



République Algérienne Démocratique et Populaire.
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université Hassiba BEN BOUALI de CHLEF

Faculté de Technologie

Département de Génie des Procédés

Laboratoire Eau – Environnement

Option: Environnement et Energies Renouvelables

Mémoire de Magister

Thème :

***Modélisation de la dispersion d'un
polluant gazeux dans l'atmosphère***

Soutenu le 26 septembre 2012

Présenté Par : **MAOUCHE Wahiba**

Devant le jury :

Mr. Achour Djilali	Professeur, UHB. Chlef	Président
Mr. Dounit Salah	M.C.A, UKM. Ouargla	Examineur
Mr. Benarous Abdallah	M.C.B, UHB. Chlef	Examineur
M^{elle}. S. Kouadri Moustefai	M.C.A, UHB. Chlef	Promoteur
Mr. Douani Mustapha	M.C.A, UHB. Chlef	Co-promoteur:

Promotion : 2011

Remerciements :

Je remercie ma directrice de thèse, Dr. Kouadri Moustfai Soumia, maître de conférences à l'université de l'UHBC pour avoir dirigé ce mémoire. Je lui adresse ma gratitude pour la confiance qu'elle m'a accordée, ainsi que pour ses précieux conseils, sa disponibilité et son encouragement,

Un grand merci à Monsieur Douani Mustapha qui m'a beaucoup aidé pendant ces trois années, particulièrement pour sa bonne humeur ; sans lui la forme des résultats serait moins attrayant.

Je remercie vivement professeur D. Achour à l'UHBC, de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de mon mémoire,

Je remercie sincèrement Mr. S. Dounit à l'université d'Ouargla, d'avoir accepté d'être membre jury,

Mes plus sincères remerciements vont également à monsieur M Abdallâh Benarous, maître conférences B à l'UHBC, pour son aide, ses conseils et ses remarques judicieuses,

Je tiens à également remercier Professeur, Mr. A. OUAGUED Directeur du Laboratoire d'Eau-Environnement de l'université Hassiba Benbouali de Chlef, de m'avoir accueilli au sein du laboratoire. J'aimerais également témoigner de mon appréciation pour l'implication de Monsieur Moukhtar Didouche qui n'est pas hésité à partager son expérience sur le code Fluent.

J'en profite aussi pour remercier mes collègues pour leur sympathie et l'ambiance amicale. J'ai une pensée pour mes parents, mon frère, mes sœurs, mes proches ainsi que mes petites Wail Omrane et Alâa.

Enfin, toutes mes pensées vont à Taieb, mon marie, pour son dévouement éternel, ses sacrifices et son attention sans limite depuis le début de ce mémoire. Il a toujours été à mes côtés pendant les moments difficiles, je lui dédie cette thèse.

M. Wahiba

Résumé

L'objectif de cette thèse est d'évaluer les performances et les limitations des différents paramètres qui influenceraient la dispersion des aérosols dans l'atmosphère (vent et conditions d'éjections) à l'échelle régionale. Les équations de Navier-Stokes en deux dimensions, les équations de conservation de la masse et de l'énergie, ont été résolues par la méthode des volumes finis. L'algorithme SIMPLEC a été utilisé pour le couplage pression-vitesse. Les résultats des simulations ont confirmé que la pollution en dioxyde de soufre est plus intense pour le cas de présence de vent (piégeage des polluants dans la couche limite atmosphérique) et faible pour le cas d'absence de vent qui on suggère qu'il est minimiser l'établissement d'habitations et des fermes dans la périphérique des industries.

Mots-clés : pollution, atmosphère, modélisation, aérosol, turbulence, couche limite

Abstract

The objective of this thesis is to evaluate the performance and limitations of various parameters influencing the dispersion of aerosols in the atmosphere (wind and conditions ejections) at the regional level. The permanent forms of Navier-Stokes equations in two dimensions and the equations of conservation of mass and energy were solved by the finite volume. The algorithm was used to SIMPLEC the pressure-velocity coupling. The simulation results have confirmed that the SO₂ pollution is more intense in case of windy conditions (trapping pollutants in the atmospheric boundary layer) and lower for the absence of wind which suggests that it is denied any establishments housing and farms in the peripheral industries.

Key words: pollution, atmosphere, modelling, aerosol, turbulence, boundary layer

ملخص

الهدف من هذه الأطروحة هو تقييم الأداء وتحديد مختلف المعايير التي تؤثر على انتشار الحبيبات العالقة في الغلاف الجوي (الرياح و ظروف الانبعاث) على الصعيد الإقليمي. معادلات نافير ستوكس ذات بعدين، معادلات حفظ الكتلة والطاقة، سوف يتم حلها عن طريق أسلوب الحجم المحدود. و لاقتران الضغط و السرعة تم استخدام خوارزمية SIMPLEC. نتائج المحاكات أكدت أن التلوث البيئي بال SO2 يكون بأكثر كثافة في حالة هبوب الرياح (احتباس الملوثات في طبقة الغلاف الجوي المحدود)، و ضعيفة في حالة غياب الرياح. لذلك يمنع منعاً باتاً إنشاء أي مواقع سكنية أو مزارع قرب المصانع.

مفتاح الكلمات : التلوث، الغلاف الجوي، النمذجة، الحبيبات العالقة، الاضطراب، طبقة محدودة.

Sommaire

Listes des figures

Listes des tableaux

Introduction	1
Chapitre I : Généralités sur l'atmosphère et la pollution atmosphérique	4
I.1. L'atmosphère : généralités	4
I.1.1. Identification des strates atmosphériques.....	4
I.1.2. Composition chimique de l'atmosphère.....	6
I.2. Les polluants atmosphériques.....	8
I.2.1. Définition de la pollution atmosphérique.....	8
I.2.2. Source de pollution et de différents polluants	8
I.2.2.1. Les sources naturelles.....	8
I.2.2.2. Les sources dues aux activités industrielles.....	9
I.2.2.3. Les différentes échelles de la pollution atmosphérique.....	9
I.2.2.4. Classification des polluants atmosphériques.....	11
I.3. Les principaux polluants et leurs sources	13
1. Le dioxyde de soufre (SO ₂)	13
2. Les oxyde d'azote (NO et NO ₂)	13
3. Les particules	13
4. Les métaux lourds	13
5. Les hydrocarbures et les composés organiques volatils (COV)	14
7. Le monoxyde de carbone.....	14
8. L'ammoniac (NH ₃)	14
9. L'ozone et les polluants photochimiques.....	14
I.4. Évolution des moyennes annuelles pour les sites urbains de quatre polluants dans l'air	15
I.5. Exemple concret des effets du soufre sur le climat.....	15
I.6. Recommandations de l'Organisation Mondiale de la Santé	17
Conclusion	17
Chapitre II : Généralités sur les aérosols atmosphériques	18
II. Généralités sur les aérosols	18
II.1. Définition	18
II.2. Sources d'aérosols	18
II.2.1. Aérosols naturels.....	18
II.2.2. Aérosols anthropiques	19
II.3. Caractéristiques chimiques	22

II.4. Etapes de formation des particules.....	22
II.4.1. Nucléation des gaz	22
II.4.2. Condensation des gaz sur les aérosols	22
II.4.3. coagulation d'aérosols	22
II.5. Caractéristiques physiques et dépôt.....	23
II.6. Propriétés radiatives des aérosols.....	23
II.6.1. Effet direct	23
II.6.2. Effet semi direct	24
II.6.3. Effet indirect	24
II.7. La dispersion des aérosols en fonction de leur taille.....	25
II.8. Origines et l'effet de dioxyde de soufre.....	26
II.8.1. Le dioxyde de soufre.....	26
II.8.2. Effets du dioxyde de soufre	27
II.9. La réglementation	30
II.10. Les facteurs influençant la dispersion des polluants.....	31
1. Facteurs « directs » affectant la dispersion.....	31
2. Facteurs « indirects » affectant la dispersion	31
II.10. 1. L'influence du facteur vent et du gradient longitudinale de température.....	31
II.10. 2. Profil vertical de la vitesse du vent.....	31
II.10.3. Profils de température et de pression dans la troposphère.....	32
II.10.4. L'effet de l'accélération de Coriolis.....	33
II.10.5. Influence de l'orientation de la vitesse du vent sur la dispersion d'un polluant autour d'un bâtiment.....	33
II.10.6. L'influence des conditions climatiques.....	34
II.10.7. Stabilité de l'atmosphère.....	35
Conclusion.....	37

Chapitre III : Modélisation de la dispersion des polluants

III. Introduction	38
1. Modèles Eulériens.....	38
2. Modèles Lagrangiens.....	39
III.1. Modélisation mathématique	39
III. 1.1. Présentation du milieu de pollution.....	39
III.2. Formulation mathématique.....	40
• Equation de conservation de continuité	40
• Equation de quantité de conservation de mouvement	41

• Equation de conservation de l'énergie	42
• Equation de transport d'espèces	42
III.3. Modélisation de la turbulence	43
III.4. La méthode de volumes finis et l'algorithme SIMPLEC.....	44
• Le Critère de convergence.....	46
• Notion de sous relaxation	47
III .5. Conditions aux limites	48
1. Conditions d'entrées du fluide.....	49
2. Conditions de sortie du fluide	49
3. Condition en vitesse.....	50
III .6. Maillage.....	52
Conclusion	53
Chapitre IV : Simulation numérique	
IV.1. Introduction.....	54
IV.2. les principales hypothèses.....	54
IV.3. principes des codes CFD.....	55
IV.4. Choix de maillage	56
IV.5. Conditions des simulations.....	57
IV.6. Régime instationnaire	58
IV.7. Résultats et discussions	58
IV.7.1. profile de la vitesse et la concentration en	59
1 ^{er} cas : Absence de circulation de vent.....	59
• Profils verticaux de la vitesse des particules SO ₂	60
• Profils verticaux de (C/C ₀) de particules de SO ₂	62
2 ^{ième} cas : Ejection en présence du vent	64
• Profils verticaux de (C/C ₀) de particules de SO ₂	65
• Effet de la couche limite sur la dispersion des espèces.....	67
• Profils horizontaux de C/C ₀ de particules de SO ₂	70
1 ^{er} cas : Absence de circulation de vent.....	70
2 ^{ième} cas : Ejection en présence du vent.....	72
Conclusion.....	75
V. Conclusion et perspectives.....	73

Références bibliographiques

Annexe A

Liste des figures

Chapitre I Généralités sur l'atmosphère et la pollution atmosphérique

Figure I.1 : Structure verticale de l'atmosphère.....	5
Figure I.2 : Distribution verticale moyenne de la concentration de différents gaz en traces dans l'atmosphère.....	6
Figure I.3: Le trou dans la couche d'ozone.....	11
Figure I.4 : Évolution de quatre polluants utilisés dans l'indice de qualité de l'air.....	15
Figure I.5 : La pollution mondiale par les composés soufrés.....	16

Chapitre II Généralités sur les aérosols atmosphériques

Figure II-1 : Composition chimique de l'aérosol typique.....	22
Figure II-2: Sources, formation d'aérosols et leur évolution selon leurs tailles.....	23
Figure II.3 : Effet direct des aérosols.....	24
Figure II.4 : Effet semi direct des aérosols.....	24
Figure II.5 : Effet indirect des aérosols.....	25
Figure II-6 : La dispersion des aérosols en fonction de leur taille.....	25
Figure II-7 : concentration des émissions de SO ₂ et SO ₃ en fonction du temps écoulé respectivement. Du gradient de dilution à partir de la source d'émission.....	28
Figure II-8: voies d'oxydation pour le SO ₂ en phases gazeuse et aqueuse.....	28
Figure II-9 : Evolution de la teneur en SO ₂ avec le temps suite à l'application des lois de préservation de l'environnement.....	30
Figure II.10: Profil vertical de la vitesse du vent en fonction de l'altitude.....	32
Figure II.11: l'influence de l'orientation de la vitesse du vent sur les caractéristiques dynamiques et thermiques du panache.....	33
Figure II.12 : Effet d'un changement de rugosité sur le champ de vent.....	35
Figure II.13: Contour de la fraction massique de CO ₂ pour une cheminée droite.....	36
Figure II.14: Contour de la fraction massique de CO ₂ pour une cheminée coudée.....	36

Chapitre III Modélisation de la dispersion des polluants

Figure III-1 : Modèle géométrique de milieu de diffusion des polluants.....	40
--	----

Figure III-2 : Volume de contrôle.....	46
Figure III-3 : Algorithme de calcul pour un solveur découplé.....	48
Figure III.4 : géométrie du milieu de dispersion pour.....	51
Figure III.5 : Schématisation du problème et de maillage du milieu étudié.....	52
Chapitre IV Simulation numérique	
FigureIV.1 : profil de vitesse pour différents maillages.	57
FigureIV.2 : profil vertical de C/C_0 aux différents temps.	59
Figure IV. 3 : Le champ dynamique de la vitesse de SO_2	59
Figure IV.4 : Le champ dynamique de la fraction massique de SO_2	60
Figure IV.5 : profil de la vitesse de particule de SO_2 avec l'altitude pour différentes compositions à l'éjection.....	60
Figure IV.6 : profil de la vitesse de particule de SO_2 avec l'altitude pour différentes températures d'éjection	61
Figure IV.7 : profil de la vitesse de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes vitesses d'éjection	61
Figure IV.8 : profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes compositions à l'éjection	62
Figure IV.9 : profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes températures d'éjection	62
Figure IV.10 : profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes vitesses d'éjection	63
Figure IV.11 : Champ dynamique de la vitesse de dioxyde de soufre pour une vitesse de vent potentiel $u_\infty = 8$ m/s	64
Figure IV.12 : Champ dynamique de la concentration molaire de dioxyde de soufre pour une vitesse de vent potentiel $u_\infty = 8$ m/s	64
Figure IV.13 : profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes vitesses d'éjection.....	65
Figure IV.14 : profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes compositions à l'éjection.....	65
Figure IV.15 : profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes températures.....	67
Figure IV.16 : profil vertical de C/C_0 de SO_2 pour différentes vitesses de vent potentiel	67
Figure IV.17 : profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes vitesses de vent potentiel...	69
Figure IV.18 : profil horizontale de C/C_0 de SO_2 pour différentes compositions à l'éjection	70

Figure IV.19: profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes vitesses d'éjection	70
Figure IV.20: profil horizontale de C/C_0 de SO_2 pour différentes températures d'éjection...	71
Figure IV.21: profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes températures d'éjection ...	72
Figure V.22: profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes vitesses d'éjection	73
Figure IV.23: profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes compositions à l'éjection..	73
Figure IV.24: profil horizontal de la température des particule de SO_2	74

Liste des tableaux

Chapitre I Généralités sur l'atmosphère et la pollution atmosphérique

Tableau I.1	Composition chimique de l'atmosphère.....	7
Tableau I.2:	Classification des polluants atmosphériques.....	12

Chapitre II Généralités sur les aérosols atmosphériques

Tableau II.1:	Différentes sources d'aérosols et leur taux de production globale annuel.....	20
Tableau II.2:	Principales sources d'aérosols.....	21
Tableau II.3 :	normes de qualité de l'air.....	30

Chapitre III Modélisation de la dispersion des polluants

Tableau III.1 :	conditions aux limites.....	50
-----------------	-----------------------------	----

Chapitre IV Simulation numérique

Tableau IV.2 :	Domaine de variation des différents paramètres opératoires.....	57
----------------	---	----

Nomenclature

Nomenclature :

- C_0 : Concentration initiale (kg.m^{-3} d'air) ;
- C_i : Concentration de l'espèce i (kg.m^{-3} d'air) ;
- $D_{T,j}$: Coefficient de diffusion moléculaire ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$) ;
- f : Coefficient de pondération ;
- $F(\phi(x, t))$: Fonction d'évolution temporelle d'une variable ϕ ;
- \vec{F} : Forces d'interactions entre espèce ;
- g : Accélération gravitationnelle ($9,81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$) ;
- H_c : Hauteur de cheminée (m) ;
- D_c : Diamètre de cheminée (m) ;
- k : Energie cinétique (m^2/s^2) ;
- L_c : Distance butoir (m) ;
- M_j : Masse molaire de constituant j (g/mol) ;
- $P(z)$: Pression à la hauteur z (atm) ;
- $P(z_{\text{ref}})$: Pression à la hauteur de référence z_{ref} (atm) ;
- p : Pression instantanée (Pa) ;
- R : Constante de gaz parfait ($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{mole}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) ;
- S : Terme source ;
- t : Temps (s) ;
- T_{sor} : Température de sortie ($^{\circ}\text{K}$) ;
- $T(z)$: Température locale à la hauteur z (K) ;
- T_{amb} : Température ambiante à la hauteur de référence z_{ref} (K) ;
- u_i : Composante du vecteur vitesse ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) ;
- u_{∞} : Vitesse du vent dans l'écoulement potentiel ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) ;
- V_{sor} : Vitesse de sortie (m/s) ;
- X_{sor} : Fraction de sortie ;
- X_j : Fraction massique de constituant j ;
- Y, z : Variables d'espaces ;
- Z_0 : Hauteur de rugosité (m) ;
-

Nomenclature

Nombres sans dimensions

R_e : Nombre de Reynolds (.) ;

P_e : Nombre de Peclet (.) ;

Lettres grecques

α : Gradient longitudinal de température ($^{\circ}/m$) ;

β : Coefficient de dilatation ;

c_{pj} : Capacité thermique massique à pression constante du constituant j ;

C_{μ} : Constante universelle ;

ε : Taux de dissipation de k ($m^2.s^{-3}$) ;

$\bar{\rho}$: Masse volumique moyenne (kg/m^3) ;

ρ : Masse volumique de l'air ambiant (kg/m^3) ;

μ : Viscosité dynamique du fluide ($kg.m^{-1}.s^{-1}$) ;

ν : Viscosité cinématique ($m^2.s^{-1}$) ;

λ : Longueur d'onde (nm) ;

δ : Epaisseur locale de la couche limite (m) ;

φ : Variable quelconque du problème ;

$\bar{\tau}$: Tenseur des contraintes ;

Γ_{ϕ} : Coefficient de diffusion ;

$\bar{\phi}$: Valeur moyenne ;

ϕ' : Terme de fluctuation turbulente ;

μ_{turb} : Viscosité turbulente ;

Abréviations

MEA : Mono éthanol amine ;

DEA : Di éthanol amine ;

TEA : Tri éthanol amine ;

CLA : Couche limite atmosphérique ;

Nomenclature

CLS :	Couche limite de surface ;
CFD :	Computational Fluid Dynamics ;
GIEC :	Groupe d'experts intergouvernementaux sur l'évolution du climat ;
CAFE :	Clean Air For Europe ;
CCN :	Cloud Condensation Nuclei;
(DAO) :	Dessin Assisté par Ordinateur ;

Espèces chimiques

CO :	Monoxyde de carbone ;
CO₂ :	Dioxyde de carbone ;
HC :	Hydrocarbures ;
HO₂· :	Radicaux hydroperoxydes ;
HNO₃ :	Acide nitrique ;
NO :	Monoxyde d'azote;
NO₂ :	Dioxyde d'azote;
NO_x :	<i>NO+NO₂</i> ;
O₂ :	Oxygène;
O₃ :	Ozone;
OH· :	Radical hydroxyle ;
RO₂· :	Radicaux peroxydes ;
PAN :	Peroxyacélnitrates ;
SO₂ :	Dioxyde de soufre ;
RCHO :	Aldéhydes ;

*Introduction
générale*

Introduction

Un des problèmes majeurs que doit affronter actuellement la population mondiale est celui de la pollution de l'air engendrée principalement par les rejets des installations industrielles. Outre son impact indiscutable sur la santé humaine dans les zones urbaines, cette pollution en croissance constante durant les cinq dernières décennies contribue à un déséquilibre de l'écosystème pour apporter des modifications profondes du climat à l'échelle planétaire. Il y a lieu de noter qu'une grande partie de l'énergie domestique et industrielle responsable de cette pollution est produite par des procédés de combustion de matière d'origine fossile [1], dont le résultat est, de toute évidence, des espèces polluantes extrêmement toxiques, telles que les oxydes de carbone (CO_x), les oxydes d'azote (NO_x), les oxydes de soufre (SO_2) et les aérosols [2].

Etant un sujet d'actualité par excellence, le thème de changement climatique occupe une place importante particulièrement dans les débats aussi bien politiques que scientifiques, compte tenu des interactions de ces espèces avec les molécules constitutives de la biosphère et de l'atmosphère. L'exploitation outrancière du sol par le recours à la déforestation, les conduites culturales telles que l'irrigation et l'urbanisation sont autant de facteurs d'origine anthropique engendrant une quasi-mutation observable par les scientifiques et les organismes internationaux chargés de la protection de l'environnement. A l'échelle globale, le problème de l'évolution du climat est beaucoup plus complexe à analyser et à comprendre du fait principalement des rétroactions, des sources et puits des gaz à effet de serre non identifiables de manière très précise [3].

Les aérosols atmosphériques sont parmi les constituants primordiaux de l'atmosphère. On désigne sous le terme d'aérosols des suspensions, en milieu gazeux, de particules extrêmement fines, présentant une faible vitesse de chute. Leur taille est généralement comprise entre 10^{-2} μm et 100 μm , et leur nature chimique est très variée. De plus, leur concentration est caractérisée par une grande variabilité spatio-temporelle du fait de leur faible temps de résidence dans l'atmosphère. C'est pourquoi leur présence et leur mode d'action sur le climat sont parfaitement corrélés avec leur concentration instantanée dans l'atmosphère qui dépend naturellement de l'activité émettrice de leurs sources. Dans cette logique, il en découle que l'étude de l'aérosol atmosphérique doit être conduite à l'échelle régionale [4].

Ces particules jouent un rôle important dans le bilan radiatif de la terre car, eu égard à leurs propriétés optiques, elles sont responsables de la diffusion et de l'absorption des rayonnements solaire et tellurique. Egalement, elles sont impliquées dans le cycle hydrologique via leurs interactions avec les nuages. En effet, certains aérosols servent de noyaux de condensation pour les nuages; donc pour une même quantité d'eau liquide, la taille des gouttes diminue fortement en présence d'aérosols, ce qui a pour effet d'augmenter la diffusion du rayonnement et donc d'augmenter la réflectivité des nuages. [5]

En concentration importante, les aérosols sont à l'origine de maladies respiratoires. Plus largement, ils ont aussi un impact sur :

- 1) La production photochimique de polluants secondaires comme l'ozone ;
- 2) La réduction de la visibilité atmosphérique ;
- 3) La qualité de l'air. [6]

Compte tenu de la complexité du problème de pollution suite à la présence d'aérosols de sources diverses et en vue d'analyser le phénomène de leur dispersion dans l'atmosphère, on s'est attelé, dans le cadre de cette contribution, à l'étude numérique du transfert par diffusion advective des aérosols dans une cavité bidimensionnelle. Cette étude consistera essentiellement au développement d'un code de calcul dans le but de la simulation numérique du phénomène en tenant compte des principaux facteurs qui affecteraient l'expansion de cette source de pollution.

Les principaux éléments de compréhension sont donnés dans le premier chapitre, en essayant notamment de classifier les différents types de pollution atmosphérique. La composition chimique de l'atmosphère est précisée.

Le second chapitre dresse les propriétés et les caractéristiques des aérosols tout en accordant un intérêt particulier au dioxyde de soufre. Leurs impacts sanitaires et environnementaux seront abordés assez succinctement en vue d'appréhender l'importance et l'acuité du problème posé par les rejets aérosolaires dans l'atmosphère.

Le troisième chapitre résume brièvement la description du phénomène dispersif du dioxyde de soufre dans les couches atmosphériques, notamment dans la couche troposphérique (les 15 premiers kilomètres). On utilisera l'approche de la mécanique des fluides. L'accent est particulièrement porté sur l'effet de la variation verticale du champ de vitesse du vent et le rôle joué par les conditions météorologiques dans la dispersion du dioxyde de soufre.

Le dernier chapitre sera axé sur les outils modernes de la modélisation numérique, CFD (Computational Fluid Dynamics), qui reprennent la formulation mathématique des

interactions très complexes impliquées dans les processus décrits dans les parties précédentes. Des applications et des thématiques actuelles de modélisation sont également données. A travers ce chapitre et après identification du maillage adéquat, on analysera l'ensemble des résultats de simulation dans la perspective de la détermination des conditions favorables et des espaces (plages) où la dispersion du polluant serait plus ou moins affectée.

Pour couronner cette étude, nous dégageons une conclusion avec des suggestions que nous développerons.

Chapitre I
Généralités sur
l'atmosphère et la
pollution
atmosphérique

I.1. L'atmosphère : généralités

I.1.1. Structure de l'atmosphère

D'après M. Pierre et al [7], les propriétés de l'atmosphère vont jouer un rôle plus ou moins moteur dans la dispersion d'un produit [7].

Dans le cadre de pollution atmosphérique, les phénomènes liés à la dispersion d'un produit ne se produisent que dans la couche inférieure de l'atmosphère, dite **couche limite atmosphérique CLA**, de quelques centaines de mètres d'épaisseur dans la plupart des cas [8]. Dans ce domaine, il importe donc de connaître, en particulier, la structure de l'écoulement du vent et du champ des températures qui vont être caractérisés par deux paramètres fondamentaux :

- Le gradient vertical de vitesse ;
- Le gradient vertical de température [9].

Ces gradients vont particulièrement être influencés principalement par deux mécanismes physiques :

- d'une part, les effets de frottement de l'air sur le sol. Ces effets dépendent des conditions orographiques locales ;
- d'autre part, les échanges de chaleur entre le sol et l'atmosphère. Ces échanges vont varier avec le cycle diurne, les conditions météorologiques et la nature du sol [10].

I.1.2. Identification des strates atmosphériques

En fonction des gradients de température et de composition de la couche atmosphérique, on distingue 3 strates et suivant leur distance par rapport au sol, on note :

1. la troposphère : du sol jusqu'à la tropopause située à une altitude de 8 à 18 km selon les régions. Son gradient thermique vertical est négatif, la température diminue avec l'altitude. L'air chaud près de la surface de la Terre peut aisément se lever car il est moins dense que l'air plus froid au-dessus de lui. Cependant, dans la couche limite atmosphérique (0-1 km), la température peut augmenter avec l'altitude. Une telle situation appelée « inversion de température » limite le mélange vertical de l'air ce qui peut entraîner des épisodes de pollution. La troposphère contient 85-90% de la masse de l'atmosphère et environ 10 % de l'ozone atmosphérique. Celui-ci est au contact des espèces vivantes avec lesquelles il agit comme une espèce irritante et polluante. Il est alors qualifié de « mauvais ozone » en raison de ses effets néfastes sur la santé humaine et sur les végétaux.

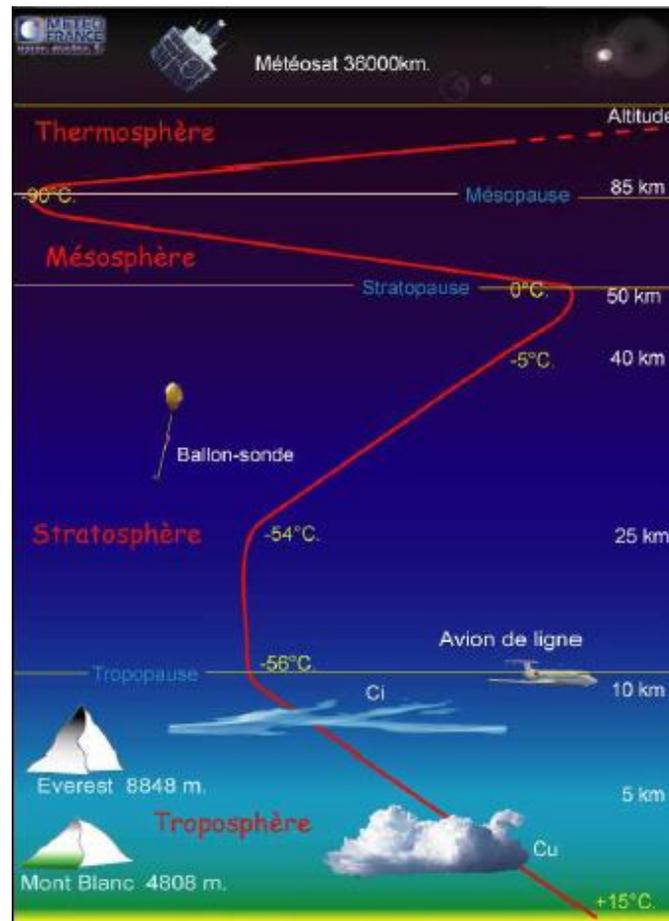


Figure I.1 : Structure verticale de l'atmosphère [11].

2. La couche suivante est la stratosphère et s'étend de la tropopause à une altitude d'environ 50 km. Les mouvements verticaux y sont peu importants du fait du gradient de température positif. C'est dans cette couche que se concentre 90 % de l'ozone de l'atmosphère. L'ozone stratosphérique agit comme une couche protectrice en absorbant le rayonnement ultraviolet solaire le plus énergétique ($\lambda < 290$ nm). L'ozone de la stratosphère est au contraire de l'ozone troposphérique qualifié de «bon ozone» puisqu'il nous protège du rayonnement UV (ultraviolet) solaire néfaste pour les différentes formes de vie terrestre. L'augmentation de la température avec l'altitude résulte de l'absorption du rayonnement solaire par la couche d'ozone. La température atteint 0°C à 50 km.

3. Au delà se trouve la mésosphère qui voit une nouvelle décroissance de la température jusqu'à environ -100°C vers 80-90 km.

Ces trois couches de l'atmosphère constituent l'homosphère. Au-delà de 90 km se trouve l'hétérosphère qui comporte :

1. la thermosphère qui s'étend jusqu'à une altitude de 700 km. et où la température augmente pour atteindre des valeurs maximales qui dépendent étroitement des quantités d'énergie reçues du soleil. Les molécules peuvent y être fortement ionisées ou dissociées en atomes, on parle alors de l'ionosphère.

2. l'exosphère où les molécules échappent à l'attraction terrestre [12].

I.1.3. Composition chimique de l'atmosphère

L'atmosphère terrestre est un mélange de différentes espèces chimiques. Les plus abondantes sont l'azote (78%) et l'oxygène (21%). Ces gaz, aussi bien que les gaz rares, ont des durées de vie très longues face aux destructions chimiques. Par conséquent, ils sont bien mélangés dans toute l'atmosphère. Les composés minoritaires, tels que la vapeur d'eau, le gaz carbonique, l'ozone, le méthane et les espèces azotées jouent un rôle important en dépit de leurs faibles concentrations. Ils influent sur la transmission des rayonnements solaires échangés (incidents et réfléchis) dans l'atmosphère pour influencer le système climatique de la terre. De plus, ils déterminent la capacité oxydante de l'atmosphère. Outre en contrôlant les durées de vie des espèces biogéniques et anthropiques. La figure I-2 montre la distribution verticale de certains gaz [12, 13].

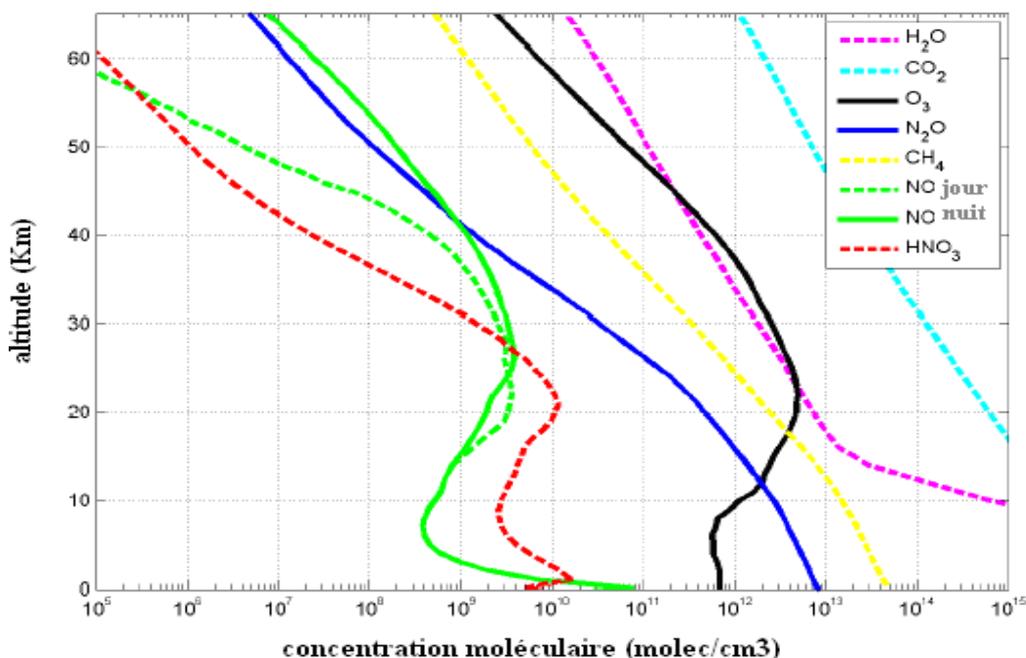


Figure I.2 : Distribution verticale moyenne de la concentration de différents gaz en traces dans l'atmosphère [11].

Le tableau I.1 illustre la composition chimique, les formules, les sources et le rapport volumique de certains polluants dans l'atmosphère :

Tableau I.1 Composition chimique de l'atmosphère [11].

Constituant	Formule chimique	Rapport volumique	Sources majoritaires
Azote	N ₂	78,084%	Biologique
Oxygène	O ₂	20,948%	Biologique
Argon	Ar	0,934%	Inerte
Dioxyde de carbone	CO ₂	360 ppmv	Combustion, océan,
Méthane	CH ₄	1,7 ppmv	Biosphère
Hydrogène	H ₂	0,55 ppmv	Biogénique et anthropique
Oxyde nitreux	N ₂ O	0,31 ppmv	Biogénique, anthropique
Monoxyde de carbone	CO	50-200 ppbv	et photochimique
Ozone troposphérique	O ₃	10-500 ppbv	Biotique et anthropique
Ozone stratosphérique	O ₃	0,5-10 ppm	Photochimique et
Hydrocarbures non méthaniques	C _x H _y	5-20 ppbv	anthropique
Espèces azotées	NO _x	10 ppt-1 ppm	Photochimique
Ammoniac	NH ₃	10 ppt-1 ppb	Biogénique et
Radicaux hydroxyles	OH	0,1-10 ppt	anthropique
Radicaux peroxydes	HO ₂	0,1-10 ppt	Sols, foudre, anthropique
Peroxyde d'hydrogène	H ₂ O ₂	0,1 ppb-10 ppb	Biogénique
Formaldéhyde	CH ₂ O	0,1-1 ppb	Photochimique
Dioxyde de soufre	SO ₂	10 ppt-1 ppb	Photochimique
Sulfure de diméthyle	CH ₃ SCH ₃	10 ppt-100 ppt	Photochimique
Disulfure de carbone	CS ₂	1 ppt-300 ppt	Photochimique
Sulfure de carbonyle	OCS	500 pptv	Photochimique,
Sulfure d'hydrogène	H ₂ S	5 ppt-500 ppt	volcanique, anthropique
Sulfate particulaire	SO ₄ ²⁻	10 ppt-10 ppb	

ppmv: part per million par volume, ppbv : part per billion par volume, pptv : part per trillion,

I.2. Les polluants atmosphériques

I.2.1. Définition de la pollution atmosphérique

«On entend par pollution atmosphérique, l'émission dans l'atmosphère de gaz, des fumées ou de particules solides ou liquides, corrosifs, toxiques ou odorantes de nature à incommoder la population, à compromettre la santé ou la sécurité publique ou à nuire aux végétations, la production agricole et aux produits agro-alimentaires, à la conservation des constructions et monuments ou au caractère des sites » [7].

Les différentes sources émettent de très nombreux polluants dits "primaires" car ils sont émis directement dans l'atmosphère. La figure I.5 présente les classes des principaux polluants de l'air. Une fois émis dans l'atmosphère, ils peuvent soit se redéposer ou soit se dégrader chimiquement, in situ, dans l'atmosphère. Les produits de ces réactions sont alors appelés polluants « secondaires ». Ces deux types de polluants jouent un rôle déterminant par les impacts qu'ils peuvent avoir sur le climat, la santé et les écosystèmes [12].

I.2.2. Source de pollution et de différents polluants

I.2.2.1. Les sources naturelles

L'atmosphère renferme, à côté des éléments de base, une quantité variable de substances naturelles provenant de sources très diverses qui, dépassant un seuil, crée une source de pollution:

- Les feux des forêts, des cultures ou des prairies contribuent à des émissions importantes d'imbrûlés et de gaz.
- Les volcans émettent des gaz comme le dioxyde de soufre et de l'hydrogène sulfureux, et des particules des cendres en grande quantité, dont les nuages peuvent parcourir des distances considérables.
- Les embruns marins sont constitués par des aérosols renfermant des cristaux de sels qui peuvent entraîner une pollution.
- Les végétaux sont à leur tour à l'origine d'une pollution par les pollens, les spores et les champignons.

- L'homme et les animaux rejettent des quantités importantes de dioxyde de carbone et sont à l'origine d'une pollution microbienne.
- L'ozone est formé naturellement à haute altitude à partir de réaction photochimique impliquant l'oxygène de l'air, ainsi une fois transportée dans les zones rurales par le vent, l'ozone se forme en grande quantité lorsque l'insolation est très élevée [11].

I.2.2.2. Les sources dues aux activités industrielles

De nombreux types d'installations industrielles émettant, cependant, également des polluants dans l'atmosphère, constituent généralement un problème local à l'échelle d'une zone ou d'un quartier, et planétaire à grande échelle [14].

1. Les installations fixes de combustions

Parmi ces installations, nous pouvons citer les centrales thermiques, les foyers de combustions de l'industrie et les usines d'incinérations des ordures ménagères.

2. Les installations industrielles

Les installations industrielles sont très diverses, citons la sidérurgie comme la poussière métallique, la pétrochimie, le stockage des produits pétroliers, la métallurgie de l'aluminium, les industries des dérivés azotés, et les cimenteries [15].

3. Les sources automobiles

Le trafic des véhicules roulants occupe, sans conteste, une place déterminante. Les prestations de circulation ont en effet subi une croissance très marquée au cours des dernières décennies. Les principaux polluants sont le monoxyde de carbone (CO), les oxydes d'azote (NO_x), les composés organiques volatiles (COV).

I.2.2.3. Les différentes échelles de la pollution atmosphérique

Nous pouvons scinder la pollution atmosphérique en trois catégories :

❖ **Pollution de proximité et à l'échelle locale** Elle concerne les sources d'émission de gaz ou d'autres substances indésirables le plus souvent produites en milieu urbain (industries, chauffage, trafic...). Elle affecte en premier lieu la santé des populations par son action directe à court terme mais exerce aussi une toxicité à plus long terme pour certaines pathologies. Elle peut également procurer une gêne olfactive importante et participer à la dégradation du patrimoine bâti (corrosion, salissure).

❖ **Pollution à l'échelle régionale**

Elle concerne les zones situées à quelques dizaines de kilomètres (voire des centaines de kilomètres) des sources d'émission de pollution. Elle regroupe souvent, sous ce terme, deux phénomènes de pollution :

les phénomènes de retombées au sol de dépôts acides, secs et humides, qui touchent des zones étendues et éloignées des sources en raison des transformations physico-chimiques et des conditions climatiques (HCl, H₂SO₄ issus des émissions de SO₂, HNO₃ liées à celles des NO_x).

La pollution photochimique qui désigne les mécanismes conduisant à la rupture naturelle de formation et de destruction de l'ozone troposphérique (à basse altitude) et à l'augmentation de sa concentration dans l'air.

❖ **Pollution planétaire**

Elle concerne les deux problèmes identifiés :

- La diminution (« trou ») de la couche d'ozone stratosphérique due essentiellement à l'action des composés halogénés (chlore, brome, iode) libérés par les activités humaines, et à la réduction du pouvoir filtrant a des conséquences néfastes sur la santé (cancers de la peau).
- L'augmentation de l'effet de serre qui constitue un processus naturel à la vie terrestre car sans ce phénomène, la température de l'air serait inférieure à -30 °C à la valeur moyenne actuelle qui est de 15°C sur notre planète. Cependant, son augmentation liée à la production excessive de certains gaz (CO, CO₂, COV) entraînera de graves

changements climatiques (élévation de la température du globe) et des conséquences lourdes pour la vie terrestre [16].

Il s'agit de la diminution de la couche d'ozone stratosphérique (Figure I.3) et de l'effet de serre.

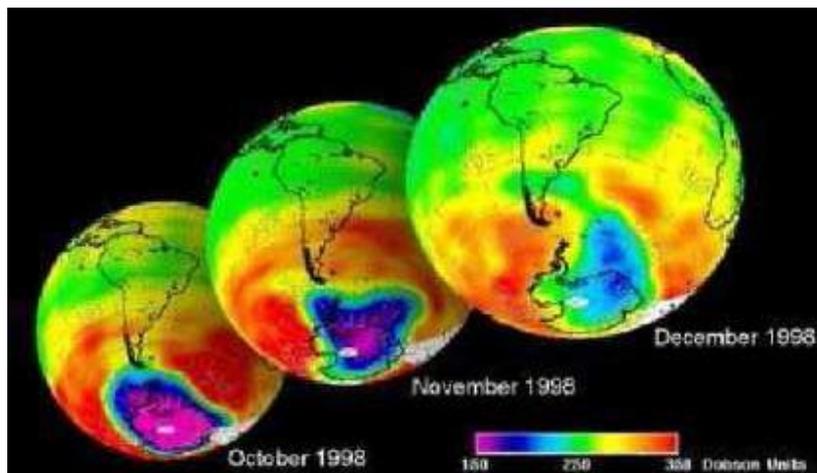


Figure I.3: Le trou dans la couche d'ozone [17].

I.2.2.4. Classification des polluants atmosphériques

Il est possible de classer les polluants en fonction de leur état physique et chimique (tableau I.2) : [18]

Tableau I.2: Classification des polluants atmosphériques

Polluant	Nature	Substance
gaz	inorganiques	<ul style="list-style-type: none"> Dérivés oxygénés du soufre (dioxyde et trioxyde de soufre, acide sulfurique, sulfates,...)
		<ul style="list-style-type: none"> Dérivés oxygénés d'azote (monoxyde et dioxyde d'azote, acides nitreux et nitrique)
		<ul style="list-style-type: none"> Monoxyde et dioxyde de carbone
		<ul style="list-style-type: none"> Autres (dérivés du plomb, hydrogène sulfuré, ammoniac, chlore, chlorures, acide fluorhydrique, fluorures,...)
	organiques	<ul style="list-style-type: none"> Hydrocarbures (aliphatiques saturés ou non, cyclaniques, aromatiques légers ou polycycliques)
		<ul style="list-style-type: none"> Aldéhydes et cétones (formaldéhyde, acroléine, acétone)
		<ul style="list-style-type: none"> Autres (alcools, hydrocarbures chlorés, mercaptans, sulfures,...)
Particules		<ul style="list-style-type: none"> Particules de matière solide (poussières, fumées)
		<ul style="list-style-type: none"> Particules de matière liquide (brouillard d'huile ou de goudrons, gouttelettes entraînées,...)

I.3.. Les principaux polluants et leurs sources

Les principaux polluants mesurés par les organismes de surveillance de la qualité de l'air sont les suivants : [19]

1. Le dioxyde de soufre (SO₂)

Ce gaz résulte des combustions (oxydation du soufre des combustibles fossiles) et il est associé à de nombreuses pathologies respiratoires, souvent en combinaison avec les particules. Il peut entraîner des inflammations et une altération de la fonction respiratoire et les études épidémiologiques montrent également souvent des liens entre concentration en dioxyde de soufre et particules dans l'air, et hospitalisations pour troubles respiratoires et cardiaques. Le dioxyde de soufre peut se transformer en particules de sulfates dans l'air ambiant et concourt également au phénomène des pluies acides, néfastes pour les écosystèmes aquatiques et terrestres [20].

2. Les oxydes d'azote (NO et NO₂)

Ils sont émis lors des combustions (chaudières, moteurs...) et le dioxyde d'azote est le plus nocif pour la santé humaine. C'est un gaz irritant pour l'appareil respiratoire et il favorise l'hyperréactivité bronchique. Les populations asthmatiques semblent plus sensibles également à ce polluant. Chez l'enfant, il peut favoriser des infections pulmonaires. Les oxydes d'azote participent en outre à la formation de polluants photochimiques comme l'ozone, néfastes pour la santé, et concourent au phénomène des pluies acides [21].

3. Les particules

Elles sont émises notamment par les combustions. Elles se forment aussi dans l'air à partir de certains polluants gazeux.

Les particules d'un diamètre inférieur à 10 µm (PM₁₀) sont dites « inhalables » car elles peuvent atteindre l'appareil pulmonaire. Les particules fines regroupent celles plus petites que 2,5 µm. Les effets dépendent de la composition chimique des particules (présence de métaux toxiques comme le plomb, ou de composés cancérigènes tels que certains hydrocarbures aromatiques polycycliques). Les particules fines sont également impliquées dans la genèse de troubles respiratoires et cardiovasculaires [22].

4. Les métaux lourds

Ce sont des métaux de densité élevée comme le plomb (Pb), le Mercure (Hg), l'Arsenic (As), le Cadmium (Cd), le Nickel (Ni), le Mercure (Hg). Dans l'air, ils sont sous forme de

particules à l'exception du mercure qui est principalement gazeux. Ils proviennent de la combustion dans certains procédés industriels et de l'incinération des déchets. Ils peuvent s'accumuler dans l'organisme et les effets sont variables selon les métaux ; atteintes du système nerveux, des fonctions rénales, hépatiques, etc. Leur dépôt sur les surfaces (sols, eaux, etc.) conduit également à une contamination de la chaîne alimentaire [23].

5. Les hydrocarbures et les composés organiques volatils (COV)

Ils sont émis par diverses sources (solvants, pétrochimie, automobiles...) et recouvrent de nombreux composés aux effets différents (odeurs, altération de la fonction respiratoire, troubles nerveux). Certains COV comme le formaldéhyde et le benzène sont cancérigènes. Les COV contribuent aussi à la mauvaise combustion du bois (dans des cheminées et foyers ouverts) et pour une plus faible part de la circulation automobile [24].

7. Le monoxyde de carbone

Ce gaz est issu des combustions dans les chaudières mal réglées, et de la circulation automobile. Il se fixe sur l'hémoglobine et peut entraîner des troubles respiratoires, des effets asphyxiants, des maux de tête, et des troubles cardiaques [25].

8. L'ammoniac (NH₃)

Ce gaz est notamment émis par les lisiers d'élevage. Il est malodorant et irritant à forte concentration. Dans l'air, l'ammoniac contribue à la formation de fines particules et de nitrate d'ammonium, et contribue aux phénomènes d'acidification et d'eutrophisation des milieux naturels par dépôt de matière azotée [23].

9. L'ozone et les polluants photochimiques

L'ozone troposphérique résulte majoritairement de réactions chimiques sous l'effet du rayonnement solaire, entre les oxydes d'azote, les composés organiques volatils et le monoxyde de carbone. Ces réactions forment aussi d'autres polluants (nitrate de peroxyacétyle, acide nitrique, aldéhydes, fines particules, etc.) regroupés sous le terme de « pollution photochimique ». L'ozone en est le principal constituant et il est néfaste pour la santé humaine et la végétation. L'ozone contribue également à l'effet de serre et constitue, avec les particules, l'une des priorités du programme CAFE (Clean Air For Europe) en matière de préservation de la qualité de l'air en Europe [15].

I.4. Évolution des moyennes annuelles pour les sites urbains de quatre polluants dans l'air

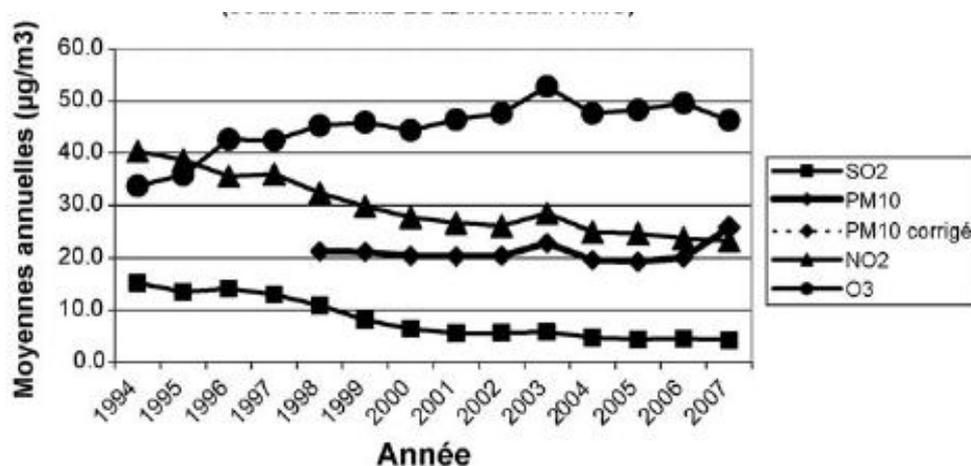


Figure I.4 : Évolution de quatre polluants utilisés dans l'indice de qualité de l'air [26].

Dans un contexte marqué par la lutte contre les émissions de gaz à effet de serre, C. Elichegaray et al [26] ont suivi les analyses des quatre polluants (SO₂, PM₁₀, NO₂, O₃) en laboratoire sur plus de 80 agglomérations de la qualité de l'air, et ont calculés l'indice pour chaque jour les valeurs sont indiqués dans la figure n° I.4 [26].

I.5. Exemple concret des effets du soufre sur le climat : cas de l'éruption du Pinatubo en 1991

Le 9 juin 1991, le volcan du mont Pinatubo, sur l'île du Luzon dans les Philippines, sort de son sommeil après six siècles d'inactivité.

Les éruptions explosives culminent les 15 et 16 juin. Le panache volcanique est propulsé dans la stratosphère jusqu'à 40 km d'altitude. Le nuage d'aérosols est rapidement transporté vers l'ouest par les vents stratosphériques et fait le tour du globe en 22 jours. La plus grande partie du nuage reste entre 30°N et 20°S, ce qui représente 42% de la surface du globe. Au mois d'août les aérosols situés à moins de 20 km d'altitude se sont déplacés vers le nord, jusqu'à 70°N.

Les effets de ces aérosols sur le climat sont principalement dus à des fines gouttelettes d'acide sulfurique (H₂SO₄) provenant de l'oxydation du dioxyde de soufre (SO₂). Ce nuage stratosphérique a provoqué un accroissement de l'albédo planétaire de 1,3% induisant une

décroissance de $1,8 \text{ W/m}^2$ du flux radiatif net (c'est-à-dire du flux d'énergie solaire) au niveau de la tropopause (séparation entre la troposphère et la stratosphère située à environ 10 km d'altitude).

Pour faire plus claire, la réduction du flux solaire reçue en surface entraîne une diminution des températures. Cette éruption a provoqué un refroidissement global atteignant un maximum de $0,5^\circ\text{C}$ à la fin de 1992 qui s'est peu à peu dissipé au fur et à mesure que les aérosols retombaient de l'atmosphère [27].

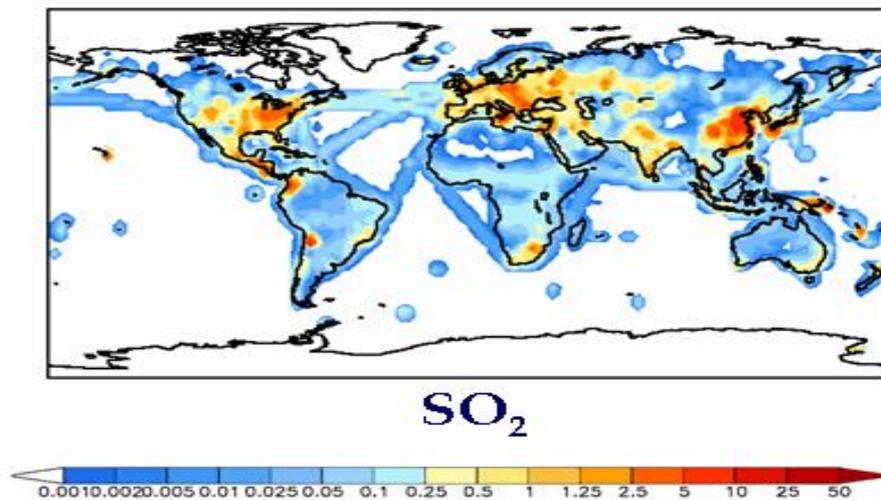


Figure I.5 : La pollution mondiale par les composés soufrés ($\text{g[S].m}^{-2}.\text{an}^{-1}$). [28]

I.6. Recommandations de l'Organisation Mondiale de la Santé

L'Organisation Mondiale de la Santé (O.M.S.) fixe des directives pour une protection à long terme. Les valeurs recommandées par l'O.M.S. sont fondées sur des critères strictement sanitaires, les critères économiques ne sont donc pas pris en compte dans l'établissement de recommandations. Les normes sont fixées par des seuils à courte, moyenne et longue échéance. Dans l'état actuel des connaissances du milieu médical international, ces valeurs conseillées sont données en considérant l'atteinte potentielle des polluants sur la santé humaine dans l'annexe A [26,29].

Conclusion

Dans ce chapitre nous sorte que :

- Le dioxyde de soufre engendre de nombreuses pathologies respiratoires, souvent en association avec des particules,
- Les oxydes d'azote sont des irritants respiratoires et induisent une hyperréactivité bronchique,
- Les particules inhalées (d'un diamètre de moins de 10 μm) induisent des troubles respiratoires et cardiovasculaires,
- Les métaux lourds ont des effets variables selon les métaux ; atteintes du système nerveux, des fonctions rénales, hépatiques, etc.
- Les COV contribuent à la formation de polluants photochimiques et certains sont cancérigènes.
- Certains hydrocarbures aromatiques polycycliques sont cancérigènes, d'autres provoquent une atteinte immunitaire.
- Le monoxyde de carbone peut entraîner des troubles respiratoires, des effets asphyxiants, des maux de tête, et des troubles cardiaques.
- Dans l'air, l'ammoniac contribue à la formation de fines particules et de nitrate d'ammonium.
- La pollution photochimique est essentiellement représentée par l'ozone.

Chapitre II
Généralité sur les
aérosols
atmosphériques

II. Généralités sur les aérosols

II.1. Définition

Un aérosol est un mélange homogène ou non, constitué d'un ensemble de particules en suspension dans un milieu gazeux et présentant des vitesses de chute négligeable [4]. Toutefois, leur chute au sol est inexorable, alors que les aérosols, plus sensibles aux mouvements des masses d'air, demeurent plus longtemps en suspension [30].

II.2. Sources d'aérosols

Il existe plusieurs manières de classer les sources d'aérosol. En termes de processus physico-chimiques, il est intéressant de distinguer :

- a. les aérosols primaires qui sont directement émis dans l'atmosphère.
- b. les aérosols secondaires : ils sont obtenus comme produits de processus de conversion gaz-particules.

Une autre grande classification, visant à tenir compte de l'influence de l'homme sur son environnement, consiste à séparer les sources naturelles des sources anthropiques [29].

II.2.1. Aérosols naturels

Ils sont essentiellement d'origines terrigène et marine.

- **L'aérosol terrigène**

L'aérosol terrigène (de terre) ou crustal (de croûte terrestre) est arraché du sol sous l'action du vent par effet d'érosion, puis il est dispersé dans l'atmosphère. Il est principalement constitué d'oxydes métalliques et d'aluminosilicates, pour les composés minéraux, et de débris de plantes ou d'humus pour la composante organique.

- **L'aérosol marin**

Est produit par le spray océanique. Sous l'action du vent dans les vagues déferlantes, l'aérosol marin est produit lors de la formation des gouttelettes d'eau chargées de sels marins. Celles-ci, par évaporation, condensation, conduisent à la formation de cristaux solides en fonction des conditions climatiques qui y règnent.

- **L'aérosol volcanique**

Il est la dernière composante de l'aérosol naturel. Les particules sont projetées dans l'atmosphère, non pas de façon continue comme dans les deux cas précédents, mais par bouffées. Il contient de nombreux métaux et de dioxyde de soufre gazeux qui se transforme en sulfates particulières. Il est peu présent dans la troposphère car la force des volcans projette des aérosols directement dans la stratosphère [31].

II.2.2. Aérosols anthropiques

Dans cette classe, on distingue deux types de particules qui sont émises par les activités humaines : les particules détritiques et les particules formées par la conversion des gaz.

- **Aérosol détritique**

Il contient des particules métalliques (plomb, zinc, fer, cuivre, cadmium, vanadium, etc.....) et de carbone élémentaire dit **carbone suie**. Cet aérosol est directement émis sous forme solide. C'est le cas des débris de pneus, des poussières de charbon, des poussières émises par l'incinération de déchets, etc. Cet aérosol est souvent de taille supérieure au micron.

- **Aérosol de conversion**

Il est produit par la condensation des vapeurs polluantes émises par les véhicules et les industries lorsque la pression de vapeur du composé excède le point de saturation. Il est formé par un processus de **conversion gaz/particule**. La combustion de la biomasse conduit à la formation de particules lors des incendies provoqués par l'homme. Où il s'agisse de particules naturelles ou particules de pollution, la distinction entre les deux est évidemment très difficile à établir. Il y a lieu de noter que l'aérosol de conversion est constitué principalement de matière organique [32].

Tableau II.1: Différentes sources d'aérosols et leurs taux de production globale annuel [11].

Type d'aérosol			Source	Production estimée Tg/an
Aérosol inorganique	Primaire	Biotique	Poussière minérale	1000-3000
			Sel de mer	1000-6000
	Secondaire	Anthropique	Sulfates	6,4-8,8*
			Nitrates	68-93* 10-19
Aérosol de carbone élémentaire	Primaire	Anthropique et Biotique	Combustion fossile + biocarburant	4,6*
			Combustion de biomasse	3,3*
			Aviation	0,006
	Primaire	Anthropique	Combustion fossile et de biomasse + biocarburant	15-17* dont 15÷50% pour la combustion fossile
			Biotique	Débris végétaux, pollens
	Secondaire	Anthropique	Aromatiques (précurseurs)	0,3-1,8
			Biotique	Terpènes (précurseurs)

* Sources de particules et estimation de leur production en Tg/an (rapport IPCC 2001 et pour les valeurs *, rapport IPCC 2007). (1 Tg = 10¹² g)

Tableau II.2: taille et flux des principales sources d'aérosols [11].

SOURCES	Flux (Mt/an)		Taille Estimation min. et max
	Estimation moyenne		
NATURELLES (90%)			
PRIMAIRES			
Poussières minérales	1500	1000-3000	Grossier
Sels de mer	1300	1000-10000	Grossier
Cendres volcaniques	30	4-10000	Grossier
Débris biologiques	50	26-80	Grossier
SECONDAIRES			
Sulfates biogéniques	130	80-150	Fin
Sulfates volcaniques	20	5-60	Fin
Aérosols organiques secondaires	60	40-200	Fin
Nitrates (venant des NO _x)	30	15-50	Fin
TOTAL NATUREL	3100	2200-23500	
ANTHROPIQUES (10%)			
PRIMAIRES			
Suies	10	5-20	Fin
Poussières industrielles (hors suie)	100	40-130	Grossier et Fin
SECONDAIRES			
Combustion de produits végétation	90	60-150	Fin
Sulfates anthropiques	190	170-250	Fin
Nitrates anthropiques	50	25-65	Grossier
Aérosols organiques	10	5-25	Fin
TOTAL ANTHROPIQUE	390	300-710	

Remarque : Les dénominations "grossier" et "fin" se réfèrent à un aérosol de taille resp. super- ou sub-micronique. Mt=10⁶t

Les aérosols peuvent transporter également des particules de vapeur d'eau qui, lorsque le taux d'humidité augmente, se condense. Pour entraîner, dans leur chute les particules sous forme de brouillards. Parailleurs, si les conditions physiques ne sont pas réunies, les particules imbibées d'eau demeurent en suspension à l'état de nuages [32].

II.3. Caractéristiques chimiques

La composition chimique de l'aérosol est généralement très complexe et variable (figure II.1). Elle reflète la chimie des éléments constituant la surface terrestre mis en jeu dans les activités biologiques naturelles et les activités anthropiques. Parmi les composés identifiés dans l'aérosol, on peut en effet trouver de l'eau, des sulfates, de l'ammonium, des nitrates, des chlorures, des métaux, des éléments d'origine crustale (silice, aluminium...), et des matériaux carbonés... [29].

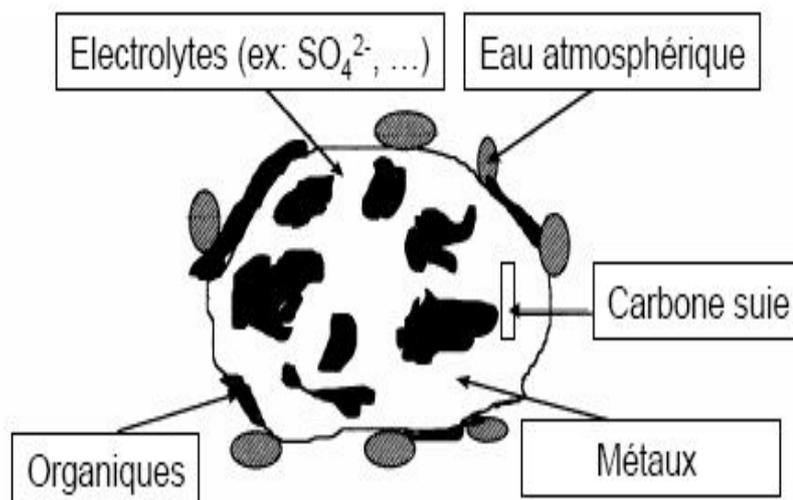


Figure II-1 : Composition chimique de l'aérosol typique [13].

II.4. Etapes de formation des particules

Il existe trois modes successifs de formation des particules :

II.4.1. Nucléation des gaz

La nucléation de gaz forme des amas qui se solidifient ensuite. Ce mécanisme a lieu lorsque la pression de vapeur s'abaisse suffisamment.

II.4.2. Condensation des gaz sur les aérosols

La condensation est le dépôt, sous forme liquide, de matière gazeuse sur des particules déjà existantes, formées par le processus de nucléation. C'est un mode d'adsorption.

II.4.3. coagulation d'aérosols

Dans ce dernier processus, les particules se regroupent entre elles lors de collisions entre particules. Un choc entre deux particules conduit à la formation d'une particule plus grosse

que les deux particules de départ. C'est une réaction de regroupement de particules sous l'effet électrostatiques [32].

II.5. Caractéristiques physiques et dépôt

Les différentes espèces chimiques composant les aérosols atteignent la phase particulaire par différents processus. La figure II.1 schématise les sources, les modes de formation et les différentes phases de l'évolution des aérosols qui en découlent.

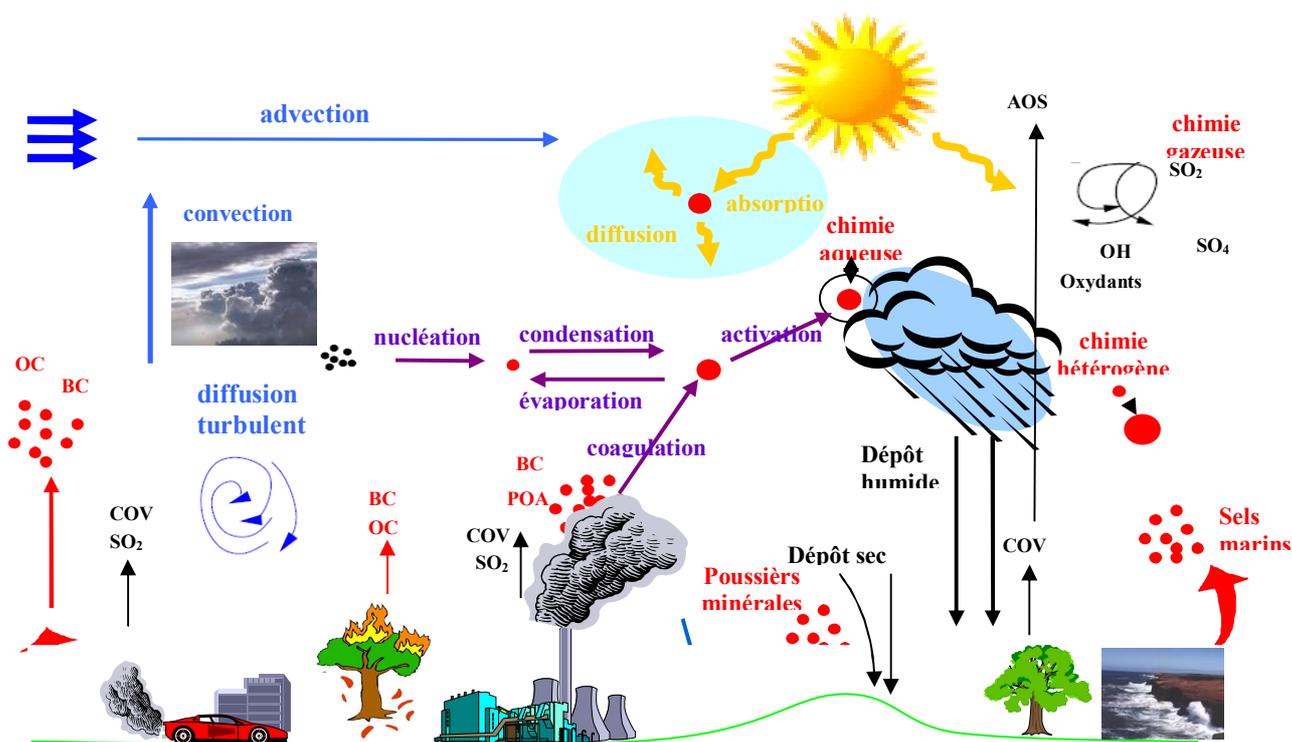


Figure II-2: Sources, formation d'aérosols et leur évolution selon leurs tailles [29].

II.6. Propriétés radiatives des aérosols

Les particules peuvent avoir trois effets sur le bilan radiatif de la planète :

II.6.1. Effet direct

Les particules, selon leur composition, absorbent ou réémettent la lumière reçue (figure II.3). Il est difficile d'estimer cet effet car les incertitudes sur le nombre, la taille, la composition, la géométrie, la distribution verticale mais aussi le mélange des composants des particules entraînent une énorme incertitude sur les indices de réfraction et donc sur le forçage induit [32]. Le rapport du GIEC (Groupe d'experts intergouvernementaux sur l'évolution du climat, 2005) donne, en première estimation, un refroidissement de la surface terrestre, un réchauffement de l'atmosphère et un budget négatif au sommet de l'atmosphère qui tend à compenser le réchauffement dû aux gaz à effet de serre [29].

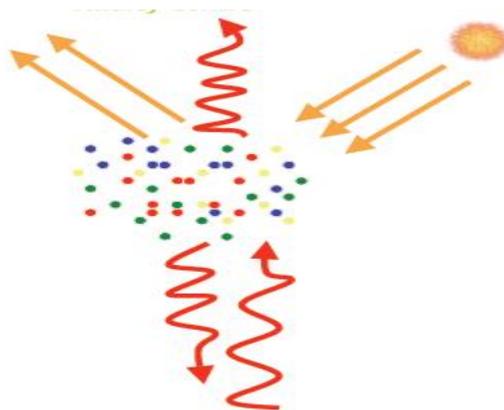


Figure II.3 : Effet direct des aérosols [33].

II.6.2. Effet semi direct

Les aérosols augmentent le rayonnement absorbé dans leur couche de résidence, modifiant le profil vertical de température (figure II.4) dont dépendent la circulation atmosphérique et la formation des nuages [32].

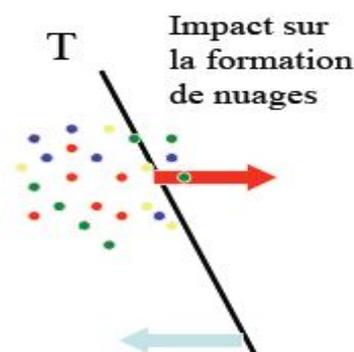


Figure II.4 : Effet semi direct des aérosols [33].

II.6.3. Effet indirect

Les aérosols sont des noyaux de condensation de la vapeur d'eau (CCN, Cloud Condensation Nuclei). Une modification dans leur nombre ou leur composition peut avoir des effets sur la couverture nuageuse, et donc sur le bilan radiatif de la planète. En effet, les aérosols anthropiques étant plus petits que les aérosols terrigènes, les gouttes qui se forment sur ces aérosols sont donc plus petites, conduisant par conséquent à la prolongation de la durée de vie des nuages (figure II.5). A priori, la couverture nuageuse augmente avec leur nombre, ce qui a un impact sur le bilan radiatif [32].

Cependant, cet effet présente de nombreuses incertitudes car les aérosols entraînent aussi des processus qui ont des effets contraires. D'une part, les rayons solaires atteignant la surface sont diminués, ce qui a pour effet de refroidir la surface, de limiter l'évaporation à la surface des océans et donc la formation de nuages.

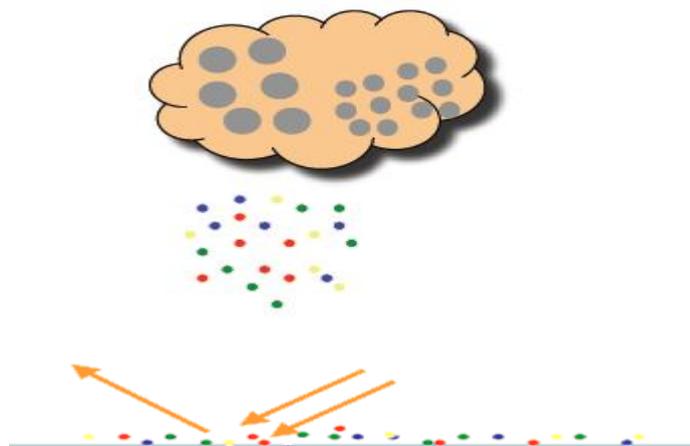


Figure II.5 : Effet indirect des aérosols [33].

D'autre part, les nuages réémettent et absorbent le rayonnement infrarouge ce qui produit l'effet contraire en réchauffant l'atmosphère et la surface (effet de serre). De plus, si les aérosols sont absorbants, ils augmentent l'évaporation à leur surface, ce qui limite aussi la formation de nuages [34].

II.7. La dispersion des aérosols en fonction de leur taille

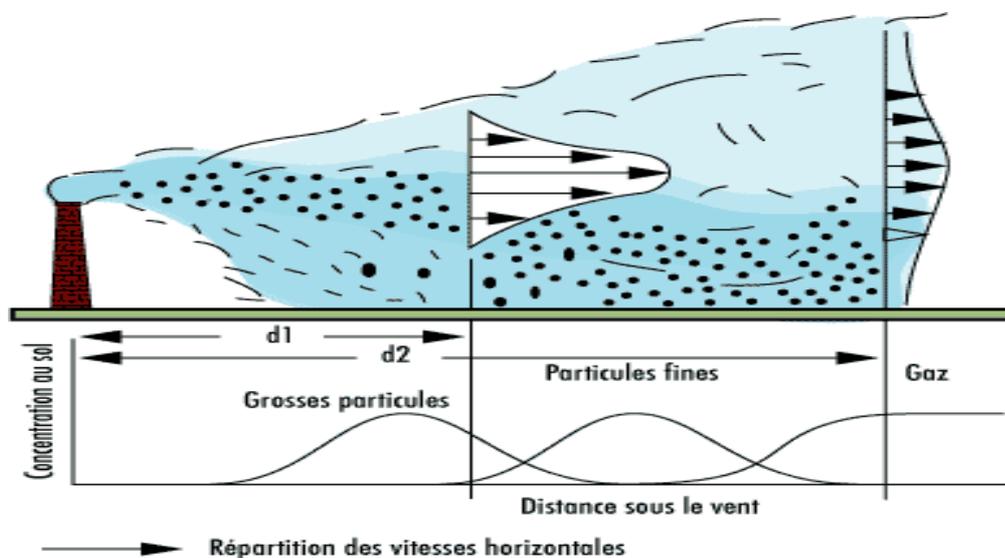


Figure II-6 : La dispersion des aérosols en fonction de leur taille [35].

Les dépôts secs correspondent aux retombées au sol des polluants gazeux ou particulaires, en l'absence de précipitations. Ces retombées se produisent sous l'effet de la diffusion, de la turbulence, de la gravité. Le temps de séjour des polluants dans l'air est très variable et dépend notamment de leurs caractéristiques physico-chimiques. On évalue, par exemple, à quelques jours seulement la durée de vie du dioxyde de soufre qui se transforme

progressivement en aérosols soufrés. En revanche, les particules de taille inférieure au micromètre, très légères peuvent rester plusieurs semaines, voire plusieurs mois en suspension [35].

Les aérosols soufrés sont reconnus comme étant les noyaux de condensation les plus importants dans la couche limite océanique. Ces aérosols secondaires appartiennent au mode d'accumulation. Ce mode affiche un grand rapport surface sur volume, autorisant un impact climatique important. De plus, ils représentent la quasi-totalité des noyaux de condensation dans la couche limite et dans la stratosphère [36]

II.8. Origines et l'effet de dioxyde de soufre

L'atmosphère est chargée de particules, plus ou moins denses, dont les origines sont diverses. En effet en fonction des différentes sources, on peut noter qu'elle est majoritairement composée de :

II.8.1. Le dioxyde de soufre

Dans la région de l'étang de Berre et de l'Ouest des Bouches-du-Rhône(France), le dioxyde de soufre est issu principalement de la combustion des énergies fossiles contenant du soufre (fuel, charbon). Le soufre (S) contenu dans ces combustibles réagit avec l'oxygène de l'air (O_2) pour former du SO_2 . C'est un gaz incolore très soluble dans l'eau (notons que le SO_2 peut être éliminé par absorption en utilisant des solutions d'amines MEA, DEA, TEA). Egalement, le SO_2 est émis principalement par les industries et les centrales thermiques. En 1999 sur les 100000 tonnes de SO_2 émis dans l'atmosphère sur la région, plus de 90% était d'origine industrielle. Pour cette raison, le dioxyde de soufre y est considéré comme un polluant caractéristique de l'activité industrielle. L'évolution historique des rejets de SO_2 est fortement à la baisse, de l'ordre de 600 tonnes/jour en 1979. Les émissions industrielles ont diminuées à 250 tonnes/jour aujourd'hui même si l'on constate une stagnation des rejets durant ces 5 dernières années. Il y a lieu de mentionner que les principales sources de SO_2 sont :

a. Le raffinage du pétrole :

- Raffinerie : 21138 tonnes de SO_2
- Total Refinery Distribution : 14410 tonnes de SO_2
- Société Shell des Pétroles : 14132 tonnes de SO_2
- Esso : 6931 tonnes de SO_2

b. La pétrochimie : 20383 tonnes de SO_2

c. La métallurgie : 11200 tonnes de SO_2

d. Production d'électricité : 3686 tonnes de SO_2

e. **Divers** (transports, émissions domestiques, ...) : 7300 tonnes de SO₂

II.8.2. Effets du dioxyde de soufre

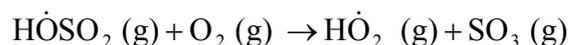
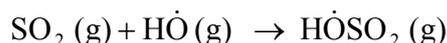
Le SO₂ est particulièrement présent lors des conditions de forte stabilité atmosphérique : conditions anticycloniques et inversion thermiques en hiver. En situation de vent moyen ou fort, la pollution industrielle peut être rabattue au sol et retomber en panache sous le vent des points d'émissions. Son principal impact est jugé à travers ses effets sanitaires mais il a aussi des effets non négligeables sur la végétation et les matériaux.

1. sur la santé publique

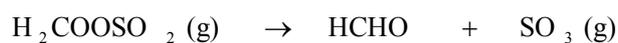
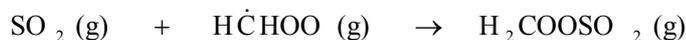
Le SO₂ inhalé à concentration de quelques centaines de microgrammes par mètre cube d'air, est absorbé à 85-99% par les muqueuses du nez et du tractus respiratoire supérieur du fait de sa grande solubilité. Une faible fraction peut néanmoins se fixer sur des particules fines et atteindre les voies respiratoires inférieures [37].

Oxydation de SO₂ dans la phase gazeuse

a) Le radical hydroxyl : premier agent significatif



b) Le biradical de Criegee : réactions électrocycliques



Lors des pointes de pollution, il provoque une altération de la fonction respiratoire chez l'enfant en particulier, une exacerbation des gênes respiratoires, des troubles de l'immunité du système respiratoire, un abaissement du seuil de déclenchement chez l'asthmatique, une mortalité prématurée.

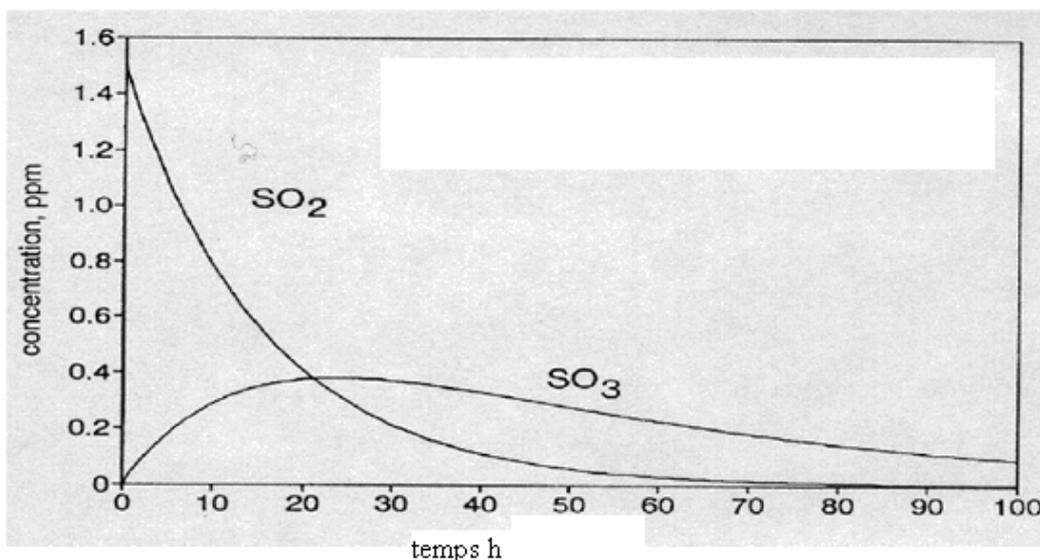


Figure II-7 : Concentration des émissions de SO₂ et SO₃ en fonction du temps écoulé respectivement. Du gradient de dilution à partir de la source d'émission [38].

2. sur la végétation

Les composés oxydés du soufre contribuent à la formation des dépôts acides (pluies acides). Outre leurs effets directs sur les végétaux, ils peuvent changer les caractéristiques du sol, notamment des sols acides.

SO₂ retombe sous forme de H₂SO₃ et H₂SO₄ via les réactions: [39]

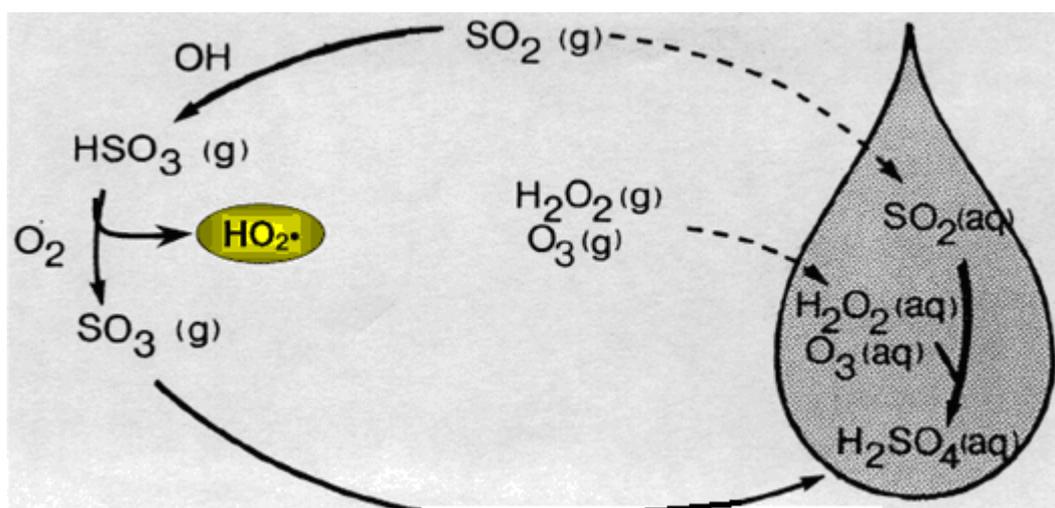
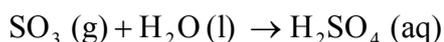
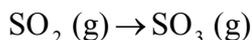
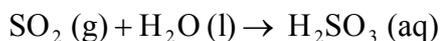


Figure II-8: voies d'oxydation pour le SO₂ en phases gazeuse et aqueuse [38].

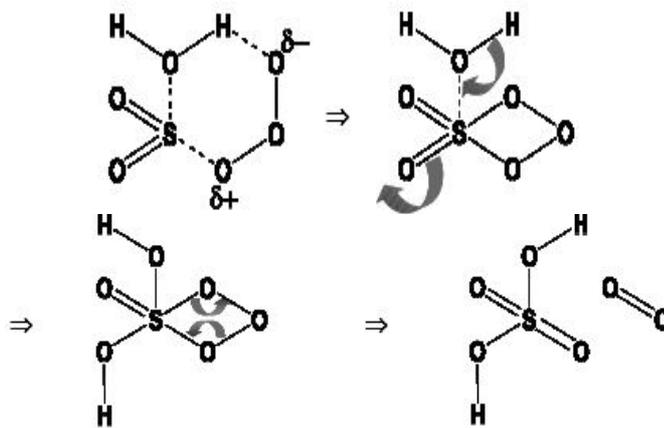
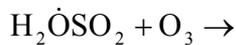
3. sur les matériaux

A partir des substances acides qu'il génère, le SO₂ apporte sa contribution aux processus de dégradation des matériaux. L'acide sulfurique formé en présence d'eau réagit avec le calcium contenu dans les particules faisant partie de vestiges historiques pour donner naissance à des cristaux de gypse (CaSO₄, 2 HO₂) ce qui accélère la dégradation des monuments tant par leur action mécanique que chimique. En se cristallisant à l'intérieur des pores des matériaux, le gypse exerce une pression très importante sur la pierre et la fait éclater. Il contribue aussi à la formation des croûtes noires.

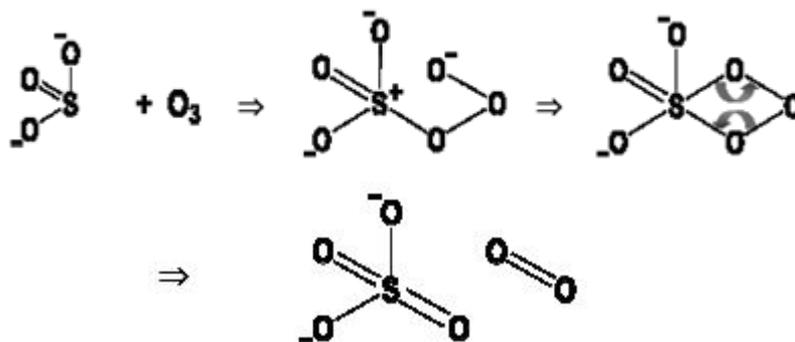
A l'état libre et en présence de l'ozone atmosphérique, le SO₂ réagit suivant le mécanisme suivant :

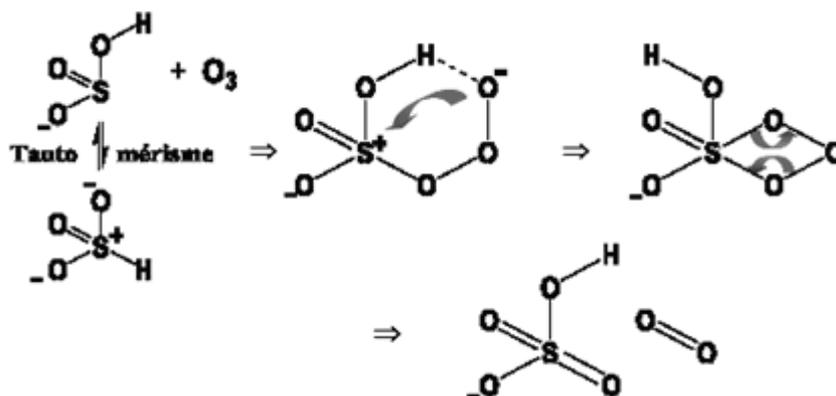
Oxydation de SO₂ dans la phase aqueuse [37]

a) Le mécanisme ozone – SO₂ hydraté:



b) Le mécanisme ozone – HSO₃⁻ :





II.9. La réglementation [39]

Pour préserver la santé humaine et l’environnement vis-à-vis du SO_2 , des normes de qualité de l’air ont été redéfinis par l’organisation mondiale de la santé (OMS) dans le tableau II.3. En promulguant le décret n° 2002-213 du 15 février 2002

Tableau II.3 : normes de qualité de l’air.

	période	Valeur de référence en $\mu\text{g}/\text{m}^3$	Date à laquelle la valeur doit être respectée
Valeurs limites :			
Protection de la santé humaine	1 h 24 h	350 (<24 dépassement/an) 125 (<3 dépassement/an)	01/01/2005 01/01/2005
Protection des écosystèmes	année civile hiver	20 20	19/07/2001 19/07/2001
Seuils d’information de la population			
Recommandation	heure	300	
Alerte	3 h consécutives	500 en moyenne	

Des mesures drastiques quant à l’émission du SO_2 dans les pays développés (USA) a conduit à une notable réduction de la teneur en SO_2 tel que présente à travers la figure II-9 :

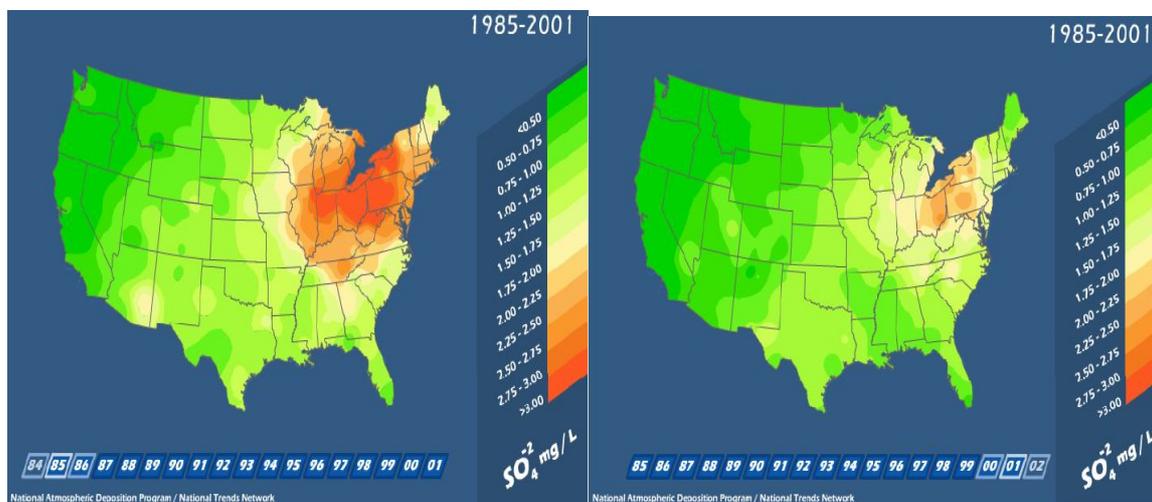


Figure II-9 : Evolution de la teneur en SO_2 avec le temps suite à l’application des lois de préservation de l’environnement [38].

II.10. Les facteurs influençant la dispersion des polluants

La dispersion des polluants dans l'atmosphère est affectée avec une série de variables météorologiques les quelles peuvent varier au cours des saisons. On distingue :

1. Facteurs « directs » affectant la dispersion

- Conditions météorologiques : vitesse du vent, stabilité thermique de l'atmosphérique et la turbulence.
- Structure du paysage : nature du sol (rugosités, couverts végétaux, surfaces humides), obstacles, reliefs, etc.

2. Facteurs « indirects » affectant la dispersion

- ils dépendent des propriétés physique et chimique de la particule : masse volumique, réactive...

En outre il y a lieu d'adjoindre les conditions liées aux paramètres dépendant de la source à savoir : - caractéristiques géométriques (hauteur, taille), - intensité, température et composition du rejet, position (géométrique par rapport à l'altitude).

Les analyses les plus récentes [10] ont mis en évidence les caractères prépondérants des paramètres suivants sur la pollution atmosphérique:

- La vitesse du vent ;
- L'intensité d'éjection (vitesse);
- La température et la composition du rejet.

II.10. 1. L'influence du facteur vent et du gradient longitudinale de température

Pour tenir compte de la complexité du problème lié aux profils de température et de vitesse de vent nous avons considéré deux domaines distincts :

1. couche limite ;
2. écoulement potentiel.

Dans la couche limite d'une épaisseur de 500 m, représentant 3,33% de la couche de tropopause, les gradients de la vitesse de vent et de température sont très importants. Le profile de vitesse de vent peut être subdivisé en couche limite où la loi de distribution est parabolique en écoulement potentiel avec une vitesse constante [40].

II.10. 2. Profil vertical de la vitesse du vent

La vitesse du vent varie en fonction de l'altitude à cause du freinage de l'air par le sol. La mesure de la vitesse du vent est effectuée en général à 10 m du sol (Standard Météorologie Nationale).

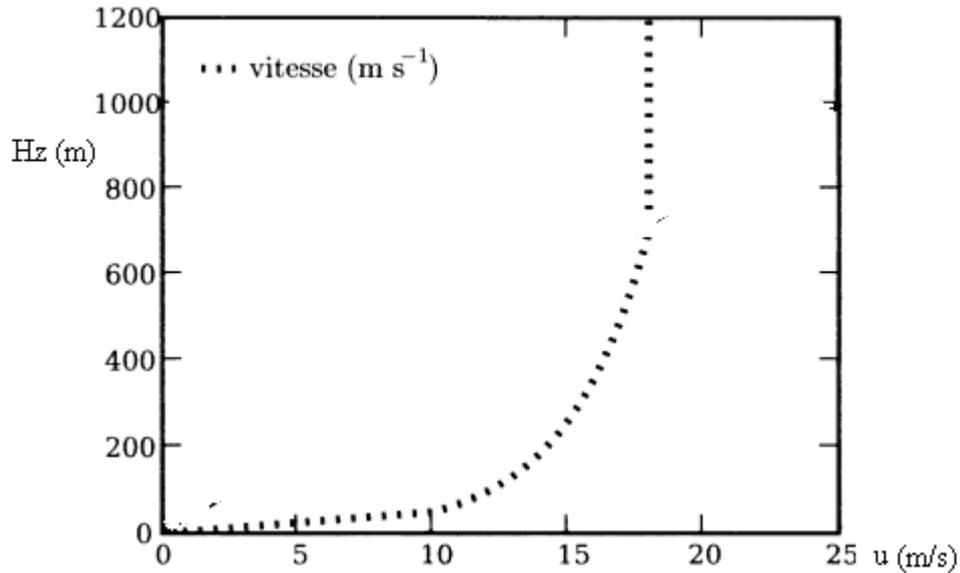


Figure II.10: Profil vertical de la vitesse du vent en fonction de l'altitude [41].

II.10.3. Profils de température et de pression dans la troposphère

Les études météorologiques les plus concordantes ont mis en évidence que les profils de pression et de température suivent une loi linéaire avec l'altitude de sorte qu'elle s'exprime par la relation :

$$T(z) = T_{\text{amb}}(z_{\text{ref}}) + \alpha (z - z_{\text{ref}}) \quad (\text{II.1})$$

Où, $T(z)$: température locale à la hauteur z ;

$T_{\text{amb}}(z_{\text{ref}})$: température ambiante à la hauteur de référence z_{ref} (K)

α [$\text{K}\cdot\text{m}^{-1}$] : gradient locale de la température lequel dépend de la classe de stabilité de l'atmosphère [13].

De même, le profil de pression peut être donné par une équation linéaire:

$$P(z) = P_{\text{atm}}(z_{\text{ref}}) - \rho \cdot g \cdot (z - z_{\text{ref}}) \quad (\text{II.2})$$

Où, $P(z)$: pression à la hauteur z ;

$P(z_{\text{ref}})$: pression à la hauteur de référence z_{ref} ;

ρ : masse volumique de l'air ambiant ;

g : accélération gravitationnelle ($9,81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$).

On note que l'expression du profil de pression a été allégée en introduisant des hypothèses simplificatrices que nous avons émis en considérant que la masse volumique de l'air varie très faiblement pour les altitudes délimitant nos domaines d'études. Cette variation est supposée égale à 0 pour $z \leq 100 \text{ m}$ [42].

II.10.4. L'effet de l'accélération de Coriolis

Les résultats expérimentaux des chercheurs dans le monde ont montré que les effets des forces de Coriolis sont négligeables dans les basses couches de l'atmosphère jusqu'à une hauteur ne dépassent pas les 100m. Pour notre étude, les forces de Coriolis dues à la rotation de la terre sont supposées négligeable vis-à-vis des forces (inertie et gravitationnelle) agissant sur la particule [43].

II.10.5. Influence de l'orientation de la vitesse du vent sur la dispersion d'un polluant autour d'un bâtiment

MAHJOUR SAID N et al [44] traitent principalement l'influence de l'orientation de la vitesse du vent sur les caractéristiques dynamiques et thermiques du panache, ainsi que sur la concentration du polluant autour d'un obstacle. La méthode numérique utilisée pour la résolution des équations de mouvement qui décrivent l'écoulement est basée sur la méthode de volumes finis. Le maillage adopté est non uniforme, très resserré près de la cheminée et autour de l'obstacle où il y a des gradients dynamiques, thermiques et massiques importants. Le domaine d'étude considéré, est assez grand pour pouvoir visualiser les recirculation et tourbillons créés dans le voisinage du bâtiment. Les résultats de simulation montrent que la présence d'obstacles modifie le champ de concentration, en affectant conséquemment le degré de dispersion des polluants dans le voisinage de ces obstacles [44].

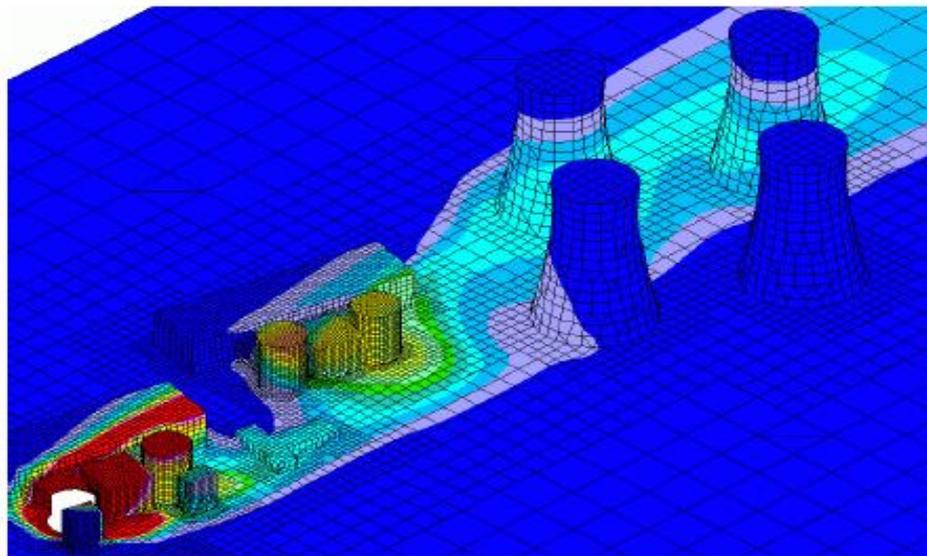


Figure II.11: l'influence de l'orientation de la vitesse du vent sur les caractéristiques dynamiques et thermiques du panache [45].

Il en découle que la direction du vent a un grand effet sur l'évolution du polluant éjecté et par la suite sur son impact sur l'environnement immédiat de l'obstacle. L'écoulement

autour d'un obstacle est un phénomène très complexe. La présence d'un obstacle modifie considérablement le champ de vitesses aussi bien à l'aval et qu'à l'amont de l'obstacle. Des zones de sillage sont mises en évidence où la concentration en polluants en amont est suffisamment de la couche limite de la paroi.

II.10.6. L'influence des conditions climatiques

Les facteurs météorologiques influencent très fortement la composition locale de l'air car des inversions de température bloquent les polluants au sol pour réduire la dispersion du polluant sous l'effet du vent ainsi, on note qu'en été et suite à la formation de O₃ sous l'action des rayons solaires par décomposition des polluants oxygénés.

Les situations météorologiques, à grande échelle, déterminent le contexte dans lequel la dispersion des polluants prend place. Ainsi, la présence d'un anticyclone se traduit par une stabilité de l'atmosphère associée à des vents généralement faibles et souvent un bon ensoleillement. Tous ces facteurs tendent à favoriser la stagnation des polluants et le développement éventuel de certaines réactions photochimiques. Au contraire, une situation perturbée, par la présence de mouvement autour d'une dépression, génère des conditions inverses pour favoriser la dispersion. Dans les conditions hygrométriques conduiraient au lessivage de polluants par suite de la formation de gouttelettes d'eau sous forme de pluie [46].

Vivien Mallet représente les mouvements turbulents par des tourbillons dont l'amplitude peut aller jusqu'à la hauteur de la couche limite. La turbulence naît principalement (par échelle croissante) :

1. d'obstacles au sol qui laissent une traînée turbulente,
2. du cisaillement du vent,
3. du réchauffement au sol (dû au rayonnement solaire) qui élève les masses d'air réchauffées au contact du sol,
4. de la convection nuageuse [39].

La turbulence atmosphérique est due à différents facteurs les quelles principalement liées à la rugosité du sol.

En effet, l'étude menée par le laboratoire « Direction de risque » a mis en évidence qu'un changement de rugosité contribue à une perturbation du champ de vitesse de vent [9].

Le profile de vitesse est visualisé à travers la figure II.7 :

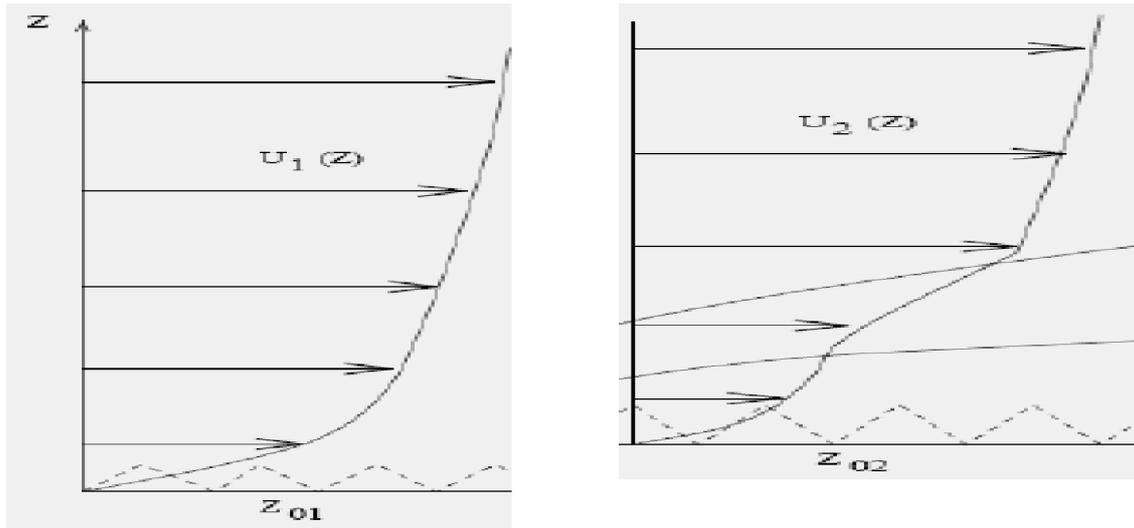


Figure II.12 : Effet d'un changement de rugosité sur le champ de vent. [42]

La turbulence horizontale est essentiellement due aux variations locales de la vitesse du vent suivant l'horizon et souvent elle dépend de la qualité du relief. Par ailleurs, la turbulence verticale est fortement variable dans le temps. Elle peut se développer jusqu'à des altitudes avoisinant les 2000 m de hauteur en plein jour. Toutefois, elle s'atténue à quelques centaines de mètres à la nuit.

Les vents sont partiellement responsables de la dispersion des composés émis à l'atmosphère tout en contribuant à la diminution de leur concentration à proximité de la source. En milieu urbain, un vent dont la vitesse est supérieure à 5 m/s suffit généralement à engendrer un air de qualité viable même en présence d'émissions diffuses importantes [47].

II.10.7. Stabilité de l'atmosphère

L'instabilité de l'atmosphère (décroissance plus ou moins élevée de la température en altitude) induit une dispersion faible ou importante. Le cas extrême est celui où la température croît avec l'altitude c'est la stabilité de l'atmosphère. On peut assister à une situation d'inversion thermique. Au lever du jour et en fin de nuit cette situation est courante par le ciel durant la période hivernale. Elle a pour conséquence un refroidissement rapide du sol durant la nuit.

De manière générale, la présence d'une inversion de température (atmosphère stable), conduit à la stagnation des polluants présents dans la masse d'air. Plus l'altitude de la couche d'inversion est faible, plus la pollution est critique : on note le piégeage des polluants dans un faible volume [48].

On remarque que la pollution (concentration) tend à s'uniformiser dans la totalité de la cavité par l'effet d'entraînement thermique. Par conséquent la pollution croît en fonction des zones plus ou moins chaudes. Ces conditions aussi génèrent une asymétrie des lignes isoconcentration par suite de la présence de source ponctuelle de pollution. Les polluants se présentent sous forme de strates (stratification du fluide au milieu).

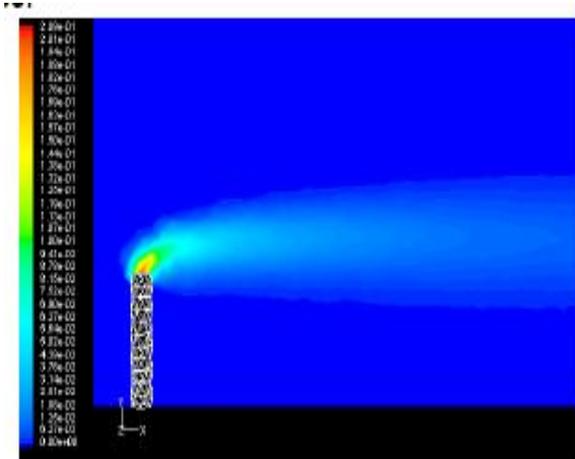


Figure II.13: Contour de la fraction massique de CO_2 pour une cheminée droite [49].

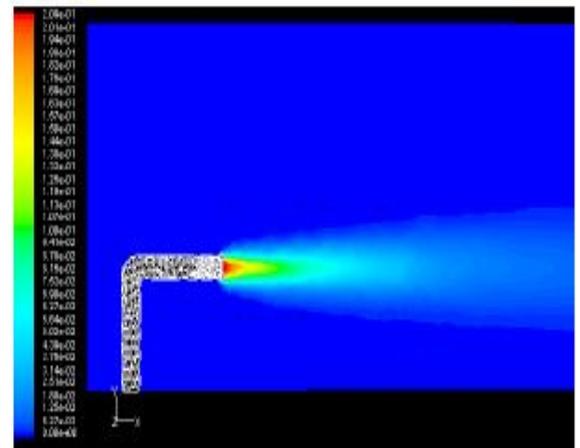


Figure II.14: Contour de la fraction massique de CO_2 pour une cheminée coudée [49].

Certains obstacles et équipement (présence de coude d'injection) peuvent affecter considérablement la dispersion des polluants tels que mis en évidence par les travaux de BHOURI BAOUAB et als. Les figures II.13 et II.14 représentent l'évolution de la fraction massique de CO_2 pour les deux configurations dans le plan médian. Ils ont noté que la fraction massique de CO_2 est plus intense pour le cas d'une cheminée coudée. En effet, pour cette configuration, le mélange du polluant par l'effet du vent est plus faible que pour le cas d'une cheminée droite [49].

Pour ce qui se rapporte à la hauteur de cheminée, son impact est clairement établi par les travaux de Ted Stathopoulos et al des mesures de la concentration ont été effectuées sur le toit du bâtiment en tenant compte de l'écoulement du vent, montrent que la dilution des polluants est favorisée par l'accroissement de la hauteur de la cheminée [50].

Conclusion

Les aérosols existent naturellement dans l'atmosphère. Ils sont issus, par exemple, de l'érosion des roches, des éruptions volcaniques, de l'entraînement de grains de sable par le vent, de l'éclatement des bulles créées par les vagues à la surface des océans, etc.

Ils peuvent aussi être d'origine anthropique. Le trac routier est l'une des principales sources mises en cause lorsque l'on parle de pollution atmosphérique particulaire. Certaines industries peuvent aussi émettre une grande quantité de particules, notamment dans le secteur de l'énergie.

Les aérosols sulfuriques constituent un enjeu important pour l'étude de l'atmosphère. En effet, ils ont des conséquences sanitaires néfastes, modifient la visibilité et ont sur le bilan radiatif des effets directs (absorption/réfraction de la lumière), semi-directs (modification du profil vertical de température) et indirects (impact sur la formation des nuages en tant que noyaux de condensation).

La modélisation de l'effets des conditions environnementaux et des conditions d'éjections est particulièrement complexe, aussi bien physiquement que numériquement.

Chapitre III
Modélisation
numérique

III. Introduction

Nous présentons dans cette partie la modélisation de la dispersion des polluants. Nous verrons que les équations fondamentales de la mécanique des fluides que nous utilisons doivent être complétées, en raison du caractère turbulent des phénomènes, par un modèle de turbulence.

Plusieurs méthodes de résolution existent et sont caractérisées par les différents paramètres:

1. Modèles Eulériens

Les modèles eulériens sont basés sur les équations de la mécanique des fluides et du transport des produits. Pour résoudre ces équations en tenant compte de la turbulence, le modèle doit décomposer les composantes de la vitesse en la somme d'une moyenne et de fluctuations, générant ainsi de nouvelles inconnues. Il faut alors de nouvelles équations pour fermer le système. Ces équations correspondent à des hypothèses semi-empiriques plus ou moins complexes, qui représentent plus ou moins bien les phénomènes physiques.

Afin de résoudre le système, le modèle doit discrétiser numériquement les équations de bilan. Ceci est fait à l'aide d'un maillage qui peut être plus ou moins complexe en fonction de la géométrie et des propriétés du milieu. De ce point de vue, les modèles eulériens diffèrent également suivant le schéma de résolution numérique qu'ils adoptent :

- différences finies. C'est la méthodologie la plus utilisée, essentiellement du fait de la facilité de mise en oeuvre.
- éléments finis. Le maillage est défini par des lignes de noeuds qui épousent à une homothétie près, la forme du relief. Le principal inconvénient des différences finies réside dans le manque de souplesse dans le dessin du maillage.
- volumes finis. Cette méthode plus élaborée, permet d'améliorer la convergence atténue la diffusion numérique.

Les grandeurs physiques sont déterminées aux noeuds du maillage (sommets, centre de gravité, milieux des côtés... des éléments). Les différences de taille et de forme des éléments peuvent conduire à envisager différentes représentations des phénomènes physiques. Il est alors important de garder à l'esprit que la manière dont le maillage a été conçu influe sur l'exactitude des résultats.

Il convient aussi de fixer correctement les conditions aux limites du maillage : l'entrée et la sortie des produits dans le domaine défini. Des conditions aux limites inadaptées peuvent conduire à des résultats erronés voire aberrants.

Enfin, les méthodes de résolution locale (résolution des systèmes linéaires, interpolations...) jouent un rôle important puisqu'elles doivent minimiser les erreurs systématiques, être compatibles les unes avec les autres et enfin ne pas avoir un coût de fonctionnement prohibitif.

2. Modèles Lagrangiens

Les modèles lagrangiens utilisent, pour modéliser le mouvement du fluide, une approche particulière : la dispersion est évaluée par le calcul de plusieurs milliers de trajectoires de particules partant d'une même source. Les concentrations sont alors données par sommation du nombre de particules présentes dans un volume donné. Les particules sont supposées indépendantes et le modèle néglige donc les interactions entre les trajectoires des particules, ce qui ne rend que partiellement compte du champ de turbulence.

Par rapport aux modèles nécessitant un maillage, l'approche lagrangienne évite la diffusion artificielle initiale des sources ponctuelles dans la maille correspondante et les erreurs dues à la diffusion numérique. Elle permet de plus de n'effectuer les calculs que là où cela est nécessaire [39].

III.1. Modélisation mathématique

III. 1.1. Présentation du milieu de pollution

Notre objectif consiste à modéliser la diffusion des polluants industriels injectés par une cheminée de 15m (Figure III.1) de hauteur et a un diamètre $D_c=2m$ dans un site de taille $15 \times 15 km$ qui ne contient pas des reliefs ni des obstacles dans la couche de la tropopause. Nous allons analyser la dispersion du polluant en tenant compte des conditions extrêmes suivantes :

- a) Absence de circulation de vitesse de vent ;
- b) Circulation de vent avec destination des écoulements :
 - couche limite ;
 - potentiel.

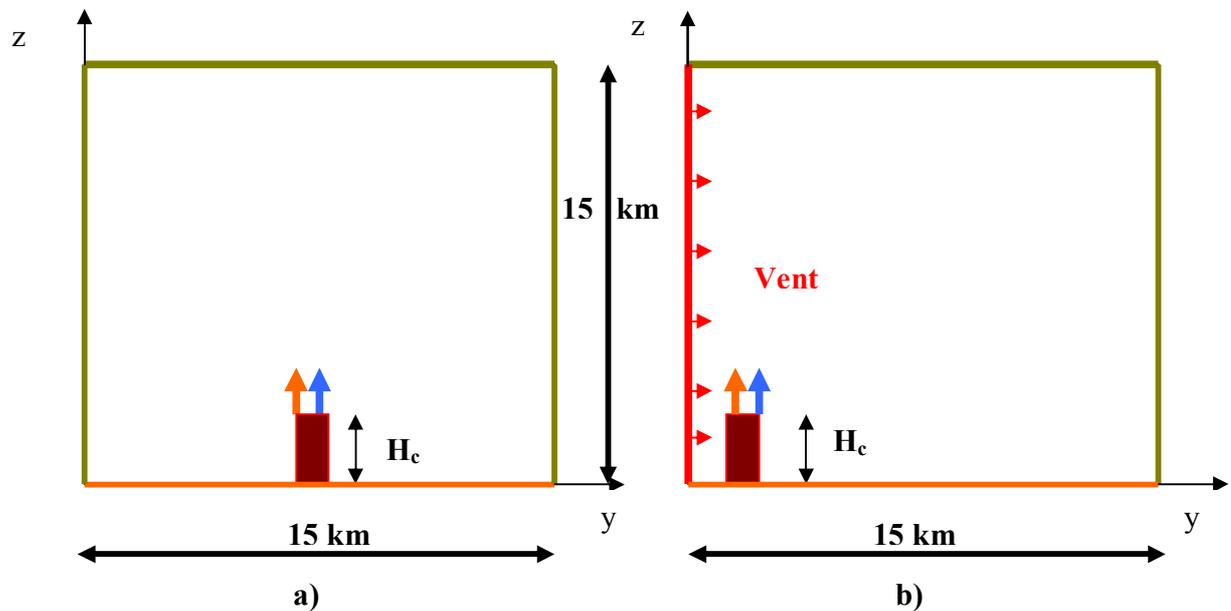


Figure III-1 : Modèle géométrique de milieu de diffusion des polluants.

III.1.2. Hypothèses simplificatrices du modèle

A ce stade, il est nécessaire d'émettre un certain nombre d'hypothèses afin d'établir un modèle mathématique simple qui décrit le comportement de la dispersion du polluant dans l'atmosphère aussi fidèlement que possible :

- L'écoulement est bidimensionnel suivant z et y , turbulent et non réactif.
- Le fluide est newtonien et incompressible.
- La température de la source de jet est constante dans le temps.
- L'effet radiatif de chaleur est négligeable.
- Force de Coriolis et de flottation sont supposées négligeables [42].
- Les parois de la cheminée sont très conductrices de la chaleur de sorte que la température de la paroi est constante le long de la torche : et $Bi \leq 0,1$. est égale à la température de jet.
- L'origine du repère, dans les deux cas considérés (figure III.1.), est au centre de la cheminée.

III.2. Formulation mathématique

Le mélange fluide est incompressible, la masse volumique ρ et la viscosité μ sont fonction de la température du milieu de dispersion et de sa composition chimique.

Une analyse approfondie des processus diffusives met en évidence l'interaction des effets de gradients de concentration et de température (effet de Soret). En vue d'étudier le phénomène, nous allons formuler le problème dans sa complexité en conjuguant les équations de bilans de :

- quantité de mouvement ;
- quantité de chaleur ;
- quantité de matière.

La simulation numérique du modèle d'advection-diffusion consiste à résoudre les équations de l'aérothermochimie de manière à calculer, en tout point du système modélisé, les grandeurs caractéristiques du fluide, à savoir sa vitesse (ses composantes dans le système d'axes retenu), sa pression, sa température (ou son enthalpie) et sa composition.

Les phénomènes turbulents des pulsations de grandeurs (c , u , t) sont étudiés dans le temps. En général, ces pulsations obéissent à des lois qui dérivent de l'analyse statistique du phénomène. Pour pallier à cette difficulté, les études sont menées en introduisant des grandeurs moyennées dans le temps de sorte que les bilans peuvent s'écrire :

- **Equation de conservation de continuité**

Sachant que le système, par hypothèse, n'est pas siège de réaction chimique la loi de conservation de la masse est exprimée mathématiquement sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \text{div} (\bar{\rho} u_i) = 0 \quad (\text{III .1})$$

Où : $\bar{\rho}$ est la masse volumique moyenne et u_i est la composante du vecteur vitesse ; alors que t est la variable indépendante de temps.

- **Equation de quantité de conservation de mouvement**

Le principe de conservation de la quantité de mouvement permet d'établir les relations entre les caractéristiques du fluide lors de son mouvement et les forces extérieures qui le produisent. L'équation de la quantité de mouvement est donnée comme suit :

$$\text{Suivant } y : \quad \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} u_y) + \text{div} (\bar{\rho} u_y u) = - \frac{\partial P}{\partial y} + \text{div} (\bar{\tau}) + \bar{F} \quad (\text{III .2.a})$$

$$\text{Suivant } z : \quad \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} u_z) + \text{div} (\bar{\rho} u_z u) = - \frac{\partial P}{\partial z} + \text{div} (\bar{\tau}) - \bar{\rho} \bar{g} + \bar{F} \quad (\text{III .2.b})$$

Où : P la pression;

$\bar{\tau}$ Le tenseur des contraintes;

\vec{g} et \vec{F} sont les forces gravitationnelle sur les polluants et les forces d'interactions entre espèce présentes dans l'atmosphère ainsi que l'effet du champs extérieur (magnétique).

- **Equation de conservation de l'énergie**

L'équation de conservation de l'énergie est obtenue à partir du premier principe de la thermodynamique et donnée comme suit :

$$\frac{\partial (\overline{\rho E})}{dt} + \text{div} (\bar{u} (\rho E + P)) = \text{div} \left(\sum_j h_j \bar{J}_{\alpha, h} \right) + \bar{S}_e \quad (\text{III .3})$$

S_e : est un terme de source.

- **Equation de transport d'espèces**

La détermination de la fraction massique pour chaque espèce, se fait par la résolution de l'équation de transport de l'espèce j, qui est de la forme suivante :

$$\frac{\partial \overline{\rho X_j}}{dt} + \text{div} (\overline{\rho u X_j}) = \text{div} (D_{T,j} \text{grad} \overline{X_j}) + \bar{S}_j, j = 1,2 \quad (\text{III .4})$$

S_j : est un terme source de constituant j. Dans le cas étudié, ce terme présente une composante nulle.

Les coefficients de diffusion de matière peuvent être considérées constants, définis sous forme polynomiale, en fonctions de la température et la composition. Toute fois, l'utilisateur peut opter pour l'utilisation de l'expression empirique [43] suivante:

$$D_{T,j} = -2,59 * 10^{-7} T^{0,659} \left[\frac{M_j^{0,511} X_j}{\sum_{j=1}^N M_j^{0,511} X_j} - Y_j \right] * \left[\frac{M_j^{0,511} X_j}{\sum_{j=1}^N M_j^{0,489} X_j} \right] \quad (\text{III .5})$$

Pour les conditions de fonctionnement requises, nous avons considéré pratiquement pour toutes les simulations un mélange gazeux idéal en équilibre thermique. Il est régi par :

$$PV = nRT \quad (\text{III .6})$$

Où n est le nombre de mole de constituant j ,

$$\text{Et :} \quad h = \sum_{j=1}^n h_j \cdot X_j \quad (\text{III .7})$$

Avec :

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T c_{pj}(T) dT + h_j^0(T_{ref}, j) \quad (\text{III .8})$$

c_{pj} Capacité thermique massique du constituant j à pression constante, et $T_{ref} = 298,15$ k.

Les valeurs de $c_{pj}(T)$ sont des données que l'on doit trouver dans des tables spécifiques (Les tables du *NIST, JANAF* [51]).

Les équations précédentes de bilans contiennent des termes inconnus, dont leurs déterminations sont fonction des termes connus. Ceci impose mathématiquement une fermeture du système d'équations.

III.3. Modélisation de la turbulence

La valeur instantanée de chaque variable ϕ peut ainsi être décomposée en la somme d'une valeur moyenne $\bar{\phi}$ et d'un terme de fluctuation turbulente ϕ' autour de celle-ci, soit $\phi = \bar{\phi} + \phi'$.

Où la moyenne temporelle de ϕ sur la période ΔT est $\bar{\phi}$ définie par :

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta T} \int_t^{t+\Delta T} \phi(t) dt \quad (\text{III .9})$$

L'analyse des équations de transferts (mouvement, matière, chaleur) montre qu'elles renferment des grandeurs, liées à la pulsation des valeurs moyennes, qui ne sont quantifiables qu'à travers la compilation de résultats expérimentaux. En effet, certains modèles empiriques de turbulence sont développés dans la littérature en vue de fermer le système d'équations constitutives du modèle mathématiques. Il en découle que la problématique réside dans la détermination des paramètres du modèle en fonction des grandeurs mesurables et leur impact sur la sensibilité du modèle. Certaines approches numériques ont conduit au développement des modèles :

- k-ε et ses variantes ;
- k-ω.

Qui sont fonction des valeurs moyennes des variables caractéristiques de l'écoulement $(\bar{c}, \bar{u}, \bar{T})$.

Pour l'étude du problème de la pollution atmosphérique, l'analyse bibliographique montre que le modèle k-ε conduit à des résultats concordant avec les données expérimentales [52] [53].

De point de vue mathématique, l'analyse de la dispersion du polluant montre qu'il présente une forte non linéarité du système avec interaction complexe entre les différentes variables. L'outil numérique demeure l'alternative afin de nous affranchir de cette difficulté. En effet, les méthodes de différence finis, volumes finis sont assez puissantes pour résoudre le modèle. Souvent, on y recourt tels que la technique CFD (pour Computational Fluid Dynamics)

Dans le modèle k-ε développé par Launder et Spalding [54], on introduit deux équations de transport supplémentaire pour la variable k et ε. Ainsi, leurs formulations sont données par :

$$\frac{\partial \bar{\rho k}}{\partial t} + \text{div}(\overline{\rho k u}) = \text{div}\left(\frac{u_{eff}}{\sigma_k} \text{grad } k\right) + P_k - \bar{\rho \varepsilon} \quad (\text{III} .10)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho \varepsilon}}{\partial t} + \text{div}(\overline{\rho \varepsilon u}) = \text{div}\left(\frac{u_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \text{grad } \varepsilon\right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - \bar{\rho \varepsilon} (C_{\varepsilon 2})) \quad (\text{III} .11)$$

$$P_k = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial u_i}{\partial y_j} \quad (\text{III} .12)$$

La viscosité turbulente est définie par [54] :

$$\mu_{turb} = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (\text{III} .13)$$

Avec C_μ est une constante universelle.

Pour plus de détails sur la formulation mathématique des autres modèles de turbulence (k_ε RNG, k_ε REA, k_ω standard, k_ω SST, ...etc.), des ouvrages spécialisés abondent en informations [54].

III.4. La méthode de volumes finis et l'algorithme SIMPLEC

La résolution numérique des équations de conservation turbulentes bidimensionnelles d'écoulement est fréquemment désignée par l'acronyme CFD (pour Computational Fluid Dynamics), qui se différencie essentiellement par la technique de discrétisation du domaine, les modèles utilisés pour calculer les différents termes sources des équations de conservation et intégrer les effets de la turbulence, mettant en œuvre des algorithmes pour résoudre les équations discrétisées. Pour toutes l'équation de transport, le code commercial Ansys-FLUENT

[45] utilise une méthode de discrétisation aux volumes finis, dans laquelle les noeuds de calcul sont placés au centre des volumes de contrôle (on parle de schéma cell-centered). L'intégration des équations de conservation par la méthode de volume finis peut être écrite sous une forme commune sans terme source :

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y_i} (\rho \phi u_i) = \frac{\partial}{\partial y_i} (\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y_i}) + S_\phi \quad (\text{III .14})$$

ϕ : pouvant être une vitesse, une température ou une concentration alors que Γ_ϕ désigne le coefficient de diffusion.

Cette équation (III.12) subit des discrétisations temporelle et spatiale. La discrétisation temporelle implique l'intégration des équations aux dérivées partielles sur le pas de temps Δt :

$$\int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y_i} (\rho \phi u_i) \right) = \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial y_i} (\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y_i}) \right) \quad (\text{III .15})$$

L'intégration du terme d'accumulation ne pose pas de problème :

$$\int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right) = (\rho \phi)[t + \Delta t] - (\rho \phi)[t] \quad (\text{III .16})$$

Pour les autres termes, l'intégration est moins directe. Pour une fonction $b = b(t)$ plusieurs schémas sont possibles. La formulation générale s'écrit :

$$\int_t^{t+\Delta t} b(t) dt = f b[t + \Delta t] + (1 - f) b[t] \quad (\text{III .17})$$

Où f est un coefficient de pondération dont la valeur est comprise entre 0 et 1. Une valeur nulle de f donne un schéma explicite, tandis qu'une valeur égale à 1 donne un schéma implicite. Le code Fluent exploite le schéma implicite. L'expression générique de l'évolution temporelle d'une variable ϕ est donnée sous forme d'une fonction $F(\phi(y, t))$, laquelle s'écrit :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = F(\phi) \quad (\text{III .18})$$

La méthode d'intégration implicite est une technique d'évaluation de ϕ en utilisant le schéma :

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = F(\phi^{n+1}) \quad (\text{III.19})$$

Donc :
$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t F(\phi^{n+1}) \quad (\text{III.20})$$

Qui calcule à priori la valeur de ϕ^{n+1} pour un intervalle de temps $(t + \Delta t)$.

L'intégration de l'équation de bilan sans terme source sur le volume de contrôle bidirectionnel défini sur la figure ci-dessous conduit à l'expression intégralo-différentielle:

$$\int_V \frac{\partial \rho^{n+1} \phi^{n+1}}{\partial t} dV + \int_s^e \int_w^e \rho^{n+1} \phi^{n+1} u^{n+1} d y dz = \int_s^e \int_w^e \Gamma^{n+1} \nabla \phi^{n+1} d y dz \quad (\text{III.21})$$

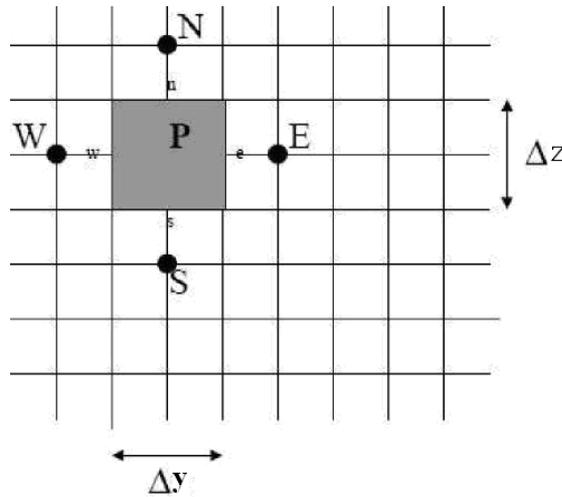


Figure III-2 : Volume de contrôle.

- **Le Critère de convergence**

Une fois discrétisées les équations de bilans prennent une forme algébrique dont la formulation générale s'écrit :

$$A_P^\phi \phi_P = \sum_{NB} A_{NB}^\phi \phi_{NB} \quad (\text{III.22})$$

La convergence est quantifiée par l'intermédiaire de résidus normalisés de la manière suivante :

$$R_n = \frac{\sum_{noeudp} \left| \sum_{NB} A_{NB}^{\phi} \phi_{NB} - A_P^{\phi} \phi_P \right|}{\sum_P A_P^{\phi} \phi_P} \quad (\text{III .23})$$

La convergence des résultats est testée selon deux critères :

1. la valeur instantanée des résidus normalisés doit être inférieure à 10^{-3} et pour les variables k et ε est inférieure à 10^{-6} .
2. des itérations ultérieures confirment l'exactitude des résultats obtenus après que la convergence est atteinte.

- **Notion de sous relaxation**

Pour atténuer les fluctuations de la solution approchée autour de la solution exacte, on introduit la méthode de sous-relaxation qui permet à la variable ϕ au point P, de passer d'une itération à la suivante par l'application d'une correction $\Delta\phi_p^n$, déduite de l'algorithme SIMPLEC de sorte que sa valeur corrigée s'écrive:

$$\phi_p^{n+1} = \phi_p^n + \alpha_{\phi} \Delta\phi_p^n \quad (\text{III .24})$$

α_{ϕ} : représente le coefficient de sous relaxation pour la variable ϕ . L'algorithme représentatif de l'enchaînement de simulation numérique est présenté sur la figure III.3.

Une fois les coefficients définis leurs valeurs dépendent des différentes variables opératoires relatives à la nature du problème.

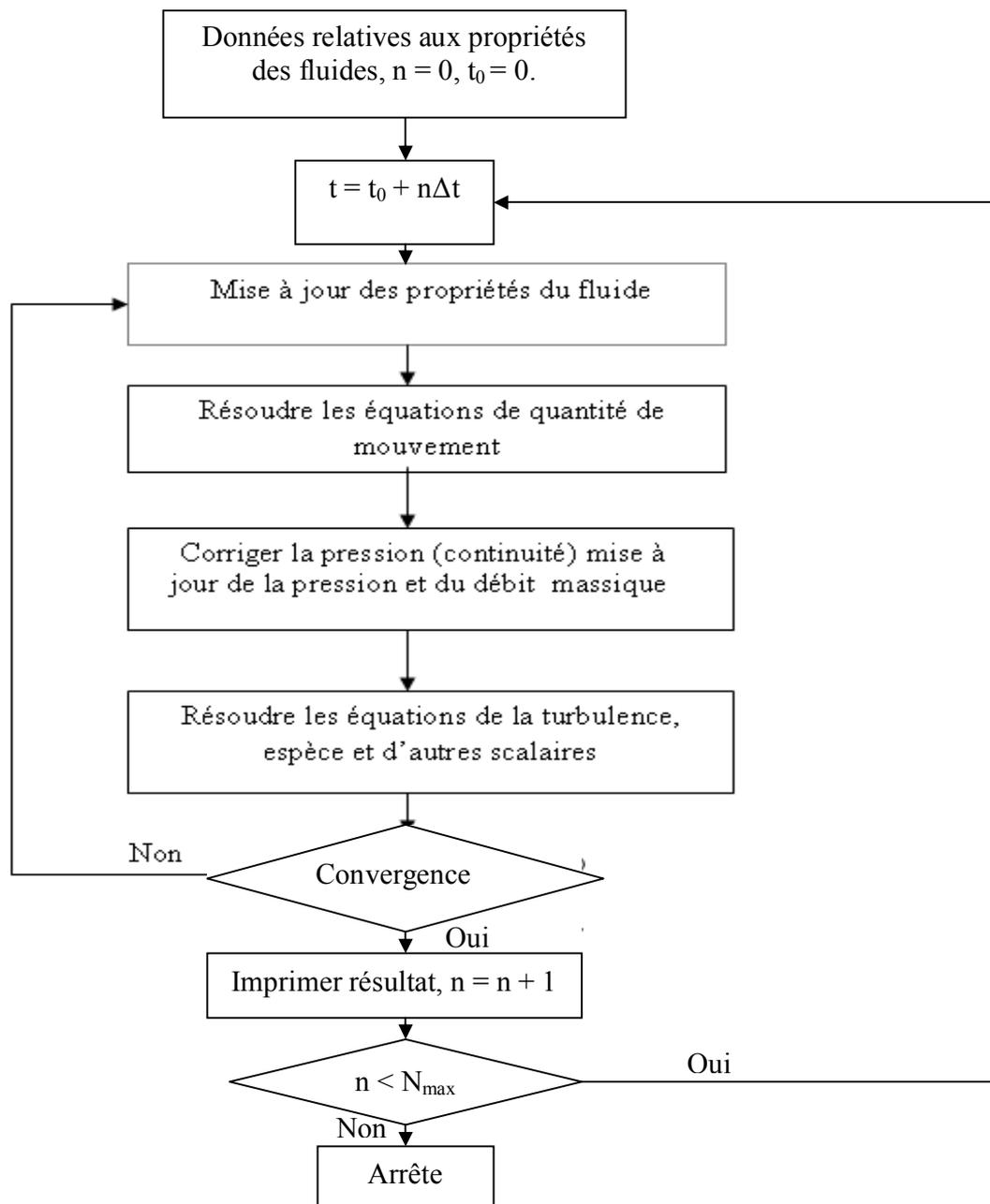


Figure III-3: Algorithme de calcul pour un solveur découplé [43].

III .5. Conditions aux limites

La résolution du système d'équations du modèle obtenu nécessite l'adjonction des conditions aux limites pour chaque variable dépendante. Il y'a lieu de noter que la condition initiale nécessite la connaissance de la valeur de la variable à l'instant $t = 0$. En toute rigueur, elle dépend : des distributions de champs de vitesse, de concentration et de température dans le domaine siège de la dispersion à l'instant initial.

1. Conditions d'entrées du fluide

Aux entrées du fluide dans l'espace confiné à la dispersion, nous avons jugé utile de fixer les valeurs de :

- vitesse absolue d'éjection ;
- concentration en polluant dans le jet ;
- température de la torche ;
- caractéristiques physiques des phénomènes de turbulence.

Comme caractéristique du régime d'écoulement, on a introduit le nombre de Reynolds, défini par [42]:

$$\text{Re} = \frac{\rho u_{\infty} \delta}{\mu} \quad (\text{III .25})$$

Avec :

u_{∞} : La vitesse du vent en «écoulement potentiel» ;

δ : L'épaisseur locale de la couche limite ;

ρ : La masse volumique du fluide ;

μ : La viscosité dynamique du fluide.

Sa valeur dépend naturellement des propriétés du fluide et de la géométrie de la conduite ouverte à l'écoulement.

Parmi les conditions aux limites, on distingue :

2. Conditions de sortie du fluide

C'est une condition qui se rapporte aux conditions prévalant au niveau des parois (exclus la torche) délimitant l'espace confinant, le domaine siège de la dispersion du polluant. A ce niveau, et indépendamment de la position, les gradients locaux de concentration et température sont nulles. Du point de vue thermodynamique, ces conditions sont équivalentes à un équilibre thermique et chimique.

Pour ce qui a trait aux conditions aux parois de la cheminée et au niveau du sol, on a considéré que :

- la vitesse du polluant est nulle (niveau bas de la couche limite)

- la température du sol est invariable et qu'elle est pratiquement non affectée par la variation diurne de l'intensité d'ensoleillement de la terre.

3. Condition en vitesse

Les différentes composantes du vecteur vitesse du fluide, celui du vent, les fractions massiques en polluant, ainsi que les températures sont consignées dans le tableau III.1. Il va de soi que la résolution du problème de dispersion du polluant dans l'atmosphère doit tenir compte des conditions aux limites mentionnées ci-après.

Tableau III.1 : conditions aux limites

Conditions géométrique	Cas	Limite	Conditions hydrodynamiques	Conditions thermiques	Conditions de concentration
AB	a)	$z=0, -L/2 \leq y \leq -D/2$	$u_y = 0, u_z = 0$	$\partial T / \partial y = 0$	$C = 0$
	b)	$z=0, -L_1 \leq y \leq -D/2$			
EF	a)	$z=0, D/2 \leq y \leq L/2$			
	b)	$z=0, D/2 \leq y \leq L_2$			
BC	a) + b)	$y = -D/2, 0 \leq z \leq H_c,$	$u_y = 0, u_z = 0$	$T = T_{jet}$	$C = 0$
ED	a) + b)	$y = D/2, 0 \leq z \leq H_c,$			
CD	a) + b)	$z = H_c, -D/2 \leq y \leq D/2$	$u_y = 0, u_z = u_{jet}$	$T = T_{jet}$	$C_{jet} = 0$
FG	a)	$y = L/2, 0 \leq z \leq H_z$	$\partial u_y / \partial y = 0,$ $\partial u_z / \partial z = 0$	$\partial T / \partial y = 0^*$	$C = 0$
	b)	$y = L_2, 0 \leq z \leq H_z$			
GH	a)	$z = H_z, -L/2 \leq y \leq L/2$			
	b)	$z = H_z, -L_1 \leq y \leq L_2$			
HA	a)	$y = -L/2, 0 \leq z \leq H_z$	$\partial u_x / \partial y = 0,$	$\partial T / \partial y = 0^*$	$C = 0$

			$\partial u_z / \partial z = 0$	
b)	$y = -L_1, 0 \leq z \leq \sigma$	$u_y = u_\infty (2z/\sigma - z^2/\sigma^2)$ (III .26)	$T(z) = T_{amb}(z_{ref}) + \alpha (z - z_{ref})$ (III .27)	
	$y = -L_1, \sigma \leq z \leq H_z$	$u_y = u_\infty$		

* : $P(z) = P_{atm}(z_{ref}) + \rho \cdot g \cdot (z - z_{ref})$

σ est l'épaisseur de la couche limite définie comme étant la longueur caractéristique entrant dans la définition du nombre de Reynolds sa valeur est estimée à 500 m [42].

α désigne le gradient longitudinal de température, sa valeur moyenne est de l'ordre de 10^{-3} . En suppose que la variation de la température avec l'altitude suit une loi linéaire [41].

L'équation (III .26) donne le profil de vitesse dans la couche limite laquelle vérifie les conditions aux limites suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} \bullet u_y \Big|_{z=0} = 0 \\ \bullet u_y \Big|_{z=\sigma} = u_\infty \\ \bullet \frac{du_y}{dz} \Big|_{z=\sigma} = 0 \end{array} \right.$$

Ces différentes conditions aux limites sous forme adimensionnelles peuvent être résumées dans la figure III- 4.

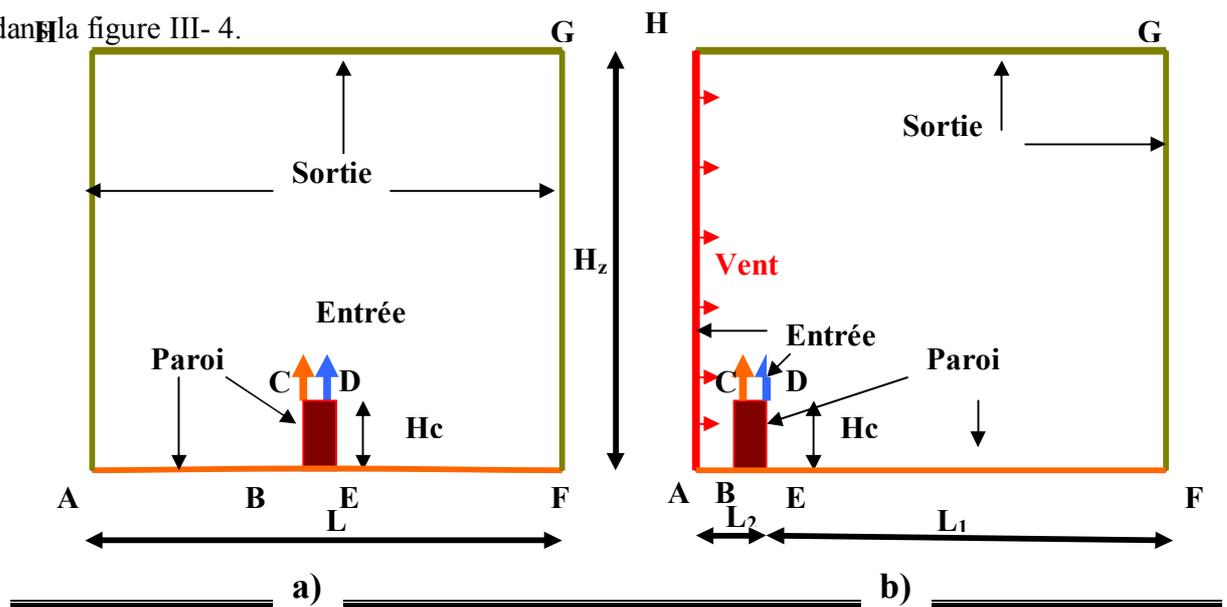


Figure III.4: géométrie du milieu de dispersion pour
a) Absence de circulation de vitesse de vent, **b)** circulation de vent

III .6. Maillage

Le maillage structuré a été construit par le biais du mailleur automatique GAMBIT [55]. L'opération consiste à créer la structure grossière en définissant des points de contrôle (généralement les bords des arrêtes), en reliant ces points par des segments de droites, et en construisant des surfaces qui s'appuient sur ces arrêtes. La séquence logique de construction suit une tendance descendante-ascendante (down-top).

Le maillage structuré, présenté en coupe longitudinale (figure III-4) sous la direction de vent, est composé de 13650 noeuds et 12800 éléments de maillage. Afin de prendre en compte l'effet de la couche limite, un raffinement tout près du sol a été adopté. La torche n'a pu être visualisée dans le schéma compte tenu de sa faible hauteur vis à vis de la taille des mailles.

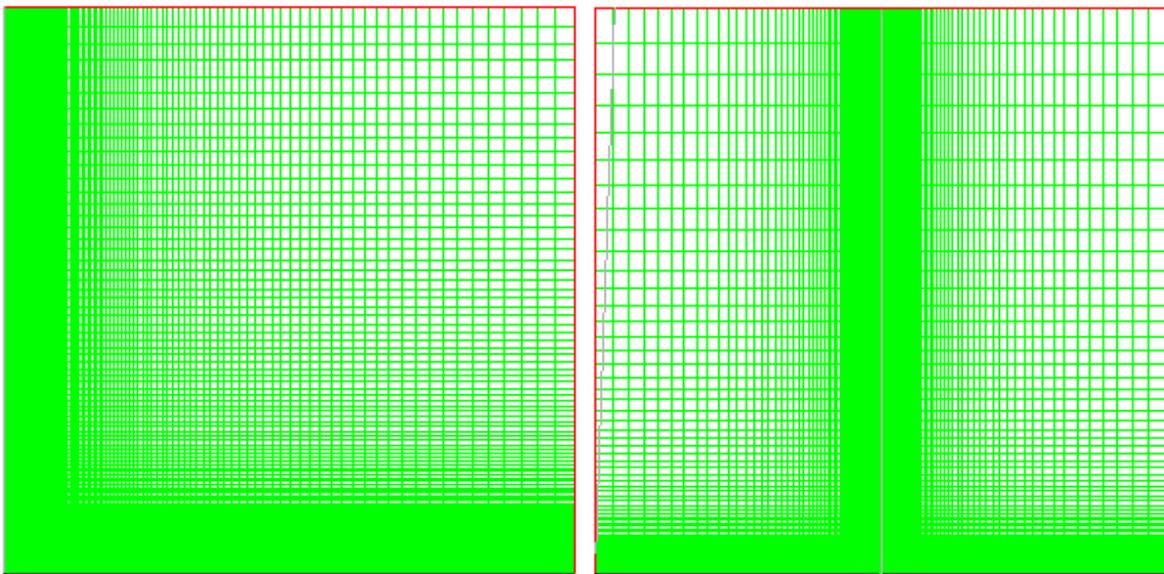


Figure III.5 : Schématisation de maillage du milieu étudié.

Conclusion

Dans le présent chapitre, nous avons établi pour le problème traité un modèle mathématique très complexe en tenant compte des différentes interactions. Ce dernier est constitué d'un système d'équations différentielles associées à des conditions aux limites des différents paramètres. Les équations de bilan sont donc connues mais :

- La résolution analytique de ces équations de bilan n'est pratiquement jamais réalisable;

- Les non-linéarités visibles dans les équations sont principalement dues à l'origine des difficultés pour obtenir une solution analytique.

Donc, l'utilisation des méthodes numériques s'avère indispensable pour la résolution des équations du modèle mathématique. Dans notre étude, nous avons basé sur la méthode numérique des volumes finis pour la résolution du système.

De plus amples détails, facilitant la compréhension de la méthode feront l'objet du chapitre suivant.

Chapitre VI
Simulation
numérique

IV.1. Introduction

La dispersion des polluants dans l'atmosphère s'effectue essentiellement dans la couche limite atmosphérique, couche la plus troublée, agitée sans cesse par des mouvements turbulents tant horizontaux que verticaux. Cette dispersion est influencée par plusieurs paramètres.

Dans ce chapitre nous allons nous intéresser à l'étude numérique de la propagation naturelle turbulente stationnaire et instationnaire dans la géométrie considérée. Nous verrons en premier lieu, l'influence du maillage sur les résultats. Puis nous procédons à la validation des résultats de la simulation obtenus à l'aide du logiciel FLUENT. Alors pour plus de clarté, dans ce travail, nous nous intéressons à l'étude des différents paramètres influençant la dispersion des polluants gazeux, tels que la vitesse, la concentration, la température d'éjection et la vitesse de vent. Cette étude nous permet aussi d'analyser un projet industriel avant sa réalisation et au cours de son exploitation afin de préserver son environnement.

Nous présentons pour chaque paramètre, des courbes de vitesse et de rapport de concentration. Pour toutes les simulations réalisées dans le premier cas de cette étude, nous avons adopté une vitesse de vent potentiel égal à 0 m/s et pour le deuxième cas, elle varié dans l'intervalle 5 à 20 m/s.

La configuration étudiée est une géométrie carrée de dimensions (15x15 km) contenant de l'air comme fluide. Le sol et les parois de cheminée sont considérés comme adiabatiques. Le modèle mathématique utilisé ainsi que la procédure de simulation numérique ayant été décrits en détail dans le chapitre précédent, ils sont rappelés brièvement ci après.

Dans la première partie de ce chapitre, on a considéré le cas où il y a une absence de circulation de vitesse de vent. La deuxième partie est consacrée à l'étude de l'influence de la circulation de vent avec destination d'écoulement couche limite et écoulements potentiel.

IV.3. Principes des codes CFD

La résolution des équations d'un phénomène physique de la propagation de SO₂ se fait par l'utilisation d'une méthode numérique. Cette dernière consiste à développer les moyens de la résolution de ces équations. A cette étape, intervient le concept de la discrétisation. Le résultat de la discrétisation des équations différentielles de transport est un système d'équations algébriques non linéaires, ces équations décrivent les propriétés discrètes du fluide aux noeuds dans le domaine de solution.

Dans la présente étude, on utilisera la méthode des volumes finis avec des volumes de contrôles quadrilatéraux et un maillage uniforme. Le schéma de discrétisation employé est de type polynomial et le couplage vitesse-pression est calculé selon l'algorithme SIMPLEC développée par Spalding et Patankar. Elle est à l'origine de la majorité des codes de calculs (Phoenics, Fluent, CFD,...). La méthode des volumes finis qui se distingue par sa fiabilité quand aux résultats, son adaptation au problème physique, sa garantie pour la conservation de masse, de quantité de mouvement et de tout scalaire transportable sur chaque volume de contrôle et dans tout le domaine de calcul, ce qui n'est pas le cas pour les autres méthodes numériques.

La simulation a été réalisée en régime transitoire et permanent pour pouvoir étudier la progression de SO_2 (évolution de la concentration et de vitesse) dans le temps et dans l'espace.

La technique des volumes de contrôle consiste dans l'intégration des équations aux dérivées partielles sur chaque volume de contrôle pour obtenir les équations discrétisées qui conservent toutes les grandeurs physiques sur un volume de contrôle.

Les différentes étapes de la méthode des volumes finis sont :

- La discrétisation du domaine considéré en volume de contrôle;
- La formulation intégrale des équations différentielles aux dérivées partielles;
- Écriture des équations algébriques aux noeuds du maillage ;
- Résolution du système algébrique linéaire obtenu.

Les résultats de la discrétisation des équations différentielles de transport sont un ensemble d'équations algébriques non linéaires. Si on divise le domaine de calcul en N mailles selon y et en M mailles selon z , on aura un système de $N \times M$ équations algébriques non linéaire pour chaque variable. Rappelons que les variables dans notre problème, sont la température T , la vitesse u et les concentrations C . Un problème subsiste du fait qu'il n'existe pas d'équation donnant directement le champ de pression. Il faut faire à une méthode itérative.

Pour accéder aux différentes étapes du menu, on a recourt au choix du fluide, sa nature physique, sa composition, les conditions de son écoulement (pression, et....) via le menu « Définir » effet de la gravitation ainsi que les conditions aux limites.

Les autres étapes du menu "Définir" sont les choix du fluide, des conditions d'opération (introduction de l'effet de la gravité et de la pression de référence) et des conditions aux limites. Le dernier menu utilisé pour entamer le calcul est le menu "Résoudre". On doit choisir :

1. les équations du modèle à résoudre,
2. les schémas de discrétisation,
3. les facteurs de sous relaxations,
4. les critères de convergence.

Les conditions aux limites sont à la base de l'initiation de la méthode itérative.

Le solveur est l'algorithme SIMPLEC (pour Semi Implicit Method for Pressure Linked Equation Consistent) utilisé dans nos calculs de simulations pour le couplage pression-vitesse. L'analyse de la performance de calcul a montré que l'exploitation d'un tel algorithme accélère la vitesse de la convergence des calculs [7].

Pour notre travail, nous aurons recours au code CFD Fluent, commercialisé par Fluent. Nous disposons de la version 6.3.26 pour l'usage que nous en avons, il permet de résoudre les équations régissant les mouvements turbulents d'un fluide, en dimension 2.

IV.4. Choix de maillage

L'objectif principal de cette partie, est d'assurer l'indépendance de la solution du maillage de la géométrie considérée. Nous représentons sur la figure (IV.1) le profil de la vitesse pour les trois différents maillages. Les résultats de la simulation sont présentés dans les figures ci-dessous :

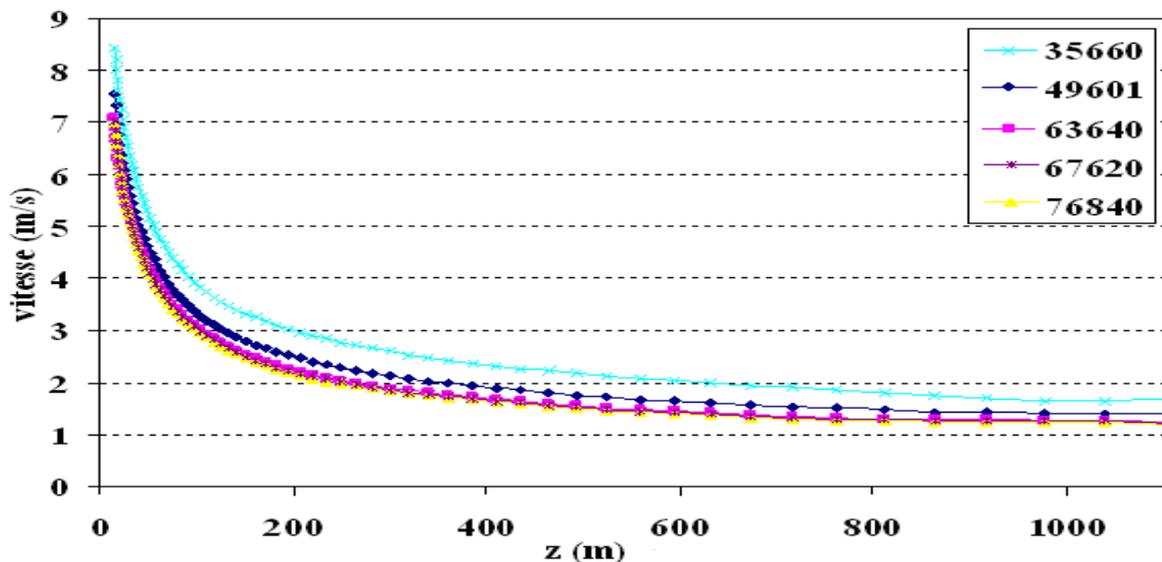


Figure IV.1 : Profil de vitesse pour différents maillages.

Il semble que la solution est très peu sensible aux cinq maillages considérés. L'analyse de la figure (IV.1), montre qu'à la position 1000 m, l'écart de vitesse pour les trois maillages (63640, 67620 et 76840 éléments) est faible.

A travers les cinq maillages qui ont été testés pour notre simulation, on remarque bien l'indépendance de la solution du maillage avec plus de précision pour le cas de 67620 éléments. De ce fait le maillage de 67620 éléments a été retenu pour toutes nos simulations pour minimiser le temps de calculs.

Nous gardons par la suite, les paramètres de l'aérodynamique de la dispersion des polluants (modèles de turbulence, les vitesses d'injection,...etc.).

IV.5. Conditions des simulations

Pour toutes les simulations effectuées, les valeurs et les conditions de fonctionnement sélectionnées sont présentées dans le tableau IV.1.

Tableau IV.1 : Domaine de variation des différents paramètres opératoires.

Conditions aux Limites	Vitesse (m/s)	Température (K)	Fraction massique (%)
Sortie de la cheminée	$V_{sor} = 5 \div 25$	$T_{sor} = 300 \div 425$	$X_0 = 0,055 \div 0,25$
Profil de vitesse de vent	$u_y = u_\infty (2z/\sigma - z^2/\sigma^2)$ $u_\infty = 5 - 20$	$T_{amb} = 285 \div 323$	$X = 0,00$
Paroi de la cheminée et au sol	$u_x = u_y = u_z = 0$	$T_{par} = 285$	/

u_∞ : est la vitesse du vent pour un écoulement potentiel.

IV.6. Régime instationnaire

Le choix d'un pas de temps permettant d'atteindre la convergence en un nombre limité d'itérations peut s'avérer extrêmement délicat. Le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence à chaque instant est fortement dépendant du choix des coefficients de sous-relaxation. Il a été même constaté que l'évolution temporelle de la solution peut être fortement affectée.

IV.7. Résultats et discussions

La configuration étudiée est une géométrie carrée de dimensions (15x15 km²) contenant de l'air comme fluide d'entraînement.

Dans la première partie de ce chapitre, on a considéré le cas d'absence de circulation du vent, La deuxième partie est consacrée à l'étude d'influence de circulation de vent en fonction de la stratification de la couche limite et de l'écoulement potentiel

Pour ce qui est des problèmes de la dispersion des polluants émis par les industries (pollution atmosphérique, toxicité.....), et afin de respecter la borne supérieure (fixée à $500 \mu\text{g}/\text{m}^3$) défini par les normes de l'OMS dans le cadre de la pollution atmosphérique, on note que la concentration en dioxyde de soufre décroît aussi bien avec le temps qu'avec la position verticale. Les résultats de simulation présentant l'évolution de la concentration relative en soufre avec le temps et de la position sont consignés dans la figure n°IV.2 :

En effet, on remarque des variations notables apparaissant dès les premières heures. On constate que les allures tendent vers un profil linéaire en fonction de l'altitude pour $Z > 2500$ m. Le régime stationnaire est atteint au bout de 30 heures. De tels résultats sont comparés à ceux obtenue par la résolution des systèmes d'équations du modèle en régime stationnaire et on a noté leur superposition ce qui confirme l'atteinte du régime stationnaire.

En toute rigueur, pour des altitudes voisines des frontières, les profils de concentration, de vitesse tendent asymptotiquement vers les valeurs consignées dans les conditions aux limites.

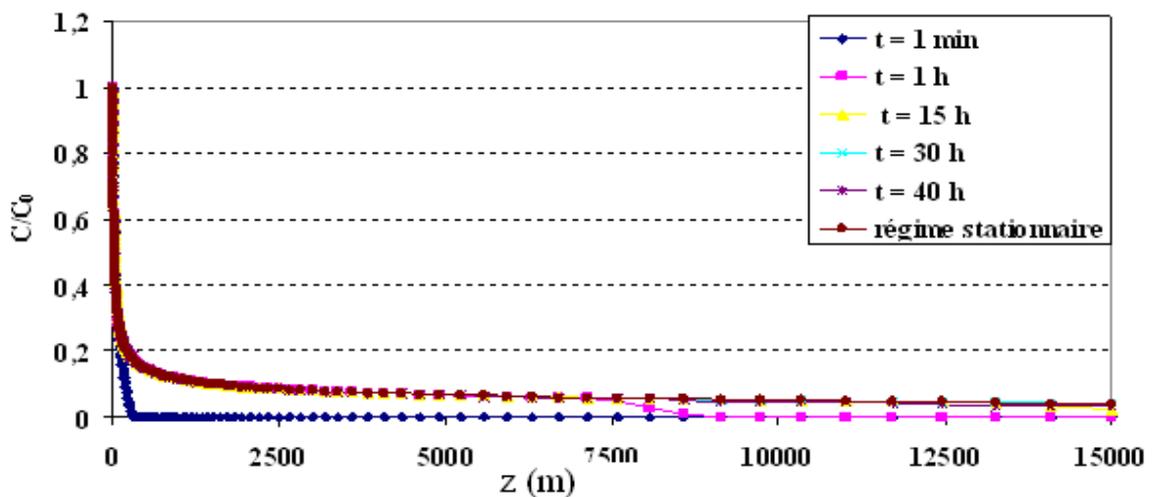


Figure IV.2: Profil vertical de C/C_0 aux différents temps.

IV.7.1. Profils de la vitesse et la concentration en SO_2

1^{er} cas : Absence de circulation de vent

Les champs dynamiques de la vitesse et de la fraction massique en dioxyde de soufre sont représentés dans les figure IV.3 et IV.4 respectivement pour une vitesse de vent nulle.

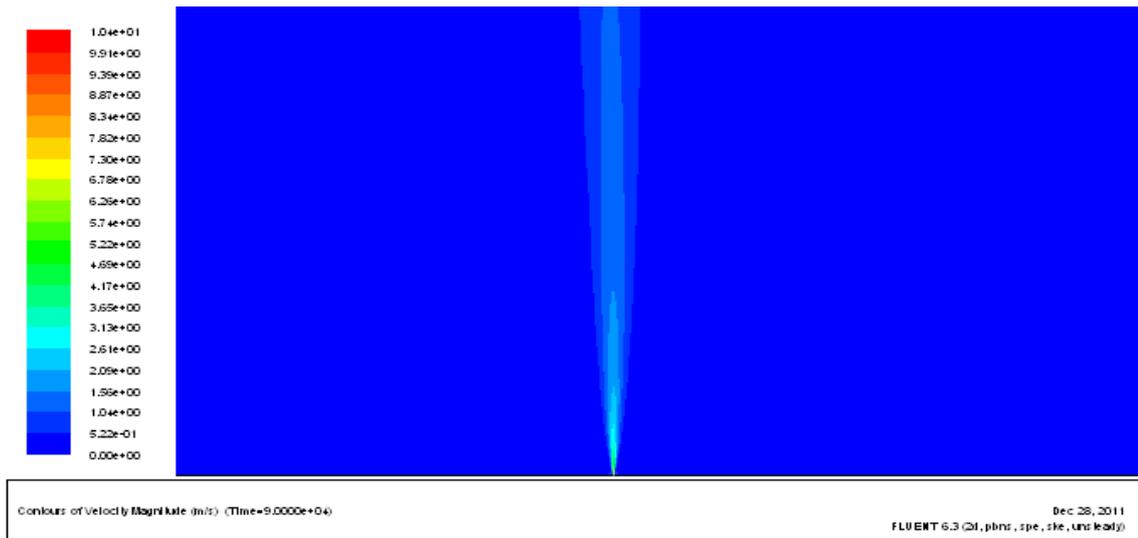


Figure IV.3 : Champ dynamique de la vitesse de SO₂.

$$[V_{\text{sor}}=10\text{m/s}, X_{\text{sor}}=0,15, T_{\text{sor}}=375\text{ K}].$$

On remarque que le mouvement d'ascension du dioxyde de soufre présente un écoulement symétrique en l'absence de circulation du vent lequel joue un rôle perturbateur de la symétrie.

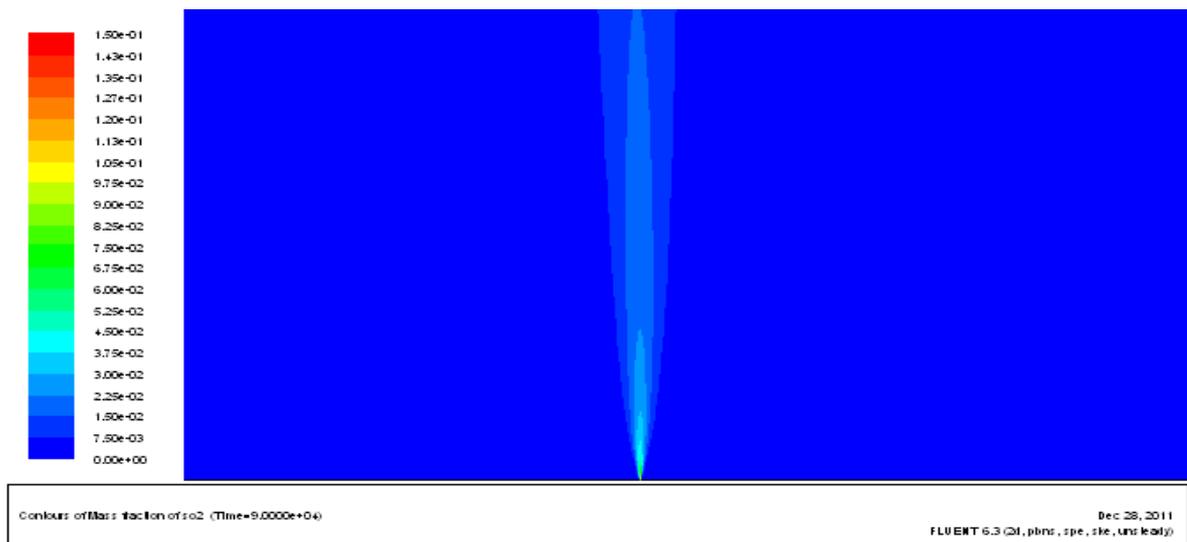


Figure IV.4 : Champ dynamique de la fraction massique de SO₂.

$$[V_{\text{sor}}=10\text{m/s}, X_{\text{sor}}=0,15, T_{\text{sor}}=375\text{ K}].$$

- **Profils verticaux de la vitesse des particules SO₂**

En régime stationnaire, l'analyse des interactions des différents paramètres liés à la dispersion de la particule de SO₂, a mis en évidence l'indépendance totale des variables suivantes : X_{sor} , T_{sor} et V_{sor} . Les profils verticaux de la vitesse de SO₂ présentés dans les figures n° IV 5, 6 et 7, montrent les différentes conditions d'éjections influeraient la

dispersion (X_{sor} , T_{sor} et V_{sor}) dans un milieu pratiquement stagnant c'est à dire que la vitesse de circulation du vent est absolument nulle.

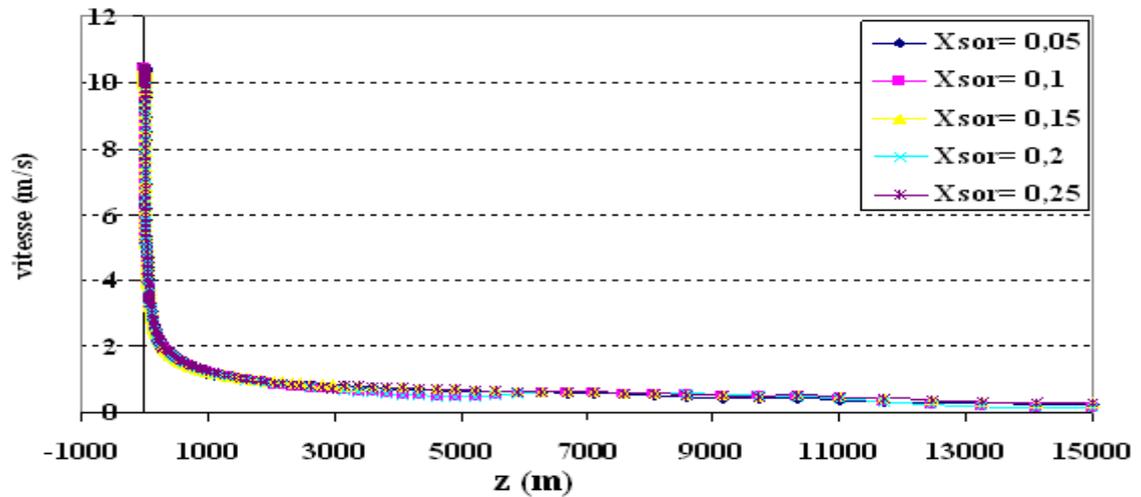


Figure IV.5: Profil de la vitesse de particule de SO_2 avec l'altitude pour différentes compositions à l'éjection [$V_{\text{sor}}=10\text{m/s}$, $T_{\text{sor}}=375\text{K}$].

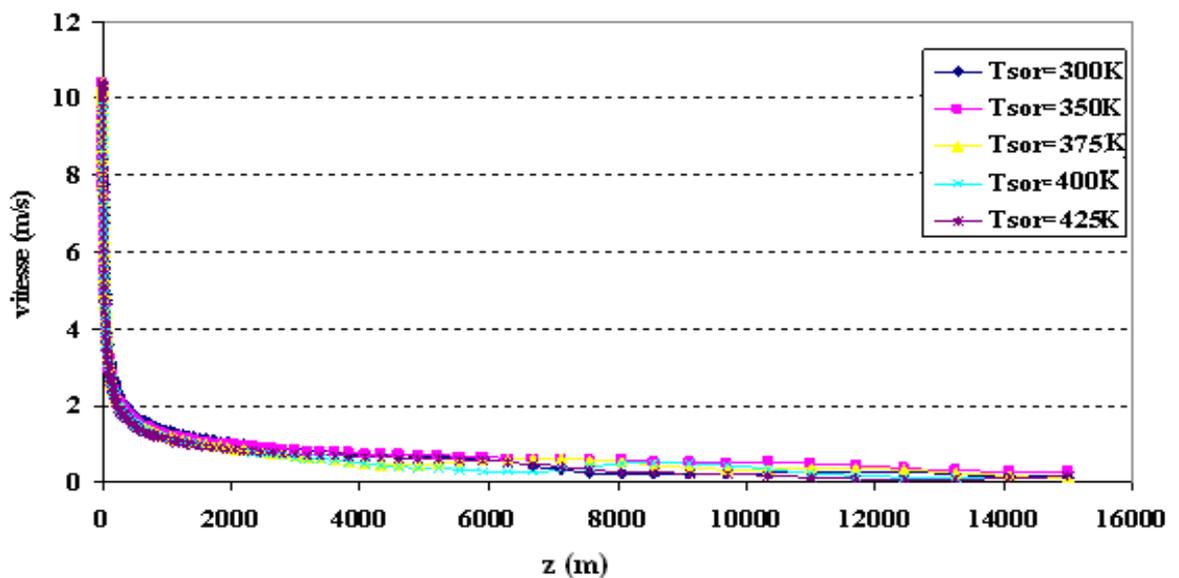


Figure IV.6 : Profil de la vitesse de particule de SO_2 avec l'altitude pour différentes températures d'éjection [$V_{\text{sor}}=10\text{m/s}$, $X_{\text{sor}}=0,15$].

On voit clairement que l'influence des concentrations exprimées en termes de température ou de fraction molaire ont sensiblement les mêmes impacts et que leurs profils sont superposables et présentent une affinité c'est-à-dire qu'ils sont déduits par simple translation. On note que le profil tend asymptotiquement vers la valeur nulle aux frontières.

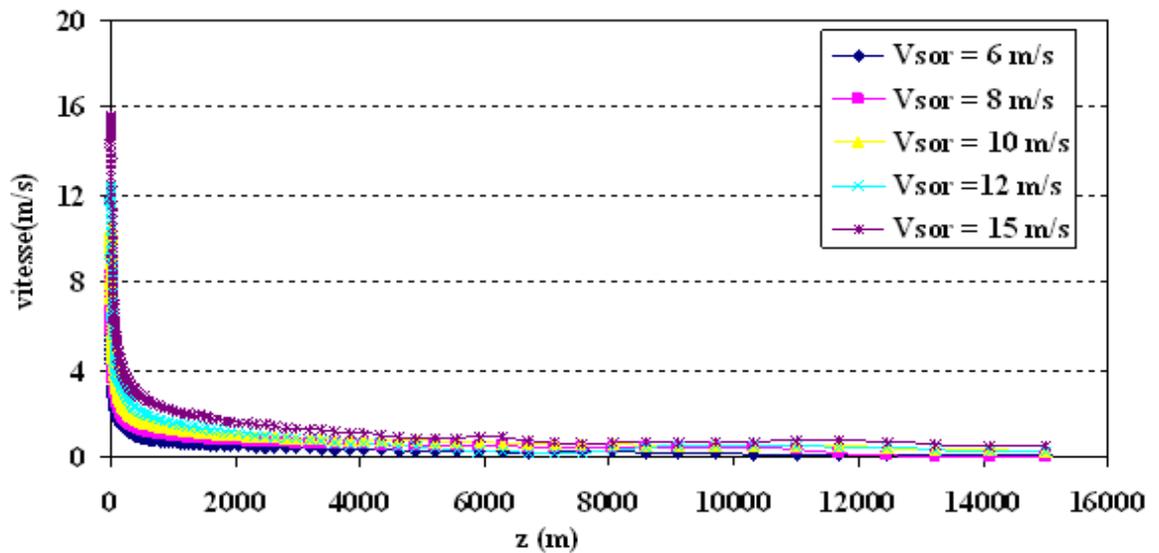


Figure IV.7: Profil de la vitesse de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes vitesses d'éjection [$T_{\text{sor}}=375 \text{ K}$, $X_{\text{sor}}=0,15$].

Par contre, pour différentes vitesses d'éjection, (la figure n° IV.7) montre que la vitesse des particules reste suffisamment importante jusqu'à 8000 m. Au delà, la vitesse des espèces dispersées demeure pratiquement invariable pour se fixer à une valeur de l'ordre de 0,4 m/s. autrement dit, l'effet convectif du jet subit un fléchissement très abrupt dans le domaine [H_c , 8000 m] et l'effet de la gravitation y est très peu perceptible.

Rappelant que H_c est la hauteur de la cheminée.

- **Profils verticaux de (C/C_0) de particules de SO_2**

Pour analyser la variation de la concentration en fonction de l'altitude, nous avons introduit la concentration relative (C/C_0) de dioxyde de soufre. Pour une étude détaillée du profil de la concentration à la sortie, on a exploré les effets de la position transversale (z) et de la concentration de sortie sur le profil (C/C_0) .

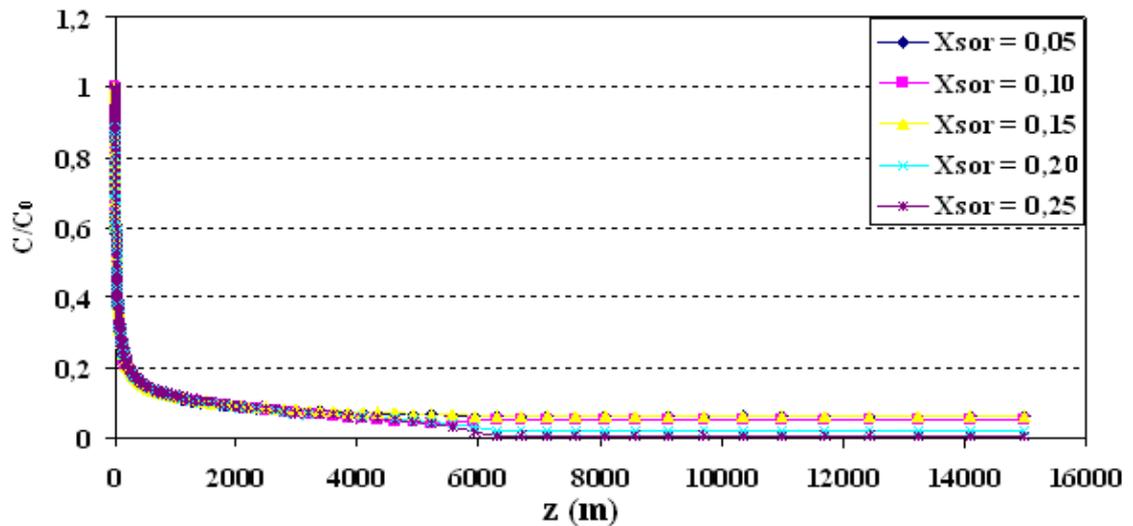


Figure IV.8: Profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes compositions à l'éjection [vitesse d'éjection $V_{\text{sor}}=15$ m/s, $T_{\text{sor}}=375$ K].

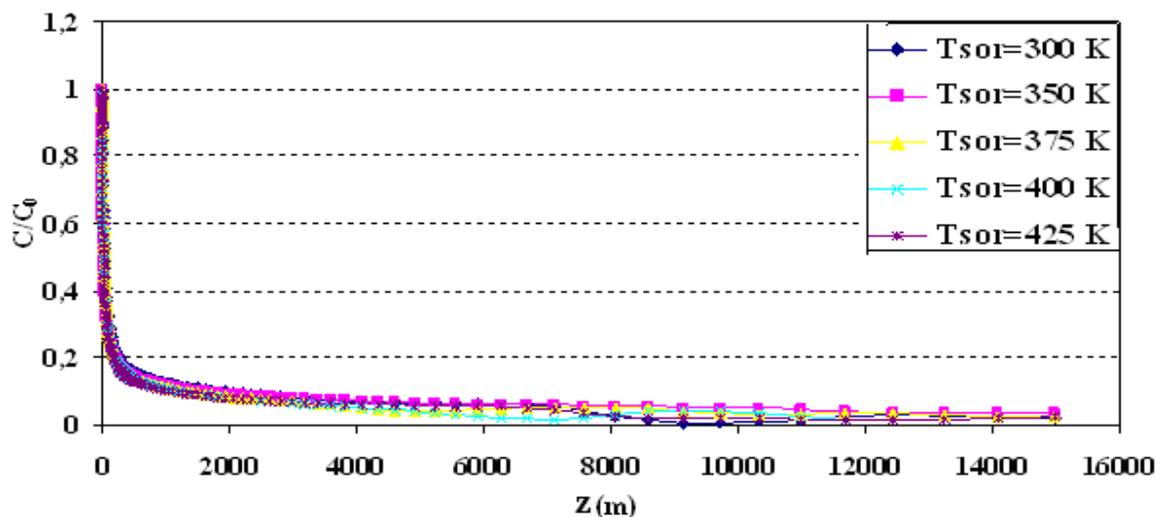


Figure IV.9: Profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes températures d'éjection [vitesse d'éjection $V_{\text{sor}}=10$ m/s, $X_{\text{sor}}=0,15$].

Il y a lieu de noter que la variation de la concentration est très importante à la sortie de la cheminée jusqu'à une hauteur $z \leq 1000$ m, (figure IV 8). Au-delà, cette variation est très peu prononcée ce qui laisse prévoir une densification de la 1^{ière} couche stratosphérique en particules de dioxyde de soufre. En matière de pollution, cette situation s'avère lourdes de conséquences.

Donc, tout problème de diffusion impose le concept de couche limite qui demeure délimité par le milieu entourant la source de diffusion dont l'épaisseur est dépendante du régime d'advection occasionné par l'écoulement extérieur. Par ailleurs, au delà de cette

épaisseur, le profil tend vers une allure linéaire lequel correspond à la solution obtenue par la 2^{ième} loi de Fick en régime stationnaire c'est-à-dire :

$$D_{T,j} \frac{\partial^2 C_j}{\partial z^2} = 0$$

La traînée de profil de concentration est dépendante de la vitesse initiale de l'éjection et tout naturellement de la masse volumique relative du dioxyde de soufre.

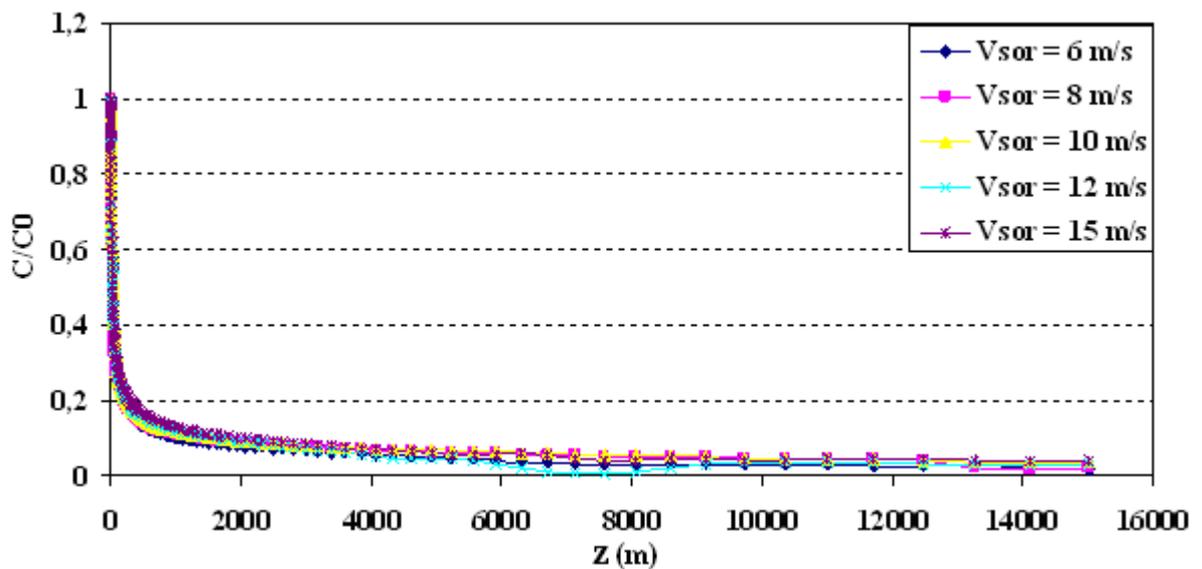


Figure IV.10: Profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes vitesses d'éjection [$T_{sor}=375$ K, $X_{sor}=0,15$].

Pour ce qui concerne la variation de la concentration pour différentes températures et à des vitesses d'éjection variantes dans un intervalle [6-15] m/sec, il est clair dans ce cas qu'il n'y a pas une variation entre les deux paramètres pour différentes valeurs de la température de sortie et même pour différentes valeurs de la vitesse d'éjection.

2^{ième} cas : Ejection en présence du vent

Pour une vitesse de vent voisine de $u_o=8$ m/s, les champs de vitesse et de concentration des espèces de SO_2 dans tout le domaine considéré dans cette étude sont présentés à travers les figures n° IV.11 et IV.12.

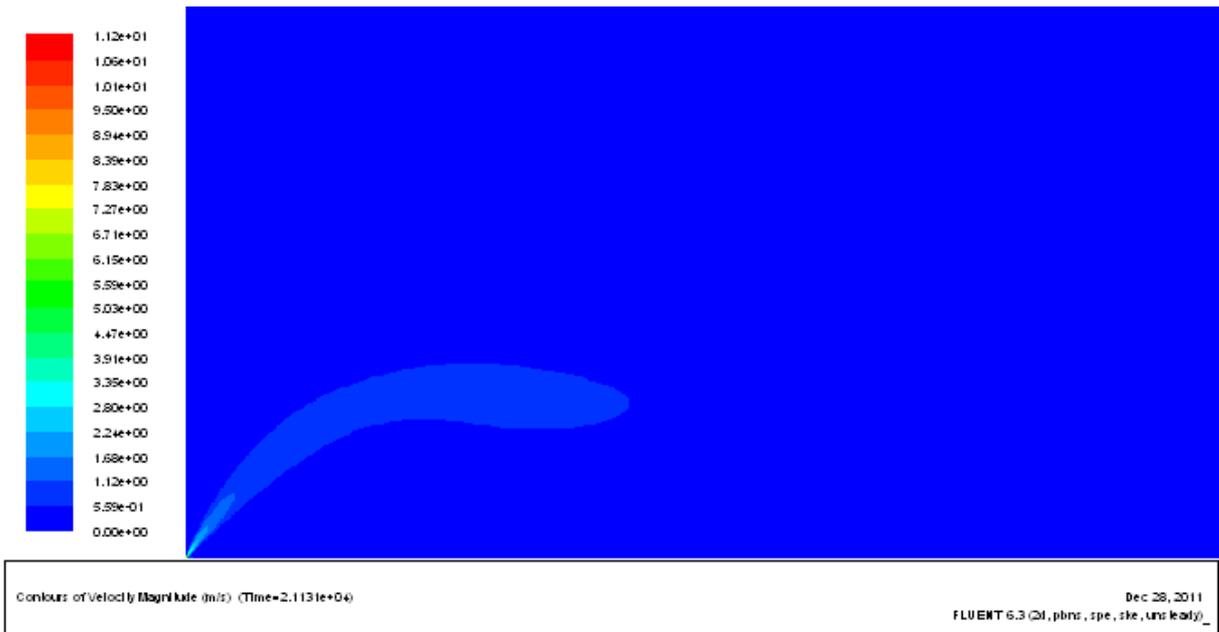


Figure IV.11: Champ dynamique de la vitesse de dioxyde de soufre pour une vitesse de vent potentiel $u_{\infty} = 8$ m/s [$V_{\text{sor}} = 10$ m/s, $T_{\text{sor}} = 375$ K, $X_{\text{sor}} = 0,15$].

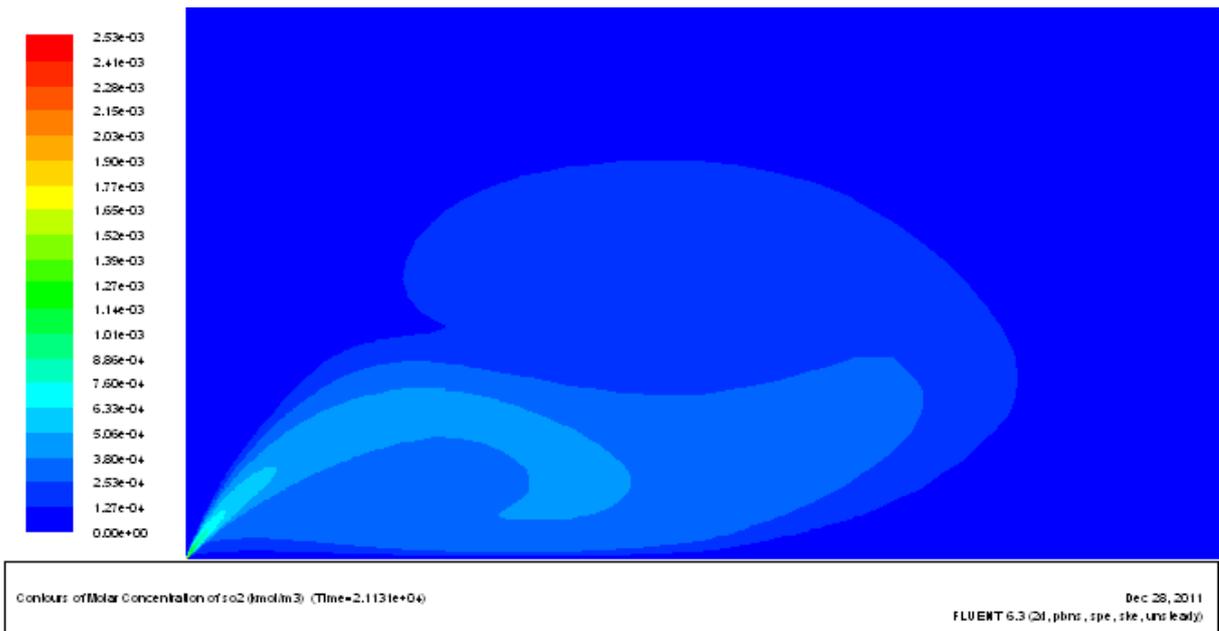


Figure IV.12: Champ dynamique de la concentration molaire de dioxyde de soufre pour une vitesse de vent potentiel $u_{\infty} = 8$ m/s [$V_{\text{sor}} = 10$ m/s, $T_{\text{sor}} = 375$ K, $X_{\text{sor}} = 0,15$].

On note un fléchissement du champ de vitesse juste à l’amont de l’éjection ce qui explique l’effet important des forces d’inertie liées à la vitesse du vent. Cette tendance se trouve accélérée au fur et à mesure que la particule s’éloigne de la sortie de la cheminée. A des distances lointaines, la force de gravitation prend le dessus et la particule subit une sédimentation ce qui corrobore les résultats de simulation présentés à travers la figure IV.12.

Par ailleurs, avec l'augmentation de la vitesse d'éjection on remarque la présence de bouffées de particules (pulsation de vitesse et de concentration) qui s'effilochent dès la pénétration dans une zone plus turbulente. Toutefois, le domaine (longueur) où la bouffée garde ses dimensions est inversement proportionnel à la vitesse turbulente du vent. En effet, l'intensité de la turbulence conditionne la durée de vie de la bouffée.

Sur la figure n° IV.12, on note un phénomène de sillage de particules dans la couche limite qui se manifeste par une inversion de leur vecteur vitesse ce qui conduit à la création locale des tourbillons.

- **Profils verticaux de (C/C_0) de particules de SO_2**

A travers les figures n° V .13, 14 et 15, on peut remarquer que la concentration relative (C/C_0) en dioxyde de soufre est très peu affectée avec les conditions d'éjection (V_{sor} , X_{sor} et T_{sor}) compte tenu de l'importance de la masse volumique relative du SO_2 par rapport à l'air, les particules ont tendance à subir un mot de sédimentation alors que la température d'éjection n'a pratiquement qu'une faible influence. Il est tout à fait évident que les conditions ambiantes contrôlent la température des particules pour des altitudes dépassant $z \geq 248$ m.

Dans ce domaine $0 \leq z \leq 248$ m on note un profile de température des particule qui va en décroissant jusqu'à ce que ces dernières aient la température ambiante.

En toute rigueur, les particules les plus chaudes suivent un parcours plus long, c'est à dire des hauteurs plus importantes telles que visualiser à travers la figure IV.15. Une conclusion similaire est obtenue quant à l'étude des profils de $C/C_0 = f_{v,x}(z)$, pour des vitesses de vent qui ne dépasseraient le seuil caractérisant la sédimentation des particules dans les espaces confinant le point d'éjection.

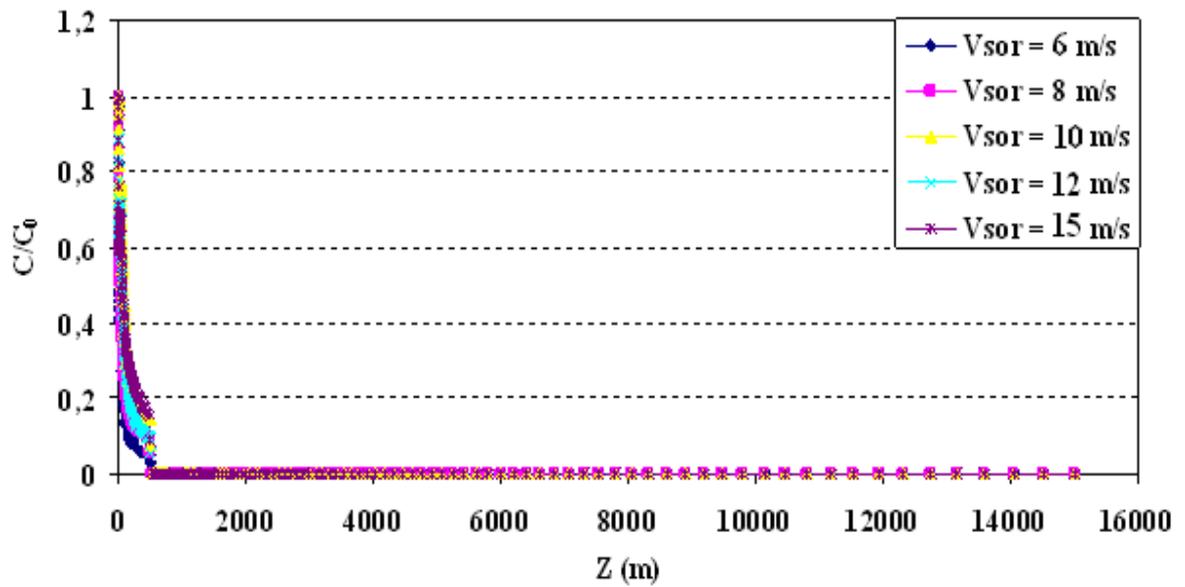


Figure IV.13: Profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes vitesses d'éjection [$u_\infty = 8 \text{ m/s}$, $T_{\text{sor}} = 375 \text{ K}$, $X_{\text{sor}} = 0,15$].

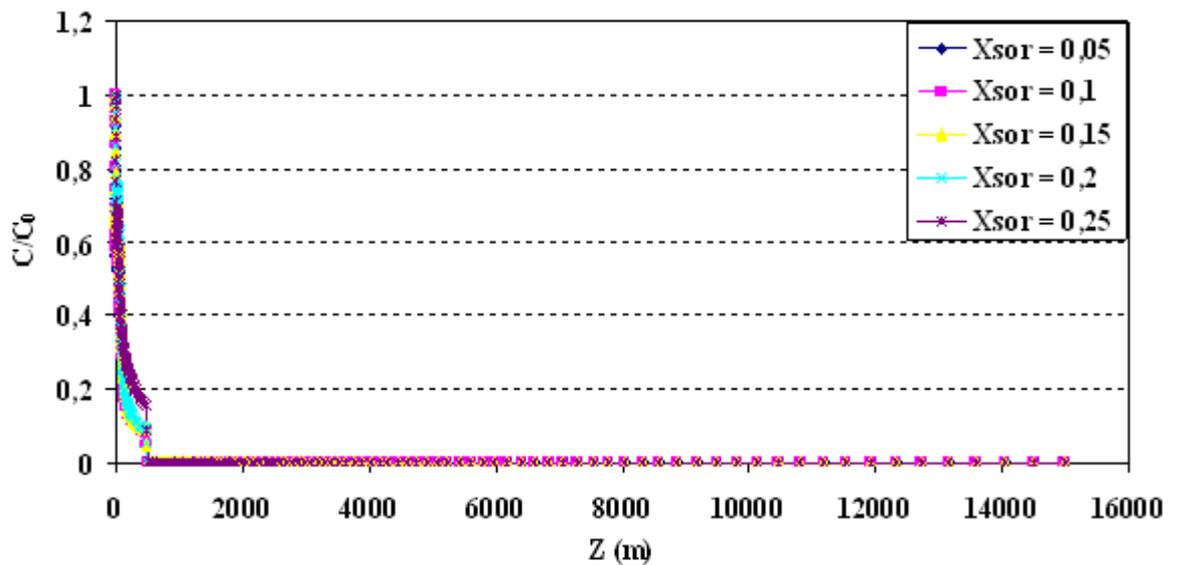


Figure IV.14: Profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes compositions à l'éjection [$u_\infty = 8 \text{ m/s}$, $T_{\text{sor}} = 375 \text{ K}$, $X_{\text{sor}} = 0,15$].

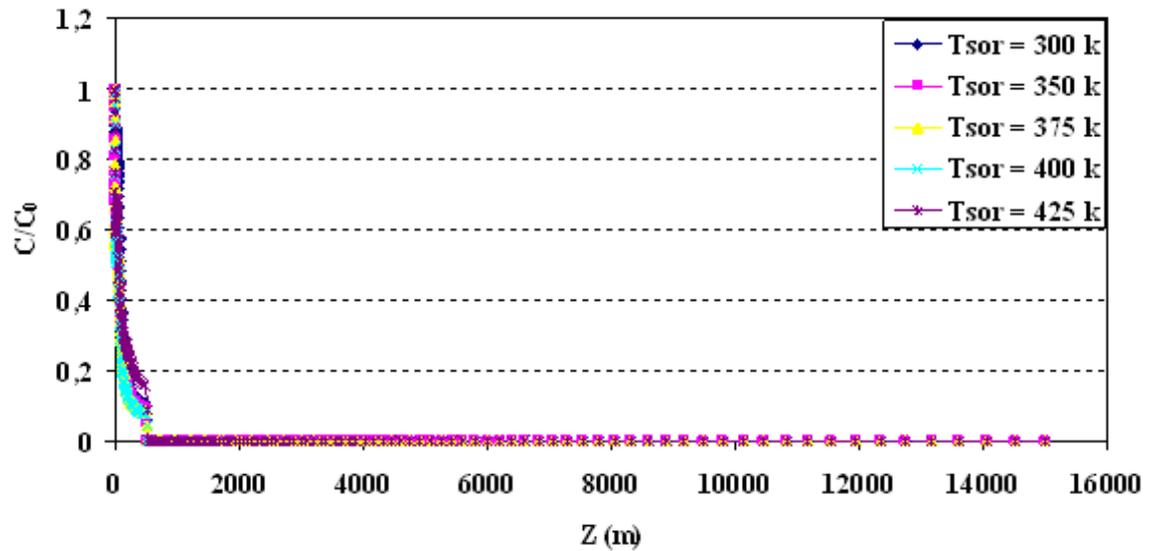


Figure IV.15: Profil de C/C_0 de SO_2 en fonction de l'altitude pour différentes températures d'éjection [$u_\infty = 8$ m/s, $V_{sor} = 15$ m/s, $X_{sor} = 0,15$].

- **Effet de la couche limite sur la dispersion des espèces**

La variation de la concentration relative en fonction de la position longitudinale est présentée à travers la figure n° IV.16.

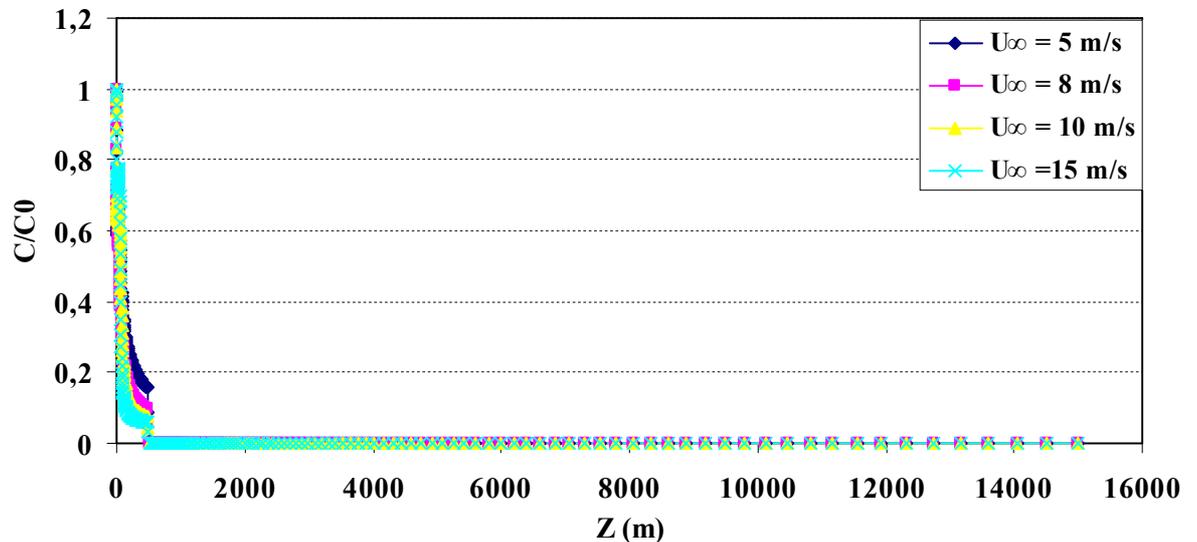
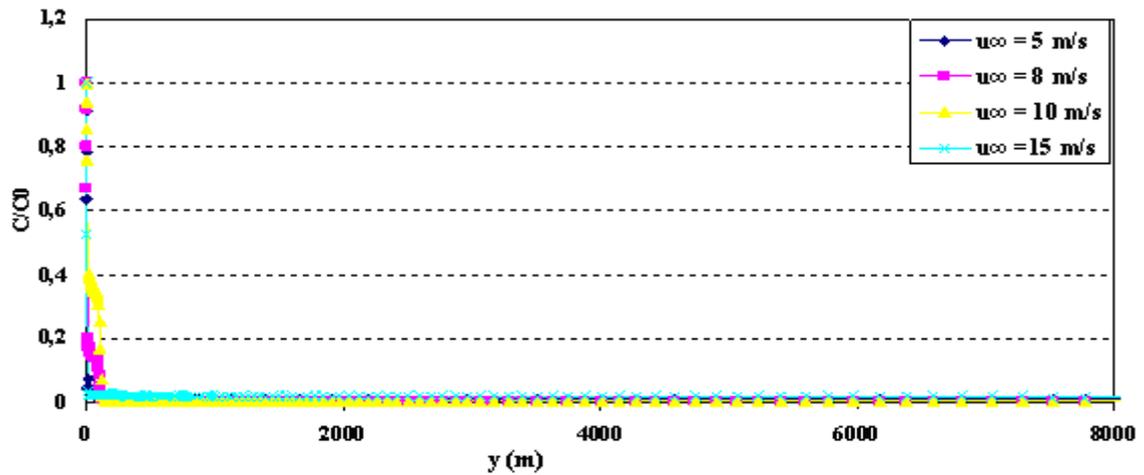


Figure IV.16: Profil vertical de C/C_0 de SO_2 pour différentes vitesses de vent potentiel [$V_{sor} = 10$ m/s, $T_{sor} = 375$ K, $X_{sor} = 0,15$].

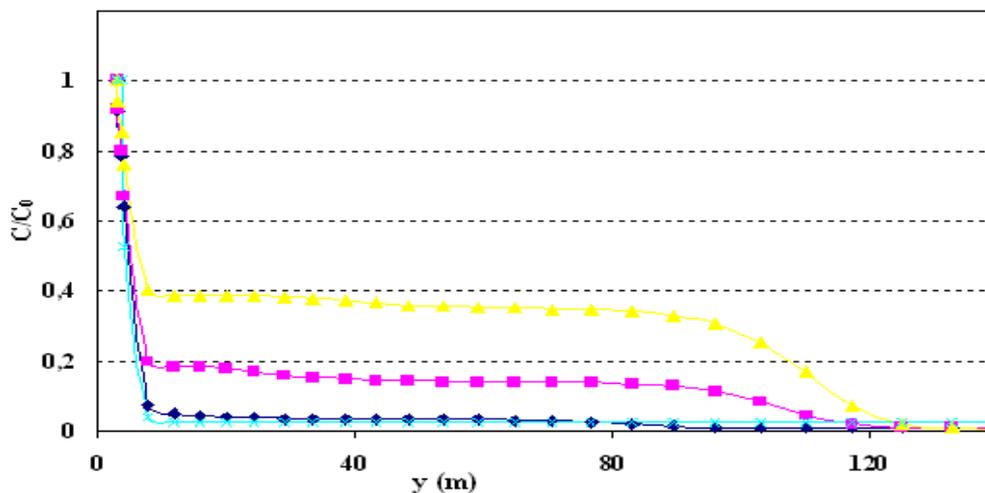
La vitesse de l'écoulement potentiel du vent est maintenue comme un paramètre. On note une cassure du profil à la limite supérieure de la couche limite cinématique alors qu'il subit une allure décroissante dans l'espace délimitant cette couche. Le module de la vitesse favorise la dispersion.

$$Pe = \frac{u_{\infty} \delta}{D_{T,j}}$$

Et l'effet de la diffusion reste très atténué. Cette interaction est mise en évidence par l'introduction du nombre de Peclet qui prend des valeurs croissantes (138×10^8) au fur et à mesure que la particule s'éloigne du sol. Un tel résultat montre l'intérêt de l'installation d'unités d'industries chimiques émettrice de polluantes dans des zones assez ventilées si ces dernières sont habitées densément et aussi bien pour l'agriculture.



(a)



(b)

Figure IV.17: Profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes vitesses de vent potentiel [$V_{\text{sor}} = 10 \text{ m/s}$, $T_{\text{sor}} = 375 \text{ K}$, $X_{\text{sor}} = 0,15$].

Au-delà de la couche limite, l'écoulement potentiel est le seul paramètre responsable de la dispersion. Toutefois, dans l'intervalle de vitesse considéré, on note que les résultats de

profils de concentration sont pratiquement nuls et superposés pour $z > \delta$ (δ est l'épaisseur de la couche limite).

Pour ce qui rapporte à l'influence de la vitesse du vent sur la dispersion horizontal des espèces, on note que les faibles vitesses conditionnent une faible dispersion et par conséquent une précipitation sur les espaces limitrophes du point d'éjection. Par conséquent, les autres particules migrent difficilement sur des distances lointaines ce qui conforme aux résultats présentés sur la figure IV.17 où on note des concentrations quasi nulles pour $y \geq 200$ m. contenté de faire apparaître cette influence à travers le second graphe (b) qui la résume sur un intervalle de $y \geq 125$ m. Dans cet intervalle, le problème de toxicité des espèces qui seraient inhalées se pose avec une grande acuité pour des vitesses de vent inférieurs à 8 m/s.

Une analyse locale de la concentration en espèces sur $0 \leq y \leq 200$ m, mettant en jeu une fonction cumulative des espèces éjectées, montre que

$$C = \sum C_i(0 \leq y_i \leq 200) \cong 0,9$$

est quasiment égale à 90% de la quantité propre éjectée. Une telle affirmation conduit logiquement à confirmer que seule une partie infime pouvant migrer à de longues distances laquelle est estimée grossièrement à 10% dans les meilleures conditions.

• Profils horizontaux de C/C_0 de particules de SO_2

Compte tenu de la sensibilité de la complexité du modèle mathématique retenu dans notre étude, on note qu'il est très sensible à la fluctuation de paramètres extérieurs liés aux conditions régnant le voisinage du sol.

1^{er} cas : Absence de circulation de vent

Les figures n° V.18, 19 et 20 représentent l'effet des conditions d'éjections sur les profils d'évolution selon la direction horizontale 'y' en absence de vent :

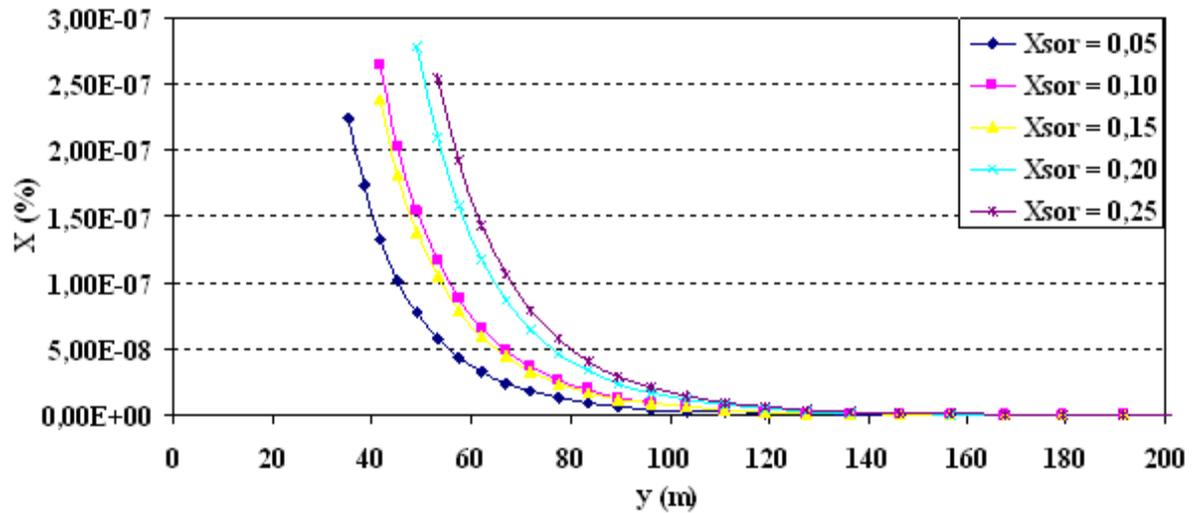


Figure IV.18: Profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes compositions à l'éjection [$u_\infty = 0$ m/s, $V_{sor} = 15$ m/s, $T_{sor} = 375$ K].

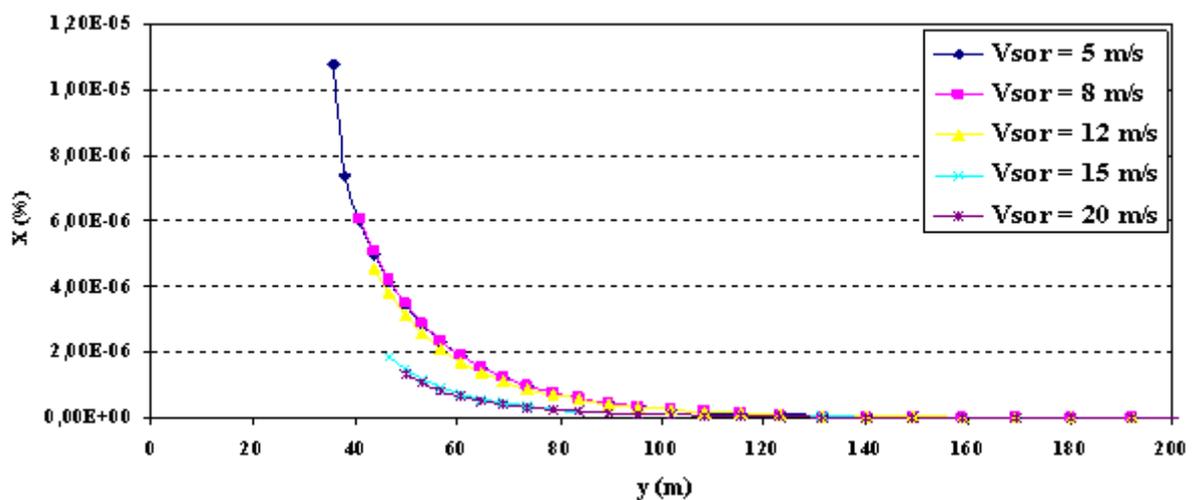


Figure IV.19: Profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes vitesses d'éjection [$u_\infty = 0$ m/s, $T_{sor} = 375$ K, $X_{sor} = 0,15$].

L'analyse des profils longitudinaux de concentration en fonction de la concentration, la vitesse et la température d'éjection (pour $u_{\infty} = 0$ m/s) montre que si certaines particules poursuivent leur ascensions vers les couches stratosphériques supérieures, la majorité des particules, estimée à 70%, arrive à vaincre l'effet de la force de gravitation pour chuter à des distances qui dépasseraient les 37 m. C'est dans cet intervalle qui se concentrent les particules pour engendrer des conditions de pollution qui s'atténuent au fur et à mesure qu'on s'éloigne de la distance butoir $L_c = 37$ m.

En termes de préservation de la santé humaine, si de telles conditions extérieures règnent dans le milieu environnant le point d'éjection, on suggère qu'il soit refusé toute implantation d'habitations dans son périphérique.

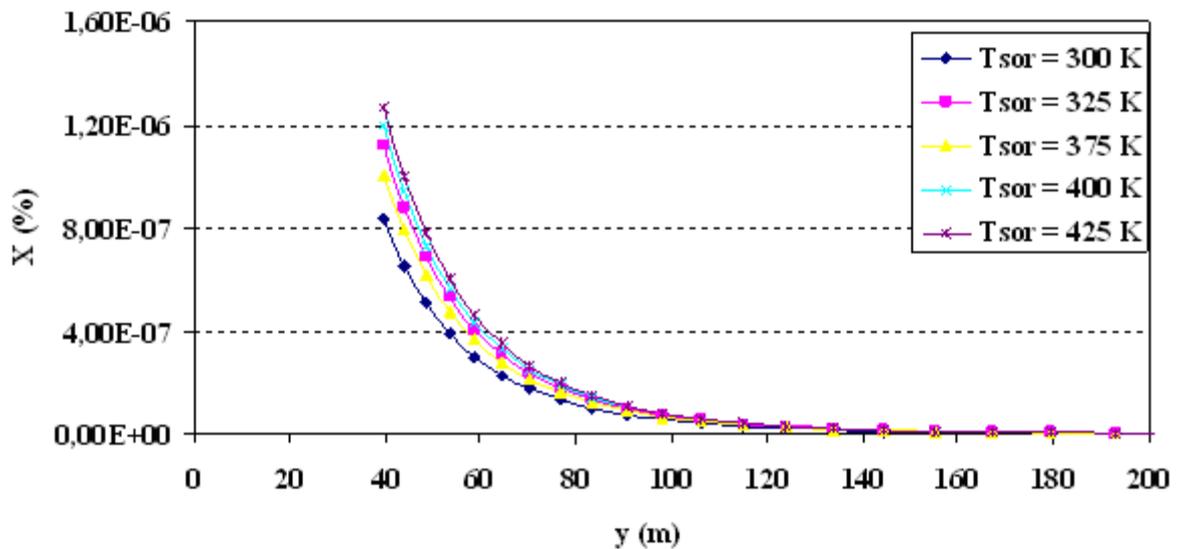


Figure IV.20: Profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes températures d'éjection
 $[u_{\infty} = 0$ m/s, $V_{sor} = 15$ m/s, $X_{sor} = 0,15]$.

2^{ième} cas : Ejection en présence du vent

Les profils horizontaux des fractions massiques présentent dans les configurations (21, 22 et 23 courbes), montrent l'influence des conditions d'éjections en présence de vent $u_\infty = 8$ m/s (T_{sor} , V_{sor} , et X_{sor}) respectivement.

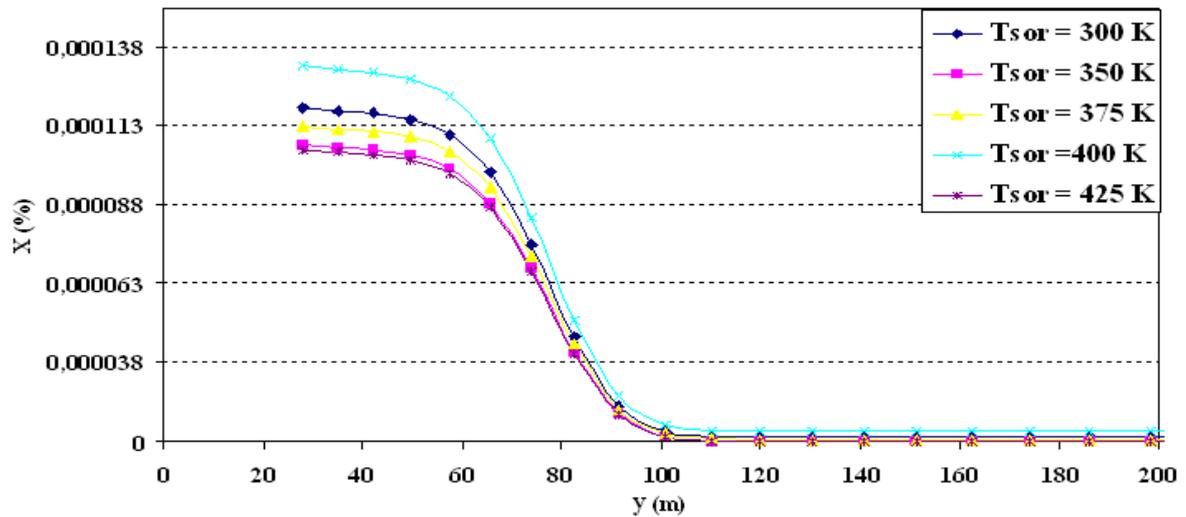


Figure IV.21: Profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes températures d'éjection [$u_\infty = 8$ m/s, $V_{sor}=15$ m/s, $X_{sor}=0,15$].

L'étude de la variation de $C/C_0 = f_T(y)$, montre que les températures élevées ne favorisent pas la migration des particules à des distances importantes, ce qui est en bon accord avec le bilan de quantité de mouvement sur la particule. En effet, suivant la relation de Boussinesq, on a :

$$\rho = \rho_0 \times (1 - \beta (T - T_0)) \tag{IV.1}$$

β : est le coefficient de dilatation thermique.

La masse volumique varie dans le sens opposé de la température. Il en découle que l'augmentation de la température conduit à la décroissance de ρ ce qui confère à la particule la possibilité de migrer plus loin pour ce retrouver sédimentée.

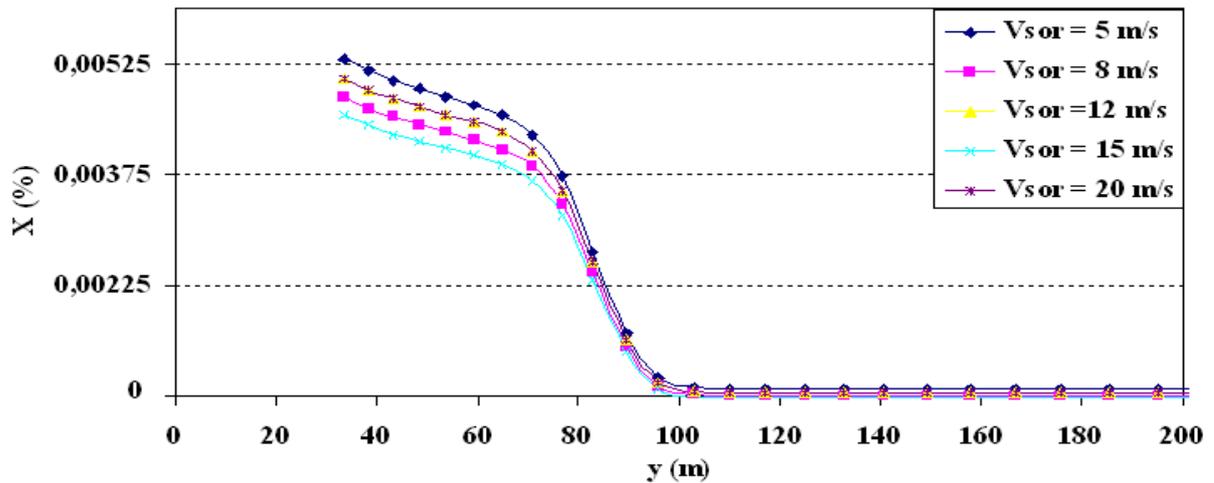


Figure V.22: Profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes vitesses d'éjection [$u_{\infty}= 8 \text{ m/s}$, $T_{\text{sor}}=375 \text{ K}$, $X_{\text{sor}}=0,15$].

Toutefois, une inversion dans l'ordre de chute de particules est à signaler. Il y a lieu de remarquer que l'effet advectif du vent sur les particules froides est atténué. En conséquences, ces dernières se trouvent entraînées à des distances plus longues pour affecter de façon néfaste l'environnement par la création d'un milieu assez toxique pour la vie humaine.

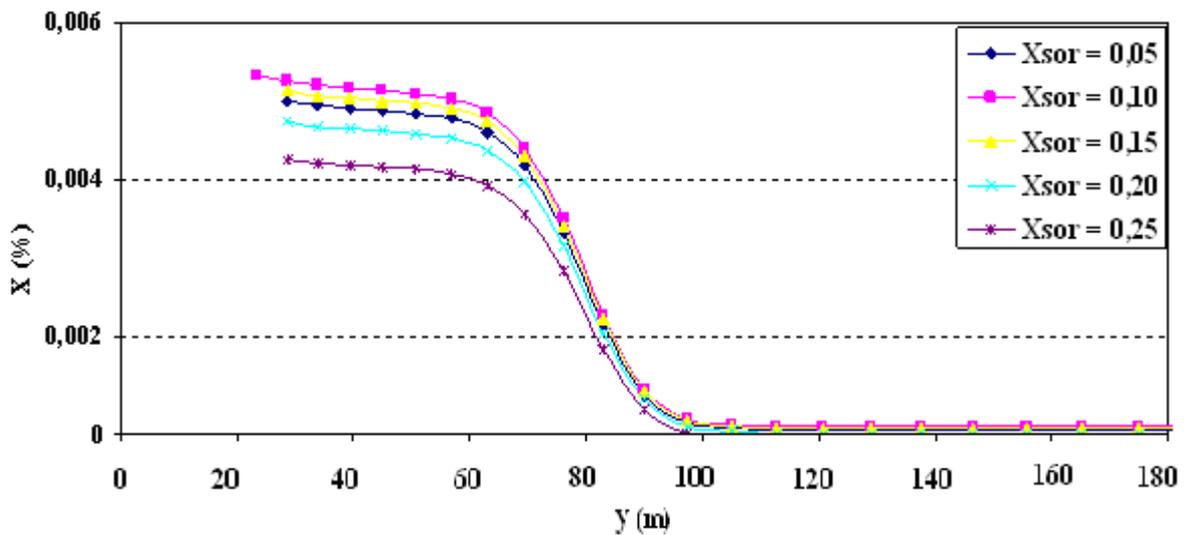


Figure IV.23: Profil horizontal de C/C_0 de SO_2 pour différentes compositions à l'éjection [$u_{\infty}= 8 \text{ m/s}$, $V_{\text{sor}}=15 \text{ m/s}$, $T_{\text{sor}}=375 \text{ K}$].

L'analyse de la température de la couche stratosphérique montre qu'elle atteint sa valeur maximale dans le voisinage immédiat du sol. Egalement la vitesse du vent tend vers sa valeur nulle conformément à son profil dans la couche limite. En tenant compte de ces

deux remarques, on note que 90% des particules sont sédimentées dans les premiers centaines mètres. Où l'effet de la température sur la masse volumique est prépondérant. Il ressort que le profil de température (figure IV.24) est responsable de cette traînée. Au-delà, on remarque que la température des particules épouse la température ambiante qu'elles chutent à flot dans un espace qui ne saurait dépasser une quarantaine de mètres et ce à partir de $y=80$ m. C'est la raison que fait la concentration est quasi nulle pour tout $y \geq 120$ m a lequel est en évidence.

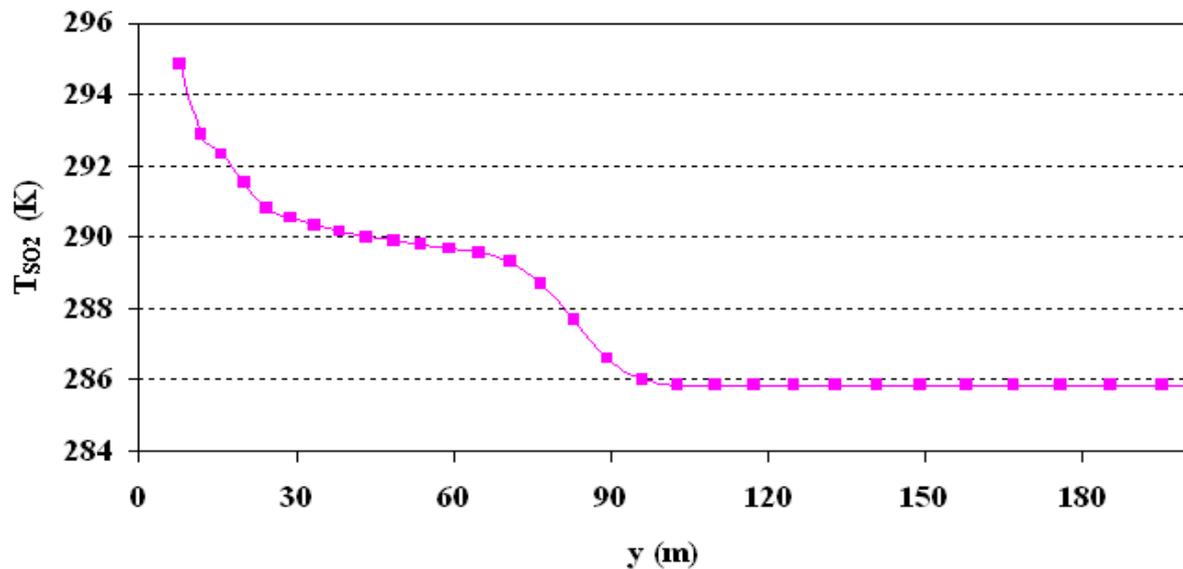


Figure IV.24: Profil horizontal de la température des particules de SO₂.

$$[u_{\infty}=8 \text{ m/s}, V_{\text{sor}}=15 \text{ m/s}, T_{\text{sor}}=375 \text{ K}, T_{\text{amb}}=285 \text{ K}].$$

Conclusion

Dans ce chapitre, l'analyse des résultats des simulations montre que l'effet des conditions d'éjections est une fonction faible sur la propagation des particules de SO₂ dans l'atmosphère en absence de toute circulation de vent. En effet, l'ascension des particules de SO₂ présente un écoulement symétrique et la variation de la concentration est très importante à la sortie de la cheminée jusqu'à une hauteur $z \leq 1000$ m où l'effet de la gravitation y est très peu perceptible,

Donc, tout problème de diffusion impose le concept de couche limite qui demeure délimité par le milieu entourant la source de diffusion dont l'épaisseur est dépendante du régime d'advection occasionné par l'écoulement extérieur. Par ailleurs, au delà de cette épaisseur, le profil tend vers une allure linéaire.

La traînée de profil de concentration est dépendante de la vitesse initiale de l'éjection et tout naturellement de la masse volumique relative du dioxyde de soufre.

Dans les champs de vitesse et de concentration des espèces de SO₂, On note un fléchissement du champ de vitesse juste à l'amont de l'éjection ce qui explique l'effet important des forces d'inertie liées à la vitesse du vent ($u_{\infty} = 8$ m/s). On remarque la présence de bouffées de particules à l'origine avec l'augmentation de la vitesse d'éjection et un phénomène de sillage de particules dans la couche limite qui se manifeste par une inversion de leur vecteur vitesse ce qui conduit à la création locale des tourbillons.

Nous avons constaté que 30% des particules éjectées chaudes pourront migrer à de longues distances dans les meilleures conditions (70% des particules sont sédimentées dans un rayon de cent mètres autour de la cheminée) en absence de la circulation de vent et 90% en présence de vent où l'effet de la température sur la masse volumique est prépondérant.

*Conclusion et
Perspectives*

V. Conclusion général et perspectives

La modélisation des effets aérodynamiques a été réalisée par le code commercial Fluent. En se basant sur la méthode des volumes finis pour discrétiser les équations mathématiques, nous avons pu déterminer les champs des vitesses et des concentrations ainsi que les variations vertical et horizontal de ces dernières.

Cette étude entreprise a permis de dégager un certain nombre de résultats susceptibles de contribuer d'une part, à la variation de la vitesse et la concentration de dioxyde de soufre dans l'atmosphère en absence de vent et l'analyse de l'effet de circulation du vent par rapport aux conditions d'éjections (X_{sor} , T_{sor} et V_{sor}) dans un milieu turbulent.

L'analyse des résultats des simulations montre que l'effet des conditions d'éjections est une fonction faible sur la propagation des particules de SO_2 dans l'atmosphère dans les deux cas (absence et présence de circulation de vent). En effet, la pollution est très importante à la sortie de la cheminée jusqu'à une hauteur $z \leq 1000$ m où l'effet de la gravitation y est très peu perceptible,

En toute rigueur, tout problème de diffusion impose le concept de couche limite qui demeure délimité par le milieu entourant la source de diffusion dont l'épaisseur est dépendante du régime d'advection occasionné par l'écoulement extérieur ce qui impose le piégeage des polluants dans la couche limite atmosphérique.

Dans les champs de vitesse et de concentration des espèces de SO_2 , on note la présence de bouffées de particules à l'origine avec l'augmentation de la vitesse d'éjection et un phénomène de sillage de particules dans la couche limite qui se manifeste par une inversion de leur vecteur vitesse ce qui conduit à la création locale des tourbillons.

Nous avons constaté que 30% des particules éjectées chaudes pourront migrer à de longues distances dans les meilleures conditions (70% des particules sont sédimentées dans un rayon de cent mètres autour de la cheminée) en absence de la circulation de vent et 90% en présence de vent où l'effet de la température sur la masse volumique est prépondérant. On note que la pollution en SO_2 est plus intense pour le cas de présence de vent et faible pour le cas d'absence de vent.

Comme perspectives, nous allons étendre notre modèle pour le cas des écoulements des polluants réactifs, tridimensionnels en prenant en considération les facteurs topographiques.

Annexe A

Références bibliographiques

[1] Mokhtar Didouche Abdelkader., 2008 « Prédiction des émissions polluantes issues d'un four industriel : Cas de la cimenterie de Chlef » Mémoire de Magister à l'U.H.B.C.

[2] Philippe OLIVIER, André WROBLEWSKI., 2001 « application d'un modèle de dispersion de polluants atmosphériques en zone rurale influencée » rapport Ecole des Mines de Douai Décembre.

[3] Mehrez SAMAALI « évaluation d'un modèle de couche limite atmosphérique 3d dans un cas homogène : application à une parcelle agricole de soja » Thèse de doctorat en mécanique énergétique, Ecole polytechnique universitaire de Marseille. France 2002

[4] J.C. LABORDE « le comportement des aérosols : de l'installation à l'environnement gif-sur-yvette Cedex » Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire. Service d'Études et de Recherches en Aérodispersion des polluants et en Confinement B.P. 68 – 91192 GIF-SUR-YVETTE Cedex France.

[5] Viatte Camille 2007 « étude de l'impact radiatif des aérosols dans la couche limite planétaire » rapport de stage université de Versailles Saint-Quentin–En Yvelines France.

[6] Organisation mondiale de la Santé 2008 « Maladies respiratoires aiguës à tendance épidémique ou pandémique » Centers for Disease Control and Prevention des Etats-Unis d'Amérique

[7] M. Pierre, R. Texier-Picard March 2000 « Existence de solutions pour un modèle de dispersion de polluants dans l'atmosphère » SIAM Rev. 42 (2000) 93–106 (electronic).

[8] Karim MOUAICI. 2008 « Etude de quelques sources de polluants atmosphériques dans la région de Bejaia université de Bejaia » Mémoire de master en Physique, l'université de Bejaia.

[9] Y. MOUILLEAU, S. DUPLANTIER, J.M. LACOME, E. BERNUCHON 2002 « Dispersion atmosphérique (Mécanismes et outils de calcul) » Ministère de l'Ecologie et du Développement Durable Direction des Risques Accidentels.

Références bibliographiques

[10] N. Diaf, M Bouchaour, L. Merad et B. Benyoucef 2003 « Paramètres Influençant la Dispersion des Polluants Gazeux » Laboratoire De Matériaux & Energies Renouvelables, Facultés Des Sciences, Université De Tlemcen Rev. Energ. Ren.: ICPWE (2003)139-142.

[11] Angélique GUILLOTEAU 2007 « Etude multiphasique de polluants organiques aromatiques : répartition des Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques dans les suies et formation d'aérosols dans l'ozonolyse du catéchol ». Thèse de doctorat en Chimie de la Pollution Atmosphérique et Physique de l'Environnement à l'université d'Orléans de France.

[12] Jean-Philippe Bolduc et Mohamed Lateb « dispersion des polluants atmosphériques » France 2008

[13] Vivien Mallet 2010 « Introduction aux modèles de chimie-transport pour la qualité de l'air » *Lecture notes. Master 2 AQA-SGE, 2007-2008* France.

[14] Sabri Hamouda, Abidi Walid, Maamri hassen « étude d'impact environnementale sur la pollution atmosphérique unité de nitrate d'ammonium d'el hadjar, annaba » PFE à l'université d'Annaba.

[15] Stephanie Lacour, 2004 « pollution atmosphérique » Ecole Nationale des Ponts et Chaussées. Centre d'Enseignement et de Recherche sur l'Environnement Atmosphérique. 6-8 Avenue Blaise Pascal, Cité Descartes, 77455 Champs sur Marne.

[16] Amandine Chevalier, 2007 « développement de service d'observations de PAES : pollution atmosphérique à l'échelle synoptique bilan de l'ozone dans la troposphère libre » thèse de doctorat à l'université Paul Sabatier - Toulouse III --HAL - CCSD--2007-12-04 France.

[17] **Site web** [www .Le trou dans la couche d'ozone figure.fr](http://www.Le.trou.dans.la.couche.d'ozone.figure.fr)

Références bibliographiques

[18] Bruno Sportisse, 2007 « Modélisation et simulation de la pollution atmosphérique » Habilitation à Diriger les Recherches à l'université de Pierre et Marie Curie.

[19] Emmanuel Demaël, 2007 « Modélisation de la dispersion atmosphérique en milieu complexe et incertitudes associées » PhD Thesis, 273 pp.

[20] MATHIEU 2006 GAGNÉ 2006 « étude de sensibilité du climat de la baie d'Hudson à l'effet indirect de la rétroaction déshydratation -effet de serre durant la période hivernale » mémoire présenté comme exigence partielle de la maîtrise en science de l'atmosphère à l'université du Québec à Montréal, France

[21] Ung, Anthony, 2005 « un cartographie de la pollution atmosphérique en milieu urbain a l'aide de données multisources » thèse de doctorale: ED 129 l'université d'ÎLE de France.

[22] Edouard Debry, 2005 « Modélisation et simulation numérique de la dynamique des aérosols atmosphériques » thèse de doctorat, Paristech ENPC.

[23] KADEM Dhaou-El-Djabine 2005 « évaluation et comportement des métaux lourds (cd – cr – cu – ni – pb – zn et mn) dans les sols à vocation agricole et à végétation naturelle soumis à une pollution atmosphérique (el-hadjar – annaba – est algérien). influence de la végétation sur la dynamique de ces métaux. » Thèse de doctorat en écologie – Pédologie de l'Université de Constantine.

[24] J Sampic 2005 « Evolution de la qualité de l'air en France » Lyon, CERTU, 2005.- 50 p. France.

[25] Hassane Graïne, 2009 « Prédiction de la concentration d'un polluant dans l'air à proximité d'une route » Colloque international Environnement et transports dans des contextes différents Ghardaïa. Actes, ENP ed., Alger, p. 163-167

[26] Elichegaray, S Bouallalah, A Maitre, M Ba « état et évolution de la pollution atmosphérique » Article ADEME Département Surveillance de la Qualité de l'Air, RMR-02-2009-26-2-0761-8425-101019-200900750. Paris, France 2009.

Références bibliographiques

[27] Masclet P, Hoyau V, Suarez J 1998 « l'aérosol atmosphérique. Analyse de la composante organique » *Analisis Magazine Environment*, 35, 2111-2121.

[28] Martin Ménégos. 2009 « Modélisation globale des interactions atmosphère-aérosols » Centre National de Recherches Météorologiques (CNRM-GAME), Groupe de Météorologie de Grande Échelle et Climat (GMGEC) l'université de Toulouse.

[29] Gilles AYMOZ « étude de la fraction carbonée de l'aérosol atmosphérique à Chamonix et St Jean de Maurienne : évolutions saisonnières, sources et caractéristiques chimiques » Thèse de doctorat de l'Université Joseph Fourier (Grenoble 1), France 2005

[30] Pierre MASCLET « pollution atmosphérique : causes, conséquences, solutions, perspectives » Ellipses édition Marketing S.A 2005.

[31] Dockery et al « L'incinération en question : les particules fines et ultrafines atmosphériques et leurs impacts sur la santé » *Am J Respir Crit Care Med*.1996; 153(1):3-50. France 1996.

[32] **Site web** [www .Effets des polluants sur la santé humaine.be](http://www.Effets des polluants sur la santé humaine.be)

[33] Nelson IBASETA « Étude expérimentale et modélisation de l'émission d'aérosols ultrafins lors du déversement de poudres nanostructurées » thèse de doctorat de INP Toulouse France 2007.

[34] Frédéric Ledoux, Dominique Courcot, Emile Puskarica, Antoine Aboukaisb, Hélène Laversinb, Lucie Courcot-Derama « Analyses physico-chimiques de particules en suspension dans l'air. Application à l'identification de sources » Laboratoire Interdisciplinaire en Sciences de l'Environnement et Laboratoire de Catalyse et Environnement, EA 2598 université de Littoral France.

Références bibliographiques

[35] Bruno Sportisse 2007 « Modélisation et simulation de la pollution atmosphérique » Habilitation à Diriger les Recherches à l'université de Pierre et Marie Curie.

[36] Marilynne TOMBETTE « Modélisation des aérosols et de leurs propriétés optiques sur l'Europe et l'Île de France : validation, sensibilité et assimilation de données » Thèse de doctorat de l'École nationale des ponts et chaussées en sciences et techniques de l'environnement France 2007.

[37] Site web www.environnement.wallonie.be

[38] Hubert Van den Bergh « acidification de l'atmosphère: phénoménologie, causalités et mesures » ENAC / ISTE / LPAS.

[39] Hélène CASTEBRUNET 2007 « soufre atmosphérique et changements climatiques : une étude de modélisation aux moyennes et hautes latitudes sud » laboratoire de glaciologie et géophysique de l'environnement UMR 5183 Centre National de la Recherche Scientifique Université Joseph Fourier 38402 Saint Martin d'Hères Cedex France.

[40] AREELIS Technologies « La pollution atmosphérique » rapport de Technopole du Madrillet - Avenue de l'Université - BP 12 - 76801 Saint Etienne du Rouvray cedex.

[41] Cours de la Ministère de l'Ecologie et du Développement Durable Direction des Risques Accidentels « Dispersion atmosphérique (Mécanismes et outils de calcul) ». France 2002

[42] P-Y Lagrée cours ENSTA, « transferts turbulents » l'université de Californie du sud (USC).

[43] Bruno Sportisse cours de l'École Nationale des Ponts et Chaussées « Modélisation de la pollution atmosphérique » Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique, Laboratoire Commun EDF R&D-ENPC.

Références bibliographiques

[44] Nishant PANDYA 2009 «: Analyse de sensibilité paramétrique d'un outil de modélisation des conséquences de scénarios d'accidents. Application à la dispersion atmosphérique de rejets avec le logiciel Phast. » Thèse de doctorat en Génie des Procédés et de l'Environnement de l'université de Toulouse.

[45] Fluent V6.3, 2006 the software Package, Fluent Inc, New Hampshire, USA.

[46] MAHJOUR SAID N; MHIRI H; EL GOLLI S; LE PALE G « Influence de l'Orientation de la vitesse du vent sur la Dispersion d'un Polluant autour d'un Bâtiment », ELEC 20. Power fits and their applications. Oxner Edwin S. 21. ELEC 21 ALGERIE (1998).

[47] Olivier Boucher « L'évolution du rôle des aérosols dans la qualité de l'air et le climat » Met Office Hadley Centre *GIS Climat, 2008*

[48] Denis Quélo « Simulation numérique et assimilation de données variationnelles pour la dispersion atmosphérique de polluants » Thèse de doctorat en Mathématiques et Informatique à l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées France 2004.

[49] Ines BHOURI BAOUAB, Nejla MAHJOUR SAID, Hatem MHIRI « influence de la présence d'un coude sur la dispersion des polluants éjectés par les cheminées » Ecole Nationale d'ingénieurs de Monastir, Tunisie.

[50] Ted Stathopoulos, Bodhisatta Hajra, Ali Bahloul «Évaluation analytique de la dispersion des émissions de cheminées de toit sur les bâtiments » Rapport R-643, Montréal, IRSST, 2010 février 2010, France.

[51] Lemmon E.W., McLinden M.O., Friend D.G., Thermophysical properties of fluid systems NIST chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899 (<http://webbook.nist.gov>), 2005

Références bibliographiques

[52] Kabar Seloua « étude numérique de l'effet du type de carburant sur les émissions polluantes dans un moteur » thèse de magister en génie mécanique à l'université de Constantine 2006.

[53] Stéphane Glockner « contribution à la modélisation de la pollution atmosphérique dans les villes » thèse de doctorat en mécanique à l'université de Bordeaux I France 2000.

[54] Launder, B. E., Spalding, D. B., 1972 Lectures in Mathematical Models of Turbulence. Academic Press, London, England.

[55] Gambit : A CFD Preprocessor, Gambit 2.0 User's guide, Vol.2, Canterra , Lebanon , New Hampshire, USA, 2002.

Bibliographie

Annexe A

Annexe A

Tableau 2 : Évolution des émissions de quelques polluants de l'air en France (KT/an) et plafonds d'émission 2010 fixés par la directive européenne NEC 2001/81. [29]

	1980	2003	Objectifs 2010
SO ₂	~3 200	~492	375
NOx	~ 1 980	~ 1 220	810
COV	~ 3 000	~ 1 400	1 050
NH ₃	840	~753	780

L'oxyde de soufre

Directive 1999/30/CE du 22 avril 1999 et directive 2000/69/CE du 16 novembre 2000 transposées par le décret n°2002-213 du 15 février 2002 modifiant le décret n°98-360 du 6 mai 1998 : [29]

Période de référence	Objectif de qualité	Durée d'application
Année civile (1 ^{er} janvier au 31 décembre)	Moyenne annuelle : 50 µg/m ³	-

Période de référence	Valeur limite pour la protection de la santé humaine	Durée d'application
Année civile (1 ^{er} janvier au 31 décembre)	Centile 99,2 : (à partir des valeurs moyennes journalières) 125 µg/m ³	-
Année civile (1 ^{er} janvier au 31 décembre)	Centile 99,7 : (à partir des valeurs moyennes horaires) 470 µg/m ³ 440 µg/m ³ 410 µg/m ³ 380 µg/m ³ 350 µg/m ³	année 2001 année 2002 année 2003 année 2004 à partir du 01/01/2005

Annexe A

Période de référence	Valeur limite pour la protection des écosystèmes	Durée d'application
Année civile (1 ^{er} janvier au 31 décembre)	Moyenne annuelle : 20 µg/m ³	-
Hiver (1 ^{er} octobre au 31 mars)	Moyenne sur la période : 20 µg/m ³	-

Période de référence	Seuils d'alerte pour l'anhydride sulfureux
1 heure	Seuil de recommandation et d'information : 300 µg/m ³ (moyenne horaire)
1 heure	Seuil d'alerte dépassé pendant 3 heures consécutives : 500 µg/m ³ (moyenne horaire)

Les particules en suspension (PM10)

Directive 1999/30/CE du 22 avril 1999 et directive 2000/69/CE du 16 novembre 2000 transposées par le décret n°2002-213 du 15 février 2002 modifiant le décret n°98-360 du 6 mai 1998 : [29]

Période de référence	Objectif de qualité	Durée d'application
Année civile (1 ^{er} janvier au 31 décembre)	Moyenne annuelle : 30 µg/m ³	-

Période de référence	Valeur limite pour la protection de la santé humaine	Durée d'application
Année civile (1 ^{er} janvier au 31 décembre)	Centile 90,4 : (à partir des valeurs moyennes journalières) 70 µg/m ³ 65 µg/m ³ 60 µg/m ³ 55 µg/m ³ 50 µg/m ³	année 2001 année 2002 année 2003 année 2004 à partir du 01/01/2005
Année civile (1 ^{er} janvier au 31 décembre)	Moyenne annuelle : 46 µg/m ³ 44 µg/m ³ 43 µg/m ³ 41 µg/m ³ 40 µg/m ³	année 2001 année 2002 année 2003 année 2004 à partir du 01/01/2005

Annexe A

Polluants classiques:

	Unité	Echelle de temps					
		10-15 min	30 min	1 heure	8 heures	24 heures	Année
Dioxyde de soufre	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	500				125	50
Particules	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	500		350		125	50
Dioxyde d'azote	$\mu\text{g}/\text{m}^3$			200			40
Monoxyde de carbone	mg/m^3	100	60	30	10		
Ozone	$\mu\text{g}/\text{m}^3$				120		

Polluants organiques :

	Unité	Echelle de temps		
		30 min	24 heures	1 semaine
Dichlorométhane	mg/m^3		3	
Formaldéhyde	mg/m^3	0,1		
Styrène	mg/m^3			0,26
Tétrachloroéthylène	mg/m^3		0,25	
Toluène	mg/m^3			0,26

Polluants inorganiques :

	Echelle de temps	
	Unité	Année
Plomb	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	0,5
Cadmium	ng/m^3	5
Manganèse	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	0,15
Mercuré	$\mu\text{g}/\text{m}^3$	1

Utilisation sommaire de FLUENT

Préliminaire :

Choisir 2D.

→Run

Charger :

Charger le fichier de maillage :

→file

→read

Annexe A

→case

sélectionner le fichier de maillage.

Vérifier le maillage :

→grid

→check

Définition du modèle :

Choix du modèle physique :

→define

→models

→solver

rentrer les caractéristiques générales : 2D/3D, stationnaire/instationnaire.

pour instationnaire, choisir un schéma implicite du second ordre.

→OK

→define

→models

→viscous

rentrer le type d'écoulement : laminaire/turbulent (on prendra k-epsilon qui utilise 2 équations pour des résultats corrects et pas trop long).

→OK

Choix des caractéristiques du fluide :

→Define

→Materials

on peut changer la viscosité et la densité du fluide.

« database » permet de choisir un autre type de fluide que celui par défaut.

→Close

Choix des conditions limites :

→define

→boundary conditions

On peut vérifier le type dans la fenêtre graphique en cliquant avec le bouton droit de la souris sur le segment désiré.

→Close

Choix des modèles de discrétisation :

→Solve

Annexe A

→Controls

→Solution

Choisir les modèles pour les différentes équations.

Choix des caractéristiques temporelles (en instationnaire) :

→Solve

→Iterate

Choisir le pas de temps, le nombre de pas et le maximum d'itération pour un même pas.

Contrôle de la convergence :

Afficher les résidus :

→solve

→monitors

→residual

→print

On peut donner de nouveaux critères pour les résidus.

→OK

Sauvegardes :

→file

→write

→case & data

Choisir le dossier de destination.

Résolution :

Initialiser :

→Solve

→Initialize

→Initialize

→Init

→Close

Résoudre :

Au clavier, taper « ↵it 500↵ » pour itérer.

Taper « ctrl + c » pour interrompre la résolution avant la fin des itérations.

Résultats :

Afficher des tracés :

Annexe A

→Display

Choisir la caractéristique à visualiser.

Afficher des courbes :

→Plot

→ XY Plot

Choisir la caractéristique à étudier.

Mesures des forces :

→Report

→Forces

Choisir l'ensemble des parois sur lesquelles on veut connaître les contraintes.

Correction :

Adaptation :

→Adapt

→Gradient

Choisir les zones à adapter.
