; $\mu = h/L_{MO}$

θ_{sol} : température potentielle au niveau du sol.

$\gamma_{ext} = + 0.0033 \text{ K.m}^{-1}$

Avec les formules suivantes pour les fonctions universelles :

$$\Psi_M(\zeta) = \Psi_H(\zeta) = -5.\zeta, \text{ pour } 0 < \zeta < 1$$

Avec θ_* déterminée par :

$$\theta_* = - \frac{H_0}{\rho C_p u_0^*}$$

et H_0 déterminée par :

$$L_{MO} = - \frac{\rho C_p \theta_*^3}{k.g.H_0}$$

Avec $\theta = \theta_{sol}$

Applications numériques :

A partir des données d'entrée expérimentales et minimales suivantes :

- $Z_0 = 0,0002 \text{ m}$
- $L_{MO} = 8 \text{ m}$
- $U_0 = 4,1 \text{ m/s}$ à $Z_{ref} = 4,88 \text{ m}$
- Température du sol : $301,77 \text{ K}$

les valeurs numériques des profils sont données ci-dessous :

z	Vitesse (m/s)	K	EPS	Température potentielle (K)
0,10	1,888E+00	4,747E-02	4,501E-02	3,028E+02
1,00	2,786E+00	4,379E-02	5,997E-03	3,038E+02
2,00	3,220E+00	4,075E-02	3,692E-03	3,042E+02
3,00	3,561E+00	3,817E-02	2,835E-03	3,046E+02
4,00	3,860E+00	3,583E-02	2,346E-03	3,049E+02
5,00	4,135E+00	3,365E-02	2,008E-03	3,052E+02
6,00	4,391E+00	3,159E-02	1,749E-03	3,055E+02
7,00	4,633E+00	2,963E-02	1,539E-03	3,058E+02
8,00	4,862E+00	2,776E-02	1,361E-03	3,060E+02
9,00	5,081E+00	2,595E-02	1,207E-03	3,063E+02
10,00	5,290E+00	2,423E-02	1,071E-03	3,065E+02
11,00	5,490E+00	2,256E-02	9,501E-04	3,068E+02
12,00	5,682E+00	2,097E-02	8,416E-04	3,070E+02
13,00	5,865E+00	1,944E-02	7,439E-04	3,073E+02
14,00	6,041E+00	1,796E-02	6,556E-04	3,075E+02
15,00	6,210E+00	1,655E-02	5,757E-04	3,077E+02
16,00	6,371E+00	1,520E-02	5,035E-04	3,080E+02
17,00	6,524E+00	1,391E-02	4,383E-04	3,082E+02
18,00	6,671E+00	1,268E-02	3,794E-04	3,085E+02
19,00	6,811E+00	1,151E-02	3,265E-04	3,087E+02
20,00	6,944E+00	1,039E-02	2,790E-04	3,089E+02
21,00	7,071E+00	9,332E-03	2,366E-04	3,092E+02
22,00	7,190E+00	8,331E-03	1,989E-04	3,094E+02
23,00	7,304E+00	7,387E-03	1,656E-04	3,096E+02
24,00	7,410E+00	6,501E-03	1,363E-04	3,098E+02
25,00	7,510E+00	5,672E-03	1,108E-04	3,101E+02
26,00	7,604E+00	4,899E-03	8,871E-05	3,103E+02
27,00	7,691E+00	4,184E-03	6,984E-05	3,105E+02
28,00	7,772E+00	3,525E-03	5,389E-05	3,108E+02
29,00	7,846E+00	2,922E-03	4,061E-05	3,110E+02
30,00	7,914E+00	2,376E-03	2,972E-05	3,112E+02
31,00	7,976E+00	1,887E-03	2,100E-05	3,114E+02
32,00	8,032E+00	1,454E-03	1,418E-05	3,117E+02

33,00	8,081E+00	1,078E-03	9,034E-06	3,119E+02
34,00	8,124E+00	7,576E-04	5,317E-06	3,121E+02
35,00	8,161E+00	4,938E-04	2,794E-06	3,123E+02
36,00	8,191E+00	4,316E-04	2,280E-06	3,126E+02
37,00	8,216E+00	4,315E-04	2,277E-06	3,128E+02
38,00	8,234E+00	4,315E-04	2,274E-06	3,130E+02
39,00	8,246E+00	4,314E-04	2,271E-06	3,132E+02
40,00	8,246E+00	4,314E-04	2,268E-06	3,133E+02
41,00	8,246E+00	4,313E-04	2,265E-06	3,133E+02
42,00	8,246E+00	4,313E-04	2,263E-06	3,133E+02
43,00	8,246E+00	4,312E-04	2,260E-06	3,133E+02
44,00	8,246E+00	4,312E-04	2,258E-06	3,133E+02
45,00	8,246E+00	4,312E-04	2,256E-06	3,133E+02
46,00	8,246E+00	4,311E-04	2,254E-06	3,133E+02
47,00	8,246E+00	4,311E-04	2,252E-06	3,133E+02
48,00	8,246E+00	4,311E-04	2,250E-06	3,133E+02
49,00	8,246E+00	4,310E-04	2,248E-06	3,133E+02
50,00	8,246E+00	4,310E-04	2,246E-06	3,133E+02
51,00	8,246E+00	4,310E-04	2,245E-06	3,133E+02
52,00	8,246E+00	4,309E-04	2,243E-06	3,133E+02
53,00	8,246E+00	4,309E-04	2,242E-06	3,133E+02
54,00	8,246E+00	4,309E-04	2,240E-06	3,133E+02
55,00	8,246E+00	4,308E-04	2,239E-06	3,133E+02
56,00	8,246E+00	4,308E-04	2,237E-06	3,132E+02
57,00	8,246E+00	4,308E-04	2,236E-06	3,132E+02
58,00	8,246E+00	4,308E-04	2,234E-06	3,132E+02
59,00	8,246E+00	4,307E-04	2,233E-06	3,132E+02
60,00	8,246E+00	4,307E-04	2,232E-06	3,132E+02
61,00	8,246E+00	4,307E-04	2,231E-06	3,132E+02
62,00	8,246E+00	4,307E-04	2,230E-06	3,132E+02
63,00	8,246E+00	4,307E-04	2,229E-06	3,132E+02
64,00	8,246E+00	4,306E-04	2,228E-06	3,132E+02
65,00	8,246E+00	4,306E-04	2,226E-06	3,132E+02
66,00	8,246E+00	4,306E-04	2,225E-06	3,132E+02
67,00	8,246E+00	4,306E-04	2,224E-06	3,132E+02
68,00	8,246E+00	4,306E-04	2,224E-06	3,132E+02
69,00	8,246E+00	4,305E-04	2,223E-06	3,132E+02
70,00	8,246E+00	4,305E-04	2,222E-06	3,132E+02
71,00	8,246E+00	4,305E-04	2,221E-06	3,132E+02
72,00	8,246E+00	4,305E-04	2,220E-06	3,132E+02
73,00	8,246E+00	4,305E-04	2,219E-06	3,132E+02
74,00	8,246E+00	4,305E-04	2,218E-06	3,132E+02
75,00	8,246E+00	4,304E-04	2,218E-06	3,132E+02
76,00	8,246E+00	4,304E-04	2,217E-06	3,132E+02
77,00	8,246E+00	4,304E-04	2,216E-06	3,132E+02
78,00	8,246E+00	4,304E-04	2,215E-06	3,132E+02
79,00	8,246E+00	4,304E-04	2,215E-06	3,132E+02

80,00	8,246E+00	4,304E-04	2,214E-06	3,132E+02
81,00	8,246E+00	4,304E-04	2,213E-06	3,132E+02
82,00	8,246E+00	4,304E-04	2,213E-06	3,132E+02
83,00	8,246E+00	4,303E-04	2,212E-06	3,132E+02
84,00	8,246E+00	4,303E-04	2,211E-06	3,132E+02
85,00	8,246E+00	4,303E-04	2,211E-06	3,132E+02
86,00	8,246E+00	4,303E-04	2,210E-06	3,132E+02
87,00	8,246E+00	4,303E-04	2,210E-06	3,132E+02
88,00	8,246E+00	4,303E-04	2,209E-06	3,132E+02
89,00	8,246E+00	4,303E-04	2,209E-06	3,132E+02
90,00	8,246E+00	4,303E-04	2,208E-06	3,132E+02
91,00	8,246E+00	4,303E-04	2,207E-06	3,132E+02
92,00	8,246E+00	4,302E-04	2,207E-06	3,132E+02
93,00	8,246E+00	4,302E-04	2,206E-06	3,132E+02
94,00	8,246E+00	4,302E-04	2,206E-06	3,132E+02
95,00	8,246E+00	4,302E-04	2,205E-06	3,132E+02
96,00	8,246E+00	4,302E-04	2,205E-06	3,132E+02
97,00	8,246E+00	4,302E-04	2,205E-06	3,132E+02
98,00	8,246E+00	4,302E-04	2,204E-06	3,132E+02
99,00	8,246E+00	4,302E-04	2,204E-06	3,132E+02
100,00	8,246E+00	4,302E-04	2,203E-06	3,131E+02

Les valeurs numériques ci-dessus sont contenues dans la :

- la feuille Excel "Formulation_GT_SC_V1" ci-jointe à cette note,
- et issues des formulations et courbes nommées "formulation Similitude Gryning" dans la feuille Excel " cas_3-KFF-5-8_V1.xls" ci-jointe à cette note.

C) Les grandeurs à fournir en sortie de simulation sont :

- Une description du maillage, des conditions aux limites considérées (y compris les profils météorologiques et de la manière dont ils ont été produits).
- une évolution au cours du temps de la concentration moyenne sur 20 secondes (moyenne « glissante » sur les 10 secondes précédentes et les 10 secondes suivantes l'instant t) à 25, 50, 100 et 225 mètres sous le vent (Y=0) du point de rejet et à une hauteur de 50 cm.
- des profils verticaux (Z allant de 0 à 20 m; Y=0) de concentration, vent, turbulence (K, EPS, viscosité turbulente), température potentielle en X = 25, 50, 100 et 225 m toutes les minutes à partir du début du rejet

- des profils horizontaux (Y allant de -50 à 50 m) de concentration, vent, turbulence (K, EPS, viscosité turbulente), température potentielle à Z = 1 m et X = 25, 50, 100 et 225 m
- profil horizontal de concentration (Y=0) à t = 180 s après le début du rejet.

B. RESULTATS OBTENUS

Une comparaison de l'évolution des concentrations modélisées le long de l'axe de rejet et des mesures expérimentales est présentée sur la Figure 50. Les résultats rassemblent 9 utilisateurs (nommés U1, U2,...) pour un panel de 8 codes (nommés C1, C2,...). Les modélisations ont été effectuées en tenant compte explicitement des obstacles et à titre de comparaisons des modélisations ont été également effectuées (utilisateur U2) en prenant en compte les obstacles par une rugosité implicite. La plupart des utilisateurs ont testé à la fois des profils d'entrées issus du profil météorologique diagnostiqué à partir des mesures de terrain (nommé diag) et des profils issus du profil prescrit par le GT (nommé Sc). Les mesures expérimentales sont représentées par la courbe noire.

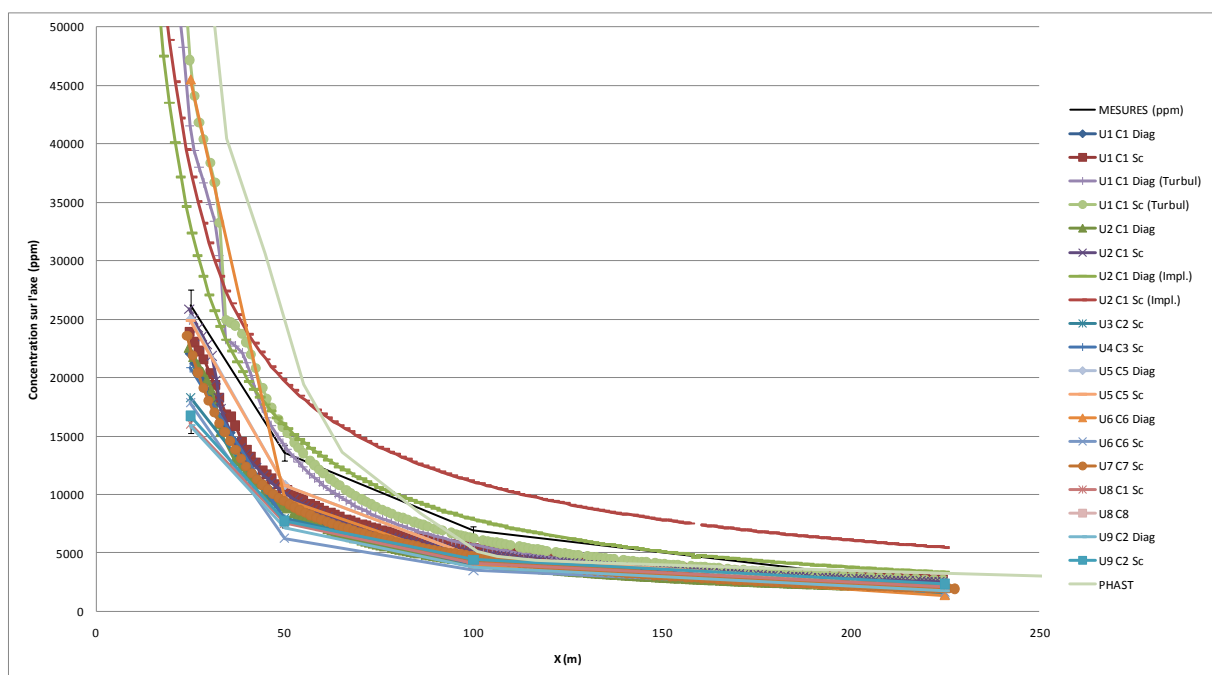


Figure 50 : évolution le long de l'axe du rejet des concentrations obtenues par modélisation (9 utilisateurs : U1, U2,... ; 8 codes : C1, C2 ; impl. : rugosité implicite, autre modèle de turbulence : turb) et des concentrations mesurées expérimentalement

Pour un utilisateur et un code donnés, le profil prescrit par le GT est généralement plus conservatoire par rapport au profil météorologique diagnostiqué directement à partir des mesures.

Les résultats statistiques sont présentés sur le Tableau 10 avec la moyenne des concentrations modélisées $E(x)$ et l'écart type relatif des résultats des modélisations 3D ($\sigma / E(x)$ en %). La

concentration moyenne modélisée est légèrement sous estimée dans le champ proche (< 100 m) mais la comparaison est dans un ordre de grandeur satisfaisant au regard des critères généralement choisis, tel le rapport 2 entre la mesure et la modélisation.

L'homogénéité relative des résultats de modélisations est plus faible dans le champ lointain du fait d'une concentration moyenne qui diminue avec la distance.

Distance (m)	Mesures (ppm)	Moyenne des concentrations modélisées E(x)	$\sigma / E(x)$ en %
25	26187	25 756	38%
50	13569	9 727	24%
100	6896	4 929	29%
225	2212	2 591	51%

Tableau 10 : statistiques des concentrations modélisées.

Les profils de diffusivités turbulentes obtenues par modélisations sont présentés sur la Figure 51 où sont exposés également les profils d'entrée du domaine. Du fait de la présence d'obstacles qui génèrent de la turbulence, les profils de diffusivités obtenus par la modélisation montrent des valeurs de diffusivités turbulentes plus élevées que ceux imposés en entrée du domaine.

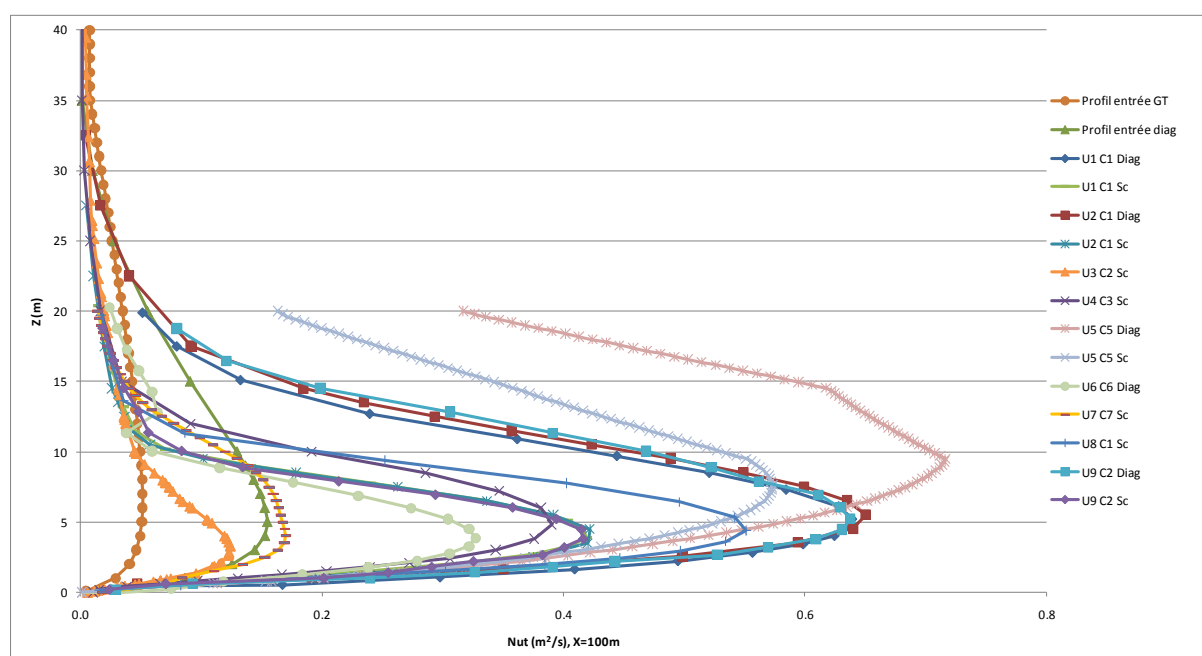


Figure 51 : Profils de diffusivité turbulente obtenus à 100 m après le point de rejet

La comparaison entre les profils montre une certaine homogénéité des valeurs de diffusivité notamment près du sol.

Annexe 10

Guide de constitution du dossier de validation à destination des utilisateurs et concepteurs d'outils

Cette annexe décrit la stratégie de validation qui doit être présentée pour l'outil ou les outils utilisés. Pour rappel, cette validation doit être réalisée par **l'utilisateur** de l'outil, non par le développeur. La validation d'un outil devra comporter deux étapes :

- Une étape de validation des modèles numériques et physiques sur des cas fondamentaux de référence,
- Une étape de validation du modèle sur des cas de dispersion atmosphérique à grande échelle.

La validation sur des cas de référence à grande échelle étant, lorsqu'elle est possible, complexe notamment en raison des incertitudes expérimentales inhérentes à de telles configurations, la partie validation sur des cas de référence analytiques ou parfaitement instrumentés est indispensable. Des cas sont proposés dans les paragraphes suivants. Pour les cas à grande échelle, les différentes campagnes disponibles sont reliées aux différentes configurations de rejets industriels rencontrés. La validation d'un outil de calcul est une démarche en plusieurs étapes qui peut être, par exemple, illustré par le schéma repris sur la Figure 52.

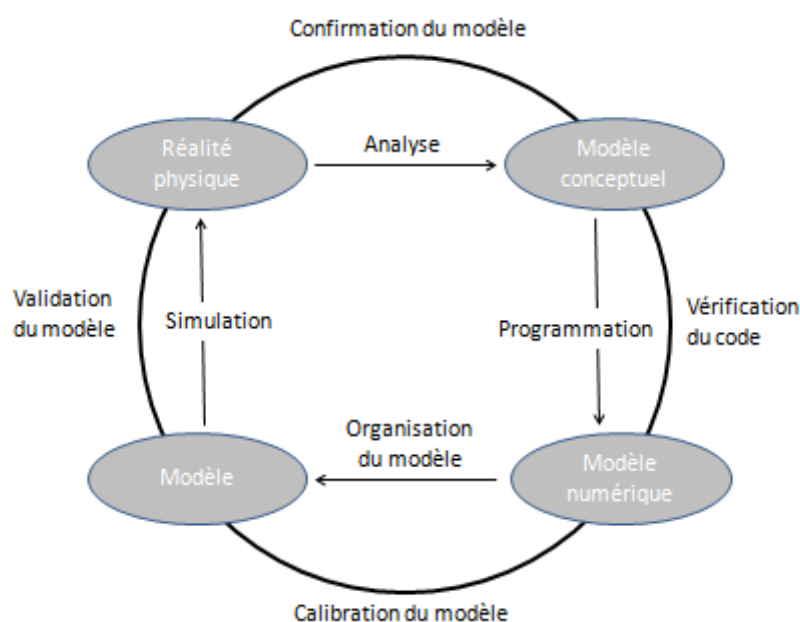


Figure 52 : Schéma illustrant les étapes de validation d'un outil, inspiré de[95].

Les 4 étapes de la validation sont donc :

- la confirmation du modèle physique utilisé en rapport avec la physique des phénomènes modélisés,
- la vérification du code lors des phases de développement par différents tests spécifiques,
- une phase de calibration visant à s'assurer que l'outil ne nécessite pas de calage spécifique pour chacune des configurations modélisées,
- une phase de validation expérimentale.

Si l'ensemble de ces étapes doivent être réalisées dans le cadre du développement d'un outil, certaines ne sont pas accessibles de l'utilisateur d'un outil qui, typiquement ne dispose pas des sources informatiques permettant de réaliser l'ensemble de ces tests. Ainsi, une méthode d'évaluation du logiciel est proposée ci-après. Elle est destinée aux utilisateurs. L'objectif de cette méthode est d'évaluer au travers de quelques configurations la fiabilité de l'outil. Cette validation s'articule en deux étapes :

- la modélisation de cas fondamentaux de référence,
- la modélisation numérique de campagnes expérimentales à grandes échelles.

Pour tous les cas, après la validation numérique essentielle lors du développement de l'outil, le niveau de validation devra être adapté à la modélisation cible, la matrice précisant les configurations de validation en fonction des cas d'étude est présentée ci-après. A noter que cette matrice de validation n'est pas propre qu'aux outils CFD.

Type de cas modélisé	Rejet passif sans obstacles	Rejet avec inertie sans obstacle	Rejet gaz lourds avec inertie sans obstacle	Rejet passif avec obstacles	Rejet avec inertie et obstacles	Rejet gaz lourds avec inertie avec obstacles
Validation obstacles	-	-	-	X	X	X
Validation topographie	X	-	-	X	X	-
Validation dynamique du rejet	-	X	X	-	X	X
Validation comportement des gaz lourds	-	-	X	-	-	X
Cas de référence (essai ech 1)	X	X	X	X	X	X

Il convient donc de disposer de données pour :

- la validation des écoulements en présence d'obstacles ou de la présence de topographie par des comparaisons à des études en soufflerie,
- la validation de la modélisation de la dynamique du rejet,
- des essais à grande échelle pour différentes configurations.

Des exemples de cas sont donnés dans les paragraphes suivants pour ces différentes configurations.

1. Validation de la dynamique du rejet

Le caractère dynamique d'un jet peut influencer de manière notable le phénomène de dispersion, soit par la quantité de mouvement du jet, soit par la nature du gaz, pour un gaz lourd par

exemple. Ainsi, afin de démontrer la capacité de l'outil à reproduire ces configurations, 2 configurations devront être modélisées :

- Un écoulement de jet,
- Un écoulement de gaz lourd.

a) Ecoulement de jet

Il conviendra de démontrer la capacité de l'outil de calcul utilisé à retrouver la loi de similitude pour un jet gazeux [12][27].

b) Ecoulement de gaz lourd

Pour le cas des rejets de gaz lourd, la validation sera obtenue par la comparaison à des rejets de gaz lourds réalisés en soufflerie et décrits au paragraphe suivant.

2. Cas représentatifs en soufflerie

De nombreuses configurations ont été étudiées en soufflerie. Si les expérimentations en soufflerie ne sont qu'un modèle de la réalité, elles ont pour intérêt majeur de permettre la réalisation de mesures bien plus précises que les essais à échelle réelle. De ce fait, la comparaison des résultats de simulation avec un minimum de deux configurations étudiées en soufflerie est requise. Plusieurs configurations sont décrites ci-après, cette liste n'est bien évidemment en aucun cas exhaustive et d'autres configurations d'écoulements en soufflerie peuvent être utilisées dans la démarche de validation. Les 3 exemples proposés ci-dessous correspondent à :

- un écoulement en présence d'obstacles,
- un écoulement autour d'une colline,
- un écoulement de gaz dense en configuration de vent neutre ou stable.

Le choix des cas de validation est libre et peut bien sûr varier de ceux présentés dans le présent document sous réserve que les cas soient bien représentatifs et suffisamment instrumentés. Il conviendra, pour tous ces cas, de démontrer le caractère représentatif et dimensionnant des modèles utilisés en se basant sur les approches statistiques [98][99]. Lors de l'évaluation, le modélisateur indiquera l'ordre de grandeur des incertitudes expérimentales lorsqu'elles sont disponibles.

a. Validations de la bonne prise en compte des obstacles

L'un des atouts des modélisations CFD étant de prendre en compte la présence d'obstacles lors des phénomènes de dispersion, il convient de démontrer la capacité de l'outil utilisé à prendre en compte ces obstacles. Différentes configurations ont de nouveau été étudiées

expérimentalement. Celle décrite ici est proposée par Meinders [97]. La configuration étudiée est reproduite sur la Figure 53.

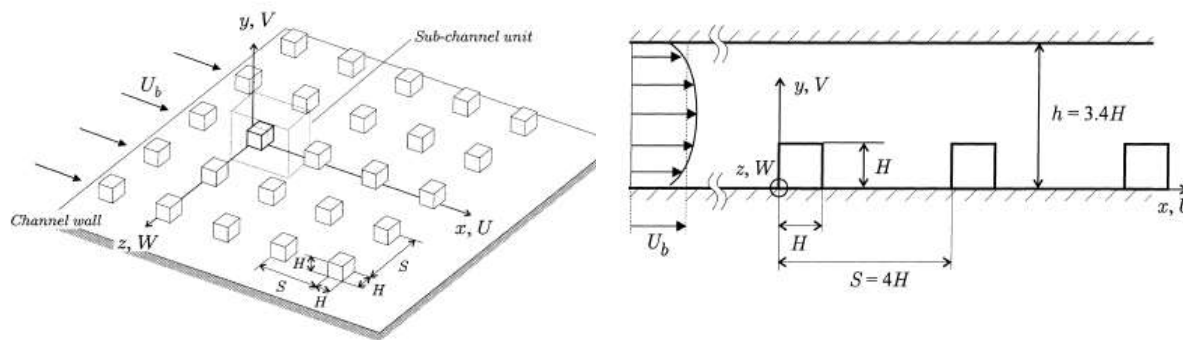


Figure 53 : Configuration étudiée par Meinders [97].

b. Influence de la topographie

La prise en compte de la topographie est un élément essentiel pour modéliser la dispersion atmosphérique d'un polluant. La phénoménologie associée à un tel phénomène doit ainsi être prise en compte de manière satisfaisante dans les outils de simulation. Ce point devra être démontré par la comparaison entre les prédictions de l'outil de simulation et un écoulement en soufflerie en présence d'une colline. Comme pour le cas précédent, différentes géométries de ce type ont été étudiées expérimentalement, notamment par Khurshudyan [100]. La configuration étudiée est schématisée sur la Figure 54.

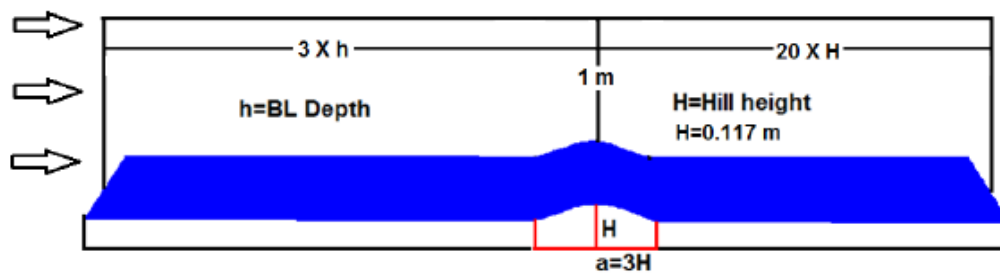


Figure 54 : Vue schématique de l'expérience de Khurshudyan [100].

c. Dispersion de gaz lourd

La dispersion de gaz lourd également été étudié en soufflerie par différents auteurs. Parmi les quelques configurations disponibles dans la littérature, la configuration la plus pertinente pour la validation d'outils de modélisation destinés à évaluer les distances d'effet d'un rejet atmosphérique de gaz lourd, peut être celle publiée par A. Robins [101]. L'intérêt particulier

de cette série d'expérimentations est de proposer des résultats pour des configurations de vent neutres [102] mais également stables [101].

3. Cas expérimentaux à grande échelle

Pour ces configurations à grande échelle, la validation sera réalisée sur la base des critères statistiques habituellement définies [98]. Les cas existants dans la littérature et utilisables pour la validation des outils sont ensuite présentés, Tableau 11. Toutefois, au-delà de cette comparaison statistique, pour les cas jugés pertinents par rapport au cas cible, seront comparés :

- les valeurs maximales et moyennes en différents points pour les cas de calcul d'une masse inflammable,
- les valeurs intégrées de concentration au cours du temps, de type dose toxique, en différents points pour le calcul des effets toxiques.

Le Tableau 11 liste les campagnes d'essais à grande échelle existante pour ce qui concerne la dispersion atmosphérique. Il est évident que les comparaisons devront être axées sur les cas les plus proches de la situation accidentelle modélisée et l'objectif recherché, masse inflammable ou distance toxique notamment.

	Burro	Coyote	Desert Tortoise	Goldfish	Handford	Maplin Sands	Prairie Grass	Thorney Island (inst)	Thorney Island (Cont)	MUST	Kit Fox Field
Substance	GNL	GNL	NH ₃	HF	Krypton 85	GNL & GPL	SO ₂	Fréon et N ₂	Fréon et N ₂	Propylène	CO ₂
Nb d'essais disponibles	8	3	4	3	5	4 et 8	44	9	2	68	52
Durée des rejets	79 à 190	65 à 98	126 à 381	125 à 360	598 et 1 191	60 à 360	600	Instantanée	460		20 et 120 à 300
Type de surface	Petites étendues d'eau	Petites étendues d'eau	Sable humide	Lit de lac asséché	Désert avec buissons	Etendues d'eau peu profonde	Herbe	Herbe	Herbe		Lit de lac asséché avec rugosité artificiel (obstacles)
Classe de vent	C-E	C-D	D-E	D	C-E	D	A-F	D-F	E-F		
Distances max. d'observation	140-800	300-400	800	3 000	800	400-650	800	500-580	472		

Tableau 11 : Liste non exhaustive des cas expérimentaux utilisables pour la validation d'un modèle de dispersion atmosphérique.

**Annexe 11 : Guide de lecture critique de la démonstration de la
mise en œuvre des bonnes pratiques**

Cette annexe constitue un guide de lecture critique de la démonstration de la mise en œuvre des BP. Pour chacune des BP rappelées dans le tableau ci-dessous, la démonstration attendue est décrite.

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Champ d'application (modèles)
Dossier de validation		
BP-Validation	BP16 - La validation d'un outil de modélisation doit comporter plusieurs étapes depuis des cas fondamentaux jusqu'à des cas à grande échelle représentatifs. L'utilisateur de l'outil réalisera pour ce faire une comparaison de résultats numériques avec différents cas analytiques ou expérimentaux pour lesquels des données expérimentales sont disponibles. Des cas de comparaison pertinents sont cités en annexe VIII du présent document.	Tous : Mass consistant, LPDM et CFD
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur fournira un dossier de validation réalisé par ses soins et non par l'éditeur du logiciel dans lequel il présentera les cas détaillés dans l'annexe X.</i>	
BP-Maintien-des-profils	BP4 - L'utilisateur devra justifier du maintien des profils atmosphériques utilisés en entrée (vitesse, température et turbulence) sur la longueur d'intérêt, c'est-à-dire la distance d'effet pour le phénomène considéré, dans la limite de 2 km, en champ libre. Le maintien strict étant délicat, il conviendra de s'assurer qu'en sortie du domaine les profils sont bien représentatifs de la même classe de stabilité atmosphérique que celle imposée en entrée. L'utilisateur explicitera la méthodologie retenue pour le maintien de ces profils et, en particulier les ajustements spécifiques s'ils ont été nécessaires pour le maintien de ce profil et le choix des conditions aux limites.	Tous : Mass consistant, LPDM et CFD
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur modélisera un domaine de 2 km de longueur, en champ libre avec un profil de vent correspondant à une stabilité de type F conforme à la définition des profils tel que définit dans l'annexe I. L'utilisateur présentera les valeurs calculées en sortie de domaine et démontrera que ces grandeurs appartiennent effectivement à une classe de stabilité identique. Il conviendra</i>	

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Champ d'application (modèles)
	<i>ainsi en particulier de positionner la LMO calculée en sortie par rapport à celle utilisée pour déterminer les conditions d'entrée.</i>	
Construction du maillage		
BP-Indépendance	BP9 - Réaliser une <u>étude de sensibilité</u> montrant la faible influence du maillage sur les résultats, c'est-à-dire un écart de moins de 10% sur les distances calculées (LIE ou distance à la concentration d'intérêt) pour : • un volume de maille égale à 0,8 fois la taille de référence, • un volume de maille égale à 1,2 fois la taille de référence. Ces modifications de taille ne s'entendent que dans la zone d'intérêt.	CFD
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur modélisera le domaine avec un premier maillage de référence dont la taille de maille est deux fois plus faible que celle du second maillage. Des sorties graphiques permettront de visualiser les maillages. L'utilisateur présentera les distances d'effets toxiques ou de LIE calculées pour chacun des deux maillages et démontrera que ces distances diffèrent de moins de 5%.</i>	
BP-Indépendance	BP9 - Justifier l'indépendance des résultats, concentrations et doses d'intérêt (SEI, SEL et SELS ou LIE et LSE), au maillage et au nombre de particules (cas des modèles Lagrangiens). De la même manière que pour un outil CFD, un écart de moins de 5% devra être démontré en doublant le nombre de particules.	Mass consistent LPDM
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur modélisera le rejet avec un premier calcul de référence et un cas de calcul avec un nombre de particules deux fois moins importants. L'utilisateur présentera les distances d'effets toxiques ou de LIE calculées pour chacun des deux calculs et démontrera que ces distances diffèrent de moins de 5%.</i>	
BP-Maillage-Bâtiments *	BP11 – Dans le nuage, toxique ou inflammable, un minimum de 10 mailles devra être utilisé dans chacune des directions des bâtiments (hauteur, largeur et longueur). 10 mailles devront également être utilisées pour les espaces	CFD et mass consistent

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Champ d'application (modèles)
	séparant les bâtiments. Ces critères sont applicables pour des bâtiments dans la zone d'intérêt, c'est-à-dire dans le panache de concentration supérieure au SEI ou à la LIE selon la concentration cible. En dehors de cette zone ou pour des obstacles de taille inférieure à dix fois la taille caractéristique du nuage, un nombre de mailles inférieur pourra être utilisé. Les justifications permettant de s'affranchir de cette BP devront s'appuyer sur l'influence de ce choix sur les caractéristiques de l'écoulement.	
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur attestera du nombre de mailles utilisées dans la zone d'intérêt, captures d'écran du maillage à l'appui.</i> <i>S'il souhaite déroger à cette règle il devra :</i> • <i>démontrer l'absence d'influence sur un cas simplifié ;</i> • <i>apporter une justification théorique de ce choix, une telle justification pourra entraîner le recours à un avis de tiers expert</i>	
BP-Facteur-de-forme	BP13 - Le facteur de forme, rapport entre la plus grande et la plus petite dimension caractéristique d'une <u>maille</u> , devra être inférieur à 10. Les justifications pouvant permettre de s'affranchir de cette BP devront s'appuyer sur les caractéristiques du <u>schéma numérique</u> utilisé ou sur les caractéristiques particulières de l'écoulement.	CFD et mass consistent
BP-Evolution-maillage	BP12 - La raison géométrique entre les mailles doit être inférieure à 1,2. Au niveau du sol, les tailles de maille dans la direction verticale seront choisies en cohérence avec le modèle utilisé (loi de paroi).	CFD et Mass consistent
Démonstration attendue	L'utilisateur présentera des vues caractéristiques du maillage permet de juger le respect de cette bonne pratique.	
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur attestera d'un facteur de forme inférieur à 10 sur les mailles utilisées dans la zone d'intérêt, captures d'écran du maillage à l'appui.</i> <i>S'il souhaite déroger à cette règle il devra démontrer l'absence d'influence sur un cas simplifié ;</i>	

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Champ d'application (modèles)
	<i>apporter une justification théorique de ce choix, une telle justification pourra entrainer le recours à un avis de tiers expert.</i>	
BP-maillage-et-vent	BP14 - Sauf justification et afin de limiter les phénomènes de <u>diffusion numérique</u> , le maillage devra être construit dans l'axe du vent, pour des <u>maillages cartésiens</u> . Les justifications permettant de s'affranchir de cette BP devront préciser les caractéristiques du schéma permettant de prévenir le phénomène de diffusion numérique excessive.	CFD
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur attestera d'un maillage, captures d'écran du maillage à l'appui, construit dans l'axe du vent.</i> <i>S'il souhaite déroger à cette règle il devra, au delà de la justification théorique, démontrer l'absence d'influence sur :</i> • <i>un cas test numérique de validation de type transport de créneau dans un écoulement uniforme sans diffusion,</i> • <i>un cas simplifié de dispersion atmosphérique.</i>	
BP-Schéma-numérique	BP15 - Utilisation de <u>schémas numériques</u> de discrétisation spatiale d'ordre 2 ou supérieur.	Tous
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur attestera de l'utilisation de schémas numériques de discrétisation spatiale d'ordre 2.</i> <i>S'il souhaite déroger à cette règle il devra apporter une justification théorique mais également démontrer l'absence d'impact sur la diffusion numérique du schéma en modélisant :</i> • <i>un cas test numérique de validation de type transport de créneau dans un écoulement uniforme sans diffusion,</i> • <i>un cas simplifié de dispersion atmosphérique.</i>	
Utilisation de conditions aux limites adaptées		
BP-Profil-de-vent	BP3 - Les profils de vent représentant les différentes classes de stabilité devront être construits sur la base des équations établies par le groupe de travail.	Tous
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur tracera sur un même graphe les profils de vent issus de l'annexe I et ceux utilisés en entrée de domaine de calcul, ces derniers devront être extrait de l'outil de calcul 3D utilisé.</i>	
BP-Eloignement-CL *	BP10 - Les conditions aux limites du domaine doivent être suffisamment éloignées des obstacles, soit : • Une distance supérieure à 10 fois la hauteur maximale de ces obstacles pour la ou les sortie(s) du domaine,	CFD et Mass consistent

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Champ d'application (modèles)
	une distance supérieure à 5 fois la hauteur maximale de ces obstacles pour toutes les autres conditions aux limites.	
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur attestera, captures d'écran du maillage à l'appui, que les conditions aux limites en sortie du domaine sont positionnées à une distance supérieure à 10 fois la hauteur maximale des obstacles les plus proches. Même démonstration pour les autres conditions limites, telle la condition limite d'entrée, avec une distance supérieure à 5 fois la hauteur des obstacles les plus proches.</i> <i>S'il souhaite déroger à cette règle il devra :</i> <i>démontrer l'absence d'influence sur un cas simplifié ;</i> <i>apporter une justification théorique de ce choix, une telle justification pourra entraîner le recours à un avis de tiers expert.</i>	
Définition du terme source et son introduction dans l'outil de modélisation.		
BP-Terme-source	BP1 - L'utilisateur détaillera et justifiera ses choix en termes d'intégration du terme source dans l'outil 3D utilisé.	Tous
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur présentera et justifiera tout d'abord l'approche globale utilisée, qui consiste généralement soit à modéliser l'ensemble du rejet par le modèle tridimensionnel ou bien à utiliser une autre approche (modèle analytique, modèle intégral, autre) pour définir les caractéristiques du terme source.</i> <i>Quelle que soit l'approche globale utilisée, l'utilisateur présentera les paramètres physiques et de maillage caractérisant les conditions limites du terme source dans la modélisation tridimensionnelle. Ces paramètres sont constitués principalement des paramètres suivants : localisation et nombre de cellules (captures d'écran du maillage à l'appui), hauteur du rejet (m), débit massique du produit (kg/s), durée du rejet (s), composition du rejet (fraction massique des produits considérés, fraction massique liquide éventuel), température (K) et densité (kg/m³) du rejet, surface de rejet (m²) ou volume de rejet (m³), vitesse de rejet (m/s).</i> <i>L'utilisateur démontrera la conservation de la masse, quantité de mouvement et énergie du terme source lors de l'introduction dans l'outil 3D.</i>	
BP-Champ-de-vent	BP2 - Les effets de densité et de jets liés à l'émission doivent être pris en compte s'ils sont significatifs pour la dispersion. C'est-à-dire, pour les effets de densité, dans le cas d'un rejet de gaz lourd ou de gaz léger et,	Tous

Intitulé de la BP	Définition synthétique de la BP	Champ d'application (modèles)
	pour la dynamique, une vitesse de jet supérieure à 5 fois la vitesse du vent à l'altitude de référence.	
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur détaillera et justifiera les critères de prise en compte ou non des effets de densité. Ces critères quantitatifs, qui sont généralement basés sur des nombres adimensionnels (nombre de Richardson et/ou de Froude) devront être présentés et référencés. La comparaison à des configurations de rejets de gaz lourds en soufflerie pourra compléter cette démonstration.</i>	
BP-Pas-temps-émission	BP7 - Le pas de temps d'émission des particules doit être en cohérence avec la dynamique du rejet et les caractéristiques du maillage.	LPDM
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur détaillera et justifiera de manière théorique les critères de choix pour le pas de temps d'émission.</i>	
Modélisation de la turbulence		
BP-Sc-Pr	BP5 - Les <u>nombres de Schmidt et Prandtl</u> turbulents devront être pris égaux à 0,7, sauf justification par l'utilisateur d'une valeur différente au travers des cas de validation spécifiques. La valeur utilisée devra toutefois rester bornée entre 0,7 et 1,0.	CFD
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur précisera les valeurs utilisées pour les nombres de Schmidt et Prandtl turbulents. S'il souhaite déroger à cette règle il devra apporter une justification vis-à-vis du cas d'écoulement considéré en particulier si le cas étudié concerne un environnement atmosphérique dégagé ou bien une zone avec quelques obstacles ou bien un milieu fortement dense en obstacles [41]. Une telle justification pourra entraîner le recours à un avis de tiers expert.</i>	
BP-Turb-atmo	BP6 - Le modèle de turbulence utilisé doit permettre de prendre en compte les spécificités des écoulements atmosphériques.	CFD et Mass consistant
Démonstration attendue	<i>L'utilisateur précisera le modèle de turbulence utilisé et la justification du choix de ce modèle. La justification sera à la fois construite sur des références théoriques et sur l'analyse des cas de validations réalisés.</i>	

