Modélisation de la dispersion atmosphérique généralités

Dans ce chapitre, nous nous proposons de poser les bases de la modélisation de la dispersion atmosphérique. Après avoir introduit les concepts théoriques et les phénomènes physiques relatifs à la dispersion turbulente, nous nous attachons à présenter les différentes techniques de modélisation existantes.

Sommaire

2.1	Méc	anismes de la dispersion atmosphérique			
	2.1.1	Dispersion turbulente : concepts généraux $\ldots \ldots \ldots \ldots 25$			
	2.1.2	Influence de l'environnement sur la dispersion			
2.2	2.2 Techniques de modélisation de la dispersion turbulente . 2				
	2.2.1	Equation d'advection-diffusion d'un scalaire			
	2.2.2	Classification générale des modèles de dispersion 28			
	2.2.3	Modèles eulériens			
	2.2.4	Modèles lagrangiens			
	2.2.5	Modèles gaussiens			

2.1 Mécanismes de la dispersion atmosphérique

2.1.1 Dispersion turbulente : concepts généraux

Un nuage de polluants rejeté dans l'atmosphère est soumis aux différents mécanismes qui régissent les écoulements de l'atmosphère. Les processus principaux sont : advection, diffusion, dépôt au sol, lessivage, et réactions chimiques éventuelles. Par définition, la *dispersion turbulente* est caractérisée par l'association des phénomènes d'*advection* et de *diffusion*.

L'advection est le transport du nuage par le vent moyen. Ce processus déplace le nuage, et peut même changer sa forme si l'écoulement du vent n'est pas uniforme, mais ne change pas la concentration en polluant.

La diffusion peut être de deux types : moléculaire ou turbulente.

- La diffusion moléculaire se réfère au mouvement des molécules du nuage de polluants dans l'air, et est due aux différences de concentration observées dans l'espace (gradients de concentration). Elle a néanmoins peu d'influence dans l'étude de la pollution atmosphérique.
- La diffusion turbulente, quant à elle, prédomine et est due à l'existence de tourbillons dans la CLA, qui brassent tridimensionnellement le nuage de polluants.
 Elle a deux origines : mécanique (cisaillement du vent) et thermique (gradient vertical de température).

L'effet conjugué des phénomènes d'advection et de diffusion turbulente génère alors la dispersion du nuage de polluants. Il est important de noter que la dispersion turbulente dépend fortement des caractéristiques turbulentes de l'écoulement. Il existe en effet une gamme très large de tourbillons dans la CLA et tous participent à leur manière au transport et à la diffusion du nuage. Globalement : les gros tourbillons par rapport au nuage le déplacent et contribuent ainsi à l'advection, ceux comparables à la taille du nuage le morcellent et contribuent ainsi à la diffusion turbulente, et enfin les tourbillons petits par rapport au nuage ne sont pas efficaces pour le morceler (PERKINS et al., 2005). L'efficacité de la dispersion turbulente étant due aux tailles relatives de ces tourbillons par rapport au nuage, comme celui-ci se déforme et se déplace au cours du temps, nous comprenons qu'elle variera également au fur et à mesure de l'étalement du nuage. En particulier, elle sera différente que nous soyons en champ proche ou loin de la source d'émission. Il en ressort que la modélisation de la dispersion turbulente est une tâche complexe et basée principalement sur la difficulté à modéliser correctement les structures tourbillonnaires. Nous nous attacherons dans le paragraphe 2.2 à réaliser une revue des principaux modèles et techniques existants.

Chapitre 2. Modélisation de la dispersion atmosphérique : généralités

Au cours de ce travail de thèse, nous nous intéressons à la modélisation de la dispersion atmosphérique à l'échelle locale (milieu urbain ou autour de sites industriels), c'est-à-dire pour des distances de l'ordre de quelques mètres à quelques kilomètres et correspondant à des échelles temporelles de l'ordre de quelques dizaines de secondes à quelques dizaines de minutes : on parle de modélisation en champ proche.

2.1.2 Influence de l'environnement sur la dispersion

L'environnement, par le biais de la nature des sols, du relief ou encore des bâtiments, influence fortement la dispersion des polluants et constitue donc une perturbation importante à prendre en compte lors de la modélisation de la dispersion. Pour cela, notons que deux voies sont possibles : la prise en compte implicite de la géométrie de la perturbation au sein-même de la paramétrisation mathématique du modèle, ou alors la résolution explicite tridimensionnelle des champs dynamiques permettant de décrire la géométrie de cette perturbation.

Nous présentons ici succintement l'influence des différents types de perturbations dues à l'environnement.

2.1.2.1 Influence de la nature des sols

La nature des sols intervient au niveau du paramètre de rugosité dynamique z_0 , introduit en chapitre 1. Exprimé en mètres, il caractérise l'influence globale de la couche limite de surface sur le profil de vent moyen. En effet, plus la rugosité est importante, plus le frottement au sol est important, et plus le profil de vitesse est cisaillé.

Les propriétés thermiques (flux de chaleur) des sols sont également des facteurs influençant la dispersion.

2.1.2.2 Influence du relief

Les reliefs accidentés (vallées, falaises, collines, etc.) modifient les écoulements atmosphériques et induisent donc une modification de leurs caractéristiques physiques, en particulier la turbulence, par rapport au cas d'un sol plat.

Il est précisé dans PERKINS et al. (2005) que le comportement de l'écoulement sur un relief dépend de la stabilité thermique de l'atmosphère. Dans le cas d'une atmosphère neutre, le panache suit les variations du relief. Dans le cas d'une atmosphère stable, le panache reste approximativement dans le même plan horizontal et contourne le relief.



FIGURE 2.1 – Ecoulement autour d'un obstacle 2D. (a) Lignes de courant du vent moyen; (b) profils de vitesse moyenne à différents points de l'écoulement.

2.1.2.3 Influence des obstacles et bâtiments

A plus petite échelle, les obstacles et les bâtiments perturbent de manière importante le champ de vitesse à la fois à l'aval et à l'amont de l'obstacle. Ceci est illustré dans la Figure 2.1 (cf. ARYA (1999)).

En amont, l'écoulement contourne l'obstacle et forme une zone de recirculation. Des études ont montré qu'on y observe un accroissement des concentrations. A l'aval, il y a à l'inverse une diminution des concentrations ainsi qu'une augmentation de la largeur du panache. Une diminution globale de la vitesse est observée en sillage lointain, due à la traînée de l'obstacle, ainsi qu'une modification de la turbulence de l'écoulement.

2.2 Techniques de modélisation de la dispersion turbulente

Avant de présenter les trois grandes familles de modèles de la dispersion atmosphérique, il est d'abord nécessaire d'introduire l'équation dite d'*advection-diffusion d'un scalaire*, qui régit le transport d'une espèce chimique au sein d'un écoulement donné.

2.2.1 Equation d'advection-diffusion d'un scalaire

Nous l'avons vu, la dispersion atmosphérique d'un nuage de polluants est directement affectée par la turbulence de l'écoulement. Les équations de Navier-Stokes moyennées par le biais de la décomposition de Reynolds présentées en chapitre 1 permettent de rendre compte statistiquement de cela et de déterminer le champ de vitesse d'un écoulement atmosphérique.

A présent, si au sein de cet écoulement atmosphérique, que nous supposerons incompressible, nous considérons une espèce chimique de concentration c (sous-entendu, fraction massique en kg/kg), le principe de conservation d'un scalaire appliqué à la quantité c s'exprime sous la forme :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U_{f,j} \frac{\partial c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + S + R , \qquad (2.1)$$

où :

- $D (m^2 \cdot s^{-1})$ est le coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce;
- S est le terme source, pouvant être positif ou négatif;
- R est le terme de production ou destruction de l'espèce par réaction chimique.

Il s'agit d'une équation de transport, appelée **équation d'advection-diffusion d'un scalaire**. Le mouvement du fluide porteur étant turbulent, nous introduisons la décomposition de Reynolds à toutes les variables y compris la concentration et nous obtenons ainsi l'équation de transport de la concentration moyenne :

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \langle U_{f,j} \rangle \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x_j} - \langle U'_{f,j} c' \rangle \right) + \langle S \rangle + \langle R \rangle .$$
(2.2)

2.2.2 Classification générale des modèles de dispersion

Un modèle de dispersion atmosphérique est un outil de simulation permettant de simuler les phénomènes atmosphériques intervenant dans le processus de dispersion turbulente des polluants. Les différences entre les nombreux modèles existants à ce jour se situent principalement au niveau du nombre de processus atmosphériques considérés, de leur degré de complexité, de leur champ d'application ainsi que, tout particulièrement, des méthodes utilisées pour résoudre les équations qui les régissent. Les modèles mathématiques de dispersion peuvent déjà se diviser en deux grandes catégories :

les modèles statistiques, qui se basent sur des équations statistiques ou empiriques pour calculer les grandeurs physiques liées à la dispersion atmosphérique (vent, turbulence, etc.);



FIGURE 2.2 – Classification des modèles mathématiques de dispersion atmosphérique.

— les modèles déterministes, qui, basés sur une description physique des processus atmosphériques, établissent des relations mathématiques de cause à effet.

Pour illustrer de manière plus concrète, nous pouvons citer comme modèle statistique par exemple un pronostic de la concentration d'un polluant comme une fonction statistique des mesures actuelles disponibles et de ses tendances historiques. Par ailleurs, un modèle déterministe est un modèle de diffusion dans lequel les concentrations de polluants se calculent typiquement en utilisant les informations sur la source d'émission (par exemple, les taux d'émission) et son environnement (par exemple, les paramètres météorologiques et la topographie du site étudié).

Parmi les modèles déterministes se classent trois principaux types de modèles :

- les modèles gaussiens, basés sur la résolution analytique de l'équation d'advectiondiffusion couplée à des paramétrisations semi-empiriques des principaux phénomènes physiques;
- les modèles eulériens, qui reposent sur la résolution de l'équation d'advectiondiffusion discrétisée en temps et en espace sur un maillage;
- les modèles lagrangiens, basés sur le calcul de trajectoires de particules.

Pour résumer, la Figure 2.2 illustre la classification générale des modèles mathématiques de dispersion atmosphérique.

Nous présentons plus en détail ces trois types de modèles dans les paragraphes suivants. Notons d'ores et déjà que les modèles eulériens et lagrangiens sont le plus généralement basés sur un champ dynamique calculé par approche eulérienne. En particulier, les modèles lagrangiens, au centre de notre travail de thèse, calculent ainsi les trajectoires des particules au sein d'un champ dynamique fourni par une approche eulérienne, et sont à ce titre souvent qualifiés de *modèles hybrides eulériens/lagrangiens*. Nous reviendrons sur ce point dans le chapitre suivant.

Avant de présenter les trois différents modèles, il convient de préciser qualitativement un point. Au centre du phénomène de dispersion se trouve le phénomène de diffusion turbulente. Or, l'efficacité de la diffusion turbulente n'est pas la même que nous soyons proche ou loin de la source. En effet, si nous considérons un nuage de polluant, les différentes structures tourbillonnaires ont des effets différents sur ce nuage au cours du temps, *i.e.*, au fur et à mesure que le nuage grossit. Près de la source, il existe des tourbillons de taille comparable à celle du nuage qui contribuent à sa diffusion et des tourbillons plus gros qui provoquent son déplacement (voir paragraphe 2.1.1). On a là une diffusion turbulente *rapide*. En revanche, loin de la source, le nuage a alors suffisamment grossi pour devenir plus gros que les plus gros tourbillons et la diffusion turbulente est alors *plus lente*. Cela se traduit aussi par une intermittence du signal.

Nous verrons dans les prochains paragraphes comment cette différence de comportement entre champ proche et champ lointain peut être prise en compte dans un modèle de dispersion.

2.2.3 Modèles eulériens

Les modèles dits eulériens reposent sur la résolution de l'équation d'advectiondiffusion d'un scalaire correspondant à la concentration en polluant. Cette équation est discrétisée en temps et en espace sur un maillage, et implique la connaissance des champs de vitesse et de turbulence. Par conséquent, la première étape est la résolution du système d'équations de Navier-Stokes, ce qui met en relief l'importance cruciale d'une modélisation correcte de la turbulence de l'écoulement.

Dans cette perspective, trois approches sont possibles :

- la simulation numérique directe (DNS Direct Numerical Simulation), qui résout la forme instantanée des équations de Navier-Stokes en considérant toutes les échelles de la turbulence;
- la simulation numérique des grandes échelles (LES Large Eddy Simulation), qui résout explicitement les grandes structures de la turbulence et modélise par paramétrisation statistique l'effet des plus petites;
- la modélisation statistique des équations de Navier-Stokes (RANS Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations), qui ne résout aucune structure tourbillonnaire et nous renseigne uniquement sur les valeurs moyennes au sens statistique des champs dynamiques.

C_{μ}	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	σ_k	σ_{ϵ}
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

TABLE 2.1 – Valeurs des constantes du modèle standard $k - \epsilon$ (LAUNDER et SPALDING, 1974).

2.2.3.1 La modélisation RANS

L'approche RANS est la plus couramment utilisée dans l'industrie. Comme nous l'avons vu, elle ramène le problème à la résolution conjointe des équations moyennées de continuité, de conservation de la quantité de mouvement, et d'advection-diffusion d'un scalaire. Or, nous avons vu dans le paragraphe que la résolution de ces équations soulevait le problème de leur fermeture, *i.e.*, comment évaluer les flux turbulents inconnus $\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle$ et $\langle U'_{f,j}c'\rangle$. De nombreux modèles de fermeture existent à différents ordres. Les plus utilisés sont ceux du premier et du second ordre. Il est important de noter que, malgré l'inconsistance que cela peut potentiellement impliquer, il est possible d'adopter une certaine fermeture turbulente pour $\langle U'_{f,i}U'_{f,j}\rangle$ et une autre, à un ordre inférieur ou égal, pour $\langle U'_{f,j}c'\rangle$.

Les modèles du premier ordre consistent à directement exprimer les flux turbulents en fonction du gradient des grandeurs moyennes. Cette fermeture fait intervenir un tenseur (de viscosité turbulente pour les composantes du vent, de diffusivité turbulente pour les scalaires température et concentration). Ce tenseur est à son tour exprimé de différentes manières selon le modèle de turbulence envisagé. Nous pouvons citer à titre d'exemple le modèle classique $k - \epsilon$, qui introduit l'énergie cinétique turbulente k et la dissipation ϵ dans l'expression du tenseur turbulent par l'intermédiaire de ν_t , quantités déterminées par la résolution des équations de transport qui leur sont associées :

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \langle U_{f,j} \rangle \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P + G - \rho \epsilon + S_k , \qquad (2.3a)$$

$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \rho \langle U_{f,j} \rangle \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} (P + C_{\epsilon 3} G) - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon , \qquad (2.3b)$$

où S_k et S_{ϵ} sont des termes sources, P est le terme de production d'énergie cinétique turbulente par cisaillement et G est le terme de production ou destruction d'énergie cinétique turbulente par flottabilité.

Les constantes introduites dans les équations (2.3) sont déterminées à partir d'expériences (LAUNDER et SPALDING, 1974) et sont exposées dans la Table 2.1. La valeur de C_{ϵ_3} est, quant à elle, tirée des travaux de VIOLLET (1988) : $C_{\epsilon_3} = 0$ pour une atmosphère stable (G < 0), $C_{\epsilon_3} = 1$ pour une atmosphère instable (G > 0).

Chapitre 2. Modélisation de la dispersion atmosphérique : généralités

Par ailleurs, il existe dans la littérature d'autres paramétrisations possibles, en dehors de celle de LAUNDER et SPALDING (1974), pour les constantes de la Table 2.1, notamment dans le cadre de travaux atmosphériques. Nous référons le lecteur en particulier aux travaux de DETERING et ETLING (1985) et DUYNKERKE (1988). Dans le cadre de nos travaux de thèse, nous utiliserons la paramétrisation dite "standard" de LAUNDER et SPALDING (1974).

Le modèle $k - \epsilon$ est le modèle le plus largement utilisé dans les études industrielles car il s'agit d'un modèle relativement simple, robuste, et disponible dans presque tous les codes. Dans ce cas, les flux scalaires turbulents sont exprimés en introduisant, par analogie avec la loi de diffusion moléculaire de Fick, le tenseur de diffusivité turbulente K_{ij} , relié au flux $\langle U'_{f,j}c' \rangle$ de la manière suivante :

$$\langle U'_{f,j}c'\rangle = -K_{ij}\frac{\partial\langle c\rangle}{\partial x_j}$$
 (2.4)

Généralement, K_{ij} est supposé diagonal, et dans le cas du modèle $k - \epsilon$, il est exprimé en fonction des grandeurs turbulentes de l'écoulement au point considéré de la façon suivante :

$$K_{ii} = \frac{\nu_t}{Sc_t} , \qquad (2.5)$$

où $\nu_t = C_{\mu}k^2/\epsilon$ est la viscosité turbulente et Sc_t le nombre de Schmidt turbulent, usuellement compris entre 0.7 et 1 pour l'air.

Les modèles du second ordre, quant à eux, déterminent les flux turbulents directement par la résolution de leurs propres équations de transport. Ces modèles font alors intervenir de nouvelles inconnues : les corrélations triples entre les fluctuations turbulentes, qu'il s'agit alors de modéliser. Un exemple de modèle du second ordre est le modèle dit $R_{ij} - \epsilon$, qui résout les équations de transport pour les tensions de Reynolds et la dissipation turbulente.

Le choix du modèle de turbulence se fait en fonction du niveau de détail requis, de la physique du problème ou des objectifs applicatifs des études menées. Pour donner un exemple concret, dans le cas de l'atmosphère, le modèle $R_{ij} - \epsilon$ est en théorie plus approprié que le modèle $k - \epsilon$, ce dernier ne rendant pas compte mathématiquement des phénomènes d'anisotropie de la turbulence atmosphérique.

2.2.3.2 La modélisation LES

Le principal problème de la modélisation RANS dans l'étude de la dispersion atmosphérique est qu'étant donné que toutes les échelles tourbillonnaires sont modélisées de manière statistique, elle ne rend compte que globalement du rôle et de l'effet des différentes tailles de tourbillons sur le nuage dans l'écoulement.

La modélisation LES permet en partie de lever ce problème car elle résout explicitement les équations de Navier-Stokes pour les grosses structures (*i.e.*, celles de taille supérieure à la taille de maille utilisée) donc leur effet sur la dispersion est explicitement pris en compte. Les structures de taille inférieure à la taille de maille utilisée sont quant à elles modélisées par un modèle dit de sous-maille, donc il s'agit de garder à l'esprit que l'approche LES ne fournit pas exactement toute l'information.

Toutefois, l'argument principal en faveur de cette approche est avancé notamment par TOWNSEND (1980) et TENNEKES et LUMLEY (1972), selon qui les écoulements turbulents diffèrent les uns des autres principalement par leurs grandes structures tourbillonnaires : les petites échelles sont elles statistiquement similaires quel que soit l'écoulement et la paramétrisation sous-maille a ainsi des propriétés universelles et indépendantes des différences dues aux grandes échelles des écoulements.

2.2.3.3 La simulation DNS

Pour une résolution complète de toutes les structures tourbillonnaires, il faudrait idéalement se tourner vers la DNS mais son coût est très élevé si bien que celle-ci n'est pas encore envisageable aux échelles atmosphériques (nombre de Reynolds *Re* très grand) avec les moyens de calcul dont nous disposons actuellement.

Ainsi, pour conclure, l'avantage principal des modèles eulériens repose sur le fait qu'ils permettent de tenir compte de toutes les variations du champ de vitesse en environnement complexe. Cependant, ils impliquent en conséquence un temps de calcul relativement important. De plus, ils ne sont généralement pas adaptés au voisinage des sources, du moins pour le cas des modèles RANS à viscosité turbulente. En effet, dans ces modèles, le tenseur de diffusivité turbulente est supposé dépendre uniquement des caractéristiques locales de l'écoulement et ne prend donc pas en compte la distance à la source et la taille du panache. Or, nous avons pu voir que celui-ci est en fait très variable du fait de la contribution différente à la dispersion du nuage des différentes échelles de structures tourbillonnaires. Afin de capturer la différence de comportement entre champ proche et champ lointain, il est préférable de se tourner vers les modèles lagrangiens de type Langevin, qui présentent l'avantage de remplir cette mission. A ce stade, il est important de noter que cette distinction pourrait également être capturée par un modèle eulérien du second ordre sur les fluctuations de concentration (voir détails dans le cas de dispersion d'un rejet ponctuel en vitesse et turbulence homogènes dans BAHLALI et al. (2018b) – article également joint en Annexe B de ce manuscrit). Cependant, ce type de modèle adapté à l'atmosphère est à l'heure actuelle en cours de développement, et n'a donc pas été étudié dans le cadre de cette thèse. Plus de détails sur les relations entre modèles lagrangien et eulérien à différents ordres sont fournis dans le chapitre 3.

2.2.4 Modèles lagrangiens

Les modèles lagrangiens consistent à reproduire le transport convectif des polluants dans l'atmosphère en suivant de manière explicite un grand nombre de particules fluides, dont l'évolution des vitesses est généralement gouvernée par une équation différentielle stochastique de type Langevin. La principale force des modèles lagrangiens réside dans le fait qu'ils traitent la convection sans approximation. Par ailleurs, ils permettent également de s'affranchir des éventuels problèmes de diffusion numérique pouvant être rencontrés avec les modèles eulériens. Enfin, comme nous l'avions précédemment mentionné, un modèle lagrangien de type Langevin est capable de capturer la distinction entre les deux régimes de diffusion correspondant au champ proche et au champ lointain.

Pour être plus rigoureux, l'approche suivie dans ces travaux de recherche suit une formulation hybride eulérienne/lagrangienne, où les champs dynamiques moyens relatifs au fluide porteur (pression, vitesse, température, turbulence) sont calculés via une approche eulérienne et sont ensuite fournis au solveur lagrangien. Ce type de formulation est couramment utilisé dans la littérature atmosphérique pour son efficacité numérique. Notons que dans le cas de notre travail de thèse, nous obtenons les champs dynamiques au moyen du code de calcul CFD *Code_Saturne* utilisé avec un modèle RANS, qui résout donc les équations eulériennes de Navier-Stokes de l'écoulement du vent moyen.

Suivre la trajectoire d'une particule est équivalent à connaître sa position à tout instant, connaissant sa position à un temps initial donné. En se plaçant dans un repère que nous noterons $R = (\mathbf{e_x}, \mathbf{e_y}, \mathbf{e_z})$, la description de la position de cette particule revient à la résolution du système suivant :

$$dX_{p,x} = U_{p,x}(t)dt , \qquad (2.6a)$$

$$dX_{p,y} = U_{p,y}(t)dt , \qquad (2.6b)$$

$$dX_{p,z} = U_{p,z}(t)dt , \qquad (2.6c)$$

où $X_{p,x}$, $X_{p,y}$, $X_{p,z}$ sont les coordonnées de la particule dans le repère R et $U_{p,x}$, $U_{p,y}$, $U_{p,z}$ les composantes de la vitesse des particules dans ce même repère.

Pour résumer et fixer les idées, l'objectif est de calculer le champ de vitesse lié aux particules $U_{p,i}(t)$ afin de pouvoir remonter aux positions des particules via la résolution du système d'équations (2.6). Avec la donnée de ces positions à tous les instants, nous serons à même d'obtenir la concentration en polluant, en comptant simplement le nombre de particules dans chaque cellule du domaine puis en convertissant cette donnée en fraction massique ou volumique (plus de détails dans le chapitre 3). Naturellement, la question qui se pose est donc : comment calculer le champ de vitesse particulaire?

Nous sommes à même de répondre à ce problème en réalisant un bilan des forces sur chaque particule et en appliquant à chacune le principe fondamental de la dynamique. Cependant – nous en donnerons plus de détails dans le chapitre suivant – ces nouvelles équations font intervenir le champ de vitesse de vent *instantané* eulérien, ce qui suppose de le connaître entièrement. Or, comme nous l'avons mentionné plus haut, notre approche hybride eulérienne/lagrangienne résout les champs dynamiques à l'aide d'un modèle de turbulence RANS du code CFD *Code_Saturne*, ce qui ne nous fournit que la *valeur moyenne* des champs de vitesse et de turbulence liés au vent. Afin de pouvoir résoudre les nouvelles équations apportées par le principe fondamental de la dynamique, nous devons donc reconstituer l'effet de la turbulence. C'est précisément là qu'interviennent les modèles lagrangiens stochastiques.

Les méthodes lagrangiennes sont en effet le plus souvent associées à des modèles stochastiques de dispersion régissant l'évolution des champs de vitesse associés aux particules. Cette idée a initialement été proposée par TAYLOR (1921), qui, du fait du caractère aléatoire de la turbulence, choisit de représenter le mouvement des particules au moyen d'une équation différentielle stochastique, dite équation de Langevin, que nous introduirons au prochain chapitre. Il est alors important de comprendre que tout le problème qui se pose au niveau de la modélisation de la dispersion est ainsi de disposer d'un modèle stochastique consistant physiquement, notamment avec le champ de vitesse du vent. Dans cette perspective, nous nous attacherons dans le chapitre suivant à détailler les principaux modèles lagrangiens stochastiques de la littérature.

2.2.5 Modèles gaussiens

Les modèles gaussiens se basent sur des solutions analytiques de l'équation d'advectiondiffusion (2.1), couplée à des paramétrisations semi-empiriques des principaux phénomènes physiques.

Nous choisissons ici de présenter le cas simple d'un rejet ponctuel et instantané d'une quantité Q de polluant au centre d'un repère fixe $(\mathbf{e_x}, \mathbf{e_y}, \mathbf{e_z})$. Un certain nombre d'autres hypothèses simplificatrices sont formulées :

- l'espèce rejetée est inerte et passive;
- il n'y a pas de mouvement moyen;
- la turbulence est considérée stationnaire;
- le terme de diffusion moléculaire est négligeable par rapport au terme de diffusion turbulente.

Sous ces hypothèses, ROBERTS (1923) introduit la solution suivante :

$$\langle c \rangle(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{1}{2t} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right)\right) ,$$
 (2.7)

où les σ_i sont les écarts-types de cette distribution de concentration.

Celle-ci a une forme gaussienne et donne ainsi son nom au modèle. L'approche gaussienne consiste en fait à paramétrer les écarts-types ci-dessus à partir de campagnes de mesures. Parmi les paramétrisations les plus utilisées, nous pouvons citer celles de DOURY (1976) et PASQUILL (1961). Par ailleurs, cette solution élémentaire peut être intégrée sur le temps ou l'espace afin d'obtenir les solutions analytiques de nombreux problèmes : bouffée, panache, rejet ponctuel, linéique, etc.

Cependant, outre le fait d'être basés sur des paramétrisations empiriques, les modèles gaussiens présentent d'autres limitations : en particulier, excepté les modèles dits de nouvelle génération, ils ne prennent pas en compte la topographie, la rugosité des sols ou encore la présence de bâtiments et d'obstacles – ou alors parfois, mais de manière très simplifiée.