



RE.CO.R.D.

ETUDES N° 01-0805/1A et 03-0805/2A

SYNTHESE DE L'ETUDE

FRANÇAIS / ANGLAIS

**MODELISATION DE LA DISPERSION DES EMISSIONS
ATMOSPHERIQUES D'UN SITE INDUSTRIEL
VERS UN GUIDE DE L'UTILISATEUR**

**PHASE 1 : ETAT DE L'ART
PHASE 2 : EVALUATION DES MODELES**

septembre 2005

R. PERKINS, L. SOULHAC, P. MEJEAN, I. RIOS - LMFA - Ecole Centrale de Lyon

**MODELISATION DE LA DISPERSION DES EMISSIONS
ATMOSPHERIQUES D'UN SITE INDUSTRIEL
VERS UN GUIDE DE L'UTILISATEUR**

PHASE 1 : ETAT DE L'ART

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 1^{ère} partie : Etat de l'art.

Résumé : Cette étude avait pour objectif de réaliser un état de l'art sur la modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques industrielles. Elle propose en particulier un rappel des bases théoriques sur lesquelles reposent le transport et la dispersion des polluants émis dans la basse atmosphère : **la dispersion turbulente, la météorologie locale et la dispersion atmosphérique**. Ces éléments théoriques constituent une base indispensable pour pouvoir interpréter et mettre en œuvre respectivement des résultats et des outils de modélisation. Les différents types de modélisation sont également rappelés ainsi que les hypothèses et les principales limitations relatives à chaque type de modélisation. Une enquête auprès des industriels nous a permis de mieux cerner la problématique des émissions atmosphériques industrielles et de déterminer les limites des études. Un inventaire sur 82 modèles de transport et de dispersion atmosphérique a été réalisé pour une large gamme de situations. Cet inventaire permet de se faire une idée assez globale sur les modèles actuels et sur leurs applications. Les critères retenus pour la description des modèles ont permis de réaliser une classification des modèles en fonction de différents paramètres comme le type de modélisation, le champ d'applications et les principaux phénomènes physiques pris en compte. Enfin, quelques pistes concernant des inventaires de bases de données ont été présentées. Ces bases de données devraient permettre par la suite de constituer des cas tests pour la prise en main des modèles dans différentes configurations typiques.

Mots-clés : pollution atmosphérique, dispersion, couche limite atmosphérique, rejets industriels, inventaire de modèles

Keywords : atmospheric pollution, dispersion, atmospheric boundary layer, industrial releases, model inventory

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 1^{ère} partie : Etat de l'art.

TABLE DES MATIERES

1. Introduction	4
1.1. Contexte de l'étude	4
1.2. Rappel du travail proposé sur la première année	5
2. Dispersion turbulente	6
3. Météorologie locale	7
4. Dispersion atmosphérique	8
5. Analyse et synthèse des situations à modéliser	12
6. Inventaire et description des modèles existants	13
7. Inventaires des cas tests	13
8. Conclusions et perspectives	14
8.1. Partie théorique	14
8.2. Bilan des situations à modéliser	15
8.3. Inventaire des modèles	15
8.4. Inventaires des cas tests	16

1. INTRODUCTION

1.1. CONTEXTE DE L'ÉTUDE

L'Association R.E.C.O.R.D. a confié au Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique de L'Ecole Centrale de Lyon, une étude relative à la dispersion des émissions atmosphériques chroniques d'un site industriel correspondant à un fonctionnement normal des installations.

Dans le cadre de la réglementation en vigueur sur les émissions de polluants atmosphériques, les industriels sont amenés à réaliser ou à faire réaliser des études d'impact qui nécessitent de déterminer le transport et la dispersion des matières rejetées. L'objet de ces études consiste en particulier à démontrer que l'impact au niveau du sol des rejets considérés, reste inférieur à des seuils de concentrations ou de doses des différents produits émis. Pour cela, il faut tenir compte de l'état initial qui correspond à la pollution de fond sans les émissions du site industriel concerné. Il faut ensuite déterminer l'impact du site lui-même au moyen d'outils capables de prendre en compte le transport et la dispersion des polluants atmosphériques émis par le site industriel.

Les industriels sont également amenés à réaliser des études de transport et de dispersion pour répondre à des problèmes très spécifiques, techniques (dimensionnement des installations, efficacité de nouveaux procédés de réduction des émissions polluantes) ou relatifs à des plaintes de riverains (problème d'odeurs) ou bien encore pour réaliser des prévisions en temps réel.

Toutes ces études d'impact nécessitent donc d'avoir recours à des outils de modélisation qui doivent être adaptés au problème à traiter (type de rejet, polluants, ...) et de tenir compte des principales singularités des sites (complexité topographique, situation géographique, conditions météorologiques locales, ...). Il existe aujourd'hui une multitude d'outils de modélisation allant des plus simples (modèles gaussiens rectilignes) aux plus compliqués (simulation numérique 3D, modélisation physique en soufflerie ou en veine hydraulique), du modèle « maison » et des modèles disponibles gratuitement sur l'internet aux logiciels commerciaux, et il n'est pas toujours facile, pour des personnes non spécialistes dans ce domaine, de faire un choix. Il n'est également pas toujours facile de prendre en main un outil de modélisation, directement sur une étude concrète, sans avoir acquis au préalable une certaine sensibilité des paramètres et des hypothèses physiques du modèle par rapport au problème à traiter. Enfin, il est aussi difficile d'analyser des résultats provenant d'études sous-traitées à des bureaux d'ingénierie, surtout lorsque l'on ne dispose pas des principales caractéristiques des modèles utilisés par le sous-traitant.

C'est en partie pour ces différentes raisons que l'Association R.E.C.O.R.D. et le LMFA ont décidé d'établir un programme de recherche visant à terme à l'établissement d'un guide de l'utilisateur pour la modélisation de la dispersion des émissions industrielles. Le projet global proposé sur une période de l'ordre de 3 ans comporte trois volets d'une durée d'un an chacun :

- Un premier volet sur l'état de l'art dans ce domaine.
- Un deuxième volet d'évaluation des modèles sur des cas tests obtenus sur le terrain ou en soufflerie.
- Un troisième volet d'étude de quelques cas génériques.

Les résultats attendus à l'issue de l'étude globale portent principalement sur l'établissement d'un guide de recommandations et d'une plate-forme de simulation concernant la modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel, pour des utilisateurs industriels :

- Choix du type de modélisation en fonction de la situation à traiter (1^{ère} année).

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 1^{ère} partie : Etat de l'art.

- Evaluation des modèles et catalogue de cas tests pour une meilleure prise en main des outils de modélisation (2^{ème} année).
- Catalogue de cas génériques pour une évaluation rapide des résultats attendus. Calculs d'ordre de grandeur (3^{ème} année).

1.2. RAPPEL DU TRAVAIL PROPOSÉ SUR LA PREMIÈRE ANNÉE

Le travail de la première année a pour objectif d'établir un état de l'art dans le domaine de la modélisation, du transport et de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel. Il consiste notamment à dresser un état des connaissances scientifiques actuelles dans ce domaine et à le mettre en correspondance avec les différentes situations réelles à traiter et avec les modèles disponibles sur le marché commercial ou non, afin de retenir et d'utiliser l'outil le mieux adapté pour répondre aux besoins de l'étude. Le travail proposé se décompose en quatre phases :

1. *Rappels théoriques* : La modélisation de la pollution atmosphérique nécessite de posséder quelques notions de base sur la dispersion turbulente (chapitre 2), sur la météorologie locale (chapitre 3) et sur la dispersion atmosphérique (chapitre 4). Il est surtout important de pouvoir faire le lien entre les processus physiques de transport et de dispersion dans la couche limite atmosphérique et les différentes approches utilisées dans les modèles de dispersion. Il faut également bien comprendre les hypothèses qui se trouvent derrière chaque type de modèle pour permettre un choix judicieux, répondant le plus précisément possible au problème. Il faut enfin disposer d'une expertise suffisante pour pouvoir interpréter les résultats des modélisations.
2. *Informations sur les différentes situations à modéliser* : Il s'agit ici d'établir un inventaire le plus exhaustif possible des différentes données nécessaires pour la modélisation de la pollution atmosphérique (les données météorologiques, la topographie du site, les conditions de rejet, la localisation des cibles, ...) en indiquant celles qui sont typiquement disponibles. Il s'agit également d'établir un inventaire des paramètres à calculer, répondant aux contraintes de l'étude. Par ailleurs, les besoins des industriels en matière de modélisation de la dispersion seront évalués le plus finement possible afin que cet état de l'art réponde directement à leurs attentes. Il est clair qu'aujourd'hui, tous les problèmes ne sont pas résolus et qu'il y a encore des besoins qui relèvent du domaine de la recherche. C'est notamment le cas de la dispersion des poussières et des odeurs. Il est important à notre sens, d'identifier clairement la frontière entre ce qui est résolu, ce qui peut l'être sous le couvert d'hypothèses simplificatrices pas trop pénalisantes et ce qui ne l'est pas et qui nécessite encore des recherches.
3. *Bilan sur les différents modèles existants* : Il est proposé ici de réaliser un inventaire des modèles de dispersion sur la base des documentations techniques des logiciels. A partir de cet inventaire, plusieurs analyses pourront être faites. Elles viseront en particulier à établir une classification des modèles en fonction de divers paramètres comme le type de modélisation, le champ d'application, la prise en compte de phénomènes physiques particuliers, A l'issue de ce travail, quelques modèles à retenir seront proposés. Une fiche par modèle sera établie ainsi que des tableaux de comparaison entre les caractéristiques des modèles. Des renseignements concernant les fournisseurs de logiciels, les possibilités de support technique et les perspectives d'évolution des modèles seront également inclus.
4. *Bilan sur les cas tests* : Il existe dans la littérature de nombreuses références à des expériences de terrain ou en soufflerie qui peuvent d'ores et déjà constituer une première série de cas tests directement appliqués aux émissions industrielles chroniques ou plus générique pour ce type d'application. Certaines de ces références ont d'ailleurs servi au développement et à la mise en œuvre de certains modèles. Il sera également utile d'identifier des cas tests supplémentaires, à réaliser en soufflerie ou sur le terrain, répondant plus précisément et plus spécifiquement aux situations industrielles.

Dans les différents chapitres proposés, nous présentons les éléments théoriques nécessaires à la compréhension des processus de transport et de dispersion des polluants atmosphériques (chapitres 2, 3, 4), l'analyse et la synthèse des situations à modéliser (chapitre 5), un inventaire et une description des modèles (chapitre 6) et un premier bilan sur les bases de données expérimentales susceptibles de fournir des cas tests (chapitre 7).

2. DISPERSION TURBULENTE

Ce chapitre présente les phénomènes physiques, les concepts théoriques et les techniques de modélisation relatifs à la dispersion turbulente. Le problème de la dispersion turbulente a été abordé d'un point de vue général, dans un contexte plus large que celui de la dispersion atmosphérique. L'application plus spécifique à l'atmosphère est exposée au chapitre 4.

L'étude de la répartition d'une espèce dans un fluide, en particulier lorsque celui-ci est en écoulement, repose sur la notion de **concentration**. L'évolution de la concentration est due aux phénomènes d'**advection** par l'écoulement et de **diffusion moléculaire**. La **dispersion turbulente** est un mécanisme qui résulte de l'effet conjugué de l'advection et de la diffusion moléculaire. C'est un processus de dilution beaucoup plus efficace que la diffusion moléculaire. Il dépend des caractéristiques turbulentes de l'écoulement.

L'**équation d'advection-diffusion** est l'équation d'évolution de la concentration. Dans le cas d'un écoulement turbulent sans vitesse moyenne et d'un rejet instantané ponctuel, elle admet une **solution analytique** pour la concentration sous forme d'une distribution **gaussienne** dans l'espace. L'étalement d'un nuage de polluant est influencé par les différentes échelles de turbulence présentes sous forme de tourbillons dans l'écoulement. Les tourbillons de taille inférieure ou égale au nuage contribuent au mécanisme de **diffusion relative** (diffusion d'un nuage instantané autour de son centre de masse). Les tourbillons plus gros que le nuage instantané contribuent au déplacement de son centre (**diffusion du centre de masse**). La diffusion totale, correspondant à la **moyenne d'ensemble** sur un grand nombre de **réalisations** de la dispersion du nuage instantané, correspond à la somme de la diffusion relative et de la diffusion du centre de masse.

L'écart entre une réalisation particulière et le comportement moyen du nuage définit la notion de **fluctuation de concentration**. Au voisinage de la source, les fluctuations sont principalement dues à la diffusion du centre de masse (phénomène de battement) alors que pour des temps de diffusion plus importants, elles sont dues majoritairement à la diffusion relative.

Un gradient de vitesse moyenne peut augmenter fortement la dispersion turbulente dans la direction normale au gradient.

Il existe principalement quatre grandes **techniques de modélisation** de la dispersion turbulente :

- **Les modèles gaussiens** : ils sont basés sur des solutions analytiques de l'équation d'advection-diffusion couplées avec des paramétrisations semi-empiriques des principaux phénomènes physiques. On distingue les modèles de panache et les modèles à bouffées. Les modèles gaussiens fournissent une modélisation rapide adaptée aux études opérationnelles mais ne permettent pas de traiter directement des écoulements complexes.
- **Les modèles lagrangiens** : basés sur le suivi des trajectoires d'un grand nombre de particules dans l'écoulement, ils permettent de bien modéliser l'influence de la turbulence sur la dispersion. Couplé à un modèle à bouffées, ils peuvent permettre de déterminer les fluctuations de concentration. Le temps de calcul peut néanmoins être important lorsque l'on étudie un grand nombre de sources.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 1^{ère} partie : Etat de l'art.

- **Les modèles eulériens** : basés sur la résolution de l'équation d'advection-diffusion sur un maillage, ces approches permettent de prendre en compte toute la complexité de l'écoulement. Elles peuvent cependant s'avérer coûteuse en temps de calcul et ne sont pas adaptées au voisinage des sources.
- **Les expériences en soufflerie ou en veine hydraulique** : basées sur les principes de similitude (reproduction des phénomènes sur des maquettes à échelle réduite), elles permettent de prendre en compte des écoulements turbulents très complexes. Elles sont cependant limitées à l'étude de la couche limite atmosphérique aux échelles locales (inférieures à quelques kilomètres).

3. MÉTÉOROLOGIE LOCALE

Les phénomènes météorologiques constituent le vecteur des polluants transportés dans l'atmosphère. Pour comprendre et modéliser la dispersion atmosphérique, il est donc essentiel de décrire les principaux phénomènes météorologiques, en particulier à l'échelle locale.

L'atmosphère peut être décomposée en plusieurs couches horizontales. La partie inférieure de l'atmosphère, à l'intérieur de laquelle les effets du sol sont importants, constitue la **couche limite atmosphérique (CLA)**. Les variables couramment utilisées pour décrire l'atmosphère sont :

- **La vitesse du vent** : dans l'atmosphère, l'écoulement du vent est **turbulent**, ce qui se caractérise par une fluctuation désordonnée de la vitesse dans l'espace et dans le temps.
- **La pression** : la pression décroît avec l'altitude sous l'effet de la gravité (**équilibre hydrostatique**).
- **La température** : la température décroît avec l'altitude. Le gradient vertical de température permet de caractériser l'**état de stabilité thermique** de l'atmosphère. Dans un **état neutre**, il n'y a pas d'action des effets thermiques sur le mouvement vertical de l'air. Dans un **état stable**, le mouvement et la turbulence dans la direction verticale sont atténués par les forces de flottabilité. Dans un **état instable**, les mouvements verticaux et la turbulence sont amplifiés.

Les phénomènes météorologiques recouvrent une **large gamme d'échelles spatiales et temporelles** qui n'ont pas toutes la même influence sur la dispersion de polluants. On considérera que les phénomènes internes à la CLA ont une influence directe sur la dispersion à court terme de rejets industriels tandis que les phénomènes de plus grande échelle peuvent être pris en compte à travers quelques paramètres particuliers. Parmi les phénomènes qui peuvent être paramétrés, on peut citer les **effets radiatifs**, la présence d'**humidité** ou l'effet de la **force de Coriolis**.

La structure de la CLA dépend principalement de l'état de stratification thermique de l'atmosphère, qui évolue au cours du temps. D'un point de vue dynamique, on distingue au sein de la CLA, la **couche limite de surface (CLS)** et la **couche d'Ekman**. D'un point de vue thermique, la CLA est constituée de la couche limite de surface associée à la **couche de mélange** au cours de la journée (atmosphère instable) et de la couche limite de surface associée à la **couche résiduelle** au cours de la nuit (atmosphère stable).

Le profil de vitesse dans la CLA est déterminé en partie par le **frottement au sol**. Plus ce frottement est important, plus le profil de vitesse est cisailé. C'est également le frottement qui est à l'origine de la **turbulence mécanique**. L'intensité du frottement dépend de la **rugosité aérodynamique** du sol, dont il existe des modèles typologiques et morphométriques.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 1^{ère} partie : Etat de l'art.

L'état de stratification thermique conduit à la production (**état instable = turbulence forte**) ou à la destruction (**état stable = turbulence faible**) de turbulence. Cela modifie le profil de vitesse et les propriétés de la couche limite. Les caractéristiques de la couche limite de surface en atmosphère stratifiée, sur un terrain plat uniforme, peuvent être décrites par la **théorie de similitude de Monin-Obukhov**.

Sur un sol hétérogène, des comportements spécifiques apparaissent, tels que des **couches limites internes**, des **brises côtières** ou des phénomènes d'**îlot de chaleur**.

La présence de **relief modifie sensiblement l'écoulement** par rapport au cas d'un sol plat. Le comportement de l'écoulement sur un relief dépend de la stabilité thermique de l'atmosphère. Dans le cas d'une colline isolée, l'air a tendance à **s'élever pour franchir le relief en atmosphère neutre** et à le **contourner en atmosphère stable**. Des phénomènes de **brises thermiques** peuvent également se développer sur les pentes des reliefs, en particulier au sein des vallées.

Les méthodes de modélisation de l'écoulement sur relief peuvent être classées de la façon suivante :

- **Les modèles diagnostiques** : on distingue les **modèles linéarisés** et les **modèles de conservation de la masse**.
- **Les modèles prognostiques** : on distingue les **modèles hydrostatiques** et les **modèles non-hydrostatiques**.

A plus petite échelle, les **obstacles ou les bâtiments** perturbent également l'écoulement dans la couche limite de surface. Dans le cas d'un obstacle isolé, l'écoulement **contourne l'obstacle à l'amont**, forme une **zone de recirculation** dans le sillage proche et une **zone de déficit de vitesse** dans le sillage lointain. L'influence d'un obstacle est plus forte en aval qu'en amont de celui-ci. Cette influence diminue lorsque l'on s'éloigne de l'obstacle.

Lorsque plusieurs obstacles interagissent (**groupe d'obstacles**), on observe une **diminution globale de la vitesse** associée à la traînée des obstacles et une **modification de la turbulence** de l'écoulement.

On peut distinguer trois types de méthodes de modélisation de l'écoulement autour d'obstacles :

- **Les approches paramétriques**.
- **Les modèles simplifiés**.
- **Les modèles eulériens tridimensionnels**

4. DISPERSION ATMOSPHERIQUE

Dans ce chapitre, nous avons présenté un résumé des connaissances théoriques et empiriques sur la dispersion de matière dans les écoulements atmosphériques. Afin de bien comprendre le rôle joué par les différents phénomènes, nous avons commencé par le cas "simple" de la dispersion dans une atmosphère neutre, sur un sol plat, à partir d'une source ponctuelle. Puis nous avons décrit différents effets plus complexes qui peuvent modifier le comportement du panache et les concentrations observées : la stratification thermique, la nature et les conditions initiales du rejet, l'influence du relief et des bâtiments, les phénomènes de déposition et les processus d'envol de particules, les fluctuations de concentration.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 1^{ère} partie : Etat de l'art.

Nous avons enfin présenté une synthèse des méthodes disponibles pour modéliser la dispersion atmosphérique que nous résumons ci-après.

Approches de modélisation

Il existe trois grandes catégories de modèles de dispersion :

- ***Les modèles gaussiens*** : ils sont basés sur les solutions analytiques de l'équation d'advection-diffusion. On distingue les modèles de panache gaussien et les modèles à bouffées gaussiennes. Dans ce type de modèles, la plupart des processus de dispersion et des processus physico-chimiques sont pris en compte à l'aide de paramétrisations spécifiques, sans résolution des équations. Ces modèles sont bien adaptés à des études opérationnelles (calcul en temps réel, étude d'impact) car ils nécessitent des temps de calcul limités et permettent ainsi l'étude d'un grand nombre de cas. Ils fournissent des résultats acceptables dans les situations pour lesquelles ils ont été paramétrés (il faut noter que les paramétrisations disponibles varient d'un modèle à l'autre). Ils sont cependant difficilement utilisables dans des situations d'écoulement très compliqué (relief, obstacles multiples) ou lorsqu'il est nécessaire de traiter des processus physico-chimiques complexes.
- ***Les modèles lagrangiens*** : ils sont basés sur le calcul des trajectoires turbulentes d'un grand nombre de particules représentant le polluant. Ils sont généralement couplés à un modèle eulérien qui calcule le champ de vent dans lequel s'effectue la dispersion. Ils permettent essentiellement de prendre en compte la dispersion et s'adaptent plus difficilement à la description de processus physico-chimiques. Ils peuvent être utilisés pour des études d'impact mais pas pour des simulations en temps réel. Les résultats obtenus avec cette approche sont généralement bons et bien adaptés au champ proche des sources. Ils ne sont cependant pas adaptés pour traiter un grand nombre de sources (temps de calcul très important).
- ***Les modèles eulériens tridimensionnels*** : ils sont basés sur une résolution numérique de l'équation d'advection-diffusion sur un maillage de l'espace. Ils sont généralement couplés à un modèle eulérien qui détermine le champ de vent (souvent sur le même maillage). Ils ne sont pas adaptés pour des simulations en temps réel et leur utilisation pour des études d'impact doit être envisagée une fois que les autres approches ont montré leurs limites. En effet, les temps de calcul d'un modèle eulérien sont souvent très importants et difficilement compatibles avec des études opérationnelles. Un modèle eulérien fournit de bons résultats, à l'exception du champ proche des sources où les hypothèses effectuées conduisent à surestimer la diffusion.

Tous les modèles de dispersion précédents ont besoin de données d'entrée sur les conditions météorologiques. On distingue pour cela deux approches :

- ***Les pré-processeurs météorologiques***, qui servent à calculer les différentes variables décrivant l'état de l'atmosphère, en particulier en ce qui concerne la stabilité thermique et la turbulence de l'écoulement. Les pré-processeurs sont généralement adaptés pour utiliser des données provenant de mesures de terrain.
- ***L'utilisation d'un champ de vent tridimensionnel***, obtenu à l'aide d'un modèle d'écoulement.

Un modèle de dispersion peut également être couplé à un modèle d'émission, qui calcule les quantités de polluants rejetées par des activités spécifiques (exemple des modèles de trafic).

Qualité des résultats

Les conclusions exposées au paragraphe précédent, concernant la qualité des résultats fournis par les différentes approches de modélisation, doivent faire l'objet de quelques réserves. En effet, la qualité des résultats d'un modèle de dispersion dépend de nombreux facteurs relatifs au modèle en lui-même, mais également à la façon dont il est mis en œuvre. Ces différents facteurs sont :

- **La qualité intrinsèque du modèle** : la qualité intrinsèque du modèle est sa capacité à simuler le phénomène pour lequel il a été développé. Cette aptitude dépend d'une part des hypothèses simplificatrices effectuées dans la constitution du modèle et d'autre part des techniques utilisées pour résoudre le problème simplifié.
- **L'adéquation entre le modèle et le problème à traiter** : parfois, un modèle peut être excellent pour traiter une situation particulière et peut ne pas être adapté à d'autres situations. S'il est utilisé hors de son contexte, il donnera donc des résultats erronés.
- **La qualité des données utilisées** : un modèle utilise des paramètres d'entrée. Si ces paramètres sont imprécis, le résultat de la simulation a de grandes chances de l'être aussi. Ce problème se pose en particulier lorsqu'un modèle de dispersion utilise un champ de vent obtenu à l'aide d'un autre modèle. La qualité du modèle de dispersion dépend alors énormément de la qualité du modèle d'écoulement. De la même façon, il n'est pas utile de mettre en œuvre un modèle très performant lorsque l'on ne dispose pas des données d'entrée suffisantes pour l'initialiser.
- **L'expertise du modélisateur** : l'expertise du modélisateur est indispensable dans l'analyse du problème à traiter, dans le choix du modèle de dispersion, dans la mise en œuvre du modèle et dans l'interprétation des résultats.

Dans le paragraphe précédent, nous avons uniquement indiqué la qualité intrinsèque du modèle. Il faut bien être conscient qu'un "bon" modèle ne suffit pas à fournir de bons résultats. C'est en général la bonne adéquation des quatre facteurs précédents qui permet d'obtenir les meilleurs résultats. Pour illustrer ce point, il est intéressant d'analyser les résultats des exercices d'inter-comparaison et de validation de modèles de dispersion, qui sont régulièrement effectués par la communauté scientifique. Il n'est pas rare d'observer que deux modélisateurs, utilisant le même modèle et cherchant à simuler le même épisode, obtiennent des résultats pour la concentration différents d'un facteur 10 !

Types d'utilisation d'un modèle

Les applications d'un modèle de dispersion peuvent être classées en fonction des contraintes opérationnelles relatives au contexte de l'étude (temps de calcul, facilité d'utilisation, ...). Ces contraintes conduisent à rechercher des modèles capables de fournir un résultat dans un temps donné. Compte tenu de la diversité des problèmes rencontrés (par exemple, la notion de "prévision" peut avoir des significations différentes selon les personnes), il nous a semblé difficile de proposer une classification des modèles en fonction des applications qu'ils seraient capables de traiter. Il nous a paru plus raisonnable de les classer en fonction du temps nécessaire pour simuler un scénario donné (un scénario est un jeu de paramètres météorologiques, d'émission, ... Par exemple, ce sera l'étude d'une source, d'une direction de vent, d'une classe de stabilité, d'un débit de rejet, ...). Il revient ainsi à chacun de définir quelles sont ses contraintes d'utilisation et d'en déduire le modèle le plus approprié. Cette classification est présentée dans le Tableau 1.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 1^{ère} partie : Etat de l'art.

	Modèle gaussien	Modèle lagrangien	Modèle eulérien
Temps CPU pour un scénario	< 1 minute	Quelques minutes à 1 heure	> 1 heure

Tableau 1 : Ordre de grandeur des temps de calcul nécessaires pour un scénario, pour les différents types de modèles.

Phénomènes pris en compte

Les phénomènes pris en compte par les différentes approches ont été résumés dans le Tableau 2. Nous avons également indiqué la "qualité" des méthodes utilisées. Il faut noter qu'aucun des phénomènes considérés n'est pris en compte "par défaut" dans ces modèles. Il conviendra donc de vérifier pour chaque modèle les phénomènes décrits. De plus, les méthodes utilisées pour prendre en compte ces phénomènes varient d'un modèle à l'autre. Les indications fournies sont donc avant tout indicatives et devront dans certains cas être nuancées.

	Modèle de panache gaussien	Modèle à bouffées gaussiennes	Modèle lagrangien	Modèle eulérien
Stratification thermique	A Paramétrisation des écarts-types	A Paramétrisation des écarts-types	A Par le champ turbulent	A Par le champ turbulent
Relief	B Paramétrisation spécifique	B Paramétrisation spécifique	A Par le champ de vent	A Par le champ de vent
Obstacles	B Paramétrisation spécifique	B Paramétrisation spécifique	A Par le champ de vent	A Par le champ de vent
Dépôt	B Paramétrisation spécifique	B Paramétrisation spécifique	A Loi de paroi (dépôt sec) et paramétrisation du dépôt humide	A Loi de paroi (dépôt sec) et paramétrisation du dépôt humide
Particules	B Paramétrisation de la sédimentation	B Paramétrisation de la sédimentation	A Paramétrisation spécifique	A Paramétrisation spécifique
Radioactivité	B Paramétrisation de l'évolution radioactive	B Paramétrisation de l'évolution radioactive	B Paramétrisation de l'évolution radioactive	A Paramétrisation de l'évolution radioactive
Chimie	C Pas adapté	B Paramétrisation de la chimie simple	B Module chimique	A Module chimique
Fluctuations et odeurs	C Pas adapté	A Couplage avec un modèle lagrangien	A Couplage avec un modèle à bouffées	A Equation de conservation de la variance

Tableau 2 : Phénomènes pris en compte dans chaque type de modèle. Le caractère gras indique la qualité de la méthode (A = reproduit bien le phénomène ; B = moyennement adaptée mais peut suffire pour une étude d'impact ; C = non adaptée). Le type de méthode utilisée est ensuite décrit.

5. ANALYSE ET SYNTHÈSE DES SITUATIONS À MODÉLISER

Dans ce chapitre, nous avons réalisé un inventaire des situations à étudier et des données nécessaires et disponibles.

L'inventaire des situations d'émissions atmosphériques industrielles avait pour objectif d'identifier et de caractériser les situations les plus courantes dans le but de réaliser des études de dispersion. L'analyse a principalement porté sur les motivations des études (réglementaire, plaintes, techniques, prévision), les configurations de rejets (emplacement et forme du rejet, nature du rejet et conditions de rejet) ainsi que sur les typologies de reliefs (site de plaine, de vallée, de montagne, ...) et d'obstacles (bâtiment isolé, site industriel en milieu rural ou urbain, ...). Par ailleurs, une enquête auprès des tuteurs industriels a été réalisée en deux étapes :

- un premier contact téléphonique a permis de mieux cerner les besoins et les attentes des tuteurs ;
- une deuxième étape par questionnaire papier avait pour objectif de mieux définir les différentes situations à modéliser.

A ce jour, tous les tuteurs ont été contactés par téléphone hormis Renault et Solvay (tout récemment intéressé par le projet) et nous avons reçu quatre questionnaires sur neuf envoyés (Atofina, Gaz de France, Solvay et Tredi). Les questions posées reprenaient succinctement les trois points présentés précédemment, à savoir quelles étaient les motivations des études, les configurations de rejets et les typologies des sites. Elles visaient également à déterminer comment (moyens en interne, sous-traitance à un bureau d'études) et avec quel modèle (développement en interne, modèles commerciaux), sont faites les études de dispersion. Il a été demandé aux tuteurs industriels de répondre globalement au questionnaire sur l'ensemble des situations qu'ils ont à traiter. Ce questionnaire peut également être utilisé au cas par cas, comme aide-mémoire, pour caractériser la situation à modéliser.

Il ressort de cette enquête que les motivations des études concernent tous les points évoqués précédemment et que les études sont réalisées soit en interne par des modèles mis en œuvre par les industriels, soit sous traitées à des bureaux d'études. Les modèles utilisés concernent le plus souvent des approches semi-empirique de type gaussien mais aussi pour une part, des modèles numériques. Le champ d'application des modèles reste inférieur à une centaine de kilomètres avec des échelles temporelles caractéristiques des fluctuations atmosphériques, de l'heure et de l'année. Les grandeurs à calculer sont en particulier la concentration moyenne, les percentiles, les fluctuations et les doses chimiques. Les conditions de rejets concernent tous les types d'émissions (émissions canalisées, émissions fugitives ou diffuses, panache de condensation). Enfin, le champ d'investigation pour les typologies de reliefs et d'obstacles est très large. Il va du plus simple, relief plat, bâtiment isolé au plus compliqué, relief de montagne, site industriel.

Lors de cette enquête, nous avons également demandé aux industriels de préciser leurs attentes par rapport à cette première étude. Il ressort des discussions un réel besoin de mieux appréhender l'influence des différents phénomènes physiques sur la dispersion des polluants, l'importance des paramètres comme la topographie et de pouvoir mieux évaluer les conséquences de certaines hypothèses de modélisation sur les résultats. Pour les industriels disposant déjà d'une expérience sur la modélisation de la dispersion, ils attendent ces informations de l'étude théorique ainsi qu'une classification des modèles de dispersion. Pour les autres, la demande finale est identique, mais avant cela, il s'agit surtout de pouvoir apporter une analyse critique sur le travail fourni par les bureaux d'études, puis de pouvoir se doter de moyens en interne. Il ressort également des discussions un besoin de disposer d'approches de modélisation qui soient agréées par le Ministère chargé de l'Environnement.

6. INVENTAIRE ET DESCRIPTION DES MODÈLES EXISTANTS

On dispose aujourd'hui d'un très grand nombre de modèles permettant de simuler la dispersion des polluants dans l'atmosphère et il est très difficile, voire impossible, d'en dresser une liste complètement exhaustive. L'inventaire que nous avons réalisé regroupe toutefois un éventail assez large de modèles permettant de répondre au problème de la dispersion atmosphérique dans sa quasi globalité. De cet inventaire de modèles très général, nous avons extrait ceux qui répondent aux problèmes spécifiques des études d'impact relatives aux émissions chroniques industrielles. L'inventaire à ce jour, a été réalisé sur 82 modèles, sur la base des documentations techniques et commerciales recueillies dans la littérature scientifique et sur plusieurs sites internet.

Une première étape a consisté à définir les différents critères retenus pour classer les modèles. Ces critères permettent en particulier d'avoir une description générale de chaque modèle, des différentes particularités des modèles météorologiques et de dispersion, des informations sur les entrées et sortie des modèles ainsi que des renseignements administratifs et des informations sur la validation des modèles et les besoins informatiques. Une deuxième étape a permis de classer les 82 modèles en fonction des trois types d'approche de modélisation de la dispersion, à savoir, les modèles gaussiens, eulériens et lagrangien. Enfin, une troisième étape a concerné plus particulièrement la classification des modèles en fonction de quelques critères retenus précédemment. Cette classification des modèles a notamment porté sur les échelles spatiales et temporelles et sur les principaux phénomènes pris en compte tels que le relief, les obstacles, la stratification de l'atmosphère, le dépôt au sol, la chimie. Elle a également porté sur des informations relatives à l'accessibilité et au coût des logiciels.

7. INVENTAIRES DES CAS TESTS

L'utilisation des cas tests présente un intérêt à plusieurs niveaux :

- *Au niveau du développement des modèles* : il est indispensable pour le développement des modèles d'identifier les processus physiques prépondérants pour le transport et la dispersion des polluants dans le contexte spécifique à étudier. Il est également indispensable de déterminer la sensibilité des paramètres d'influence du problème posé.
- *Au niveau de la validation des modèles* : une fois le modèle opérationnel, il est nécessaire de le valider sur des applications pour lesquelles il a été développé. Dans ce contexte, il existe, en fonction des applications, des exercices de validation qui permettent la validation proprement dite des modèles mais également leur inter-comparaison.
- *Au niveau de l'utilisation des modèles* : de manière générale, la mise en œuvre opérationnelle d'un modèle pour répondre à un problème spécifique (étude réglementaire par exemple) n'est pas faite par un spécialiste de la dispersion atmosphérique. Il est alors utile d'avoir recours à des cas tests, pas trop éloignés des problèmes à traiter, pour permettre la formation des modélisateurs et pour acquérir une sensibilité suffisante quant aux paramètres importants.

Dans le cadre de ce projet, le premier objectif à réaliser était de recenser les bases de données existantes et disponibles dans la littérature scientifique, qui permettront par la suite de constituer un ensemble de cas tests répondant au problème posé. Le deuxième objectif, était d'identifier les principaux critères à retenir pour la définition des cas tests qui serviront à l'évaluation des modèles retenus mais également à la formation des modélisateurs. Un troisième objectif, sera de déterminer précisément les besoins spécifiques des industriels en matière d'expériences, non totalement couverts par les bases de données existantes.

De nombreuses bases de données expérimentales obtenues soit en soufflerie, soit par des campagnes de mesure sur le terrain existent déjà dans la littérature scientifique et couvrent un

large spectre d'applications. Pour ne retenir que ce qui intéresse les émissions atmosphériques d'un site industriel, nous avons défini des critères de sélection liés au champ d'applications, à la topographie du terrain et aux conditions de rejet. Puis nous avons recensé des sites internet qui proposaient un inventaire des bases de données existantes. L'intérêt de ces bases de données est d'être déjà orientées vers la validation des modèles de dispersion atmosphérique et pour la plupart de proposer des méthodes d'évaluation des modèles.

8. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Le projet global proposé sur une période de l'ordre de 3 ans avait comme objectifs initiaux de réaliser un état de l'art sur la modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques des rejets industriels, d'évaluer les modèles sur des cas tests représentatifs de situations industrielles bien identifiées et d'étudier quelques cas génériques des situations les plus courantes. Le travail de la première année avait donc comme objectif de réaliser un état de l'art dans ce domaine. Il a consisté en particulier à introduire les bases théoriques nécessaires à la compréhension des processus physiques relatifs à la dispersion atmosphérique et à leur modélisation, et à établir un état des connaissances scientifiques actuelles. Ce travail a également permis d'établir un inventaire et une classification de modèles de dispersion, sur la base des documentations générales disponibles en particulier sur internet, un bilan des situations industrielles à prendre en compte ainsi qu'un premier inventaire des cas tests.

8.1. PARTIE THÉORIQUE

Dans les chapitres 2 à 4, nous avons rappelé les éléments théoriques essentiels à la compréhension des processus de transport et de dispersion des polluants atmosphériques dans la basse atmosphère. Le chapitre 2 avait pour objet de présenter les phénomènes physiques, les concepts théoriques et les techniques de modélisation relatifs à la dispersion turbulente. Le problème de la dispersion turbulente a été abordé ici d'un point de vue général, dans un contexte plus large que celui de la dispersion atmosphérique. Ce chapitre a notamment permis d'introduire les notions d'advection et de diffusion d'une substance dans un écoulement fluide. Il a également permis d'introduire les principales approches de modélisation de la dispersion turbulente : les modèles gaussiens, les modèles eulériens, les modèles lagrangiens et la modélisation physique sur maquette en laboratoire. Le chapitre 3 avait pour objet de rappeler quelques notions de météorologie locale, sur un sol plat, sur un relief et en présence d'obstacles. La dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel à cette échelle, est due principalement à l'action du vent et de la turbulence qui transportent et diluent ces polluants. Afin de pouvoir comprendre les mécanismes de dispersion atmosphérique, il était donc nécessaire de rappeler et de décrire les caractéristiques de l'atmosphère et des principaux phénomènes météorologiques. Enfin, le chapitre 4 avait pour objet de présenter un résumé des connaissances théoriques et empiriques sur la dispersion de matière dans les écoulements atmosphériques. Il s'agissait ici de bien comprendre le rôle joué par les différents phénomènes physiques mis en jeu dans la dispersion atmosphérique d'un panache de polluants.

Cette partie théorique donne une description relativement complète des principaux phénomènes physiques qui se trouvent derrière le problème de la modélisation de la dispersion atmosphérique à des échelles locales. Elle donne également une description relativement détaillée des principaux types de modélisation mis en œuvre pour traiter du transport et de la dispersion des polluants dans l'atmosphère, tout en rappelant les principales hypothèses, approximations et limitations des différentes méthodes.

Cet exposé théorique pourrait encore être enrichi par la suite en introduisant tout au long du texte ou dans un autre document, des exemples concrets et des calculs pratiques d'ordre de grandeur sur des configurations réelles. Pour cela, il faudrait réaliser une sélection des situations réelles sur la base des informations fournies par les tuteurs industriels (approfondissement de l'enquête débutée sur cette première année) et des cas tests disponibles dans la littérature (acquisition des données). Il faudrait également disposer des outils de

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 1^{ère} partie : Etat de l'art.

modélisation retenus en collaboration avec les tuteurs industriels pour réaliser des comparaisons entre les différentes approches et acquérir une sensibilité suffisante sur le type d'outil à mettre en œuvre pour répondre à un problème précis. Ce travail permettra en particulier d'établir un lien direct entre la théorie sur la dispersion atmosphérique et la pratique d'utilisation des modèles sur des cas concrets.

8.2. BILAN DES SITUATIONS À MODÉLISER

Les principaux résultats de l'enquête menée auprès des tuteurs industriels montrent que l'on doit prendre en compte une grande diversité de situations à modéliser (effets de bâtiment, de relief, de la stratification de l'atmosphère, de dépôt, ...). Toutefois, le domaine d'étude reste inférieur à une centaine de kilomètres et les temps caractéristiques se rapportent autant à l'étude des fluctuations de concentration (odeurs) qu'à des moyennes horaires et annuelles. Les motivations des études de dispersion correspondent à la demande réglementaire (besoin de modèles opérationnels capables de traiter un grand nombre de situations), mais aussi à des demandes plus spécifiques (plaintes, dimensionnement des installations, ...) qui peuvent éventuellement s'appuyer sur des modélisations plus performantes. Les modèles mis en œuvre concernent le plus souvent des approches semi-empiriques de type gaussien.

Les attentes des tuteurs industriels par rapport à cette étude concernent plus particulièrement une meilleure compréhension des différents phénomènes physiques agissant sur le transport et la dispersion des polluants et des différentes modélisations à utiliser en fonction du problème à traiter. Il est également ressorti des discussions un besoin de disposer d'approches de modélisation qui soient agréées par le Ministère chargé de l'Environnement.

Les situations à modéliser devront être définies plus précisément en collaboration avec les tuteurs industriels en particulier afin de répondre le plus directement et le plus efficacement possible à leurs attentes.

8.3. INVENTAIRE DES MODÈLES

L'inventaire des modèles de dispersion atmosphérique réalisé dans le cadre de cette étude a permis de recenser 82 modèles. Cet inventaire est loin d'être exhaustif, mais il regroupe tout même un éventail assez large de types de modèles. La recherche a été orientée dans un premier temps vers des organismes reconnus au niveau mondial qui recommandent dans leur pays d'origine un certain nombre de modèles ou de méthodes de modélisation (Environment Protection Agency, Finnish Meteorological Institute, TNO. ...) Dans un deuxième temps, nous avons orienté nos recherches vers des bases de données déjà constituées (European Protection Agency, Office of the Federal Coordinator for Meteorological Services and Supporting Research, ...), puis dans un troisième temps vers les organismes de recherche, grandes écoles et université. La description de chaque modèle recensé a été réalisée sur la base des documentations obtenues sur internet et au moyen d'un ensemble de critères permettant en particulier de décrire les types de modélisation, le champ d'application, les principaux phénomènes physiques pris en compte et un ensemble de renseignements administratifs. Les informations ainsi recueillies ont été rassemblées dans une fiche par modèle (document annexe intitulé : « Fiches de présentation des modèles de dispersion atmosphérique »). Des tableaux de synthèses ont également été présentés afin de regrouper l'ensemble des modèles recensés dans différentes catégories (champ d'application, prise en compte des phénomènes physiques, ...). La classification des modèles proposée dans ce rapport, ne consistait pas à les ranger du meilleur au moins bon, mais plutôt d'identifier clairement sur quel type de modélisation ils s'appuient, quel est leur domaine d'application, et quels sont les principaux phénomènes physiques qu'ils sont capables de reproduire.

Rappelons que l'un des objectifs de cette étude était de proposer quelques modèles à retenir pour une évaluation plus détaillée par la suite. L'inventaire réalisé sur la base des documentations disponibles sur internet a permis d'effectuer une classification grossière des 82

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 1^{ère} partie : Etat de l'art.

modèles recensés en fonction des critères retenus. Malheureusement, il sera très certainement difficile dans l'état actuel de cet inventaire, de sélectionner pour chaque critère, les modèles qui sont les plus représentatifs et les plus performants. Afin de réaliser tout de même une première sélection de modèles, nous proposons la démarche suivante :

- **Sélection de quelques modèles d'ancienne génération** : l'objectif ici est de conserver un état de référence représentatif des études passées qui constituera un point de départ de l'évaluation des modèles sur des cas tests. L'objectif est également de conserver le savoir-faire actuel des industriels et des bureaux d'études pour permettre une évaluation directe des gains et des avantages liés à l'utilisation de modèles plus évolués. Le choix de modèles d'ancienne génération portera en particulier sur des modèles gaussiens utilisant des paramétrisations des écarts-types de dispersion par classes (Doury, Pasquill, ...).
- **Sélection de quelques modèles de référence** : il existe un certain nombre de modèles qui sont explicitement recommandés par des organismes officiels pour répondre à des situations particulières de dispersion atmosphérique. C'est en particulier le cas des modèles recommandés par l'EPA (AERMOD, CALPUFF, CALINE3, ...). Nous proposons donc d'en retenir quelques uns qui répondront en particulier directement à des situations typiques retenues.
- **Sélection de quelques modèles représentés au niveau national** : nous proposons de retenir les modèles commercialisés et supportés techniquement en France, les plus utilisés dans le cadre des applications industrielles concernant cette étude. L'intérêt ici réside surtout dans le fait de pouvoir bénéficier d'un support technique et d'un prestataire implanté au niveau national. Le choix portera sur des modèles comme ADMS-3, ARIA-IMPACT ou dans un type différent, DRAG&FLY, FLUIDYN-PANACHE, ARIA-LOCAL, ...
- **Sélection de quelques modèles de nouvelle génération ou de recherche** : des modèles gaussiens de nouvelles générations sont déjà utilisés pour des études industrielles (ADMS-3, AERMOD, ...) ou dans le domaine du nucléaire (modèle Franco-Allemand). Ils en existent d'autres qui sont le plus souvent encore en développement dans les organismes de recherche et qui permettront à terme de prendre mieux en compte certains phénomènes (champ très proche des sources, fluctuations, vent calme, chimie atmosphérique ...). On peut par exemple citer les modèles TAPM, LADM (CSIRO en Australie), METPHOMOD (EPFL en Suisse), PPM de Peter de Haan, ... L'objectif ici est de disposer de modèles capables de répondre à des situations de dispersion particulières non encore ou mal pris en compte dans les modèles actuels et d'assurer une veille scientifique et technique sur le développement des modèles de nouvelle génération adaptés à ce contexte d'études industrielles.

8.4. INVENTAIRES DES CAS TESTS

Dans cette étude, nous avons précisé les différents critères à retenir pour sélectionner par la suite des expériences de terrain ou sur maquette qui serviront de cas tests pour évaluer les modèles. Nous avons également réalisé un premier inventaire des bases de données existantes et identifié les différents cas répondant aux critères sélectionnés. Les données contenues dans ces bases de données peuvent pour la plupart être obtenues sur simple demande (Model Validation Kit par exemple). D'autres expériences pourront être recherchées par la suite dans la littérature scientifique.

Le choix définitif des cas tests devra se faire sur la base des modèles sélectionnés et des situations à modéliser.

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

Summary: This study aimed to write a state of the art on the modelling of the dispersion of the industrial atmospheric emissions. It proposes in particular a reminder of the theoretical bases on which the transport and the dispersion of the pollutants emitted in the lower atmosphere rest: **turbulent dispersion, local meteorology and atmospheric dispersion**. These theoretical elements constitute an essential base to be able to interpret and implement respectively results and modelling tools. The various types of modelling are also reminded as well as the assumptions and the main limitations relating to each type of modelling. An investigation near the industrialists enabled us to better determine the problems of the industrial atmospheric emissions and to determine the limits of the studies. An inventory of 82 models of transport and atmospheric dispersion for a broad range of situations was realised. This inventory makes it possible to have a rather total idea about the current models and their applications. The criteria retained for the description of the models made it possible to carry out a classification of the models according to various parameters like the type of modelling, the field of application and the main physical phenomena taken into account. Lastly, some validation databases were presented. These databases should make it possible thereafter to constitute validation cases for the training of the models in various typical configurations.

Mots-clés : pollution atmosphérique, dispersion, couche limite atmosphérique, rejets industriels, inventaire de modèles

Keywords : atmospheric pollution, dispersion, atmospheric boundary layer, industrial releases, model inventory

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

CONTENTS

1. Introduction	4
1.1. Context of the study	4
1.2. Reminder of the work suggested over the first year	5
2. Turbulent dispersion	6
3. Local meteorology	7
4. Atmospheric dispersion	8
5. Analyse and synthesis of the situations to be modelled	11
6. Inventory and description of the existing models	12
7. Inventories of the validation cases	13
8. Conclusions and perspectives	13
8.1. Theoretical part	14
8.2. Assessment of the situations to be modeled	14
8.3. Inventory of the models	15
8.4. Inventories of the validation cases	16

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

1. INTRODUCTION

1.1. CONTEXT OF THE STUDY

Association R.E.C.O.R.D entrusted to the Laboratory of Mechanics Fluids and Acoustics of the Ecole Centrale de Lyon, with a study relating to the dispersion of the chronic atmospheric emissions of a factory site corresponding to a normal operation of the installations.

Within the framework of the regulation on the atmospheric emissions of pollutants, the industrialists have to realise or realise impact studies which require to determine the transport and the dispersion of the rejected materials. The object of these studies consists particularly in showing that the ground level concentrations due to the rejections considered, remains lower than thresholds of concentrations or amounts of the various emitted products. For that, it is necessary to take account of the initial state which corresponds to background pollution without the emissions of the factory site concerned. It is then necessary to determine the impact of the site itself by means of tools able to take into account the transport and the dispersion of the atmospheric pollutants emitted by the factory site.

The industrialists have also to make studies of transport and dispersion to answer very specific, technical problems (dimensioning of the installations, effectiveness of new processes of reduction of the pollutant emissions) or relating to complaints of residents (problem of odours) or even to forecast concentrations in real time.

All these impact studies thus require to use modelling tools which must be adapted to the problem to treat (standard rejection, pollutants...) and to take account of the main singularities of the sites (topographic complexity, geographical situation, local weather conditions...). There is today a multitude of modelling tools going from simplest (rectilinear Gaussian models) to most complicated (3D numerical simulation, physical modelling in wind tunnel or hydraulic flume), from the "home model" and the models available freely on the Internet to the commercial software, and it is not always easy, for people not specialists in this field, to make a choice. It is also not always easy to take in hand a modelling tool, directly on a practical study, without to have acquired as a preliminary a certain sensitivity of the parameters and physical assumptions of the model compared to the problem to be treated. Lastly, it is also difficult to analyse results coming from studies subcontracted at engineering company, especially when one does not know the main characteristics of the models used by subcontractor.

It is partly for these various reasons that Association R.E.C.O.R.D. and the LMFA decided to establish a research program aiming in the long term to the establishment of a guide for the user of the modelling of the dispersion of the industrial emissions. The total project suggested over a period of about 3 years comprises three one year duration phase each one:

- a first phase on the state of the art in this field.
- a second phase of evaluation of the models on validation cases obtained by field or wind tunnel studies.
- a third phase of study of some generic cases.

The results awaited at the end of the general study relate mainly to the establishment of a guide of recommendations and a simulation platform concerning the modelling of the dispersion of the atmospheric emissions of a factory site, for industrial users:

- Choice of the type of modelling according to the situation to be treated (1st year).
- Evaluation of the models and validation kit for a better training of the modelling tools (2nd year).

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

- Study of generic cases for a fast evaluation of the awaited results. Calculations of order of magnitude (3rd year).

1.2. REMINDER OF THE WORK SUGGESTED OVER THE FIRST YEAR

The work of the first year aims to establish a state of the art in the field of modelling, the transport and the dispersion of the atmospheric emissions of a factory site. It consists in collecting the current scientific knowledge in this field and putting it in correspondence with the various real situations to treat and with the models available or not on the market, in order to retain and to use the best adapted tool to meet the needs for the study. Work suggested breaks up into four phases:

1. *Theoretical reminders:* The modelling of the air pollution requires to know some basic concepts on turbulent dispersion (chapter 2), on local meteorology (chapter 3) and on atmospheric dispersion (chapter 4). It is especially significant to be able to establish the link between the physical processes of transport and dispersion in the atmospheric boundary layer and the various approaches used in the models of dispersion. It is necessary also to well understand the assumptions which are behind each type of model to allow a judicious choice, answering the problem as precisely as possible. It is finally necessary to have a sufficient expertise to be able to interpret the results of simulations.
2. *Information on the various situations to be modelled:* The aim is to establish the most exhaustive inventory of various data necessary for the modelling of the air pollution (meteorological data, topography of the site, conditions of rejection, localisation of the receptors...), indicating those which are typically available. The aim is also to establish an inventory of the parameters to be calculated, answering the stresses of the study. In addition, the needs of the industrialists in modelling of dispersion will be evaluated most finely as possible so that this state of the art answers directly their waitings. It is clear that today, all the problems are not solved and that there are still needs which come under the field of research. It is in particular the case of the dispersion of dust and the odours. It is important to identify clearly the limits between what is solved, what can be solved under some simplifying and not penalising assumptions, and what cannot be solved and still requires research.
3. *Assessment on the various existing models:* It is proposed here to make an inventory of the models of dispersion on the basis of technical documentation of the software. From this inventory, several analyses could be made. They will aim in particular at establishing a classification of the models according to various parameters like the type of modelling, the field of application, the taking into account of particular physical phenomena.... At the end of this work, some models to be retained will be proposed. A card by model will be drawn up as well as tables of comparison between the characteristics of the models. Information concerning the suppliers of software, the possibilities of technical support and the prospects for evolution of the models will be also included.
4. *Assessment on the validation cases:* There exists in the literature many references to field or wind tunnel experiments which can right now constitute a first series of validation cases directly applied to the chronic industrial emissions or more general for this type of application. Some of these references were used besides for the development and the implementation of some models. It will be also useful to identify additional validation cases, to study in wind tunnel or in the field, corresponding more precisely and more specifically the industrial situations.

In the following chapters, we present the theoretical elements necessary to the comprehension of the processes of transport and dispersion of the atmospheric pollutants (chapters 2, 3 and 4), the analysis and the synthesis of the situations to be modelled (chapter 5), an inventory and a description of the models (chapter 6) and a first assessment on the experimental databases likely to provide validation cases (chapter 7).

2. TURBULENT DISPERSION

This chapter presents the physical phenomena, the theoretical concepts and the techniques of modelling relating to turbulent dispersion. The problem of turbulent dispersion was tackled from a general point of view, in a context broader than that of atmospheric dispersion. The application more specific to the atmosphere is exposed in chapter 4

The study of the distribution of a species in a fluid, in particular when this one is in flow, rests on the concept of **concentration**. The evolution of the concentration is due to the phenomena of **advection** by the flow and **molecular diffusion**. **Turbulent dispersion** is a mechanism which results from the combined effect of the advection and the molecular diffusion. It is a process of dilution much more effective than the molecular diffusion. It depends on the turbulent characteristics of the flow.

The equation of advection-diffusion is the equation of evolution of the concentration. In the case of a turbulent flow without mean velocity and of a point instantaneous rejection, it admits **an analytical solution** for the concentration in the form of a Gaussian **distribution** in space. The dispersion of a cloud of pollutant is influenced by the various scales of turbulence present in the form of eddies in the flow. The eddies of size lower or equal to the cloud contribute to the mechanism of **relative diffusion** (diffusion of an instantaneous cloud around its centre of mass). The eddies larger than the instantaneous cloud contribute to the displacement of its centre (**diffusion of the centre of mass**). The total diffusion, corresponding to **the overall average** on a great number of **realisations** of the dispersion of the instantaneous cloud, corresponds to the sum of the relative diffusion and the diffusion of the centre of mass.

The difference between a particular realisation and the average behaviour of the cloud define the concept of **fluctuation of concentration**. In the vicinity of the source, the fluctuations are mainly due to the diffusion of the centre of mass (phenomenon of meandering) whereas for more significant times of diffusion, they are due mainly to the relative diffusion.

A mean velocity gradient can strongly increase turbulent dispersion in the direction normal to the gradient.

There are mainly four **techniques of modelling** of turbulent dispersion:

- **Gaussian models:** they are based on analytical solutions of the equation of advection-diffusion coupled with semi-empirical parameterisations of the main physical phenomena. One distinguishes the plume models and the puffs models. The Gaussian models provide a fast modelling adapted to the operational studies but do not allow to treat complex flows directly.
- **Lagrangian models:** based on the follow-up of the trajectories of a great number of particles in the flow, they make it possible to model the influence of turbulence on dispersion. Coupled to a puff model, they can make it possible to determine the fluctuations of concentration. The computing time can nevertheless be significant when one studies a great number of sources.
- **Eulerian models:** based on the resolution of the equation of advection-diffusion on a mesh, these approaches make it possible to take into account all the complexity of the flow. They can however be expensive in computing times and are not adapted in the vicinity of the sources.
- **Experiments in wind tunnel or in hydraulic flume:** based on the principles of similarity (reproduction of the phenomena on models at reduced scale), they make it possible to take into account very complex turbulent flows. They are however limited to the study of the atmospheric boundary layer on local scales (lower than a few kilometres).

3. LOCAL METEOROLOGY

The meteorological phenomena constitute the vector of the pollutants transported in the atmosphere. To understand and model atmospheric dispersion, it is thus essential to describe the main meteorological phenomena, in particular at a local scale.

The atmosphere can be broken up into several horizontal layers. The lower part of the atmosphere, inside which the effects of the ground are significant, constitutes **the atmospheric boundary layer (ABL)**. The variables usually used to describe the atmosphere are:

- **The speed of the wind:** in the atmosphere, the flow of the wind is **turbulent** which is characterised by chaotic velocity fluctuations in space and time.
- **The pressure:** the pressure decrease with altitude under the effect of gravity (**hydrostatic balance**).
- **The temperature:** the temperature decrease with altitude. The vertical variation in temperature makes it possible to characterise **the stability** of the atmosphere. In a **neutral state** there is no action of the buoyancy effects on the vertical movement of the air. In a **stable state** the movement and turbulence in the vertical direction are attenuated by the forces of buoyancy. In an **unstable state** the vertical movements and turbulence are amplified.

The meteorological phenomena cover a **broad range of space and temporal scales** which do not have all the same influence on the dispersion of pollutants. It will be considered that the internal phenomena within the ABL have a direct influence on the short-term dispersion of industrial wastes while the phenomena of greater scale can be taken into account through some particular parameters. Among the phenomena which can be parameterised, one can quote **the radiative effects**, the presence of **moisture** or the effect of **the force of Coriolis**.

The structure of the ABL depends mainly on the state of stratification of the atmosphere, which evolves with time. From a dynamic point of view, one distinguishes within the ABL, **the surface boundary layer (SBL)** and the **Ekman layer**. From a thermal point of view, the ABL consists of the surface boundary layer associated with **the mixing layer** during the day (unstable atmosphere) and of the surface boundary layer associated with **the residual layer** during the night (stable atmosphere).

The velocity profile in the ABL depends partly on the **friction on the ground**. The more significant this friction is, the more the velocity profile is sheared. It is also the friction which is at the origin of **mechanical turbulence**. The intensity of friction depends on **the aerodynamic roughness** of the ground, for which there are typological and morphometric models.

The thermal state of stratification led to the production (**unstable state = strong turbulence**) or to the destruction (**stable state = weak turbulence**) of turbulence. That modifies the velocity profile and the properties of the boundary layer. The characteristics of the surface boundary layer in stratified atmosphere, on a uniform flat ground, can be described by **the theory of similarity of Monin-Obukhov**

On a heterogeneous ground, specific behaviours appear, such as **internal boundary layers**, **coastal breezes** or the phenomena of **heat island**.

The presence of **relief appreciably modifies the flow** compared to the case of a flat ground. The behaviour of the flow on a relief depends on the thermal stability of the atmosphere. In the case of a isolated hill, the air tends **to rise to cross the relief in neutral atmosphere** and to circumvent **it in stable atmosphere**. Thermal phenomena like **breezes** can also develop on the slopes of the reliefs, in particular within the valleys.

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

The methods of modelling the flow on relief can be classified in the following way:

- **Diagnostic models:** one distinguishes **the linearised models** and **the models of conservation of the mass**.
- **Prognostic models:** the **hydrostatic models** and the **non-hydrostatic models** are distinguished.

At smaller scale, **the obstacles or the buildings** also disturb the flow in the surface boundary layer. In the case of an isolated obstacle, the flow **circumvents the obstacle upstream**, forms **a recirculation** in the close wake and **an area of velocity defect** in the far wake. The influence of an obstacle is stronger downstream than upstream of this one. This influence decreases when one moves away from the obstacle.

When several obstacles interact (**group of obstacles**), one observes **a global reduction of the velocity** due to the drag of the obstacles and **a modification of turbulence** of the flow.

One can distinguish three types of methods of modelling the flow around obstacles:

- **Parametric approaches**
- **Simplified models**
- **Three-dimensional eulerian models**

4. ATMOSPHERIC DISPERSION

In this chapter, we presented a summary of theoretical and empirical knowledge on the material dispersion in the atmospheric flows. In order to understand the role played by the various phenomena, we started with the "simple" case of dispersion in a neutral atmosphere, on a flat ground, starting from a point source. Then we described various more complex effects which can modify the behaviour of the plume and the concentrations observed: the thermal stratification, the nature and initial conditions of the rejection, the influence of the relief and the buildings, deposition phenomena, fluctuations of concentration.

We finally presented a synthesis of the methods available to model the atmospheric dispersion which we summarise thereafter.

Approaches of modelling

There are three main categories of models of dispersion:

- **Gaussian models:** they are based on the analytical solutions of the equation of advection-diffusion. One distinguishes the Gaussian plume models and the Gaussian puffs models. In this type of models, the majority of the dispersion and physicochemical processes are taken into account using specific parameterisations, without resolution of the equations. These models are well adapted to operational studies (calculation in real time, impact study) because they require limited computing times and thus allow the study of a great number of cases. They provide acceptable results in the situations for which they were parameterised (it should be noted that parameterisations available vary from one model to another). They are however not easily usable in situations of very complex flow (relief, multiple obstacles) or when it is necessary to treat complex physicochemical processes.

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

- **Lagrangian models:** they are based on the calculation of the turbulent trajectories of a great number of particles representing the pollutant. They are generally coupled with an eulerian model which calculates the wind field in which dispersion arises. They make it possible to take into account dispersion but adapt with difficulty to the description of physicochemical processes. They can be used for impact studies but not for simulations in real time. The results obtained with this approach are generally good and well adapted to the area close to the sources. They are however not adapted to treat a great number of sources (very significant computing time).
- **Three-dimensional eulerian models:** they are based on a numerical resolution of the equation of advection-diffusion on a mesh of space. They are generally coupled with an eulerian model which determines the wind field (often on the same mesh). They are not adapted for simulations in real time and their use for impact studies must be considered once the other approaches showed their limits. Indeed, the computing times of a eulerian model are often very significant and not easily compatible with operational studies. An eulerian model provides good results, except for the field close to the sources where the assumptions carried out result in over-estimating the diffusion.

All the preceding models of dispersion need input data for the meteorological conditions. One distinguishes for that two approaches:

- **The meteorological pre-processors** which are used to calculate the various variables describing the state of the atmosphere, in particular with regard to the thermal stability and the turbulence of the flow. The pre-processors are generally adapted to use data coming from measurements on the ground.
- **The use of a of three-dimensional wind field** obtained using a model of flow.

A model of dispersion can also be coupled with a model of emission, which calculates the quantities of pollutants rejected by specific activities (example of the models of traffic).

Quality of the results

The conclusions exposed in the preceding paragraph, concerning the quality of the results provided by the various approaches of modelling, must be the subject of some reserves. Indeed, the quality of the results of a model of dispersion depends on many factors relating to the model in itself, but also to the way in which it is implemented. These various factors are:

- **The intrinsic quality of the model:** the intrinsic quality of the model is its capacity to simulate the phenomenon for which it was developed. This aptitude depends on the simplifying assumptions carried out in the constitution on the model and on the techniques used to solve the simplified problem.
- **The adequacy between the model and the problem to be treated:** sometimes, a model can be excellent to treat a particular situation and can not be adapted to other situations. If it is used out of its context, it will thus give erroneous results.
- **The quality of the data used:** a model uses input parameters. If these parameters have a large uncertainty, the result of simulation has great chances to be not precise. This problem arises in particular when a model of dispersion uses a wind field obtained using another model. The quality of the model of dispersion depends then enormously on the quality of the model of flow. In the same way, it is not useful to implement a very powerful model when one does not have the sufficient input data to initialise it.

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

- **The expertise of the user:** the expertise of the user is essential in the analysis of the problem to be treated, in the choice of the model of dispersion, in the implementation of the model and in the interpretation of the results.

In the preceding paragraph, we indicated only the intrinsic quality of the model. It is necessary to be conscious that a "good" model is not enough to provide good results. It is in general the good adequacy of the four preceding factors, which makes it possible to obtain the best results. To illustrate this point, it is interesting to analyse the results of the exercises of intercomparison and validation of models of dispersion, which are regularly carried out by the scientific community. It is not rare to observe that two users, using the same model and seeking to simulate the same episode, obtain results for the concentration different from a factor of 10 !

Types of use of a model

The applications of a model of dispersion can be classified according to the operational stresses relating to the context of the study (computing time, facility of use...). These stresses result in seeking models able to provide a result in a given time. Taking into account the diversity of the encountered problems (for example, the concept of "forecast" can have different significances according to people's), it seemed difficult to us to propose a classification of the models according to the applications which they would be able to treat. It appeared more reasonable to us to classify them according to time necessary to simulate a scenario given (a scenario is a set of weather parameters, of emission... For example, it will be the study of a source, a direction of wind, a class of stability, a rate of rejection...). It thus returns to each one to define which are its operational requirements and to deduce the most suitable model for it. This classification is presented in Table 1:

	Gaussian model	Lagrangian model	Eulerian model
CPU time for a scenario	< 1 minute	A few minutes to 1 hour	> 1 hour

Table 1 Order of magnitude of the computing times necessary for a scenario, for the various types of models.

Phenomena taken into account

The phenomena taken into account by the various approaches were summarized in Table 2. We also indicated the "quality" of the methods used. It should be noted that none the phenomena considered is taken into account "by defect" in these models. It will thus be advisable to check for each model the described phenomena. Moreover, the methods used to take into account these phenomena vary from one model to another. The provided indications are very indicative and will have sometimes to be moderated.

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

	Gaussian plume model	Gaussian puff model	Lagrangian model	Eulerian model
Thermal stratification	A Parameterisation of the standard deviations	A Parameterisation of the standard deviations	A By the wind field	A By the wind field
Relief	B Specific parameterisation	B Specific parameterisation	A By the wind field	A By the wind field
Obstacles	B Specific parameterisation	B Specific parameterisation	A By the wind field	A By the wind field
Deposition	B Specific parameterisation	B Specific parameterisation	A Law of wall (dry deposition) and parameterisation of the wet deposition	A Law of wall (dry deposition) and parameterisation of the wet deposition
Particles	B Parameterisation of sedimentation	B Parameterisation of sedimentation	A Specific parameterisation	A Specific parameterisation
Radioactivity	B Parameterisation of the radioactive evolution	B Parameterisation of the radioactive evolution	B Parameterisation of the radioactive evolution	A Parameterisation of the radioactive evolution
Chemistry	C Not adapted	B Parameterisation of simple chemistry	B Chemical module	A Chemical module
Fluctuations and odours	C Not adapted	A Coupling with a Lagrangian model	A Coupling with a puff model	A Conservation equation of the variance

Table 2 Phenomena taken into account in each type of model. The bold type indicates the quality of the method (A = reproduced the phenomenon well; B = not really adapted but can be enough for an impact study; C = not adapted). The type of method used is then described.

5. ANALYSE AND SYNTHESIS OF THE SITUATIONS TO BE MODELLED

In this chapter, we carried out an inventory of the situations to be studied and of the data necessary and available.

The inventory of the situations of industrial atmospheric emissions aimed to identify and characterise the most current situations with an aim of making studies of dispersion. The analysis mainly related to the motivations of the studies (regulatory, complaints, techniques, forecast), the configurations of rejections (site and form of the rejection, nature of the rejection and conditions of rejection) and the typologies of reliefs (site of plain, valley, of mountain...) and of obstacles (isolated obstacle, factory site in rural or urban area...). In addition, an investigation near the industrial tutors was carried out in two stages:

- a first telephone contact made it possible to better determine the needs and waitings of the tutors;
- a second stage by paper questionnaire aimed to better define the various situations to be modelled.

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

To date, all the tutors were contacted by telephone except Renault and Solvay (very recently interested by the project) and we received four questionnaires out of nine sent (Atofina, Gaz de France, Solvay and Tredi). The questions concerned the three points briefly presented previously, namely which were the motivations of the studies, the configurations of rejections and typologies of the sites. They also aimed at determining how (by own means, subcontracting at a engineering company) and with which model (own development, commercial models), are made the studies of dispersion. It was requested from the industrial tutors to answer overall the questionnaire on the whole of the situations which they have to treat. This questionnaire can also be used, like an aide-mémoire, to characterise the situation to be modelled.

It comes out from this investigation that the motivations of the studies relate to all the points evoked previously and that the studies are carried out either in-house by models implemented by the industrialists, or sub-contracted at engineering companies. The models used are generally based on semi-empiric approaches of Gaussian type but also for some others, on numerical models. The field of application of the models remains lower than a hundred kilometres with temporal scales characteristic of the atmospheric fluctuations, hour and year. The variables to be calculated are in particular the average concentration, the chemical percentiles, fluctuations and chemical doses. The conditions of rejections relate to all the types of emissions (stack emissions, fugitive or diffuse emissions, plume of condensation). Lastly, the field of investigation for typologies of reliefs and obstacles is very broad. It goes from simplest, flat relief, isolated building with more complicated, relief of mountain, factory site.

At the time of this investigation, we also asked the industrialists to specify their waitings compared to this first study. It arises from the discussions a real need to better apprehend the influence of the various physical phenomena on the dispersion of the pollutants, the importance of the parameters like topography and better being able to evaluate the consequences of certain assumptions of modelling on the results. For the industrialists already having an experiment on the modelling of dispersion, they await this information of the theoretical study as well as a classification of the models of dispersion. For the others, the final request is identical, but before that, it is especially a question of being able to bring a critical analysis on the work provided by the engineering companies, then of being able to obtain in-house means. It also arises from the discussions a need to have approaches for modelling which are approved by the Ministry in charge of the Environment.

6. INVENTORY AND DESCRIPTION OF THE EXISTING MODELS

One has today a very great number of models allowing to simulate the dispersion of the pollutants in the atmosphere and it is very difficult, even impossible, to draw up a completely exhaustive list of it. The inventory that we carried out gathers however a rather broad range of models making it possible to answer the problem of atmospheric dispersion in its quasi globality. From this very general inventory of models, we extracted those which answer the specific problems of the impact studies relating to the industrial chronic emissions. The inventory to date, was carried out on 82 models, from technical and commercial documentation collected in the scientific literature and on several Internet sites.

A first stage consisted in defining the various criteria selected to classify the models. These criteria make it possible in particular to have a general description of each model, various characteristics of the meteorological and dispersion models, information on the inputs and output of the models as well as administrative information and information on the validation of the models and the data-processing needs. A second stage made it possible to classify the 82 models according to the three types of approach of modelling of dispersion, namely, the Gaussian, Eulerian and Lagrangian models. Lastly, a third stage was more related to the classification of the models according to some criteria selected previously. This classification of the models related particularly on the space and temporal scales and the main phenomena taken into account such as the relief, the obstacles, the stratification of the atmosphere, the deposition on the ground, the chemistry. It also concerned information relating to the accessibility and the cost of the software.

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

7. INVENTORIES OF THE VALIDATION CASES

The use of the validation cases is of an interest at several levels:

- *On the level of the development of the models:* it is essential for the development of the models to identify the dominating physical processes for transport and dispersion of the pollutants in the specific context to study. It is also essential to determine the sensitivity of the parameters of influence of the problem arising.
- *On the level of the validation of the models:* once the model is operational, it is necessary to validate it on applications for which it was developed. In this context, there exists, according to the applications, some validation exercises which allow the validation itself of the models but also their inter-comparison.
- *On the level of the use of the models:* in a general way, the operational use of a model to answer a specific problem (regulatory study for example) is not made by a specialist in atmospheric dispersion. It is then useful to use validation cases, not too far away from the problems to treat, to allow the training of the users and to acquire a sufficient sensitivity about the significant parameters.

Within the framework of this project, the prime objective to be realised was to count the databases existing and available in the scientific literature, which will make it possible thereafter to constitute a catalogue of validation cases answering the problem arising. The second objective, was to identify the main criteria to be retained for the definition of the validation cases which will be used for the evaluation of the models selected but also for the formation of the users. A third objective, will be to precise the specific needs of the industrialists as regards experiments, not completely covered by the existing databases.

Many experimental databases obtained either in wind tunnel, or by series of measurement in the field already exist in the scientific literature and cover a broad range of applications. To only retain what interests the atmospheric emissions of a factory site, we defined criteria of selection related on the field of application, the topography of the ground and the conditions of rejection. Then we listed Internet sites which proposed an inventory of the existing databases. The interest of these databases is to be already directed towards the validation of the models of atmospheric dispersion and for the majority to propose evaluation methods of the models.

8. CONCLUSIONS AND PERPECTIVES

The total project suggested over a period of about 3 years had as initial objectives to carry out a state of the art on the modelling of the dispersion of the atmospheric emissions of the industrial wastes, to evaluate the models on validation cases representative of well identified industrial situations and to study some generic cases of the most current situations. The work of the first year had thus as objective to carry out a state of the art in this field. It consisted particularly in introducing the theoretical bases necessary to the comprehension of the physical processes relating to atmospheric dispersion and their modelling, and establishing a state of current scientific knowledge. This work also made it possible to establish an inventory and a classification of models of dispersion, on the basis of general documentation available in particular on Internet, an assessment of the industrial situations to take into account as well as a first inventory of the validation cases.

8.1. THEORETICAL PART

In chapters 2 to 4 we reminded the theoretical elements essential for the comprehension of the processes of transport and dispersion of the atmospheric pollutants in the lower atmosphere. Chapter 2 had the aim of presenting the physical phenomena, the theoretical concepts and the techniques of modelling relating to turbulent dispersion. The problem of turbulent dispersion was tackled here from a general point of view, in a context broader than that of atmospheric dispersion. This chapter in particular made it possible to introduce the concepts of advection and diffusion of a substance into a fluid flow. It also made it possible to introduce the main approaches of modelling of turbulent dispersion: Gaussian models, Lagrangian models, Eulerian models and physical modelling on model in laboratory. Chapter 3 had the aim of reminding some concepts of local meteorology, on a flat ground, a relief and in the presence of obstacles. The dispersion of the atmospheric emissions of a factory site at this scale, is due mainly to the action of the wind and the turbulence which transport and dilute these pollutants. In order to be able to understand the mechanisms of atmospheric dispersion, it was thus necessary to point out and describe the characteristics of the atmosphere and the main meteorological phenomena. Lastly, chapter 4 had the aim of presenting a summary of theoretical and empirical knowledge on the material dispersion in the atmospheric flows. Here the aim was to understand the role played by the various physical phenomena involved in the atmospheric dispersion of a plume of pollutants.

This theoretical part gives a relatively complete description of the main physical phenomena which are behind the problem of the modelling of atmospheric dispersion on local scales. It also gives a relatively detailed description of the main types of modelling implemented to treat transport and dispersion of the pollutants in the atmosphere, while pointing out the main assumptions, approximations and limitations of the various methods.

This theoretical part could still be enriched thereafter by introducing throughout the text or in another document, some concrete examples and practical calculations of order of magnitude on real configurations. For that, it would be necessary to select real situations on the basis of the information provided by the industrial tutors (continuation of the investigation begun over this first year) and the validation cases available in the literature (acquisition of the data). It would also be necessary to get the modelling tools retained in collaboration with the industrial tutors to carry out comparisons between the various approaches and to acquire a sufficient sensitivity on the type of tool to be implemented to answer a precise problem. This work will make it possible in particular to establish a direct link between the theory on atmospheric dispersion and the practice of use of the models on concrete cases.

8.2. ASSESSMENT OF THE SITUATIONS TO BE MODELED

The main results of the survey carried out near the industrial tutors show that one must take into account a great diversity of situations to be modelled (effects of buildings, of relief, of stratification of the atmosphere, deposition...). However, the field of study remains lower than a hundred kilometres and characteristic times refer as much to the study fluctuations of concentration (odours) that with hourly and annual averages. The motivations of the studies of dispersion correspond to the regulatory request (need for operational models able to treat a great number of situations), but also to more specific requests (complaints, dimensioning of the installations...) which can be possibly based on more powerful modellings. The models implemented generally relate to semi-empiric approaches of Gaussian type.

Waitings of the industrial tutors for this study more particularly relate to a better comprehension of the various physical phenomena acting on the transport and the dispersion of the pollutants and various modellings to use according to the problem to treat. It is also arisen from the

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

discussions a need to have approaches for modelling which are approved by the Ministry in charge of the Environment.

The situations to be modelled will have to be defined more precisely in collaboration with the industrial tutors in particular in order to answer most directly and most effectively possible their waitings.

8.3. INVENTORY OF THE MODELS

The inventory of the models of atmospheric dispersion realised within the framework of this study made it possible to count 82 models. This inventory is far from being exhaustive, but it gathers a rather broad range of types of models. Research was initially directed towards the organisations recognised on a world level which recommend in their country of origin a certain number of models or methods of modelling (Environment Protection Agency, Finnish Meteorological Institute, TNO...). In the second time, we directed our research towards data bases already made up (European Protection Agency, Office of the Federal Coordinator for Meteorological Services and Supporting Research...), then in the third time towards the organisations of research, large schools and university. The description of each listed model was carried out on the basis of the documentations obtained on Internet and by means of a whole of criteria making it possible to describe the types of modelling, the field of application, the main physical phenomena taken into account and a whole of administrative information. Information thus collected was gathered in a card by model (appendix document entitled: "Fiches de présentation des modèles de dispersion atmosphérique "). Tables of syntheses were also presented in order to gather the whole of the models listed in various categories (field of application, taken into account of the physical phenomena...). The classification of the models proposed in this report, did not consist in arranging them from the best to the worst, but rather to clearly identify on which type of modelling they rest, which is their applicability, and which are the main physical phenomena which they are able to reproduce.

Let us remind that one of the objectives of this study was to propose some models to be retained for more detailed evaluation thereafter. The inventory carried out on the basis of documentation available on Internet made it possible to carry out a coarse classification of the 82 models listed according to the criteria selected. Unfortunately, it will be doubtless difficult in the current state of this inventory, to select for each criterion, the models which are most representative and most powerful. In order to carry out a first selection of models, we propose the following step:

- **Selection of some models of old generation:** *the objective here is to preserve a state of reference representative of the last studies which will constitute a starting point of the evaluation of the models on validation cases. The objective is also to preserve the current knowledge of industrialists and engineering company to allow a direct evaluation of the gains and advantages related to the use of more advanced models. The choice of models of old generation will relate in particular to Gaussian models using of parameterisations of the standard deviations of dispersion by classes (Doury, Pasquill...).*
- **Selection of some models of reference:** *there is a certain number of models which are explicitly recommended by official organisations to answer particular situations of atmospheric dispersion. It is in particular the case of the models recommended by EPA (AERMOD, CALPUFF, CALINE3...). We thus propose to retain some of them which will answer directly typical situations selected.*
- **Selection of some models represented at the national level:** *we propose to retain the models marketed and supported technically in France, the most used within the framework of the industrial applications concerning this study. The interest here lies especially in the fact of being able to profit from a technical support and a company established at the*

Dispersion modelling of the atmospheric emissions of a factory site – Towards a user guide – 1st part : State of the art

national level. The choice will relate to models like ADMS-3, ARIA-IMPACT or in a different type, DRAG&FLY, FLUIDYN-PANACHE, ARIA-LOCAL...

- **Selection of some models of new generation or research:** *Gaussian models of new generations are already used for industrial studies (ADMS-3, AERMOD...) or in the field of the nuclear power (Franco-Allemand model). There exist some other models which are generally still under development in the research organisations and which will in the long term make it possible to better take into account certain phenomena (field very close to the sources, fluctuations, calm wind, atmospheric chemistry...). One can for example quote models TAPM, LADM (CSIRO in Australia), METPHOMOD (EPFL in Switzerland), PPM of Peter de Haan... the objective here is to have models able to answer particular situations of dispersion not yet or badly taken into account in the current models and to ensure a scientific and technical observation on the development of the models of new generation adapted to this context of industrial studies.*

8.4. INVENTORIES OF THE VALIDATION CASES

In this study, we specified the various criteria to be retained to select thereafter experiments in the field or on model which will be used as validation cases to evaluate the models. We also carried out a first inventory of the databases existing and identified the various cases answering the selected criteria. The data contained in these databases can for the majority being obtained on request (Model Validation Kit for example). Other experiments could be required thereafter in the scientific literature.

The final choice of the validation cases will have to be done on the basis of the selected models and of the situations to be modelled.

**MODELISATION DE LA DISPERSION DES EMISSIONS
ATMOSPHERIQUES D'UN SITE INDUSTRIEL
VERS UN GUIDE DE L'UTILISATEUR**

PHASE 2 : EVALUATION DES MODELES

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème}
partie : Evaluation des modèles .

TABLE DES MATIERES

1. Introduction	3
1.1. Contexte de l'étude	3
1.2. Les différentes étapes de l'étude	3
2. Présentation des modèles retenus	4
3. Etude de sensibilité	7
4. Présentation des résultats obtenus sur les cas tests	10
5. Etude des cas industriels	12
6. Conclusion	13

1. INTRODUCTION

1.1. CONTEXTE DE L'ETUDE

L'Association R.E.C.O.R.D. a confié au Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique de L'Ecole Centrale de Lyon (LMFA), une étude relative à la dispersion des émissions atmosphériques chroniques d'un site industriel correspondant à un fonctionnement normal des installations. Le contexte de l'étude concerne principalement la prise en compte de la modélisation du transport et de la dispersion des polluants atmosphériques dans les études réglementaires (études d'impact). L'objectif de la modélisation dans les études d'impact est en particulier de déterminer l'impact maximum au sol ou sur des cibles bien identifiées de rejets de polluants dans l'atmosphère. Plus précisément, il s'agit de localiser et de quantifier cet impact, soit pour des séquences météorologiques bien définies (impact à court terme), soit pour des périodes plus longues (impact à long terme).

Dans le cadre des études d'impact que les industriels doivent réaliser, il est donc important de pouvoir connaître la précision et les limitations des modèles mis en œuvre. Pour cela, il est nécessaire d'évaluer ces modèles afin de vérifier qu'ils feront bien les bonnes prédictions. L'évaluation doit porter sur les performances opérationnelles des modèles, mais également sur la physique qu'ils contiennent. Enfin, l'évaluation doit permettre de pouvoir distinguer les performances entre différents modèles. L'évaluation des modèles que nous avons réalisée s'est faite en plusieurs étapes. Une première étape a consisté à analyser les principes physiques mis en œuvre dans les différents modèles et les avantages et les limites de chaque modélisation ; cette partie fait l'objet du chapitre 2. Ensuite, nous avons identifié la sensibilité des modèles aux paramètres d'entrée (chapitre 3). Nous avons aussi évalué les modèles sur des cas tests (deux campagnes de terrain), les résultats de cette évaluation sont présentés au 4^{ème} chapitre. Enfin, nous avons utilisé les modèles sur des cas réels afin notamment de comparer l'intérêt d'une approche de modélisation par rapport à une autre (chapitre 5).

1.2. LES DIFFERENTES ETAPES DE L'ETUDE

Une première étude réalisée au cours des années 2001 et 2002 a permis d'établir un état de l'art dans le domaine de la modélisation du transport et de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel. Cet état de l'art comporte notamment des rappels théoriques sur la dispersion turbulente, la météorologie locale et la dispersion atmosphérique, ainsi que les modélisations associées. Cette étude a aussi permis de réaliser un inventaire des différents modèles de dispersion proposés sur le marché et de faire un bilan des bases de données expérimentales susceptibles de fournir des cas tests.

Le travail proposé sur la deuxième phase du projet avait pour principal objectif d'évaluer un nombre restreint de modèles sur des cas tests suffisamment documentés, représentatifs de situations typiques de dispersion dans l'atmosphère, et sur des cas réels plus proches des études d'impact réalisées par les industriels. Ce travail permet de répondre à un certain nombre de questions que se posent les utilisateurs concernant d'une part les performances des modèles et d'autre part la mise en œuvre de ces modèles sur des cas réels.

Pour réaliser cette étude, nous avons retenu cinq modèles.

- Un modèle de panache gaussien « deuxième génération » ADMS 3 distribué par NUMTECH
- Un modèle de panache gaussien « première génération » ARIA IMPACT
- Un modèle à bouffées gaussiennes TRAMES
- Un modèle lagrangien SPRAY
- Un modèle eulérien HERMES

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Ces 4 derniers modèles sont distribués par ARIA Technologies. Nous avons souhaité travaillé avec un troisième fournisseur de logiciel, TRANSOFT, mais après plusieurs discussions, ils n'ont finalement pas souhaité participer au projet.

La première étape d'évaluation des modèles consiste à étudier les possibilités de simulation qu'ils offrent à l'utilisateur et quelles sont les modélisations physiques associées.

La deuxième étape d'évaluation des modèles est l'étude de deux cas tests représentant des situations relativement courantes : un rejet sur un sol plat en milieu rural et un rejet à la cheminée en milieu urbain avec différentes stratifications (stable, neutre et instable). Elle permet de disposer de simulations commentées qui sont notamment utiles à la formation des utilisateurs et à la prise en main des modèles. Elle permet aussi d'établir une comparaison des possibilités et des fonctionnalités de chaque approche de modélisation et de réaliser un premier classement des modèles en fonction des problèmes à traiter. Elle permet enfin d'évaluer les modèles en fonction de leurs performances propres, sur des cas réels correspondant aux principaux phénomènes rencontrés.

Parallèlement à cette étude des cas tests, nous avons effectué une étude de sensibilité à partir des questions qui se posent à l'utilisateur quand il doit utiliser le modèle dans un cas concret. Elle permet notamment d'identifier et de quantifier les incertitudes sur les données de sortie en fonction de la qualité des données d'entrée dont on dispose pour réaliser les études.

Enfin, pour guider l'utilisateur dans sa démarche de modélisation d'un site industriel, nous avons élaboré une méthodologie d'analyse de la situation à modéliser. Cette méthode illustrée par l'étude d'un cas réel complexe permet en particulier aux industriels d'appréhender concrètement l'intérêt d'une approche de modélisation par rapport à une autre en fonction de la complexité de la situation à modéliser.

2. PRESENTATION DES MODELES RETENUS

Ce chapitre présente les différentes fonctionnalités des logiciels de dispersion que nous avons utilisés pour l'étude RECORD comme un nouvel utilisateur pourrait les découvrir. Nous analysons les différents modèles physiques qui sont appliqués pour calculer la dispersion. Enfin, nous présentons les données d'entrée nécessaires au modèle et comment l'utilisateur communique avec le logiciel.

- **ARIA IMPACT**

Le modèle ARIA IMPACT, distribué par la société ARIA Technologies, est un modèle de panache gaussien permettant de calculer l'impact au sol d'un rejet industriel à court terme et sur le long terme. La concentration au sol dépend de la vitesse du vent, de la hauteur du rejet et des écarts-types de diffusion. Ces écart-types de diffusion sont définis suivant des classes de stabilité dépendant des paramètres météorologiques (le vent, la température, la couverture nuageuse,...). La météorologie est considérée comme uniforme sur tout le domaine d'étude. Le modèle permet de prendre en compte le relief de façon très simplifiée, mais il n'est pas possible de prendre en compte les bâtiments. En revanche, un modèle à bouffées permet de prendre en compte les vents calmes. Les sources modélisées par ARIA IMPACT peuvent avoir différentes formes. Le modèle doit être renseigné sur le débit de la source, ainsi que la température et la vitesse du rejet pour calculer la surhauteur du panache. Plusieurs formulations de surhauteur sont disponibles. Les polluants sont des gaz inertes ou des particules et un calcul de dépôts secs ou humides est possible.

Les temps de calcul sont très courts, ils permettent de réaliser des études statistiques à long terme dans un temps raisonnable. Pour étudier une source avec un an de données météorologiques séquentielles, avec un pentium 4 à 3GHz et 1Go de RAM, il faut de 2 à 3 minutes.

L'avantage du modèle ARIA IMPACT est qu'il est rapide et facile à mettre en œuvre sur des situations où l'écoulement est simple. En revanche, il ne permet pas de modéliser des situations complexes d'écoulement perturbé par un relief ou des bâtiments.

- **ADMS 3**

Le modèle ADMS 3, distribué par la société NUMTECH, est un modèle de panache gaussien de deuxième génération qui permet de calculer l'impact au sol et en des points récepteurs à court terme et pour un calcul à long terme. Les écarts-types de diffusion sont définis suivant l'état turbulent de l'atmosphère. La stabilité de l'atmosphère est décrite de façon continue par des paramètres comme la hauteur de la couche limite ou la longueur de Monin Obukhov à partir des données météorologiques (le vent, la température, la couverture nuageuse ou le flux de chaleur sensible). Le modèle ADMS permet de prendre en compte des reliefs modérés (pentes inférieures à 20°) par le modèle diagnostique linéarisé FLOWSTAR et de modéliser des situations complexes comme des changements de rugosité dans le domaine d'étude ou la présence de bâtiments autour de la source. En revanche, le modèle ne permet pas de prendre en compte les vents inférieurs à 0.75m/s à 10m de hauteur.

Les sources modélisées par ADMS peuvent avoir différentes formes. Le modèle doit être renseigné sur le débit de la source, ainsi que la température et la vitesse du rejet pour calculer la surhauteur du panache. Les polluants sont des gaz inertes ou actifs, des particules ou des éléments radioactifs. Une prise en compte des dépôts secs ou humides est possible.

Les temps de calcul sont très courts, ils permettent de réaliser des études statistiques à long terme dans un temps raisonnable. Pour étudier une source avec un an de données météorologiques séquentielles, avec un pentium 4 à 3GHz et 1Go de RAM, il faut de 2 à 3 minutes. Les temps de calcul augmentent si on prend en compte le relief.

Le modèle ADMS permet de répondre à un grand nombre de problématiques liées à la dispersion atmosphérique (particules, relief, bâtiments,...) dans un temps raisonnable. Cependant, le module de relief est limité à des reliefs modérés et le modèle ne permet pas de traiter des phénomènes de vent calme.

- **La plate-forme ARIA INDUSTRY**

La plate-forme ARIA INDUSTRY distribuée par la société ARIA Technologies propose 3 modèles de dispersion : un modèle à bouffées gaussiennes (TRAMES), un modèle eulérien (HERMES) et un modèle lagrangien (SPRAY). Ces modèles permettent de calculer la dispersion d'un polluant dans un champ de vent tridimensionnel. Contrairement au modèle gaussien classique, ces modèles permettent de décrire des situations instationnaires comme un rejet non continu et l'évolution du polluant au cours du temps. Ce logiciel propose aussi un modèle météorologique de type diagnostique : MINERVE, qui permet d'interpoler des mesures météorologiques sur un maillage à trois dimensions. Le choix du modèle de dispersion est entièrement laissé à l'utilisateur.

- **Le modèle météorologique MINERVE**

Le modèle MINERVE est un modèle météorologique de type diagnostique qui permet, à partir de mesures de vent et de température en surface et en altitude, de reconstituer par une méthode d'interpolation qui tient compte du relief, les champs de vent et de température sur un maillage tridimensionnel régulier. Le champ de vent interpolé est ensuite ajusté pour remplir la condition de conservation de la masse.

- **TRAMES**

Le modèle TRAMES est un modèle à bouffées gaussiennes qui permet de simuler en 3 dimensions la dispersion des polluants atmosphériques issus d'une ou de plusieurs sources. Seul un calcul à court terme est possible. Le modèle est fondé sur le principe d'une formulation gaussienne qui permet de suivre dans l'espace et le temps l'évolution d'une bouffée. La trajectoire de la bouffée est calculée en intégrant le champ de vent calculé par MINERVE. Les écart-types des bouffées sont calculés à partir des formules de Pasquill, Briggs ou Doury définies suivant la classe de stabilité de l'atmosphère. Les effets de cisaillement verticaux ne sont pas pris en compte. Le modèle est donc limité à des reliefs modérés.

Les sources modélisées par TRAMES peuvent avoir différentes formes. Le modèle doit être renseigné sur le débit de la source, ainsi que la température et la vitesse du rejet pour calculer la surhauteur du panache. Les polluants sont des gaz inertes, des particules, des éléments radioactifs. Un calcul des dépôts secs ou humides est possible.

Les temps de calculs du logiciel sont moyens. Pour étudier la dispersion issue d'une source ponctuelle sur un maillage de 200*200 points sur une heure de météo, avec un pentium 4 à 3GHz et 1Go de RAM, il faut 10 minutes environ. Le temps de calcul dépend du nombre de bouffées à traiter.

Le modèle TRAMES permet de traiter des situations instationnaires dans un écoulement complexe dans un temps raisonnable. En revanche, le modèle n'est pas adapté à une situation où le gradient vertical du vent est fort.

- **HERMES**

Le modèle HERMES est un modèle eulérien qui permet de calculer à court terme la dispersion des polluants atmosphériques dans un écoulement complexe en résolvant les équations de transport d'un scalaire passif sur un maillage régulier à 3 dimensions. Des hypothèses de fermeture permettent d'estimer les flux turbulents. Le modèle s'applique à des domaines de 20 à 500 km. Le modèle HERMES est plutôt adapté à des études d'impact à l'échelle régionale.

Les sources modélisées par HERMES peuvent avoir différentes formes. Le modèle doit être renseigné sur le débit de la source, ainsi que la température et la vitesse du rejet pour calculer la surhauteur du panache. Les polluants sont des gaz inertes, des particules ou des éléments radioactifs. Une prise en compte des dépôts secs ou humides est possible.

Les temps de calcul sont beaucoup plus longs qu'avec un modèle gaussien, mais ils ne dépendent que de la taille du maillage et pas du nombre de sources. Pour traiter une source ponctuelle sur un domaine de 200*200 mailles de 50m et 25 niveaux verticaux, pour une heure de météo, il faut 15h de calcul avec un pentium 4, 3 GHz et 3 Go de RAM.

Le modèle HERMES permet de traiter simultanément un grand nombre de source dans un écoulement complexe. En revanche, la concentration au voisinage de la source est mal modélisée

- **SPRAY**

Le modèle SPRAY est un modèle lagrangien qui permet de simuler le transport, la dispersion et les dépôts de polluant dans un champ météorologique complexe. Le rejet de polluant est discrétisé en un nombre fini de particules lagrangiennes portant chacune une certaine masse de polluant. Chaque particule suit une trajectoire chaotique qui dépend de l'écoulement (calculé par MINERVE) et de son état turbulent. Il faut un grand nombre de particules lagrangiennes pour décrire toutes les trajectoires possibles du polluant. A un instant t, la distribution spatiale de ces particules permet de déterminer la concentration de polluant. Pour calculer les trajectoires des particules, on utilise un modèle stochastique, c'est-à-dire que les variations temporelles et spatiales des variables météorologiques sont considérées comme aléatoires. Les variables turbulentes sont calculées à partir des champs météorologiques issus du modèle MINERVE, de l'occupation des sols et des informations sur le rayonnement, la couverture nuageuse,...

Les sources modélisées par SPRAY peuvent avoir différentes formes. Le modèle doit être renseigné sur le débit de la source, ainsi que la température et la vitesse du rejet pour calculer la surhauteur du panache. Les polluants sont des gaz inertes, des particules ou des éléments radioactifs. Un calcul des dépôts secs ou humides est possible.

Les temps de calcul sont très longs. Pour traiter une source ponctuelle modélisée par un rejet de 2000 particules toutes les 10 s, pour 1 heure de météorologie, il faut 30 minutes de calcul avec un pentium 4, 3GHz et 3 Go de RAM.

Le modèle SPRAY permet de calculer la dispersion dans tous les types d'écoulements, quelle que soit leur complexité.

3. ETUDE DE SENSIBILITE

L'étude de sensibilité des processus de dispersion atmosphérique constitue une étape dans la démarche d'évaluation des modèles mise en place dans le cadre de cette étude.

- L'étude de sensibilité permet d'évaluer l'influence des différents phénomènes physiques sur la concentration en polluants, afin de déterminer les conséquences d'une non prise en compte de ces phénomènes dans les modèles.
- L'étude de sensibilité permet également d'évaluer l'impact sur les concentrations calculées d'une erreur ou d'une incertitude sur les données d'entrée du modèle.
- Cette étude permet enfin aux utilisateurs des modèles d'acquérir une expérience des phénomènes influençant la dispersion, afin de minimiser leurs erreurs dans la mise en œuvre de ces outils.

Sur le plan pratique, l'étude de sensibilité consiste à évaluer l'impact sur la concentration des différents paramètres caractérisant le problème étudié : émissions, météorologie, site. L'étude a été menée en considérant successivement ces trois grandes familles de paramètres. La démarche est cependant rendue complexe par l'interdépendance entre les différents paramètres. Dans le cadre de cette étude, nous avons essayé, dans la mesure du possible, de mettre en évidence les relations entre les paramètres considérés.

De plus, cette étude de sensibilité vise à évaluer l'influence de différentes méthodologies de mise en œuvre des modèles sur les résultats finaux. L'étude de sensibilité fournit aux industriels des éléments de réponse concernant les approches de mise en œuvre des modèles sur des cas réels.

Nous avons utilisé, pour mener à bien l'étude de sensibilité, des modèles analytiques simples, mais également des outils logiciels tels que ADMS ou ARIA IMPACT, qui intègrent également ce type de modèles.

Pour réaliser cette étude de sensibilité, nous avons utilisé, dans la mesure du possible, des données réelles fournies par les industriels afin d'illustrer de manière concrète les différents points que nous avons abordés.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Le panache de polluant issu d'une source industrielle est transporté par le vent. Au fur et à mesure de son éloignement de la source, le panache s'étale par diffusion turbulente. D'autre part, par des effets thermiques et dynamiques, le panache s'élève au dessus de la source. On distingue trois types de paramètres ayant un impact sur la dispersion :

- **Les conditions de rejet**

Paramètres	Effet sur la dispersion et la concentration
Débit de la source	La concentration est directement proportionnelle au débit de la source
Hauteur de la source	Plus le rejet est haut plus la concentration au sol est faible et plus le point d'impact est éloigné de la source
Vitesse et température du rejet	Elévation du panache au dessus de la source. Différentes formules permettent d'évaluer la surhauteur
Géométrie de la source	Plus la source est étalée, plus le panache est large au voisinage de la source. A partir d'une certaine distance (dépendant de la stabilité et de l'étalement de la source), la source géométrique peut-être assimilée à une source ponctuelle
Modulation des émissions	En moyenne annuelle, la modulation diurne ou saisonnière des émissions peut avoir un impact car les conditions météorologiques varient.

- **La météorologie**

Paramètres	Effet sur la dispersion et la concentration
Vitesse du vent	Augmentation de la dilution. La concentration est inversement proportionnelle à la vitesse du vent
Direction du vent	Modification de la direction du panache
Stabilité atmosphérique	Situation stable : faible dispersion Situation neutre : dispersion moyenne Situation instable : bonne dispersion
Turbulence atmosphérique	La dispersion est directement liée à la turbulence. La concentration au sol diminue et le panache s'étale plus si la turbulence augmente
Couverture nuageuse	Les nuages limitent les échanges thermiques et radiatifs entre le sol et l'atmosphère. Ils font tendre l'atmosphère vers une situation neutre
Hauteur de la couche limite	Grandeur caractéristique de la stabilité. Plus l'atmosphère est stable, plus la couche limite est basse. Réflexion du panache sur le sommet de la couche limite. Confinement des polluants.

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

Précipitations	Lessivage du polluant par la pluie. Légère diminution de la concentration au sol
Comparaison d'un calcul séquentiel avec un calcul à partir d'une rose des vents	La dégradation de l'information sur la stabilité peut entraîner des écarts importants entre les deux calculs

- **Les caractéristiques du site**

Paramètres	Effet sur la dispersion et la concentration
Présence du sol, dépôt sec	Déposition du polluant sur le sol par sédimentation ou adsorption. Diminution de la concentration au niveau du sol
Rugosité du sol	Modification du profil vertical du vent et augmentation de la turbulence au voisinage du sol
Relief	Situation neutre et instable : légère modification de l'écoulement, augmentation de la turbulence dans le sillage Situation stable : forte modification de l'écoulement La concentration au sol peut être très différente suivant que l'on prend en compte le relief ou non
Obstacles	Forte modification de l'écoulement autour de l'obstacle, augmentation de la turbulence dans le sillage. La concentration autour de l'obstacle est fortement influencée par la présence de l'obstacle

4. PRESENTATION DES RESULTATS OBTENUS SUR LES CAS TESTS

L'évaluation des modèles sur des cas tests consiste à comparer les résultats d'un modèle à des mesures de terrain représentatives de situations simples. Cette étape permet notamment d'évaluer les performances propres des modèles. Cependant, cet exercice est assez délicat. Une faible variation sur les conditions météorologiques peut entraîner des différences importantes sur les processus de dispersion et donc sur la concentration au sol. Pour améliorer la cohérence des comparaisons entre les modèles et les mesures, on s'intéresse aux concentrations sur l'axe du panache pour le modèle et aux maximums de concentrations sur les arcs de mesures pour les expériences. On trace ainsi le nuage de points modèle-mesures pour l'ensemble des expériences d'un cas test. Les cas tests permettent de couvrir un grand nombre de situations météorologiques différentes. Une étude statistique des résultats des modèles pour l'ensemble de ces situations permet de s'affranchir en partie du caractère aléatoire de la météorologie. Pour chaque modèle on calcule la concentration moyenne obtenue sur l'ensemble des expériences du cas test ainsi que divers paramètres statistiques comme l'écart-type, le biais fractionnel, le coefficient de corrélation, la proportion de résultats dans un facteur 2 par rapport aux mesures et la proportion de résultats dans un facteur 5 par rapport aux mesures.

Deux cas tests représentatifs des situations en milieu rural et en milieu urbain ont été retenus pour cette étude :

- **Le cas test de Prairie Grass**

Il a été réalisé dans les années 50 sur un site plat recouvert d'herbe. Le rejet étudié concerne un rejet de SO₂ au sol sans surhauteur. Les arcs de récepteurs sont situés à 50, 100, 200, 400 et 800m de la source. Les expériences réalisées couvrent des situations météorologiques stables, neutres et instables. Le tableau ci-dessous résume les meilleurs résultats statistiques obtenus avec chaque modèle.

	Moyenne (10 ⁻³ s/m ³)	Ecart-type (10 ⁻³ s/m ³)	Biais fractionnel	Corrélation	Fac2	Fac5
Mesures	2.23	3.90				
IMPACT (Pasquill)	1.86	4.05	0.18	0.60	0.58	0.89
ADMS	1.39	3.29	0.46	0.5	0.57	0.88
TRAMES (Pasquill)	1.32	2.76	0.50	0.66	0.46	0.91
SPRAY	0.7	1.05	1.03	0.66	0.39	0.81

Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d'un site industriel - Vers un guide de l'utilisateur - 2^{ème} partie : Evaluation des modèles .

- **Le cas test d'Indianapolis**

Il a été réalisé dans les années 80 sur un site urbain, plat. Le rejet étudié est un rejet de SF₆ issu d'une cheminée haute de 84m avec une forte surhauteur thermique. Les arcs de récepteurs sont situés entre 250m et 12 km de la source. Les expériences réalisées couvrent des situations météorologiques stables, neutres et instables. Le tableau ci-dessous résume les meilleurs résultats statistiques obtenus avec chaque modèle

	Moyenne (10 ⁻⁹ s/m ³)	Ecart-type (10 ⁻⁹ s/m ³)	Biais fractionnel	Corrélation	Fac2	Fac5
Mesures	257.8	221.7				
IMPACT (Briggs Urban)	261.1	269.4	0.05	0.37	0.40	0.65
ADMS	257.6	243.6	0.01	0.28	0.43	0.79
TRAMES (Briggs Urban)	233.7	215.0	0.10	0.33	0.41	0.71
SPRAY	252.6	195.5	0.02	0.32	0.44	0.75

Ces résultats montrent que les différents modèles étudiés sur un grand nombre de situations météorologiques différentes donnent des résultats corrects en moyenne mais que la comparaison modèle-mesures sur une situation météorologique particulière est très aléatoire. Ces résultats montrent ainsi l'intérêt des études statistiques par rapport aux études de scénarios particuliers pour les études d'impact afin de ne pas privilégier une situation où le modèle ne donne pas de résultat satisfaisant. Enfin, il est très difficile de différencier les modèles sur ces cas tests simples où la variabilité des conditions météorologiques est déterminante pour la qualité des résultats.

5. ETUDE DES CAS INDUSTRIELS

Afin de guider l'utilisateur dans l'utilisation des modèles de dispersion pour étudier l'impact d'un rejet industriel dans l'atmosphère, nous avons établi une méthodologie d'étude des cas réels sous forme d'une liste exhaustive de questions. Nous avons proposé trois axes de réflexions :

- Les phénomènes physiques qui influent sur la dispersion d'un polluant (la météorologie locale déterminée par l'occupation des sols et la topographie du site, la nature du polluant et les caractéristiques du rejet)
- Un inventaire des données disponibles pour décrire le site, le rejet et la météorologie
- Les différentes possibilités qui s'offrent à l'utilisateur en terme de choix de modèle, d'option de modélisation et de choix de scénarios de simulation

Pour illustrer cette méthodologie, nous avons étudié le cas réel d'une usine située dans le village de La Chambre dans la vallée de la Maurienne en Savoie. Cette vallée est soumise à des régimes de vents thermiques en raison de la présence de reliefs très élevés et le champ de vent au voisinage du sol est peu sensible aux effets météorologiques à grande échelle. D'autre part, la proportion de vents calmes dans la vallée est très importante. Pour étudier ce site, nous disposons d'une mesure de vent et de température dans la vallée et des résultats du modèle ALADIN de Météo France.

Nous avons étudié 4 démarches de modélisation :

- Un calcul séquentiel sur 3 ans réalisé avec le modèle gaussien ADMS avec les mesures météorologiques dans la vallée. Les concentrations moyennes au sol ont été calculées pour la zone plate autour de l'usine
- Un calcul statistique, à partir d'une rose des vents, réalisé avec le modèle lagrangien SPRAY couplé avec le préprocesseur météorologique MINERVE qui permet de calculer un champ de vent tridimensionnel en fonction du relief. Les concentrations moyennes au sol ont été calculées sur un domaine de 10 km par 10 km autour de l'usine et intégrant le relief.
- Un calcul de l'évolution heure par heure du panache de polluant pour une journée caractéristique d'un jour d'été, réalisé avec le modèle lagrangien SPRAY couplé avec le préprocesseur météorologique MINERVE
- Un calcul de l'évolution heure par heure du panache de polluant pour une journée caractéristique d'un jour d'été, réalisé avec le modèle eulérien HERMES couplé avec le préprocesseur météorologique MINERVE

Les 4 approches ont donné des résultats différents. Ne disposant pas de mesures de concentrations autour de l'usine, il n'est pas possible de dire si un modèle est meilleur qu'un autre. Les résultats du modèle ADMS semblent cohérents pour la partie plate autour de l'usine, mais la méthodologie mise en œuvre avec ce modèle ne permet pas de voir des niveaux de concentrations élevés qui apparaissent sur les reliefs autour de l'usine. Les résultats obtenus avec SPRAY montrent des niveaux de concentration élevés sur les reliefs autour de l'usine. Le premier scénario de modélisation avec la rose des vents permet d'estimer l'impact moyen de l'usine dans son environnement, alors que le scénario utilisant une journée type permet de modéliser des phénomènes d'accumulation de polluant pendant les heures où le vent est faible. Enfin, les résultats du modèle HERMES surestiment la concentration autour de l'usine à cause d'une mauvaise estimation de la surhauteur du panache au dessus de la source.

6. CONCLUSION

L'utilisation des logiciels de dispersion atmosphérique ADMS, ARIA IMPACT et ARIA INDUSTRY a permis d'analyser les différentes théories de modélisation de la dispersion et de comprendre les enjeux de chacune de ces théories. L'étude de ces différents modèles a aussi montré qu'une bonne connaissance théorique des écoulements et de la dispersion dans la couche limite atmosphérique était indispensable pour utiliser correctement les modèles de dispersion.

L'étude de sensibilité a permis de comprendre les mécanismes de la dispersion atmosphérique et d'évaluer l'impact sur le calcul de la concentration des variations des paramètres d'entrée, notamment les conditions de rejet, les paramètres météorologiques et les caractéristiques du site industriel. L'étude de sensibilité a aussi montré les limites des différentes hypothèses simplificatrices dans les scénarios de modélisation.

L'étude des cas tests a permis d'une part d'approfondir la connaissance des modèles de dispersion et d'évaluer les performances des modèles sur deux situations simples et représentatives des études d'impact. Les modèles que nous avons étudiés donnent des résultats satisfaisants en moyenne sur les deux cas tests, mais la comparaison point par point des résultats des modèles par rapport aux mesures est très aléatoire. Cette étude a aussi montré l'importance de l'expérience de l'utilisateur dans la mise en œuvre d'un modèle de dispersion.

En ce qui concerne l'étude des cas réels, la méthodologie que nous avons mise en place en s'appuyant sur l'étude de sensibilité doit permettre à l'utilisateur de s'interroger sur l'influence des différents paramètres qui entrent en jeu dans la modélisation d'un cas réel et d'évaluer l'impact sur le résultat des différentes simplifications utilisées. Pour illustrer cette étude, nous avons étudié en détail un site industriel réel situé dans une zone de relief marqué. Nous avons étudié 3 démarches de modélisation :

- L'utilisation d'un modèle gaussien simple avec une météorologie représentative du site
- L'utilisation d'un modèle lagrangien couplé avec un préprocesseur météorologique qui permet de calculer un champ de vent tridimensionnel
- L'utilisation d'un modèle eulérien couplé avec un préprocesseur météorologique qui permet de calculer un champ de vent tridimensionnel.

Les 3 modèles donnent des résultats très différents et ne disposant pas de mesures de concentration sur le site, il est impossible de dire quel modèle donne les meilleurs résultats. Cette étude a cependant permis de montrer les avantages et les limites de chaque méthode de modélisation en fonction des données que nous avons à notre disposition.

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

CONTENTS

1. Introduction	3
1.1. Contexte of the study	3
1.2. differents stages of the study	3
2. Presentation of the selected models	4
3. study of sensivity	6
4. Presentation of the results obtenained on field experiments	10
5. study of industrials cases	12
6. Conclusion	12

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

1. INTRODUCTION

1.1. CONTEXTE OF THE STUDY

Association RECORD entrusted to the Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique of Ecole Centrale de Lyon (LMFA), a study relating to the dispersion of the chronic atmospheric emissions of an industrial site corresponding to a normal operation of the installations. The context of the study relates to mainly the taking into account of the modelling of the transport and the dispersion of the atmospheric pollutants in the lawful studies (impact studies). The objective of modelling in the impact studies is in particular to determine the maximum impact on the ground or on well identified targets of releases of pollutants in the atmosphere. More precisely, it is a question of locating and of quantifying this impact, either for weather sequences well defined (short-term impact), or for longer periods (long-term impact).

Within the framework of the impact studies which the industrialists must carry out, it is thus significant to be able to know the precision and the limitations of the models implemented. For that, it is necessary to evaluate these models in order to check that they will make the good predictions. The evaluation must relate on the operational performances of the models, but also to the physics which they contain. Lastly, the evaluation must make it possible to be able to distinguish the performances between various models. The evaluation of the models which we carried out is made in several stages. A first stage consisted in analyzing the physical principles implemented in the various models and the advantages and the limits of each modelling; this part is covered in the chapter 2. Then, we identified the sensitivity of the models to the parameters of entry (chapter 3). We also evaluated the models on field experiments (two campaigns), the results of this evaluation are introduced at the 4th chapter. Lastly, we used the models on real situations so in particular comparing the interest of an approach of modelling compared to another (chapter 5).

1.2. DIFFERENTS STAGES OF THE STUDY

A first study carried out during years 2001 and 2002 made it possible to establish a state of the art in the field of the modelling of the transport and the dispersion of the atmospheric emissions of an industrial site. This state of the art comprises in particular theoretical recalls on turbulent dispersion, local meteorology and atmospheric dispersion, as well as associated modelling. This study also made it possible to carry out an inventory of the various models of dispersion suggested on the market and to take stock of the experimental data bases.

The work suggested on the second phase of the project had for main goal to evaluate a restricted number of models on case studies sufficiently documented, representative of typical situations of dispersion in the atmosphere, and on real cases closer to the impact studies carried out by the industrialists. This work makes it possible to answer certain numbers of questions that the users asked relating to on the one hand the performances of the models and on the other hand the implementation of these models on real cases.

To make this study, we retained five models.

- A Gaussian plume model " second generation " ADMS 3 distributed by NUMTECH
- A Gaussian plume model " first generation " ARIA IMPACT
- A Gaussian puffs model TRAMES
- A Lagrangian model SPRAY
- A eulerian model HERMES

These last 4 models are distributed by ARIA Technologies. We wished worked with a third supplier of software, TRANSOFT, but after several discussions, they finally did not wish to take part in the project.

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

The first stage of evaluation of the models consists in studying the possibilities of simulation which they offer to the user and which physical modelling are associated.

The second stage of evaluation of the models is the study of two field experiments representing of the relatively current situations: a release on a flat ground in rural area and a rejection with the chimney in urban environment with various stratifications (stable, neutral and unstable). It makes it possible to have simulations with accompanying notes which are in particular useful for the training of the users and the catch in hand of the models. It also makes it possible to establish a comparison of the possibilities and functionalities of each approach of modelling and to carry out a first classification of the models according to the problems to be treated. It finally makes it possible to evaluate the models according to their own performances, on real cases corresponding to the principal phenomena met.

Parallel to this study of the field experiments, we carried out a study of sensitivity starting from the questions which arise for the user when it must use the model in a concrete case. It in particular makes it possible to identify and quantify uncertainties on the output data according to the quality of the data input.

Lastly, to guide the user in his step of modelling of a factory site, we worked out a methodology of analysis of the situation to be modelled. This method illustrated by the study of a complex real case makes it possible in particular to the industrialists to concretely apprehend the interest of an approach of modelling compared to another according to the complexity of the situation to model.

2. PRESENTATION OF THE SELECTED MODELS

This chapter presents the various functionalities of the software of dispersion which we used for the study RECORD as a new user could discover them. We analyze the various physical models which are applied to calculate dispersion. Lastly, we present the input data necessary to the model and how the user communicates with the software.

- **ARIA IMPACT**

The model ARIA IMPACT, distributed by the company ARIA Technologies, is a model of Gaussian plume able to calculate the impact on the ground of an industrial release in the short term and in the long term. The concentration on the ground depends on the wind speed, the release height and the standard deviations of diffusion. These standard deviations of diffusion are defined according to stability classes depending on the weather parameters (wind, temperature, cloud cover...). Meteorology is regarded as uniform on all the field of study. The model makes it possible to take into account the relief in a very simplified way, but it is not possible to take into account buildings. On the other hand, a model with puffs makes it possible to take into account calm winds. The sources modelled by ARIA IMPACT can have various forms. The model must be indicated on source emission rate, as well as temperature and speed of the release to calculate the plume rise. Several formulations of plume rise are available. The pollutants are inert gases or particles and a calculation of dry or wet deposition is possible.

The computing times are very short; they make it possible to make long term statistical studies in a reasonable time. To study a source with one year of sequential weather data, with a Pentium 4 with 3GHz and 1Go of RAM, it takes 2 or 3 minutes.

The advantage of the model ARIA IMPACT is that it is fast and easy to implement on situations where the flow is simple. On the other hand, it is not possible to model complex situations of flow disturbed by a relief or buildings.

- **ADMS 3**

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

ADMS 3, distributed by company NUMTECH, is a Gaussian plume model of second generation which makes it possible to calculate the impact on the ground and in receiving points in the short term and for a long-term calculation. The standard deviations of diffusion are defined according to the turbulent state of the atmosphere. The stability of the atmosphere is described continuously by parameters like the height of the boundary layer or the Monin Obukhov length starting from the weather data (wind, temperature, cloud cover or heat flux). Model ADMS makes it possible to take into account hills (slopes lower than 20°) by the linearized diagnostic model FLOWSTAR and to model complex situations like changes of roughness in the field of study or the presence of buildings around the source. On the other hand, the model does not take into account the winds lower than 0.75m/s at 10m height.

The sources modelled by ADMS can have various forms. The model must be indicated on the source emission rate, as well as temperature and speed release to calculate the plume rise. The pollutants are inert or active gases, radioactive elements or particles. A taking into account of the dry or wet deposition is possible.

The computing times are very short; it is possible to make log term statistical studies in a reasonable time. To study a source with one year of sequential weather data, with a Pentium 4 with 3GHz and 1Go of RAM, it takes 2 or 3 minutes. The computing times increase if hills is taken into account.

Model ADMS makes it possible to answer a great number of problems related to atmospheric dispersion (particles, relief, buildings...) in a reasonable time. However, the hills module is limited to moderate reliefs and the model does not make it possible to treat phenomena of calm wind.

- **ARIA INDUSTRY software**

ARIA INDUSTRY software distributed by the company ARIA Technologies proposes 3 models of dispersion: a model with Gaussian puffs (SCREENS), a eulerian model (HERMES) and a Lagrangian model (SPRAY). These models make it possible to calculate the dispersion of a pollutant in a three-dimensional wind field. Contrary to the traditional Gaussian model, these models make it possible to describe non stationary situations like a discontinuous release and the evolution of the pollutant in time. This software proposes also a diagnostic weather model : MINERVE, which makes it possible to interpolate weather measurements on a three-dimensional grid. The choice of the model of dispersion is entirely left to the user.

- **Weather model MINERVE**

Model MINERVE is a diagnostic weather model which allows, starting from measurements of wind and temperature on the surface and altitude, to reconstitute by a method of interpolation which takes account of the relief, the fields of wind and temperature on a regular three-dimensional grid. The field of interpolated wind is then adjusted to meet the condition of conservation of the mass.

- **TRAMES**

The model TRAMES is a model with Gaussian puffs which makes it possible to simulate in 3 dimensions the dispersion of the atmospheric pollutants resulting from one or several sources. Only a short-term calculation is possible. The model is founded on the principle of a Gaussian formulation which makes it possible to follow in space and time the evolution of a puff. The trajectory of the puff is calculated by integrating the wind field calculated by MINERVE. The standard deviations of the puffs are calculated starting from the formulas of Pasquill, Briggs or Doury defined following the class of stability of the atmosphere. The vertical effects of shearing are not taken into account. The model is thus limited to moderate hills.

The sources modelled by TRAMES can have various forms. The model must be indicated on source emission rate, as well as the temperature and the speed of the release to calculate the plume rise. The pollutants are inert gases, particles, radioactive elements. A calculation of the dry or wet deposition is possible.

The computing times of the software are average. To study dispersion resulting from a point source on a grid of 200*200 points over one hour of weather, with a Pentium 4 with 3GHz and

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

1Go of RAM, it takes 10 minutes approximately. The computing time depends on the number of puffs to treat.

The model TRAMES makes it possible to treat non stationary situations in a complex flow in a reasonable time. On the other hand, the model is not adapted to a situation where the vertical wind gradient is strong.

- **HERMES**

Model HERMES is an eulerian model which makes it possible to calculate in short term the dispersion of the atmospheric pollutants in a flow complexes by solving the transport equations of a passive scalar on a regular grid with 3 dimensions. Assumptions of closing make it possible to consider turbulent flows. The model applies to fields from 20 to 500 km. Model HERMES is rather adapted to impact studies on a regional scale.

The sources modelled by HERMES can have various forms. The model must be indicated on source emission rate, as well as the temperature and the speed of the release to calculate the plume rise. The pollutants are inert gases, particles, radioactive elements. A taking into account of the dry or wet deposition is possible.

The computing times are much longer than with a Gaussian model, but they depend only on the size of the grid and not of the number of sources. To treat a point source on a field of 200*200 meshes of 50m and 25 vertical levels, for one hour of weather, it takes 15h calculation with a pentium 4, 3 GHz and 3 Go of RAM

Model HERMES makes it possible simultaneously to treat a great number of sources in a complex flow. On the other hand, the concentration in the vicinity of the source is badly modelled

- **SPRAY**

The model SPRAY is a Lagrangian model which makes it possible to simulate transport, the dispersion and the deposition of pollutant in a complex weather field. The release of pollutant is considered as a finished number of Lagrangian particles, each one carrying a certain mass of pollutant. Each particle follows a chaotic trajectory which depends on the flow (calculated by MINERVE) and on its turbulent state. We need a great number of Lagrangian particles to describe all the possible trajectories of the pollutant. At one moment T, the spatial distribution of these particles makes it possible to determine the concentration of pollutant. To calculate the trajectories of the particles, a stochastic model is used, i.e. the temporal and space variations of the weather variables are regarded as random. The turbulent parameters are calculated starting from the weather fields resulting from model MINERVE, the occupation of the grounds and information on the radiation, the cloud cover...

The sources modelled by SPRAY can have various forms. The model must be indicated on source emission rate, as well as the temperature and the speed of the release to calculate the plume rise. The pollutants are inert gases, particles, radioactive elements. A calculation of the dry or wet deposition is possible.

The computing times are very long. To treat a point source modelled by a rejection of 2000 particles all the 10 S, for 1 hour of meteorology, it takes 30 minutes of calculation with a pentium 4, 3GHz and 3 Go of RAM

The model SPRAY makes it possible to calculate dispersion in all the types of flows, whatever their complexity.

3. **STUDY OF SENSIVITY**

The study of sensitivity of the process of atmospheric dispersion constitutes a stage in the step of evaluation of the models installation within the framework of this study.

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

- The study of sensitivity makes it possible to evaluate the influence of the various physical phenomena on the pollutants concentration, in order to determine the consequences of not taken into account these phenomena in the models.
- The study of sensitivity also makes it possible to evaluate the impact on the concentrations calculated of an error or an uncertainty on the input data of the model.
- This study finally allows to the models users to acquire an experiment of the phenomena influencing dispersion, in order to minimize their errors in the placement of these tools.

On the practical point of view, the study of sensitivity consists in evaluating the impact on the concentration of the various parameters characterizing the studied problem: emissions, meteorology, site. The study was undertaken by successively considering these three great families of parameters. The step is however made complex by the interdependence between the various parameters. Within the framework of this study, we tried, as far as possible, to highlight the relations between the parameters considered.

Moreover, this study of sensitivity aims at evaluating the influence of various methodologies of implementation of the models on the final results. The study of sensitivity provides to the industrialists brief replies concerning the approaches of implementation of the models on real cases.

We used, to conclude the study of sensitivity, of the simple analytical models, but also of the software tools such as ADMS or ARIA IMPACT, which also integrate this type of models.

To make this study of sensitivity, we used, as far as possible, real data provided by the industrialists in order to illustrate in a concrete way the various points which we approached.

The plume of pollutant resulting from an industrial source is transported by the wind. Progressively with its distance of the source, the plume is spread out by turbulent diffusion. In addition, by thermic and dynamic effects, the plume rises over the source. We distinguish three types of parameters having an impact on dispersion:

- **Release conditions**

Parameters	Effect on dispersion and concentration
Source emission rate	Concentration is directly proportional to the source emission rate
Source height	The more the release is high more the concentration on the ground is weak and more the point of impact is far away from the source
Release speed and release temperature	Plume rise over the source. Various formulas make it possible to evaluate the plume rise
Source geometry	The more the source is spread out, the more the plume is large in the vicinity of the source. From a certain distance (depend on the stability and spreading out of the source), the geometrical source can be considered as a point source
Time varying emission	On annual average, the diurnal or seasonal modulation of the emissions can have an impact because the weather conditions vary.

- **The weather**

Parameters	Effect on dispersion and concentration
-------------------	---

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

Wind speed	Increase in dilution. The concentration is inversely proportional to wind speed
Wind direction	Change in plume direction
Atmospheric stability	Stable situation: weak dispersion Neutral Situation : middle dispersion Unstable Situation : height dispersion
Turbulence	Dispersion is directly linked to turbulence. The concentration on the ground decreases and the plume is spread out more if turbulence increases
Cloud cover	Clouds limit thermic and radiative exchanges between the ground and the atmosphere. They make tighten the atmosphere towards a neutral situation.
Atmospheric Boundary layer height	Size characteristics of stability. The more stable the atmosphere is, the more the boundary layer is low. Reflexion of the plume on the top of the boundary layer. Containment of the pollutants.
Rain	washout of the pollutant by the rain light decrease in the ground concentration
Comparison of a sequential calculation and a rose wind calculation	the degradation of information on stability can involve significant differences between two calculations

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

- **Site characteristics**

Parameters	Effect on dispersion and concentration
Presence of the ground, dry deposition	Dry deposition of the pollutant by sédimentation or adsorption. Reduction in the concentration on the level of the ground
Ground roughness	Modification of the vertical profile of the wind and increase in turbulence in the vicinity of the ground
hills	Neutral and unstable situation: light modification of the flow, increase in turbulence in the wake Stable situation: strong modification of the flow Concentration on the ground can be very different according to whether the relief is taken into account or not
Obstacles	Strong modification of the flow around the obstacle, increase in turbulence in the wake. The concentration around the obstacle is strongly influenced by the presence of the obstacle

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

4. PRESENTATION OF THE RESULTS OBTAINED ON FIELD EXPERIMENTS

The evaluation of the models on field experiments consists in comparing the results of a model with measurements of ground representative of simple situations. This stage makes it possible to evaluate the own performances of the models. However, this exercise is rather delicate. A weak variation on the weather conditions can involve significant differences on the processes of dispersion and thus on the concentration on the ground. To improve coherence of the comparisons between the models and measurements, we are interested in the concentrations on the axis of the plume for the model and to the maximum of concentrations on the arcs of measurements for the experiments. We trace the group of couple model-measurements for the whole experiments of a case. The field experiments make it possible to cover a great number of different weather situations. A statistical study of the results of the models for the whole of these situations makes it possible to be freed partly from the randomness of meteorology. For each model we calculate the average concentration obtained on all of the experiments of the case like various statistical parameters like the standard deviation, fractional skew, the coefficient of correlation, the proportion of results in a factor 2 compared to measurements and the proportion of results in a factor 5 compared to measurements.

Two field experiments representative of the situations in rural area and urban environment were retained for this study:

- **Prairie Grass field experiment**

It was carried out in the Fifties on a flat site covered with grass. The studied release relates to a release of SO₂ on the ground without plume rise. The arcs of receivers are located at 50, 100, 200, 400 and 800m of the source. The experiments cover stable, neutral and unstable situations weather. The table below summarizes the best statistical results obtained with each model.

	Mean (10 ⁻³ s/m ³)	Standard deviation (10 ⁻³ s/m ³)	Fractionnal bias	Correlation	Fac2	Fac5
Measures	2.23	3.90				
IMPACT (Pasquill)	1.86	4.05	0.18	0.60	0.58	0.89
ADMS	1.39	3.29	0.46	0.5	0.57	0.88
TRAMES (Pasquill)	1.32	2.76	0.50	0.66	0.46	0.91
SPRAY	0.7	1.05	1.03	0.66	0.39	0.81

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

- **Indianapolis field experiment**

It has been carried out in the Eighties on an urban, flat site. The studied release is a release of SF₆ resulting from a high chimney of 84m with strong plume rise. The arcs of receivers are located between 250m and 12 km of the source. The experiments carried out cover stable, neutral and unstable situations weather. The table below summarizes the best statistical results obtained with each model

	Mean (10 ⁻⁹ s/m ³)	Standard deviation (10 ⁻⁹ s/m ³)	Biais fractionnel	Correlation	Fac2	Fac5
Measures	257.8	221.7				
IMPACT (Briggs Urban)	261.1	269.4	0.05	0.37	0.40	0.65
ADMS	257.6	243.6	0.01	0.28	0.43	0.79
TRAMES (Briggs Urban)	233.7	215.0	0.10	0.33	0.41	0.71
SPRAY	252.6	195.5	0.02	0.32	0.44	0.75

These results show that the various models studied on a great number of different weather situations give correct mean results but that the comparison model-measurements on a particular weather situation is very random. Thus, these results show the interest of the statistical studies compared to the studies of particular scenarios for the impact studies in order not to privilege a situation where the model does not give a good result. Lastly, it is very difficult to differentiate the models on these simple field experiments where the variability of the weather conditions is determining for the quality of the results.

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

5. STUDY OF INDUSTRIALS CASES

In order to guide the user in the use of the models of dispersion to study the impact of an industrial release in the atmosphere, we established a methodology of study of the real cases in the form of an exhaustive list of questions. We proposed three axes of thinking:

- The physical phenomena which influence the dispersion of a pollutant (the local meteorology determined by the grounds occupation and the topography of the site, the nature of the pollutant and the characteristics of the release)
- An inventory of the data available to describe the site, the release and meteorology
- The various possibilities which are offered to the user in term of choice of model, option of modelling and choice of scenarios of simulation

To illustrate this methodology, we studied the real case of a factory located in the village of la Chambre in the valley of Maurienne in Savoy. This valley is subjected to modes of thermal winds because of the presence of very high mountains and the field of wind in the vicinity of the ground is not very sensitive to the weather effects on a large scale. In addition, the proportion of calm winds in the valley is very significant. To study this site, we have a measurement of wind and temperature in the valley and the results of the model ALADDIN of Meteo France.

We studied 4 ways of modelling:

- A sequential calculation over 3 years realized with Gaussian model ADMS with weather measurements in the valley. The average concentrations on the ground were calculated for the flat zone around the factory
- A statistical calculation, starting from a rose of the wind, carried out with the Lagrangian model SPRAY coupled with the weather preprocessor MINERVE which makes it possible to calculate a three-dimensional wind field according to the relief. The mean concentrations on the ground were calculated on a field of 10 km by 10 km around the factory and integrating the mountains.
- A calculation of the pollutant plume evolution hour per hour for one day characterizing a summer day, carried out with the Lagrangian model SPRAY coupled with weather preprocessor MINERVE
- A calculation of the pollutant plume evolution hour per hour for one day characterizing a summer day, carried out with the eulerian model HERMES coupled with weather preprocessor MINERVE

The 4 approaches gave different results. Not having measurements of concentrations around the factory, it is not possible to say if a model is better than another. The results of model ADMS seem coherent for the flat area around the factory, but the methodology implemented with this model does not make it possible to see high levels of concentrations which appear on the mountains around the factory. The results obtained with SPRAY show levels of concentration raised on the mountains around the factory. The first scenario of modelling with the rose of winds makes it possible to consider the impact average of the factory in its environment, whereas the scenario using one characteristic day makes it possible to model phenomena of accumulation of pollutant during the hours when the wind is weak. Lastly, the results of model HERMES over-estimate the concentration around the factory because of a bad estimate of the plume rise.

6. CONCLUSION

The use of the software of atmospheric dispersion ADMS, ARIA IMPACT and ARIA INDUSTRY made it possible to analyze the various theories of dispersion modelling and to understand the

Atmospheric dispersion modelling for industrial site - Toward a user guide - 2nd part : models evaluation.

stakes of each one of these theories. The study of these various models as showed as a good theoretical knowledge of the flows and dispersion in the atmospheric boundary layer was essential to use the models of dispersion correctly.

The study of sensitivity made it possible to understand the mechanisms of atmospheric dispersion and to evaluate the impact on the calculation of the concentration of the variations of the input data, in particular the conditions of release, the parameters weather and the characteristics of the industrial site. The study of sensitivity also showed the limits of the various simplifying assumptions in the scenarios of modelling.

The study of the field experiments made it possible on the one hand to look further into the knowledge of the models of dispersion and to evaluate the performances of the models on two simple and representative of the impact studies situations. The models which we studied give good mean results, but the comparison point by point of the results of the models compared to measurements is very random. This study also showed the importance of the user knowledge in the implementation of a dispersion model.

Concerning the study of the real cases, the methodology we proposed is based on the study of sensitivity and it must make it possible to the user to wonder about the influence of the various parameters who come into play the modelling of a real case and to evaluate the impact on the result of various simplifications used. To illustrate this study, we studied in detail a real factory site located in a zone of marked relief. We studied 3 steps of modelling:

- The use of a simple Gaussian model with a meteorology representative of the site
- The use of a Lagrangian model coupled with a weather preprocessor which makes it possible to calculate a three-dimensional wind field
- The use of an eulerian model coupled with a weather preprocessor which makes it possible to calculate a three-dimensional wind field.

The 3 models give very different results and not having measurements of concentration on the site, it is impossible to say which model gives the best results. This study however made it possible to show the advantages and the limits of each method of modelling according to the data which we had at our disposal.