République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة يحي فارس بالمدية
Université Yahia Farès de Médéa
كلية العلوم والتكنولوجيا
Faculté des Sciences et de la Technologie

THESE

En vue de l'obtention du Doctorat en Sciences en Génie des Procédés

Spécialité : Génie des Procédés

Présentée par Mr. Athmane GHEZIEL

THEME

Modélisation du transfert des polluants dans un milieu confiné et/ou ouvert.

Soutenue devant le jury :

Mr. Salah BELAADI	Professeur, USTHB	Président
Mme Aicha BENSMAILI	Professeur, USTHB	Examinatrice
Mme Hakima CHERIFI	MCA, Université Yahia FARES., Médéa	Examinatrice
Mr. Othmane BENKORTBI	MCA, Université Yahia FARES., Médéa	Examinateur
Mr. Mamaar LAIDI	MCA, Université Yahia FARES., Médéa	Examinateur
Mr. Salah HANINI	Professeur, Université Yahia FARES., Médéa	Directeur de thèse

2016 – 2017

Dédicace

À mes Parents,
À ma Mère ELBOUTI SAIDA,
À mes beaux Parents,
À ma chère Femme,
À mes Enfants ASSIA, HIBATO ALLAH, FATIMA ZOHRA, AHMED et MOHAMED,
À mes Frères et sœurs,
À ma Belle sœur,
À toute ma famille,
A tous mes amis,
A tous ceux qui m'ont aidé et encouragé

Je dédie ce travail

Remerciements

Avant de tourner la page des années de thèse, enfin concrétisée par ce mémoire, j'ai très envie de m'adonner à l'exercice ultime et sincère des remerciements.

J'aimerais bien évidemment débuter cette page en remerciant le ***Dieu ALLAH le tout Puissant*** *qui ma donné la force, le courage et la patience de bien mener ce travail.*

J'adresse mes reconnaissances à mon directeur de thèse, Docteur ***S. HANINI****, Professeur à l'Université Yahia Farès de Médéa pour tout le temps qu'il m'a accordé mais aussi pour la sympathie qu'ils me témoignent.*

Je suis sensible à l'honneur que m'a fait le Docteur ***BELAADI Salah****, Professeur à l'Université* Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumedien *(USTHB) en acceptant la présidence du jury de thèse. Je le prie de bien vouloir trouver ici l'expression de ma gratitude.*

Mes remerciements s'adressent aussi au Docteur ***Aicha BENSMAILI*** *Professeur à l'Université d'USTHB, au Docteur* ***Hakima CHERIFI*** *Maitre de Conférences A à l'Université Yahia Farès de Médéa, au Docteur* ***Othmane BENKORTBI*** *Maitre de Conférences A à l'Université Yahia Farès de Médéa et au Docteur* ***Mamaar LAIDI*** *Maitre de Conférences A à l'Université Yahia Farès de Médéa pour avoir bien voulu examiner le contenu de ce travail et participer à la soutenance.*

Je tiens à exprimer mes remercîments à Docteur ***Brahim MOHAMMEDI****, Chercheur principal au Centre de Recherche Nucléaire de Birine (CRNB) pour son aide et de son soutien tout au long de ce travail.*

Sans pouvoir, malheureusement, recenser tous ceux qui participent à rendre meilleur mon environnement de travail, je pense à Mrs ***A. KERRIS*** *et* ***A. BENAZZA*** *respectivement directeur général et secrétaire général du centre de recherche nucléaire de Birine (CRNB), aux services administratifs et le département de formation & information du Centre de Recherche Nucléaire de Birine. Je voudrais adresser un merci particulier à Monsieur* ***S. BOUHLI*** *directeur de division au CRNB de m'avoir autorisé à poursuivre mes études et des services qui m'ont été assurés.*

Je tiens à exprimer mes reconnaissances à Messieurs ***A. BOUZIDI, M. TOUIZA, A. ARAREM, H. BENKHARFIA, K. REZOUG, A. AIDOUNI, Kh. AIDOUNI*** *et* ***M. SALHI*** *chercheurs au CRNB, collègues de longues dates pour leur soutien inconditionnel, leur amitié a beaucoup d'importance pour moi..*

Que tous mes amis et camarades du Centre de Recherche Nucléaire de Birine (CRNB), de l'Université Yahia Farès de Médéa ainsi que ceux d'Ain-Oussera dont j'ai pu apprécier l'esprit d'entraide, soient ici remerciés.

ملخص : نمذجة انتقال الملوثات في محيط مغلق و/أو مفتوح

إن انتقال الملوثات الخطرة في محيط مغلق و/أو مفتوح هو الحدث الذي قد يؤدي إلى عواقب وخيمة على صحة الإنسان والبيئة. أن نمذجة تراكيز هذه الملوثات سوتسمح لنا برسم الخرائط الزمان–مكانية لها في جميع أنحاء الموقع في حالة الأزمة. أن التقييم السريع والدقيق لهذهالتراكيز كان هدفا لتطوير نماذج العمل مع الأخذ بعين الاعتبار تشتت في مجال القريب مع النظر في العقبات البيئية. ويستند هذا النهج في تطويرها على نماذج من الشبكات العصبية الاصطناعية، والحل التحليلي (Gaussien) و طريقة عددية "CFD".

باستخدام نوع من الشبكات العصبية " MLP" تتطلب التعلم. يتم إنشاء قاعدتين للبيانات من القيم المقاسة تجريبيا مستوحاة من الدراسات السابقة. تتكون قاعدة البيانات الأولى من 261 نقطة مقاسة المستخدمة في تعليم نموذج ANN_S (حالة مستقرة) أما القاعدة الثانية فتتكون من 2271 نقطة لتعلم نموذج ANN_T (انتقالي).

ان التطبيق والتحقق من صحة هذه المنهجيات الثلاث المقترحة سوتسمح لنا بدراسة الحالات التالية:

- نشر سحابة من مدخنة في منطقة صناعية باستخدام طريقة CFD والحل التحليلي.
- نقل الجسيمات الدقيقة داخل غرفة جيدة التهوية باستخدام نماذج ثلاثية الأبعاد "CFD" و"ANN_S".
- تشتت شعاع الجسيمات (0.3−5 µm) في غرفة جيدة التهوية باستخدام النموذجي"ANN_T".

من اجل دراسة الانبعاث العمودي، فان مجال التطبيق هو ذو حجم 1500000 ($م^3$). إن إجراء التحقق من صحة الحل التحليلي يتم من خلال المقارنة بين النتائج المحصل عليها عن طريق نموذج CFD وتلك المحصل عليها عن طريق الحل التحليلي. إن قيم الحل التحليلي باستخدام ارتباط BNL أقرب إلى تلك التي وجدت من خلال طريقة CFD.

إن تحليل انتقال الجزيئات في غرفة جيدة التهوية، تم من خلال أشكال هندسية مستوحاة من الدراسات السابقة من اجل التحقق الشامل من صحة هذين النموذجين (ANN_S و ANN_T). الغرفة الأول بحجم 0.128 $م^3$ وهي المستخدمة للتحقق من صحة النموذج ANN_S، والغرفة الثانية بحجم 0.3 $م^3$ و تستخدم للتحقق من صحة النموذج ANN_T. كلا النموذجين من الشبكة العصبية التي تم تطويرهما هم ا نموذجان دقيقان للغاية ومن السهل التنبؤ بالتراكيز التي تشكلها الجسيمات بالمقارنة مع النموذج CFD. لا يتجاوز الخطأ المطلق لنموذج "ANN_S" 5٪ أما الحد الأقصى لنموذج "ANN_T" فان حده الأقصى لا يصل إلى 9٪.

المفاتيح : نموذج ANN, CFD ، النمذجة، الملوثات، التشتت، الغلاف الجوي، الجسيمات، حدود طبقة، "ANSYS−Fluent"

Résumé : Modélisation du transfert des polluants dans un milieu confiné et/ou ouvert.

Le transfert des polluants dangereux dans un milieu confiné et/ou ouvert est un évènement susceptible d'entrainer de graves conséquences sur la santé humaine et de l'environnement. Sa modélisation permet la cartographie spatiotemporelle des concentrations de ces polluants autour du site en situation de crise. L'évaluation précise et rapide a fait l'objet d'un développement des modèles opérationnels, prenant en compte de la dispersion en champ proche et avec la prise en compte des obstacles dans l'environnement. L'approche développée s'appuie sur des modèles issus de réseaux neurones artificiels, de la solution analytique (Gaussienne) et de la méthode numérique "CFD".

L'utilisation des réseaux de neurones de type "MLP" requiert un apprentissage. Deux bases de données sont générées à partir des valeurs expérimentales inspirées d'études antérieures. La première base de données composée de 261 points de mesures est utilisée à l'apprentissage du modèle ANN_S (régime stationnaire) et la deuxième base constituée de 2271 points afin d'apprendre le modèle ANN_T (régime transitoire).

Afin d'appliquer et valider ces trois méthodologies envisagées qui permettent à nous d'étudier les situations suivantes :

- Diffusion d'un panache d'une cheminée d'une zone industrielle utilisant la méthode CFD et la solution analytique ;
- Transfert de particules fines dans une salle ventilée utilisant les modèles tridimensionnels CFD, et ANN_S ;
- Dispersion d'un faisceau de particules (0.3 à 5µm) dans une salle ventilée utilisant le Modèle ANN_T.

Pour l'étude du panache, le domaine d'application a un volume de 1500000 (m^3). La validation de la solution analytique est effectuée à travers une comparaison effectuée entre les résultats simulés par modèle CFD et ceux de la solution analytique. Les valeurs de la solution analytique utilisant la corrélation BNL pour les écarts-types sont les plus proches de ceux trouvés par CFD.

L'analyse du transfert des particules dans des salles ventilées a été effectuée dans des géométries inspirées de la littérature afin de donner une validation globale à ces deux modèles (ANN_S et ANN_T), la première d'une salle de 0.128 m^3 est utilisée pour valider le modèle ANN_S, la deuxième salle de 0.3 m^3 est utilisée pour le modèle ANN_T. Les deux modèles du réseau neuronal qui sont développés étaient très précis et faciles à prévoir les profils de concentration de particules par rapport au modèle CFD. L'erreur absolue moyenne donnée par le modèle ANN_S ne dépasse pas 5 % et celle du modèle ANN_T dont son maximum n'atteint pas le 9 %.

Mot clef : Modèle ANN, CFD, modélisation, dispersion, polluants, atmosphérique, particules, couche limites, ANSYS-Fluent.

Abstract: Modeling the transfer of pollutants in a confined and/or open environment.

The transfer of hazardous pollutants into a confined and / or open environment is an event that can have serious consequences for human health and the environment. Its modeling allows the spatiotemporal mapping of the concentrations of these pollutants around the site in a crisis situation. Precise and rapid evaluation was the development of operational models, considering the dispersion in near field and with taking into account the obstacles in the environment. The approach developed is based on models derived from artificial neural networks, the analytical solution (Gaussian) and the numerical method "CFD".

The use of neural networks of the "MLP" type requires an apprenticeship. Two databases are generated from the experimental values inspired by previous studies. The first database consisting of 261 measurement points is used to learn the model ANN_S (steady state) and the second base consists of 2271 points in order to learn the model ANN_T (transient regime).

To implement and validate these, three proposed methodologies allow us to study the following situations:

- Diffusion of a chimney plume from an industrial zone using the CFD method and the analytical solution;
- Transfer of fine particles into a ventilated room using three-dimensional models CFD, and ANN_S;
- Dispersion of a particle beam (0.3 to 5µm) in a ventilated room using the Model ANN_T.

For the study of the plume, the application domain has a volume of 1500000 (m3). The analytical solution validation is carried out by comparing the results simulated by CFD model with those of the analytical solution. The analytical solution values using the BNL correlation for standard deviations are closest to those found by CFD.

The analysis of the transfer of the particles in ventilated rooms was carried out in geometries inspired by the literature in order to give a global validation to these two models (ANN_S and ANN_T), the first one of a room of 0.128 m^3 is used to validate the ANN_S model, the second room of 0.3 m^3 is used for the ANN_T. The two models of the neural network that were developed were very precise and easy to predict the particles concentration profiles compared to the CFD model. The mean absolute error given by the ANN_S model does not exceed 5% and that of the ANN_T model whose maximum does not reach 9%.

Key word: Model ANN, CFD, modeling, dispersion, pollutants, atmospheric, particles, boundary layer, ANSYS-Fluent

" La théorie, c’est quand on sait tout et que rien ne fonctionne.
La pratique, c’est quand tout fonctionne et que personne ne sait pourquoi.
Ici, nous avons réuni théorie et pratique : Rien ne fonctionne... et personne ne sait pourquoi ! "

Albert Einstein

Table des Matières

Dédicace ii
Remerciements iii
الملخص iv
Résumé v
Abstract vi
Table des figures xi
Liste des tableaus xii
Nomenclature xiv
Abréviation xvi
Introduction Générale 1

Chapitre I
Etat de l'Art et Revue Critique

I.1. CONTEXTE DU PROJET 6
I.1.1. Historique de la pollution 6
I.1.2. Sources de pollution 7
I.1.3. Principaux polluants 8
I.2. Dispersion de la pollution 10
I.3. Dispersion par l'approche expérimentale 10
I.3.1. Technique de traçage 11
I.3.2. Principaux traceurs 11
I.3.3. Dispersion atmosphérique 12
I.3.4. Dispersion dans le milieu fermé 13
I.3.5. Synthèse bibliographie 14
I.4. Dispersion par l'approche numérique 16
I.4.1. Milieu ouvert 16
I.4.2. Milieu Fermé 18
I.5. Dispersion par la méthode de l'intelligence artificielle 18
I.6. Conclusion 20

CHAPITRE II

MODELISATION DE LA DISPERSION

II.1. Modélisation de la dispersion 21
II.2. Différentes approches de modélisation de la dispersion 23
II.3. Modélisation par l'approche déterministe 23
II.3.1. Mécanisme des écoulements atmosphériques 24
II.3.1.1. Caractéristiques générale de l'atmosphère 24
II.3.1.2. Mouvement de l'air atmosphérique 25
II.3.1.3. Approches de simulation de turbulence 30
II.3.2. Modèles utilisés pour la dispersion 32
II.3.2.1. Modèle Gaussien 33
II.3.2.2. Modèle intégral (hybride) 37
II.3.2.3. Modèle tridimensionnel CFD 38
II.3.2.3.1. Modèle Lagrangien 39
II.3.2.3.2. Modèle Eulérien 42
II.4. Méthode de l'intelligence artificielle 43
II.4.1. Principe de la méthode 44
II.4.2. Procédure de la méthode 44
II.4.3. Optimisation et calcul des erreurs statistiques 46
II.5. Conclusion 47

CHAPITRE III

STRUCTURE DU CODE "ANSYS-FLUENT"

III.1. Présentation du code "ANSYS-Fluent " 48
III.2. Procédure utilisation du code 49
III.2.1. Choix du solveur 49
III.2.2. Choix du schéma de discrétisation 49
III.2.3. Initialisation 50
III.3.Traitement de la turbulence 50
III.4. Méthode de discrétisation 54
III.4.1. Discrétisation spatiale 55
III.4.2. Discrétisation temporelle 57
III.4.3. Discrétisation des équations 58

III.5. Traitement auprès de la paroi 58
III.6. Conclusion 61

CHAPITRE IV
MISE EN ŒUVRE

IV.1. Etude d'un panache utilisant modèle Gaussien 62
IV.1.1. Domaine de la simulation 62
IV.1.2. Phase préparatoire du calcul analytique 63
IV.1.3. Etude de l'effet de corrélation d'écarts-types sur la dispersion atmosphérique 63
IV.1.4. Evolution de concentration dans le plan (x, y) à z=65m 67
IV.1.5. Evolution de concentration dans le plan (x, z) à y=0 69
IV.2. Modèle tridimensionnel CFD 70
IV.2.1. Etude d'un panache utilisant modèle CFD 72
IV.2.1.1.Procédure préparatoire de simulation 72
IV.2.1.2. Effet du maillage 76
IV.2.1.3. Résultats et discussion 76
IV.2.2. Etude du transfert de polluant dans un milieu confiné ventilé 83
IV.2.2.1. Procédure et mise en œuvre de simulation 83
IV.2.2.2. Effet du maillage 86
IV.2.2.3. Effet de la quantité initiale injectée 86
IV.2.2.4. Condition aux limites de la phase dispersée 87
IV.2.2.5. Résultats et discussion 88
IV.3. Modélisation par la méthode du réseau neural artificiel 89
IV.3.1. Méthodologie de préparation des modèles ANN de simulation 89
IV.3.2. Détermination et validation du modèle ANN_S 92
IV.3.3. Utilisation du modèle ANN_S 101
IV.3.4. Détermination et validation du modèle ANN_T 104
IV.3.5. Utilisation du modèle ANN_T 112
IV.4. Conclusion 115
Conclusion générale 117
Références Bibliographiques 120

Table des Figures

Fig.1	Système mondial de surveillance continue de l'environnement	4
Fig.I.1	Schéma représentatif de la gamme des particules	9
Fig.I.2	Schéma de principe d'une soufflerie	13
Fig.I.3	Schéma d'un dispositif expérimental PDA	13
Fig.I.4	Schéma de principe des expériences de traçage gazeux et particulaire	14
Fig.I.5	Schéma du domaine de simulation expérimentale	16
Fig.II.1	Organigramme des étapes d'une modelisationd'EDD	21
Fig.II.2	Schéma représentatif de différents mécanismes physiques influençant sur la dispersion	23
Fig.II.3	Schéma structurel de l'atmosphère terrestre et son profil de température	24
Fig.II.4	Structure de la couche limite atmosphérique	26
Fig.II.5	Évolution de l'écart-type vertical en fonction de la distance de source pour différente états de stabilité	27
Fig.II.6	Comparaison entre les approches RANS, DNS et LES	31
Fig.II.7	Représentation de la diffusion selon modèle Gaussien	35
Fig.II.8	Forces agissant sur une particule suspendue dans l'air	39
Fig.II.9	Variation des coefficients de trainée avec le nombre Reynolds pour une particule Sphérique	40
Fig.II.10	Représentation de la phase préparatoire des bases de données	45
Fig.II.11	Procédure de modélisation par réseaux de neurones	46
Fig.III.1	Interface graphique du code	48
Fig.III.2	Fenêtre e choix de schéma de discrétisation	50
Fig.III.3	Modèles de la turbulence	51
Fig.III.4	Eléments de maillage	56
Fig.III.5	Types de cellules	56
Fig.III.6	Eléments du volume de contrôle	57
Fig.III.7	Lois de la couche limite	60
Fig.IV.1	Profils verticaux de concentration à y=0, x=50m et à différentes corrélations	64
Fig.IV.2	Profils verticaux de concentration à y=0, x=100m et à différentes corrélations	64
Fig.IV.3	Profils verticaux de concentration à y=0, x=140m et à différentes corrélations	65
Fig.IV.4	Schéma de principe d'un panache tridimensionnel	66
Fig.IV.5	Profils axiaux de concentration à y=0, z=65m et à différentes corrélations	67
Fig.IV.6	Agrandissement de la partie A , x varie de 100 à 160m; de la figure (V.5)	67
Fig.IV.7	Distribution en 3D de concentration des polluants dans le plan (x, y) et à z=65m	68
Fig.IV.8	Iso concentration dans le plan (x, y) à z=65m	69
Fig.IV.9	Distribution en 3D de concentration des polluants dans le plan (x, z) et à y=0m	69
Fig.IV.10	Iso concentration dans le plan (x, z) à y=0m	70
Fig.IV.11	Schéma synoptique de processus de simulation	72
Fig.IV.12	Schéma du domaine de simulation	73
Fig.IV.13	Coupe transversale de maillage du volume	74

Fig.IV.14 Détails de maillage de la cheminée 74
Fig.IV.15 Schéma du principe des conditions aux limites 75
Fig.IV.16 Effet de l'indépendance du maillage sur la solution 76
Fig.IV.17 Profils verticaux de vitesses 77
Fig.IV.18 Evolutions e la concentration pour 3 positions 78
Fig.IV.19 Evolution de la concentration à z=65m du sol 79
Fig.IV.20 Evolution de la concentration aux deux positions verticales 80
Fig.IV.21 Volume rendu de la concentration 81
Fig.IV.22 Courant de vitesse de la concentration 81
Fig.IV.23 Iso surfaces de la concentration 82
Fig.IV.24 Contour de la concentration à la sortie de la cheminée 83
Fig.IV.25 Géométrie utilisée pour la simulation 84
Fig.IV.26 Représentation graphique du maillage utilisé 85
Fig.IV.27 Schéma de gaine de ventilation 87
Fig.IV.28 Profils verticaux de concentration aux trois positions axiales 88
Fig.IV.29 Séparation de la base globale selon l'apprentissage, validation et test 90
Fig.IV.30 Schéma du principe d''apprentissage du réseau 90
Fig.IV.31 Optimisation des paramètres d'un réseau de neurone artificiel 92
Fig.IV.32 Performance en fonction de nombre de neurone dans le couche cachée 96
Fig.IV.33 Schéma structural du modèle ANN_S 97
Fig.IV.34 Graphe de régression du réseau ANN_S 97
Fig.IV.35 Comparaison entre profils verticaux de concentration aux trois positions axiales et aux deux vitesses 99
Fig.IV.36 Visualisation graphique de l'erreur moyenne aux trois positions et aux deux régimes 100
Fig.IV.37 Profils axiaux de concentration à la position verticale y=0.36m 101
Fig.IV.38 Iso concentration au centre de la salle et aux deux régimes 102
Fig.IV.39 Graphe 3D de concentration au centre de la salle et aux deux régimes 103
Fig.IV.40 Effet de vitesse d'air sur la dispersion de particules 104
Fig.IV.41 Schéma du domaine de simulation 105
Fig.IV.42 Schéma structural du modèle ANN_T 108
Fig.IV.43 Graphe de régression du réseau ANN_T 109
Fig.IV.44 Profils de concentration aux points (2,2), (3,3), (1,3), aux cinq gamme de diam et à O_1 111
Fig.IV.45 Visualisation de l'erreur moyenne de concentration aux points (2,2), (3,3), (1,3) et aux cinq gammes de diam 112
Fig.IV.46 Profils temporels de concentration aux cinq gamme de diam et aux différentes points 113
Fig.IV.47 Profils temporels de concentration aux cinq gammes de diam, aux deux points, aux deux vitesses et à O_2 114
Fig.IV.48 Profils temporels de concentration aux cinq gammes de diam, aux deux points et à O_3 115

Liste des Tableaux

Tableau I.1	Récupitulatif de travaux sur la dispersion atmosphérique par voie numérique	17
Tableau I.2	Récapitulatif de travaux réalisés antérieurement pour milieu confiné	18
Tableau II.1	Propriétés de l'air atmospherique	29
Tableau II.2	Stabilité de la CLA en fonction de Ri	30
Tableau II.3	Classes de stabilité de Pasquill	35
Tableau II.4	Condition meteolorologiques diffinissant les classes de Pasquill	36
Tableau II.5	Coefficients relatifs a, b et c pour les écarts types	36
Tableau II.6	Coefficients relatifs aux écarts types pour une diffusion normale	37
Tableau II.7	Coefficients relatifs aux écarts types pour une diffusion faible	37
Tableau III.1	Comportement et utilisation du modèle de turbulence RANS	51
Tableau III.2	Valeurs de constantes du modèle k-ε	53
Tableau IV.1	Tableau des noms des modèles avec ces correlations	63
Tableau IV.2	Tableau des noms des modèles avec ces correlations	65
Tableau IV.3	Largeur du panache à y=0	66
Tableau IV.4	Differents configuration du maillage	86
Tableau IV.5	Débit massique injecté dans le système de ventilation	87
Tableau IV.6	Valeurs mini et max de variables d'entrée	94
Tableau IV.7	Tableau des noms des algorithmes d'apprentissage testés	95
Tableau IV.8	Tableau de choix de la fonction d'apprentissage	95
Tableau IV.9	Parametres de configuration optimale du modèle ANN_S	96
Tableau IV.10	Coordonnées spatial des points de mesures et les sections de sortie	105
Tableau IV.11	Valeurs limites des inputs du modèles ANN_T	106
Tableau IV.12	Choix et selection d'une configuration optimale	107

Nomenclature

Caractères latins

Ap	Surface d'une particule	m^2
bi	Biais du neurone	--
C	Concentration d'une substance dans un milieu	g/m^3
C_D	Coefficient de trainée	--
c_p	Chaleur spécifique à pression constante	J/(kg. °K)
D	Coefficient de diffusion de la substance dans un milieu	m^2/s
D_H	Dimension caractéristiques du milieu	m
dp	Diamètre de particule	µm
dt	Pas de temps	s
F	Fonction d'activation du neurone	--
f	Résultante des forces qui s'appliquent au polluant	$Kg.m/s^2$
F_D	Force de trainée	$Kg.m/s^2$
g	Gravite	m/s^2
H	Hauteur	m
h_q	Humidité spécifique	Kg_{eau}/Kg_{air_sec}
Kx	Coefficient de diffusion turbulente suivant l'axe x	m^2/s
Ky	Coefficient de diffusion turbulente suivant l'axe y	m^2/s
Kz	Coefficient de diffusion turbulente suivant l'axe z	m^2/s
M	Moment d'impulsion	$Kg.m^2/s^2$
N	Nombre d'entrées du neurone	--
m_p	Masse de polluant	Kg
p	Pression du milieu	bar
Q	Débit volumétrique émis par la source	Kg/s
Q_d	Quantité déposée par unité de temps et de surface	$g/(m^2.s)$
Rc	Terme de Réaction chimique	Kmol/(m3.s)
Si	Terme de Source d'émission	Kmol/(m3.s)
t	Temps	s
T	Température absolue	°K
Tv	Température virtuelle	°K
U	Vitesse du milieu porteur	m/s
v_d	Vitesse de déposition des contaminants sur les parois	m/s
V_e	Vitesse d'évacuation	m/s
x	Distance axiale	m
z	Altitude	m

Caractères grecs

β	Coefficient de flottabilité	$m/(s^2.°K)$
μ	Viscosité dynamique de fluide	Kg/(m.s)
θ	Température potentielle	°K
θv	Température potentielle virtuelle	°K
ρ	Masse volumique	kg/m^3
σ_{ij}	Tenseur des contraintes agissant à la surface de l'élément fluide	Pa. N m

δ_{ij}	Symbole de Kronecker	---

Nombres adimensionnels

Ar	Nombre d'Archimède
Re	Nombre de Reynolds
Rep	Nombre de Reynolds particule
Ri	Nombre de Richardson de gradient

Exposants

-	Valeur Moyenne
~	Valeur fluctuant de « Favre »

Indices

i	Direction spatiale
j	Direction spatiale
f	Fluide
d	Déposition des particules
mel	Mélange
p	Particule
v	Virtuel

Abréviation

AAE	*Average Absolute Error (**EAM** :Erreur Absolue Moyenne)*
AE	*Absolute Error (**EA**: Erreur Absolue)*
ANN	*Artificiel Neural Network (**RNA**: Réseau neural Artificiel)*
ANSYS	*ANalysis SYStem (Système d'analyse)*
ASME	*American Society of Mechanical engineering (**SAEM:** Société Américaine de l'Enegering Mécanique)*
ASHRAE	*American Society of Heating, Refrigerating and Air conditioning Engineers (**SAECCA**: Société Américaine de l'engering de chauffage et de conditionnement d'air)*
BNL	*Brookhaven National Laboratory (**NLB**: National Laboratoire de Brookhaven)*
CFD	*Computational Fluid Dynamics (**FDN**: Fluide Dynamique Numérique)*
CLA	*Couche Limite Atmosphérique*
CLS	*Couche Limites de Surface*
COMENA	*Commissariat à l'Energie Atomique*
CRNB	*Centre de Recherche Nucléaire de Birine*
DNS	*Direct Numerical Simulation (**SND**: simulation numérique directe)*
EDD	*Etude de Danger d'une Dispersion*
GEMS	*Global Environment Monitoring System (**SMSCE**: Système Mondial de Surveillance Continue de l'Environnement)*
LES	*Large Eddy Simulation (**SLE**: Simulation Large Echelle)*
MLP	*Multi-Layer Perpcepton (**PMC**: Perpceton à Multi-Couché)*
PM	*Particulate Matter (**PFA**: Particules Fines dans l'Air)*
OMS	*Organisation Mondiale de la Santé*
PNUE	*Programme des Nations Unies pour l'environnement*
PPRT	*Plans de Prévention des risques Technologiques*
PDA	*Phase Doppler Aneomontry (**ADP**:Anémométrie Doppler en Phase)*
RMSE	*Root Mean Square Error (**EQM**: Erreur Quadratique Moyenne)*
RANS	*Reynolds Averaged (Navier Stockes à Moyenne de l'échelle de Reynolds)*
STDEV	*STandard DEViation (**ET**: Ecart-Type)*
UDF	*User Defined Functions**(** Fonctions définies par l'utilisateur)*
URANS	*Unsteady Reynolds Averaged Navier Stockes (Navier Stockes à Moyenne de l'échelle de Reynolds transitoire)*

Introduction Générale

La pollution environnementale est responsable, selon l'OMS, de la mort de 2,4 millions de personnes dans le monde chaque année (Communiqué de l'OMS publié à Genève, 2006). L'air pollué à l'extérieur comme à l'intérieur d'une surface bâtie cause des troubles cardiaques ou reproductifs, des cancers et favorise également les maladies allergiques respiratoires (asthme). La pollution de l'air est une conséquence directe de l'activité humaine et de son accélération au cours du XX^{ème} siècle et de ce début de XXI^{ème}. En effet, au cours du siècle dernier, le développement rapide des industries chimiques et pétrolières, les accidents industriels, a eu sur l'environnement des conséquences qui ont été illustrées par les innombrables cas où les ressources en sols, en air et en eau ont été contaminées par des matières toxiques et d'autres polluants mettant gravement le danger, à la santé des êtres humains et la contamination des écosystèmes. En plus de ces problèmes, l'explosion démographique mondiale entrainait une hausse considérable des besoins énergétiques à une augmentation conséquente du trafic automobile. Par pollution de l'air (ou pollution atmosphérique), on entend la contamination de l'environnement intérieur ou extérieur par un agent chimique, physique ou biologique qui modifie les caractéristiques naturelles de l'atmosphère. Par analogie, la pollution nucléaire est définie par l'introduction, directe ou indirecte, par l'activité humaine, de substances radioactives dans l'environnement, susceptibles de contribuer ou de causer un danger pour la santé de l'homme, où détériorations des ressources biologiques, aux écosystèmes ou aux biens matériels, une entrave à un usage légitime de l'environnement [1].

L'air frais entre dans un bâtiment par une ou plusieurs bouches d'aération. Parallèlement, les bouches d'évacuation permettent à l'air vicié des bâtiments de s'en échapper afin que le vent les disperse. Lorsque les prises d'air ou le système d'évacuation ne sont pas bien conçus, des contaminants de sources extérieures environnantes (p. ex., échappement des véhicules) ou du bâtiment lui-même (émissions de hottes de laboratoire) peuvent entrer dans le bâtiment sans avoir été suffisamment dilués. Les contaminants mal dilués peuvent causer des odeurs et nuire à la santé et à la qualité de l'air intérieur. Il est donc extrêmement important d'étudier et de comprendre les effets de la dilution, surtout sur de courtes distances dans le voisinage immédiat d'un bâtiment [2].

C'est ainsi qu'au cours des 20 dernières années, l'industrie a fait appel au secteur de la recherche pour développer et optimiser ses méthodes de production, par la mise en place de procédés de plus en plus perfectionnés. Cependant, la réduction des émissions industrielles passe aussi par la surveillance continue des sites et de leurs abords et par l'analyse de scénarii accidentels pour améliorer la compréhension des causes des pics de pollution et prendre les mesures nécessaires pour éviter leurs reproductions futures. Cette approche nécessite alors le développement de réseaux de surveillance de la qualité de l'air et la mise en place de nombreux capteurs pour conseiller les autorités, informer et prévenir les populations. En appui de ces réseaux, le monde industriel s'est tourné vers la modélisation de la pollution atmosphérique, afin de renforcer et d'améliorer la sécurité sur et en dehors des sites de production. Grâce aux développements des ressources informatiques, cet aspect numérique a pris ces dernières années un poids de plus en plus important dans les systèmes de régulation de la pollution industrielle.

La pluridisciplinarité fait la richesse de la recherche scientifique dans le domaine de la pollution et la dispersion spatiotemporelle de ces polluants. Des équipes spécialisées dans des domaines aussi variés que les sciences de la Terre, la biologie, la microbiologie, l'écologie, le génie des procédés, l'hydrogéologie sont amenées à collaborer et assurer le transfert technologique en lien avec des

partenaires industriels. L'importance des enjeux (santé, environnement, foncier, économie...) souligne la nécessité de progresser dans la connaissance scientifique sur de nombreux points [3] :

- Caractérisation des sites pollués ;
- Métrologie de l'environnement ;
- Processus de transfert des polluants vers les eaux et la biosphère ;
- Prédiction de l'évolution des sites à long terme ;
- Evaluation des risques sanitaires ;
- Techniques de réhabilitation et de surveillance des sites pollués.

Le rôle de la modélisation de la dispersion atmosphérique peut paraître secondaire par rapport aux mesures législatives de réduction des émissions. Pourtant cette dernière est une composante importante de la gestion de la pollution pour les pouvoirs publics, mais aussi pour les exploitants de sites industriels. La modélisation permet de mieux comprendre les phénomènes physiques mis en jeu et constitue un outil indispensable pour concevoir les moyens de lutte contre la pollution. Ainsi la place de la modélisation dans la problématique de la pollution industrielle se situe à plusieurs niveaux [4].

La surveillance des émissions de polluants dans l'atmosphère constitue pour les industriels une problématique environnementale de premier ordre. Qu'elles soient ponctuelles (rejet de polluant par une cheminée) ou fugitives (fuites accidentelles de canalisations ou de stockages), la connaissance et la maîtrise de ces émissions sont aujourd'hui nécessaires pour quantifier et réduire les cas échéants leur impact environnemental. Dans ce contexte, la modélisation intervient tout d'abord dans la surveillance de sites industriels. Elle peut venir compléter et préciser des mesures réalisées par les capteurs fixes de pollution disséminés sur le site. Les outils de modélisation permettent alors d'exploiter les données issues de ces capteurs en traçant des cartographies de concentration et visualiser ainsi les zones à fortes concentrations de polluant tout en évaluant l'exposition réelle de la population aux alentours des sites industriels, mais aussi celle des employés au voisinage des installations. De part sa capacité à étudier des épisodes passés de forte pollution, elle permet aux exploitants d'améliorer leur réactivité devant des scénarios similaires, mais aussi de choisir de manière optimale l'emplacement de futurs capteurs qui permettront une surveillance de plus en plus précise. La surveillance des sites passe aussi par un contrôle en temps réel et prévisionnel de la pollution. La modélisation permet alors la création d'outils assurant le suivi en temps réel des concentrations aux abords des sites, mais aussi, en fonction des prévisions météorologiques et des activités du site, ces outils prévisionnels peuvent assurer le pilotage de la production en limitant cette dernière en cas de risque de pollution sur les villes limitrophes. À titre d'exemple, nous donnons le Système mondial de surveillance continue de l'environnement GEMS/Air (OMS/PNUE, 1993b), organisé et patronné par l'OMS et le PNUE, a élaboré un programme complet ou un organigramme visant à fournir les instruments d'une gestion rationnelle de la pollution de l'air (voir figure 1).

L'un des principaux intérêts ou problématiques de la modélisation pour les exploitants de sites industriels est de pouvoir étudier les modifications engendrées par un changement des conditions d'un problème. Ainsi, il est possible avec les outils actuels de prédire l'impact de l'ajout d'une géométrie ou d'un terme source sur les sites industriels. Plusieurs scénarii peuvent être testés et simulés afin d'aider les exploitants à choisir le meilleur compromis entre rentabilité et protection des populations aux alentours. Les études de dangers sont alors réalisées en partie par des modèles de calcul, qui lors d'aménagements particuliers (implantation d'usine, réorganisation de l'urbanisme aux alentours d'un site, etc.) apportent des renseignements sur la pollution engendrée et évaluent l'efficacité des différentes politiques mises en œuvre. Finalement, l'apport de la modélisation atmosphérique au niveau de l'aide à la décision est très important et permet de

faciliter la coexistence entre la rentabilité et la production du monde industriel et la sécurité des populations environnantes [5].

La protection des travailleurs et la surveillance de l'environnement intérieur/extérieur dans l'industrie classique en général et plus particulièrement aux installations nucléaires passent en tout premier lieu par la détermination de la distribution spatio-temporelle de la concentration des aéro-contaminants ou polluants [2]. La détermination de cartographie de la dispersion des contaminants autour de l'environnement des installations nucléaires, principalement c'est un outil d'aide à la décision nécessaire à la classification de zones contrôlées, ou renforcer des barrières de filtrations d'air aux systèmes de ventilations, etc.

Le principe important de la ventilation à l'industrie dans le cas général et plus particulier autour des installations nucléaires est :

- De diminuer l'accumulation de taux de la pollution de l'environnement interne et externe ;
- D'assurer la qualité de l'air frais, de garantir la fonction de surveillance des ambiances de travail ;
- D'établir la fonction de confinement dynamique entre les différentes classes des zones.

La dispersion des polluants dans une surface fermée peut ne pas être de manière homogène. En effet, dans ce cas, la dérive des particules par rapport aux écoulements d'air, et leur dépôt sur les parois du local et les obstacles qu'il renferme, conditionne en partie leur répartition au sein du local, conduisant à des différences de concentrations locales non négligeables [2].
En effet, la connaissance de la concentration en contaminant à l'intérieur d'un local ventilé, suite à une émission accidentelle, peut permettre d'évaluer l'exposition d'un travailleur et ainsi son éventuelle contamination interne. De même, la prédiction des transferts de contamination à l'intérieur d'un local peut aider à l'optimisation de l'emplacement et du réglage des seuils d'alarme des balises de radioprotection, qui sont des éléments essentiels de détection du risque de contamination. C'est pourquoi des travaux de recherche au sein de COMENA doivent être initiés, afin de disposer de modèles qualifiés permettant d'évaluer les transferts d'aérosols, depuis un point source potentiel de contamination jusqu'en tout point d'un local, au moyen de simulations numériques.

Dans ce contexte motivant, le Centre de Recherche Nucléaire de Birine, et plus particulièrement la Division de Sureté Nucléaire et Radioprotection a su se positionner en tant qu'expert de ventilation au sein des installations nucléaires. Ces expertises portent à la fois sur le transfert des aéro-contaminants à l'intérieur et autour de nos installations nucléaires. Dans ce cadre, l'objectif de cette thèse était de mettre en évidence des outils permettant de réduire le temps de calcul nécessaire pour arriver à un niveau de détail important. La stratégie développée dans cette thèse est d'utiliser des outils issus de l'apprentissage statistique afin de déporter l'essentiel du calcul en amont de l'utilisation du modèle opérationnel. L'utilisation des réseaux de neurones s'effectue à partir d'une base de données d'écoulements et de dispersions de substances, réalisées grâce à des valeurs expérimentales inspirées de la littérature. Différentes stratégies sont évaluées selon une complexité croissante : dispersion atmosphérique en milieu ouvert, dispersion stationnaire et in stationnaire en milieu confiné ventilé. Pour chaque situation, différentes méthodologies ont été déployées.

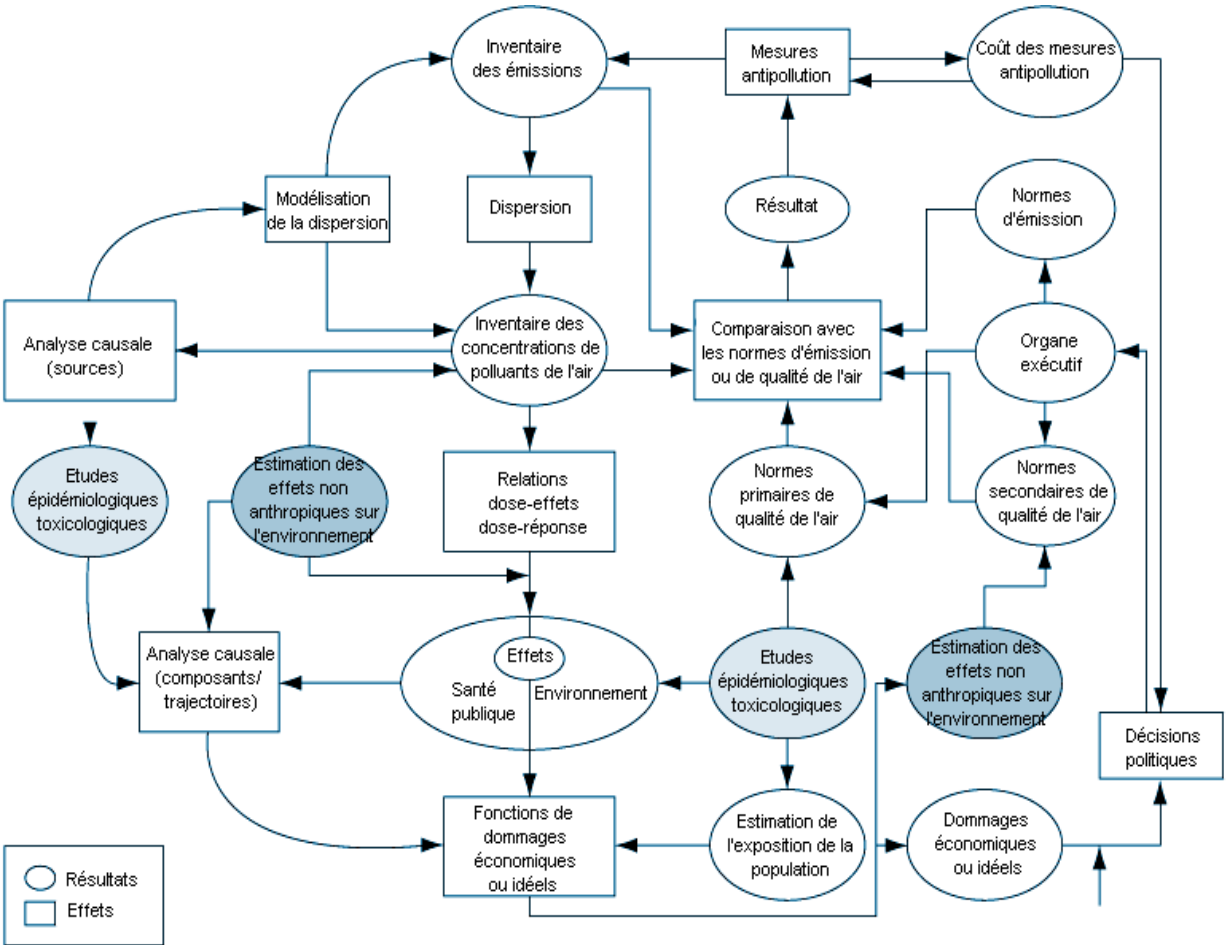


Fig.1 : Système mondial de surveillance continue de l'environnement [6].

Afin d'atteindre l'étude de ces objectifs citée ci-dessus avec clarté très détaillée de ce projet, nous avons organisé le présent manuscrit de thèse en cinq chapitres :

Le premier chapitre de la thèse est consacré au recensement, précisément l'identification, de phénomènes de pollution, les sources d'émissions et ainsi les principaux polluants dispersés dans l'atmosphère. Un aperçu sur l'étude de l'art du transfert des polluants dans un milieu ouvert et fermé par approche expérimentale et ainsi dans laquelle nous présentons les différentes techniques du traçage utilisées dans ce domaine pour les deux milieux. Une synthèse bibliographique nous a permis de rassembler les travaux publiés qui traitent la dispersion atmosphérique dans un milieu ouvert et fermé par la modélisation numérique et en plus un état de l'art sur le dépôt des particules en paroi.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons les détails des différentes approches que ce soit déterministes ou statistiques, la formulation mathématique de modélisation de phénomène de dispersion des polluants dans un milieu ouvert (atmosphérique) ou fermé (surface bâtie). Dans l'approche déterministe, nous donnons les équations gouvernant de ce type d'écoulement, ainsi que tous les modèles de modélisation de la dispersion sont traités, ou chaque modèle est appliqué pour une situation définie (milieu ouvert ou fermé). Par contre, dans l'approche statistique nous traitons seulement la méthode de réseau neural artificiel, dont son application est choisie seulement pour le milieu confiné avec les deux régimes d'écoulement (stationnaire et transitoire), à cause de manque des données expérimentales pour le milieu atmosphérique.

Le troisième chapitre est consacré exclusivement à la présentation de la structure du code ANSYS-Fluent ou les différentes techniques pour modéliser les processus physiques impliqués dans la modélisation de la dispersion des polluants dans un milieu ouvert ou fermé. Les nombreux modèles et les options actuellement disponibles dans la version V14.0.5 sont présentés.

Pour le dernier chapitre, nous présentons l'ensemble des éléments nécessaires à la mise en œuvre des approches de simulations suivantes :

- Solution analytique Gaussienne utilisée pour l'étude d'un panache d'une cheminée ;
- Modèles tridimensionnels CFD (code de calcul ANSYS-Fluent) utilisés pour :
  - l'étude de panache d'une cheminée du réacteur ;
  - l'étude de la dispersion des particules dans un milieu confiné ;
- Modèles ANN (Réseau neural artificiel) utilisés pour la dispersion des particules dans un milieu confiné et ventilé aux deux régimes d'écoulement (stationnaire et transitoire).

Nous clôturons notre travail par une conclusion générale dans laquelle nous proposons notamment quelques résultats et comparaisons entre les approches ainsi les modèles de la dispersion. Enfin, diverses perspectives de recherche ouvertes par ce travail seront exposées.

CHAPITRE I

Etat de l’art et revue critique

L'objectif de ce chapitre est de dresser un état actuel des connaissances, à partir de la littérature scientifique, sur le problème de la pollution et ainsi sa dispersion dans le milieu ambiant que ce soit ouvert ou fermé. Pour connaitre bien ce phénomène, nous avons commencé ce chapitre par une partie d’identification de problème, les sources d'émissions, principaux polluants dégagés par la pollution et ainsi les normes limites de ces polluants. Dans la deuxième partie, nous présentons les techniques expérimentales pour réaliser la distribution spatiotemporelle dans des zones susceptibles d’être touchées d’un éventuel accident et ainsi une synthèse des expériences réalise dans cet axe. Ensuite en troisième partie, nous donnons un état de l'art des travaux réalisés pour étudier la dispersion des polluants dans le milieu ambiant et ainsi la déposition de ces polluants auprès des parois.

I.1. Contexte du projet

Dans notre thèse, la problématique est de suivre et d’évaluer la quantité des polluants dégagés par une telle pollution en cas général, plus spécifiquement celle produite par l’industrie. De par sa nature complexe, la pollution atmosphérique fait l’objet, suivant les pays et parfois suivant les divers organismes qui en ont la charge dans un même pays, de plusieurs définitions différentes. Certaines reposent sur le principe que toute modification de la composition normale de l’air est une pollution atmosphérique, d’autres y ajoutent des notions de gênes ou de nocivité dues aux composés anormaux qui ont modifié cette composition. Selon le **Journal Officiel** de la République Algérienne de 20 juillet 2003, la pollution est définie comme suit :

- Pollution : " Toute modification directe ou indirecte de l’environnement provoquée par tout acte qui provoque ou qui risque de provoquer une situation préjudiciable pour la santé, la sécurité, le bien-être de l’homme, la flore, la faune, l’air, l’atmosphère, les eaux, les sols et les biens collectifs et individuels " ;
- Pollution de l'atmosphère : " L'introduction de toute substance dans l'air ou l'atmosphère provoquée par l'émanation de gaz, de vapeurs, de fumées ou de particules liquides ou solides susceptible de porter préjudice ou de créer des risques au cadre de vie ".

I.1.1. Historique de la pollution

Historiquement la pollution a toujours accompagné les progrès de la civilisation. En ce sens, elles étaient déjà présentes au commencement de l’humanité à travers les feux de forêt et l’activité volcanique, émetteurs de gaz et de particules dans l’atmosphère. Néanmoins, depuis la révolution industrielle qui a conduit la pollution aux niveaux connus de nos jours. La combustion massive de charbon amena la pollution de l'air à des niveaux sans précédent. Les industries déchargèrent leurs effluents chimiques et leurs déchets sans traitements particuliers qui sont à l’origine de ce degré de pollution de l’environnement et la toxicité de cours d’eau, les nappes phréatiques et les sources d'eau potable.

La métallurgie de l'âge du bronze puis de l'âge du fer a marqué un tournant dans la pollution de l'environnement extérieur. Les carottages des glaciers du Groenland ont révélé un accroissement

de la pollution associée à la métallurgie des grecs, des romains et des chinois. Mais à cette époque, la pollution était comparativement faible, et n'avait pas d'impact environnemental significatif.
La pollution de l'air qui lui est reliée a permis l'observation de liens directs entre mortalité et fortes concentrations de substances dangereuses (notamment en particules fines et en dioxyde de soufre). Vers le milieu du XX^{e} siècle, le terme smog de contraction des mots smok (fumée) est apparu en Amérique suite aux gaz d'échappement provoqués par les automobiles, devenus un problème majeur dans des villes comme la ville de Los Angeles, ou Donora. Londres qu'a connus son pire épisode de pollution atmosphérique avec le Grand Smog de 1952, dont on estime qu'il a pu faire 12 000 morts. D'autres villes qui ont remarqué historiquement un degré de pollution très élevé sont la ville de New York City en novembre 1953, 1963 et 1966, la ville de Pittsburgh en novembre 1975, Los Angeles en 1954, Mexico City dans les années 1950 et 1960 (Raga et al. 2001) sont notables [3].

I.1.2. Sources de pollution

Malgré le développement de l'industrialisation qui à donner des points très positifs à la civilisation et la santé de l'homme, mais à des conséquences néfastes pour la santé de l'homme, a son environnement et son avenir. L'idée de progrès pour minimiser le degré de cette gravité, on doit connaitre son origine et sa nature. Parmi les sources qui peuvent être émisse des polluants dans l'environnement [1] [3] :

a. Sources industrielles

Le secteur industriel est responsable d'une grande partie des polluants émisses dans l'environnement. Par ce secteur on trouve l'industrie classique et celle de nucléaire.

a-1. Industrie nucléaire

L'utilisation du nucléaire, civil ou militaire, remis des polluants dans l'atmosphère qui peuvent être due aux sources d'émissions suivantes :

- Essais nucléaires atmosphériques ;
- Fonctionnement des installations nucléaires ;
- Accidents nucléaires (Tchernobyl, Fukushima, Tokai-Mura, ...) ;
- Déchets produisent par ce type des installations ;
- Transport des sources radioactives.

Des molécules qui n'existent pas de façon permanente dans la nature peuvent apparaître ponctuellement (iode radioactif à courte durée de demi-vie) ou durablement (dans ce cas, il s'agit souvent de métaux lourds qui tendent à retomber au sol (ex. : plutonium, césium 137 de Tchernobyl), mais qui peuvent facilement polluer l'air lors, par exemple, d'un incendie de forêt, après qu'ils se sont accumulés dans les arbres ou d'autres végétaux ou champignons exposés à l'incendie.

a-2. Industrie classique

La pollution industrielle désigne la part de la pollution de l'environnement directement induite par l'activité industrielle quand elle introduit des substances biologiques, chimiques ou organiques, affectant de manière plus ou moins une contamination à l'écosystème. Parmi ces secteurs on trouve :

- Industrie de production d'énergie électrique et thermique ;
- Industrie chimique ;

- Utilisation des combustibles fossiles ;
- Industrie de l'exploitation minière ;
- Industrie de fabrication et de construction.

a. Emissions dues aux transports

La pollution produite par le secteur des transports a longtemps été considérée comme un problème de proximité, essentiellement perçu dans les villes en raison de la densité du trafic. Ce secteur constitue la deuxième source majeure d'émissions de polluants attribuables à la santé de l'homme, puisque c'est un secteur utilisable des carburants dérivés du pétrole (essence, diesel, kérosène, etc.).

b. Emissions domestiques

Principales sources de pollution domestique qui peut être identifiée par :

- Systèmes de climatisation de chauffage ;
- Appareils fonctionnent par la combustion de combustibles fossiles produits d'importantes émissions polluantes ;
- Matériaux ayant servi à la construction ou à l'isolation du bâtiment et les composants des équipements et mobiliers.

c. Emissions dues aux traitements des déchets

Elles sont à l'origine de plusieurs types de polluants, parmi lesquels : le méthane (abondamment dégagé par la décomposition des matières organiques, il contribue fortement à l'effet de serre), l'acide chlorhydrique, les métaux lourds, les dioxines et les furanes qui sont produits par l'incinération des déchets industriels et ménagers.

d. Emissions d'origine agricole

Le développement de l'agriculture intensive contribue à la pollution atmosphérique. Ses émissions (essentiellement l'ammoniac, le méthane, le protoxyde d'azote, le monoxyde de carbone et les pesticides) sont liées à la décomposition des matières organiques, aux animaux d'élevage et à l'utilisation massive d'engrais et de pesticides.

I.1.3. Principaux polluants

Les principaux polluants atmosphériques se classent dans deux grandes familles bien distinctes : les polluants primaires et les polluants secondaires.

Les polluants primaires sont directement issus des sources de pollution (trafic routier, industries, chauffage, agriculture, …). Il s'agit par exemple [1]:

- Des oxydes de carbone ;
- Des oxydes de soufre ;
- Des oxydes d'azote ;
- Des hydrocarbures légers ;
- Des composés organiques volatils (COV) ;
- Des particules (PM10 et PM2.5) ;
- Des métaux (plomb, mercure, cadmium…).

Les polluants secondaires ne sont pas directement rejetés dans l'atmosphère mais proviennent de réactions chimiques de gaz entre eux. C'est le cas notamment :

- Des particules secondaires ;
- De l'ozone ;
- Du dioxyde d'azote, …

Certains polluants comme le dioxyde d'azote et les particules sont à la fois des polluants primaires et secondaires. Ces polluants se trouvent dans l'air soit sous forme gazeux ou particuliers

a. Polluant particulaire : Aérosol

Les aérosols en suspension dans l'air sont sous forme solides ou liquides et résultent essentiellement de composés solides du carbone, des hydrocarbures non brûlés, mais aussi de l'usure des pneus et des métaux lourds. Sa dimension est très réduite à l'échelle microscopique. Parmi eux, les microparticules de dimension de l'ordre du micromètre (µm, un million de fois plus petit qu'un mètre) ne sont pas visibles à l'œil nu. Ce sont celles qui sont mesurées dans l'air à travers [7] :

- Les particules PM10, de diamètre inférieur à 10 µm (6 à 8 fois plus petites que l'épaisseur d'un cheveu ou de la taille d'une cellule) et qui peut être pénétré dans l'appareil respiratoire de l'homme ;
- Les particules fines PM2.5, dont le diamètre inférieur ou égal à 2,5 µm (comme les bactéries) et qui peut se loger dans les ramifications les plus profondes des voies respiratoires de l'homme. Dans le but de visualiser l'échelle d'une gamme de particules, on peut citer en ci-dessous la figure (I.1) comme exemple.

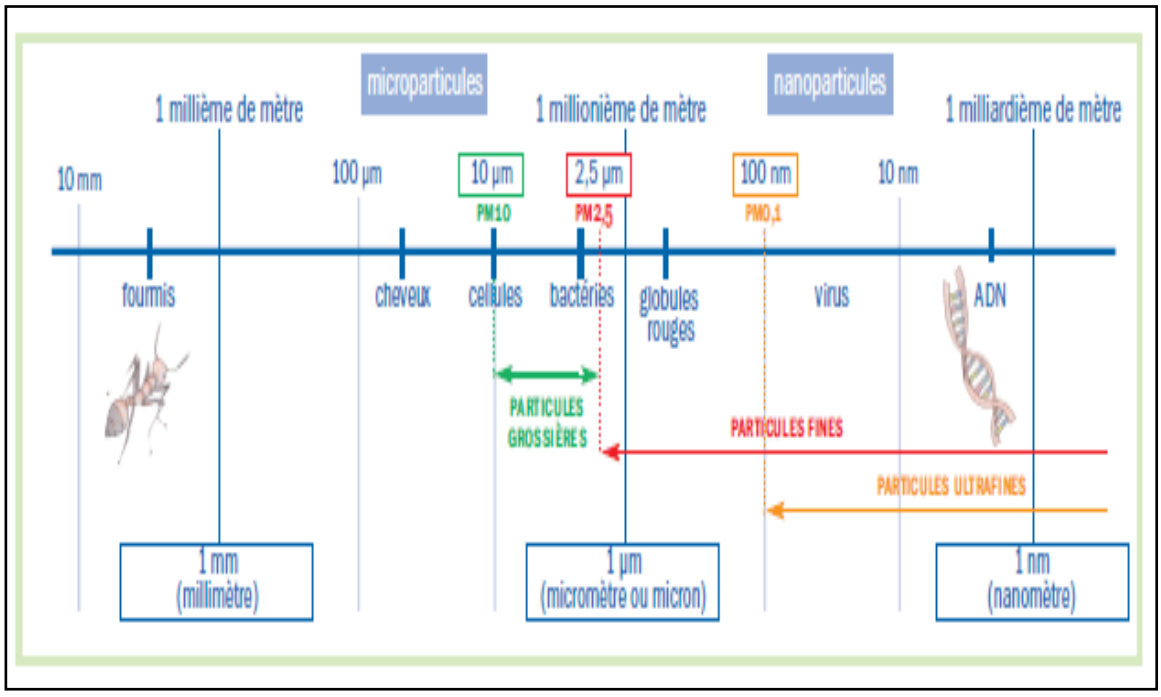


Fig. I.1 : schéma représentatif de la gamme des particules [7]

Les particules en cas générales sont définies en fonction de :

- La source ;
- La taille ou la forme ;
- Les processus de formation ;
- La composition chimique.

b. Polluant Gazeux

Les principaux polluants gazeux qui peuvent être en suspension dans l'air sont [1] :

- L'ozone (O_3) ;
- Le dioxyde d'azote (NO_2) ;
- Le dioxyde de soufre (SO_2) ;
- Le monoxyde de carbone (CO) ;
- Composés organiques volatils (COV) ;
- Le benzène et les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP).

Ces gaz pollués peuvent être classés dans l'une des quatre catégories suivantes, en fonction de leur nature et de leur concentration :

- Gaz toxiques ;
- Gaz nocifs ;
- Gaz gênants ;
- Gaz odorants.

I.2. Dispersion de la pollution

Après l'identification du problème de pollution, nous préparons un état de lieux, des études antérieures traitent la dispersion de ce contexte, par l'analyse et l'évaluation de ces travaux, nous pouvons dégager trois démarches suivantes, qui sont :

- L'approche expérimentale : des expériences réalisées en terrains ou sur maquette pour suivre la dispersion de ces polluants ;
- L'approche des calculs numériques par la résolution des équations qui gouvernent ce type d'écoulement ;
- La méthode de l'intelligence artificielle utilisant des méthodes mathématiques pour déterminer la liaison entre les paramètres de mode opératoire de l'expérimentale et les résultats mesurés.

I.3. Dispersion par approche expérimentale

Malgré le développement de l'outil du calcul numérique, les résultats trouvés par cette voie, restent très limités par rapport aux valeurs réelles à cause des erreurs qui peuvent être dues [5] :

- Les hypothèses simplificatrices de considération durant le déroulement du calcul numérique ;
- Les phénomènes physiques qui ne sont pas pris en considération ;
- Les effets qui sont traités par des fonctions empiriques ;
- L'effet de maillage ;
- La machine du calcul ;
- Des arrondissements de quelques valeurs de calcul, …

L'approche expérimentale reste toujours une voie incontournable, surtout pour la validation (benchmarks) des résultats trouvés par la méthode CFD ou celles par la solution analytique. Simulation réelle du transfert des polluants produits par des sources industrielles qui est dangereuse et provoque des effets néfastes à l'environnement et la santé de l'homme, la majorité des études réalisées sont à l'aide d'un simulateur des polluants émis dans le fluide porteur. Ce simulateur est un générateur de production des traceurs passifs qui sont simulés à mêmes propriétés physiques chimiques que le polluant réel.

I.3.1. Technique de traçage

La technique de traçage consiste à marquer au moyen d'un traceur que ce soit sous forme d'un gaz, ou de particules et les deux en même temps. Ces traceurs sont convenablement choisis selon la considération réelle de phénomène étudié. Ils sont injectés par un flux de traceurs parcourant le système traité pour suivre ou mesurer l'évolution dans l'espace ou dans le temps des concentrations résultantes de ce polluant passif. Cette technique permet notamment [5] :

- De mesurer les grandeurs aérauliques du système d'étude, tel que le débit, le taux de renouvellement dans un local ventilé, la distribution des temps de séjour, mesure de fuites, … ;
- D'évaluer la concentration du gaz traceur à des points du système pour en déduire les coefficients de transfert associes K (en s/m^3). Ces coefficients sont caractéristiques de la dispersion de contamination entre une source donnée et les points considérés pour une source continue, il s'agit du rapport de la concentration à l'équilibre sur le débit d'injection.

D'une façon générale, le banc d'essai d'une simulation expérimentale pour une émission du traceur pacifique que ce soit gaz ou particules dans un milieu ambiant, constitue par les parties principales suivantes [5] :

- Un dispositif d'émission du traceur que nous appelle un générateur de production de particules est occupé d'un régulateur de débit ;
- Un système de mesure et d'acquisition de données, constitué de plusieurs sondes de prélèvement, lesquelles sont espacées d'une distance bien choisie selon la configuration du domaine de mesure ;
- Un système informatique équipé d'un programme d'acquisition, qui permet à la fois d'acquérir les données et de visualiser en temps réel l'évolution des concentrations.

I.3.2. Principaux traceurs utilisés

L'existence des variétés des traceurs au niveau des laboratoires scientifiques mondiales, ce qui permet à nous de choisir d'une façon efficace celui qui conviendra le mieux au terme source et le milieu étudié. Les critères de sélections s'effectuent, sur la base de prendre en compte des points suivants [2] [5] :

- Une bonne stabilité chimique (absence de réactions chimiques entre le gaz porteur et le gaz traceur) et biologique, garantissant une absence d'évolution en présence de lumière, de bactéries ;
- Un comportement proche du milieu dans lequel il va être utilisé ;
- Une bonne solubilité qui permet au traceur de bien se disperser dans l'eau même à basse température ;
- Un faible potentiel à s'absorber et à subir un échange ionique sur les matériaux ;
- Une toxicité nulle ou très faible afin de ne pas provoquer de risque toxique pour l'homme et de ne pas avoir d'impact environnemental ;
- L'existence d'une méthode analytique fiable, précise, avec une très faible limite de quantification ;
- Une linéarité par rapport à la quantité d'espèces diffusantes émises, ce qui signifie notamment que si cette quantité est multipliée par un facteur donné, les concentrations résultantes seront, toutes choses restant égales, multipliées par le même facteur ;
- Des coûts (produit et méthodes analytiques) compatibles avec les objectifs.

Ils sont généralement classés en 3 catégories :

- Les traceurs solubles dans l'air ;
- Les particules insolubles ;
- Les traceurs radioactifs.

Les traceurs utilisés le plus couramment ont été la Fluorescéine sodique (uranine) et le chlorure de lithium. Avec la Fluorescéine, le taux de restitution obtenu a été très élevé (près de 95 %) dans les aquifères à réseaux plus complexes. D'autres traceurs rencontres dans la littérature sont par exemple des oxydes d'aluminium ou des gouttes d'huile, détectés notamment par un comptage optique, utilisant un appareillage spécifique à cette technique.

I.3.3. Dispersion atmosphérique

La modélisation de la dispersion atmosphérique expérimentalement est réalisée par deux approches :

- Des compagnes de mesures sur terrain ;
- Des expériences sur maquette dans une soufflerie.

i. **Premier cas** :

L'analyse de la dispersion des polluants au milieu proche de l'industrie en crise s'effectue par des compagnes de prélèvement de mesure de concentration de ces contaminants dans l'espace et dans le temps. L'existence des énormes problèmes empêche la réalisation de ces expériences sur terrain, parmi lesquels :

- Provoquer des effets néfastes à la santé de l'homme et l'environnement ;
- Echelle dimensionnelle du domaine à étudier ;
- Coût de réalisation côté matériel, main d'œuvre, transport et temps d'exécution.

ii. **Deuxième cas :**

Des expériences effectuées sur soufflerie (Fig. I.2), qui constitue un outil indispensable dans de nombreux domaines de la mécanique des fluides. En s'appuyant sur la notion de similitude, elle permet d'étudier les phénomènes physiques réels sur des maquettes à une échelle différente de la réalité. L'intérêt est de pouvoir ramener un problème complexe à l'échelle et dans des conditions d'un laboratoire, et donc de pouvoir disposer de moyens d'investigation et de mesure performants. Elle permet également de prendre en compte des configurations géométriques très détaillées, qu'il est encore difficile de modéliser numériquement.

Pour ces différentes raisons, la simulation en soufflerie présente un intérêt particulier pour l'étude de l'atmosphère. L'écoulement et la dispersion sur des sites complexes de plusieurs kilomètres (sites industriels, zones urbaines, ...) peuvent être reproduits sur des maquettes de quelques mètres représentant les moindres détails. La soufflerie constitue alors un moyen d'analyse des processus turbulents instationnaires et permet d'étudier des phénomènes tels que la dispersion des polluants ou le comportement des contraintes du vent sur les bâtiments ou les ouvrages d'art.

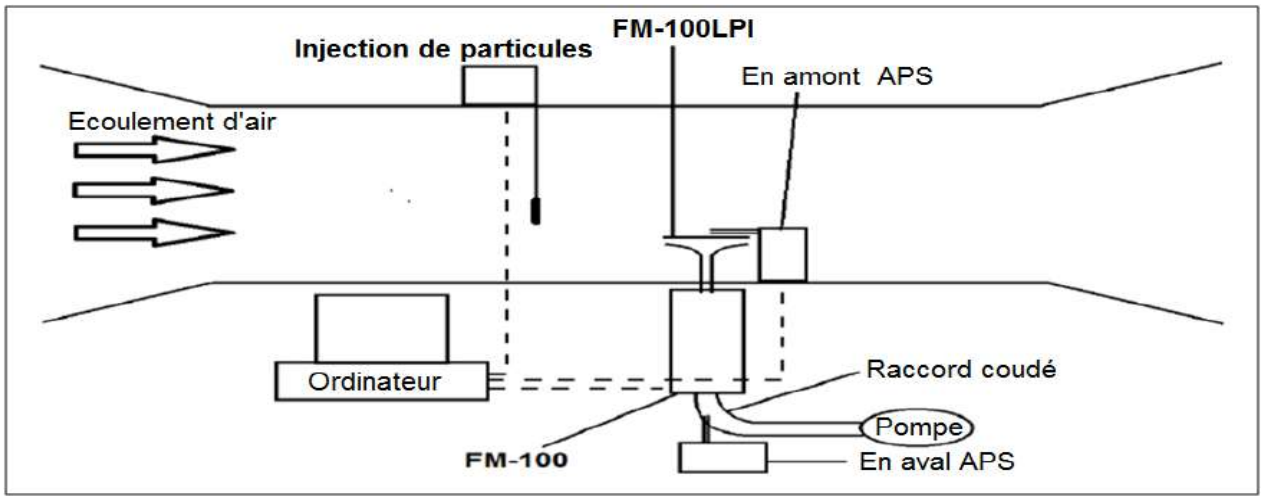


Fig. I.2 : Schéma de principe d'une soufflerie dispose d'un module de la dispersion de traceur [8].

I.3.4. Dispersion dans un milieu fermé

La majorité, des travaux réalisés pour la dispersion des polluants dans un milieu confiné sont limités sur des locaux à faible volume (maquette) et sans occupation c'est-à-dire le domaine de l'étude considéré comme vide. Afin de visualiser le principe d'une telle simulation par voie expérimentale d'une source d'émission d'une pollution à l'intérieur d'un local, et ainsi à travers une synthèse des études antérieures, nous pouvons envisager deux cas probables :

i. **Cas d'une contamination** : le principe de cette simulation est d'injecter une quantité nécessaire et suffisante du traceur dans le système d'alimentation d'air frais de la salle étudiée. Pour ce cas, la concentration des polluants est normalisée par rapport à la quantité initiale injectée dans le système. À titre d'exemple, la figure (I.3) représente un banc d'essai qui compose principalement par une salle, un système de ventilation, un générateur de production des polluants, un moyen de mesure de concentration de particules.

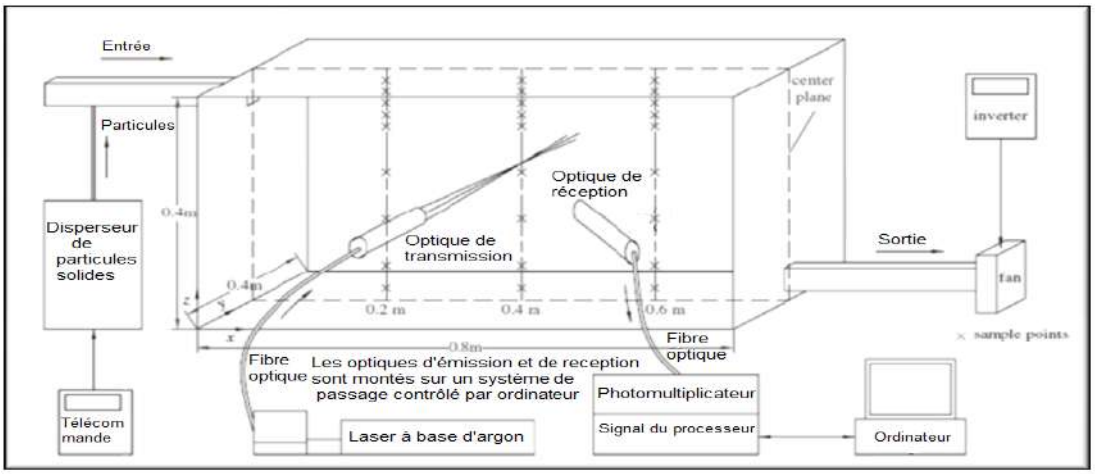


Fig. I.3 : Schéma d'un dispositif expérimental PDA [9].

ii. **Cas d'une fuite :** le principe de simulation est d'injecter une quantité du traceur à l'intérieur de la salle étudiée pour supposer une source de contamination à travers une fuite produite à l'intérieur de la salle. Pour visualiser mieux, donnons la figure (I.4) représente un schéma de principe d'un simulateur de banc d'essai pour ce type des expériences.

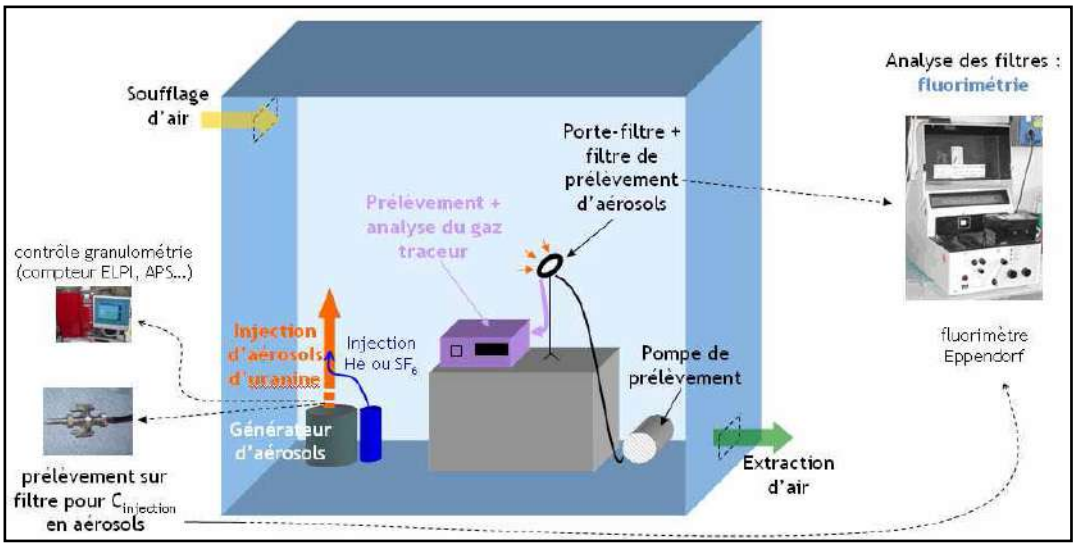


Fig. I.4: Schéma de principe des expériences de traçage gazeux et particulaire [2].

I.3.5. Synthèse bibliographie

La plupart des essais effectués afin de déterminer un benchmark utilisé pour valider un tel modèle numérique ou analytique afin de quantifier le phénomène du transfert des polluants. À travers une synthèse des travaux antérieurs qui nous étaient examinés aux deux milieux ambiants, nous pouvons citer quelques de ces travaux :

a. Milieu atmosphérique (ouvert)

Martin (1965) [8]: il a mesuré sur terrain la diffusion du panache dans des points auprès de sol dans la direction de vent. Il a comparé ces résultats mesurés avec les valeurs simulées par la soufflerie, a constaté qu'en l'absence de rabattement du panache, les données de terrain concordaient avec les concentrations moyennes en soufflerie. Ensuite dans cet axe de recherche, arrivent après lui plusieurs travaux de prélèvements de mesures expérimentales tels que les travaux de recherche effectuée par Petersen en 1986, Alluine et al. en 1980, et Bachlin et al. en 1991 [10] [11] [12]. Par exemple Start et al. en 1977, ils ont conclu que les résultats trouvés par la soufflerie dépassent les valeurs de concentration sur terrain d'un facteur de 1.7 en moyenne.

Higson *et al*. (1994) [13] ont effectué des expériences au gaz traceur avec une cheminée placée à diverses distances au vent d'un petit bâtiment mobile, pour ensuite comparer les résultats aux données de soufflerie. Ils ont constaté que les concentrations maximales étaient généralement surestimées lors des essais en soufflerie, alors que les concentrations minimales étaient sous-estimées. Cela suggère que le panache en soufflerie était plus étroit que le panache sur le terrain en raison de l'absence de turbulence à grande échelle dans la soufflerie [14][15].

Krysta M. (2004) [16] a effectué des expériences sur soufflerie pour simuler le rejet du contaminant radioactif à travers la cheminée du réacteur nucléaire du Bugey en France et a utilisé l'éthane comme traceur. Il a supposé que le rejet a eu lieu dans un écoulement turbulent stationnaire et négligé la disposition des polluants. Dans sa comparaison, il trouve que les concentrations mesurées sur terrains aux proximités du rejet dépassent largement celles qui ont été modélisées.

VENDEL F. (2011) [3] a réalisé des expériences dans une soufflerie pour traiter la dispersion atmosphérique autour d'obstacles complexes afin de modéliser le site de la raffinerie de Feyzin. Il a utilisé l'éthane (C_2H_6) comme gaz traceur puisque sa densité est proche de l'air. Pour le

traitement de la turbulence dans le cas numérique, a utilisé k-ε standard corrigé. Dans sa comparaison, les profils de concentration simulés sont légèrement sous-estimés par rapport à ceux trouvés par l'expérimentale et ne dépasse pas d'une erreur de 20%.

b. Milieu confiné (fermé)

Cheong K.W.D. el al. (2003) [17]**:** Ils ont étudié expérimentalement la dispersion des contaminants dans un environnement, l'expérience a été menée dans un bureau pour deux configurations, la première disposition comporte deux postes de travail situés au milieu de la pièce et séparés par une partition de bas niveau, tandis que la disposition 2 a une partition de niveau bas qui sépare la salle en deux moitiés avec un poste de travail à chaque coin. Le contrôle de température et de débit du bureau est assuré par un système de climatisation de ventilation. L'émission du contaminant a été générée par une injection constante de gaz traceur, hexafluorure de soufre (SF6), par une surface de 280 mm x 200 mm pour représenter la source plane. La concentration de contaminant dans la chambre pour les deux configurations a été mesurée et simulée à l'aide d'un analyseur de gaz. Ils ont observé que le diagramme de dispersion du contaminant était fortement dépendant du champ d'écoulement de vitesse. La disposition des meubles a influé sur le profil du flux d'air et la distribution des contaminants dans le bureau. Dans l'ensemble, la disposition (1) était meilleure que la disposition (2) avec un niveau plus faible de contaminant dans les zones de respiration de l'occupant.

Bouilly et al. (2005) [18]**:** Ils ont présenté dans ces travaux expérimentaux, une méthode d'évaluation du taux de dépôt global, à savoir un suivi de l'évolution de la décroissance de concentration, celle-ci étant supposée homogène dans tout le local. Les vitesses de dépôt expérimentales obtenues par Bouilly et al. sont comparées à des courbes obtenues lors d'études expérimentales antérieures [19] [20]. Les différents résultats sont globalement en bon accord, particulièrement lorsque le taux de renouvellement est faible.

Chen et al. (2006) [9]: Ils ont comparé des résultats numériques et expérimentaux obtenus dans une enceinte ventilée de très faible volume (< 1 m^3). La partie expérimentale consiste à mesurer la concentration en particules de 10 μm pour différents points situés sur le plan central de la salle (figure I.3), 27 points de mesures pour chaque régime de l'écoulement d'air. Pour cette expérience, pour la partie de mesure, ils ont utilisé la technique optique à travers l'instrument « Phase Doppler Anemomtry (PDA) ». Cette technique permet également d'effectuer des mesures de concentration des particules et ainsi la vitesse de fluide. Les aérosols utilisés sont des billes de verre pour les mesures de concentration des particules et des gouttelettes d'huile pour les mesures de distribution de vitesse d'air. Dans ses comparaisons à trouver certains compromis entre les deux résultats. À travers les résultats expérimentaux trouvés, plusieurs chercheurs ont utilisé comme un benchmark pour valider et sélectionner le meilleur modèle numérique développé pour l'utiliser dans la cartographie spatiotemporelle de concentration des polluants dans un milieu confiné ventilé.

Lai et al. (2008) [21]: De la même manière de l'expérience réalisée par Chen et al., et de même géométrie de simulation, sauf que Lai et al. ont divisé la salle en deux zones séparées. La circulation de l'air s'effectue du primaire vers la deuxième zone à travers une ouverture (figure I.5). A travers l'instrument PDA, ils ont mesuré des profils verticaux de concentration de particules à plusieurs positions axiales et ainsi aux deux zones. Son but est de comparer ces mesures à des résultats numériques et de visualiser l'effet de paroi de séparation sur la dispersion des particules.

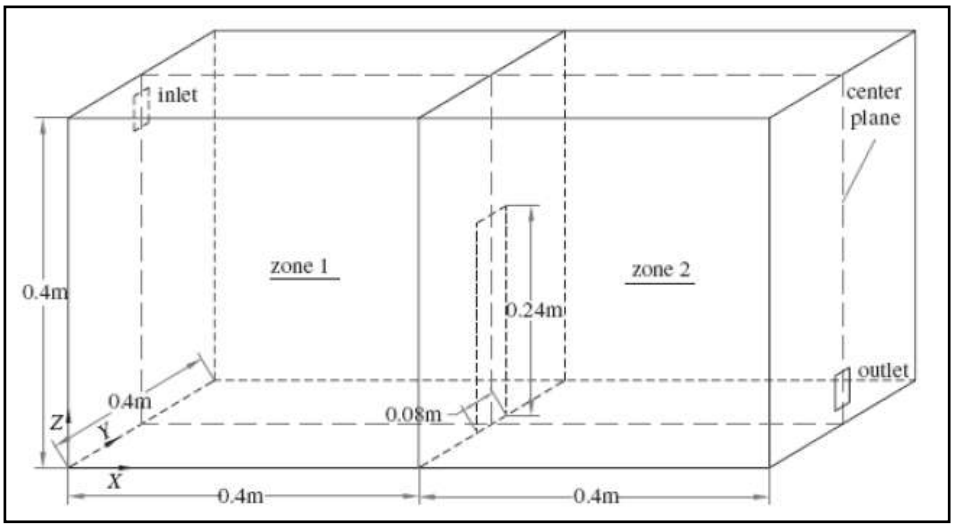


Fig. I.5 : Schéma du domaine de simulation expérimentale [18]

Hanhui J. et al. (2009) [22]: Ils ont étudié expérimentalement la dispersion de particules dans une maquette d'une chambre ventilée. Ils ont effectué leurs travaux pour plusieurs configurations, trois configurations pour positions de section d'extraction d'air, cinq groups de différents diamètres de particules, deux régimes d'écoulement d'air (0,5 et 1,5 m/s). Par ces résultats, ils ont montré que :

- Le temps de dispersion des particules est influencé par la position de section d'extraction ;
- Le temps de dispersion diminué si on augmente le diamètre de particules ;
- Lorsque la vitesse d'écoulement du gaz est élevée, le taux de temps de dispersion des particules est indépendant de la taille des particules
- Mais lorsque la vitesse d'écoulement du gaz est faible, la taille des particules peut affecter significativement le taux de temps de dispersion des particules.

I.4. Dispersion par l'approche numérique

Le calcul numérique généralement devient un outil indispensable pour le traitement ou la quantification d'un tel phénomène, et particulièrement, occupe une place majeure pour la lutte contre la pollution et la réduction des émissions. Puisque dans les problématiques de la pollution industrielle se situe à plusieurs niveaux (surveillance de sites, outil d'aide à la décision, classification des zones d'activités, …). Cet outil apparait en seconde position par rapport aux mesures, les deux approches d'estimations de concentrations sont importantes pour les pouvoirs publics, mais aussi pour les exploitants de sites industriels. Depuis les dernières années, ce type de modélisation a beaucoup progressé, profitant des améliorations de l'informatique et des modèles météorologiques. À travers une analyse d'études antérieures, les majorités de ces travaux utilisent dans sa modélisation de dispersion l'un des modèles suivants :

- Modèles gaussiens : solution analytique ;
- Modèles hybrides ;
- Modèles tridimensionnels (CFD).

Théoriquement, la dispersion des polluants est un phénomène qui peut être modélisé et simulé, sur la base de la théorie de mécanique des fluides. Des détails et les formalismes de ces modèles seront traités dans le chapitre (II).

I.4.1. Milieu ouvert (atmosphérique)

La simulation numérique est parmi les outils d'évaluation de la dispersion des polluants dans les zones urbaines qui nécessitant la compréhension de la météorologie de la pollution atmosphérique

et ainsi l'aérodynamique urbaine. La prédiction de la dispersion des polluants par voie déterministe, dans les études antérieures, principalement reposée sur des formules semi-empiriques ou des simulations fondées sur la mécanique des fluides numérique (CFD).

- **Modèles analytiques**

Ce modèle est un outil de base en matière de la dispersion, le plus couramment utilisé et notamment pour les raisons suivantes [7] :

- Produire des résultats concorde bien avec les données expérimentales ;
- Facile à utiliser ;
- Compatible avec la nature aléatoire de la turbulence.

Par contre, ce modèle ne tient pas compte des facteurs géométriques propres à un emplacement donné, lesquels peuvent considérablement modifier le comportement du panache, cette approche n'est donc pas applicable aux bâtiments complexes ou en présence de bâtiments avoisinants, comme c'est le cas en milieu urbain.

La société American "ASHARE" des systèmes de ventilation et conditionnement d'air recommande le modèle Gaussien spécifique à cette dernière (modèles de dispersion d'ASHRAE) pour l'analyser de la dilution du panache, l'influence de la hauteur et l'emplacement des cheminées.

- **Modèles CFD**

Les modèles CFD produisent simultanément des résultats relatifs aux caractéristiques d'écoulement à tous les points dans l'espace. Fondée sur la physique fondamentale, les modèles CFD sont utilisés dans un large éventail applications de recherche fondamentale et d'applications pratiques [12]. De plus, bien que les travaux soient similaires, on rencontre d'un autre à l'autre une diversité dans le choix des modèles pour le traitement de l'effet de la turbulence et de la phase dispersée, comme le montre le tableau (I.1).

Tableau. I.1 : Récapitulatif de travaux sur la dispersion atmosphérique par voie numérique.

Référence	**Simulation de la phase continue**	**Modélisation de la turbulence**	**Simulation de la phase dispersée**	**Condition aux limites**	**Nature des travaux**
Glockner S. (2000) [23]	Eulérien	k-ε standard, RNG et v^2f	Lagrangien	--	Modélisation de la pollution atmosphérique dans les villes.
Vinkoic I. (2005) [24]	Eulérien	LES	Lagrangien	--	Dispersion et mélange turbulent des particules par LES
Davidson M. et al. (2005) [25]		Ecarts types	Solution analytique	--	Dispersion de tritium dans le PBL de la centrale nucléaire d'Angra (I)
Sharan M. et al. (2006) [26]		Ecarts types	Solution analytique	Profil logarithmique de vitesse	Dispersion d'un panache par modèle bidimensionnel
Shi R.F. et al. (2008) [27]	Eulérien	LES	Eulérien	Profil de vitesse	Simulation LES d'un panache de rejet
Gousseau P. et al. (2010) [28]	Eulérien	LES et k-ε standard	Eulérien	Profil de vitesse	Dispersion des polluants au champ proche du centre-ville de Montréal

I.4.2. Milieu confiné (fermé)

Les travaux présentant le transfert des polluants en milieu ventilé s'inscrivent généralement dans des projets d'amélioration de la qualité de l'air dans l'habitat et classification des zones d'activités en cas de fuite [29] [30]. La plupart des travaux pratiquement similaires utilisent les modèles CFD pour sa modélisation, la diversité rencontrée d'un travail à l'autre est résumée au choix des modèles des traitements de l'effet de la turbulence et de la phase dispersée, comme le montre le tableau (I.2).

Tableau. I.2. Récapitulatif de travaux réalisés antérieurement pour milieu confiné

Référence	**Modélisation de la turbulence**	**Simulation de la phase dispersée**	**Condition aux limites**	**Nature de travail**
Murakami S. et al. (1992) [31]	K-ε standard	Eulérien	-Vitesse et concentration à l'entrée -d_p <10µm	Diffusion des particules en tenu compte l'effet de sédimentation gravitationnelle
Posner J.D. et al. (2002) [32]	Laminaire, K-ε standard et RNG	Lagrangien	--	Mesure et prédiction de la qualité de l'air.
Srebric J., et al. (2003) [33]	K-ε standard et RNG	lagrangien	-Taille de la source - Flux de chaleur -Forme et taille des personnes.	L'influence des conditions aux limites sur la dispersion des contaminants.
Tian Z.F. et al. (2006) [34]	K-ε standard RNG et LES.	Lagrangien	U de 0.235 m/s	Analyse de concentration de particules dans un flux d'air
Zhang Z. et al. (2006) [35]	K-ε standard	Lagrangien	d_p <0.1µm, Débit de 0.0944 m/s et C_0 de 912 kg/m^3 Deux sources et 4 personnes	Analyse du transport des particules dans une salle.
Zhang T.F et al. (2007) [36]	RNG	--	--	Identification d'une source de contaminant dans une surface fermée par la méthode inverse.
Inthavong K. et al. (2008) [37]	RNG et K-ε standard	Lagrangien	--	Effet de la position du système de ventilation sur la décontamination des postes de travail en bois
Lin Tian et al. (2010) [38]	RNG et K-ε standard	Eulérien	--	Diffusion des contaminants gazeux sous effet de la ventilation de l'air frais.
Webber D.M., et al. (2011) [39]	--	Analytique (conservation de masse)	U de 0.5 m/s Débit de sortie 112.5 m^3/s.	Dispersion appliquée au classement des zones
Wang M. et al. (2011) [40]	RNG, K-ε standard, LES et DES	Lagrangien	Taux de déposition des particules (conservation de masse)	Détermination de la déposition de particules aux parois
Wang M. et al. (2012) [41]	RANS, URANS, LES et DES	Eulérien et Lagrangien	--	Influence des modèles de turbulence sur le transport de particules.

I.5. Dispersion par méthodes de l'intelligence artificielle

Les réseaux de neurones artificiels sont très peu utilisés en dispersion des polluants que ce soit dans l'atmosphère ou dans des zones confinées, malgré qui a prouvé son efficacité dans d'autres disciplines telles que l'aéronautique, chimie, traitement des eaux, etc. Mais son utilisation nécessite des bases des données riches en valeurs ou prédiction réelles de la dispersion avec différents paramètres de mode opératoires dans laquelle effectuer la dispersion. Différentes

initiatives ont permis d'appliquer les réseaux de neurones à la dispersion atmosphérique accidentelle. La plupart des applications des ANN en dispersion atmosphérique ou en météorologie sont limitées à un phénomène très particulier, concentration en un point, valeur maximale journalière d'une concentration [42] [43], prédiction de phénomènes violents (tornades)…[44]. La majorité de ces travaux traitent la dispersion par cette voie, sont des initiations aux développements des mèta-modèles afin de lier les paramètres de mode opératoire avec le résultat de l'expérience de phénomène de la dispersion [45]. À travers une synthèse des travaux antérieurs qui nous étaient examinés aux deux milieux ambiants, nous pouvons citer quelques travaux :

a. Milieu atmosphérique

Boznar et al. (1993) [46]: ils Proposent une méthode de prédiction à court terme de concentrations dans l'environnement de sites industriels. Ils utilisent de stations de mesures du polluant (SO_2) à intervalle de temps donné, ainsi que d'autres paramètres reliés aux conditions météorologiques afin de prédire la concentration en un point, pour un intervalle de temps variable (régime transitoire). Les résultats prédits montrent une bonne prévision des pics de polluants. Mais sans traité les résultats de la distribution.

Pelliccioni et al. (2006) [47] : Ils proposent un couplage entre la solution analytique Gaussienne et le réseau neural artificiel. Ils ont déterminé les écarts-types de la solution Gaussienne à travers d'un développement du modèle ANN pour prédire l'effet de la turbulence en fonction des différents paramètres métrologiques du milieu atmosphérique. De cette manière, une amélioration des performances du modèle couplé gaussien "ANN" par rapport au modèle gaussien seul et le modèle développé permet d'obtenir une prévision selon l'axe principal de dispersion.

Cao (2007) [48] utilise les réseaux de neurones afin de déterminer le déplacement d'un nuage d'aérosols dans les trois dimensions de l'espace. La prévision est effectuée directement à partir des entrées du réseau de neurones. On distingue trois catégories dans les entrées proposées. Les éléments relatifs à la source, aux conditions météorologiques et à la sortie désirée. Dans le cadre de cette étude, la base de données du phénomène est réalisée à partir de données expérimentales. Les prévisions de concentrations de ce modèle sont de l'ordre de grandeur de celles des modèles gaussiens.

Lauret P. (2014) [4]**:** Il utilise les réseaux de neurones artificiels et les automates cellulaires pour prédire la dispersion d'une source de méthane en champ atmosphérique d'un site industriel à un écoulement stationnaire. L'apprentissage du réseau neural est effectué à travers une base de données déduite par des valeurs simulées par modèle tridimensionnel "CFD". La validation globale du modèle développé est effectuée à travers les résultats simulés par CFD. La crédibilité de ce modèle reste à voir à raison que le modèle apprenti par le modèle CFD et ainsi validé par le même modèle. Plus l'absence des profils de la distribution spatiale de concentration, mais entre seulement aux détails de la phase mise en œuvre sans une procédure claire pour la préparation et l'optimisation de ce modèle ANN.

b. Milieu fermé

Hoque S. et al. (2011) [49]: ils fondent un méta-modèle basé issu du réseau neuronal artificiel (ANN) pour cartographier entre les paramètres de mode opératoire et les résultats d'une expérience. Ils ont utilisé les valeurs simulées par modèle tridimensionnel "CFD" aux bases de données d'apprentissage et de test du modèle ANN. Après la prédiction du modèle, ils ont montré à travers ce modèle développé que la position des sections d'entrée et de sortie d'air selon la

hauteur de la salle a plus d’impact que les autres paramètres de mode opératoire sur le comportement de polluant.

I.6. Conclusion

A travers cette étude bibliographique développée dans ce Chapitre, elle mit en relief la grande diversité des méthodes pour suivre le transfert des polluants dans un milieu ambiant que ce soit aux milieux ouvert ou confiné. Peu d'études de dispersion sont réalisées par l’approche expérimentale à cause de son coût de réalisation de côté matériel, main-d’œuvre, transport et temps d’exécution. Une diversité des études antérieures utilise la voie numérique, les solutions analytiques et les modèles tridimensionnels "CFD". Les solutions analytiques (Gaussiennes) sont rapides de modéliser la dispersion dans un milieu ouvert (atmosphérique) à partir d’équations paramétrées et simplifiées. De fait général, la qualité de ce type de modèle est conditionnée par les éléments suivants :

- Direction et la vitesse du vent constantes ;
- Absence de reliefs et d’obstacles (murs, bâtiments, …) ;
- Distances Limites en général supérieures à 100 m et inférieures à 10 km ;
- Masse volumique de polluant dispersé est très proche de milieu porteur.

Pour les modèles tridimensionnels, CFD permet de simuler le transfert des polluants dans un milieu ambiant (ouvert ou fermé) en tenant en compte de l’ensemble des phénomènes intervenant de façon significative sur la dispersion, qu’ils soient liés à l’atmosphère comme la turbulence thermique, ou au site comme les obstacles ou le relief. Ce type d’approche basé sur la résolution des équations de la mécanique des fluides d’ordre général, non simplifié. Mais ces modèles sont très lourds de côtés temps d’exécution et nécessitent un professionnalisme dans son utilisation.

Peu d'études antérieures utilisent la méthode de l’intelligence artificielle pour modéliser la dispersion des polluants. Mais cette méthode a prouvé son efficacité dans d’autres disciplines qui encouragent les chercheurs de participer à son développement à cause de sa rapidité, ainsi que de donner à nous un benchmark de données large pour la validation des modèles déterministes (solution analytique, modèle CFD) de phénomène de la dispersion. En plus cette méthode, ne nécessite pas un professionnalisme dans les simulations des écoulements à son application.

Afin de déterminer la précision des modèles utilisés, avec la considération de son temps d’exécutions qui doit être rapide si possible, nous effectuerons un développement des modèles pour quantifier la dispersion des polluants et ses applications. Ces modèles développés sont issus des méthodes suivantes :

- Solution analytique Gaussienne ;
- Fluide dynamique numérique "CFD" ;
- Intelligence artificielle : Réseau neural.

CHAPITRE II

Modélisation de la dispersion

La modélisation des effets des phénomènes dangereux a 2 objectifs. Elle permet certes d'évaluer les distances d'effets demandées par la règlementation dans une étude de dangers de dispersion (EDD), mais aussi de conforter les choix techniques (par exemple la conception d'un réseau de capteurs, nombre et positionnement d'une chaine de détection de fuite). La figure II.1 illustre les démarches nécessaires pour analyser et modéliser le phénomène d'une dispersion des polluants [51].

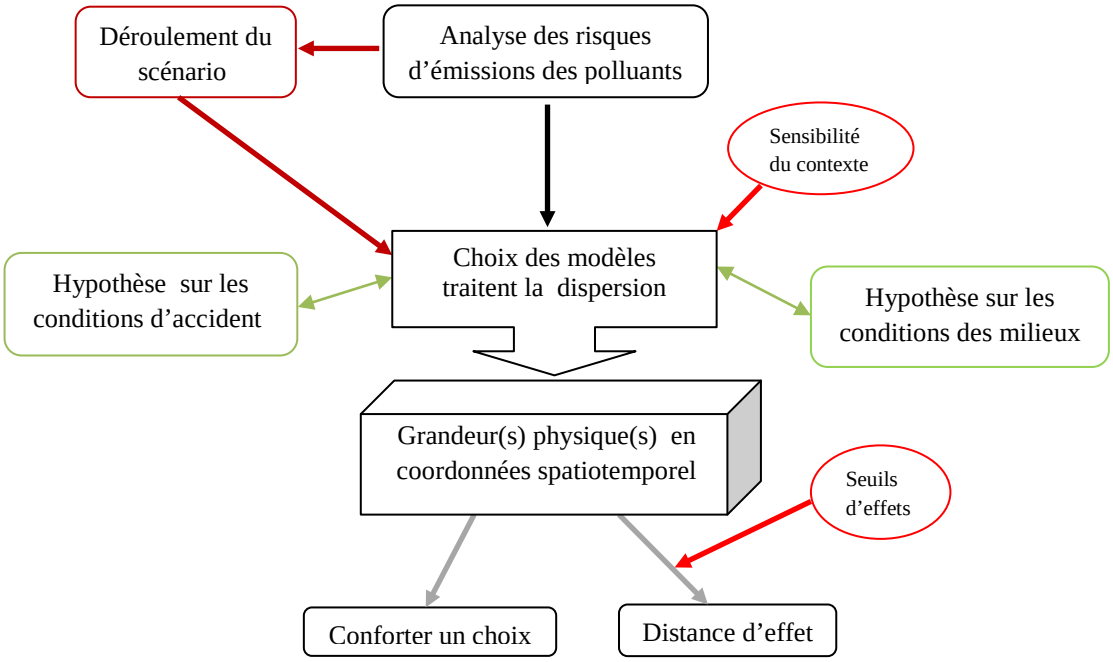


Fig.II.1 : Organigramme des étapes d'une modelisation d'EDD [52]

La modélisation des effets d'un phénomène de pollution comprend trois parties ou composantes, à savoir les modélisations du terme source, de la propagation de cette source dans le milieu ambiant et ses effets sur les cibles.

La dispersion des polluants caractérise ou défini le devenir dans le temps et dans l'espace d'un ensemble des polluants (aérosols, gaz, poussières) rejetés dans un milieu ambiant. L'émission des polluants dans le milieu peut revêtir un caractère [4]:

- Soit chronique, avec des émissions de pollution plus ou moins continus ou périodiques dans le temps ;
- Soit accidentel, avec des émissions ponctuelles dans le temps ; non désirées comme la fuite d'une cuve ou un dégagement de fumées dû à un incendie.

II.1. Modélisation de la dispersion

La modélisation de la dispersion des produits rejetés dans un milieu ambiant, est un outil fréquemment utilisé pour connaitre la distribution spatio-temporelle des polluants que soit radioactif ou passif. Cette connaissance est très utile pour aider les gens travaillent dans ce

domaine à la discussion. La dispersion d'un produit rejeté dans un milieu ambiant dépend essentiellement :

- Des caractéristiques de la source d'émission (énergie cinétique, direction du rejet, densité du produit rejeté, durée de la fuite, conditions de la fuite, …) ;
- Des conditions météorologiques du milieu comme la vitesse du vent, la stabilité de l'atmosphère, l'hygrométrie, la température ambiante ;
- Des conditions orographiques, c'est-à-dire essentiellement l'état de rugosité du sol qui varie selon qu'il s'agisse d'un champ cultivé, d'une forêt, d'une zone industrielle, …

Dans notre étude en supposant que les paramètres de caractérisation de termes sources sont connus, et nous évaluons le transfert de ces substances dans le milieu que ce soit l'atmosphère ou l'environnement intérieur. La distribution de concentration d'une substance rejeté dans un milieu ambiant en coordonnées spatiotemporelle est définit par :

$$C(x_i, t) = \frac{masse\ de\ la\ substance}{volume\ du\ fluide\ (mélange)} \qquad \text{II.1}$$

Avec :

x_i : Les cordonnées spatial de point de prélèvement ;
t : Le coordonné temps de point de prélèvement.

Pour la concentration définie par de nombreuses unités : particule/m^3 ; mol/m^3 ; mg/m^3. Mathématiquement la concentration moyennée des polluants dispersés dans un milieu ambiant quelconque est gouvernée par la relation suivante :

$$\bar{C}(x_i, t) = Q(t).T(x_i, t) \qquad \text{II.2}$$

Avec :

$\bar{C}(x_i, t)$: Concentration moyenne des polluants en coordonnés spatiotemporels, en g/m^3
Q(t) : Quantité des sources émises par unité de temps, en g/s ;
$T(x_i, t)$: Fonction transport des polluants dans le milieu ambiant (milieu ouvert ou fermé).

La quantité déposée (en g) par unité de surface et de temps est défini par la relation suivant :

$$Q_d(x_i, t) = v_d(x_i, t).\bar{C}(x_i, t) \qquad \text{II.3}$$

Ou :

$v_d(x_i, t)$: Vitesse de la déposition des contaminants sur les parois, en m/s.

D'après l'équation (II.2), la détermination de concentration spatiotemporelle est définie par l'identification ou la résolution de la fonction du transport et ainsi la fonction des pertes (flux de déposition).

La difficulté de déterminer la concentration ou de modéliser la dispersion d'un produit dans un milieu ambiant puisqu'il dépend de plusieurs mécanismes physicochimiques. Afin de visualiser les différents paramètres influençant sur le mode de la dispersion, nous schématisons graphiquement sur la figure (II.2), les processus de dépôt de polluants pour un cas général d'une dispersion atmosphérique due à une source d'émission que ce soit naturel ou anthropogéniques.

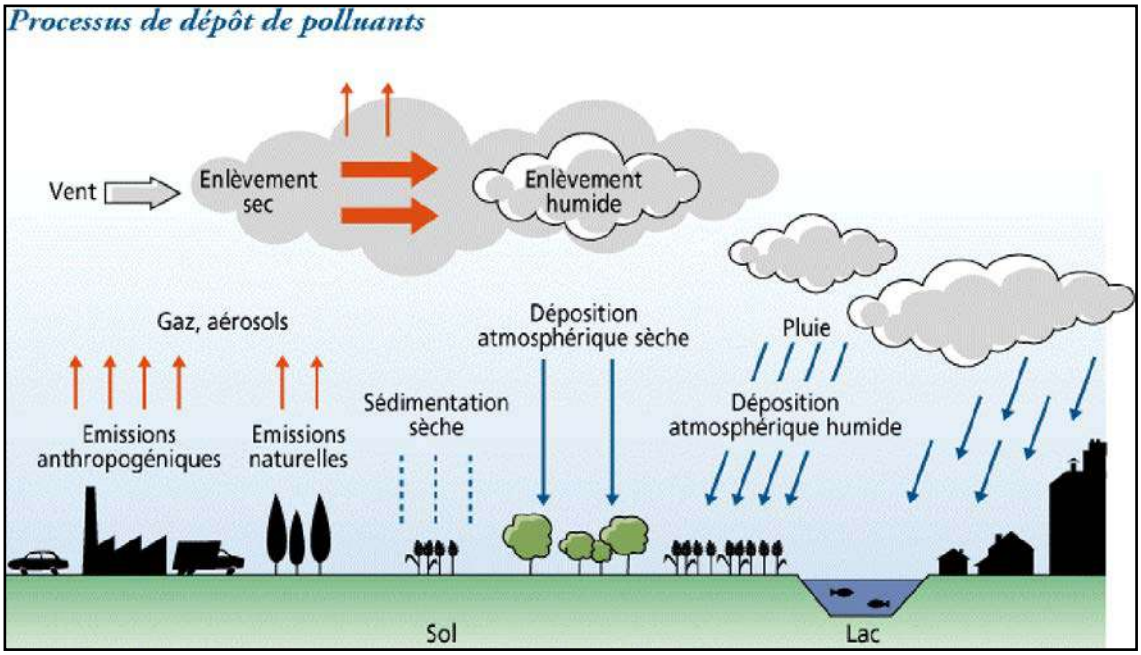


Fig. II.2 : Schéma représentatif de différents mécanismes physiques influençant sur la dispersion [7]

Les outils de modélisation à différentes échelles sont nécessaires afin, par exemple, de mieux comprendre les processus physico-chimiques à l'origine de la pollution atmosphérique d'ordre globale, mais aussi pour prévoir les pics de pollution.

II.2. Différentes approches de modélisation de la dispersion

Pour modéliser un phénomène de dispersion, nous pouvons différencier deux types d'approches : la modélisation statistique (empirique) et la modélisation déterministe.

- ✓ **La première approche**, repose sur la formulation des mécanismes physiques, chimiques et sur la résolution numérique des équations, basées sur les lois physiques (lois de la thermodynamique, mécanique des fluides, etc.). Elles régissent les mécanismes commandant le phénomène en question. Le développement de ces modèles nécessite donc une compréhension la plus détaillée possible des processus impliqués. Dans le cas d'un polluant tel que les particules, qui plus est dans un environnement topographique marqué et aussi à proximité immédiat des sources, les processus physiques impliqués sont à la fois d'une grande complexité et non complètement connus.
- ✓ **La seconde approche** emploie un panel de données décrivant les variables déterminantes du système (mesures des concentrations, estimation des émissions, observations météorologiques…) dans une équation de type régression linéaire (ou délinéarisée), sans faire intervenir les équations chimiques et physiques d'évolution du milieu.

II. 3. Modélisation par l'approche déterministe.

Le principe de base est que, théoriquement, la dispersion des polluants est un phénomène qui peut être modélisé et simulé, sur la base de la théorie de la mécanique des fluides. Quand l'environnement atmosphérique est plus complexe, en cas de conditions météorologiques complexes ou quand le polluant est mal connu, la modélisation devient plus difficile, mais les techniques modernes, issues des modèles existants, une fois mis en œuvre, peuvent permettre de prévoir de plus en plus la manière fiable de disperser les polluants dans le milieu ambiant c'est-à-dire à estimer, à prédire la direction des vents et la concentration de polluants atmosphériques ou

de toxines provenant des sources polluantes. Le phénomène de la dispersion atmosphérique est gouverné essentiellement par le mécanisme des écoulements atmosphérique et les conditions de terme source, par la complexité du milieu atmosphérique (ouvert), plusieurs paramètres gouvernant l'écoulement atmosphérique.

II.3.1. Mécanisme des écoulements atmosphériques

II.3.1.1. Caractéristiques générale de l'atmosphère

L'atmosphère terrestre est une couche de gaz entourant notre planète. Elle est décomposée en plusieurs sous-couches, chacune ayant des particularités qui lui sont propres. Le champ de pesanteur, orienté selon la verticale, a tendance à organiser l'atmosphère en couches stratifiées verticalement, dont les limites ont été définies selon les discontinuités dans les variations de température, en fonction de l'altitude [3][53] [54]:

- **La troposphère** : Cette couche correspond à la couche la plus basse. Elle englobe la partie allant du sol à 8 à 15 km de hauteur. Son profil de température décroît en fonction de l'altitude. Elle contient 80 à 90% de la masse totale de l'air et la quasi-totalité de la vapeur d'eau. A l'intérieur de cette couche où se produisent les phénomènes météorologiques (nuages, pluies, etc.) et les mouvements atmosphériques horizontaux et verticaux (convection thermique, vents).
- **La stratosphère :** Il s'agit de la couche juste au-dessus, de 15 à 50 km d'altitude. La température suit un profil inverse au précédent, dû à la captation du rayonnement UV par la couche d'ozone.
- **La mésosphère :** Le profil de température décroit de nouveau avec l'altitude de 50 à 80 km.
- **La thermosphère :** Le profil de température s'inverse de nouveau et l'altitude de 80 à 350km.
- **L'exosphère** : Il s'agit de la couche la plus haute de l'atmosphère. Elle couvre la zone où les particules sont encore attirées gravitationnellement à la Terre. Elle s'étend jusqu'à 50000 km d'altitude.

L'illustration graphique de la figure II.3 reprend les données des énoncés mentionnés ci-dessus.

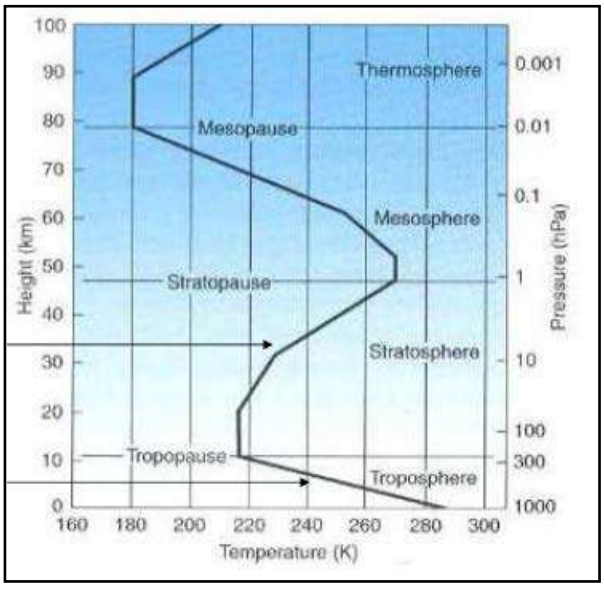


Figure II.3 : Schéma structurel de l'atmosphère terrestre et son profil de température [53]

II.3.1.2. Mouvement de l'air atmosphérique

La circulation générale de l'air atmosphérique est le mouvement à l'échelle planétaire de la couche d'air entourant la Terre. D'un point de vue dynamique, les mouvements convectifs ainsi créés sont soumis à deux forces. La première, la force de Coriolis, est directement liée à la rotation de la Terre et dévie, en altitude, les trajectoires de ces masses d'air. Quant à la deuxième, c'est une force de frottement qui se manifeste au contact du sol et qui a pour conséquence un ralentissement du mouvement. L'influence relative de ces deux forces sur le mouvement de l'air atmosphérique permet alors de distinguer deux zones au sein de l'atmosphère [54] :

- L'atmosphère libre, zone à partir de laquelle les effets du frottement de l'air sur la surface de la Terre deviennent négligeables devant ceux produits par la force de Coriolis ;
- La couche limite atmosphérique qui est située au voisinage du sol. Dans cette zone, le frottement devient progressivement prépondérant par rapport à la force de Coriolis.

La couche limite atmosphérique (CLA) est la partie de l'atmosphère la plus proche du sol et dans laquelle les effets de la force de Coriolis s'estompent petit à petit en faveur des forces de frottement dues à l'influence du sol, lorsque l'on se rapproche de ce dernier. Ainsi, à l'intérieur de la CLA les mouvements de l'air atmosphérique sont fortement perturbés par les discontinuités qu'impose la surface terrestre. Par exemple, les effets du relief et des obstacles génèrent l'apparition de perturbations qui peuvent se propager jusque dans l'atmosphère libre (onde de relief, déferlement de pente, etc.). En fonction de sa position auprès de sol, la couche limite atmosphérique devient une partie privilégiée à l'étude lorsqu'on s'intéresse aux interactions entre l'atmosphère et les activités humaines.

i. Couche limite atmosphérique (CLA)

La couche limite atmosphérique (CLA) est la partie de l'atmosphère la plus proche du sol et dans laquelle les effets de la force de Coriolis s'estompent petit à petit en faveur des forces de frottement dues à l'influence du sol, lorsque l'on se rapproche de ce dernier. Ainsi, à l'intérieur de la CLA les mouvements de l'air atmosphérique sont fortement perturbés par les discontinuités qu'impose la surface terrestre.

D'un point de vue assez général, l'épaisseur de la couche limite atmosphérique est comprise entre 100 et 2000 m. Pour étudier la CLA, on considère que sa structure est uniforme horizontalement et qu'elle peut être divisée en trois couches, représentées sur la Figure II.4.

- La couche de transition d'Ekman, dans la partie supérieure, à l'intérieur de laquelle les effets du frottement sur le sol et de Coriolis s'équilibrent ;
- La couche limite de surface (CLS), dans la partie la plus proche du sol. Elle est définie comme la région où la température diminue rapidement avec l'altitude pendant la journée, et où les flux de quantité de mouvement, de chaleur sensible et latente sont conservatifs et égaux à ceux du sol. Les propriétés dynamiques et turbulentes y sont homogènes horizontalement, et la force de Coriolis négligeable devant les forces de frottement dues au sol ;
- La canopée, zone dans laquelle l'effet individuel des obstacles (microrelief, bâtiments, arbres) peut être mis en avant.

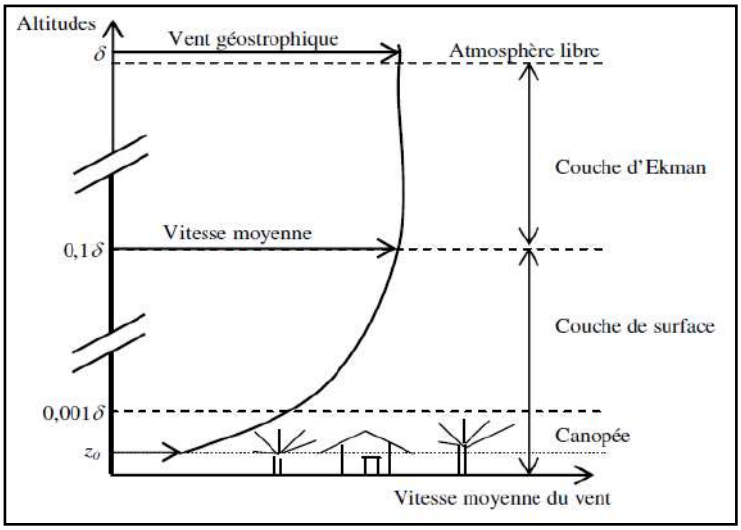


Figure II.4 : Structure de la couche limite atmosphérique [55]

ii. Echelle des mouvements atmosphériques

Dans les paragraphes précédents, nous avons présenté la structure verticale de l'atmosphère et les différentes couches la composant. Pour la suite de ce travail de recherche, il est important de connaître les tailles caractéristiques des domaines que nous aurons à utiliser. Cette limitation spatiale du domaine d'étude nous permettra de nous focaliser sur la ou les couches atmosphériques et d'en présenter minutieusement les propriétés afin de comprendre les différents mécanismes.

Par conséquent, la plupart des rejets se feront près du sol ou au niveau de cheminées que l'on peut trouver sur ces sites (cheminées rejetant du SO_2 sur les raffineries par exemple). Ainsi, de manière très générale, les rejets de polluants que l'on peut trouver dans le monde industriel se situent au maximum à une altitude de l'ordre de la centaine de mètres. Le paragraphe précédent propose une épaisseur de l'ordre de 1000 m pour la couche limite atmosphérique et plus précisément, de l'ordre de la centaine de mètres pour la couche limite de surface. Ainsi, la plupart des rejets de polluants se situent dans la couche limite de surface.

Les complexes industriels et leurs alentours que nous étudierons sont des domaines qui peuvent atteindre plusieurs kilomètres carrés et par conséquent la dispersion du polluant se fera sur des distances de l'ordre du kilomètre. Il est alors intéressant de fournir un ordre de grandeur sur la dispersion verticale d'un panache sur de telles distances. On trouve dans la littérature (Briggs, 1973) des abaques permettant le calcul d'écarts-types et même si la dispersion de polluant dépend de nombreux paramètres tels que l'état de stabilité atmosphérique ou du type de sol (dégagé, urbain), on peut trouver un ordre de grandeur nous permettant de limiter l'étude de la dispersion jusqu'à une certaine altitude [50].

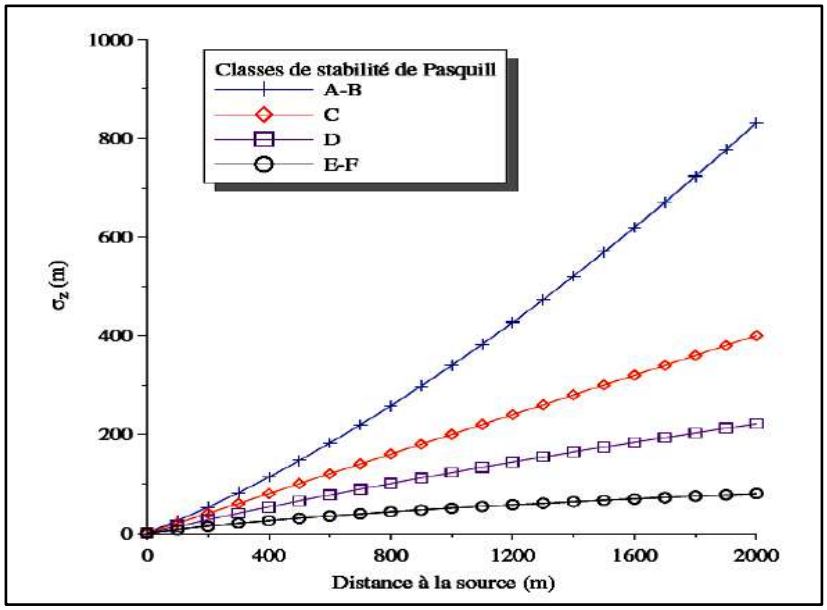


Figure II.5 : Evolution de l'écart-type vertical en fonction de la distance à la source pour différents états de stabilité [56]

La Figure II.5 montre que sur une distance d'un kilomètre, la dispersion verticale d'un panache est principalement inférieure à 500 m, quel que soit l'état de stabilité de l'atmosphère. Cet ordre de grandeur permet de fixer par avance une hauteur de domaine pour les études numériques qui suivront. En général, lors des futures études que nous devrons réaliser par la suite, nous choisirons des domaines dont la hauteur ne dépasse pas quelques centaines de mètres, nous assurant ainsi de caractériser la plupart des panaches sur un site complexe. De plus, on peut noter que lorsque l'atmosphère sera instable, la hauteur caractéristique de dispersion et la hauteur de la CLS augmenteront simultanément.

Outre l'aspect spatial, il est aussi nécessaire de regarder l'aspect temporel des phénomènes étudiés dans la CLS. En effet, l'écoulement dans la couche limite atmosphérique et par conséquent dans la couche limite de surface, est fortement turbulent. Une des propriétés de cette turbulence est d'être découplée des grandes variations météorologiques qui se développent à l'échelle de plusieurs jours. Par conséquent, pour un temps de l'ordre de l'heure, ce qui correspond au temps caractéristique des phénomènes étudiés dans la CLS, on pourra admettre que les variations météorologiques sont suffisamment lentes pour être considérées comme constantes (Van Der Hoven, 1957).

iii. Equations fondamentales du mouvement atmosphérique

Après la notion donnée sur la description de la CLA en ci-dessus, il convient de détailler les équations dynamiques gouvernant ce type d'écoulement. Les écoulements atmosphériques sont décrits par les équations de mécaniques des fluides de Navier-Stokes, traduisant la conservation des quantités physiques suivantes :

- De la masse, fluide incompressible qui peut être exprimée par la masse volumique
- De quantité de mouvement ;
- De l'énergie.

Le mouvement d'un fluide peut être traité ou représenté de deux façons différentes. La représentation eulérienne décrit l'évolution d'une grandeur donnée à un point d'observation fixe. La dérivée partielle (ou eulérienne) de cette grandeur est utilisée pour suivre ces variations.

La représentation Lagrangienne décrit l'évolution d'une grandeur à partir d'un référentiel correspondant à une particule dans l'écoulement. La dérivée particulaire (ou Lagrangienne) de la grandeur considérée est utilisée. Elle décrit les variations locales de cette grandeur ainsi que les modifications liées au déplacement de la particule. On lie les descriptions lagrangiennes et eulériennes par la décomposition de la dérivée particulaire qui peut être représentée par l'équation suivante [55] :

$$\frac{\mathrm{DA}}{\mathrm{Dt}} = \frac{\partial \mathrm{A}}{\partial \mathrm{t}} + (\vec{\mathrm{V}}.\,\mathrm{grad})\mathrm{A} \qquad \text{II.4}$$

Le bilan de masse du fluide sur un élément de volume (description eulérienne) s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial \mathrm{t}} + \nabla.\,(\rho \mathrm{u_i}) = 0 \qquad \text{II.5}$$

Avec :

ρ	Masse volumique	$kg.m^{-3}$
t	Temps	s
u_i	Vitesse dans la direction i	$m.s^{-1}$

La conservation de la quantité de mouvement est donnée par l'équation traduisant le principe fondamental de la dynamique de mouvement, qui peut être écrit par la forme suivante :

$$\frac{\partial(\rho \mathrm{u_i})}{\partial \mathrm{t}} + \frac{\partial}{\partial \mathrm{x_j}}\left(\rho \mathrm{u_i u_j}\right) = \rho \mathrm{f_i} + \frac{\partial}{\partial \mathrm{x_j}}\left(\sigma_{\mathrm{ij}}\right) \qquad \text{II.6}$$

Avec :

f_i Résultante des forces extérieures de volume ;
σ_{ij} Tenseur des contraintes agissant à la surface de l'élément fluide (pression, contraintes visqueuses)

Par ailleurs, le fluide étant supposé « Newtonien », la loi de comportement donnant le tenseur des contraintes visqueuses qui prend la forme suivante :

$$\sigma_{\mathrm{ij}} = \mu\left(\frac{\partial \mathrm{u_i}}{\partial \mathrm{x_j}} + \frac{\partial \mathrm{u_j}}{\partial \mathrm{x_i}}\right) - \frac{2}{3}\mu\frac{\partial \mathrm{u_j}}{\partial \mathrm{x_j}}\delta_{\mathrm{ij}} \qquad \text{II.7}$$

La résolution de ces équations est possible dans le cas des régimes laminaires, les caractéristiques étant des fonctions déterministes de l'espace et du temps (vitesses, pression, température). Cependant, il est nécessaire de s'intéresser à des aspects particuliers des écoulements atmosphériques. Osborne Reynolds a été mis en évidence en1883, un nombre sans dimension utilisé en mécanique des fluides pour caractériser un écoulement, en particulier la nature de son régime (laminaire, transitoire, turbulent). Ce nombre est défini par le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses, il est défini par l'équation suivante :

$$\mathrm{Re} = \frac{\mathrm{Ul}}{\nu} = \frac{\rho \mathrm{U} D_{\mathrm{H}}}{\mu} \qquad \text{II.8}$$

Avec :

Re	Nombre de Reynolds	---
ρ	Masse volumique du milieu	$kg.m^{-3}$
D_H	Dimension caractéristique du milieu	m
U	Vitesse de l'écoulement	$m.s^{-1}$
μ	Viscosité dynamique du milieu	$kg.m^{-1}.s^{-1}$

La couche limite atmosphérique est considérée comme turbulente, les forces d'inertie étant largement supérieures aux forces de viscosité :

Tableau. II.1 : Propriétés de l'air atmosphérique [54]

Paramètre	Valeur	Unité
Masse volumique de l'air	1,29	Kg/m
Hauteur de la couche limite atmosphérique	200 – 2 000	M
Vitesse de l'écoulement	2-20	m/s
Viscosité dynamique	$1{,}8\times10^{-5}$	kg/m. s
Nombre de Reynolds	$2{,}67 \times 10^{7} – 2{,}67 \times 10^{9}$	--

Cette turbulence d'origine mécanique est provoquée par les effets de frottements au niveau du sol. Effectivement la condition d'adhérence au contact d'une paroi amène à une stratification verticale du champ de vitesse horizontal. Par ailleurs, la turbulence d'ordre thermique peut s'y ajouter. La turbulence thermique dépend du gradient vertical de température [54].

La prise en compte de la stabilité est effectuée à partir de l'utilisation de la température potentielle θ (Kaimal et Finnigan, 1994). Cette température correspond à la température d'un volume d'air à la température absolue *T*, et à la pression *p*, ramené adiabatiquement à la pression de référence au niveau du sol. L'équation s'écrit :

$$\theta_p = T + \left(\frac{g}{c_p}\right)\Delta z \qquad \text{II.9}$$

Avec :

θ_p	Température potentielle	°K
T	Température	°K
g	Gravité	$m.s^{-2}$
c_p	Chaleur spécifique à pression constante	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
z	Altitude	m

L'équation de la température potentielle peut s'écrire sous une autre forme :

$$\frac{\theta_p}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{g}{c_p} \qquad \text{II.10}$$

Dans une atmosphère adiabatique, $\frac{\theta_p}{\partial z}$ est nulle et la stabilité est neutre. Une atmosphère stable et une atmosphère instable auront respectivement une pente positive ($\frac{\theta_p}{\partial z}$ >0) et négative ($\frac{\theta_p}{\partial z}$<0). Lorsque de l'humidité est présente de manière significative (influence sur la densité de l'air), la température virtuelle potentielle est nœuds dans la définition [4] [54] [57] :

$$\theta_v = \left(\frac{\theta}{T}\right)T_v \qquad \text{II.11}$$

$$T_v = T(1 + 0.61h_q) \qquad \text{II.12}$$

Avec :

T_v	Température virtuelle	°K
h_q	Humidité spécifique	$Kg_{eau}/Kg_{air\ sec}$

La température virtuelle est la température à laquelle l'air sec a la même densité que l'air humide à la même pression. En pratique, la différence entre température potentielle et température potentielle virtuelle est faible lorsque l'on se situe au-dessus d'un terrain.

Le lien entre stratification thermique et turbulence dynamique est effectué à travers l'introduction du nombre de Richardson de gradient *Ri*. Celui-ci permet d'évaluer la compétition entre production mécanique et thermique de l'énergie cinétique *k* :

$$Ri = \beta \frac{\partial \overline{\theta_v} / \partial z}{\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z}\right)^2} \qquad \text{II.13}$$

Avec :

β	Coefficient de flottabilité	$m.s^{-2}.K$
θ_v	Température potentielle virtuelle	°K

Le coefficient de flottabilité est défini par la relation suivante :

$$\beta = \frac{g}{\theta_v} \qquad \text{II.14}$$

Ce nombre adimensionnel est simple à calculer puisqu'il dépend de gradients de quantités moyennes mesurables. Le tableau ci-après relie les valeurs du nombre de Richardson et la caractérisation de la stabilité de l'atmosphère :

Tableau II.2. Stabilité de la CLA en fonction du nombre de Richardson [54]

Valeur de Ri	Stratification
Ri >0	Stable
Ri <0	Instable
Ri =0	Neutre

En dessous d'une valeur critique de 0.25, l'écoulement passe de turbulent à laminaire.

Dans l'objectif d'extraire la composante turbulente des équations fondamentales de la mécanique des fluides, Reynolds (1894) introduit donc l'opérateur de moyenne. Les grandeurs calculées sont décomposées en une addition d'une partie moyennée traduisant l'intensité et une partie fluctuante, traduisant l'impact de la turbulence.

II.3.1.3. Approches de simulation de turbulence

Trois approches sont principalement utilisées actuellement pour décrire les écoulements turbulents. Leurs atouts et leurs défauts respectifs, loin de les dresser en simples concurrences, les destinent plutôt à des tâches spécifiques.

La méthode « RANS » (Reynolds Averaged Navier-Stokes équations) permet de décrire les grandeurs moyennes de l'écoulement, mais requiert une modélisation de toutes les échelles turbulentes. Dans ce cadre, une large gamme de modèles, simples ou beaucoup plus sophistiqués, a été développée et permet de traiter, avec certaines lacunes toutefois, la plupart des problèmes industriels complexes.

A l'inverse, la simulation numérique directe ou DNS (Direct Numerical Simulation) se propose en résolvant les équations de conservation instantanées (équation II.5 et II.6), de calculer toutes les échelles turbulentes présentées sans modélisation d'aucune sorte. Ceci impose ainsi des contraintes sévères tant sur le domaine d'intégration, sa discrétisation et le solveur numérique utilisé. Cette méthode s'avère extrêmement coûteuse que soit en temps de calcul ou en mémoire de la machine utilisée. En premier lieu, le maillage doit en effet répondre à deux exigences opposées en termes d'échelle. Se composer, d'abord de cellules suffisamment petites de l'ordre de la longueur de « Kolmogorov » pour décrire les phénomènes turbulents associés aux plus grandes structures du spectre. Le coût de calcul lie au nombre « N » de nœuds utilisés qui augmente donc dramatiquement avec l'étendue du spectre turbulent et par conséquent avec le nombre de Reynolds « Re » de l'écoulement. Ainsi dans une boite cubique par exemple, la dépendance de « N » est proportionnelle à « $Re^{9/4}$ ». Par conséquent, compte tenu des moyens de calcul actuels,

cette approche se voit encore limitée à des domaines de taille réduite et des nombres de Reynolds faibles.

Développée plus récemment, la simulation des grandes échelles « LES » (Large Eddy Simulation) offre un compromis entre les deux approches précédentes. En effet, elle simule exactement les plus grandes structures de l'écoulement et modélise celles de nombre d'ondes inférieur à un nombre d'ondes de coupure caractéristique, Kc, classiquement situé dans la zone inertielle (figure II.6). Elle permet d'offrir une véritable approche instationnaire, mais pour un coût très largement supérieur à celui de la modélisation (approche) « URANS ». Elle exige en principe, en effet, un traitement tridimensionnel et des schémas d'ordres élevés. De plus, quoique les grandes structures soient ici résolues de manière déterministe. Elle requiert aussi des hypothèses pour la modélisation des petites échelles, par l'intermédiaire d'un modèle de sous maille [55].

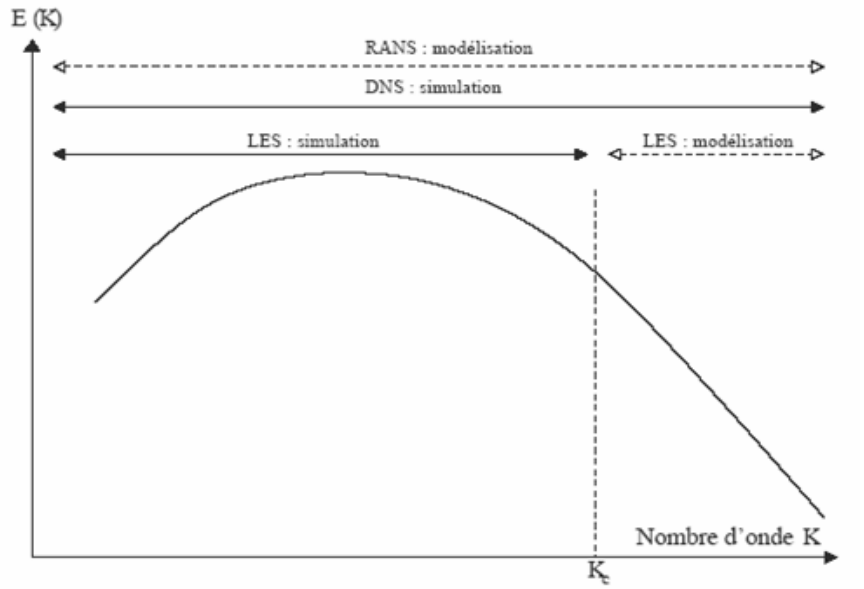


Fig. II.6. Comparaison entre les approches RANS, DNS et LES [55]

Pour les applications aérodynamiques incluant de vastes décollements, éventuellement libres, de très grands domaines d'études s'avèrent nécessaires. L'approche RANS reste par conséquent la plus souhaitable pour analyser les caractéristiques principales de ces écoulements.

La méthode RANS permet de décrire les grandeurs moyennes de l'écoulement, mais requiert une modélisation de toutes les échelles turbulentes. Dans ce cadre, une large gamme de modèles, simples ou beaucoup plus sophistiqués, a été développée et permet de traiter, avec certaines lacunes toutefois, la plupart des problèmes industriels complexes.

Les non-linéarités des termes convectifs du système initial font apparaître de quantité inconnue associées à des moyennes de produits de fluctuations : les tensions de Reynolds $\overline{\rho}\widetilde{u''_i u''_j}$. Par exemple, ces termes supplémentaires doivent être modélisés pour fermer le système dans le cas d'écoulements turbulents. La fermeture est réalisée au moyen d'un modèle de turbulence (le modèle k-ε est le modèle le plus connu). Ceci permet de réduire considérablement le nombre de points de discrétisation et de traiter des configurations complexes.

Selon l'approche statistique de fermeture en un point, il convient de décomposer le mouvement instantané en une partie moyenne et une partie fluctuante. Cette décomposition, introduite au niveau des variables d'écoulement avant de moyenner les équations, s'effectue selon le formalisme de Favre. On utilise une moyenne pondérée par la masse $\widetilde{\varphi}$ obtenue en effectuant le

rapport $\overline{\rho\varphi}/\bar{\rho}$ et qui est appliquée à toutes les variables excepté la masse volumique et la pression. En un point M, on définit la moyenne temporelle d'une grandeur φ par :

$$\overline{\boldsymbol{\varphi}(M_i,t)} = \frac{1}{T}\int_{t-T/2}^{t+T/2} \boldsymbol{\varphi}(M,t)d\boldsymbol{\tau} \qquad \text{II.16}$$

Pour les écoulements à masse volumique variables, la moyenne de Favre permet de s'affranchir de la présence des termes de fluctuation de masse volumique et de rendre ainsi le système à résoudre formellement plus proche des équations instantanées. Cette moyenne consiste en une pondération par la masse volumique comme suit :

$$\tilde{\varphi} = \overline{\rho\varphi}/\bar{\rho} \qquad \text{II.17}$$

Toute grandeur se décompose alors selon la relation suivante :

$$\varphi = \tilde{\varphi} + \varphi'' \qquad \text{II.18}$$

Mais pour

$$\overline{\varphi''} = \bar{\varphi} - \tilde{\varphi} = \overline{\rho'\varphi'}/\bar{\rho} \qquad \text{II.19}$$

Sous cette forme, on voit clairement que la moyenne de Favre permet d'occulter les corrélations faisant intervenir les fluctuations de masse volumique. Cette particularité permet d'ailleurs au formalisme de Favre de garder la forme conservative des équations instantanées. Appliquant ce formalisme aux équations instantanées citées ci-dessus, introduisant à l'équation de l'énergie le terme de l'enthalpie massique «$h = C_p T$ ». Après arrangement de ces équations, nous obtenons les formes suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{\boldsymbol{\rho}} + \frac{\partial}{\partial x_j}\bar{\boldsymbol{\rho}}.\tilde{u}_j = 0 \qquad \text{II.20}$$

$$\frac{\partial(\bar{\boldsymbol{\rho}}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\boldsymbol{\rho}}.\tilde{u}_i\tilde{u}_j + \bar{\boldsymbol{\rho}}\widetilde{u''_i u''_j} + \bar{p}\boldsymbol{\delta}_{ij} - \boldsymbol{\sigma}_{ij}\right) = 0 \qquad \text{II.21}$$

A ce stade, même en négligeant la corrélation d'ordre trois $\widetilde{u''_j u''_k u''_k}$, des hypothèses restent nécessaires afin de modéliser la corrélation $\bar{\rho}\widetilde{u''_i u''_j}$ qui est apparue dans l'équation II.20 qui constituant les contraintes de Reynolds (flux turbulents de la quantité de mouvement).

II.3.2. Modèles utilisés pour la dispersion

Le suivi de parcours de concentrations des polluants dans un milieu atmosphérique à travers des essais physiques et ceci pour évaluer les conséquences d'un phénomène dangereux ne permet pas d'être exhaustif sur terrain. À cet effet, les solutions analytiques et la modélisation numérique deviennent très réalistes pour éviter des simulations expérimentales à échelle réelle ou réduite. Ces tests sont très couteux côté matériel et temps d'exécution qu'il est très lourd. D'autre part, ces simulations permettent de répondre aux demandes de la règlementation en termes de nombre de scénarios pouvant être testés.

Un grand nombre de modèles différents existent et se complètent selon les phénomènes d'intérêt et la finesse requise. Généralement le calcul du champ de vent est découplé du calcul de la dispersion atmosphérique. Ce dernier est principalement gouverné par le caractère turbulent de l'écoulement. La plupart des modèles existants calculent séparément ces deux phénomènes sauf les modèles tridimensionnels (CFD).

La dispersion atmosphérique d'une substance est directement affectée par la turbulence d'un écoulement. Le système d'équations présenté en ci-dessus permet de déterminer le champ de vitesse d'un écoulement d'air. Le suivi de la phase dispersée peut être traité de trois manières :

- Approche analytique ou semi analytique
- Approche numérique (CFD) utilisant :
  - Suivi Lagrangien ;
  - Suivi Eulérien.

II.3.2.1. Modèle Gaussien

L'Équation de transport-diffusion traduisant le principe de conservation de la quantité scalaire de concentration pour un régime stationnaire peut être écrite sous la relation suivante [4] [57] :

$$\frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \mathrm{t}} + \mathrm{u_j}\frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \mathrm{x_j}} = \frac{\partial}{\partial \mathrm{x_j}}\left(\mathrm{D}\frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \mathrm{x_j}}\right) + \mathrm{S_i} + \mathrm{R_c} \qquad \text{II.22}$$

Avec :

D	Coefficient de diffusion de la substance	$m^2.s\text{-}1$
$\frac{\partial c}{\partial t}$	Terme in stationnaire	$kmol.m^{-3}.s^{-1}$
$u_j \frac{\partial c}{\partial x_j}$	Terme advectif	$kmol.m^{-3}.s^{-1}$
$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(D_i \frac{\partial c}{\partial x_j}\right)$	Terme diffusif	$kmol.m^{-3}.s^{-1}$
S_i	Source	$kmol.m^{-3}.s^{-1}$
R_c	Réaction chimique	$kmol.m\text{-}^{3}.s^{-1}$

S'agissant d'un écoulement turbulent, la décomposition de Reynolds s'applique également à la concentration :

$$\boldsymbol{c} = \bar{\boldsymbol{c}} + \boldsymbol{c}'' \qquad \text{II.23}$$

Remplacer la concentration c par sa valeur dans l'équation (II.2) de transport :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u_l}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(D.\frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} - \overline{u''_l c''}\right) + S_i + R_c \qquad \text{II.24}$$

Avec :

$\overline{u''_l c''}$ Flux turbulent du scalaire considéré

Cette équation possède quatre inconnues, $\bar{c}$ et les trois composantes du vecteur $\overline{u''_l c''}$. Il est donc nécessaire d'exprimer les composantes de ce flux par des variables connues.

Le modèle gaussien est basé sur une solution analytique de l'équation d'advection-diffusion. Ainsi, à partir des hypothèses simplificatrices, nous obtenons une équation de dispersion moyennée qui tient compte de la turbulence de l'écoulement. Ces hypothèses conduisant à une solution analytique sont [4] :

- On néglige les corrélations pour le terme de lessivage et le taux de production chimique des espèces ;
- On suppose un régime stationnaire et on adopte un schéma de fermeture du premier ordre base sur la théorie du gradient (*ou K théorie*) en reliant les flux turbulents de concentration aux gradients moyens de concentration par les relations suivantes :

$$\overline{u''_l c''} = -K\nabla\bar{c} \qquad \text{II.25}$$

- On considère que le transport par le vent est prépondérant horizontalement alors que la diffusion turbulente domine verticalement. Les conditions aux limites latérales sont donc associées à des situations de vent entrant alors que les conditions aux limites au sol et en haut du domaine portent sur le flux de diffusion.

- Les conditions au sol décrivent les processus d'émission et de dépôt sec. Si *z* désigne la coordonnée verticale, on a, en z= 0,

$$-K_z \frac{\partial c_i}{\partial z} = E_i(x,t) - {v_d}^i(x,t).c_i \qquad \text{II.26}$$

Avec :

E_i	terme d'émission. Surfacique
${v_d}^i$	vitesse de dépôt sec.

On limite le domaine supérieur à z = z_H par une condition de frontière. Cette condition est la supposition d'un flux de diffusion égale à zéro et ainsi formulé par l'équation (II.27).

$$-K_z \frac{\partial c_i}{\partial z} = 0 \qquad \text{II.27}$$

Après l'introduction de ces hypothèses, l'équation (II.24) devient sous la forme suivante [4] :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_x \frac{\partial c}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + S_i \qquad \text{II.28}$$

Avec :

c	concentration du polluant (kmol. M^{-3}ou Kg. M^{-3})
S_i	source de la pollution,
u_x	vitesse du vent moyen suivant la direction moyenne du vent
K_x, K_y, K_z	coefficients de diffusion turbulente suivant x, y et z.

En dimension infinie (situation de panache mince), la solution analytique gaussienne de l'équation de transport-diffusion est sous la forme suivante [57] :

$$C(x,y,z,t) = \frac{Q}{2\pi\sigma_{y(x)}\sigma_{z(x)}u}\left[exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_{y(x)}}\right)^2\right)\right]\left\{exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{H-z}{\sigma_{z(x)}}\right)^2\right] + \alpha.exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{H+z}{\sigma_{z(x)}}\right)^2\right]\right\} \qquad \text{II.29}$$

Avec :

C (x, y, z)	concentration du polluant en un point de l'espace ($g.m^{-3}$)
H	élévation totale du panache ou la hauteur de cheminé de rejet
Q	débit volumique émis par la source
$\sigma_{y(x)}\sigma_{z(x)}$	écarts-types de la distribution gaussienne horizontale et verticale
u	vitesse horizontale moyenne du vent
α	Coefficient de réflexion au sol (sans dimension).

Cette configuration (solution) admet qu'un produit émis diffuse de telle sorte que les moyennes statistiques des concentrations soient distribuées selon une loi gaussienne. Cette répartition s'opère le long des axes verticaux et transversaux et constitue un panache conique de distribution gaussienne (figure II.7).

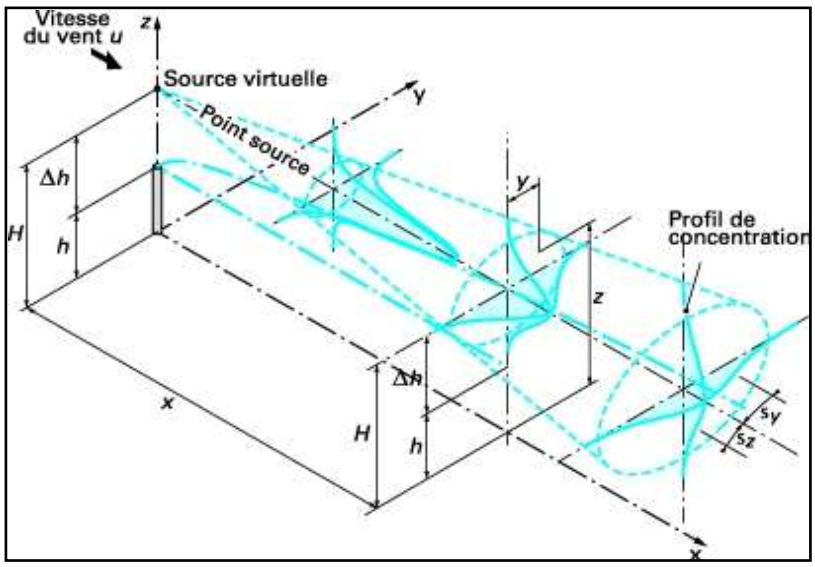


Fig. II.7 : Représentation de la diffusion selon le modèle gaussien [57].

Les limitations liées à cette méthode de résolution concernent les temps courts. Il est nécessaire d'évaluer les écarts-types de cette distribution de concentration [4]:

$$\sigma_i = \sqrt{2K_i t} \qquad \text{II.30}$$

La difficulté dans un modèle gaussien est d'évaluer la diffusion turbulente. Ce sont les écarts-types de distribution σ_i qui représentent la diffusion turbulente suivant les directions y et z dans cette équation. Ces coefficients dépendent des caractéristiques de l'écoulement, de la turbulence, de la stabilité de l'atmosphère et de la rugosité de la surface. Ils sont déterminés expérimentalement à partir d'essais à grande échelle. Il existe plusieurs corrélations pour déterminer les écarts-types, dont celles de Pasquill (1961) qui dépendent de la distance à la source et des classes de stabilité atmosphérique i.

a. Corrélation de Pasquill

Les classes de Pasqual sont définies en fonction de la stabilité de l'atmosphère, de A à F, d'extrêmement instable à extrêmement stable (Tableau II.3). Cette stabilité dépend de la période de la journée (nuit ou jour), de l'ensoleillement ou nébulosité et de la vitesse du vent à 10 mètres d'altitude (Tableau II.4) [54] [57].

Tableau II.3 : Classes de stabilité de Pasquill [54]

Classe de stabilité	Définition	Classe de stabilité	Définition
A	Très instable	D	Neutre
B	Instable	E	Légèrement stable
C	Légèrement instable	F	Stable

Tableau II.4 : Conditions météorologiques définissant les classes de stabilité de Pasquill [54]

	Classes de stabilité en journée			Classes de stabilité de nuit	
	Radiation solaire incidente			Nébulosité	
Vent à 10m (m/s)	**Forte**	**Modérée**	**Faible**	**Très nuageux N>4/8**	**Peu nuageux N≤ 4/8**
U<2	A	A-B	B	F	F
2≤U≤3	A-B	B	C	E	F
3<U≤5	B	B-C	C	D	E
5<U≤6	C	C-D	D	D	D
6<U	C	D	D	D	D

La formulation des écarts-types σ_y et σ_z proposée par Pasquill est dépendante de la classe de stabilité de Pasquill considérée et la vitesse de vent. Pour une dispersion en milieu atmosphérique, on considère ainsi les formules suivantes, où x est la distance à la source

$$\sigma_i = ax^b + c \qquad \text{II.31}$$

Les coefficients *a*, *b* et *c* sont déterminés à partir de l'abaque combinant classe de stabilité et distance à la source. Ces abaques sont donnés sous forme de tableau (II.5), indique en ci-dessous.

Tableau II.5 : Coefficients relatifs a, b et c pour les écart-types [54]

σ_y

Stabilité atmosphérique (Pasquill)	A	b	c
A	0,215	0,858	0
B	0,155	0,889	
C	0,105	0,903	
D	0,068	0,908	
E	0,05	0,914	
F	0,034	0,908	

σ_z

Stabilité atmosphérique (Pasquill)	a	B	c
A	0,467	1,89	0,01
B	0,103	1,11	0
C	0,066	0,915	0
D	0,0315	0,822	0
E si x<1km	0,0232	0,745	0
E si x>1km	0,148	0,15	-0,126
F si x<1km	0,0144	0,727	0
F si x>1km	0,0312	0,306	-0,017

Des limitations sont associées à ces modèles Gaussiens, outre les hypothèses contraignantes détaillées précédemment, les modèles gaussiens ne prennent pas en compte la topographie, la rugosité du terrain et la présence de bâtiments et d'obstacles. Des améliorations de ces modèles (Carruthers et al. 1994 ; Riddle et al., 2004) permettent de prendre en compte certaines de ces considérations en utilisant notamment le principe de conservation de la masse et la modification du champ de vitesse.

a. Corrélation de de Doury

Les écarts-types de Doury ont été déterminés à partir d'un grand nombre de données expérimentales recueillies par Sandia Corporation, en 1966. Il est défini selon deux classes de diffusion, faible et normale, en fonction de la vitesse du vent et de la période de la journée.

En fonction des classes de stabilité atmosphérique de Doury, les valeurs des écarts-types sont fonction du temps de transfert et les classes de stabilité atmosphérique. La relation pour calculer les écarts types est de la forme [54] :

$$\sigma_y = (A_{\mathrm{h}}.t)^{k_{\mathrm{h}}} \quad \text{II.32}$$

$$\sigma_z = (A_{\mathrm{z}}.t)^{k_{\mathrm{z}}} \quad \text{II.33}$$

Avec le temps du transfert est défini par :

$$t = \frac{x}{u} \quad \text{II.34}$$

Avec :

x	Distance	m
u	Vitesse	$m.s^{-1}$

Les coefficients A_h, A_z, K_h et K_z sont déterminées à partir des tableaux spécifiques, du type de diffusion et du temps de transport pour les deux cas de diffusion :

- Cas d'une diffusion normale, les coefficients utilisés dans la détermination des écarts types sont donnés dans le tableau (II.6).

Tableau II.6 : Coefficients relatifs aux écarts-types [54]

Temps de transfert [s]	**Ah**	**Az**	**Kh**	**Kz**
	$[m^{1/k}/s]$=Kh ou Kz			
0< t <240	0.405	0.42	0.859	0.814
240< t <3280	0.135	1.00	1.130	0.685
3280< t <97000	0.135	20.0	1.130	0.500
97000< t <508000	0.463	20.0	1.000	0.500
508000< t <1300000	6.50	20.0	0.824	0.500
T >1300000	$2\ 10^5$	20.0	0.500	0.500

- Cas d'une diffusion faible, les coefficients sont représentés dans le tableau (II.7).

Tableau II.7 : Coefficients relatifs aux écarts-types [54]

Temps de transfert [s]	**Ah**	**Az**	**Kh**	**Kz**
	$[m^{1/k}/s]$=Kh ou Kz			
0< t <240	0.405	0.20	0.859	0.500
240< t <97000	0.135	0.20	1.130	0.500
97000< t <508000	0.463	0.20	1.000	0.500
508000< t <1300000	6.50	0.20	0.824	0.500
t >1300000	$2\ 10^5$	0.20	0.500	0.500

II.3.2.2. Modèle intégral (hybride)

Le modèle intégral est utilisé lorsque le rejet perturbe l'écoulement atmosphérique de l'air, l'emploi d'un modèle gaussien donne des résultats erronés. Des mécanismes physiques non pris en compte par les modèles gaussiens, parmi lesquels :

- Les effets de turbulence dynamique pour les rejets à grande vitesse d'émission ;
- Les effets de gravité, pour les rejets de gaz lourds ;
- Les effets de flottabilité pour les rejets de gaz légers.

L'emploi d'un modèle intégral permet de modéliser ces mécanismes. Ce type de modèle est basé sur les équations de la mécanique des fluides dont le système d'équations est suffisamment dégénéré pour permettre une résolution rapide. Cette simplification se traduit par l'introduction de paramètres représentant globalement les mécanismes non modélisés par le modèle gaussien [57].

a. DOMAINE DE VALIDITE

Dans ce type de modèle, la turbulence atmosphérique est prise en compte par l'intermédiaire de classes de stabilité atmosphérique, de façon à s'affranchir d'une modélisation lourde de la turbulence. Comme pour les modèles gaussiens, le terrain est supposé homogène et idéalement plat. La présence de reliefs, d'obstacles (murs, bâtiments…) introduirait des perturbations de l'écoulement de l'air complexes. Les caractéristiques du terrain sont définies sous la forme d'une seule hauteur de rugosité pour toute la région du rejet [57].

Le champ de vent est uniforme. Dans la plupart des cas, le profil vertical du vent est retenu comme constant. Des outils plus élaborés peuvent considérer la variation de la vitesse du vent, de la température de l'air et de la densité de l'atmosphère avec l'altitude. Une couche d'inversion de température peut parfois aussi être prise en compte.

Comme pour les modèles gaussiens, au-delà de distances de dispersion de l'ordre de la dizaine de kilomètres, les résultats ne sont plus valables car d'autres phénomènes de turbulence et de diffusion doivent être considérés.

b. METHODES DE RESOLUTION

La mise au point des modèles de type intégral passe, d'une part, par la paramétrisation de certaines équations de la mécanique des fluides et la sélection de méthodes numériques de résolution et d'autre part, par le calage des paramètres introduits dans le système d'équations. Chaque outil utilise une mise en équation spécifique et qui lui est propre pour chacun des mécanismes physiques modélisés (effets de gravité des gaz lourds, effets dynamiques des jets turbulents...) [57].

II.3.2.3. Modèle Tridimensionnel CFD

Les modèles numériques tridimensionnels permettent de simuler le transport des polluants dans un environnement atmosphérique ou intérieur (surface bâtie) en prenant en compte de l'ensemble des phénomènes intervenant de façon significative sur la dispersion, qu'ils soient liés au milieu porteur comme la turbulence, gradient thermique, les obstacles, le relief de surface du milieu.
Ces modèles numériques se permettent directement de résoudre le système d'équations physiques (équations de Navier Stockes) qui gouverne l'écoulement du milieu porteur et de la dispersion des contaminants sans hypothèses simplificatrices comme dans les modèles cités en ci-dessus, par exemple le modèle de type intégral. Le système d'équations du modèle physique gouverne ce type d'écoulement se compose par [2] [59] :

- La conservation de la masse d'air ;
- La conservation de la quantité de mouvement ;
- La conservation de l'énergie ;
- La conservation de la quantité de produit ;
- L'équation d'état du mélange gazeux ;
- L'équation donnant la masse molaire du mélange.

Plusieurs méthodes de résolution existent qui sont caractérisées par les différents schémas :

- Le type de modèle de suivi de trajectoires des polluants tel qu'Eulérien ou Lagrangien ;
- Le schéma général de discrétisation du domaine de calcul pour la résolution tel qu'éléments finis, différences finies ou volume fini ;
- Les méthodes de résolution telle que : la méthode de gradient conjugué, Gauss Seidel, etc.…

II.3.2.3.1. Modèle Lagrangien

Le principe du modèle Lagrangien est basé sur le suivi individuel de chaque trajectoire de polluants dans son milieu porteur que ce soit en mouvement ou à l'état d'arrêt. Pour la résolution de ce type d'écoulement, la phase de milieu porteur est résolue par l'application des équations Navier Stockes, par contre pour la phase dispersée on calcule directement la trajectoire de mouvement des polluants, en appliquant à chacune d'elles la 2ème loi de Newton (ou principe fondamental de la dynamique) [2] [58] [59] [60] [62]:

$$m_p \frac{du_p(x,t)}{dt} = F \qquad \text{II.35}$$

Avec :

m_p : La masse de polluant ;
u_p : La vitesse de polluant au point x et à l'instant t ;
F : La résultante des forces qui s'appliquent au polluant.

La force F est décomposée en poids de polluants et les résultants de forces exercés par le fluide sur les polluants, sont illustrés dans la figure (II.8).

$$F = m_p g + F_{f\to p} \qquad \text{II.36}$$

Avec :

g est la pesanteur
$F_{f\to p}$ est les forces exercés par le fluide sur le polluants.

Hypothèses : nous démarrons notre modalisation par la considération que :

- L'écoulement est très dilué c'est-à-dire qu'on néglige le problème d'interphase ;
- Les fractions volumique et ainsi massique de particules dans l'écoulement sont très faibles ($\leq 10^{-6}$).

Dans cette partie, on recensera le maximum des forces qui peuvent être réagissent sur les polluants ($F_{f\to p}$), l'équation devient :

$$F_{f\to p} = F_D + F_{Bi} + F_A + F_{MA} + F_H + F_{Tchen} + F_L + F_{el} + F_{th} + \text{"autres"} \qquad \text{II.37}$$

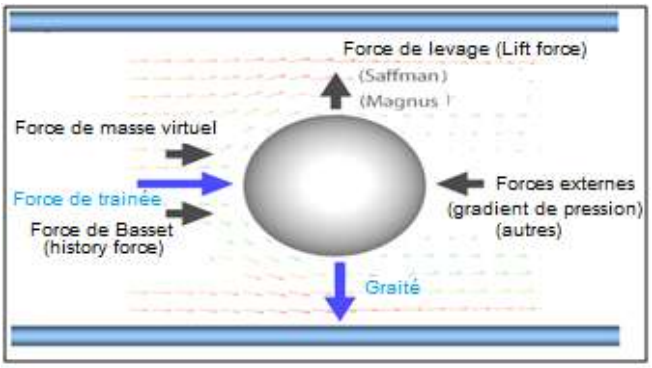


Fig. II.8 : Forces agissant sur une particule suspendue dans l'air [58].

- **Force de trainée** (Drag Force).

En mécanique de fluide, la trainée c'est une force « F_D » qui s'oppose au mouvement des polluants dans le fluide porteur (air), relativement entre la particule et le fluide qui l'entoure (force de frottement fluide, fig. II.8). L'expression la plus générale de la force de trainée est la suivante :

$$F_D = -C_D \frac{A_p}{2} \rho_f \|u_p - u_f\|(u_p - u_f) \quad \text{II.38}$$

Avec :

C_D : désigne le coefficient de trainée (Drag Coefficient), nombre sans dimension. U_f et u_p désignent respectivement la vitesse instantanée qu'aurait le fluide au centre de masse de la particule en l'absence de particule, et la vitesse de la particule.

A_p : représente la surface projetée de l'inclusion. Pratiquement, nous considérons l'hypothèse que les particules considèrent comme sphériques, dont sa section définie par :

$$A_p = \frac{\pi d_p^2}{4} \quad \text{II.39}$$

Le nombre de Reynolds en abscisse sur le graphe de la figure (II.10) est le nombre de Reynolds particulaire, note Re_p, déterminé par l'équation suivante :

$$Re_p = \frac{d_p . \rho_p \|u_p - u_f\|}{\mu_f} \quad \text{II.40}$$

La plupart de ces corrélations apparait se présenter sous la même forme :

$$C_D = \frac{24}{Re_P}\left(1 + \alpha . {Re_P}^{\beta}\right) \quad \text{II.51}$$

Chaque auteur a effectué son identification pour paramétrer, déterminer ces coefficients utilisés dans l'équation (II.51). La relation liant le coefficient de trainée (C_D) et le nombre de Reynolds particulaire (Re_p) est présentée graphiquement par la figure (II.9).

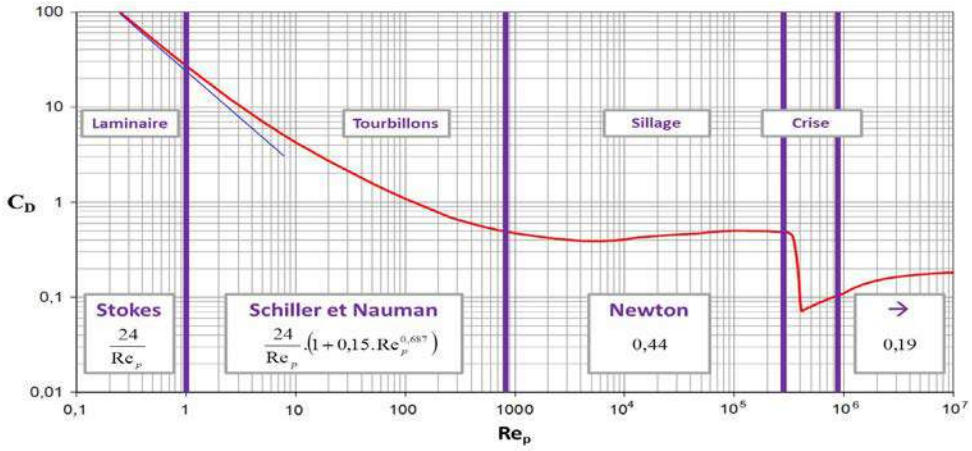


Fig. II.9 : Variation de coefficient de Trainée avec le nombre Reynolds pour une particule sphérique [59] [65].

- **Force brownienne**

Prenons le cas où la collision est due au mouvement brownien, provoqué des chocs entre la particule et les molécules de fluide environnant qu'elle rencontre, elles-mêmes en mouvement d'agitation aléatoire. La force due par ce phénomène a une influence croissante lorsque le diamètre des particules diminue. Zhao et al. (2004-b) la modélisent en utilisant une méthode de bruit blanc gaussien :

$$F_{Bi} = m_p G_i \sqrt{\frac{\pi S_0}{\Delta t}} \quad \text{II.52}$$

avec m_p : masse de la particule ; G_i : distribution gaussienne de nombres aléatoires ; Δt : pas de temps d'échantillonnage ; S_0 : densité spectrale.

- **Force d'Archimède**

La poussée d'Archimède est la résultante des forces de pression hydrostatique exercées par le fluide sur la particule. L'expression de cette force pour une sphère complètement immergée est équivalente au poids du volume de fluide déplacé :

$$F_A = U_p . \rho_f . g \qquad \text{II.53}$$

- **Force de masse ajoutée**

La force de masse ajoutée « F_{MA} » représente l'inertie du fluide attaché à la particule qui peut être formalisé par l'équation suivante :

$$F_{MA} = C_{MA} \rho_f v_p \left[\left. \frac{Du_f}{Dt} \right|_p - \frac{du_p}{dt} \right] \qquad \text{II.54}$$

Avec :

$\left. \frac{Du_f}{Dt} \right|_p$: Accélération du fluide en l'absence de particule, évaluée au centre fictif de la particule

C_{MA} désigne le coefficient de masse ajoutée. Pour les particules sphériques, $C_{MA} = 0{,}5$.

- **Force d'histoire**

La force d'histoire, parfois appelée force de Basset (Zhao et al, 2004), traduit la mise en régime des effets visqueux autour de la particule. Il faut en effet un certain temps pour que la contrainte visqueuse s'établisse à l'interface. Tenir compte de la force d'histoire, c'est donc tenir compte de ce « retard », de « l'histoire » de la particule. Pour des particules solides en régime de Stokes, l'expression est :

$$F_H = 3\pi \mu_f d_p \int_0^t K(t-\tau) \left(\frac{\partial u_f}{\partial t} - \frac{\partial u_p}{\partial t} \right) d\tau \qquad \text{II.55}$$

Avec :

$$K(t-\tau) = d_p/2 \sqrt{\pi \frac{\mu_f}{\rho_f}} \qquad \text{II.56}$$

La force d'histoire est la plupart du temps négligée, les autres phénomènes agissant généralement plus rapidement sur la dynamique de la particule.

- **Autres forces**

Pour les autres forces citées dans l'équation (II. 37), nous présentons seulement ces noms, sans entrer dans les détails de ces formalismes mathématiques.

F_{Tchen} : La force de Tchen représente la force que le fluide doit exercer sur un élément de lui-même, de même volume que la particule, pour lui fournir une accélération égale à celle de l'écoulement non perturbe par la particule.

F_L : La force de portance F_L (Lift Force) traduit les effets des gradients de vitesse sur une particule.

F_{el} : représente la force électrostatique s'appliquant à une particule chargée près d'une surface conductrice.

F_{th} : représente la force de thermo-phorésie due gradient de température dans milieu ambiant.

D'autres phénomènes peuvent encore être pris en compte comme la force de Coriolis due à la rotation de la Terre, la force de photophorèse due à l'incidence d'un rayon lumineux sur la particule (Renoux et Boulaud, 1998), la force de diffusion-phorésie due à des gradients de concentration en constituants du mélange, par exemple en cas de condensation de vapeur en paroi [14].

II.3.2.3.2. Modèles Eulérien

Le principe des approches eulériennes est de considérer la phase dispersée comme un fluide supplémentaire. On résout donc des équations de type milieux continus pour chaque phase (équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement).

Dans cette étude, l'écoulement sera supposé dilué. Ceci permet de s'affranchir de certains phénomènes, et ainsi simplifier le problème, comme en lagrangien. Ces phénomènes sont les collisions entre particules, ainsi que l'influence des particules sur la turbulence du fluide (« one way Coupling »). Ces simplifications sont considérées comme admissibles si les fractions volumique et massique des particules restent inférieures ou égales à 10^{-6} [59].

Il existe différents formalismes pour mettre en œuvre les équations gouvernant les deux phases continus d'un mouvement bi-phasique selon le modèle eulérien-eulérien, ces formalise sont [2] [59] [62] [63] :

- Equations Eulériennes utilisant les moyennes phasiques ;
- Equations Eulériennes utilisant les moyennes de Reynolds ;
- Equations Eulériennes de type « mixture model » ;
- Equations eulériennes établies à partir de fonctions densité de probabilité (PDF) ;
- Modèle eulérien de glissement : équation de transport de concentration.

Nous détaillons seulement le modèle mixture puisque nous avons utilisé lors de ces simulations numériques. Ce modèle consiste à considérer les phases porteuse et dispersée comme deux milieux continus s'interpénétrant, constituant ainsi un mélange se déplaçant à une certaine vitesse, elle-même calculée à partir des propriétés de chaque phase. Le système d'équations du problème est constitué de l'équation de continuité du mélange, l'équation de quantité de mouvement du mélange et l'équation de la fraction volumique de la particule. Les équations gouvernant se modèle de dispersion sont [2] [61]:

- L'équation de continuité de la phase m :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{mel} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_{mel}\,U_{mel,j} = \dot{m} \qquad \text{II.56}$$

- L'équation de conservation de quantité de mouvement de la phase m :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{mel}\,U_i + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_{mel}\,U_{mel,j}\,U_{mel,j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\rho_{mel}\left(\frac{\partial U_{mel,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{mel,j}}{\partial x_i}\right)\right] + \rho_{mel}\cdot g_i + F_i - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_p\rho_p V_{dr,p,i}V_{dr;p;j} + \alpha_f\rho_f V_{dr,f,i}V_{dr,f,j}\right) \quad \textit{II.57}$$

- La fraction volumique des particules est déterminée par l'équation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}\alpha_p\rho_p + \frac{\partial}{\partial x_j}\alpha_p\rho_p U_{mel,j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_p\rho_p V_{dr,p,j}\right) \quad \text{II.58}$$

Avec :

- La densité de melange est définie par :

$$\rho_{mel} = \alpha_p\rho_p + \alpha_f\rho_f \quad \text{II.59}$$

- La viscosité dynamique de melange est définie par :

$$\mu_{mel} = \alpha_p\mu_p + \alpha_f\mu \quad \text{II.60}$$

- La vitesse de mélange est définie par :

$$\mathrm{U_{mel,j}} = \frac{\alpha_p\rho_p\mathrm{U_{p,j}} + \alpha_f\rho_f\mathrm{U_{f,j}}}{\rho_{mel}} \quad \text{II.61}$$

o Les variables " $V_{dr,p,j}$ " et "$V_{dr,f,j}$" représentent les vitesses dérivé, respectivement de la particule et du fluide, par rapport au centre de masse du mélange. Ces vitesses sont definies par :

.

$$V_{dr,p,j} = U_{p,j} - U_{f,j} = U_{fp,j} - \frac{\alpha_p\rho_p U_{p,j} + \alpha_f\rho_f U_{f,j}}{\rho_m} \quad \text{II.62}$$

- $U_{fp,j}$ est la vitesse de glissement des particules par rapport au fluide.

En cas general, la concentration des particules dans un milieu ambiant s'écrit par :

$$C = \alpha_p\rho_p. \quad \text{II.63}$$

II.4. Méthode de l'intelligence artificielle

Comme vue dans les paragraphes précédents, la dispersion des polluants dans un milieu ambiant par la méthode déterministe est tributaire d'un grand nombre de mécanismes. La modélisation de tels phénomènes de manière précise se révèle être une difficulté de premier plan pour les industriels lors des études d'impacts, de dangers et en situation d'urgence. Les approches plus précises telles que les modèles tridimensionnels CFD sont beaucoup plus lentes et demandent un

certain professionnalisme pour ses applications. Un certain nombre d'initiatives ont été développées afin de réduire le temps de calcul d'un côté et d'augmenter la précision de l'autre. Par ailleurs, certaines des méthodes ainsi créées sont spécifiques à un site d'étude ce qui limite leur utilisation.

Ce constat permet de construire un cahier des charges du modèle adapté à la dispersion des polluants dans un milieu ambiant, dans un cadre opérationnel. Ce modèle doit permettre un calcul rapide et fiable, de manière à se rapprocher du temps de calcul des modèles analytiques (solution gaussienne) et de la précision des modèles tridimensionnels CFD. Il ne doit pas être spécifique à une situation en particulier mais doit au contraire pouvoir être adapté à n'importe quelle configuration.

L'intelligence artificielle est une discipline scientifique permettant de rechercher des méthodes de résolution de problèmes à fortes complexités logique ou algorithmique, utilisant les dispositifs imitant ou remplaçant l'humain dans certaines mises en œuvre de ses fonctions cognitives. Parmi les modèles de cette méthode, nous trouvons les modèles plus utilisés, ceux qui sont développés à partir de l'application du réseau neural artificiel.

Dans cette partie, nous présentons seulement le principe et les procédures de méthodologies de cet outil qui peuvent être utilisés pour la modélisation de la dispersion.

II.4.1. Principe de la méthode

Les réseaux de neurones artificiels sont des outils de modélisation de phénomènes non linéaires. Ces modèles empiriques sont de types « boîtes noires » qui constituent à partir de forme primitive du modèle mathématique. Il s'agit, pour calibrer les paramètres du ANN, d'effectuer un apprentissage sur une base de données construite à partir de valeurs expérimentales ou d'observations. On fait correspondre cette étape au calcul d'une régression non linéaire. Ces cas doivent être d'autant plus nombreux que le problème est complexe et que sa topologie est peu structurée. A l'opposé, un modèle de connaissance, que l'on pourrait qualifier de boite blanche, est issu de l'analyse des phénomènes physiques, chimiques, biologiques, etc., dont résulte la grandeur cherchée à modéliser. Ces phénomènes sont mis en équation à l'aide des connaissances théoriques disponibles au moment de l'élaboration du modèle. La démarche scientifique s'efforce, dans la mesure du possible, de construire des modèles de connaissance : l'élaboration d'un modèle de connaissance nécessite l'existence d'une théorie ; alors qu'un modèle boite noire requiert seulement la disponibilité de mesures. Les principes importants sont détaillés dans le chapitre IV.

L'objectif de la modélisation boite noire est de trouver, à partir des données ou des mesures disponibles, une relation déterministe, si elle existe, entre les variables d'entrées du modèle x et la grandeur à modéliser y [66].

$$f(y_i, x_i) = 0 \qquad \text{II.64}$$

II.4.2. Procédures de la méthode

Pour modéliser la dispersion des particules dans un milieu confiné, nous avons utilisé le réseau neural artificiel de type MLP (Multi-layer perceptron). La procédure applicable au développement d'un modèle du réseau neural artificiel répond à une modélisation statique, peut se résumer dans les points suivants [60] :

1. Sélection des données ;
2. Collecte des données ;

3. Dimension de l'espace de la base des données ;
4. Découpage de la base de données globale en bases d'apprentissage, de validation et de test ;
5. Normalisation des données ;
6. Choix du type de réseau de neurones ;
7. Choix du nombre de neurones dans la couche cachée ;
8. Choix de la fonction de transfert ;
9. Estimation des paramètres ou apprentissage ;
10. Validation et Test ;

Les points 1 à 4 représentent la phase de préparation et dimensionnement de l'espace spatiotemporel du modèle utilisé pour la modélisation, peuvent être résumés dans la représentation graphique de la figure ci-dessous.

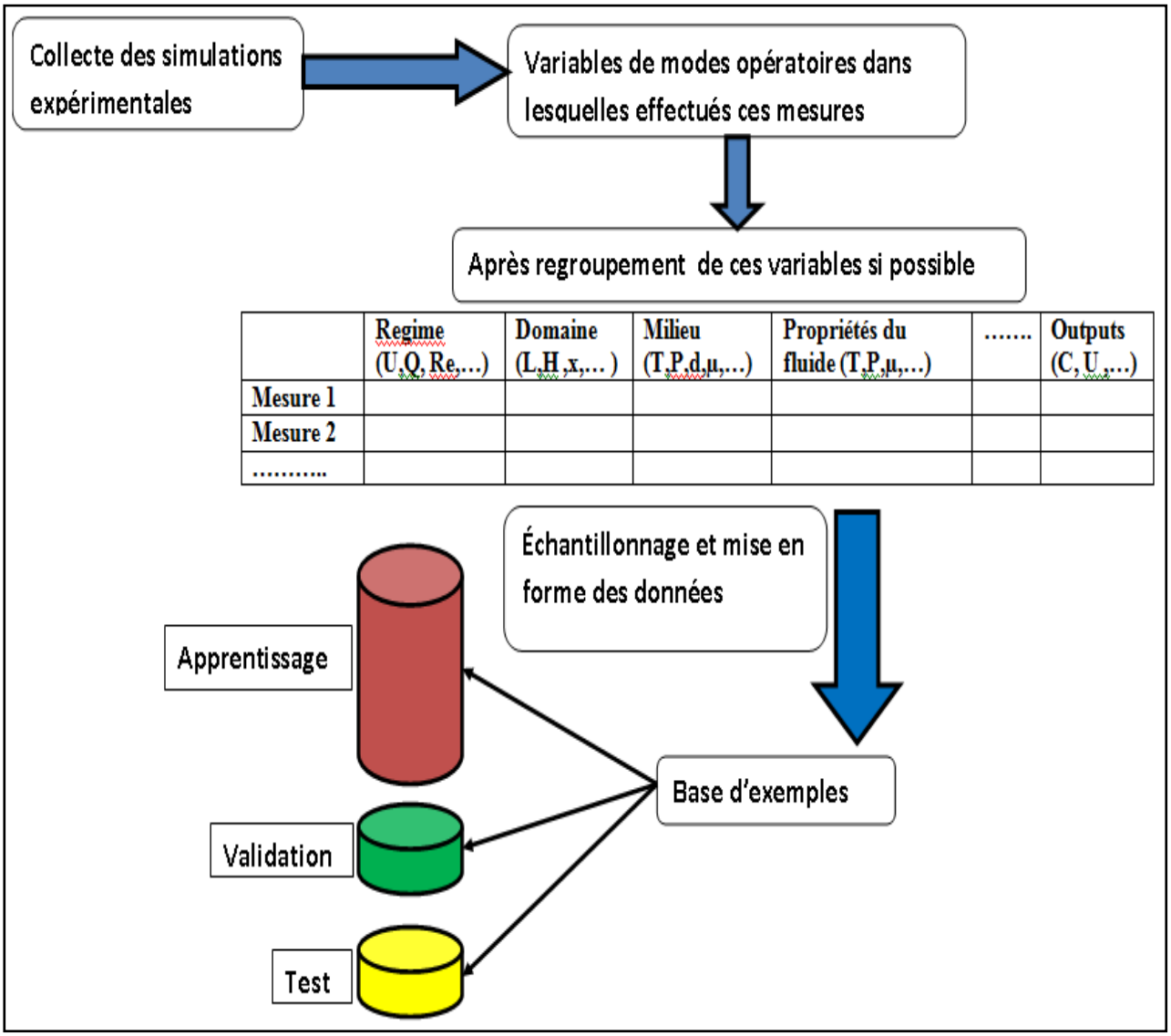


Fig. II.10 : Représentation de la phase préparatoire des bases de données.

La modélisation par l'approche du réseau neural, utilisant la technique des réseaux supervisés qui sont appliqués pour prédire la distribution spatiotemporelle da la concentration des particules dans un milieu confiné ventilé. La méthodologie adoptée dans ce cas de modelisation, est illustrée par l'organigramme de la figure (II.11).

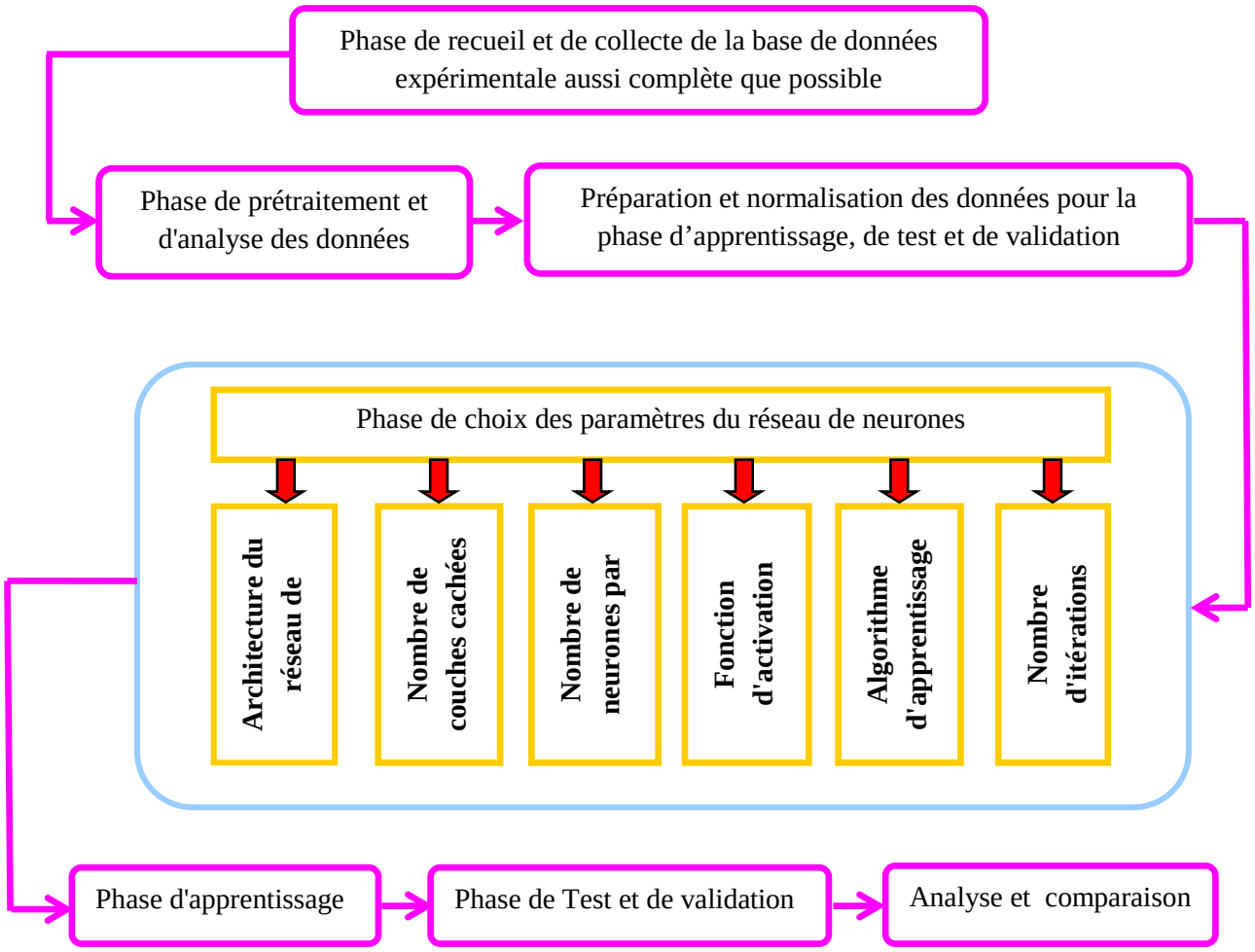


Fig. II.11 : Procédure de modélisation par les réseaux de neurones [66].

II.4.3. Optimisation et calcul des erreurs statistiques

La qualité d'apprentissage d'un réseau neural est estimée par le calcul de l'erreur quadratique moyenne sur l'ensemble de tests. L'apprentissage seul ne permet pas une meilleure performance du réseau d'où il est indispensable d'effectuer une phase d'optimisation et de sélection d'une meilleure configuration du modèle. Des variations sont effectuées sur les paramètres influant sur la qualité d'apprentissage de manière à identifier son influence. Ces paramètres sont : l'initialisation des paramètres des neurones et l'architecture de ce même réseau (nombre de neurones dans la couche cachée, type de fonction d'activation, nombre de couches cachées), clairement mentionné dans la figure (II.11). Dans cette phase d'optimisation, il convient de déterminer la configuration optimale qui est définie à travers les calculs de différentes erreurs statistiques sur les configurations testées, dont les formules de ces erreurs sont mentionnées ci-dessous [60]:

- Le coefficient d'erreur quadratique moyenne (RMSE) est le principal critère d'évaluation de la performance de l'ANN, qui peut être défini comme suit [60] :

$$RSME = \left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i^t)^2\right]^{1/2} \quad \text{II.65}$$

- Le coefficient de corrélation R^2 a été utilisé comme fonction d'erreur pour mesure de performance du réseau, défini selon relation suivante :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i^t)^2}{\sum_{i=1}^{2}(y_i - y_0)^2} \quad \text{II.66}$$

Avec :

$$y_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i^t)}{n} \quad \text{II.67}$$

- L'erreur absolue en % entre les valeurs simulés (y_i) et mesurés (y_i^t), définie par la formule suivante :

$$AE_i = \left[\frac{|y_i^t| - |y_i|}{|y_i^t|}\right].100 \quad \text{II.68}$$

- L'erreur moyenne entre les valeurs simulés et mesurés en %, défini par l'équation suivante

$$AAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} AE_i \quad \text{II.69}$$

- Le biais est défini par :

$$Bias = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i^t) \quad \text{II.70}$$

II.5. Conclusion

Après la description détaillée pour les méthodes utilisées aux développements de ces modèles qui nous ont fournis, nous remarquons qu'est nécessaire de donner un autre chapitre pour donner une notion sur la structure du code commercial "ANSYS-fluent", le principe de traitement de la turbulence et les schémas de discrétisation utilisant le principe de la méthode de volume fini.

CHAPITRE III

Structure du code «ANSYS-Fluent »

III.1. Présentation du code « ANSYS-Fluent »

ANSYS-Fluent est un code de calcul qui permet de simuler les écoulements des fluides avec ou sans les transferts thermiques dans des géométries complexes. Il peut résoudre des problèmes d'écoulement avec des mailles structurées et non structurées, produites grâce à des géométries complexes, avec une facilité relative. Les mailles supportées en 2D sont de types triangulaires ou quadrilatéraux, elles sont tétraédriques/hexaédriques/pyramidales en 3D, ou des mailles (hybrides) mélangées. Le code **« ANSYS-Fluent »** est écrit en langage C et utilise pleinement la flexibilité et la puissance offertes par ce langage (allocation de la mémoire dynamique). En outre, il utilise une architecture qui lui permet de s'exécuter en tant que plusieurs processus simultanés sur le même poste de travail ou sur des postes séparés, pour une exécution plus efficace. Les capacités sont vastes, ce qui en fait un outil utilisé dans de nombreux domaines industriels : Aéronautique, Véhicules à moteur, Marine, Biomédical, Refroidissement en électronique, Verre, Traitement de polymère, Processus chimique, Production d'électricité, Turbomachine, Environnement, dispersion des polluants dans un milieu ambiant, etc.…. **ANSYS-Fluent** se présente sous la forme de 2 fenêtres (Figure III.1) : un terminal et une fenêtre graphique.

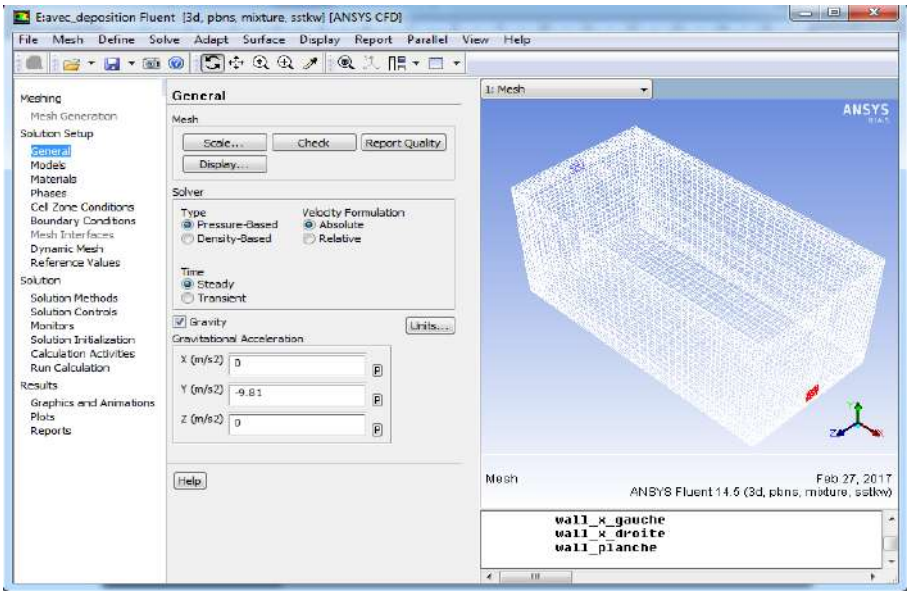


Figure III.1 : Interface graphique du code Fluent

Ainsi, il a la capacité de modéliser :

- Les Écoulements à 2D ou 3D ;
- États permanents ou transitoires ;
- Écoulements incompressibles ou compressibles incluant toute vitesse de régimes (subsoniques, transsoniques, supersoniques et hypersoniques) ;
- Écoulements non visqueux, visqueux, laminaires ou turbulents ;
- Les écoulements dans les milieux poreux.

Ce code de calcul utilise la méthode des volumes finis. La discrétisation des équations intégrales qui gouvernent l'écoulement, tel que l'équation de continuité, l'équation de la quantité de mouvement, et l'équation d'énergie associée à d'autres scalaires dépendants de la nature de l'écoulement est faite en se basant sur la technique du volume de contrôle elle consiste en :

- La division du domaine en des volumes de contrôle discrets en utilisant un maillage de calcul.
- L'intégration des équations gouvernantes sur les volumes de contrôle individuel, afin de construire les équations algébriques pour les variables dépendantes discrètes (les inconnues), tels que les vitesses, pressions, températures et les scalaires conservés.
- Les linéarisations des équations discrétisées et solutions du système d'équations linéaires résultant, pour pouvoir adapter les valeurs des variables dépendantes.

III.2. Procédure d'utilisation

III.2.1. Choix du solveur

Dans le module « *Define* » du code commercial « *Fluent* » (Figure III.1), on peut choisir entre les deux formulations [67] [68] [69]:

- La formulation « *Segregated* » (séparé), ou isolée (implicite) : Cette formulation peut résoudre numériquement les équations gouvernantes d'un écoulement, séquentiellement, c'est-à-dire indépendantes les unes des autres. Ce type de résolution est employé pour les écoulements incompressibles et ceux dont la compressibilité est modérée.
- La formulation « *Coupled* », ou couplée (implicite ou explicite) : Cette formulation permet la résolution simultanée des équations gouvernantes, sous un autre contexte couplé les unes avec les autres. Cependant, les autres scalaires tels que les quantités de la turbulence qui sont traités à part. Ce mode a été conçu principalement pour un écoulement compressible à grandes vitesses (Mach et Reynolds élevés). Ce qui lui donne un avantage pour le traitement d'un écoulement à forte interdépendance entre la densité, la pression et la température. Cette formulation est fortement recommandée pour les écoulements transsoniques à un nombre de Reynolds élevé et pour cela qu'elle a été choisie pour nos simulations bien qu'elle exige une double fois la mémoire que la formulation Segregated. Dans le cas des écoulements in-stationnaires, il est conseillé d'utiliser la forme couplée explicite.

III.2.2. Choix du schéma de discrétisation

Le code *« Fluent »* nous permet de choisir le schéma de discrétisation, pour les termes convectifs à chaque équation gouvernante (le second ordre est le plus utilisé pour les termes visqueux). Quand le « solver *coupled »* est utilisé, les équations sont résolues en utilisant par défaut le schéma du second ordre. Les autres équations utilisent le schéma du premier ordre par défaut (figure III.2).

Dans ce modèle des simulations et le schéma de second ordre upwind ont été choisis. Le schéma du premier ordre peut converger facilement, mais les résultats ne reflètent pas assez la réalité physique. Le schéma du second ordre a des difficultés à atteindre la convergence, mais présente de très bons résultats.

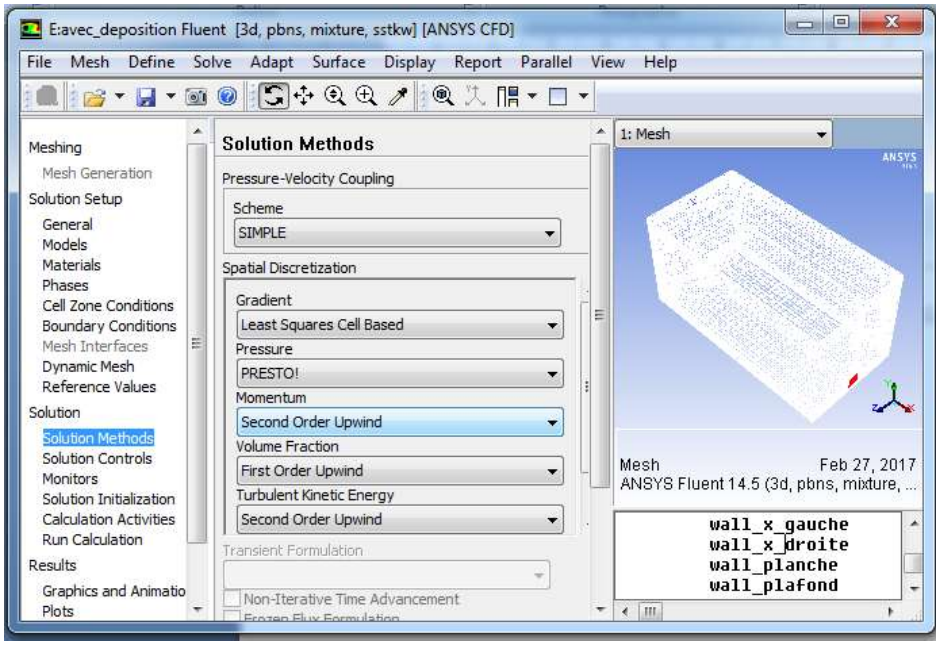


Fig.III.2 : Fenêtre de choix de Schéma de Discrétisation

III.2.3. Initialisation

Avant de commencer les simulations nous devons implémenter une estimation initiale de la solution du champ de l'écoulement, le choix adéquat des conditions initiales permet d'atteindre une solution stable et une convergence accélérée.

III.3. Traitement de la turbulence

L'écoulement turbulent est un phénomène très important dans le domaine industriel. La turbulence est un phénomène nature qui a lieu au sein des fluides lorsque les gradients de vitesse sont importants, cela dérive en une perturbation dans le domaine de l'écoulement comme une fonction d'espace et de temps par exemple la fumée dans l'air, la condensation de l'eau sur la paroi, les vagues entre autres. Un écoulement turbulent est caractérisé par [66] :

- Irrégularité dans le temps et dans l'espace : L'écoulement est très sensible aux perturbations, même faibles, celles-ci ayant tendances à s'amplifier pour de faibles viscosités. Ainsi, l'état turbulent n'est connu qu'à travers des grandeurs moyennes et fluctuantes. L'analyse de tels écoulements se fait ainsi de manière statistique. Sa modélisation est donc très délicate,
- Présence des structures de tailles très différentes qui interagissent entre elles : Plus le nombre de Reynolds est important, plus la différence de taille entre les plus petites structures et les plus grandes présentées dans l'écoulement est importante,
- Caractère dissipatif : La viscosité du fluide est à l'origine de la dissipation de l'énergie cinétique turbulente produite aux grandes échelles. Cette énergie se transforme en chaleur,
- Caractère diffusif : La turbulence augmente le taux de mélange et de diffusion des espèces chimiques.

Dans le cas des écoulements monophasiques, les modèles de fermeture sont normalement utilisés afin de montrer les influences des fluctuations de la vitesse turbulente et les quantités scalaires. En comparaison aux écoulements monophasiques, la modélisation de la turbulence dans les simulations multiphasiques est extrêmement complexe en raison du grand nombre de termes dans les équations de quantité de mouvement nécessitant la modélisation. La modélisation de la

turbulence dans les écoulements diphasiques peut être réalisée en utilisant soit des modèles *k-ε* ou modèles Reynolds-Stress (RSM).

La Figure (III.3) résume les différents types de modèles de turbulence : Moyenne de Reynolds des équations Navier-Stokes (RANS), Simulation des grandes échelles (LES) et la Simulation Numérique Direct (DNS). Le cadre en gras indique les modèles disponibles dans les codes standards CFD comme celui utilisé dans cette étude, Fluent.

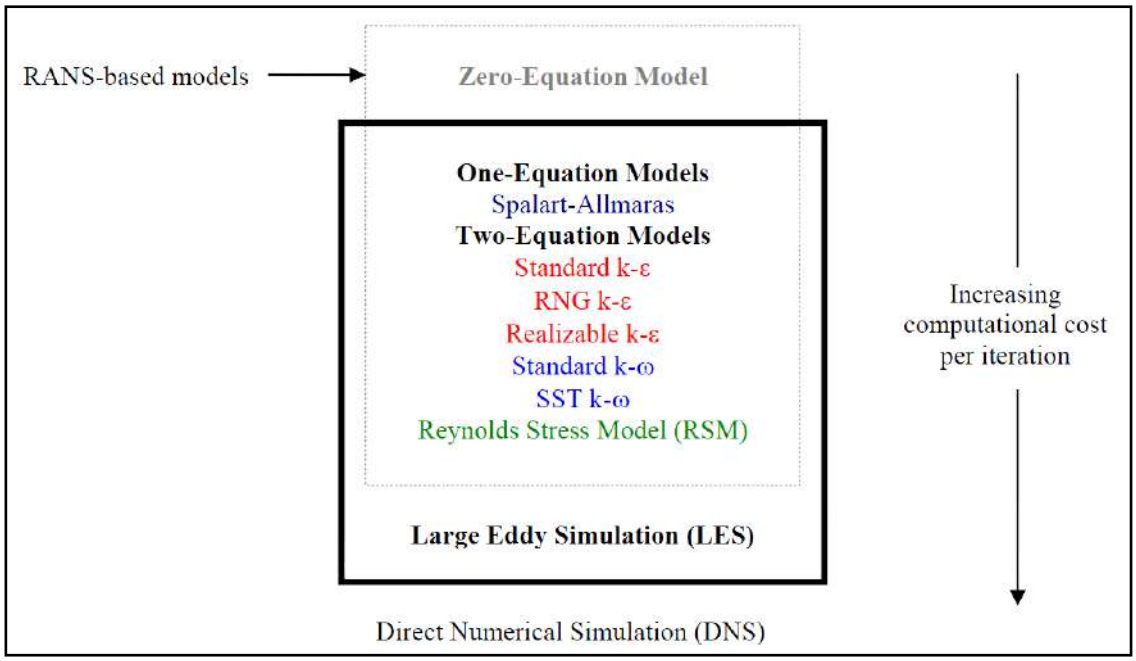


Fig.III.3 : Modèles de la turbulence [48]

Le tableau (III.1) résume le comportement des modèles de turbulence RANS et fournit des directives pour les situations où leur utilisation est appropriée. Le modèle *k-ε* et le modèle *k-ω* sont réputés pour fournir des performances supérieures dans les couches limites d'un écoulement à proximité immédiate des parois et les plus appropriés pour la couche limite des écoulements complexes sous un gradient de pression.

Tableau III.1 : Comportement et utilisation du modèle de turbulence RANS [60]

Modèle	**Comportement et Utilisation**
Spalart-Allmaras	Economique pour le maillage grossier. Performances faibles pour les écoulements 3D, les écoulements cisaillés libres et les écoulements avec une forte séparation. Approprié aux écoulements externes/internes modérément complexe (quasi-2D) et les écoulements dans les couches limites sous gradient de pression (surfaces aérodynamiques, ailes, fuselage d'avion, les missiles, les coques de navires).
Standard *k-ε*	Robuste. Largement utilisé, malgré les limites connues du modèle. Mauvaise performance pour les écoulements complexes impliquant ∇p sévère, la séparation, la forte courbure aérodynamique. Convient pour les versions initiales, première sélection des conceptions alternatives et des études paramétriques.
RNG *k-ε*	Approprié aux écoulements de cisaillement complexes impliquant la déformation rapide, tourbillon modérée, vortex et les écoulements localement transitoires (par exemple, la séparation de la couche limite, séparation massive et décollement de tourbillon derrière de corps non

	profilés, perte de vitesse dans les diffuseurs de grand angle, ventilation des pièces).
Realizable *k-ε*	Offre en grande partie les mêmes avantages et a les mêmes applications que RNG. Incapable d'utiliser de multiples référentiels. Peut-être plus précis et plus facile à converger que le RNG.
Standard *k-ω*	Une performance supérieure pour les écoulements dans les couches limites, cisaillement libre et les écoulements à faibles *Re*. Convient pour les écoulements complexes dans les couches limites sous gradient de pression (aérodynamique externe et turbo-machines). Peut être utilisé pour les écoulements de transition tend cependant à prévoir début de la transition). La séparation est généralement prévue pour être excessive et précoce.
SST *k-ω*	Des avantages similaires que le modèle standard *k-ω*. La dépendance de la distance de la paroi rend ce modèle moins approprié pour les écoulements de cisaillement.
RSM	Physiquement, c'est le modèle le plus solide des modèles RANS. Evite l'hypothèse de viscosité turbulente isotrope. Nécessite plus de temps CPU et de mémoire. Plus difficile à converger en raison de la fermeture du couplage des équations. Convient pour les écoulements complexe 3D avec une forte courbure aérodynamique, forte turbulence/rotation (par exemple, conduites courbés, des chambres de combustion de très grande turbulence à l'entrée, cyclones).

Fluent propose trois catégories de modèles de turbulence multiphasiques et elles sont toutes applicables à l'ébullition : Mixture, dispersée et par phase. Sous chaque catégorie, une gamme à 2 équations et à 7 équations des modèles de turbulence sont disponibles. Introduction de ϕ pour représenter les équations scalaires de turbulence (soit un mélange, pour le modèle de mixture, ou une variable de phase). Après option pour les équations différentielles à résoudre, s'agissant ici de la modélisation mathématique, il est nécessaire par ailleurs de transformer ces équations en équations algébriques (modélisation numérique), où toutes les variations continues des variables de l'écoulement doivent être représentées par des valeurs en des points discrets dans l'espace, les équations de modélisation de la turbulence ont la forme générale suivante :

$$\frac{\partial\left(\alpha_q \rho_q \emptyset_q\right)}{\partial t} + \nabla.\left(\alpha_q \rho_q \vec{u}_q \emptyset_q\right) = \nabla.\left(\alpha_q \Gamma_{\emptyset q} \nabla \emptyset_q\right) + \alpha_q S_{\emptyset q} \qquad \text{III.1}$$

Où $\Gamma_{\emptyset q}$ est le terme de diffusion, $S_{\emptyset q}$ est le terme source comportant production, dissipation et termes extra source résultant des interactions des bulles turbulentes. Pour les modèles de turbulence de la mixture, le volume de la fraction de la phase α_q est égal à *1.0* pour l'équation de mixture. ρ_q est la masse volumique de la phase mixture et $\vec{u}_q$ est la vitesse de la mixture ou de la phase (en fonction des équations).

Le modèle de mixture représente la première extension du modèle monophasique *k-ε*, c'est le modèle le plus utilisé dans la littérature ainsi que dans les codes commerciaux tel que Fluent, il s'agit d'un modèle à deux équations introduit pour la première fois par Chou en 1945 et dont on doit la forme actuelle à Launder et Sharma, en 1974. Ce modèle est considéré comme le modèle de turbulence multiphasique par défaut. Lorsque le rapport de densité entre les phases est proche de 1 et lorsque les phases se séparent, pour des écoulements diphasiques stratifiés, ce modèle peut être appliqué de façon appropriée. Dans chacun de ces deux cas, en utilisant les vitesses de mélange et des propriétés est suffisant afin de capturer les caractéristiques importantes de l'écoulement turbulent. L'équation de l'énergie cinétique turbulente et de son taux de dissipation qui décrit ce modèle sont [66] :

$$\frac{\partial(\rho_m k)}{\partial t} + \nabla.(\rho_m \vec{u}_m k) = \nabla.\left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_k}\nabla k\right) + G_{k,m} - \rho_m \varepsilon + S_k \qquad \text{III.2}$$

et

$$\frac{\partial(\rho_m \varepsilon)}{\partial t} + \nabla.(\rho_m \vec{u}_m \varepsilon) = \nabla.\left(\frac{\mu_{t,m}}{\sigma_\varepsilon}\nabla \varepsilon\right) + \frac{\varepsilon}{k}\left(C_{1\varepsilon} G_{k,m} - C_{2\varepsilon}\rho_m \varepsilon\right) + S_\varepsilon \qquad \text{III.3}$$

où ρ_m et $\vec{u}_m$ sont la densité et la vitesse du mélange et sont calculées comme suit :

$$\rho_m = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \, \rho_i \qquad \text{III.4}$$

et

$$\vec{u}_m = \frac{\sum_{i=1}^{N} \alpha_i \, \rho_i \vec{u}_i}{\sum_{i=1}^{N} \alpha_i \, \rho_i} \qquad \text{III.5}$$

La viscosité turbulent, $\mu_{t,m}$, est calculé ainsi :

$$\mu_{t,m} = \rho_m C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \qquad \text{III.6}$$

et la production d'énergie cinétique turbulente, $G_{k,m}$, est calculée par :

$$G_{k,m} = \mu_{t,m}(\nabla \vec{u}_m + (\nabla \vec{u}_m)^T) : \nabla \vec{u}_m \qquad \text{III.7}$$

Les deux termes supplémentaires qui ont été inclus pour décrire l'agitation de la bulle et la dissipation : l'un dans l'équation de l'énergie cinétique turbulente (S_k), et l'autre dans l'équation du taux de dissipation (S_ε) :

$$S_k = \frac{3}{4}\frac{a_v(1-a_v)\rho_l C_D}{D_b}|\vec{u}_l - \vec{u}_v|^2 \qquad \text{III.8}$$

$$S_\varepsilon = C_{\varepsilon 3}\frac{3C_D}{D_b}|\vec{u}_l - \vec{u}_v| S_k \qquad \text{III.9}$$

Les valeurs des constantes des équations du modèle, obtenues expérimentalement avec l'écoulement d'air et d'eau utilisées dans le code Fluent, sont résumées dans le tableau (III.2) en ci-dessous.

Tableau III.2 : Valeurs des constantes empiriques du modèle k-ε [69]

Constantes	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	$C_{3\varepsilon}$	C_μ	σ_k	σ_ε
Valeurs	1.44	1.92	0.45	0.09	1.0	1.3

III.4. Méthodes de discrétisation

Il est impossible de résoudre directement les équations décrites dans les sections précédentes (qui forment un ensemble d'équations simultanées aux dérivées partielles non linéaires). Au lieu de cela les équations sont converties à une forme algébrique simple qui peut être résolue numériquement. Ce processus est appelé discrétisation parce que des variables continues, comme ϕ, sont réduites à un ensemble de valeurs discrètes ϕ_i et les différentielles et les intégrales sont simplement des différences et des somme, de ces valeurs discrètes. Théoriquement [70]:

$$\left(\frac{\partial \emptyset}{\partial x}\right)_i \Rightarrow \frac{\emptyset_{i+1} - \emptyset_{i-1}}{2\Delta x} \qquad \text{III.10}$$

$$\int \emptyset dx \Rightarrow \sum_i \emptyset_i \Delta x \qquad \text{III.11}$$

Les valeurs discrètes sont localisées dans les centres de cellules (ou nœuds) dans une maille, et doivent être interpolées aux valeurs à face centrée au besoin.

Dans notre cas, les équations décrites précédemment n'ont pas de solution analytique. Pour ce faire, il faut choisir une méthode de discrétisation adaptée au problème. Les méthodes de discrétisations approchent la solution des équations différentielles avec une série d'équations algébriques, qui seront résolues en chaque point d'un ensemble de positions dans l'espace et dans le temps.

Les positions où les équations sont résolues sont définies par le maillage. Il existe une grande variété de méthodes de discrétisation, mais les plus implémentées en mécanique des fluides CFD sont :

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

Les choix des schémas de discrétisation, du solveur et des paramètres de contrôle des solutions sont ceux proposés par défaut par le logiciel. Ces choix font partie des règles de bonnes pratiques identifiées notamment dans les guides d'utilisation du logiciel.
Dans le code commercial Fluent V14.0.5, la méthode des volumes finis est utilisée. Cette méthode permet de résoudre les équations différentielles pour des géométries complexes. Les équations de conservations sont résolues dans chaque volume de contrôle. Le centre de la cellule contient le nœud ou les équations seront résolues, figure (III.4). Il est nécessaire d'utiliser des méthodes d'interpolation pour relier les nœuds.

En général, les schémas de discrétisation peuvent être évalués en termes de leur précision, stabilité et efficacité :

i) Précision : la précision est souvent considérée en termes d'erreurs de troncature des séries de Taylor. La plupart des schémas sont aux premiers ou deuxièmes ordre, cependant, certains codes implémentent des schémas d'ordre supérieur et hybrides (où le schéma varie d'une cellule à une autre sur la base des propriétés de l'écoulement tel que le nombre de Péclet). En plus de l'erreur de série de Taylor, certains schémas, tels que la différenciation en amont, sont sujettes à des fausses diffusions.

ii) Stabilité : la stabilité d'un schéma est sa capacité à produire une solution valable sur un large éventail de problèmes. Le schéma de discrétisation est stable quand il n'amplifie pas les erreurs au cours du processus de la solution numérique. Dans la pratique, la stabilité ne peut être assurée que si un schéma est :

- **Conservateur :** le flux calculé de la variable ϕ sur la face commune entre deux cellules doit être indépendant de la cellule considérée. Cela garantit que le principe de la conservation utilisée pour le calcul des équations principales est maintenu. Puisque les équations à résoudre obéissent aux lois de conservation, le schéma numérique doit être aussi. Ceci veut dire que les quantités conservées qui quittent un volume fermé doivent être égales aux quantités entrantes dans le cas stationnaire. Cette propriété est très importante puisqu'elle impose une contrainte sur l'erreur de la solution,

- **Délimitée** : la valeur de la variable ϕ dans un nœud devrait normalement (en l'absence de termes sources) se situent entre la valeur de la variable ϕ en nœuds voisins. La solution numérique doit être liée à ses propres limites (bornes), les quantités physiquement non négatives telles que la densité et l'énergie cinétique turbulente doivent toujours être positives. Cette propriété est difficile à garantir surtout quand les mailles sont grossières. Les schémas du premier ordre garantissent parfois cette propriété,

- **Transport** : à savoir, le schéma respecte l'importance relative de la convection et la diffusion (i.e. le nombre de Péclet) et la direction de l'écoulement.

iii) Efficacité : l'efficacité est la quantité de calcul nécessaire pour parvenir à une solution définitive, elle est fortement dépendante du cas. Par exemple, bien que les schémas d'ordre supérieur nécessitent plus de calcul par cellule, ils sont souvent en mesure de produire une solution en moins d'itérations ou en utilisant un maillage plus grossier de même précision produites par une solution de premier d'ordre.

La méthode des volumes finis, comme la méthode des éléments finis et bien d'autres, discrétise le problème comme suit :

- Discrétisation spatiale : division du domaine de l'espace en un ensemble de cellules,
- Discrétisation temporelle : pour des problèmes transitoires, en divisant le domaine temporel en un nombre fini d'intervalles de temps, ou pas de temps,
- Discrétisation des équations : génération d'un système d'équations algébriques en termes de quantités discrètes définies à des endroits spécifiques dans le domaine, à partir des équations qui caractérisent le problème.

III.4.1. Discrétisation spatiale

La première démarche à suivre dans la résolution du problème numérique est la création du maillage. C'est une étape extrêmement importante qui consiste à diviser le domaine géométrique du problème en un nombre précis de sous domaine ou de volumes de contrôle. L'ensemble des volumes de contrôle forme le maillage. La figure (III.4) schématise les volumes de contrôle en 2D et 3D.

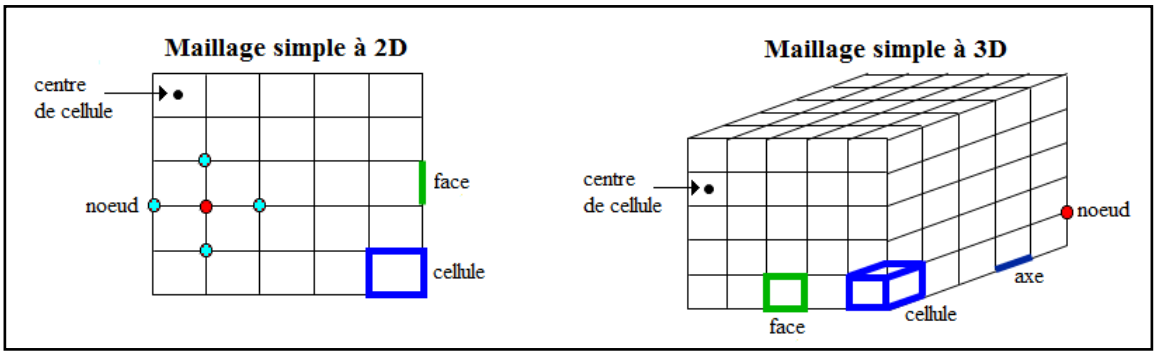


Fig.III.4 : Eléments de maillage [70]

Un maillage peut être structuré ou non structuré, en fonction des types de cellules qui le composent. Chaque volume de contrôle à un nombre précis de faces ainsi qu'un nombre précis de nœuds. La figure (III.5) schématise les types de cellules. Les maillages structurés sont constitués par des volumes de contrôle avec une forme de quadrilatère en configuration 2D et d'hexaèdre ou prisme en configuration 3D. L'intérêt principal est de créer une structure qui puisse être alignée avec l'écoulement, de manière à minimiser la diffusion numérique. Néanmoins, les maillages structurés ne sont utilisables que pour des structures géométriques simples.

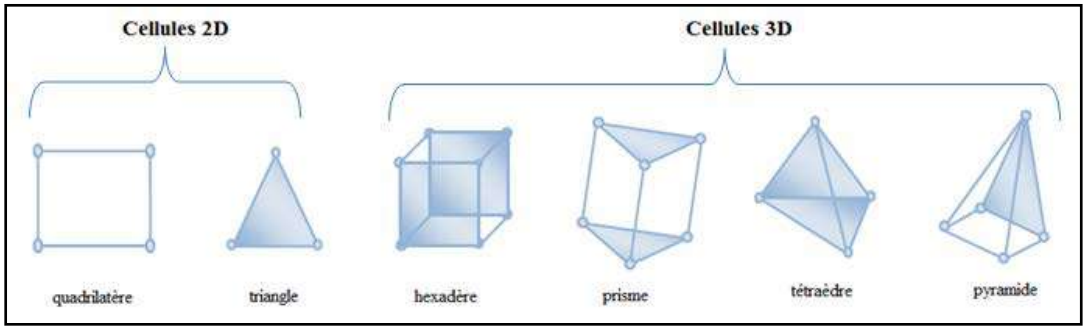


Fig. III.5 : Types de cellules [70]

Une alternative pour des géométries très complexes est d'utiliser des maillages non structurés. Ils n'ont pas de restriction dans les nombres d'éléments voisins et peuvent avoir en théorie n'importe quelle forme. En pratique, les maillages non structurés sont formés de volume de contrôle triangulaires pour les géométries en 2D, et tétraédriques ou pyramidaux en 3D. Le principal inconvénient dans ce type de maillage est l'irrégularité de la structure des données.

L'utilisation de maillages hybrides est une alternative intéressante pour des systèmes complexes. Il est possible de créer des volumes de contrôle structurés dans des zones avec des géométries simples et non structurées dans les zones avec des géométries plus complexes. La principale difficulté lors de l'utilisation des maillages hybrides vient de la nécessité de concordance aux interfaces des zones structurées et non structurées. La qualité de chaque volume de contrôle est mesurée par le coefficient de déformation géométrique, Ξ (equiangle skew, en Anglais) qui est défini par :

$$\Xi = max\left[\frac{\theta_{max} - \theta_e}{180 - \theta_e}, \frac{\theta_e - \theta_{min}}{\theta_e}\right] \qquad \text{III.12}$$

Où θ_e est l'angle d'élongation idéale (face/cellule), il est égal à 90° pour la cellule quadrilatère et hexaèdre et est égal à 60° pour la cellule triangle et tétraèdre, voir figure (III.6).

La grandeur Ξ varie de 0 à 1, zéro correspond à un maillage de très bonne qualité et 1 correspond à un maillage de mauvaise qualité. La valeur limite recommandée est Ξ =0.9. Des volumes de contrôle de bonne qualité permettront une convergence plus rapide en réduisant les erreurs de calcul numérique.

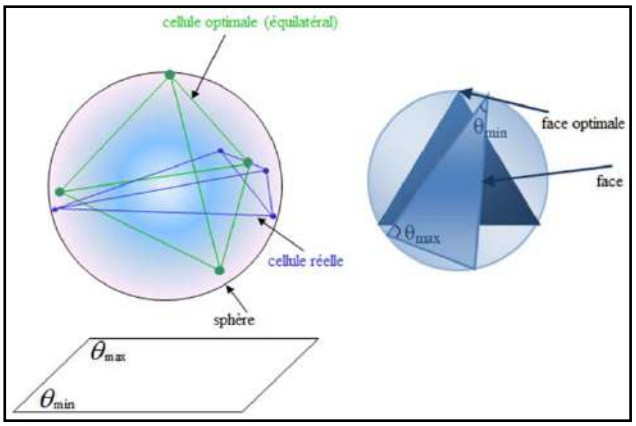


Fig.III.6 : Elément du volume de contrôle [70]

III.4.2. Discrétisation temporelle

La discrétisation spatiale n'est pas suffisante lorsqu'il s'agit d'écoulements transitoires. Une discrétisation temporelle, par une division du temps de simulation en différents pas de temps *dt*, qui soit compatible avec le maillage et avec les modèles physiques choisis, s'avère nécessaire pour procéder ensuite à une intégration de chaque équation de conservation, des mécanismes physiques auxquels on s'intéresse, sur chaque pas de temps [66].

IL existe une grande variété de méthodes de discrétisation temporelle, mais les plus implémentées en mécanique des fluides CFD sont :

- Schémas d'Euler,
- Schémas de Runge-Kutta,
- Schémas avec discrétisation du terme source (Crank-Nicolson, Adams-Bashforth).

Pour les solutions transitoires, c'est-à-dire

$$\frac{\partial(\rho\emptyset)}{\partial t} \neq 0 \qquad \text{III.13}$$

Le domaine temporel du problème est divisé en pas de temps discrets de taille finie. Ce processus est similaire à la discrétisation spatiale décrite dans la section (III.4.1)

Une fois que le schéma numérique est établi et que le problème discret est formulé, il s'agit non seulement de le résoudre, mais encore de s'assurer que la solution discrète converge vers la solution exacte lorsque les pas du maillage tendent vers 0.

Pour certains schémas dits explicites, il est possible d'ordonner les inconnues de telle sorte que chacune d'elle puisse être déterminée récursivement à partir des précédentes qui sont supposées être déjà calculées (la valeur de ϕ à un pas de temps ne se trouve que par référence à la solution au

pas de temps précédent). Pour les schémas implicites, il est parfois possible d'éviter de résoudre l'ensemble du système de toutes les équations. C'est en particulier le cas pour un système évolutif dont l'état, caractérisé par des variables spatiales, est défini par des conditions initiales (t = 0), puis évolue progressivement au cours du temps : le schéma numérique reste explicite dans la variable temporelle et son caractère implicite ne concerne que les variables spatiales (la valeur pour ϕ est déterminée par référence à la fois au pas de temps précédent et au pas de temps actuel). Les schémas implicites sont stables et pour cette raison sont préférés pour la plupart des applications malgré leur complexité accrue.

III.4.3. Discrétisation des équations

Dans tous les cas, chaque équation du schéma numérique ne concerne qu'un petit nombre d'inconnues. Dans un environnement linéaire, cette propriété conduit à formuler le problème discret à l'aide de matrices creuses et à en tirer profit pour le résoudre en utilisant des méthodes appropriées. Cet avantage est indéniable lorsque la taille du maillage dépasse le cadre d'une étude didactique.

La résolution des schémas numériques s'appuie en général sur des méthodes algébriques classiques. Cependant d'autres formulations équivalentes peuvent faire appel à des méthodes d'optimisation.

Le système algébrique obtenu après discrétisations spatiale et temporelle est énorme et les équations sont fortement couplées. Des méthodes itératives sont alors utilisées pour obtenir une solution. Le nombre d'itérations pour résoudre les équations à chaque pas de temps doit être fixé, ou alternativement, un critère indiquant la convergence de la solution doit être défini. Les paramètres qui peuvent être suivis, pendant le calcul d'une solution pour juger de la convergence de la solution, sont variables d'un outil CFD à un autre et il peut donc être plus ou moins facile de s'assurer de la convergence.

III.5. Traitement auprès de la paroi

L'objectif de ce paragraphe est de fournir quelques éléments de compréhension de la physique des écoulements turbulents anisothermes près de la paroi, afin d'en envisager la modélisation par des modèles de parois ou d'en tenir compte lors de simulations de référence fines.

Les modèles de turbulence ne sont plus valides dans les zones proches des parois, caractérisées par de fortes contraintes et un gradient de vitesse très important et où le moteur de la diffusion de quantité de mouvement n'est plus associé à la turbulence mais à la diffusion moléculaire. L'adhérence sur les murs impose une vitesse nulle à la paroi. Un écoulement dans la couche limite classiquement observé est présenté sur la figure (III.7). On notera que dans ce graphique, des grandeurs sans dimension, basées sur des caractéristiques de l'état de turbulence sont utilisées. On définit pour cela une vitesse caractéristique u_τ , appelée vitesse de frottement et une longueur caractéristique *l* (demi-hauteur d'un canal, ou rayon d'un tuyau par exemple).

$$u_\tau = \left(\nu \frac{\partial u}{\partial x_n}\right)_w^{1/2} \qquad \text{III.14}$$

$$l = \frac{\nu}{u_\tau} \qquad \text{III.15}$$

Où x_n désigne la direction normale à la paroi et ν désigne la viscosité cinématique.

Les grandeurs rendues sans dimension telles que la vitesse, notée u^+, et les distances, y^+, seront exprimées en unités de paroi par :

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau} \qquad \text{III.16}$$

$$y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu} \qquad \text{III.17}$$

Où *y* désigne la distance à la paroi.

A partir de cet adimensionnement, on peut aussi exprimer un temps caractéristique de la turbulence de paroi par :

$$t_\tau = \frac{\nu}{u_\tau^2} \qquad \text{III.18}$$

Et un nombre de Reynolds turbulent tel que :

$$Re_\tau = \frac{l u_\tau}{\nu} \qquad \text{III.19}$$

Les couches limites turbulentes canoniques sont caractérisées par 3 zones distinctes, figure (III.7) :

- La sous couche visqueuse pour $0 \leq y^+ < 5$, la couche la plus proche du mur. L'écoulement y est laminaire et la viscosité moléculaire joue un rôle important,

$$u^+ = y^+ \qquad \text{III.20}$$

- La zone intermédiaire pour $5 \leq y^+ < 30$, au sein de laquelle les effets de la viscosité moléculaire et de turbulence sont d'égales importances, c'est une zone tampon, complexe située entre les deux régions précédentes. On définit une fonction qui assure la continuité entre les lois de la sous couche visqueuse et la région à la loi logarithmique,

$$u^+ = \frac{1}{0.2} ln y^+ - C_1 \qquad \text{III.21}$$

  0ù C_1 est une constante d'intégration, $C_1 = 3.05$

- Enfin, la couche extérieure, appelée couche pleinement turbulente pour $y^+ > 30$, c'est la zone la plus éloignée de la paroi dans laquelle l'écoulement est conditionné par la vitesse maximale et il est peu influencé par les effets de la viscosité moléculaire. L'écoulement suit une loi logarithmique,

$$u^+ = \frac{1}{k} ln y^+ + C_2 \qquad \text{III.22}$$

  0ù *k* est la constante de Karman, $k = 0.41$ et $C_2 = 5.45$.

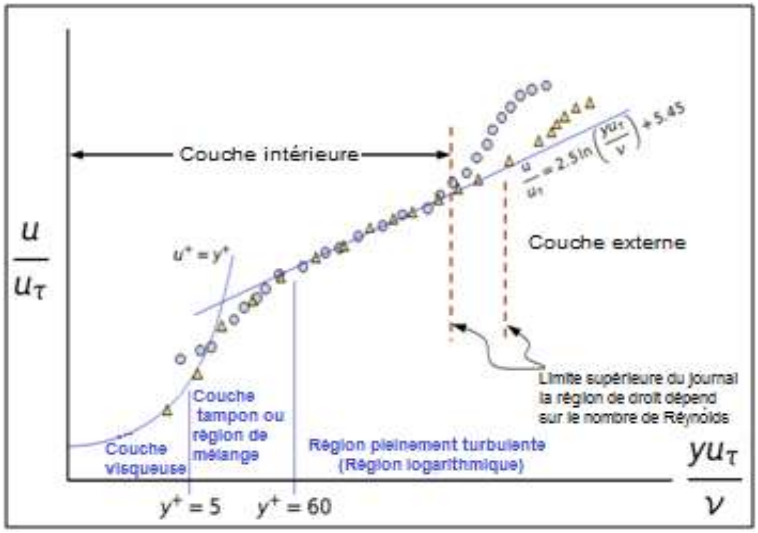


Fig.III.7 : Lois de parois [70]

Ceci illustre une loi de paroi de type « log » à une échelle. Il est donc fait l'hypothèse d'un écoulement turbulent en proche paroi. Il existe d'autres lois de paroi (loi log à deux échelles, modèle à deux couches. Suivant le régime d'écoulement (convection naturelle, forcée ou mixte), elles seront plus ou moins valables.

La couche limite est divisée en plusieurs zones : la zone interne et la zone externe. Plusieurs approches sont disponibles avec Ansys-Fluent® pour modéliser la sous-couche visqueuse et la zone tampon de la zone interne :

- La première approche est d'utiliser une approche d'une fonction de paroi. Cette dernière utilise une loi de paroi semi-empirique en régime turbulent lisse pour modéliser l'effet de la couche limite turbulente sur l'écoulement. Il suffit alors d'une seule maille associée à cette loi pour modéliser la couche limite de proche paroi. Cette approche, moins précise, nécessite beaucoup moins de mailles de calcul. Elle impose cependant une contrainte sur la dimension des mailles situées sur les bords qui doivent correspondre à peu près à la couche modélisée. Il faut ainsi que

$$30 < y^+ < 300 \qquad \text{III.23}$$

En supposant que la taille caractéristique des premières mailles est de l'ordre du centimètre, il faut vérifier que la vitesse caractéristique moyenne de l'écoulement *u* soit bien comprise entre

$$0.1\ ms^{-1} < u < 100\ ms^{-1} \qquad \text{III.24}$$

FLUENT propose quatre options pour traiter la turbulence près des parois : les fonctions standard de parois (Standard Wall-Functions), les fonctions de parois évolutives (Scalable Wall-Functions), les fonctions de parois non équilibrées (Non-equilibrium wall-function) est particulièrement adaptée pour les écoulements complexes, soumis à de forts gradients de pression et un traitement amélioré des lois de parois (Enhanced wall treatment) qui tient le plus compte de l'effet de paroi. Dans chacun de ces cas, une vérification a posteriori doit être faite afin de vérifier le maillage. Cela se fait en regardant les valeurs que prend y^+.

- La deuxième approche est de mailler finement cette zone et calculer exactement les écoulements dans la sous couche visqueuse et dans la région de recouvrement avec la Near-

Wall Model Approach. Cette technique, plus précise, nécessite un affinement du maillage en proche paroi, ce qui requiert un grand nombre de mailles.

III.6. Conclusion

Tout au long de ce chapitre, nous avons tenté de donner un maximum d'informations sur la structure du code Fluent, au début de ce chapitre, nous avons passé en revue les échelles d'analyse qui permettent la prédiction des écoulements fluides. Ensuite, les avantages, développement, vérification et validation d'un modèle sous des codes CFD ont été discutés. Dans ce chapitre, la procédure de solution numérique a été discutée. Enfin, les stratégies de discrétisations spatiales et temporelles, les techniques de stabilisation et traitement de la paroi ont été présentés.

CHAPITRE IV

Mise en œuvre

L'objectif de ce dernier chapitre, mise en œuvre de différents modèles du calcul du transfert des polluants injectés dans un milieu ambiant, est la validation de ce qui a été fait lors des chapitres précédents par la confrontation des résultats simulés avec les mesures expérimentales si possibles. A travers les chapitres précédents, nous pouvons dire que la dispersion dans un milieu proche de la source d'émission est tributaire d'un grand nombre de variables. La modélisation de ce phénomène d'une manière précise et rapide peut être une difficulté de premier ordre pour les industriels durant la phase des études d'impacts de dangers dans les situations d'urgence.

D'une part et en fonction de cette diversité des paramètres qui peuvent être influencés sur la dispersion, les modèles simples et rapides ne sont pas utilisables en champ proche et obstrué. D'autre part, les approches plus précises telles que la CFD est beaucoup plus lentes et nécessitant un certain professionnalisme pour son application. Un certain nombre d'initiatives ont été développées afin de réduire le temps de calcul d'un côté et augmenter la précision de l'autre. Par ailleurs, certaines des méthodes ainsi créées sont spécifiques à une situation d'étude ce qui limite leur utilisation.

A cet effet, nous avons utilisé plusieurs approches pour la modélisation d'un tel phénomène de la dispersion des polluants dans un milieu ambiant et ceci pour le classifier de côté rapidité et précision. Parmi ces modèles que nous avons développés, qui peuvent être regroupés en trois parties :

- **Partie 1** : L'utilisation du modèle Gaussien pour l'étude d'un panache ;
- **Partie 2** : L'application du modèle tridimensionnel CFD pour l'étude :
    - D'un panache de rejet ;
    - Du transfert de polluant dans un milieu confiné ventilé.
- **Partie 3** : L'application des réseaux neurones pour l'étude du transfert des polluants dans un milieu confiné au deux cas du régime de l'écoulement (stationnaire et transitoire).

Dans le contexte de la diversification, de recensement des outils nécessaires pour analyser un tel phénomène de dispersion ou diffusion des émissions des éventuelles sources de pollution, nous commençons nos simulations numériques par la solution analytique Gaussienne de l'équation de transport-diffusion d'un polluant qui est mentionnée au chapitre II par l'équation (II.29).

IV.1. Étude d'un panache utilisant le modèle Gaussien

Afin de connaitre la cartographie spatiale d'un panache réel diffusé à travers une cheminée d'une hauteur de 65 m, refoule un rejet du débit massique de 5.10 kg/s, et dans les conditions normales de l'atmosphère. La température et la densité du rejet sont supposées similaires à ceux de l'air atmosphérique. Nous utilisons les profils verticaux de vitesses de la figure (V.15) pour la détermination de vitesse de vent à une hauteur de 65 m (point de rejet)

IV.1.1. Domaine de la simulation

L'objectif est de déterminer la distribution de concentration par plusieurs modèles et de comparer les résultats trouvés, nous choisissions un domaine d'application similaire à celui utilisé dans le paragraphe (IV.2) qui traite le modèle CFD. Le domaine du calcul est représenté dans la

figure (IV.11) et avec ces limites selon les trois directions de l'espace (x, y, z) sont respectivement de 100 x 150 x 100 m^3.

IV.1.2. Phase préparatoire du calcul analytique

La solution analytique C(x, y, z) de l'équation (II.29) modélise la distribution de concentration des polluants refoulés par une cheminée d'une zone industrielle dans l'atmosphère et en régime d'écoulement stationnaire. Dans ce cadre, nous avons développé un programme écrit en code « Matlab ». Ce programme est utilisé pour calculer la concentration des polluants en coordonnées spatiales (x, y, z) et divisé en trois parties :

- La première partie est consacrée à la discrétisation du domaine et le calcul des écarts types à partir différentes corrélations mentionnées dans le chapitre modélisation (II) ;
- La deuxième partie est réservée aux calculs de la concentration C(x, y, z) ;
- La troisième partie est pour la visualisation graphique de concentration.

La discrétisation du domaine avec un pas d'espace de 1m sur la direction axiale, de 2m sur l'axe radial et de 1m sur l'axe vertical. Pour éviter les résultats erronés au point de la source (Équation II.29, valeur zéro au deviseur), d'où en décalant notre programme d'une distance à x = 10 m de la source. En supposant qu'il existe une symétrie à y=0 au plan (x, z) central de la diffusion du panache.

IV.1.3. Etude de l'effet de corrélation d'écarts types sur la dispersion atmosphérique

Le paramètre de la turbulence est un paramètre très dominant sur l'estimation de la dispersion des polluants dans l'atmosphère. Pour la solution analytique, la turbulence est comptée par la détermination des écarts-types (σ_y et σ_z) qui sont déterminés par des équations empiriques. Afin d'étudier l'effet de l'utilisation de différentes corrélations des écarts-types sur l'estimation de la concentration, nous avons effectué une série de tests sur quatre corrélations pour déterminer ces écarts-types. Ces quatre corrélations utilisées sont celles de Pasquill, de Briggs, de BNL et de Doury. Nous avons donné des noms aux modèles établis par leurs corrélations des écarts types, et sont indiqués dans le tableau (IV.1).

Tableau. IV.1 : Tableau des noms des modèles avec ces corrélations

Nom du modèle	**Modèle de simulation**	**Modélisations de la turbulence**
Modèle_Pasquill	Solution Gaussienne	Corrélation Pasquill
Modèle_Briggs	‘ ‘ ‘’	Corrélation Briggs
Modèle_BNL	**‘ ‘ ‘’**	**Corrélation BNL**
Modèle_Doury	‘ ‘ ‘’	Corrélation Doury
modèle_CFD	Modèle CFD (Référence)	méthode CFD

Après l'exécution de ce programme simulant la concentration d'un panache du rejet à travers une cheminée, nous pouvons donner les résultats de concentration dans le plan spatial (x, y, z), sous la forme des représentations graphiques qui sont mentionnées dans les figures en ci-dessous. Pour les résultats simulés par le modèle tridimensionnel, nous utilisions ceux qui sont trouvés dans la partie CFD (IV.2.1) citée en ci-dessous. Ces profils CFD sont utilisés comme référence pour notre comparaison. Aux trois positions axiales (x=50m, 100m et 140m) à y= 0 m, nous donnons les profils verticaux de concentration qui sont représentés pour quatre modèles Gaussiens dans les figures (IV.1, IV.2 et IV.3). A travers les résultats trouvés, nous constatons que la solution analytique surestime la concentration des polluants, si on prend les valeurs trouvées par CFD comme valeurs de référence.

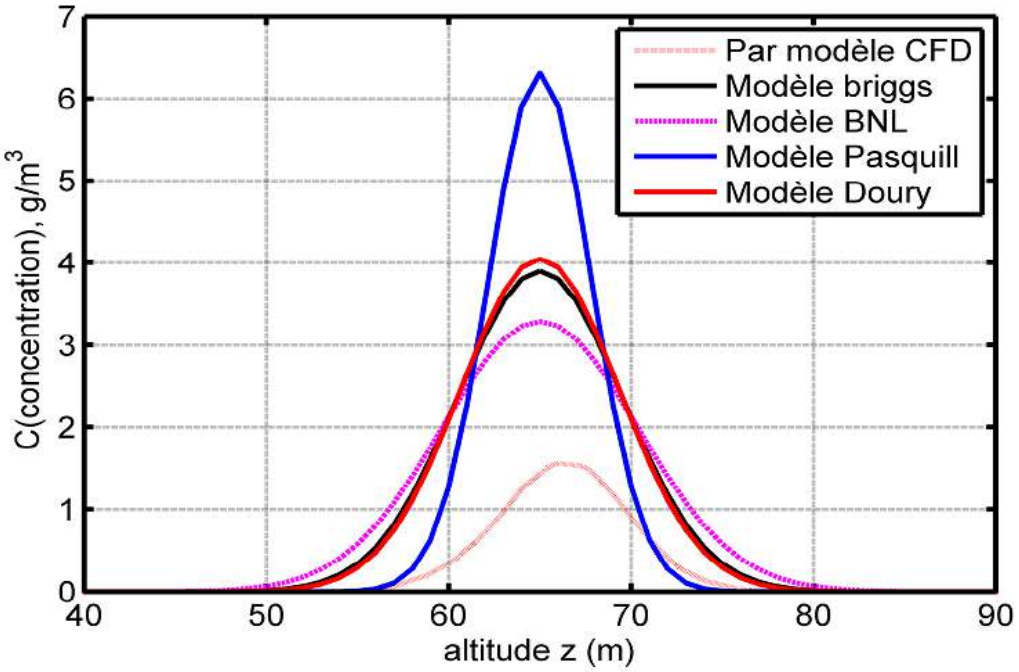


Fig. IV.1 : Profils verticaux de concentration à y=0, x=50m et à différent corrélations

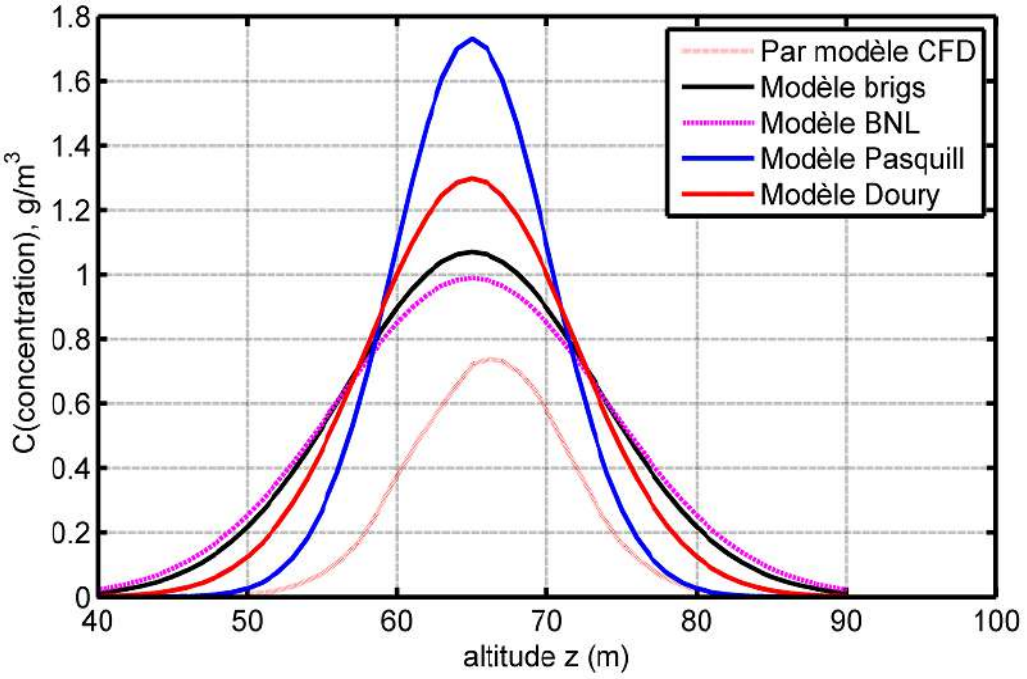


Fig. IV.2 : Profils verticaux de concentration à y=0, x=100m et à différent corrélations

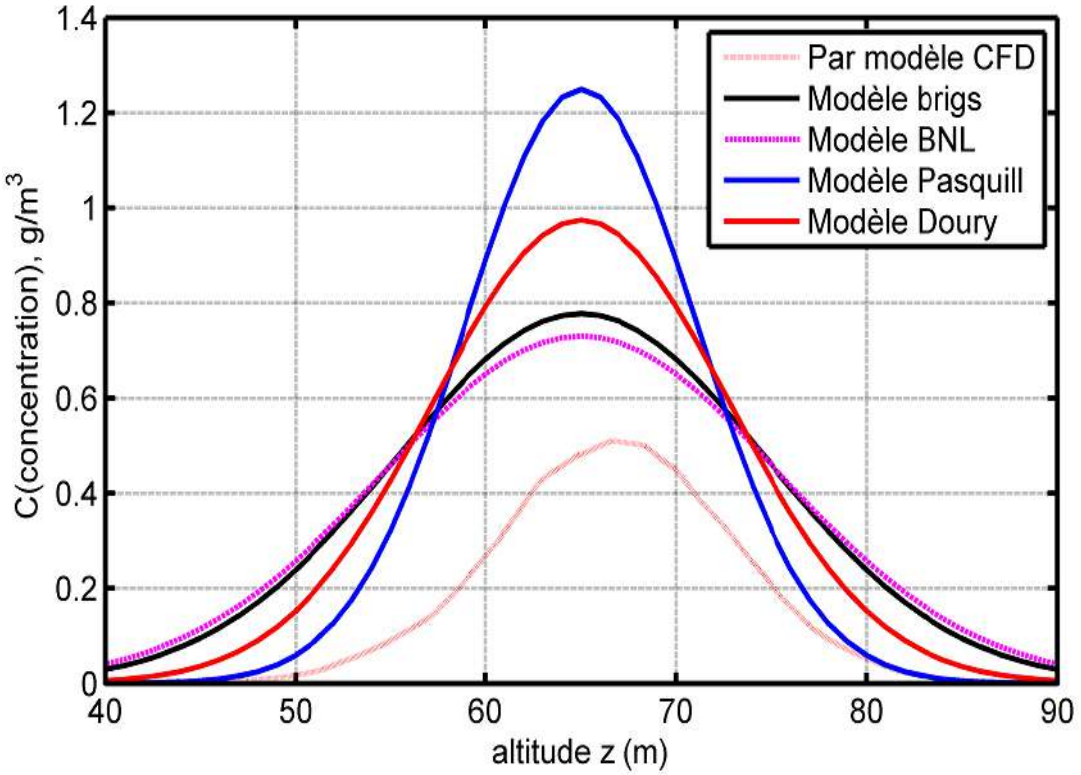


Fig. IV.3 : Profils verticaux de concentration à y=0, x=140m et à différent corrélations

Pour une raison de comparaison entre les profils de concentration, déterminer par différente corrélation, comme indique les figures (IV.1, IV.2 et IV.3), nous remarquons un maximum de concentration auprès de z=65 m, ainsi que nous déterminons les valeurs de ces maximums par rapport a celui de modèle de CFD. Ces facteurs multiplicateurs sont indiqués au tableau suivant :

Tableau. IV.2 : Tableau de facteur multiplicateur

	Distance axiale de la source (m)		
Modèle	**x=50**	**x=100**	**x=140**
Modèle_Pasquill	4	2.34	2.46
Modèle_Briggs	2,48	1.45	1.52
Modèle_BNL	**2.09**	**1.35**	**1.42**
Modèle_Doury	2.57	1.76	1.91

Nous constatons, à travers ce tableau des facteurs multiplicateurs, que le modèle Gaussien pour une distance x inférieure de 100 m de la source donne une grande estimation par rapport aux valeurs trouvées par CFD. Par exemple pour le modèle_Pasquill, nous visualisons un facteur multiplicateur de 4, c'est-à-dire une erreur de 300 % par rapport au modèle CFD. Par contre, pour une distance x égale à 100 m ou supérieure, le facteur multiplicateur est inférieur à 2 pour tous les modèles, sauf le cas du modèle de Pasquil qui donne un facteur de 2.34, et l'erreur par rapport au modèle CFD est de 135 %. A partir les graphes des figures (IV.1), (IV.2), (IV.3) et le tableau (IV.2), nous déduisons que le modèle BNL est le meilleur modèle pour notre application, et son erreur ne dépasse pas le 40 % aux points maximums de concentration pour chaque profil. Dans l'étude de Gabruck et al., ils ont trouvé que les valeurs simulées sont dans un facteur 2 de la valeur mesurée correspondante (Gabruck et al,1999). Pour le modèle BNL, même à x=50m un facteur multiplicateur de 2.09 est acceptable si on compare à celui de « Gabruck » (Gabruck et al, 1999).

Faute de données expérimentales pour la confrontation aux résultats trouvés pour voir si le modèle CFD sous-estime ou surestime le phénomène de la dispersion d'un panache. Si le modèle CFD donne une sous-estimation (figures IV.1, IV.2 et IV.3) par rapport à l'expérimentale, notre modèle analytique est fiable et proche de la réalité.

Par les figures (IV.1), (IV.2) et (IV.3), nous avons déterminés la largeur de différents profils verticaux de concentration de l'air pollué refoulé à travers une cheminée. Cette analyse est effectuée dans le plan (x, z) à x supérieur ou égal à 50 m de la source de pollution. Pour visualiser graphiquement la largeur du panache selon l'axe z d'ordre général, on a donné la figure (IV.4). Après calcul, nous pouvons donner les valeurs de largeur du panache dans le tableau (IV.3). À travers le tableau (IV.3) des largeurs verticales du panache à y=0 (plan du refoulement), on peut noter que le modèle Gaussien BNL à une large diffusion du panache dans le plan (x, z), si on les compare aux autres modèles les largeurs sont presque deux fois celles trouvées par le modèle CFD. D'où le modèle BNL prévoit une surestimation de la largeur de la diffusion du panache selon l'axe vertical (z) par rapport aux autres.

Tableau. IV.3 : Largeur du panache à y=0

x de la source	**Largeur du panache L(m)**				
	Modèle_Pasquill	**Modèle_Briggs**	**Modèle_BNL**	**Modèle_Doury**	**modèle_CFD**
050 m	12.8	17.9	**20.9**	17.9	10.5
100 m	17.9	23.4	**24.2**	21.1	11.5
140 m	23.2	32.1	**33.5**	27.7	16.8

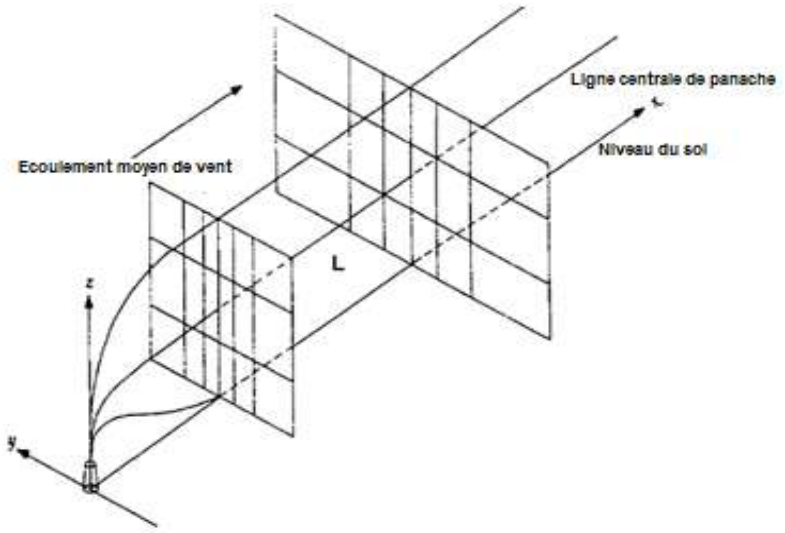


Fig. IV.4 : schéma de principe d'un panache tridimensionnel [74]

Au proche de la source de pollution, le modèle analytique donne une grande surestimation des valeurs de concentration par rapport à ceux trouvés par le modèle CFD. Ces grandes valeurs se décroissant sous une forme exponentielle quand en éloignant d'elle, jusqu'à s'aplatit vers des valeurs très faibles et se converge à celles trouvées par le modèle CFD. La grande surestimation de concentration due aux sous-estimations des écarts types, si on voit la figure (IV.1) à x=50m.

La figure (IV.5) présente les profils axiaux de la concentration des polluants à z=65m au sol et à y= 0 m c'est-à-dire à l'axe radial de refoulement de l'air pollué. Comme précédent, cette représentation graphique montre que la concentration des polluants déterminés par la solution analytique pour les quatre corrélations des écarts types surestime la concentration au proche de la source. Mais quand on s'éloigne de la source de pollution, ces profils se convergent vers le profil CFD et surtout ceux déduits par les modèles Brigs et BNL.

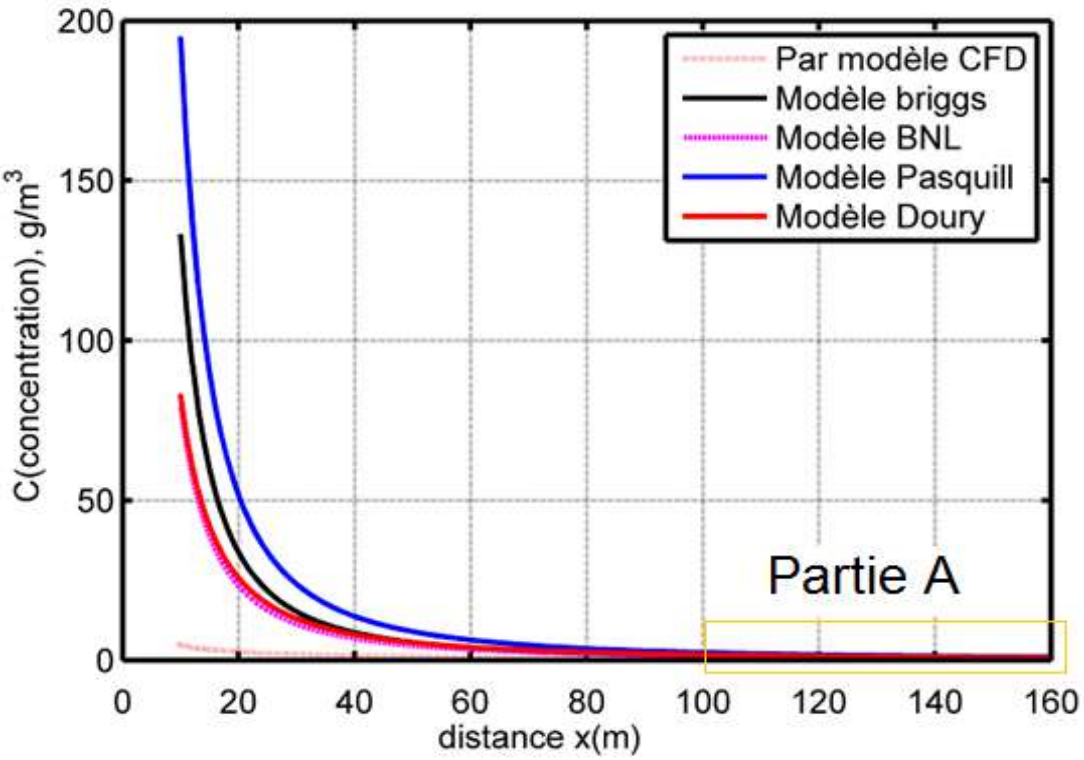


Fig. IV.5 : Profils axiaux de concentration à y=0, z=65m et à différent corrélation des écarts types

Pour bien visualiser la différence entre ces profils pour la partie quand x varie de 100 à 160 m, nous procédons à son agrandissement, qui est représentée dans la figure (IV.6). Par cette représentation graphique, nous pouvons dire encore que le profil axial de concentration déduit par le modèle BNL est le plus proche de celui du modèle CFD.

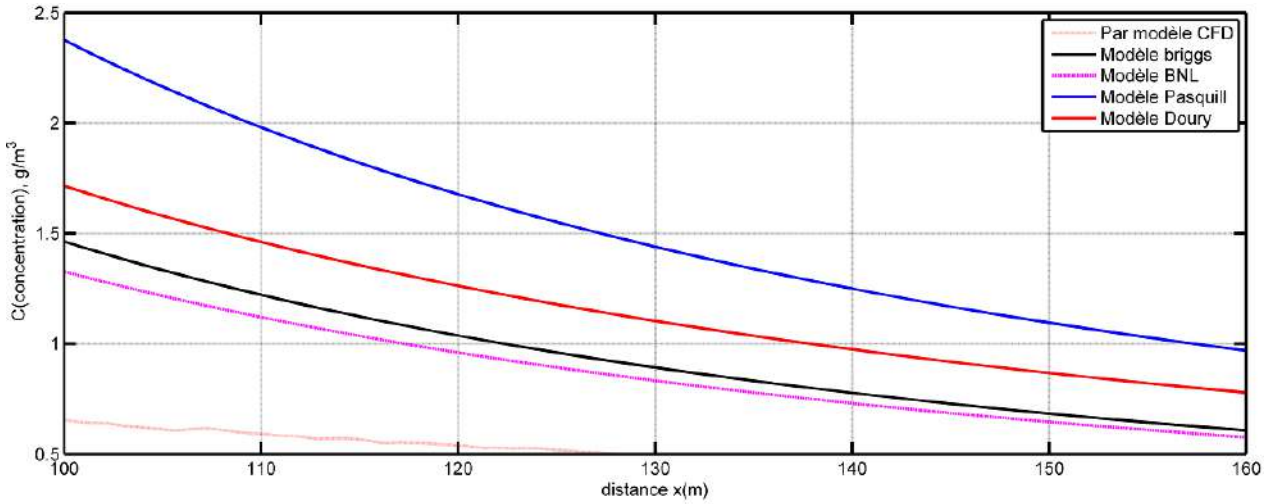


Fig. IV.6 : Agrandissement de partie A : x varie de 100 à 160 ; de la figure (IV.5)

IV.1.4. Evolution de concentration dans le plan (x, y) à z=65m

Après la comparaison effectuée ci-dessus, où nous avons utilisé les valeurs trouvées par CFD comme valeur de référence a montré que les résultats donnés par la solution analytique utilisant

la corrélation BNL sont acceptables et proches des valeurs trouvées par la méthode CFD. Dans la suite de notre calcul par voie analytique, nous utilisons cette corrélation pour déterminer la distribution tridimensionnelle de concentration de la pollution dans l'atmosphère en régime stationnaire.

La figure (IV.7) présente la distribution tridimensionnelle de concentration des polluants, au plan (x, y) à z=65m, a montré, que la concentration est inférieur de 10 g/m^3 sauf aux points proches de la source dont les coordonnés (x, y) inférieur (30 m, 5m) qui sont supérieure 10 g/m^3 et atteint 70 g/m^3 même dépasse cette valeur juste près de la source.

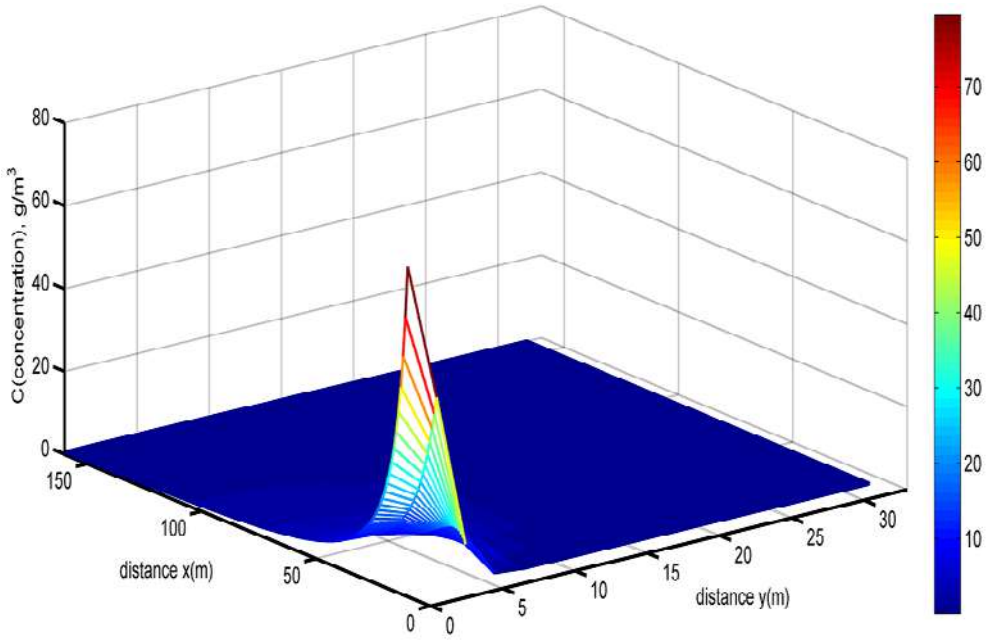


Fig. IV.7 : Distribution en 3D de concentration des polluants dans plan (x, y) à z=65m

La figure (IV.8) visualise les iso-concentrations des polluants au plan (x, y) et a z= 65m. Cette figure montre une distribution en bouffe, se propage presque dans l'axe diagonale du plan. Ces iso-concentrations diminuent quand on s'éloigne de la source dans les deux sens ; par cette représentation graphique, nous déduisons que la diffusion du panache forme un angle aux environs de 30° par rapport à l'axe y.

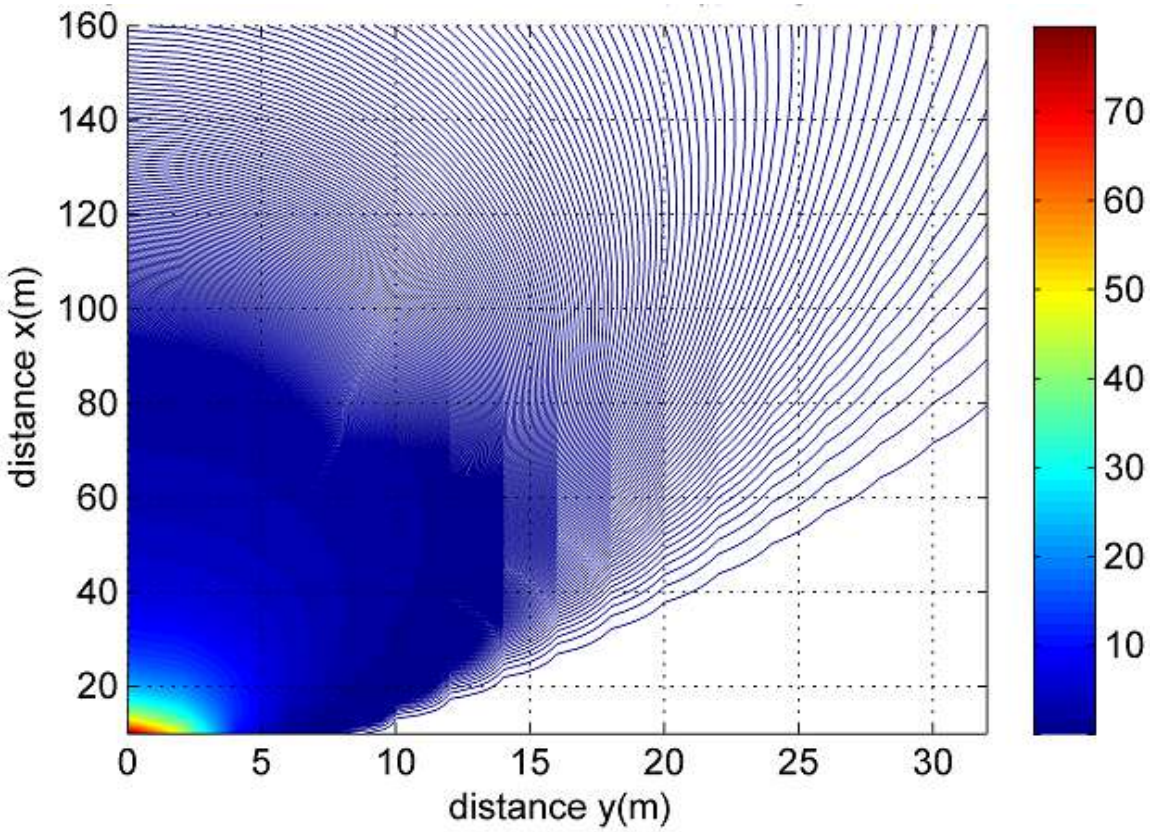


Fig. IV.8 : Iso-concentration dans plan (x, y) à z=65m

IV.1.5. Evolution de concentration dans le plan (x, z) à y=0

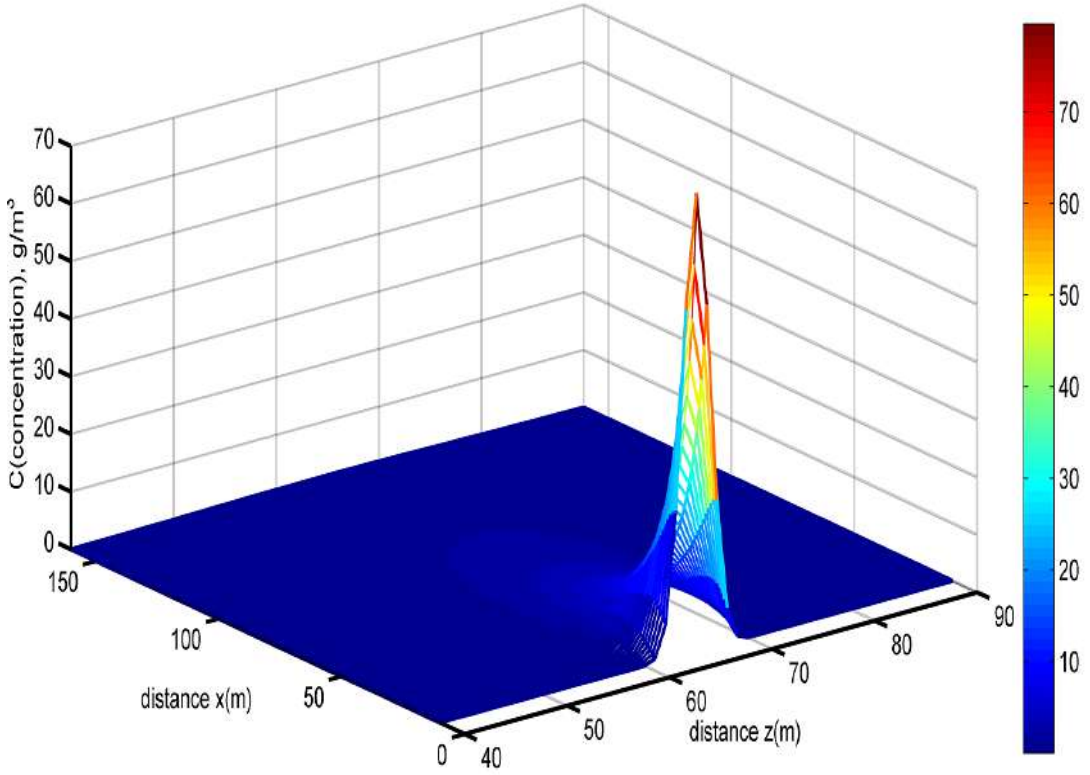


Fig. IV.9 : Distribution en 3D de concentration des polluants dans plan (x, z) à y=0m

Par la même philosophie, à travers la figure (IV.10), nous visualisons graphiquement la diffusion du panache au plan (x, z) à y=0, on remarque que le rejet sous forme de bouffe et la diffusion du panache forme un angle aux environs de 40° par rapport à l'axe z.

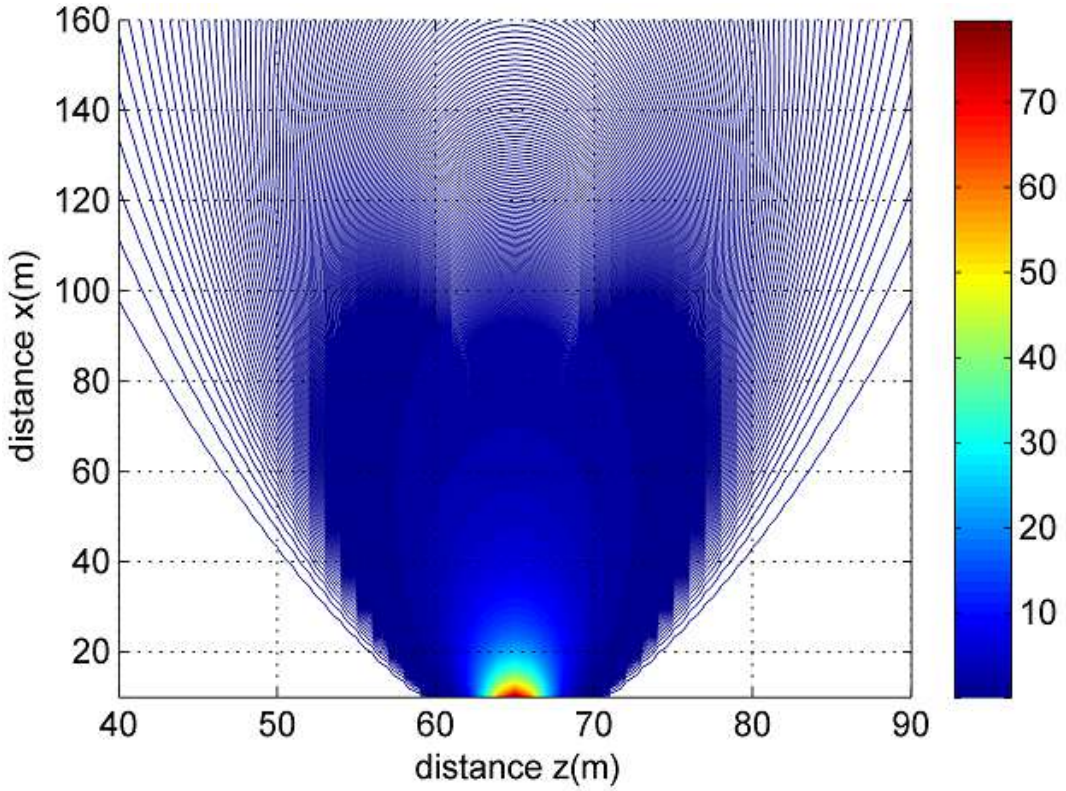


Fig. IV.10 : Iso-concentration dans plan (x, z) à y=0m

IV.2. Modèle tridimensionnels CFD

Le calcul de la distribution spatiotemporelle de la concentration des polluants par les modèles tridimensionnels CFD est l'approche la plus complète et précis puisqu'elle consiste à simuler l'évolution du système couplé, c'est-à-dire le fluide et les espèces transportées. Ceci revient à résoudre les équations de Navier-Stokes complétées en plus de l'équation de transport diffusion d'un scalaire pacifique. La plupart des codes commerciaux traitent le phénomène de la mécanique de fluide numérique d'une façon qui permet la possibilité d'intégrer d'autres conditions et des effets sous forme des sous-programmes (UDF ou UDS) compilés en langage C. Le processus d'une telle simulation sous le code CFD, ANSYS-Fluent en l'occurrence, est composé des étapes citées en ci-dessous.

i) Formulation du problème

La formulation d'un tel problème est entamée par la description de ce phénomène physique par l'affectation des équations à résoudre, c'est-à-dire de définir :

- Le problème à simuler ;
- Le formalisme mathématique général pour la modélisation de problème simulé ;
- Les conditions aux limites ou frontières et la limite spatiotemporelle de ce modèle conceptuel.

Généralement la majorité des écoulements est de caractère turbulent, les grandeurs physiques sont fluctuantes, les équations gouvernant l'écoulement nécessitent un traitement spécial, nécessite un

modèle de turbulence sophistiqué. Particulièrement pour les phénomènes très compliqués, il est nécessaire de recourir à des simplifications sans toutefois affecter la précision de la solution pour simplifier le problème.

ii) Maillage

Dans le processus préparatoire d'une telle simulation numérique, l'opération du maillage du domaine du calcul est une étape critique, puisque la qualité de raffinement de maillage peut changer la solution des problèmes. Généralement, les régimes d'écoulement à fort gradient de pression doivent être raffinés et encore plus recommandés au voisinage proche de parois.

iii) Spécification d'écoulement

Une fois le domaine défini, le maillage élaboré, on passe à :

- Définir le type d'écoulement :
  - Le caractère de l'écoulement (modèle de turbulence),
  - Le régime de l'écoulement (stationnaire ou transitoire) ;
  - Le type de l'écoulement mono ou multiphasique (définition de phase) ;
  - Le modèle de suivi de la phase dispersé ;
- Définir les conditions aux limites ;
- L choix des schémas de discrétisation spatiale et temporelle.

Ces étapes sont connues pour les analystes, la partie de pre-processing dans une analyse d'une telle simulation numérique.

iv) Solution numérique

C'est la phase de la solution numérique des équations après discrétisation, en utilisant des critères de convergence après le choix de la méthode de résolution, cette étape est connue sous le nom de post-processing.

v) Analyse des résultats

Les résultats obtenus de l'étape de la solution numérique seront vérifiés avec l'aspect physique recherché et les différents paramètres de l'écoulement seront représentés sous forme de graphes, contour…etc. Par la figure IV.11, nous visualisons une présentation graphique d'un processus en cas général pour une simulation numérique utilisant un code de type CFD comme « ANSYS-Fluent ».

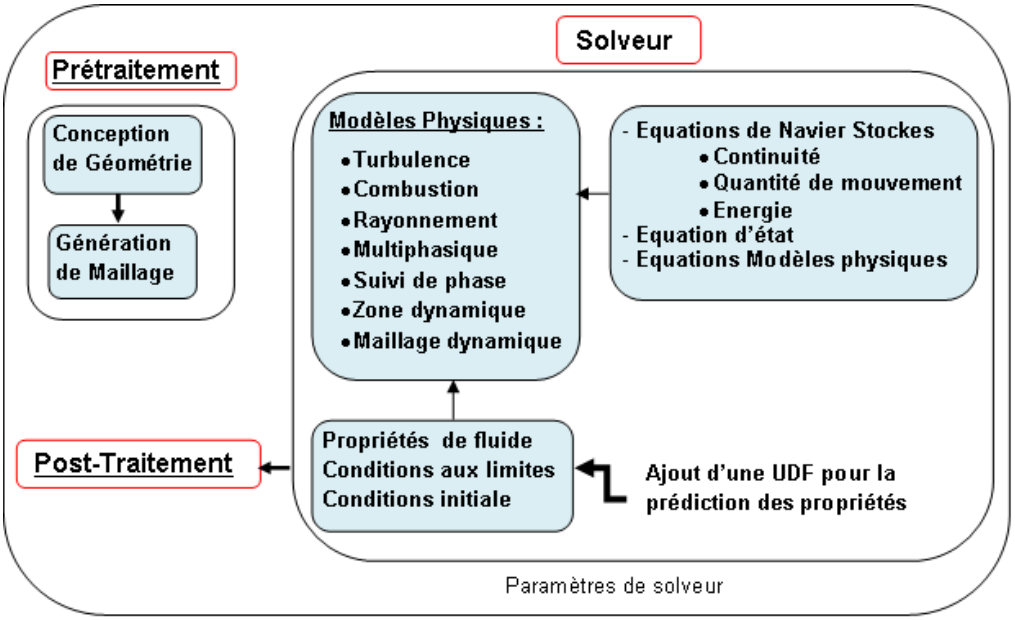


Fig. IV.11 : Schéma synoptique du processus de simulation [66]

IV.2.1. Étude d'un panache utilisant modèle CFD

L'objectif de cette étude est de modéliser la dispersion **d'un panache** en sortie d'une cheminée d'une zone industrielle. Pour une raison des données similaire à celles de l'étude effectuée par le modèle Gaussien, nous supposons la zone d'étude est sans construction et sans habitation (Fig. IV.12). Cette étude se déroulera en trois phases : phase de procédure préparatoire, phase d'étude de l'effet de maillage et phase de traitement des résultats.

IV.2.1.1. Procédure préparatoire de simulation

Pour les procédures préparatoires, nous appliquons les démarches générales d'un code « CFD », qui sont citées ci-dessus (paragraphe IV.2). Ces démarches peuvent être résumées aux points suivants :

a) Préparation du domaine de simulation

A l'aide de l'outil « DesignModdeler » du code ANSYS, nous préparons le design (dessin) du domaine tridimensionnel avec ces caractéristiques. Avec l'absence d'outils très puissants, nous avons limité la taille du domaine de simulation, qui est définit par un cube de dimensions de 100 m x 100 m x 150 m respectivement selon les directions axiale, radiale et verticale. La source d'émission des polluants est representée par une cheminée conique d'une hauteur de 65 m, dont le diamètre est de 2.5 m au point de rejet. Cette source est placée au plan central (x, y) du domaine d'étude à x=10 m de l'origine. La figure (IV.12) donne toutes les cotations necessaire du domaine utilisé pour la simulation de la dispersion d'un panache dans l'atmosphère au voisinnage d'une installation industrielle.

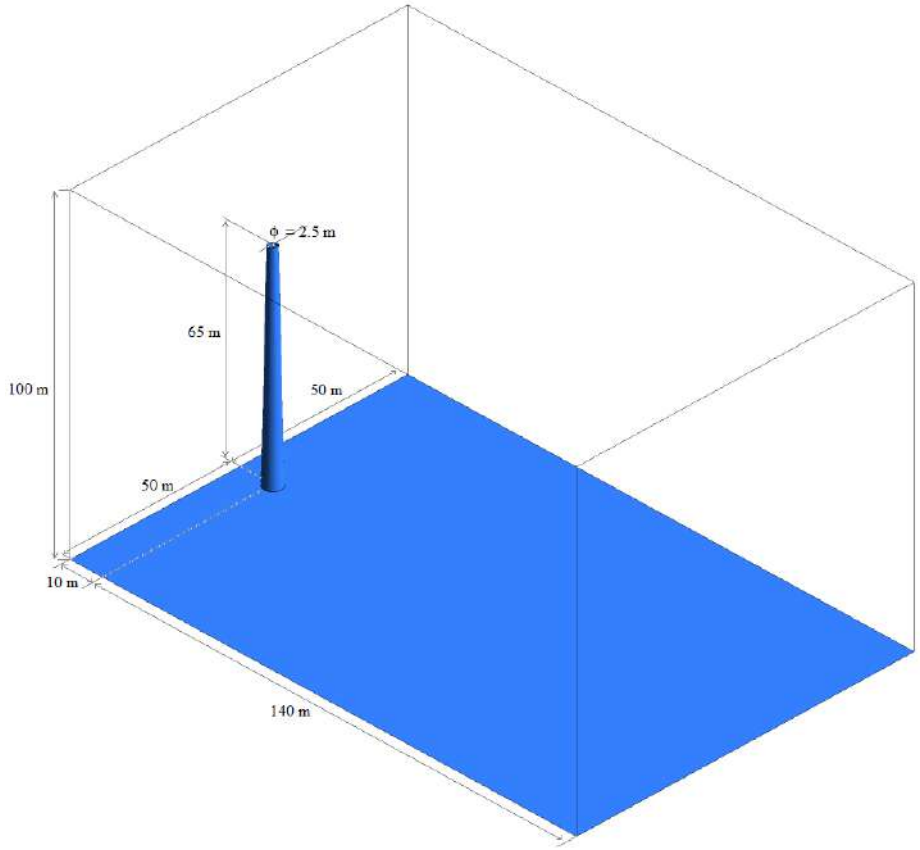


Fig. IV.12 : Schéma du domaine de simulation

b) Maillage du domaine

Après la conception numérique du modèle, nous passons à l'étape de préparation de maillage, effectué à l'aide d'un outil du code ANSYS, Meshing en l'occurrence. Pour le maillage de ce domaine, le choix est arrêté pour la taille de l'élément de 2 mètres ce qui donne 303126 nœuds et 1743717 éléments. Pour la métrique de maillage, le minium skewness est de 1^{e-4}, son maximum est de 0.79 et sa moyenne est de 0.21 quant à la déviation standard elle est de 0.12. Pour plus de détails sur le maillage de ce cube avec sa cheminée, nous présentons une coupe transversale de domaine d'interet maillé, indiqué par la figure (IV.13) et celui de la cheminée présenté par la figure (IV.14).

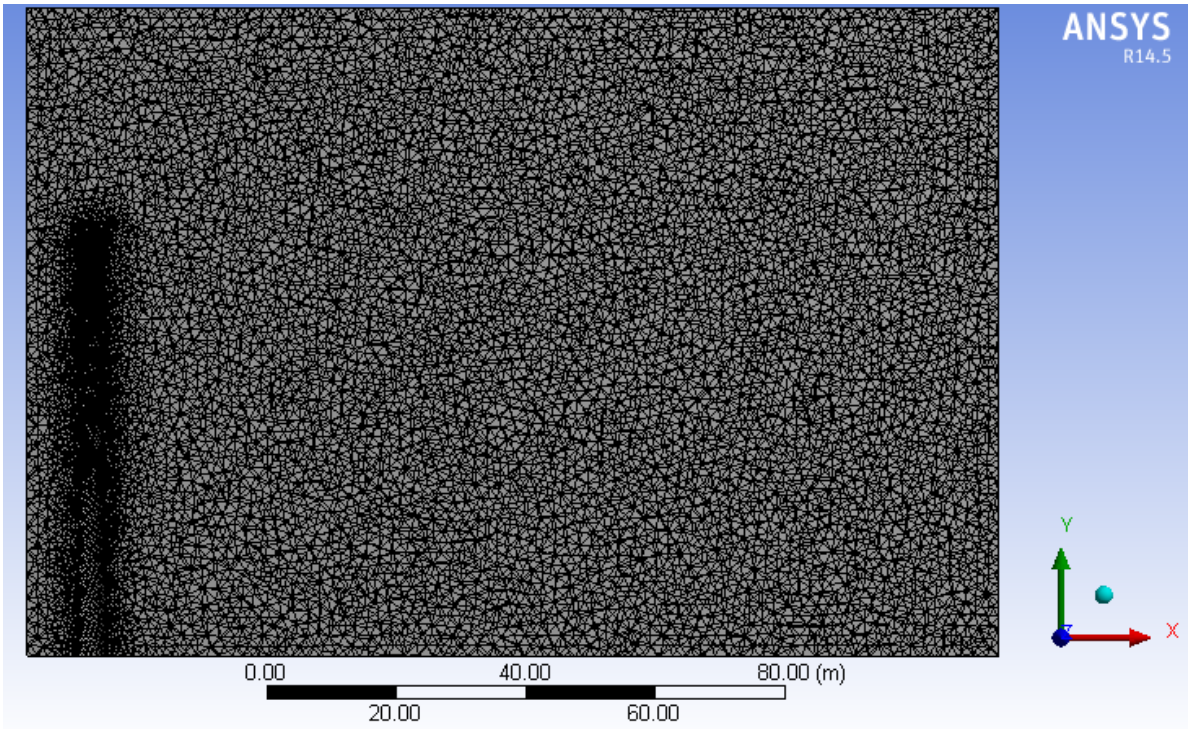


Fig. IV.13 : Coupe transversale de maillage du volume

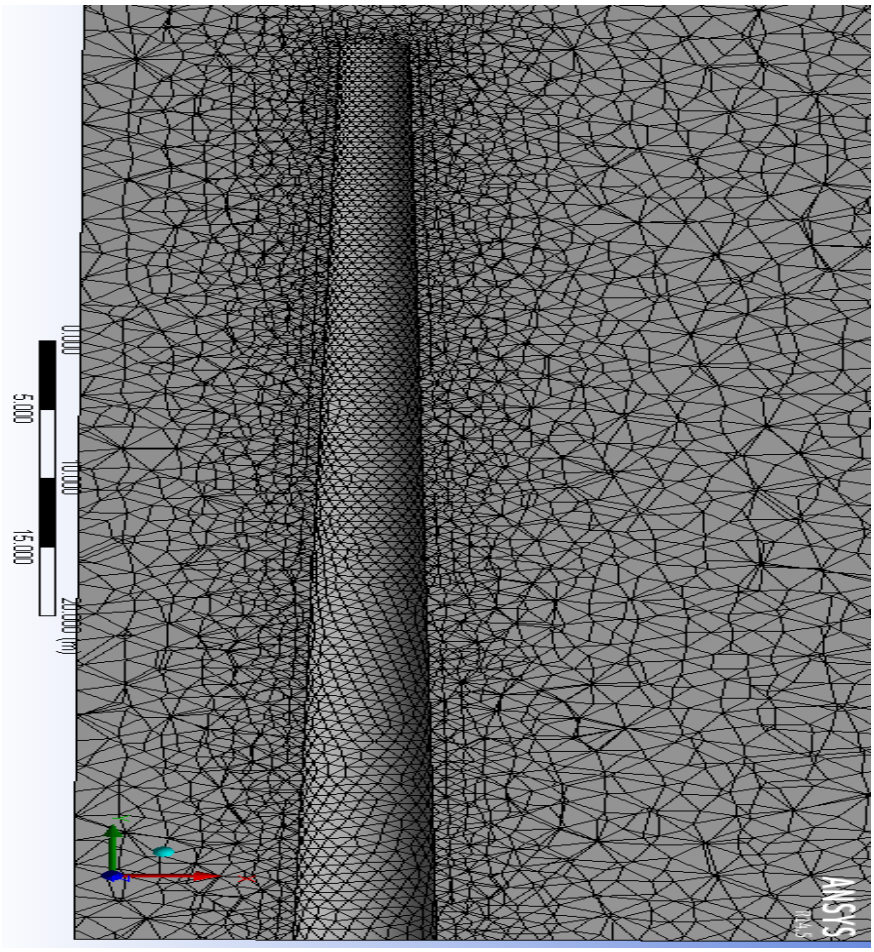


Fig. IV.14 : Détails de maillage de la cheminée

c) Conditions aux limites

Généralement pour un calcul numérique, nous limitons notre domaine d'application par des conditions aux frontières dans toutes les directions. La schématisation de ces conditions de frontières est donnée par la figure (IV.15) qui nous permet d'identifier l'ensemble des points à prendre en considération. On peut ainsi mettre en avant :

- Les conditions d'entrée dans le domaine ;
- Les conditions de sortie du domaine ;
- Les conditions au sol ;
- Les conditions au sommet du domaine.

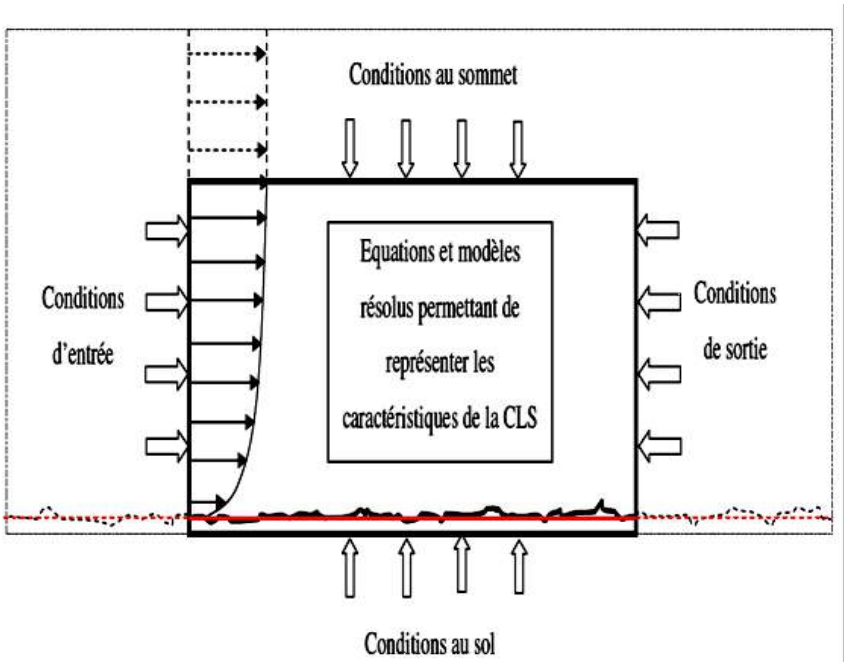


Fig. IV.15 : schéma du principe des conditions aux limites [4]

En plus de conditions de frontières, on ajoute d'autres considérations sous forme des sous programmes (UDF) écrits en langage C. Ces conditions, peuvent être résumées comme suivant :

- **Condition de Vitesse du vent**

Pour la vitesse du vent on a utilisé un profil logarithmique qui donne une bonne estimation pour le cisaillement vertical du vent, en prenant la vitesse v_1= 3 m/s à une hauteur h_1= 10 m avec une longueur de rugosité z_0=0.03 m, soit la classe de rugosité 1 qui correspond à un type de couverture de sol de terres agricoles ouvertes sans clôtures et haies, peut être des bâtiments éloignés et des collines très douces. Ce qui donne une vitesse minimale de 0 m/s au sol et d'une vitesse maximale de 6.422 m/s à l'altitude de 100 m.

- **Condition de la diffusivité d'un scalair**

Pour la diffusivité, on a utilisé l'équation générique de transport. Pour son implémentation dans ANSYS-Fleunt, on a utilisé une UDS (User Defined Scalar) avec la variable ∅ qui represente l'air activé, donc on a pour :

- ∅ =1, signifie que 100 % de la concentration de l'air activé ;
- ∅ =0, signifie que 0 % de la concentration de l'air activé ;

IV.2.1.2. Effet de maillage

Afin d'adopter une discrétisation spatiale optimale, une subdivision en maille fine du domaine de simulation est nécessaire, pas de technique spécifique pour encadrer cette division**.** Pour simuler au cas de la physique réelle, qui est un milieu continu, un nombre infini de nœuds du calcul serait imposé. Des empêchements du temps d'exécution et la puissance de l'outil informatique, obligent à utiliser un nombre fini de subdivision du domaine, est souvent basé sur la puissance des processeurs disponibles, le temps disponible pour réaliser le calcul ou la précision recherchée. Toutefois, des résultats de calcul fiables doivent être indépendants de la discrétisation, c'est-à-dire qu'un raffinement du maillage ne doit pas altérer la physique calculée par le logiciel. L'indépendance de maillage n'annule par contre pas l'erreur implicite au critère de convergence, figure (IV.16).

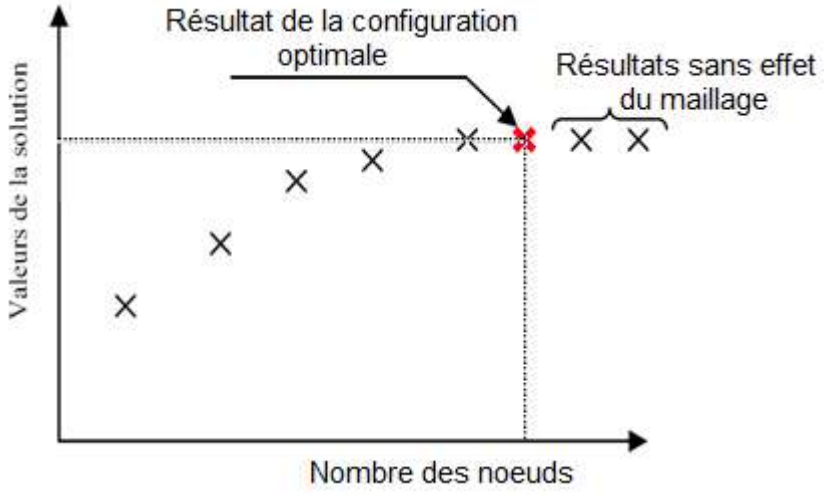


Fig. IV.16 : Effet de l'indépendance du maillage sur la solution [66]

IV.2.1.3. Résultats et discussion

Apres l'exécution de ces simulations, nous analysons les résultats numériques de la dispersion d'un panache dans l'atmosphère, la supposition de la conservation du champ dynamique est assurée, par conséquent la couche limite atmosphérique est neutre ou homogénéité horizontale.

Nous illustrerons nos résultats par des séries de graphiques à différentes distances, sur lesquels on représentera les profils verticaux de vitesse moyenne et de concentration de l'air pollué.

a) Les profils verticaux de vitesse moyenne

La figure (IV.17) représentée en ci-dessous visualise graphiquement les profils verticaux de la vitesse du vent à différentes positions horizontales du domaine du calcul. Toutes les positions sont prises au plan central du domaine, c'est-à-dire à y = 0 m. Quatre positions ont été choisies, à x = 0 m (avant la cheminée), à x = 10 m (au pied de la cheminée) et 2 autres positions après la cheminée à x = 50 m (40 m après la cheminée) et à x = 100 m (90 m après la cheminée).

Avant le refoulement de l'air pollué à x = 0 m, le profil vertical de la vitesse du vent, en rouge dans la figure (IV.17), donne une vitesse minimale de 0 m/s au sol c'est-à-dire à z = 0 m et un maximum de 7 m/s à une altitude de 100 m.

Au point de rejet à x = 10 m, le profil vertical de la vitesse du vent est indiqué en bleu sur la figure (IV.17). La visualisation graphique de ce profil, à l'altitude du point de rejet de polluants, soit à z

= 65 m. Le profil de vitesse indique une légère augmentation auprès de la bouche de rejet qui est dû à la vitesse de rejet du polluant égale à 0.86 m/s.

Nous remarquons pour les deux profils verticaux de vitesse du vent, au plan central, aux positions axiales de x=50 m et x=100m et dans la portion de z varie entre 0 et 65 m sont perturbés par les tourbillons provoqués par l'obstacle de la cheminée du rejet.

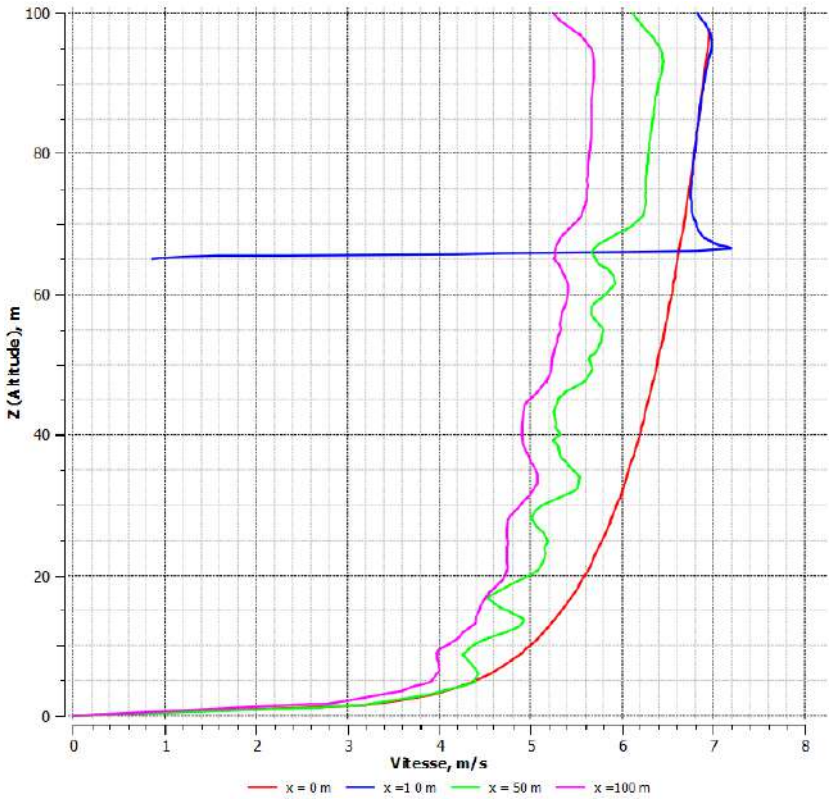


Fig. IV.17 : Profils verticaux de vitesses

b) Les profils verticaux de concentration.

La figure (IV.18) montre l'évolution de la concentration en fonction de l'altitude pour y = 0 m en trois positions à x = 50 m, à x = 100 m et à x = 140 m. Cette figure indique que les concentrations dans l'air ambiant des polluants primaires sont maximales à proximité de la source, puis tendent à diminuer au fur et à mesure que l'on s'en éloigne sous l'influence du vent de profil logarithmique qui participe au transport et à la dispersion comme prédit par le modèle Gaussien des panaches simulé par l'advection et la diffusion de la concentration dans l'air.

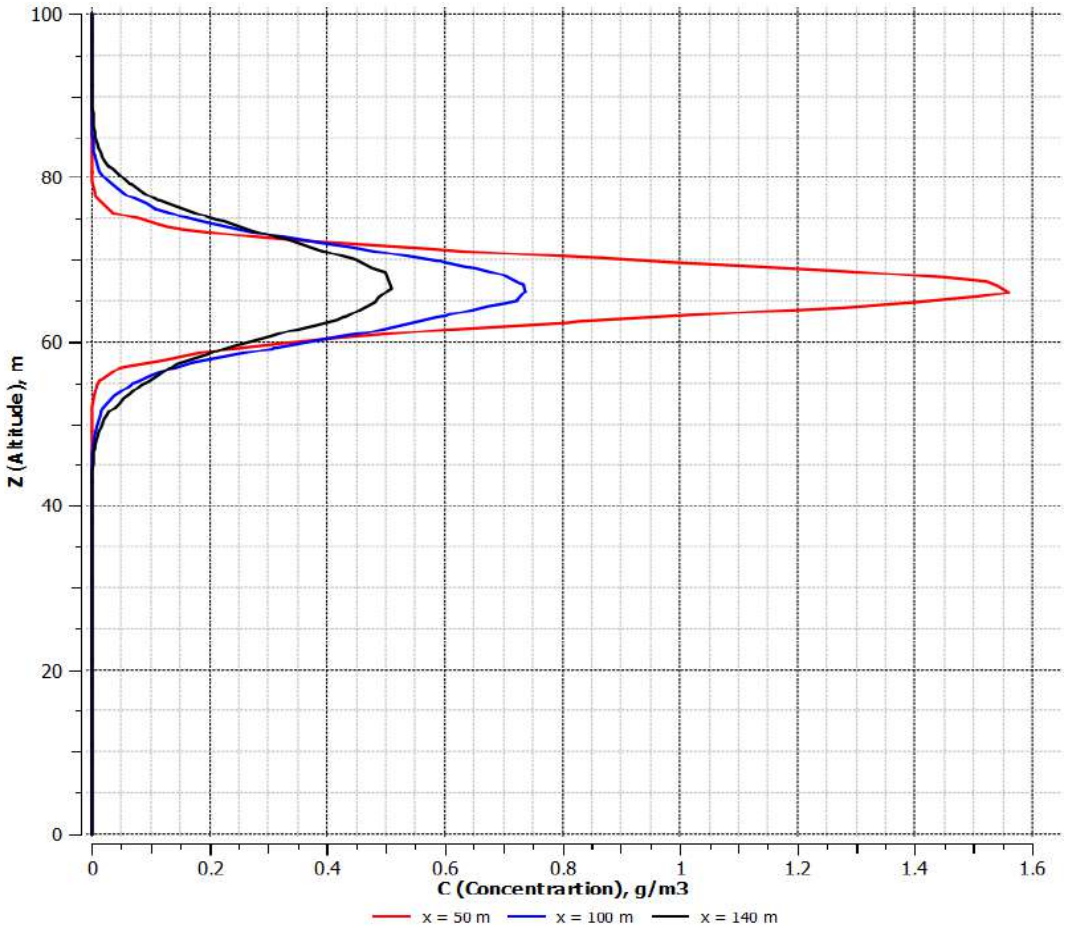


Fig. IV.18 : Evolution de la concentration pour 3 positions

La figure (IV.19) montre l'évolution de la concentration en fonction de l'horizontale x pour y = 0 m et pour z = 65 m (hauteur de la cheminée). Selon cette figure, la concentration est maximale au point x = 10 m, y = 0 m et z = 65 m qui correspond aux coordonnées de la sortie de la bouche de la cheminée. La concentration maximale est près de 283 g/m^3.

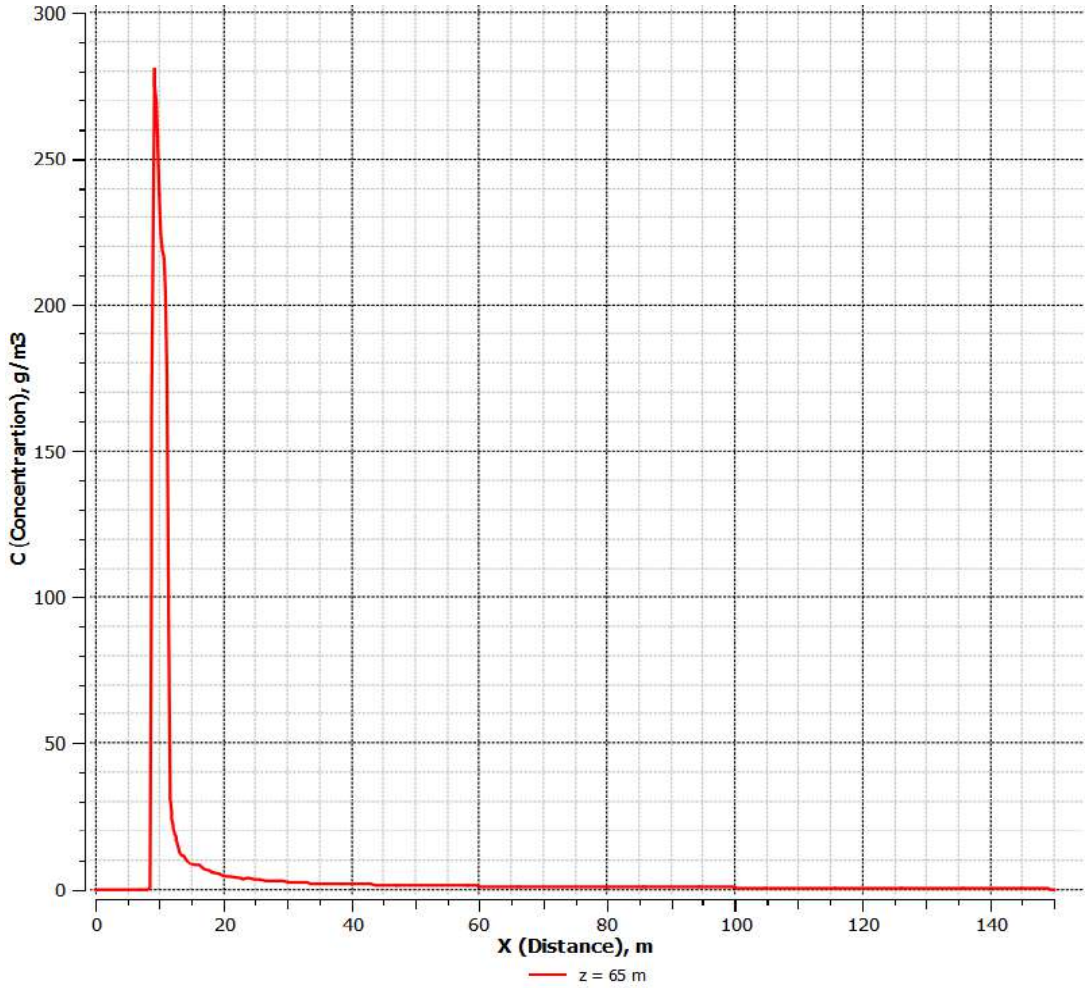


Fig.IV.19 : Evolution de la concentration à 65 m du sol

La figure (IV.20) montre l'évolution de la concentration en fonction de l'horizontale x pour y = 0 m et pour les deux altitudes z = 55 m et z= 75 m. Selon cette figure, la concentration tend à diminuer au fur et à mesure que l'on s'en éloigne, vers le bas ou vers la haut du centre du panache, comme prédit par le modèle Gaussien des panaches.

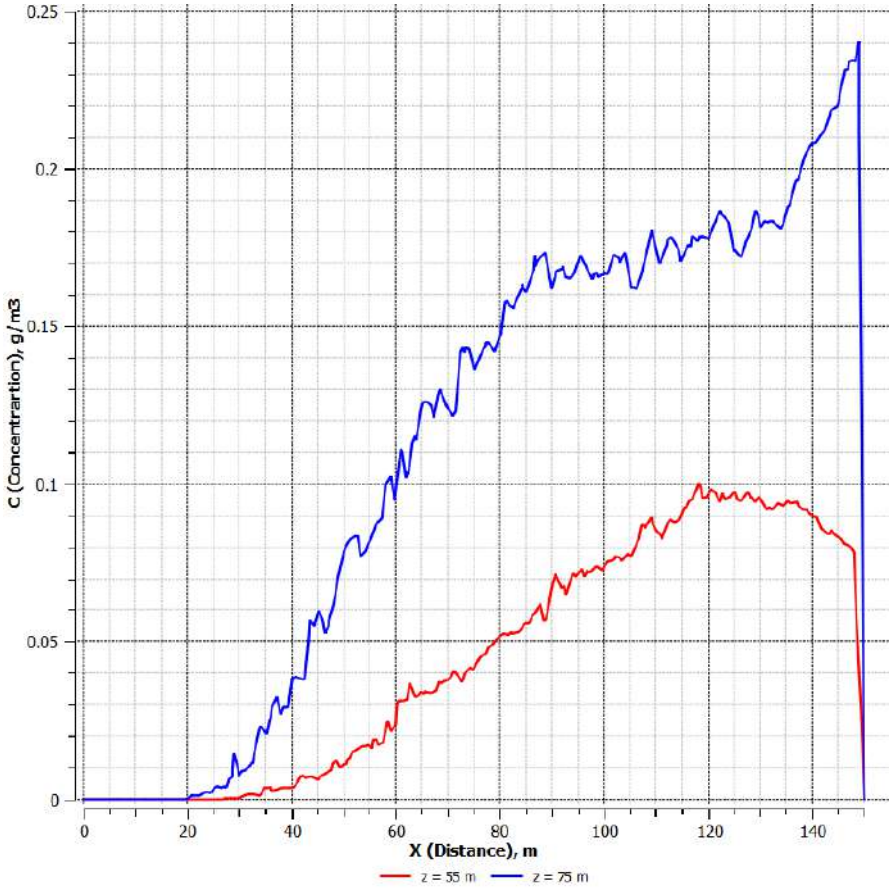


Fig.IV.20 : Evolution de la concentration aux deux positions verticales

Les profils de concentrations montrent que les concentrations diminuent selon l'éloignement longitudinal de la source, soit la direction de l'advection par le vent, ainsi que les distances latérales et verticales (non montrées) de la source. Ce comportement est cohérent avec la théorie car la dilution du panache dans l'atmosphère entraîne nécessairement une diminution des concentrations par conservation de la masse. Le profil longitudinal des concentrations relatives montre que la concentration maximale est simulée à la source puis décroît exponentiellement avec la distance. Il peut être remarqué que la diminution de la concentration en fonction de la distance n'est pas uniforme : elle est maximale au début de la dispersion et décroît par la suite ; ce ralentissement est causé par la limitation d'expansion verticale du panache aux frontières de la couche limite atmosphérique, engendrant une uniformisation des concentrations verticales.

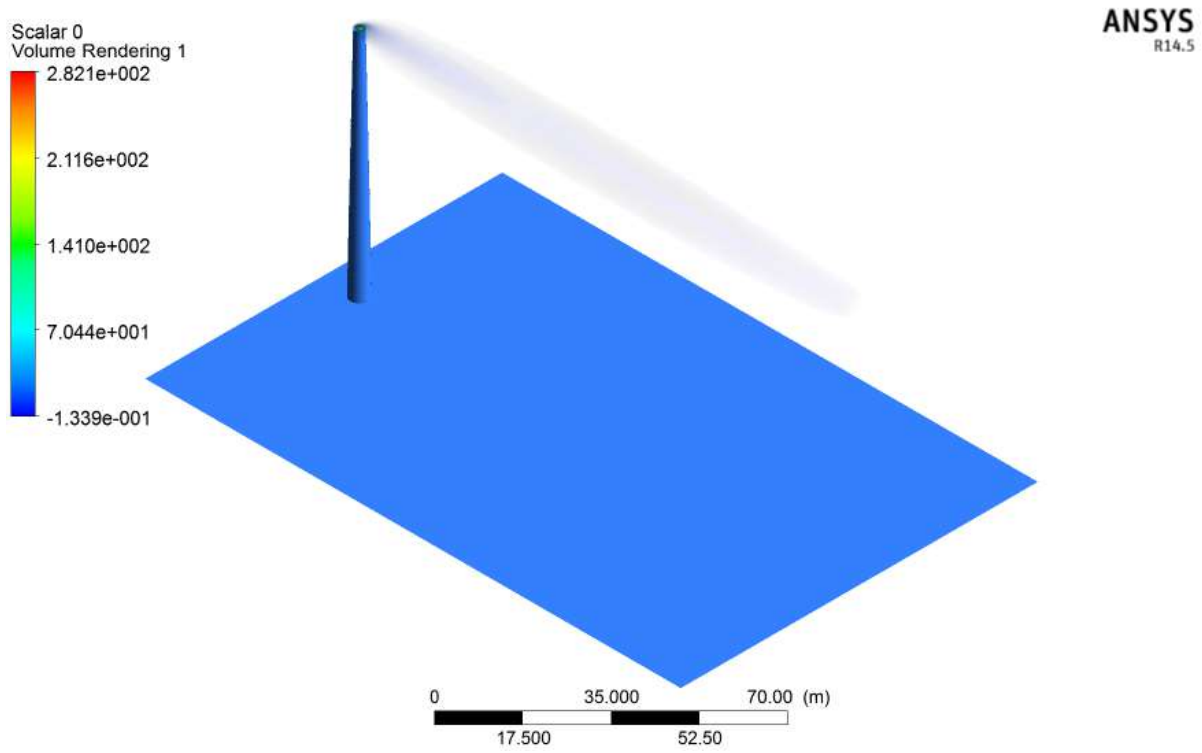


Fig.IV.21 : Volume rendu de la concentartion

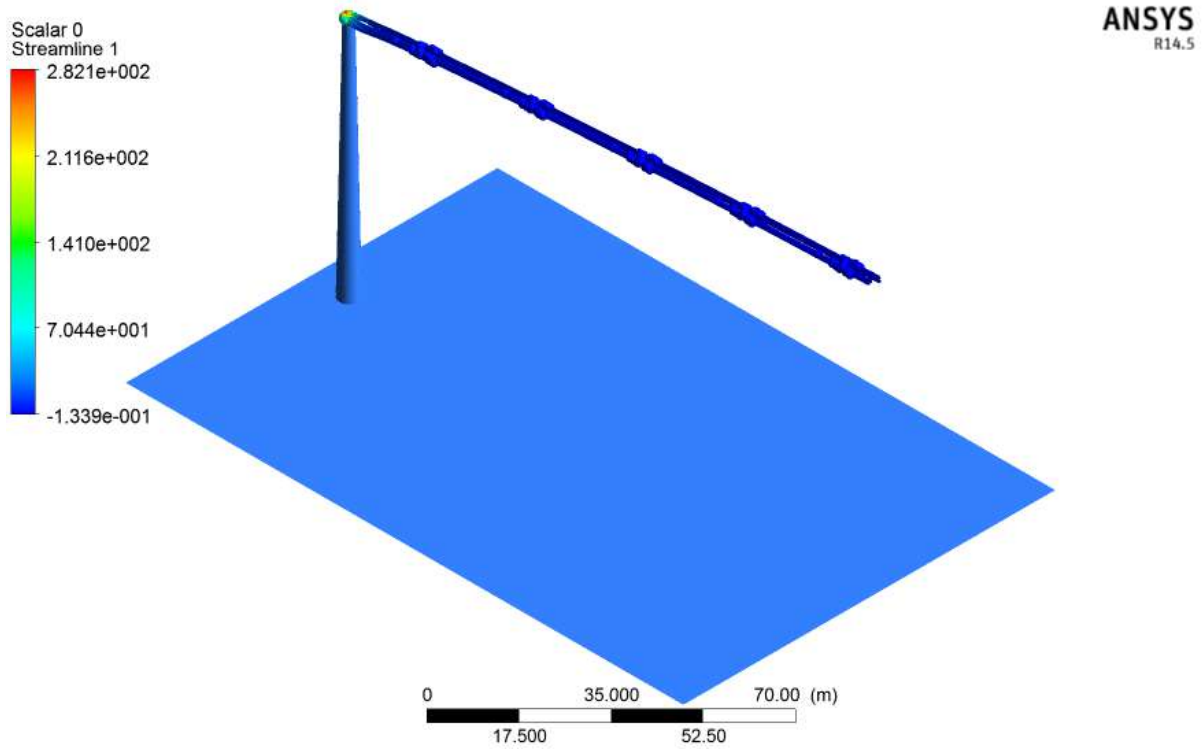


Fig.IV.22 : Courant de vitesse de la concentration

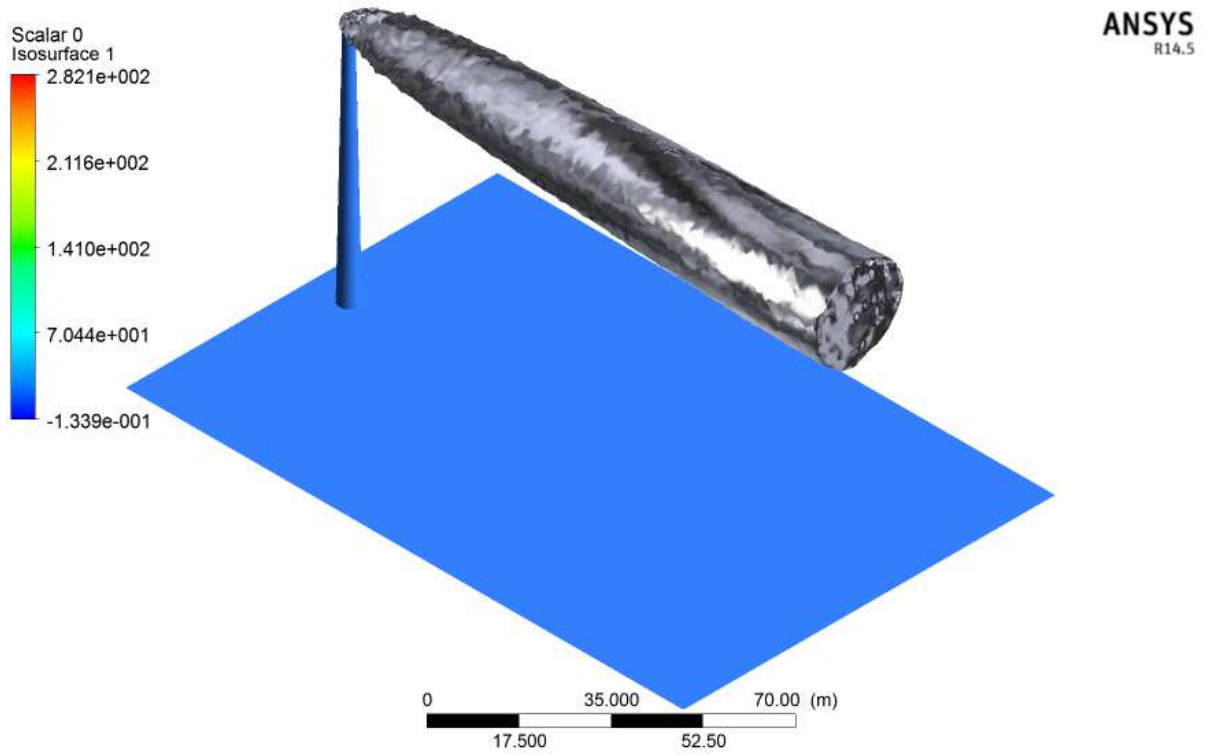


Fig.IV.23 : Isosurfaces de la concentartion

Les figures (IV.21, IV.22, IV.23) qui coresspondent respectivement au volume rendu, au courant de vitesse et des isosurfaces de la concentration montrent que la dispersion atmosphérique du panache, avec un vent modéré, animé de fluctuation latérales de grande période et les transferts turbulents sont beaucoup plus faibles dans la direction vericale que dans la direction transversale est dans les conditions de forte stabilité atmosphérique.

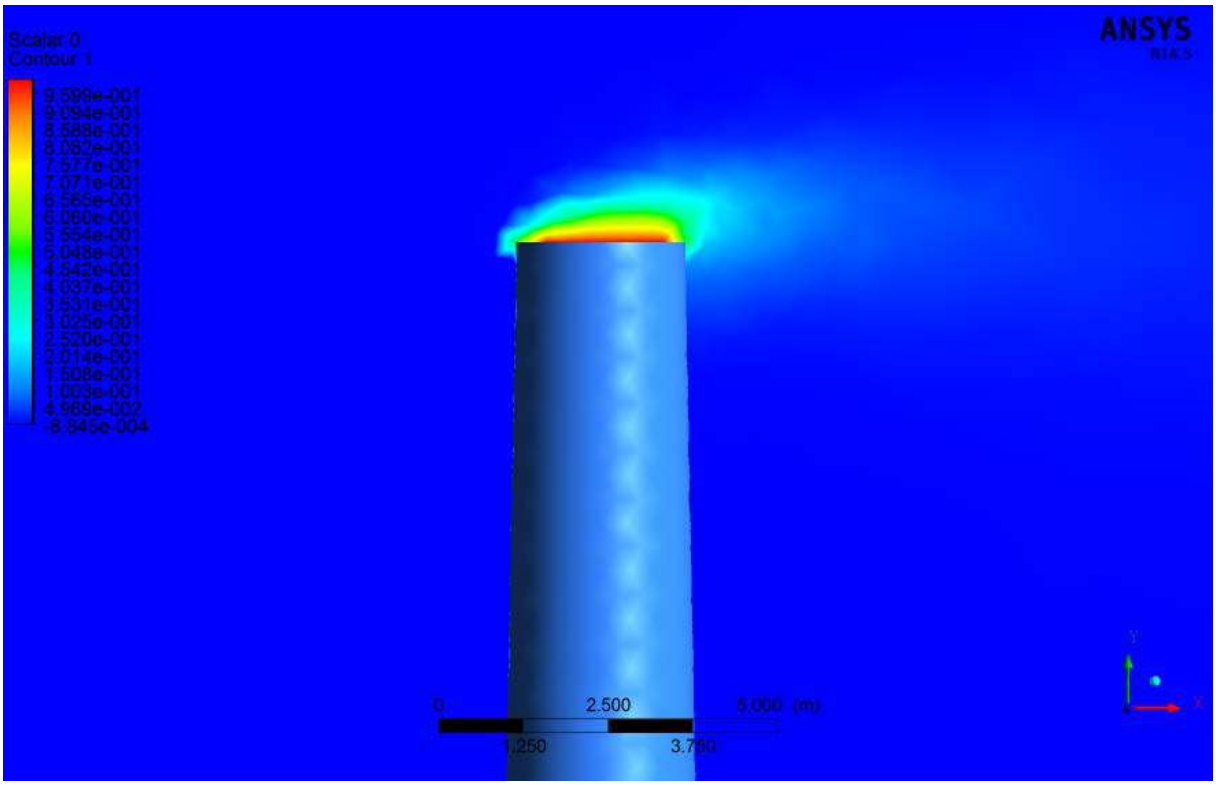


Fig.IV.24 : Contours de la concentartion à la sortie de la cheminée

La figure (IV.24) représente les contours de la concentration à la sortie de la cheminée. Cette figure indique les concentrations des polluants primaires dans l'air ambiant qui est un maximum à proximité des sources, puis tend à diminuer au fur et à mesure que l'on s'en éloigne de cette source sous l'influence du vent de profil logarithmique qui participe au transport et à la dispersion comme prédit par le modèle gaussien des panaches simulé par l'advection et la diffusion de la concentration de ce dernier dans l'air.

IV.2.2. Etude du transfert de polluant dans un milieu confiné ventilé.

L'objectif de l'étude est de suivre le transfert des polluants sous forme des particules très fins, depuis la source d'émission jusqu'à son évacuation vers l'extérieur du milieu confiné, cette analyse de la dispersion est effectué par la méthode CFD, en utilisant les deux modèles de suivi des particules Lagrangien et Eulérien. Pour le modèle Eulérien, nous avons utilisé le modèle Mixture granulaire. Cette étude est effectuée à différent régime d'écoulement d'air (U=0.225 m/s et 0.45 m/s).

IV.2.2.1. Procédure et mise en œuvre de simulation

Pour effectuer la mise en œuvre de ces simulations, nous avons suivi les démarches suivantes :

a) Domaine de simulation

Dans le cadre de la confrontation de nos résultats avec les valeurs expérimentales, nos simulations numériques sont effectuées pour une maquette ventilée d'une salle dont sa dimension est définit par sa longueur de 0.8 m, sa largeur de 0.4 m et sa hauteur de 0.4 m. La salle est occupée par un système de ventilation assurant l'admission de l'air frais et l'extraction de l'air pollué de cette salle. Les sections d'admission et d'évacuation de l'air sont de 0.04 x 0.04 m^2, sont installées aux deux murs opposés de la salle. Le choix de cette géométrie est inspiré à partir d'études antérieures de Chan [9] et BinZaho [61]. La symétrie du domaine est représentée par le plan central à Y = 0,2 m, voir la figure (IV.25) pour plus de détails sur le domaine du calcul.

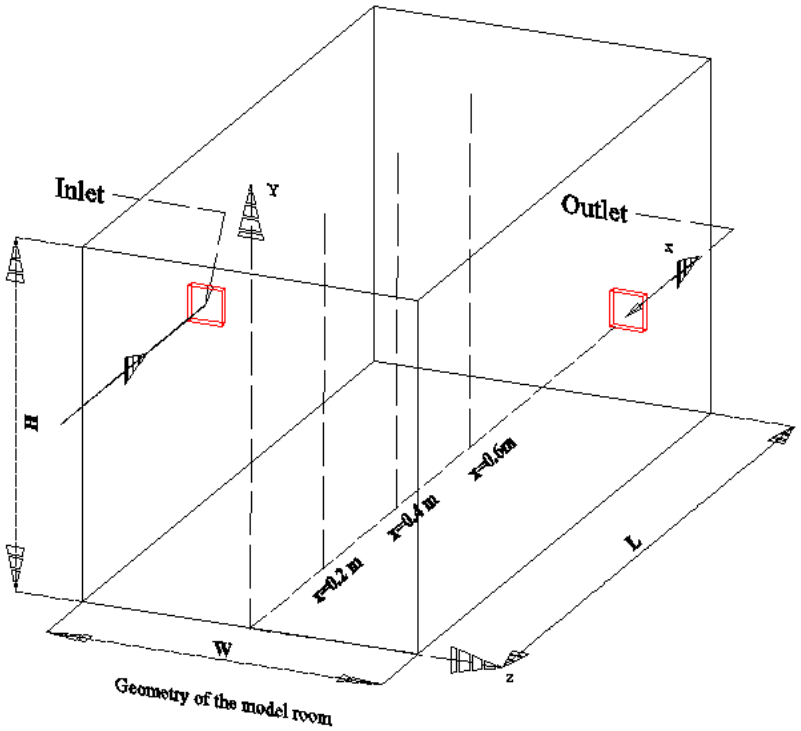


Fig. IV.25 : Géométrie utilisé pour la simulation [13]

b) Maillage du domaine

La génération du maillage est une phase très importante dans une analyse CFD, vu l'influence de ses paramètres sur la solution calculée. Utilisant le module Meshing du code ANSYS pour mailler notre géométrie en trois dimensions. Le maillage de la configuration optimale choisie pour nos simulations est composé de 200 nœuds sur la direction de longueur de la salle, 100 nœuds sur la direction de largeur et 100 nœuds sur la hauteur de la salle. Pour cette configuration, nous avons utilisé un maillage tridimensionnel structuré et a deux millions de mailles en volume.

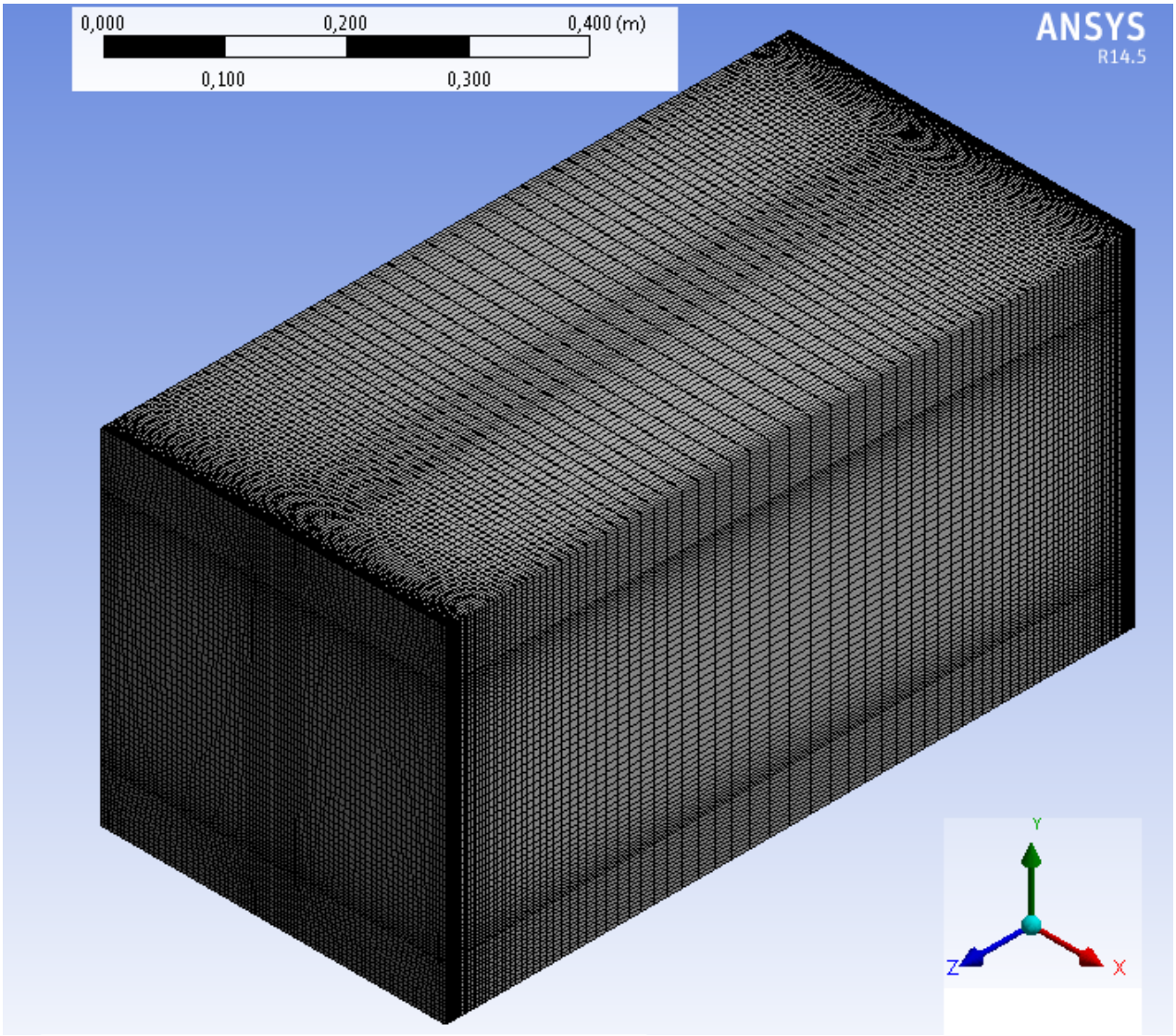


Fig.IV.26 : Représentation graphique du maillage utilisé

c) Condition aux limites

Nous avons utilisé, pour nos simulations, comme conditions aux limites suivantes :

- Une condition de vitesse à l'entrée de l'air (Velocity Inlet) est imposée ;
- Pour les conditions de fraction volumétrique et la température granulaire de la phase particulaire par les profils tridimensionnels qui sont déjà préparés dont son processus voir paragraphe ci-dessous ;
- Une condition de non-glissement des parois est déjà affectée par le code « ANSYS-FLUENT » ;
- Une condition de pression (Pression Outlet) à la sortie de l'air de la salle est imposée.

Pour les propriétés des particules, la densité est de 1400 kg/m^3 et le diamètre est de 10 µm. Les vitesses de l'écoulement d'air frais à l'entrée de la salle sont de 0,225m/s et de 0,45 m/s.

IV.2.2.2. Effet du maillage

Le but de raffinement du maillage, sous un code mailleur (ANSYS), et de l'adaptation de la grille à la solution sous le solveur (Fluent), pour l'obtenir d'une solution indépendante de la qualité du maillage utilisé, c'est-à-dire que les paramètres de la solution envisagée deviennent insensibles au bout d'un certain nombre d'éléments. Afin d'aboutir à cette grille optimale, nous avons testé cinq grilles à différentes tailles de mailles (voir tableau IV.4), le principe de l'effet d'indépendance du maillage est visualisé graphiquement dans la figure (IV.16).

Tableau. IV.4 : Différentes configuration du maillage

	Grille	Taille
	Grille E	240 x 160 x 160
x	**Grille D**	**200 x 100 x 100**
	Grille C	200 x 80 x 80
	Grille B	160 x 80 x 80
	Grille A	100 x 80 x 80

IV.2. 2.3. Effet de la quantité initiale injectée

Après l'étude de sensibilité de maillage, nous avons entamé la phase d'analyse de quantité nécessaire et suffisante des particules qui doit être injectée dans le système d'alimentation d'air frais pour avoir des valeurs simulées stables et proches aux résultats expérimentaux trouvés par Chen et al.[4]. Ces tests numériques CFD ont montré que la concentration de PM d'entrée avait un effet significatif sur les champs de concentration et de vitesse prévus de la phase particulaire dans la chambre. Par conséquent, différentes concentrations d'entrée variant de 20 mg/m^3 à 1000 mg/m^3 ont été testées. La limite inférieure de la concentration d'entrée (20 mg/m^3) était basée sur les directives de l'OMS pour la concentration moyenne annuelle recommandée de particules de diamètre de 10 µm (PM_{10}) comme étant la bonne qualité de l'air. A travers la quantité en kilogramme par m^3 de volume du milieu porteur, nous déterminons le débit massique injecté en kilogramme par seconde dans le système de ventilation. Pour la détermination de débit, nous utilisons la formule suivant :

$$\dot{m} = U.S.Q \qquad \text{IV.1}$$

Avec :

$\dot{m}$: Débit massique de particules a injecté dans le système de ventilation en kg par seconde ;
U : Vitesse de particule supposé est identique à celle de l'air ;
S : Surface de la section d'admission d'air frais à la salle ;
Q : Quantité des particules en kg/m^3 ou est la concentration initiale.

Au but de déterminer la concentration initialement injectée dans le système, pour trouver la quantité utilisée par chen et al. [13] dans son étude expérimentale , nous avons commencé cette série des simulations par le débit massique initialement injecté de 3.6E-08 kg/s pour un régime d'écoulement U=0.225 m/s, de 7.2E-08 pour un régime U=0.45 m/s, puis augmenté progressivement ce débit d'injection avec le maintien des autres conditions de simulation, jusqu'à ce qu'un accord soit acceptable avec les données expérimentales, le tableau ci-dessous indique les quantités testées.

Tableau IV.5 : Débit massique injecté dans le système de ventilation

U (m/s)	S (m^2)	C_0 = Q (kg/m^3)	$\dot{m}$ (kg/s)
0.225	0.0016	1E-04	3.6E-08
		2E-04	7.2E-08
		4E-04	1.44E-07
		8E-04	2.88E-07
		1E-03	3.60E-07
0.45		1E-04	7.2E-08
		2E-04	1.44E-07
		4E-04	2.88E-07
		8E-04	5.76E-07
		1E-03	7.2E-07

Après l'exécution de cette série de test, nous avons déduit que la quantité nécessaire à injecté dans le système d'admission d'air, dont lequel les résultats de simulation numériques concordaient avec les données expérimentales. Cette quantité est de 800 mg/m^3 qui à été jugée assez raisonnable pour une mesure de PDA lorsqu'on considère l'opérabilité.

IV.2. 2.4. Condition aux limites de la phase dispersée

Afin d'approcher à la réalité des conditions d'une simulation du transfert des particules à travers un système de ventilation, la condition aux limites de la concentration initiale injectée dans la salle est effectuée par un profil tridimensionnel de concentration des particules selon les directions radiale (x) et verticale (y). Le processus de la détermination de ce profil de concentration est effectué à travers des simulations numériques d'écoulement d'air dans une gaine de ventilation, on injecte une quantité massique du traceur particulaire (Kg/s) avant sa distribution dans la salle, le schéma de simulation est représenté par la figure (IV.27). D'après la norme de mesure d'une grandeur physique, les points de mesure doivent être suffisamment éloignés du point d'injection pour assurer une homogénéisation complète du traceur dans l'écoulement. Pour respecter cette condition, nous avons choisi la distance entre la section d'injection du traceur et la section de refoulement d'air à la salle qui est égale à six fois le diamètre hydraulique de la gaine de ventilation.

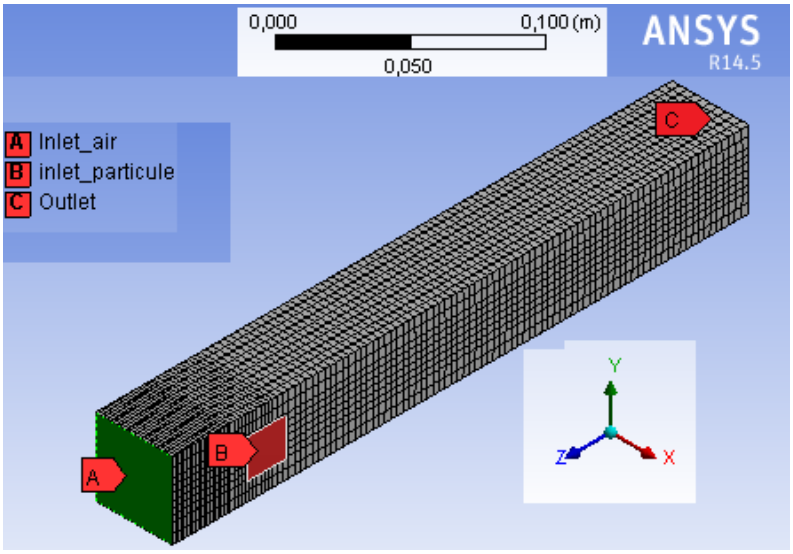


Fig. IV.27 : Schéma de gaine de ventilation

La concentration initiale à injecter est définie par l'équation suivante :

$$C_0 = Q = \alpha_p . \rho_p \qquad \text{IV.1}$$

Avec :

α_p : fraction volumique de la phase particules
ρ_p : densité de particules, en kg/m^3

Une fois que la simulation dans la gaine converge, nous aurons besoin de produire le profil tridimensionnel de la fraction volumétrique de phase particulaire, à la section de sortie de la gaine de ventilation. Le code ANSYS-Fluent permit de produire automatiquement ce profil, ces opérations de préparations de profil sont effectuées pour les deux régimes d'écoulements U=0.225m/s et 0.45m/s. Ces profils de fraction volumétrique et de granulaire température (m^2/s^2) sont injectés comme condition aux limites au projet de simulation de la distribution spatiale de concentration des particules dans la salle en question, chaque régime d'écoulement à ses profils spécifiques.

IV.2.2.5. Résultats et discussion

Après une série des simulations numériques effectuées par la méthode CFD, nous pouvons donner la représentation graphique des profils verticaux de concentration à différentes positions axiales et aux deux vitesses et qui sont indiqués dans la figure (IV.28).

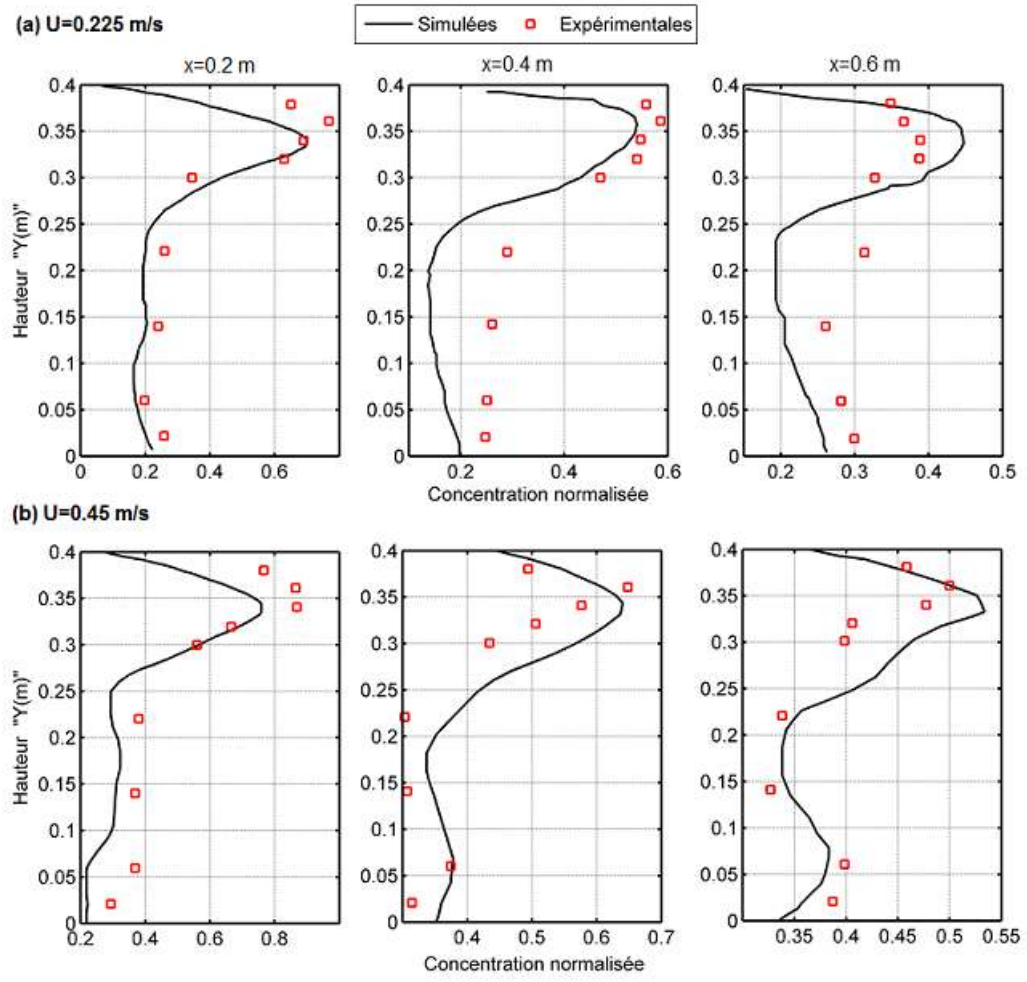


Fig. IV.28 : Profils verticaux de concentration aux trois positions axiales

Malgré toutes les précautions requises par les améliorations que nous avons effectuées pour donner des résultats précis, à travers le traitement de l'effet de concentration initiale injectée dans le système et l'implantation du profil de fraction volumique de la phase dispersée comme condition initiale à l'entrée d'air, les profils de concentration présentent un décalage par rapport aux valeurs expérimentales. Cela est dû aux effets de traitement de la turbulence et la prise en compte de la déposition de particules aux parois par une implantation des UDF prit ces considérations.

IV.3. Modélisation par la méthode du réseau neuronal artificiel (ANN)

Afin de recenser et de classifier les outils nécessaires pour la modélisation de phénomène de la dispersion des polluants dans un milieu confiné ventilé, nous essayons dans cette partie d'étude d'appliquer la méthode du réseau neural artificiel pour modéliser ce phénomène. Les deux Modèles (ANN_S et ANN_T) utilisant des réseaux des neurones de type perceptron multicouche (MLP) et qui sont apprenti à l'aide d'une base des données des résultats trouvés par des expériences réalisées à travers des études antérieures. Le modèle "ANN_S" est utilisé pour étudier la dispersion des particules solides dans l'air ambiant d'une salle ventilée en régime stationnaire et le deuxième modèle "ANN_T" pour analyser le transfert d'une gamme de particules (0.5 à 5 µm) dans un milieu fermé ventilé en régime transitoire.

IV.3.1. Méthodologie de préparation des modèles ANN de simulation

Pour la préparation de ces deux modèles de simulation de dispersion, la méthodologie appliquée est celle mentionnée dans le chapitre II. Dont les démarches de ces déterminations peuvent être résumées et regroupées en trois parties :

- **Partie 01** : c'est une phase de construction des bases de données qui peuvent être utilisées pour l'apprentissage, la validation et le test du réseau qui sera déterminé après calcul ;

- **Partie 02** : c'est une phase de détermination de la structure et de l'optimisation du réseau optimal cherché ;

- **Partie 03** : c'est une phase réservée pour valider et comparer les résultats trouvés par ce modèle du calcul avec ceux trouvés par d'autres méthodes.

a) Phase de construction des bases des données.

L'objectif de cette étape est de recueillir des données, à la fois pour développer le réseau de neurones et pour le tester. Après l'opération de recueil, une analyse de ces données de manière à déterminer les caractéristiques discriminantes pour détecter les variables restreintes de mode opératoire de ces expériences. Ces caractéristiques constituent l'entrée du réseau de neurones. Afin de dire, tout problème peut être représenté sous la forme d'une fonction de mise en correspondance entre un espace d'entrée et un espace de sortie, dès lors que l'on ne dispose que d'exemples de comportement de cette fonction. En général, mathématiquement cette relation entre le mode opératoire d'une telle expérience de la dispersion des particules qui peut être formulée par l'équation suivante :

$$f\left(\frac{C}{C0}, L, W, H, x_1, y_1, z_1, A_i, A_o, x_{Ai-Ao}, y_{Ai-Ao}, z_{Ai-Ao}, U, \rho_f, \mu_f, \rho_p, d_p, \tau\right) = 0 \qquad \text{IV.2}$$

Afin d'utiliser le technique du réseau supervisé, une opération de séparation des bases de données en trois : une grande base pour effectuer l'apprentissage, les deux autres pour la validation et le test du réseau (figure II.11). Plusieurs types d'apprentissages peuvent être adaptés à un même type de réseau de neurones. L'apprentissage du réseau est effectué selon le schéma du

principe de la figure (IV.30). Les critères de choix sont souvent la rapidité de convergence ou les performances de généralisation.

La séparation des bases de données s'effectué selon le principe représenté dans la figure (IV.29). La base d'apprentissage du réseau prend 80% des données globale, 10% est réservée au test et le reste est utilisé pour la validation.

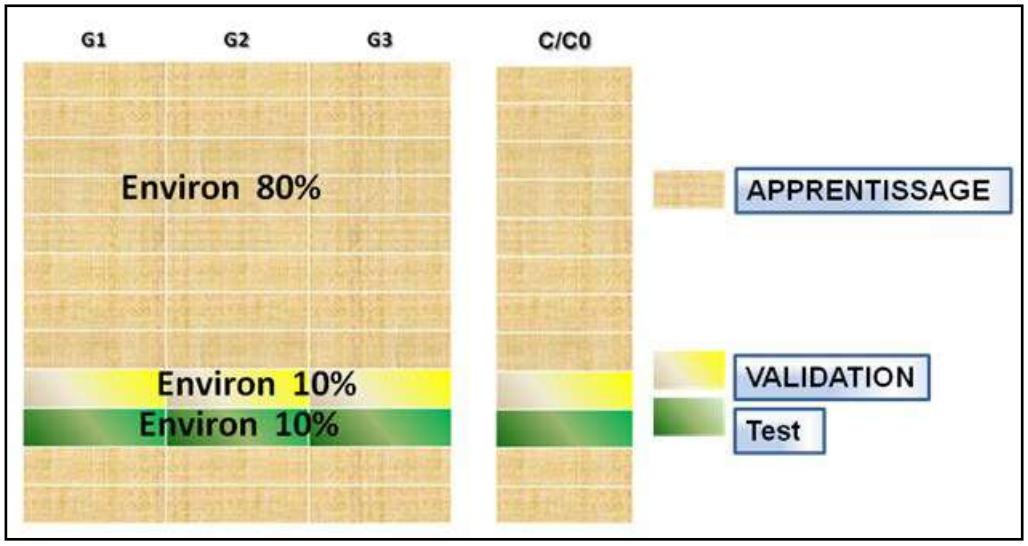


Fig. IV.29 : Séparation de la base globale selon l'apprentissage, validation et test

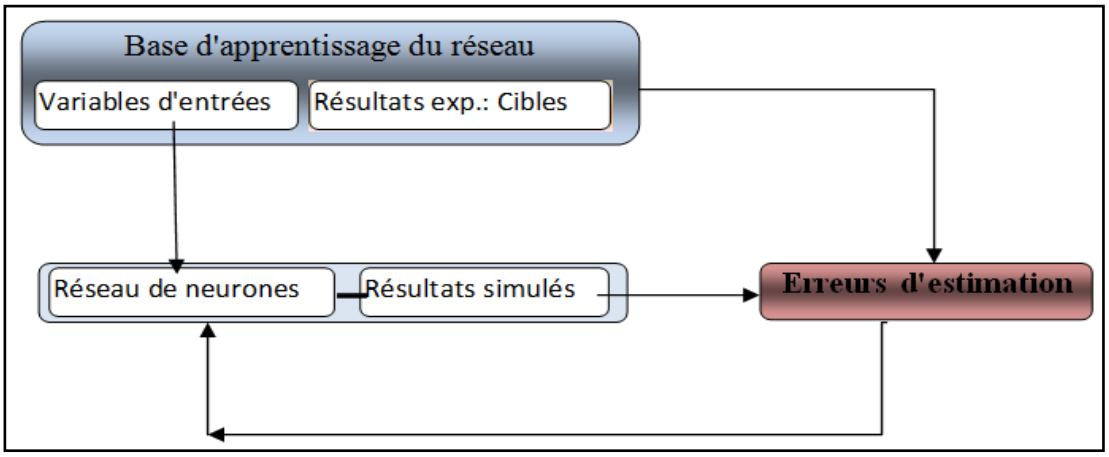


Fig. IV.30 : Schéma de principe d'apprentissage du réseau

Le critère d'arrêt de l'apprentissage est souvent calculé à partir d'une fonction de coût, caractérisant l'écart entre les valeurs de sortie obtenues et les valeurs de références (réponses souhaitées pour chaque exemple présenté). La technique de validation croisée, qui sera précisée par la suite, permet un arrêt adéquat de l'apprentissage pour obtenir de bonnes performances de généralisation.

De manière générale, la mise en forme des bases de données doivent subir un prétraitement afin d'être adaptées aux entrées et sorties du réseau de neurones. Un prétraitement courant consiste à effectuer une normalisation appropriée, qui tienne compte de l'amplitude des valeurs acceptées par le réseau.

La normalisation est une étape importante dans le processus de l'élaboration des données. Elle devient, dans la plupart des cas, une exigence pour les matrices des inputs, du fait qu'on utilise souvent des fonctions de transfert bornées de type sigmoïdes dans les modélisations statiques. Dans notre travail, on a normalisé l'entrée et la sortie par la fonction mapminmax, dont l'algorithme est indiqué ci-dessous, en langage Matlab qui effectue une normalisation de la valeur maximale et minimale de chaque rangée.

$$y = \frac{(y_{max} - y_{min})(x - x_{min})}{(x_{max} - x_{min})} + y_{min} \qquad \text{IV.3}$$

b) Phase de détermination de structure et l'optimisation.

Lors de la phase de conception du réseau, nous avons limité la taille de la couche d'entrée qui est fixée par le nombre des variables de mode opératoire (inputs) et ainsi celle de la couche de sortie qui est fixée par le nombre des variables d'output de référence mesuré. Après la limite de ces couches (entrée et sortie), nous pouvons chercher la configuration optimale du réseau neuronal à travers une étude d'influence des différents paramètres, tel que le nombre de couches cachées, le nombre de neurones dans ces couches, la fonction d'activation entre les couches, l'algorithme d'apprentissage, structure du réseau, les fonctions de normalisations de la base des données et l'initialisation. Afin de visualiser la procédure d'obtention d'une configuration optimale, nous donnons l'organigramme, figure (IV.31), de différents tests effectués pour l'optimisation du réseau.

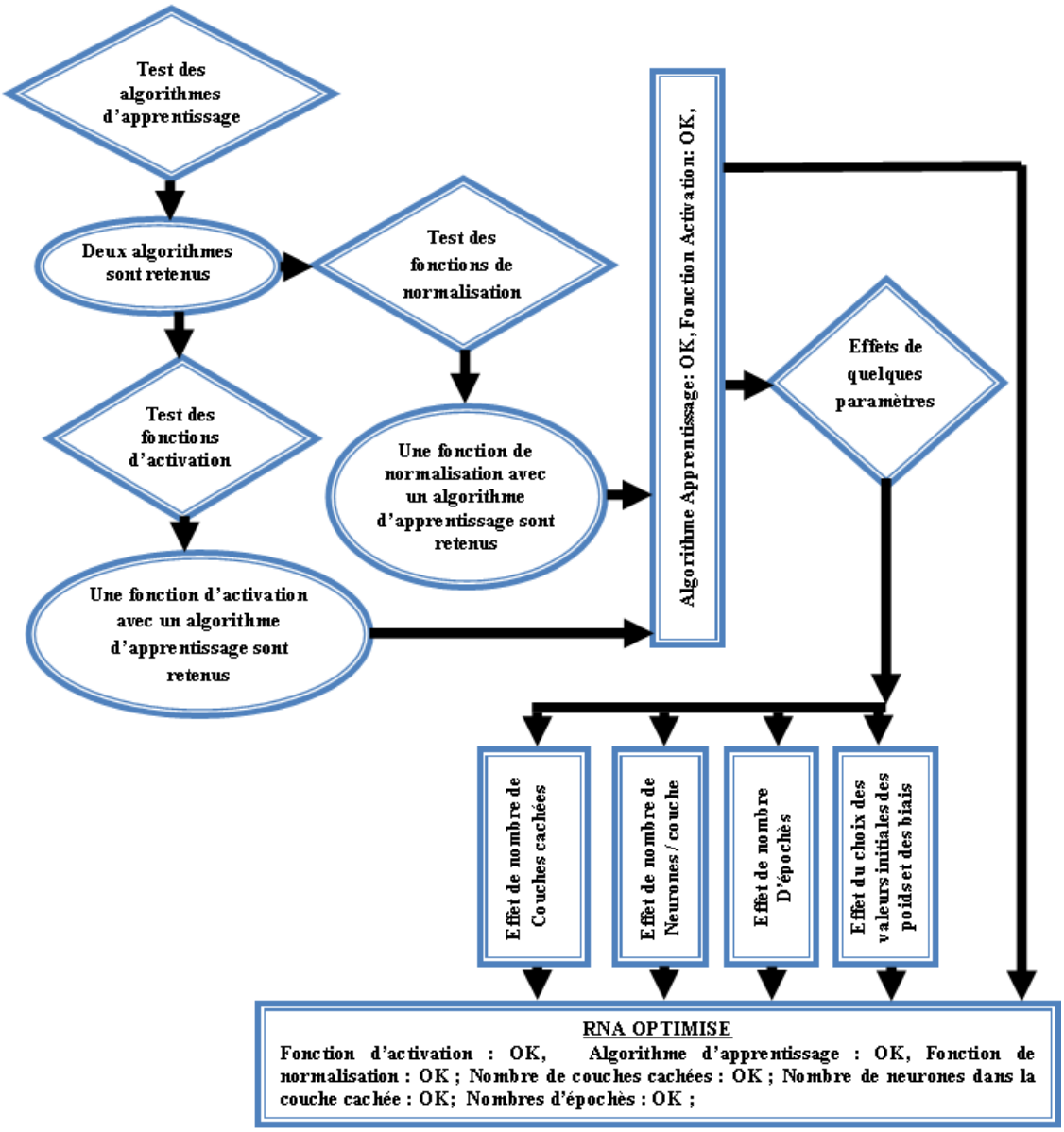


Fig. IV.31 : Optimisation des paramètres d'un réseau de neurone artificiel [66]

c) Phase de validation globale.

Afin de répondre à la détermination des modèles précis et optimaux à la modélisation du transfert des polluants dans un milieu fermé ventilé en deux régimes d'écoulement, nous appliquons ces deux modèles ANN_S (stationnaire) et ANN_T (transitoire) pour simuler le phénomène de la dispersion des particules, les résultats obtenus sont comparés aux valeurs simulées par la méthode CFD. Dans ce paragraphe, nous calculons les erreurs relatives par rapport aux valeurs de référence des données expérimentales des études antérieures.

IV.3.2. Détermination et validation du Modèle ANN_S

Le modèle ANN_S est utilisé pour étudier la distribution spatiale de la concentration des particules dans une salle ventilée en régime stationnaire. A travers de ce modèle, on peut étudier l'influence du régime d'écoulement (vitesse), diamètre de particules, dimension du domaine, dimension des bouches d'admission et position des sections de passage d'air sur la dispersion.

i. Phase de construction des bases de données du modèle ANN_S

Les données sont collectées à partir de trois études antérieures : Chen et al. [13], Lai et al. [18] et Hanhui et al. [21]. La base de données générale est composée de 261 points de mesure. Par exemple dans l'étude expérimentale effectuée par "Chen", nous pouvons déduire 56 points de mesure. Ces points se trouvant à trois positions axiales, Figure (IV.25) à x = 0,2 m, 0,4 m et 0,6 m et chaque position comprend 9 points de mesure à chaque régime d'écoulement. Pour les deux régimes d'écoulement : U = 0225 m/s et 0,45 m/s ; nous identifions 54 points de mesure en plus de l'hypothèse que la concentration normalisée au point d'admission d'air est égale à 1 ($C/C_0 = 1$).

La manière que nous avons suivie pour déterminer le nombre de variables dimensionnelles principales gouvernant l'écoulement d'air porteur de particules dans un milieu fermé ventilé, elle peut résumer dans les points suivants :

- Déterminer les conditions sur lesquelles sont effectuées ces études expérimentales. Dans notre cas, nous avons trouvé seulement des études réalisées à pression, et à température et à humidité supposées constantes. En perspective, si la disponibilité des valeurs de concentration des particules mesurées pour la condition de pression, ou de température ou d'humidité varie, nous pouvons l'ajouter à la base donnée pour son enrichissement.
- Déduire la concentration initiale (C_0) injectée dans le système de ventilation. Nous trouvons la majorité des investigations dans cet axe de recherche que sont effectuées sur la supposition de faibles concentrations des particules (fraction inférieure à 10^{-6}) et ceci pour compter seulement de l'interaction entre fluide et particule, même cette concentration des particules est largement suffisante pour étudier ce problème dans l'industrie puisque la norme impose une fraction inférieure à « 10^{-10} ».
- Nous identifions les variables influentes sur l'exécution de l'écoulement.
    a. Groupe de variables spécifiques à la dimension du domaine d'étude (voir figure IV.25) :
        i. Longueur, largeur et hauteur du domaine (L, W et H) ;
        ii. Variables caractérisant les sections d'entrée et de sortie de l'air à la chambre sélectionné (A_i, A_o) ;
        iii. Variables caractérisant les distances entre les sections d'entrée et de sortie d'air-particules de la salle sélectionnée.
    b. Les propriétés de fluide porteur U : vitesse de l'écoulement à l'entrée, ρ_f : densité de l'air et μ_f : viscosité dynamique de l'air ;
    c. Les propriétés de particules (ρ_p : densité de particule, d_p : diamètre de particule, τ : temps de séjours de particule) ;
    d. Variables spécifiques aux coordonnées des points de mesure de concentrations de particules dans la chambre choisie.

- Nous réalisons notre étude seulement pour le cas de l'air comme fluide porteur et en plus à température et ainsi pression constante d'où il nous donne les propriétés (ρ_f, μ_f) qui sont invariables durant ces études expérimentales ;

- Pour raison de diminuer le nombre de variables des inputs, nous testons tous les regroupements possibles de ces variables.

En fin, nous concluons après regroupement et élimination des variables invariantes durant les simulations expérimentales, nous déduisons que douze paramètres variables peuvent influencés

sur les résultats trouvés par l'expérimentale. Apres prétraitement, Ces douze variables de mode opératoire de ces expériences sont liées par l'équation suivante :

$$\frac{C}{C_0} = \beta\left(\frac{x_1}{L}, \frac{y_1}{H}, \frac{z_1}{W}, A_i, A_o, x_{Ai-Ao}, y_{Ai-Ao}, z_{Ai-Ao}, U, \rho_p, d_p, \tau\right) \quad \text{(IV.4)}$$

Les dimensions de l'espace conceptuel de ce modèle sont représentées dans le tableau (IV.6).

Tableau. IV.6: valeurs Mini et Max de variables d'entrée

Variable	Unit	Min	Max
d_p	m	5×10^{-07}	10×10^{-06}
U	m/s	0	1.5
x_1/L	-	0.17	0.83
y_1/H	-	0	0.9526
z_1/W	-	0.17	0.83
A_i	m^2	0.0016	0.06
A_o	m^2	0.0016	0.06
$x_{Ai\text{-}Ao}$	-	0.83	1
$y_{Ai\text{-}Ao}$	-	0	0.8
$z_{Ai\text{-}Ao}$	-	0	0.5
ρ_f	Kg/m^3	1400	2100
$1/\tau$	s^{-1}	0	0.3

ii. **Phase de détermination de structure et optimisation du modèle ANN_S**

Au début, l'architecture du modèle ANN_S est constituée de douze neurones dans la couche d'entrée, une seule couche cachée de M neurones et la couche de sortie est composée par un seul neurone (Concentration normalisée). Pour obtenir un modèle précis et optimal, plusieurs tests sont effectués pour étudier l'influence de plusieurs paramètres. Parmi les tests que nous avons effectués pour optimiser le modèle ANN_S, les tests des algorithmes d'apprentissages et l'effet de nombres de neurones dans la couche cachée. Pour ces deux paramètres d'optimisation à titre d'exemple, nous avons donné les détails concernant les tests dans les paragraphes suivants :

1. Test des algorithmes d'apprentissage du réseau

Les réseaux des neurones, apprenti de type MLP, possèdent de grands nombres d'algorithmes d'apprentissage qui peuvent nous fournir un modèle du réseau précis, rapide et fiable pour un tel cas d'utilisation. Pour trouver un algorithme qui fonctionne mieux dans notre cas, nous avons effectué une série de tests sur six algorithmes d'apprentissage du réseau. Nous avons donné des noms aux réseaux établis par leurs algorithmes de formation comme Net1, Net2, Net3, Net4, Net5 et Net6. Ces algorithmes avec leurs codes correspondants sont présentés dans le Tableau (IV.5). Après l'exécution de ces modèles (Tableau. IV.7), les résultats de vérification de la performance de ces six algorithmes testés sont donnés dans le tableau (IV.8).

Tableau. IV.7 : Tableau des noms des algorithmes d'apprentissage testés

Network name	Training algorithm name	Matlab code	Acronym
Net1	Quasi-Newton/Levenberg-Marquardt	Train_lm	LM
Net2	Polak-Ribière Conjugate Gradient	Train_Cgp	CGP
Net3	**Fletcher-Powell Conjugate Gradient**	**Train_Cgf**	**CFG**
Net4	Quasi-Newton /One-Step Secant	Train_Oss	OSS
Net5	BFGS Quasi-Newton	Train_Bfg	BFG
Net6	ResilientBack-propagation	Train_Rp	RP

Tableau. IV.8 : Tableau de choix de la fonction d'apprentissage

(a) Apprentissage

Algorithm name	RMSE	R	AE(%)	AE_min	AE_Max	STDEV
Train_lm	2,8865E-004	0,9994	1,0210	0,0045	10,25	1,3901
Train_Cgp	1.1473E-004	0,9994	1,0658	0,0020	12,98	1,5744
Train_Cgf	**3.2518E-004**	**0,9994**	**1,0661**	**0,0030**	**13,609**	**1,4506**
Train_Oss	1.3381E-004	0,9989	1,3412	3,0275E-005	11,6816	1,8147
Train BFG	9.7739E-004	0,9994	1,0422	0,0019	16,9968	1,4293
Train_RP	0,0028		1,0645	0,0105	123653	1,4087

(b) Validation

Algorithm name	RMSE	R	AE(%)	AE_min	AE_Max	STDEV
Train_lm	0.0904	0.9618	6.0344	0.1679	9.3256	33.4513
Train_Cgp	0.0036	0.9257	6.6319	0.0178	73.9137	46.3141
Train_Cgf	**6.6087E-004**	**0.9923**	**2.4147**	**0.2863**	**6.3621**	**8.2419**
Train_Oss	0.0189	0.9818	3.8606	0.1858	17.3813	16.3435
Train BFG	0.0348	0.8920	6.7099	0.1077	57.8693	39.4564
Train_RP	0.0143	0.9783	3.8565	0.0956	17.1728	15.8049

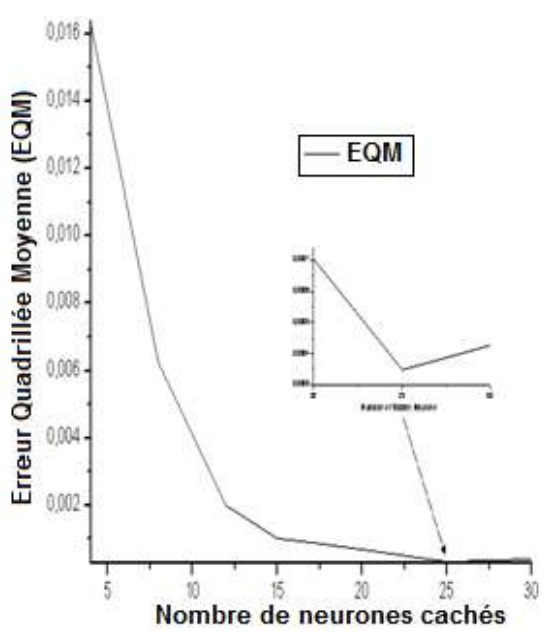
(c) Test

Algorithm name	RMSE	R	AE(%)	AE_min	AE_Max	STDEV
Train_lm	0.0501	0.9380	5.7073	0.0258	33.1239	9.0168
Train_Cgp	0.0201	0.9627	4.2217	0.0134	25.4141	6.3737
Train_Cgf	**5.3005E-004**	**0.9957**	**2.0717**	**0.0638**	**13.6289**	**2,7742**
Train_Oss	0.0244	0.9225	6.5562	0.0373	36.5554	9.6211
Train BFG	0.1444	0.7830	8.1910	0.2144	93.0507	18.6620
Train_RP	0.1321	0.9100	8.4828	0.0969	87.9828	17.9679

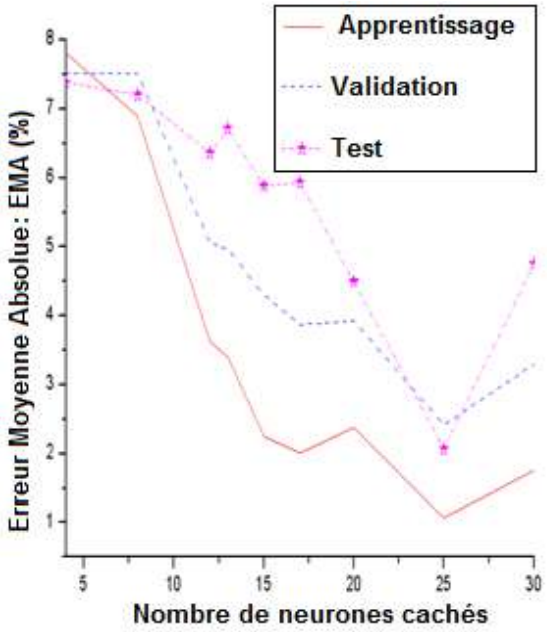
A travers ce tableau (IV.8) des paramètres de performance de ces réseaux (Net1, … et Net 6) pour les trois parties : apprentissage, validation et test ; nous déduisons que l'algorithme **Train_Cgf** donne une configuration optimale dans notre cas puisqu'il visualise un compromis des paramètres optimaux pour les trois parties. Le paramètre $\mathbf{R^2}$ dans le cas optimal doit être très proche de 1. Par exemple dans le cas de l'algorithme **Train_BFG**, le $\mathbf{R^2}$ pour la partie d'apprentissage est meilleur il est de 0.999. Par contre pour la validation il est de 0.89206 et pour le test il est de 0.78309.

2. Test de l'effet de nombre de neurones dans la couche cachée

Le choix du nombre de neurones dans la couche cachée est effectué après une série de simulations en variant le nombre de neurones et on mesure le MSE (Mean Squared Error). Le réseau ANN possède une seule couche cachée de 25 neurones qui a été choisi puisqu'à un MSE plateaux (valeurs stables) pour un nombre croissant de neurones pour plus de détails et de précision voir la figure (IV.32).



Seulement l'Apprentissage du réseau



Trois parties en même temps (apprentissage, validation et test)

Fig. IV.32 : Performance du réseau en fonction de Nombre de Neurones dans la couche cachée.

3. Configuration optimale

Un réseau de type Perceptron (MLP) à deux couches (une couche cachée et une couche de sortie) est utilisé, dont les propriétés sont mentionnées dans le tableau (IV.9). La structure du réseau est représentée dans la figure (IV.33).

Tableau IV.9 : Paramètres de configuration optimale du modèle ANN_S

Paramètres	**Propriétés**
Nombre de couche caché	01
Nombre de neurone dans la couche cachée	25
Fonction d'activation entre les couches - Couche d'entrée/couche cachée - Couche cachée/couche sortie	 Log-sigmoid Fonction linéaire
Algorithme d'apprentissage du réseau	TrainCGF (conjugale gradient Fletcher) algorithm
Interpolation polynomiale	$\boldsymbol{y = \left(\frac{C}{C_0}\right)_{pred} = 1.0 \times \left(\frac{C}{C_0}\right)_{exp} + 0.00089}$

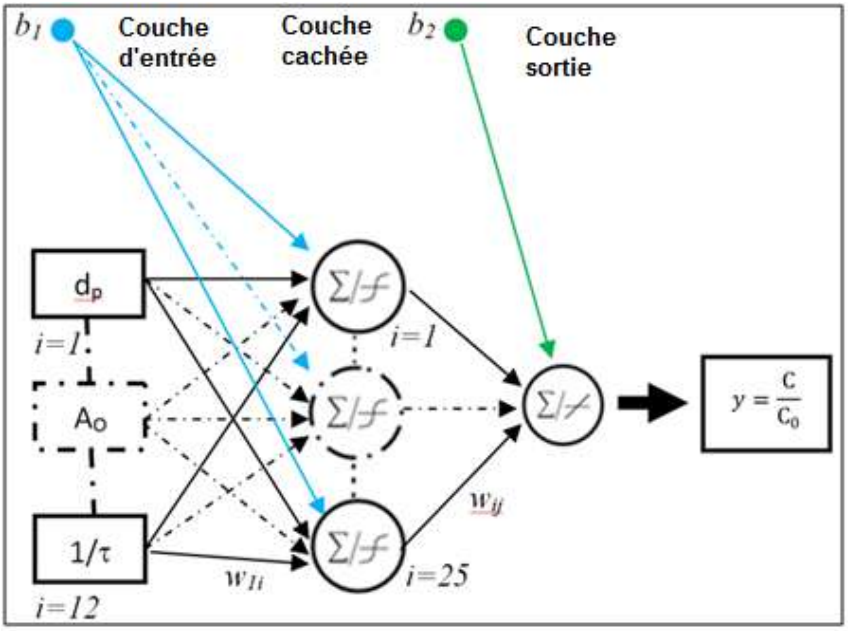
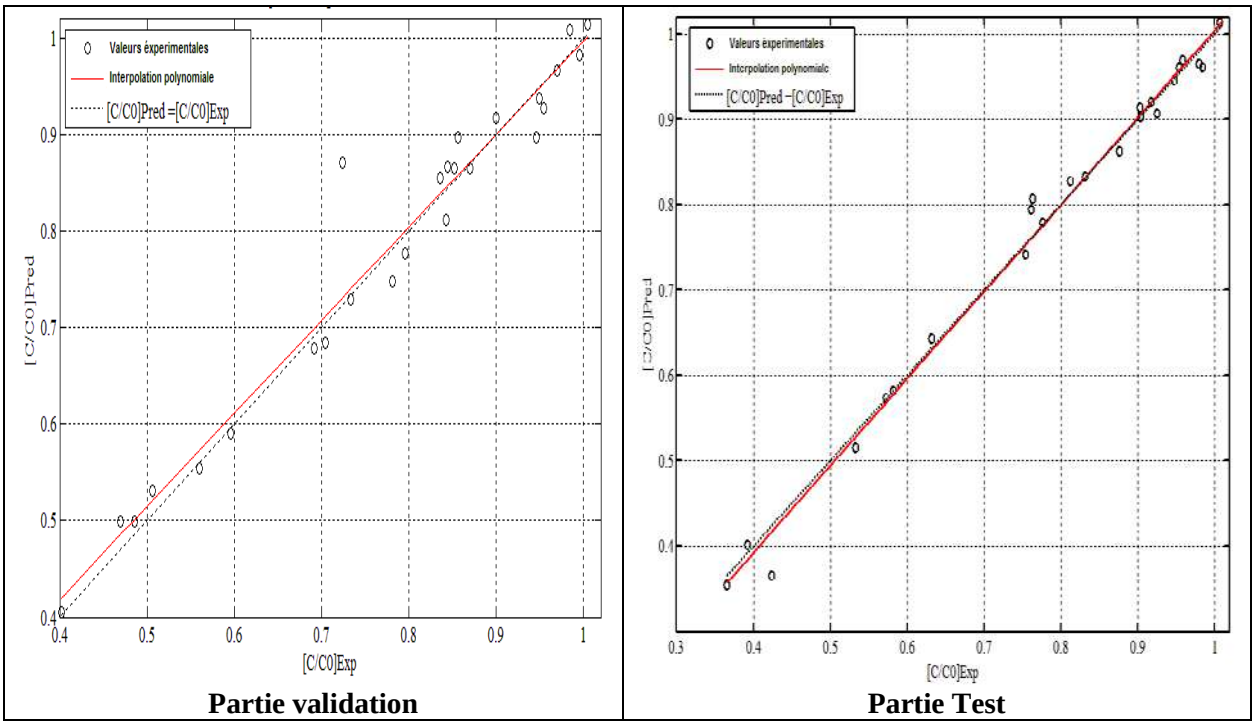
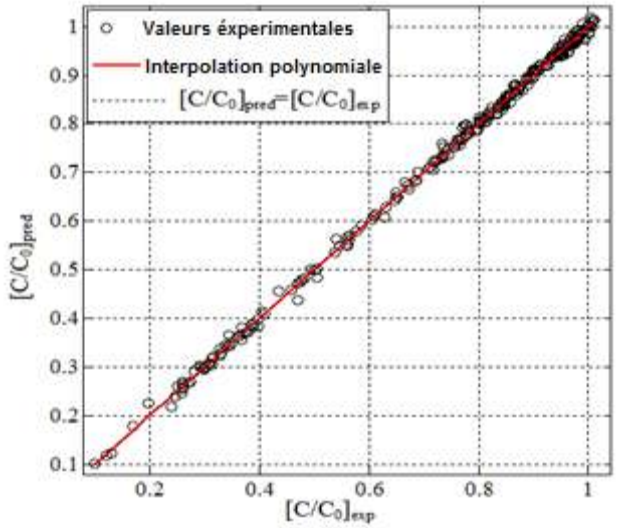


Fig. IV.33 : Schéma structural du modèle ANN_S

La représentation graphique de l'analyse par régression du réseau ANN_S utilisé dans notre étude est visualisée pour les trois parties (apprentissage, validation et test) dans la figure (IV.34).





Partie Apprentissage

Fig. IV.34: Graphe de régression du réseau ANN_S.

ii. Phase de validation globale du modèle ANN_S

Après la détermination structurale du modèle ANN_S, le test et la validation effectuée pour le réseau à travers les deux bases de données spécifiques à ces opérations, nous avons entamé une autre phase de validation globale, de comparaison des résultats obtenus par cette voie et les valeurs simulées par la méthode CFD, en utilisant les valeurs expérimentales comme valeurs de référence. Cette opération de validation a pour objectif de vérifier la crédibilité et la fiabilité des résultats obtenus par le modèle ANN_S. Pour la validation du modèle ANN_S, nous avons choisi la géométrie de la figure (IV.25) comme domaine du calcul. La géométrie de la salle est définie comme suit : longueur × largeur × hauteur = 0,8 m x 0,4 m x 0,4 m; l'ouverture de l'entrée et de la sortie d'air frais à une section de 0,04 x 0,04 m^2 et la sortie de l'air se trouvant à la façade verticale opposée à celle de l'entrée. La symétrie du domaine est représentée par le plan central à Y = 0,2 m et pour plus de détails concernant la géométrie voir la Figure (IV.25). Les valeurs mesurées des concentrations normalisées des particules dans l'air ambiant sont déterminées ou inspirées de l'étude de Chan et al. [9] sont utilisés comme de valeurs de référence pour notre validation. Les propriétés des particules avec une densité de 1400 kg/m^3 et le diamètre de 10 µm. Les vitesses de l'écoulement d'air frais à l'entrée de la salle sont de 0,225 et 0,45 m/s.

Utilisant le modèle ANN_S pour déterminer les profils de concentration selon la hauteur de la salle, aux points axiaux à x=0,2m, 0,4m et 0,6m et pour les deux régimes d'écoulement. Les résultats simulés par l'approche CFD (Lagrangien et Drift-flux) sont tirés d'une étude antérieure à celle-ci effectuée par Bin Z. [61]. Les profils de concentrations obtenus par le modèle ANN_S sont confortés avec les résultats expérimentaux et ceux trouvés par la méthode CFD. A l'aide d'un programme écrit en langage Matlab, nous visualisons les résultats obtenus sous forme d'un graphique comme l'indique la figure (IV.35).

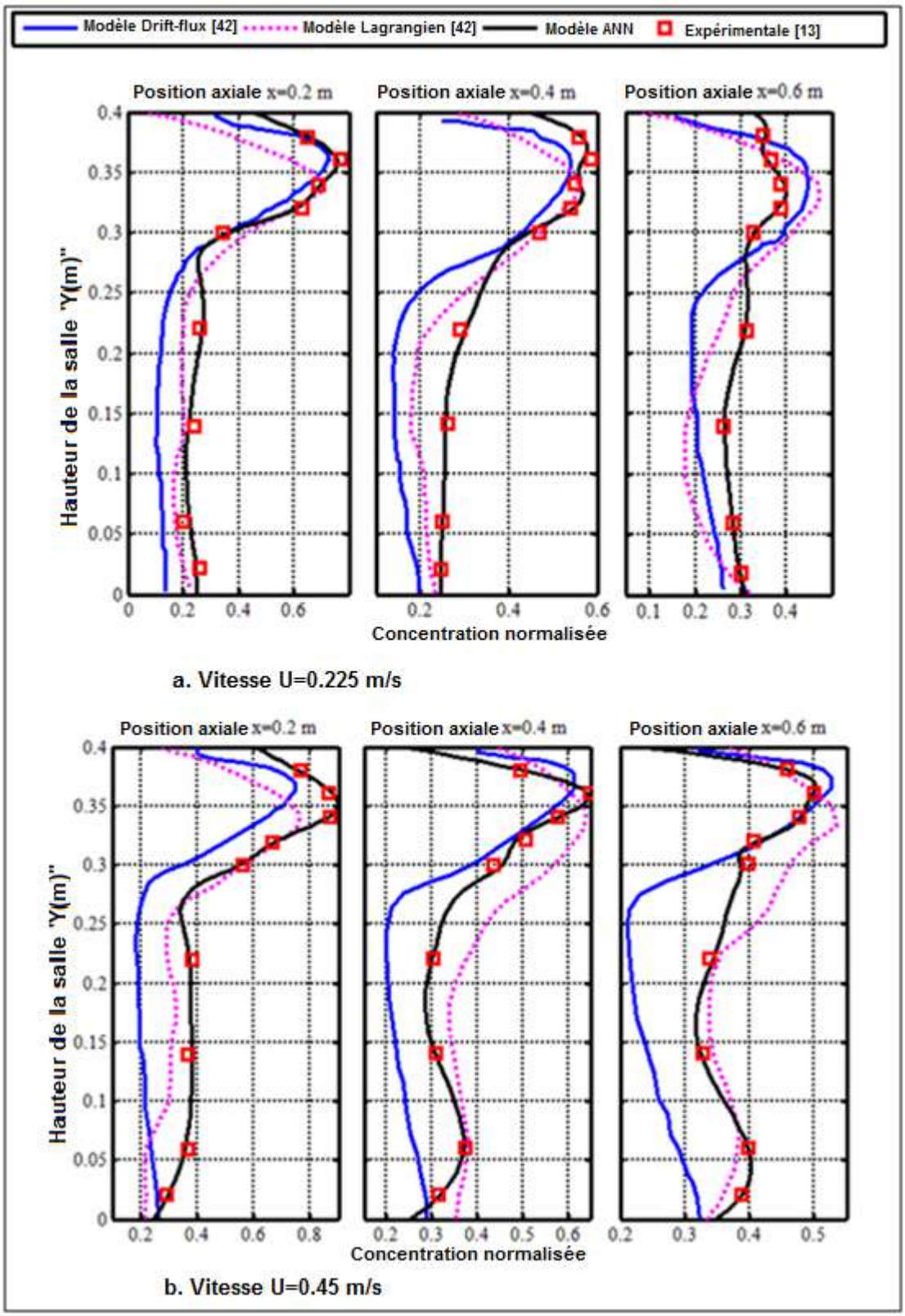


Fig. IV.35 : Comparaison entre profils verticaux de concentration aux trois positions axiales et aux deux vitesses

La première remarque tirée, figure (IV.35), est que les profils verticaux de concentrations simulés par le modèle ANN_S (lignes noires) concordent avec ceux de l'expérience et ceci pour les trois positions axiales et les deux régimes d'écoulement. Par contre, les résultats simulés par la méthode

déterministe « CFD » pour les deux modèles (Lagrangien et Drift-flux) de suivi de la phase dispersé, sont décalés par rapport à ceux de l'expérimentale. Ce décalage représente une sous-estimation de la concentration quand le lissage se trouve en avant des données expérimentales et dans les autres cas une surestimation de celle-ci. D'une autre façon, la visualisation d'une surestimation des effets de la turbulence est indiquée quand le lissage est avant les données expérimentales et dans le cas contraire, on a une sous-estimation.

A travers cette visualisation graphique illustrée dans la figure (IV.35), nous pouvons dire que la simulation par le modèle ANN_S prédit bien la distribution spatiale de la concentration de particules dans un environnement fermé ventilé sur tout l'espace d'analyse. Le modèle Lagrangien prédit moyennement la dispersion des particules et surtout auprès de parois du domaine. Mais pour le modèle Drift-flux (Suivi Eulérien) gère la situation au cœur de l'écoulement, c'est-à-dire au jet de l'écoulement qui est provoqué par le système d'admission d'air frais à la salle.

Après la comparaison grossière, nous entamons une autre phase de comparaison, c'est le calcul des erreurs relatives pour les trois modèles, à l'aide des outils de logiciel Excel de Microsoft, nous avons calculé les erreurs relatives des profils de concentration, dont les valeurs moyennes pour chaque position axiale, et pour chaque régime d'écoulement et sont représentés sous forme d'histogramme dans la figure (IV.36).

Cette représentation graphique, nous permets de constater que les barres des erreurs moyennes, n'atteint pas les 5% pour les six profils (2 régimes x 3position) simulés par le modèle ANN_S. Mais pour les profils déduits par la méthode CFD, nous remarquons une erreur minimale moyenne pour le profil du modèle Lagrangien à x= 0.6m pour une vitesse de U=0.45 m/s d'environ 9%, et une erreur maximale pour le profil du modèle Drift-flux à x=0.2m pour une vitesse de U=0.45 m/s dépassent le 25%.

Cet histogramme des erreurs montre que la modélisation par le modèle ANN_S donne une meilleure concordance avec les données expérimentales pour une erreur moyenne maximale d'environs de 5%. Le modèle Lagrangien arrive en deuxième position avec une erreur moyenne d'environ 16%.

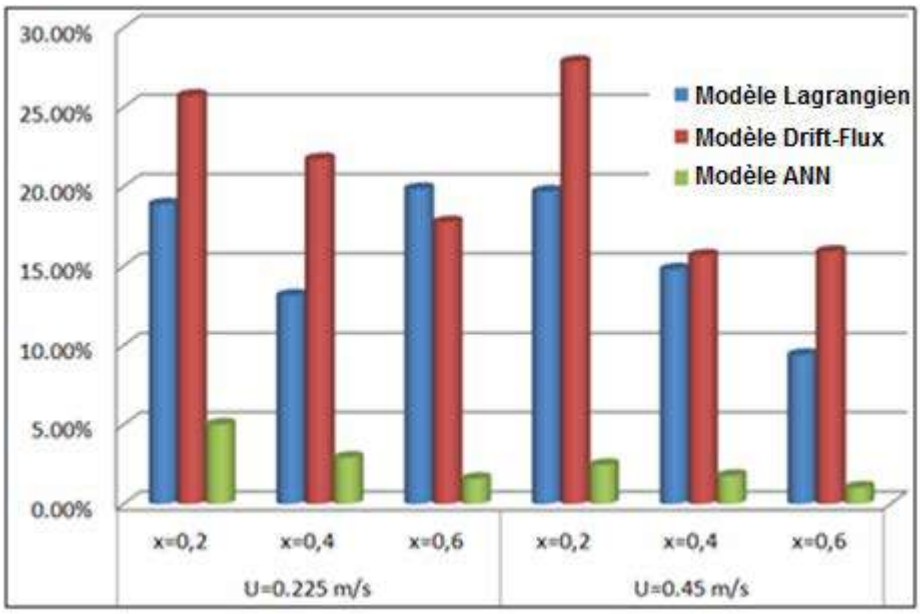


Fig. IV.36: Visualisation graphique de l'erreur moyenne aux trois positions et les deux régimes

IV.3.3. Utilisation du Modèle ANN_S

- **Profil axial de concentration des particules**

Afin de visualiser les limites de ce modèle axialement, y=0.36m, qui se trouve au centre de la section d'admission d'air frais, nous simulons deux profils axiaux de concentration au plan central de la salle et aux deux vitesses d'air (U=0.225 et 0.45 m/s). La représentation graphique de ces profils, les points de mesure de concentration par voie expérimentale, qui sont visualisés dans la figure (IV.37). Sur cette figure, on mentionne les deux axes « x_1 » et « x_2 » qui présentent les limites de l'espace conceptuel du modèle sur la direction axiale. Ces deux profils axiaux représentés dans la figure (IV.37), montre bien la décroissance de la concentration normalisée des particules dans un milieu fermé qui commence par une valeur de 1 au niveau de la section d'admission d'air jusqu'à atteindre la valeur de 0.15 à une vitesse U=0.225 m/s, ou la valeur de 0.46 à U=0.45 m/s. Ces valeurs de concentrations sont simulées au plan de sortie. A travers la visualisation de ces profils axiaux, nous remarquons que le modèle ANN_S interpole bien le phénomène de la distribution axiale de la concentration à l'intérieur du domaine et donne des allures logiques en dehors des limites du domaine.

Les valeurs d'extrapolation de la concentration des particules déterminées par l'ANN_S, figure (IV.37), indiquent qu'elles sont réelles et crédibles si l'on voit le graphe de l'allure de profil axial de la concentration pour la vitesse d'entrée 0,225 m/s et 0,45 m/s. A défaut de données expérimentales en dehors des limites du domaine d'intérêt et vu le graphe de la figure (IV.37), les valeurs d'extrapolation sont acceptables, ce qui signifie que le modèle ANN_S ait également une bonne extrapolation particulièrement pour les positions frontières proches du domaine du calcul.

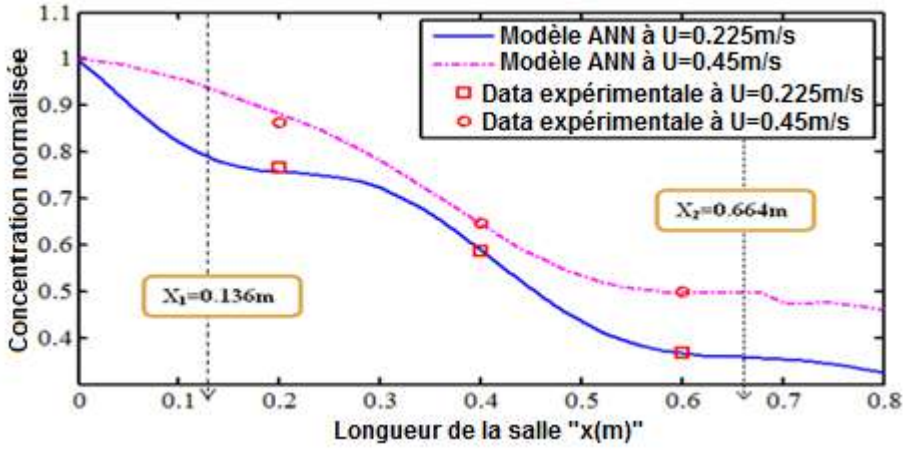


Fig. IV.37: Profils axiaux de concentration à la position verticale y=0.36 m

- **Distribution tridimensionnelle de concentration des particules au plan central**

Les figures (IV.38 et IV.39) montrent en outre une représentation graphique de la distribution de concentration de particules dans un espace fermé au plan central de la pièce. Sur ces figures, on voit une forme acceptable et raisonnable de la distribution de la concentration avec une grande concentration de particules à la zone d'entrée d'air, considérée comme une source de pollution dans ce cas et diminue progressivement le long de la direction axiale en raison du dépôt de particules sur différentes parois de la pièce. A travers ces résultats des contours d'iso-concentration pour les deux conditions de vitesses d'entrées U = 0,225 m/s et U = 0,45 m/s, on confirme également que les résultats simulés de la concentration de particules, obtenus par le modèle ANN_S sont bons sur tout l'espace conceptuel du domaine.

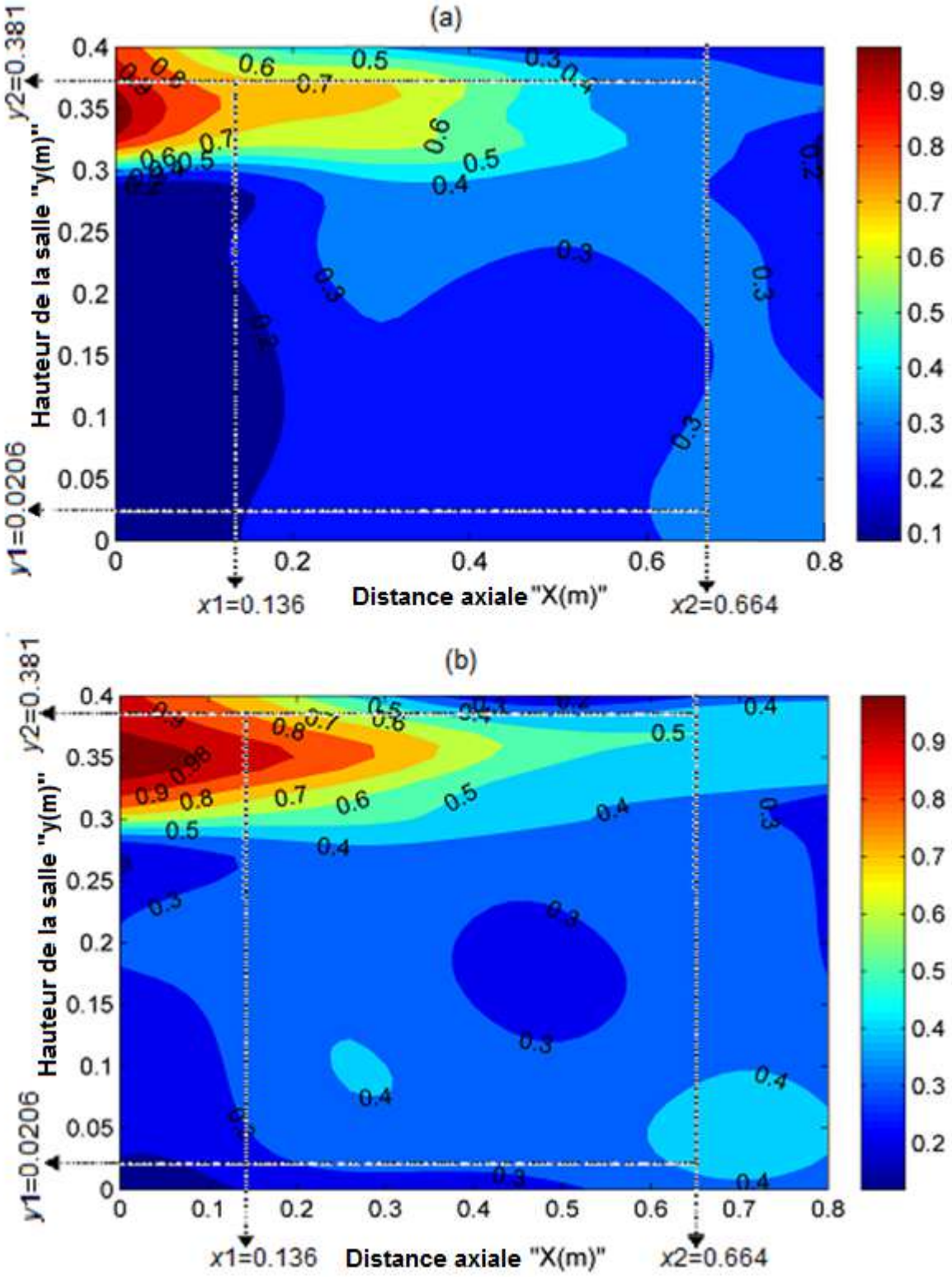


Fig. IV.38 : Iso-concentration au centre de la salle et aux deux régimes : (a) U=0.225m/s et (b) U=0.45m/s

De plus, pour une visualisation détaillée de la distribution de la concentration des particules au plan central de la pièce, selon les deux directions, axiale et verticale, pour les deux conditions de vitesses d'entrées, cette présentation a été réalisée dans les trois dimensions représentées sur la Figure (IV.39).

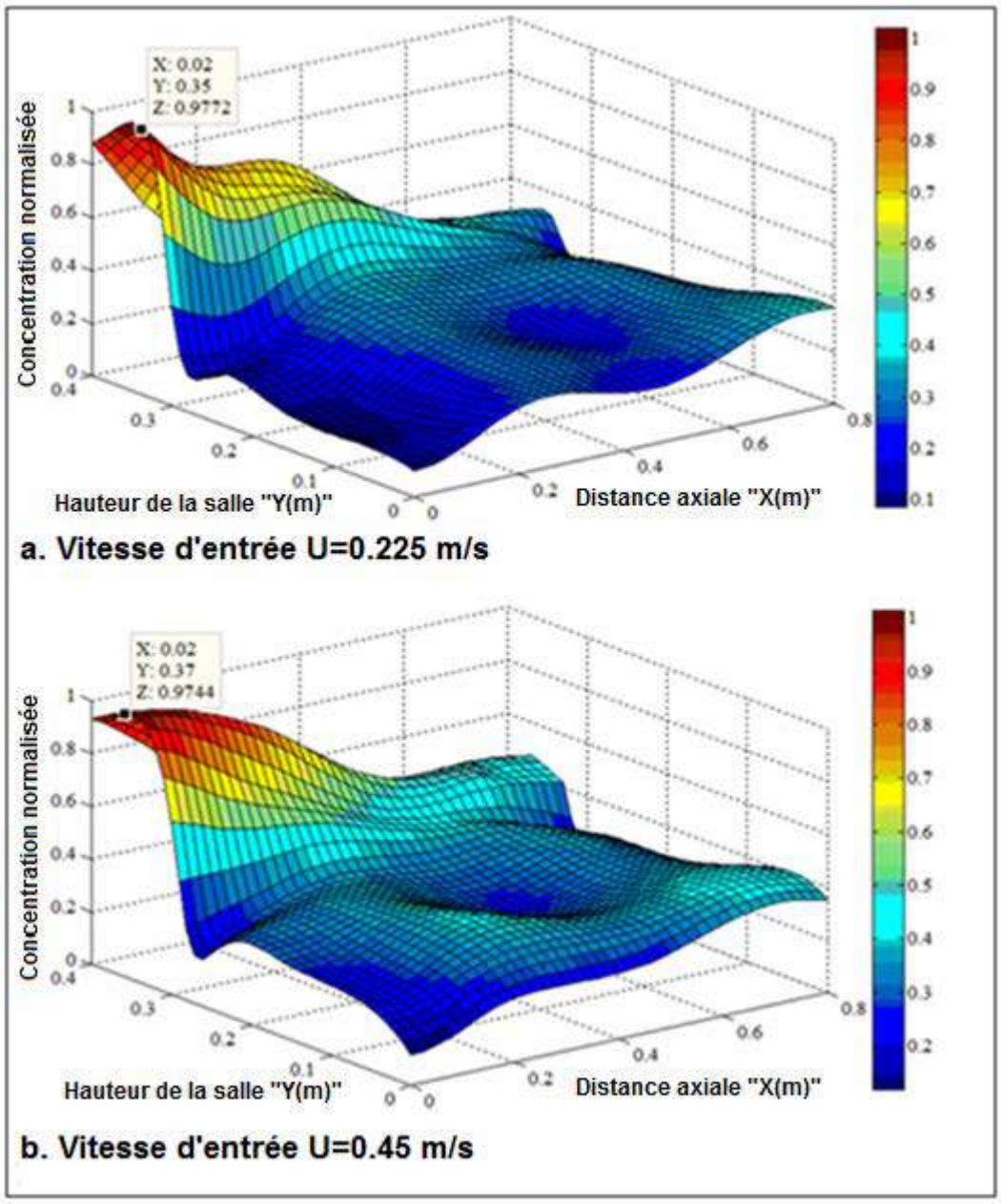


Figure IV.39 : Graphe 3D de concentration au centre de la salle et pour les deux régimes

- **Etude d'effet de la vitesse d'air sur la dispersion de particules**

Afin de visualiser l'effet de la vitesse sur le comportement de la phase particulaire, nous effectuons une série de simulations utilisant le modèle trouvé ANN_S, variant la vitesse de l'écoulement d'air de 0.1 jusqu'à 0.6 m/s et fixant l'altitude d'analyse de concentration de particules à y= 0.36 m de planche de la salle. A travers l'exécution de ces simulations, nous pouvons donner les profils axiaux de concentrations à ces vitesses qui sont indiquées dans la figure (IV.40). On constate que les profils axiaux ont des formes similaires sauf un décalage vers le haut c'est-à-dire une augmentation de concentration quand la vitesse de l'écoulement croit. Cette augmentation est considérable quand la vitesse de l'écoulement dépasse les 0.3 m/s. En outre, montre bien que la concentration des particules dépend essentiellement de l'effet de la turbulence de mouvement.

Pour une vitesse faible (régime laminaire), donne un meilleur régime d'écoulement aux zones propres (salles blanches) puisque la sédimentation due par l'effet de gravité est dominant et le temps de séjours est plus large. Par contre, pour une vitesse d'écoulement très grande, une accélération inertielle au lieu de l'accélération de la pesanteur, diminution de l'effet de déposition par gravité et ainsi que le temps de séjours beaucoup plus court.

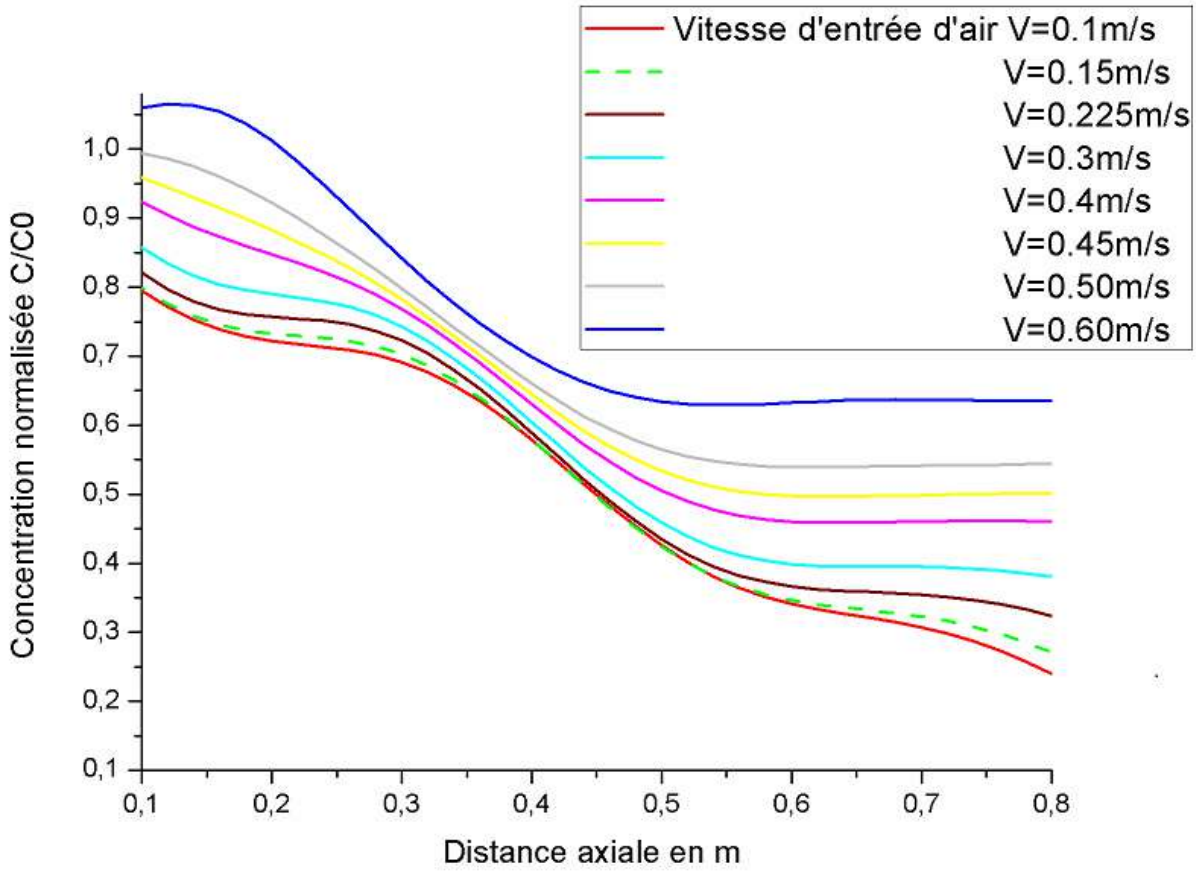


Figure IV.40 : L'effet de vitesse d'air sur la dispersion de particules.

IV.3.4. Détermination et validation du modèle ANN_T

Le modèle ANN_T est déterminé pour étudier la distribution spatiotemporelle de la concentration des particules dans une salle ventilée en régime transitoire. A travers de ce modèle, on peut étudier l'influence du régime d'écoulement (vitesse), diamètre de particules, dimension du domaine, la position de la section d'extraction d'air sur la dispersion.

i. Phase de construction des bases de données du modèle ANN_T

L'extraction maximale des informations sur la relation entre les sorties du modèle ANN_T ou les valeurs mesurées expérimentalement et les inputs de simulations, l'espace de conception doit être utilisé efficacement pour réduire le coût et le temps de l'exécution de ces simulations que ce soit expérimental ou numérique. Pour définir l'apprentissage du modèle ANN_T, nous avons collecté les données suffisantes à partir de l'étude expérimentale réalisée par Hanhui et al. [22]. La base de données générale est composée de 2271 valeurs mesurées pour les 9 points d'échantillonnages d'air à différents diamètres de particule, à plusieurs régimes d'écoulement, à différentes positions de la section d'extraction d'air et en fonction de variation du temps de prélèvement de mesure. La valeur de la concentration des particules mesurée avec un détecteur laser de particules de type

« **CLJ-BII** » installé au point de prélèvement en variant quelque variable d'entrée (mode opératoire). La description du domaine de simulation est représentée dans la figure suivante :

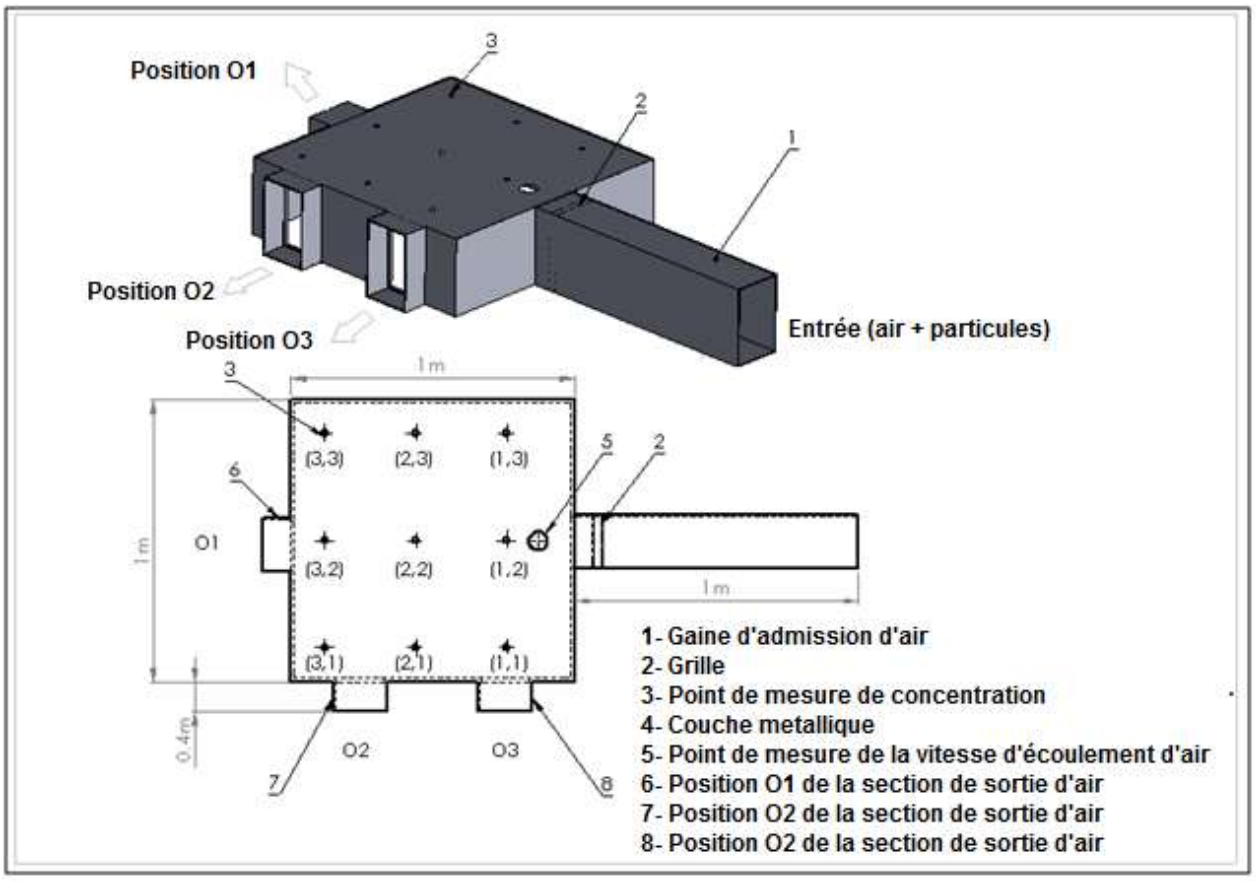


Fig. IV.41: Schéma de domaine de simulation [22]

Les coordonnées spatiales des points de prélèvement et les positions de sections prévues pour l'extraction de l'air sont mentionnées dans le tableau (IV.10).

Tableau IV.10 : Coordonnées spatial des points de mesures et les sections de sortie [22]

Coordonnées des points	**Point**								
	(1,1)	**(1,2)**	**(1,3)**	**(2,1)**	**(2,2)**	**(2,3)**	**(3,1)**	**(3,2)**	**(3,3)**
x	0.17	0.17	0.17	0.5	0.5	0.50	0.83	0.83	0.83
y	0.17	0.5	0.83	0.17	0.5	0.83	0.17	0.5	0.83
Coordonnées des positions de section de sortie d'air									
	O_1		**O_2**		**O_3**				
x	1		0.75		0.25				
y	0		0.5		0.5				

Pour optimiser le nombre des variables d'entrées (mode opératoire) influent sur la réalisation d'essai de mesures de la concentration des particules, ainsi que la généralisation de notre modèle ANN_T, nous testons tous les regroupements possibles et ensuite nous passerons à l'analyse dimensionnelle de ces variables. Afin de tenir les effets de gravitation, de la vitesse de sédimentation, le taux de renouvellement d'air et ainsi l'effet de volume de l'enceinte, nous définissions deux nombres sans dimension, qui sont :

1. **Nombre d'Archimède**

Le nombre d'Archimède est un nombre sans dimension qui caractérise le mouvement des particules dans le fluide porteur, dû à leur différence de densité. Il s'agit du rapport entre les forces gravitationnelles, les forces d'inertie et les forces visqueuses. Il est définit par l'équation suivante :

$$Ar = g.(d_p)^3.\rho_a(\rho_p - \rho_a)/\mu^2 \qquad \text{IV.5}$$

Avec :

g : accélération de la pesanteur, (m.s^{-2})
d_p : diamètre de particule, (m)
ρ_a : masse volumique de l'air à la température expérimentale, (kg.m^{-3})
ρ_p : masse volumique de polluant à la température expérimentale, (kg.m^{-3})
μ_a : viscosité dynamique de l'air à la température expérimentale, (kg.m^{-1}.s^{-1})

2. **Temps réduit :**

Le temps réduit est un nombre sans dimension caractérisant le rapport entre le temps de prélèvement de mesure et le temps de parcours de particules dans l'enceinte à étudier. Il est défini par l'équation suivante :

$$\theta = t.Q/(L.l.h) \qquad \text{IV.6}$$

Avec :

$\theta = t/\tau =$ temps / temps de passage de la particule polluante dans l'enceinte ;

$\tau = V/Q = L.l.h/Q =$ volume de l'enceinte/ débit volumique du polluant.

En fin, nous concluons après regroupement et élimination des invariants durant les simulations expérimentales, nous déduisons que sept variables peuvent influencés les résultats obtenus par l'expérimentale. Apres prétraitement, ces sept variables de mode opératoire de ces expériences sont liés par l'équation suivante :

$$\frac{C}{C_0} = \beta\left(\frac{x_1}{L}, \frac{y_1}{W}, x_{Ai-Ao}, y_{Ai-Ao}, , U, Ar, \theta\right) \qquad \text{(IV.7)}$$

Les dimensions de l'espace conceptuel de ce modèle sont représentées dans le tableau (IV.5) pour indiquer les limites minimales et maximales de ces variables d'entrée du modèle ANN_T.

Tableau IV.11: Valeurs limite des inputs du modèle ANN_T

Variable	Unit	Min	Max
Ar	--	2.025×10^{-06}	9.37×10^{-03}
U	m/s	0.5	1.5
x_1/L	-	0.17	0.83
y_1/W	-	0.17	0.83
$x_{Ai\text{-}Ao}$	-	0.25	1
$y_{Ai\text{-}Ao}$	-	0	0.5
$\boldsymbol{\theta}$	--	0.9418	60

ii. Phase de détermination de structure et l'optimisation du modèle ANN_T

Au début, l'architecture du modèle ANN_T est constituée de sept neurones dans la couche d'entrée, de N couche cachées à M neurones chacune et la couche de sortie qu'est composée par un seul neurone (Concentration normalisée). Pour obtenir un modèle précis et optimal, plusieurs tests sont effectués pour étudier l'influence de plusieurs paramètres. Parmi les tests que nous avons effectués pour optimiser le modèle ANN_T, les tests des algorithmes d'apprentissages et l'effet de nombre des couches cachées et le nombre de neurones dans chaque couche cachée. Pour ces paramètres d'optimisation, nous avons donné les détails concernant les tests dans les tableaux suivants :

Tableau IV.12 : Choix et sélection d'une configuration optimale

(a) Apprentissage

Nombre neurones											
H.L 1	**H.L 2**	**Fonction d'activatio**	**Training Fonction**	**R**	**RMSE**	**AE_ Min**	**AE**	**STDV**	**AE_ Max**	**goal**	**n. ep**
60	0		LM	0,9949	0.0031	8.06E-04	3.22	5.03	84.32	0,0025	651
80	0		LM	0,9946	1.66E-05	0.0011	3.34	5.36	87.06	0,0023	555
90	0		LM	0,99458	1.74E-05	0.0012	3.30	4.96	84.86	0,0023	523
40	2		LM	0,9944	7.66E-05	0.0024	3.53	6.19	140.18	0,0024	932
40	4		LM	0,99736	1.09E-04	0.0019	2.24	3.13	32.13	0,0011	1097
40	8		LM	0,99767	0.0011	1.56E-05	1.78	2.19	16.39	0,0010	837
40	10		LM	0,9976	5.16E-05	1.21E-04	1.89	2.55	32.02	0,0010	1122
43	**10**		**LM**	**0,99798**	**5.31E-05**	**3.19E-04**	**1.55**	**1.87**	**16.56**	**0,0008**	**2179**
50	10		LM	0,99769	2.39E-05	1.13E-04	1.84	2.40	25.55	0,0010	854
43	10	TAN/LOG	LM	0,99791	9.11E-05	4.98E-05	1.69	2.18	17.53	0,0009	1046
43	10	LOG /LOG	LM	0,99762	1.79E-04	3.89E-04	1.86	2.33	21.41	0,0010	793
50	10		CFG	0,9931	0.0118	4.19E-04	4.43	8.28	92.31	0,0028	3602
60	10		CFG	0,99439	0.0045	0.025	3.64	5.80	77.24	0,0024	6153
60	10		RP	0,9927	6.95E-04	3.05E-04	4.34	7.97	97.45	0,0032	42451

(b) Validation

Nombre neurone											
H.L 1	**H.L 2**	**Fonction d'activation**	**Training Fonction**	**R**	**RMSE**	**AE_ Min**	**AE**	**STDV**	**AE_ Max**	**goal**	**n. ep**
60	0		LM	0,98496	0.0182	0.0039	2.62	10.50	11.96	0,00252	651
80	0		LM	0,96677	0.0207	0.0134	4.05	20.79	43.43	0,00238	555
90	0		LM	0,9471	0.0195	0.1161	4.44	20.82	46.32	0,00239	523
40	2		LM	0,98575	0.0013	0.0065	2.46	9.91	12.63	0,00247	932
40	4		LM	0,99018	0.0143	0.0112	2.08	8.58	11.96	0,00116	1097
40	8		LM	0,9903	0.0136	0.0157	1.99	8.29	12.05	0,00103	837
40	10		LM	0,98806	0.0368	0.0165	2.24	9.17	13.18	0,00106	1122
43	**10**		**LM**	**0,98967**	**0.0208**	**0.0111**	**2.02**	**8.81**	**11.50**	**0,00089**	**2179**
50	10		LM	0,98904	0.0221	0.0029	2.01	8.49	11.93	0,00102	854
43	10	TAN/LOG	LM	0,99033	0.0249	0.0070	2.00	8.53	11.79	0,00092	1046
43	10	LOG /LOG	LM	0,99124	0.0033	0.0010	1.88	7.85	10.70	0,00105	793
50	10		CFG	0,98701	0.0047	0.0031	2.39	10.12	20.18	0,00282	3602
60	10		CFG	0,98741	0.0015	0.0139	2.42	9.66	12.76	0,00242	6153
60	10		RP	0,98339	0.0038	0.0178	2.73	11.65	21.30	0,00322	42451

(c) Test

Nombre neurones											
H.L 1	**H.L 2**	**Fonction d'activation**	**Training Function**	**R**	**RMSE**	**AE_ Min**	**AE**	**STDV**	**AE_ Max**	**goal**	**n. ep**
60	0		LM	0,97393	0.0119	0.0278	2.44	2.73	12.88	0,00252	651
80	0		LM	0,96027	0.0227	0.0169	3.44	3.64	24.65	0,00238	555
90	0		LM	0,95135	0.0067	0.0010	3.73	3.77	27.94	0,00239	523
40	2		LM	0,97468	0.0059	0.0517	2.70	2.37	12.73	0,0024	932
40	4		LM	0,98378	0.0029	4.07E-04	2.18	2.20	15.69	0,00116	1097
40	8		LM	0,9844	0.0019	0.0092	2.14	2.21	17.03	0,00103	837
40	10		LM	0,98172	0.0090	0.0138	2.31	2.42	17.74	0,00106	1122
43	**10**		**LM**	**0.98362**	**0.0147**	**0.0034**	**2.14**	**2.24**	**12.77**	**0.00089**	**2179**
50	10		LM	0,98421	0.0011	0.0062	2.09	2.10	11.76	0,00102	854
43	10	TAN/ LOG	LM	0,98404	0.0170	0.0166	2.08	2.08	9.65	0,00092	1046
43	10	LOG / LOG	LM	0,98423	0.0030	0.0051	2.10	1.96	10.57	0,00105	793
50	10		CFG	0,97374	0.0046	0.0259	2.80	2.42	13.89	0,00282	3602
60	10		CFG	0,97688	0.0026	0.0094	2.67	2.42	17.31	0,00242	6153
60	10		RP	0,96978	0.0053	0.0071	3.06	2.72	16.16	0,00322	42451

Configuration optimale

Après une série de test pour la détermination d'une configuration optimale et précise, qui correspond aux de la ligne de la couleur jaune au tableau (IV.12). Le choix d'une configuration optimale est réalisé à partir d'un compromis entre les trois parties du tableau (IV.12).

Un réseau de type perceptron (MLP) à trois couches est utilisé (2 couches cachées et une couche de sortie). La première couche cachée comporte 43 neurones avec une fonction d'activation tangente hyperbolique. La deuxième couche cachée contient 10 neurones avec une fonction d'activation tangente hyperbolique. La troisième couche représente la couche de sortie à une fonction d'activation linéaire (y=x). Le réseau de neurones peut être schématiquement représenté comme sur la figure suivante :

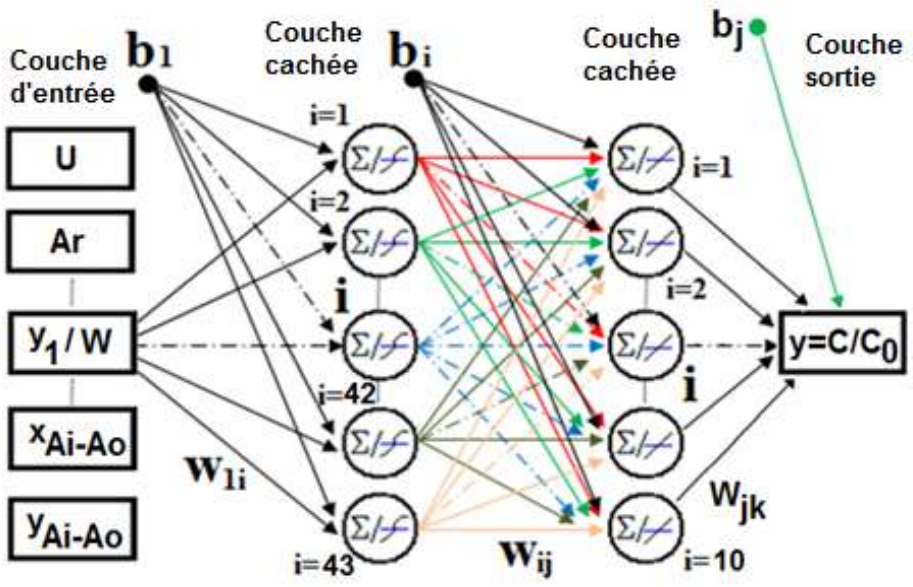
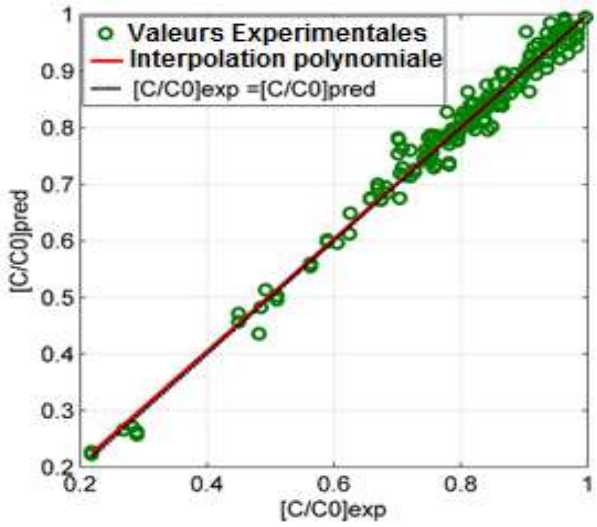
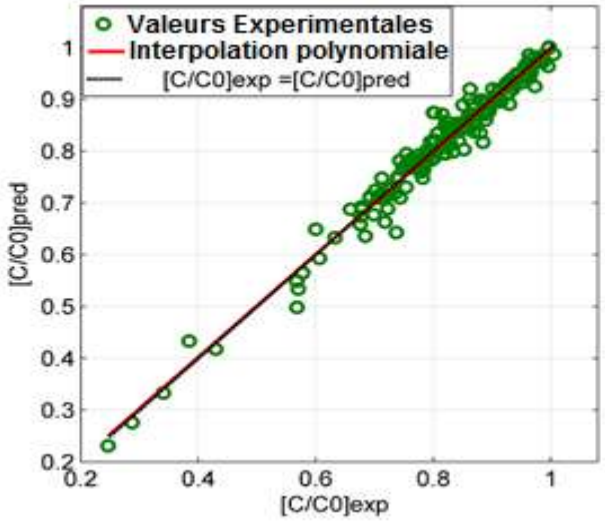


Fig. IV.42 : Schéma structural du modèle ANN_T

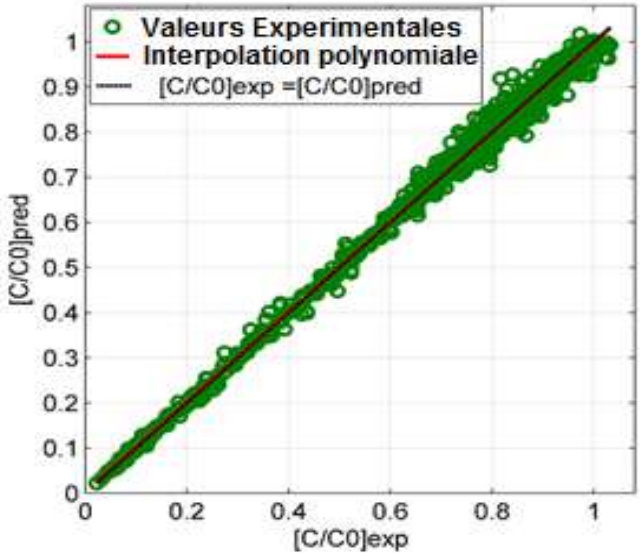
La représentation graphique de l'analyse par régression du réseau ANN_T utilisé dans notre étude est visualisée pour les trois parties (apprentissage, validation et test) sur la figure (IV.43).



Partie validation



Partie test



Partie apprentissage

Fig. IV.43 : graphe de régression du réseau ANN_T

iii. Phase validation globale du modèle ANN_T

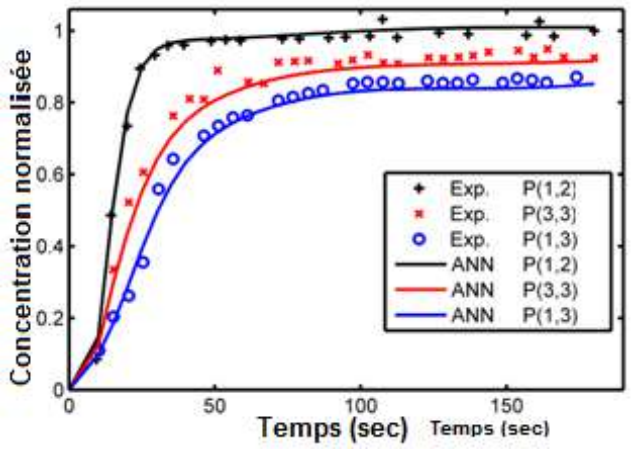
Afin de donner la crédibilité et la fiabilité aux résultats obtenus par le modèle ANN_T, et après la détermination structurale du modèle optimal ANN_T, nous avons entamé une autre phase de validation globale. Cette validation est basée sur une comparaison des résultats obtenus par ce modèle et les valeurs simulées par la méthode CFD, nous utilisons les valeurs expérimentales comme référence. Pour cette validation du modèle, nous avons choisi la géométrie de la figure (IV.38) comme domaine du calcul. Les dimensions de ce domaine sont définies comme suit : longueur × largeur × hauteur = 1 m x 1 m x 0,3 m ; l'ouverture de l'entrée d'air frais est de 0.2 x 0.3 m^2 et la section de sortie d'air est de 0.2 x 0.3 m^2. Pour l'étude de l'effet de position de la section de sortie sur le transfert de particules, prévue pour trois positions O_1, O_2 et O_3 : la position O_1 est placée à la face opposée de la section d'entrée d'air, pour plus de détails pour les autres positions de sorties, et les points de prélèvements de mesure sont indiqués au tableau (IV.10) et la figure (IV.41). Les valeurs mesurées et simulées des concentrations normalisées des particules dans l'air ambiant sont inspirées de l'étude Hanhui Jin et al. [22, 72]. Les valeurs expérimentales sont utilisées comme des valeurs de références pour notre validation. Les propriétés des particules dont la densité qui est de 2100 kg/m^3 et le diamètre variant de 0.5 à 5µm. Les particules d'aérosol

sont classées en 5 groupes: 0,3-0,5 mm, 0,5-1,0 mm, 1,0-3,0 mm, 3,0-5,0 mm et 5,0-10,0 mm, qui ont été désignés par 0,3 mm, 0,5 mm, 1,0 mm, 3,0 mm, 5,0 mm respectivement, et la concentration des cinq groupes de particules d'aérosol a été mesurée respectivement. Pour aménager les différents champs d'écoulement d'air, ils ont supposé une seule des trois sorties qui est ouverte. Les vitesses de l'écoulement d'air frais à l'entrée de la salle sont de 0.5 et 1.5 m/s à la position d'entrée qui correspond aux débits de 5400 l/min, 1800 l/s, respectivement.

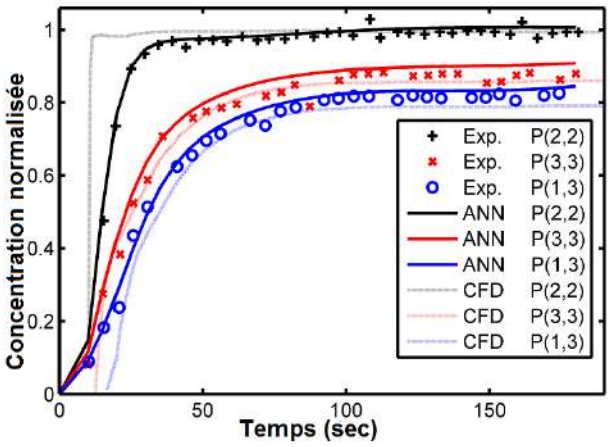
Les profils temporels de la concentration normalisée des particules fines dans le milieu ambiant de la salle sont simulés par le modèle ANN_T, aux points (2, 2), (3, 3) et (1,3) dont les coordonnées sont indiqués dans le tableau (IV.10), aux cinq gammes de diamètre de particules qui sont mentionnées ci-dessus. Les profils simulés par l'approche CFD [70] et avec le modèle ANN_T sont confrontés aux valeurs expérimentales [22], ces profils sont visualisés graphiquement dans la figure (IV.44). Cette représentation graphique visualise grossièrement, sans calcul d'erreur, les profils obtenus par le réseau ANN_T concordent avec ceux des valeurs expérimentales et ceci pour les cinq groupes des diamètres de particules, aux trois points spatial : (2,2), (3,3) et (1,3) ; pour la vitesse U=0.5 et la position O_1 de la section de sortie de l'air pollué. Par contre pour les résultats simulés par la méthode CFD, sont proches des valeurs expérimentales sauf pour le point (2,2) où une grande divergence par rapport aux profils expérimentaux et surtout au régime transitoire du mouvement, c'est-à-dire avant d'atteindre le palier de stabilité de mouvement et cette remarque est valable aux quatre gammes de diamètres des particules.

Pour le diamètre de particules de 0.5µm, la comparaison est effectuée seulement par rapport à expérimental à cause de manque de données simulées par la méthode CFD [72]. Cette remarque est valable pour les trois points dans lequel on a effectué la comparaison.

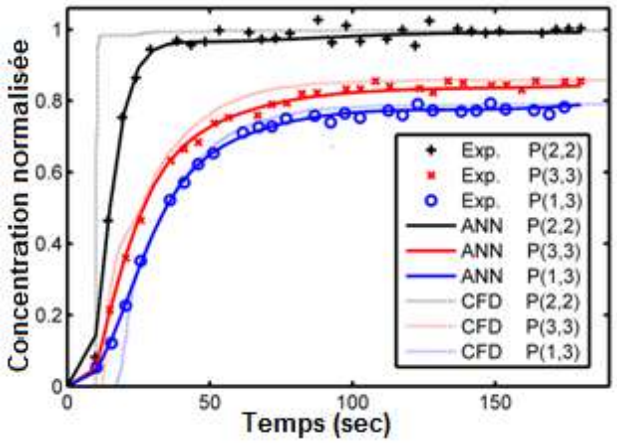
(a) Diamètre de particule est 0.5µm



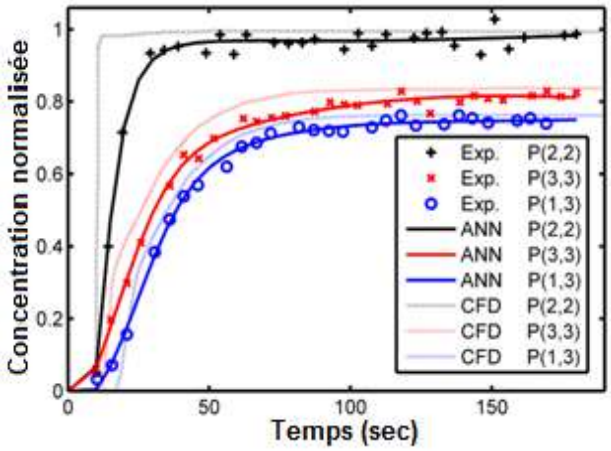
(b) Diamètre de particule est 0.3µm



(c) Diamètre de particule est 1µm



(d) Diamètre de particule est 3µm



(e) Diamètre de particule est 5µm

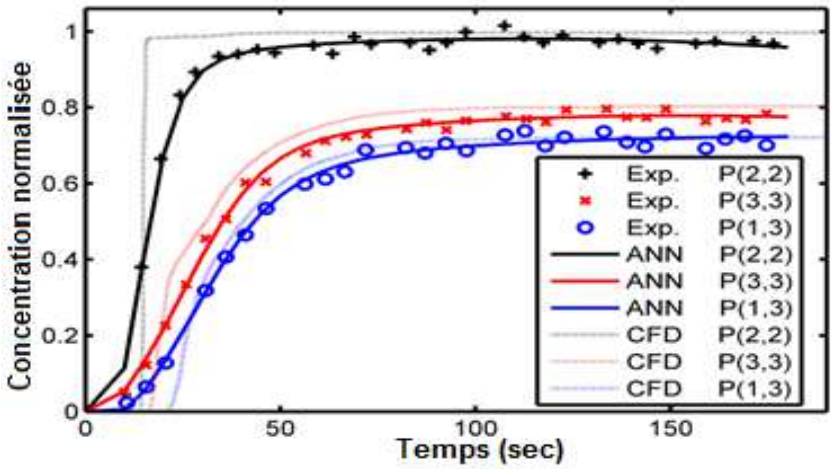


Fig. IV.44 : Profils de concentration aux points (2, 2), (3, 3) et (1, 3), aux cinq gammes de diamètre et à la position O_1

A travers les profils temporels de concentrations représentés dans la figure (IV.44), nous remarquons que le modèle ANN_T donne une meilleure répartition spatiotemporelle de la concentration des particules dans un environnement fermé sur tout le milieu d'étude. D'où on déduit que notre modèle ANN_T donne un bon lissage des profils à l'intérieur de l'espace conceptuel du domaine de simulation (tableau IV.10).

Le modèle CFD sous-estime le temps de parcours pour atteindre le régime établi et surtout le profil de concentration du point (2,2) pour les quatre gammes de diamètres par rapport aux profils réels. On a remarqué que le temps de mélange nécessaire pour atteindre l'état stationnaire (régime établi) pour le profil CFD au point (2,2) est presque estime à 10 seconds qui sont égale au volume de l'enceinte divisé par le débit de l'écoulement à la section d'entrée.

Après la comparaison superficielle, nous entamons une autre phase de calcul des erreurs relatives des profils de concentration simulés par les deux méthodes (méthode CFD et modèle ANN_T) par rapport valeurs expérimentales utilisées comme référence. La figure (IV.45) représente les valeurs des erreurs relatives des profils temporels de concentrations aux trois positions spatiales : point (2,2), (3,3) et (1,3) ; et ainsi pour chaque gamme de diamètres de particules étudiée. D'après cet histogramme mentionné dans la figure (IV.45), nous remarquons que la majorité des barres des erreurs du modèle ANN_T, ne dépasse pas les 5% sauf pour le cas du point (1,3) au diamètre 5µm

qui atteint le 8.2%. Mais pour les barres des erreurs de la méthode CFD, le minimum dépasse les 5% et le maximum atteint les 16%.

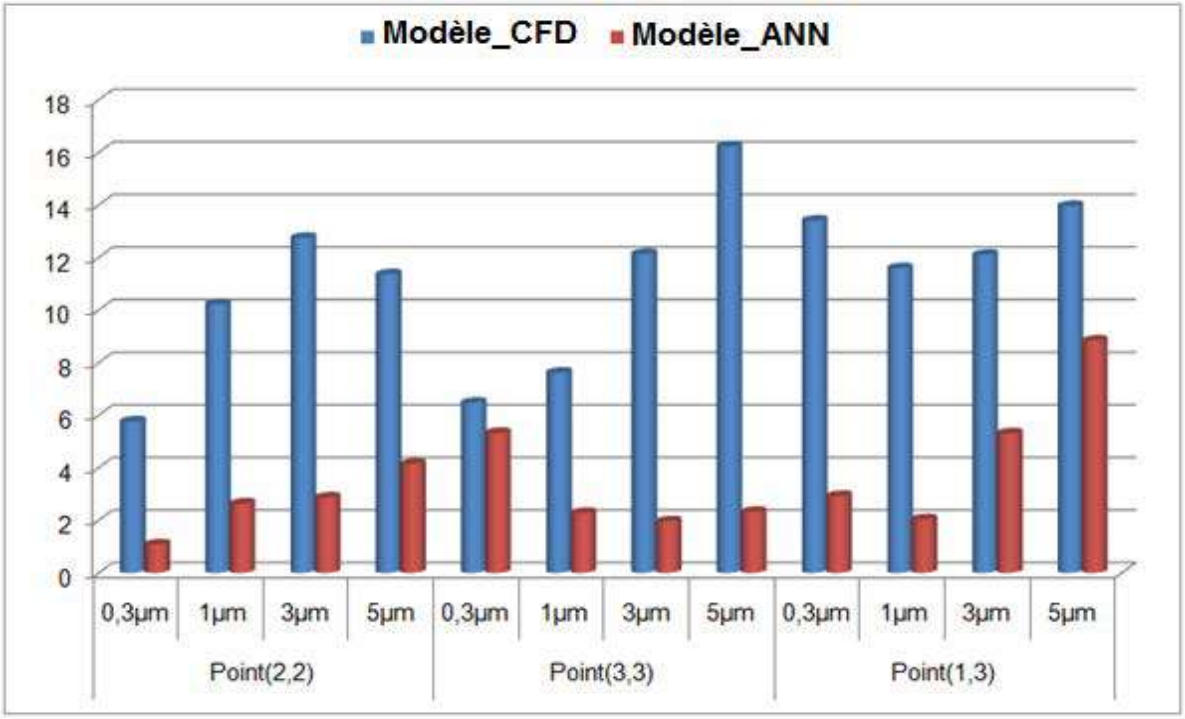


Fig. IV.45 : Visualisation de l'erreur moyenne de concentration aux points (2, 2), (3, 3), (1, 3) et aux cinq gammes de diamètre de particules.

Par cette comparaison approfondie, nous confirmons que le modèle ANN_T fournit de meilleurs profils de distribution spatiotemporelle de concentrations de particules dans un milieu confiné ventilé et très similaire aux données expérimentales presque dans tout l'espace conceptuel du modèle. Par cette remarque d'interprétation, on peut dire qu'un réseau neural artificiel de type MLP donne une meilleure méthode de prédiction des résultats prévus pour une éventuelle configuration avec la seule condition que cette dernière doit être incluse dans les dimensions de l'espace du modèle.

IV.3.5. Utilisation du modèle ANN_T

La figure (IV.46) donne une visualisation graphique des profils temporels de concentration des particules à cinq gammes de diamètres, à différents points spatiaux de maquette et à position O_1 figure (IV.41) de la section de sortie d'air pour une vitesse d'écoulement d'air est de 0.5 m/s. A travers ces profils, nous constatons que l'effet de diamètre de particule est remarquable à partir d'un diamètre de 1µm. Les cinq graphes de la figure (IV.46) montrent que l'évolution standard d'un régime transitoire de mouvement en fonction de temps d'injection des particules dans l'espace de maquette avec la vitesse d'air frais à l'entrée est de 0.5m/s quand la section de sortie d'air " O_1" est ouverte. Ce régime débute par un palier de croissance de concentration normalisée jusqu'à atteindre un état stable ou le régime établi. Plus le diamètre des particules est grand, plus le temps d'atteindre le régime établi est faible pour tous les points sur l'espace de maquette. Le temps d'atteindre le régime établi diffère d'un point à l'autre en fonction de sa position sur l'espace de maquette, en fonction de son éloignement de la section d'entrée d'air, sa position par rapport aux lignes de courant (coin mort ou non) et visualisé mieux pour les profils de grands diamètres c'est à dire la considération des autres effets tels que la sédimentation des particules par gravité.

La figure (IV.46, (a),... et (e)) montre que nous pouvons classer la distribution de particules en deux groupes, les particules dont le diamètre est inférieur ou égale à 1µm et le groupe des particules supérieur à 1µm. Par exemple, pour les profils de concentration de particule de diamètre 0.3 et 0.5 µm sont en superposition pour tous les points.

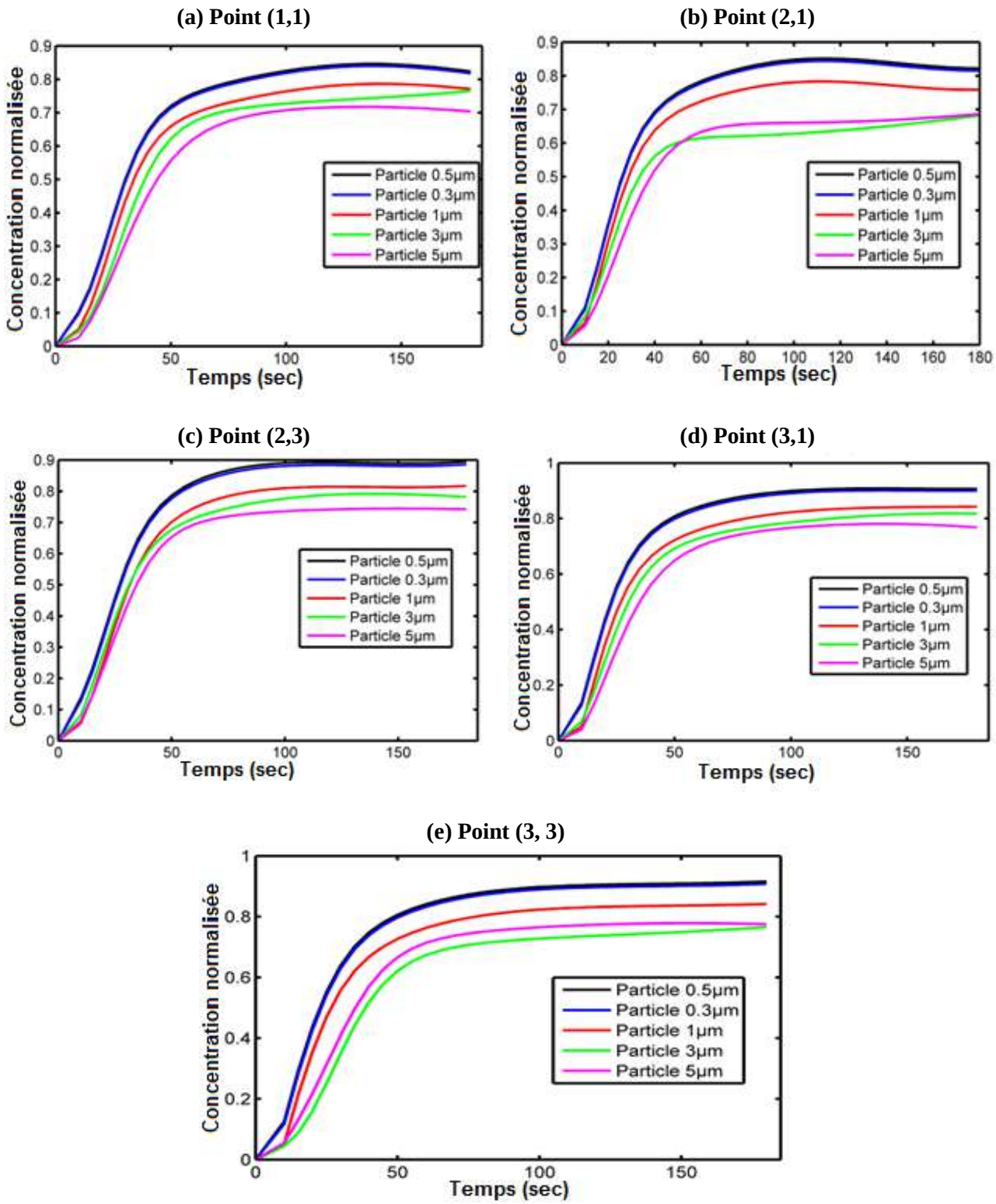


Fig. IV.46 : Profils temporels de concentration aux cinq gammes de diamètre et aux différents points et à la position de sortie «O_1 »

Pour montrer l'effet de la vitesse sur le comportement du mouvement, nous choisissions la position « O_2 » (figure IV.41) pour la section d'évacuation de l'air et nous effectuons les simulations pour les deux vitesses U=0.5 et 1.5 m/s. Après l'exécution, nous pouvons visualiser les profils temporels de concentration de particules dans un environnement intérieur aux points (2,2) et (3,3) comme indique la figure (IV.47). Ces graphismes montrent que le temps d'établissement du régime stable est faible quand la vitesse de l'écoulement est augmentée. Par la même quantité initiale injectée, ils montrent que la concentration des particules est augmentée quand la vitesse de l'écoulement croit (figure IV.47 (a) et (c)). Pour les particules dont le diamètre est inférieur à 1µm, ces paliers de stabilité se superposent quand la vitesse s'agrandit. Nous remarquons qu'une uniformité dans les profils de la concentration de particules par rapport à ceux de la figure (IV.46) peut être due à la position de la section d'évacuation d'air, puisqu'aperçue pour les deux vitesses d'écoulement.

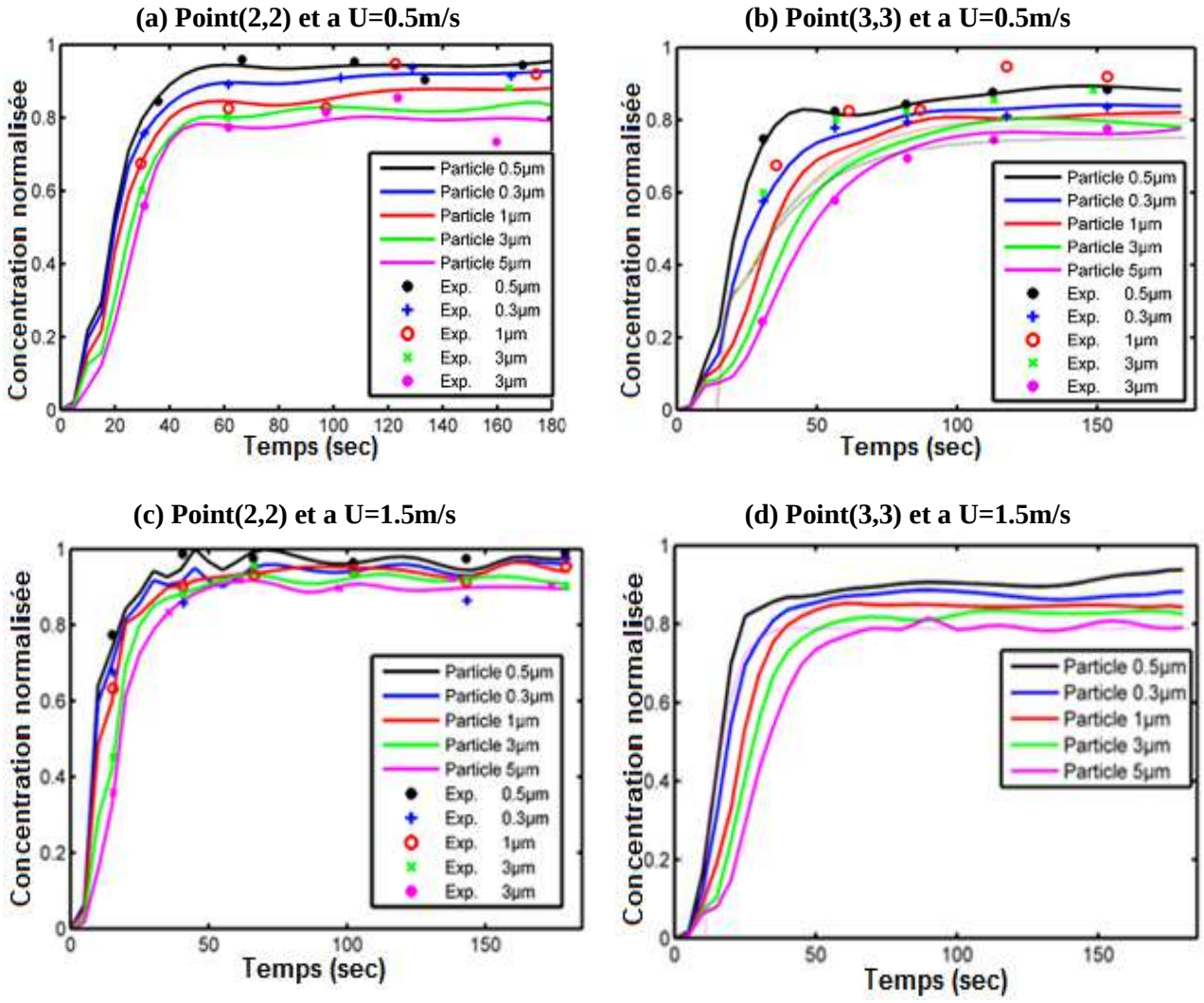


Fig. IV.47 : Profils temporels de concentration aux cinq gammes de diamètre, aux deux points, aux deux régimes et à la position O_2

Pour visualiser mieux l'effet de choix de position de la section d'évacuation de l'air, sur la stabilité des profils de concentration de particules, nous fixons la vitesse de l'écoulement d'air à

0.5 m/s et on déplace la section de sortie d'air à la position « O_3 » (figure IV.41). A travers la simulation dans ces conditions, par le modèle ANN_T, on présente les profils temporels obtenus de concentrations au point (2,2), au point (3,3) dans la figure (IV.48). Etant donné que la distance entre le point (3,3) et l'entrée et la sortie est plus longue que celle de n'importe quel autre point dans ce cas, la concentration des particules au point (3,3) commence à augmenter beaucoup plus tard comme le montre la figure (IV.48, b). Une uniformité des profils de concentration, si l'on compare par rapport aux profils des autres positions de la section de sortie, est remarquée surtout pour le point (3, 3). En outre, les profils trouvés par la méthode CFD n'indiquent pas cette instabilité et ces profils pour différente gamme de diamètres sont superposés.

Selon les résultats obtenus avec différentes positions de la section de sortie, il est clairement démontré que la configuration du champ d'écoulement, la stabilité de régime de mouvement et le temps de la dispersion des particules, se diffère d'un point à l'autre et le même pour diamètre. Plus le diamètre de particules est grand, plus la pente de la droite d'établissement du régime est faible.

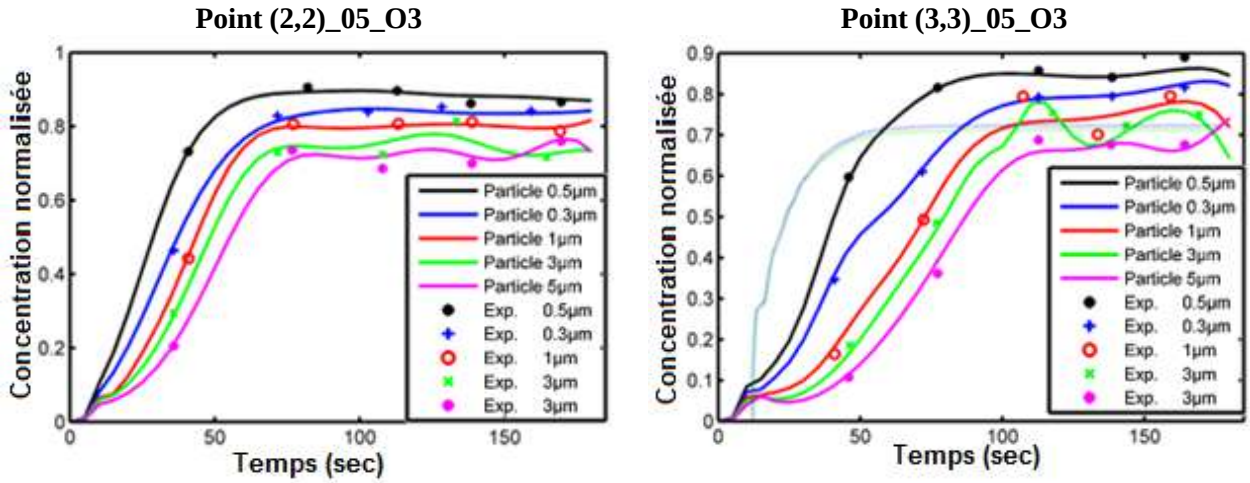


Fig. IV.48: Profils temporels de concentration aux cinq gammes de diamètre, aux deux points, à U=0.5m/s et à la position O_3

IV.4. Conclusion

A travers les principaux résultats présentés dans ce chapitre, via l'utilisation des modèles numérique pour prédire la dispersion des polluants sous l'émission d'une éventuelle source de pollution dans l'atmosphère ou dans un milieu confiné ventilé, provenant essentiellement des simulations réalisées par :

- La programmation de la solution Gaussienne sous MatLab pour étudier la diffusion d'un panache dans l'atmosphère ;
- L'utilisation de la méthode CFD à travers le code commercial « ANSYS-Fluent » qui est utilisé pour analyser la diffusion du panache et le transfert de particules dans un milieu fermé ;
- L'application du réseau neural artificiel pour modéliser la dispersion de particules dans milieu ferme en régime stationnaire et transitoire.

Les résultats trouvés par l'application de ces modèles de quantification de la dispersion des polluants dans les coordonnées spatiotemporelles, nous permettent de conclure que :

- Pour le milieu atmosphérique, la comparaison est effectuée entre les modèles Gaussien et tridimensionnel CFD :
    - La solution Gaussienne standard donne rapidement une estimation de concentration des polluants autour des installations industrielles. Le temps d'exécution est environ de 3min, qu'elle est très intéressante de l'utiliser en situation de crise. La corrélation BNL estimant les écarts-types (σ_y et σ_z), dont les résultats trouvés par celle-ci sont satisfaisants, représente une légère surestimation qui est acceptable, l'erreur au pic de concentration ne dépasse pas les 40 quand la distance axiale de la source dépasse le 50m, c'est-à-dire un facteur multiplicateur de 1.4 est inférieur à 2 (Gabruck et al, 1999) ;
    - Le modèle tridimensionnel CFD sous-estime la concentration. Le traitement de la turbulence est effectué par k-ε standard. Généralement, ce modèle présente légèrement un surestime de l'effet de la turbulence par rapport à l'expérimentale qui provoque cette sous-estimation.
- Pour le milieu confiné ventilé, la comparaison est réalisée entre les résultats trouvés par le modèle tridimensionnel CFD et l'application du réseau neural artificiel :
    - Les résultats trouvés par le modèle CFD sont acceptables. Mais, résulte une amélioration sur le modèle pour tenir compte de quelques effets qui ne sont pas pris en considération par le code, tel que l'effet de déposition des particules pour le modèle Eulérien-Eulérien ;
    - Les résultats trouvés sur la base d'un modèle des réseaux de neurones artificiels sont très adéquats. Il semble alors important, par la suite, d'enrichir si possible la base d'apprentissage pour généraliser ce modèle et ainsi d'augmenter les dimensions de l'espace conceptuel de ce dernier.

Enfin, les résultats obtenus, en les confrontant avec les valeurs expérimentales, démontrent que les modèles développés sont capables de prédire raisonnablement la dispersion des polluants dans un milieu, nécessitent dans le cas de l'approche déterministe des améliorations afin de tenir compte des effets qui ne sont pas pris en considération que ce soit pour le modèle CFD ou la solution analytique. Par contre, pour l'approche statistique nécessite un enrichissement de la base des données d'apprentissage du modèle.

Conclusion Générale

Dans les installations nucléaires, la surveillance de l'environnement intérieur/extérieur face aux risques de contamination par les aéro-contaminants fait partie des rôles essentiels assurés par les systèmes de ventilation nucléaires. Les systèmes de ventilation dans ces installations sont la première barrière protectrice de ce majeur danger à travers les fonctions suivantes :

- Confinement dynamique entre les différentes zones ;
- Diminuer l'accumulation de taux de pollution ;
- Garantir la qualité de l'air frais.

Les règlementations dans l'industriel nucléaire imposent des études de dangers aux exploitants afin d'évaluer les conséquences d'un accident sur leur installation. Ces études cartographient en coordonnés spatiotemporels la concentration des polluants, classement des zones à différents niveaux d'activités et efficacité des barrières de filtration placés au système d'assainissements de l'air. Par ailleurs, en situation de crise lorsque l'accident se produit, il est nécessaire de pouvoir prévoir rapidement les zones à évacuer en priorité (plan d'urgence). Généralement, la dispersion des polluants est une combinaison entre les différents mécanismes de mouvement d'air, les dimensions du milieu, les occupations du milieu (obstacles) et la caractérisation de terme source.

Notre travail consiste à analyser les outils nécessaires pour prédire l'évolution dans le temps et dans l'espace d'une contamination d'une éventuelle pollution d'ordre industriel, en établissant des modèles qualifiés et ainsi rapides pour quantifier le transfert des polluants dans un tel milieu ambiant. Ces modèles de simulations numériques doivent fournir un calcul des valeurs de concentration des polluants depuis sa zone d'émission jusqu'à tout point du domaine considéré.

Ainsi, nous avons mené une série d'études numériques réalisées par :

- L'analyse de la diffusion d'un panache d'air pollué dans une atmosphère légèrement instable, utilisant la solution Gaussienne qui est programmé numériquement sous langage Matlab ;
- Des études numériques de la diffusion d'un panache d'une cheminée et ainsi que le transfert des particules dans un milieu confiné ventilé utilisant la méthode CFD à travers le code commercial « ANSYS-Fluent » ;
- La modélisation du transfert de particules dans un environnement intérieur aux deux régimes stationnaire, transitoire utilisant les réseaux neurones artificiels.

En facilitant la manipulation, à l'utilisateur, on a développé des procédures du mode préparatoire pour chaque approche de modélisation. A travers la simplicité de l'interface graphique du code "Fluent", qui n'est pas limité uniquement à ces propres fonctions, mais il offre à l'utilisateur la possibilité d'y injecter ses propres fonctions selon les particularités du problème. A partir de cela, nous avons développé deux UDF, l'une pour la prédiction de l'évolution verticale de la vitesse de vent et l'autre une UDS pour implanter l'effet de la diffusion moléculaire du panache dans l'atmosphère. Pour le milieu fermé ventilé, à travers une série de simulation, on a déterminé la quantité initiale injectée dans le système de ventilation qui est utilisé dans l'étude antérieure réalisée par Lai et al. (Lai et al., 2006). Ainsi que l'établissement d'un profil de fraction volumétrique de la phase dispersé pour l'introduire aux conditions aux limites d'entrées. Afin de répondre aux exigences de rapidité et précision des résultats, nous avons développé des modèles des réseaux de neurones artificiels issus de l'apprentissage statistique. Leur utilisation a nécessité la constitution et l'apprentissage de bases de données exhaustives à partir d'essais expérimentaux.

Devant la complexité de la réalisation de base de données aussi complète que possible, un inconvénient pour la généralisation de ces modèles ANN aux études de différentes situations et condition opératoire de simulations.

La première série de simulations a permis d'évaluer et de comparer entre les profils de concentration trouvés par la solution Gaussienne et le modèle tridimensionnels CFD dans le cas d'un suivi du panache diffusé dans l'atmosphère. Compte tenu des résultats satisfaisants, nous pouvons dire que :

- La corrélation BNL des écarts types (σ_y et σ_z), de solution analytique Gaussienne a montré son utilisation pour le cas d'un panache a une hauteur de l'ordre de 100m (Balde H., 2011);
- Une erreur de surestimation faible, même pour les cas proches de la source quand la distance supérieure ou égale à 50m, ne dépasse pas le 40% au pic de concentration ;
- Le modèle tridimensionnel CFD sous-estime la concentration, peut être due à l'utilisation du modèle k-ε standard pour le traitement l'effet de la turbulence.

D'autre part, nous effectuons une comparaison entre le temps du calcul de chaque modèle puisqu'il est un élément important en faveur de la modélisation du champ de concentration. La solution analytique pour un domaine de dimension 150 x 100 x100 m^3, le temps d'exécution est inférieur à 3 minutes. Par contre, la méthode CFD, pour le même domaine à 10 jours de fonctionnement pour une convergence de simulation utilisant le modèle k-ε standard pour le traitement de turbulence et pour un maillage pas assez fin.

Afin de donner des résultats rapides en situation de crise, les modèles analytiques présentent un intérêt important dans la modélisation de dispersion, car le temps de calcul est extrêmement rapide et ainsi que dans la plupart des cas, la solution analytique donne une surestimation des polluants dans l'atmosphère par rapport le cas réel.

Une autre série de simulations a permis de quantifier et d'évaluer la performance entre les valeurs de concentrations des particules, trouvés par le modèle tridimensionnel CFD et les méta-modèles issus des réseaux neurones artificiels dans le cas du transfert des particules dans un milieu confiné ventilé. Compte tenu des résultats très satisfaisants, on peut conclure que :

- Les résultats trouvés par la voie de CFD sont acceptables après certaines améliorations effectuées sur l'effet de la quantité initiale à injecter dans le système de ventilation. Mais, dans des points, l'erreur dépasse les 40%, reste d'améliorer ces modèles pour approcher ces profils vers les données réelles. Ces erreurs peuvent être dues aux effets de traitement de turbulence par le modèle k-ε et la déposition des particules aux parois. Le phénomène de déposition est traité par Nazaroff W. (Lai et Nazaroff, 2000). Ces modèles ont le mérite de pouvoir traité et développés dans le but de l'introduire dans le code ANSYS-Fluent.
- L'application des réseaux des neurones artificiels de type MLP est bénéfique pour la modélisation du transfert de particules, donne des résultats crédibles et fiables. Pour le régime stationnaire, l'erreur maximale ne dépasse pas les 5% et pour le régime transitoire l'erreur maximale atteint les 8.5%. Le temps de l'exécution est rapide, mais le temps de la phase préparatoire est lent.

Aussi d'autres recherches de base doivent être effectuées pour quantifier les effets de vitesse, de diamètre de particules, positions de la section de sortie d'air sur la dispersion des particules utilisant le réseau neural artificiel. Pour l'effet de la vitesse nous avons déduit que l'augmentation de la vitesse donne une accélération inertielle au lieu de l'accélération de la pesanteur, diminution de l'effet de déposition de particules par gravité. Le mauvais choix de la position de section de sortie favorise l'instabilité de mouvement.

En conclusion de ce travail de thèse, plusieurs modèles ont été développés pour répondre à différents cas rencontrés en risque d'une dispersion d'une éventuelle pollution. Les outils employés que ce soit les réseaux de neurones, la méthode CFD et la solution analytique Gaussienne permettent de répondre aux exigences formulées par l'étude du contexte. Le temps de calcul des différents modèles ANN et analytique est plus court que ceux obtenus par simulation CFD et la précision des modèles ANN est agréable si l'on compare par rapport aux résultats trouvés par la méthode CFD. Cependant, la phase de constitution de la base de données est longue, tout comme la phase d'optimisation du modèle neuronal.

Les méthodes développées dans ce travail de thèse peuvent être complétées selon plusieurs aspects.

- **Perspectives d'améliorations des résultats trouvés par la solution Gaussienne :** Généralement, la solution Gaussienne est moins couteuse en temps de calcul, facile pour son utilisation et basée sur de moyennes statistiques (écarts-types: σy et σz) établies sur des bases météorologiques pluriannuelles. En contrepartie, les paramétrages de ces équations sont simples, ce qui conduit à des approximations parfois faciles pour de cas particuliers, tels que l'effet du relief ou des bâtiments, qui peuvent avoir une influence non négligeable sur la dispersion, surtout à petite échelle. Nous souhaiterons de modéliser un couplage entre la solution analytique et le réseau neuronal artificiel pour corriger la sous-estimation des effets de la turbulence (σy et σz) produit par le système mécanique ou par le gradient thermique afin de converger les résultats simulés par cette méthode vers les données réelles (expérimentales).
- **Perspectives d'améliorations des résultats trouvés par le modèle tridimensionnel CFD :** Par les résultats obtenus par ces modèles, nous souhaiterons développer le phénomène de la déposition des particules aux différentes parois. Surtout la déposition des particules aux parois de gaine de ventilation pour quantifier nos rejets vers l'atmosphère.

Références bibliographiques

[1] **Abadie M.**, Contribution à l'étude de la pollution particulaire: Rôle des parois, rôle de la ventilation, Thèse de Doctorat, Université de Rochelle, France, 2000.

[2] **Nerisson P.**, Modélisation du Transfert des Aérosols dans un Local Ventilé, Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, France, 2009

[3] **Vendel F.**, Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes : application à l'étude de sites industriels, Thèse de Doctorat, Université de Lyon, France, 2011.

[4] **Lauret P.**, Modélisation de la Dispersion Atmosphérique sur un Site Industriel par Combinaison d'Automates Cellulaires et de Réseaux de Neurones, Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Saint Etienne, France, 2014

[5] **Guerra D.**, Modélisation du Transfert d'un Aéro-contaminant dans un Local Ventilé en Champ Proche d'une Source d'Emission Accidentelle, Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, France, 2004

[6] Le Système mondial de surveillance continue de l'environnement GEMS/Air (OMS/PNUE, 1993b), Chapitre 55, Partie VII : L'environnement, Encyclopédie de sécurité et de santé au travail.

[7] **Albriet B.**, Modélisation numérique des aérosols à l'échelle locale, Thèse de Doctorat, Ecole national des ponts et chaussées, France, 2007.

[8] **Martin, J.E.,** The correlation of Wind tunnel and field measurements of gas diffusion using Krypton-85 as a tracer, PhD thesis, Department of Health Science, University of Michigan, USA, 1965.

[9] **Chen F., Lai A. C. et al.,** Modeling particle distribution and deposition in indoor environments with a new drift-flux model. Atmos Environ. 40, 357-367(2006). doi: 10.1016/j.atmosenv

[10] **Li W.W et al.**, Gas Dispersion near a cubical model building. Part I Mean concentration measurements, Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 12(1), 15-33(1983). doi: 10.1016/0167-6105(83)90078-8.

[11] **Saathoff P. et al.**, Dilution of exhaust gases from rooftop stacks- Comparison of Wind tunnel data with full-scale measurements, In 9th Joint Conference on Application of Air Pollution Meteorology, American Meteorological Society and the Air and Waste Management Association, Atlanta 341-345.

[12] **Meroney R. N. et al.**, Wind-tunnel and numerical modeling of flow and dispersion about several building shapes, Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 81, 333-345(1999). doi: 10.1016/S0167-105(99)00028-8.

[13] **Higson H. L. et al.**, Concentration measurements around an isolated building: a comparison between wind tunnel and field data, Atmospheric Environment, 28, 827-1836(1994). Doi:10.1002/env.3170060604.

[14] **Meroney R.N.**, Wind tunnel and numerical simulation of pollution dispersion: a hybrid approach, Working paper, Croucher Advanced Study Institute on Wind Tunnel Modeling, Hong Kong University of Science and Technology, 2004.

[15] **Schulman et al.**, The effect of stack height, exhaust speed, and wind direction on concentrations from a rooftop stack, ASHRAE Transactions, 97(2), 573-582 (1991).

[16] **Krysta M.**, Modélisation numérique et assimilation de données de la dispersion de radionucléides en champ proche et à l'échelle continentale, Thèse de Doctorat, Université Paris XII - Val de Marne, 2006.

[17] **Cheong K.W.D. et al.**, Measurements and computations of contaminant's distribution in an office environment, Building and Environment, 38(1), 135 – 145(2003). doi: 10.1016/S0360-1323(02)00031-8

[18] **Bouilly J. et al.**, Effect of ventilation strategies on particle decay rates indoors: an experimental and modeling study, Atmospheric Environment ,39, 4885-4892 (2005). doi: 10.1016/j.atmosenv.2005.04.033

[19] **Nomura Y. et al.**, B., Deposition of particles in a chamber as a function of ventilation rate, Aerosol Science and Technology, 27(1), 62-72(1997). doi: 10.1080/02786829708965458

[20] **Chang T.J et al.,** Numerical Study of the Effect of Ventilation Pattern on Coarse, Fine, and Very Fine Particulate Matter Removal in Partitioned Indoor Environment, Journal of the Air & Waste Management Association, 57(2),179-189(2006). doi: 10.1080/10473289.2007.10465311

[21] **Lai A., et al.**, Experimental and numerical study on particle distribution in a two-zone chamber. Atmos Environ. 42(8), 1717-1726(2008). doi: 10.1016/j.atmosenv

[22] **Hanhui J., et al.**, Experimental analysis of particle concentration heterogeneity in a ventilated scale chamber. Atmos Environ. 43(28), 4311-4318(2009). doi: 10.1016/j.atmosenv

[23] **Glockner S.**, Contribution à la modélisation de la pollution atmosphérique dans les villes, Thèse de Doctorat, Université bordeaux I, France, 2000

[24] **Vinkovic I.**, Dispersion et mélange turbulents de particules solides et gouttelettes par une simulation stochastique lagrangienne, Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Lyon, France, 2005

[25] **Davidson M. et al.**, A semi-analytical model for the tritium dispersion simulation in the PBL from the Angra I nuclear power plant, Ecological Modeling, 189,413-424(2005). doi:10.1016/j.ecolmodel 2005.04.012.

[26] **Sharan M. et al.**, A two-dimensional analytical model for the dispersion of air-pollutants in the atmosphere with a capping inversion, Atmospheric Environment, 40, 3479–3489 (2006). doi: 10.1016/j.atmosenv.2006.01.051

[27] **Shi R.F., et al.**, Large eddy simulation of wind field and plume dispersion in building array, Atmospheric Environment,42,1083-1097. Doi: Doi:10.1016/j.atmosenv.2007.10.071

[28] **Gousseau P., et al.**, CFD simulation of near-field pollutant dispersion on a high resolution grid: a case study by LES and RANS for a building group in downtown Montreal, Atmospheric Environment, 45, NO.2, 428-438. doi: 10.1016/j.atmosenv.2010.09.065

[29] **Zhao B. et al.**, Comparison of indoor aerosol particle concentration and deposition in different ventilated rooms by numerical method. Build Environ. 39(1), 1-8(2004). doi: 10.1016/j.buildenv.2003.08.002

[30] **Zhang Z. et al.,** Experimental measurements and numerical simulation of fine particle transport and distribution in ventilated rooms. Atmos Environ. **40**, 3396-3408(2006). doi: 10.1016/j.atmosenv.2006.01.014

[31] **Murakami S., et al**., Diffusion characteristics of airborne particles with gravitational settling in a convection dominant indoor flow field. ASHRAE Transactions. **98**, 82-97(1992).

[32] **Posner J.D et al**., Measurement and prediction of indoor air flow in a model room, Energy and Building,35,515-526(2003).

[33] **Srebric J., et al.**, CFD boundary conditions for contaminant dispersion, heat transfer and airflow simulations around human occupants in indoor environments, Building and Environment, 43, 294–303 (2008). Doi: 10.1016/j.buildenv.2006.03.023.

[34] **Zhang Z. et al.**, Experimental measurements and numerical simulations of particle transport and distribution in ventilated rooms, Atmospheric Environment, 40 3396–3408 (2006). Doi: 10.1016/j.atmosenv.2006.01.014.

[35] **Tian Z.F., et al.,** On the numerical study of contaminant particle concentration in indoor airflow, Building and Environment, 41 1504–1514 (2006). doi: 10.1016/j.buildenv.2005.06.006.

[36] **Tian Z.F., et al.**, Numerical studies of indoor airflow and particle dispersion by large Eddy simulation, Building and Environment, 42, 3483–3492 (2007). doi: 10.1016/j.buildenv.2006.10.047.

[37] **Inthavong K. et al.**, Effect of ventilation design on removal of particles in woodturning workstations, Building and Environment, 44, 125–136 (2009). doi: 10.1016/j.buildenv.2008.02.002.

[38] **Tian L. et al.**, Comparison of gaseous contaminant diffusion under stratum ventilation and under displacement ventilation, Building and Environment, 45 2035–2046 (2010). doi: 10.1016/j.buildenv.2010.01.002.

[39] **Webber D.M. et al.**, Ventilation theory and dispersion modeling applied to hazardous area classification, Loss Prevention in the Process Industries ,24 612-621(2011). doi: 10.1016/j.jlp.2011.04.002.

[40] **Wang M., et al.**, Determination of Particle Deposition in Enclosed Spaces by Detached Eddy Simulation with the Lagrangian Method, Atmospheric Environment, 45, 5376-5384 (2011).

[41] **Wang M., et al.**, Advanced Turbulence Models for Predicting Particle Transport in Enclosed Environments, Building and Environment, 47, 40-49 (2012). Doi:10.1016/j.buildenv.2011.05.018.

[42] **Gardner M.W. et al.** Artificial neural networks (the multilayer perceptron) - a review of applications in the atmospheric sciences, Atmospheric Environment, 32, 2627–2636(1998). doi: 10.1016/S1352-2310(97)00447-0

[43] **Junsub Yi et al.**, A neural network model forecasting for prediction of daily maximum ozone concentration in an industrialized urban area, Environmental Pollution, 92(3), 349–357 (1996). doi : 10.1016/0269-7491(95)00078-X

[44] **Timothy J. el al.,** , Modeling aerosol puff concentration distributions from point sources using artificial neural networks, in: Proceedings of the 2000 Battlespace Atmospheric and Cloud Impacts on Military Operations Conference. Cooperative Institute for Research in the Atmosphere and Army Research Laboratory, Fort Collins, Colorado, 24–27 April 2000.

[45] **Wahid H. al.**, Neural network-based meta-modeling approach for estimating spatial distribution of air pollutant levels, Applied Soft Computing. 13(10), 4087–4096(2013). doi: 10.1016/j.asoc.2013.05.007

[46] **Boznar M., et al.**, A neural network-based method for short-term predictions of ambient SO2 concentrations in highly polluted industrial areas of complex terrain, Atmospheric Environment Part B Urban Atmosphere, 27(2):221-230 (1993). doi : 10.1016/0957-1272(93)90007-S

[47] **Pelliccioni A. et al.**, Air dispersion model and neural network: A new perspective for integrated models in the simulation of complex situations Environmental Modeling and Software, 21(4), 539–546(2006). doi : 10.1016/j.envsoft.2004.07.015

[48] **Cao X**., Modeling the Concentration Distribution of Non-Buoyant Aerosols Released from Transient Point Sources into the Atmosphere. Queen's University, Ontario, Canada, 2007.

[49] **Shamia H. et al.**, Development of meta-models for predicting aerosol dispersion in ventilated spaces. Atmos Environ. 45(10), 1876-1887(2011). doi: 10.1016/j.atmosenv.2010.12.046

[50] **Longmire P.,** Computational fluid dynamics (cfd) simulations of aerosol in a u-shaped steam generator tube, Thèse de Doctorat ,Texas A&M University, 2007.

[51] **Debry E.**, Modélisation et simulation numérique de la dynamique des aérosols atmosphériques, Thèse de Doctorat, Ecole nationale des ponts et chaussées, France, 2004.

[52] **Couillet J.C**, Méthodes pour l'évaluation et la prévention des risques accidentels, Dispersion atmosphérique, Mécanismes et outils de calcul, Direction des Risques Accidentels, INERIS, France

[53] **Briant R.**, Modélisation multi échelles de l'impact du trafic routier sur la qualité de l'air , Thèse de Doctorat, Université Paris-Est, France, 2012.

[54] **Balde H**., Modélisation de la Pollution Atmosphérique de Scalaires Passifs par Faibles, Thèse de Doctorat, Université D'every Val D'essonne, France, 2011.

[55] **Doukoure M.**, Variabilité des flux turbulents de surface au sein du bassin versant d'Ara au Bénin, Thèse de Doctorat, Université de Grenoble, France, 2006.

[56] **Devesa A.**, Modélisation de Paroi pour la Simulation d'Ecoulements in-stationnaires Non-isothermes, Thèse de Doctorat, L'Université Montpellier II, France, 2006.

[57] **Stathopoulos T. et al.**, Évaluation analytique de la dispersion des émissions de cheminées de toit sur les bâtiments, Institut de Recherche Robert-Sauvé en santé et en Sécurité du Travail (IRSST), ISBN : 978-2-89631-427-0, Bibliothèque nationale du Québec.

[58] **Xayasenh A.**, Étude numérique du dépôt turbulent de particules non-browniennes en suspension dans un liquide : application aux inclusions dans l'acier liquide, Thèse de Doctorat, Ecole centrale es arts et manufactures " Ecole centrale paris", France, 2013.

[59] **Nazaroff W.**, Mathematical Modeling and Control of Pollutant Dynamics in Indoor Air, Thèse de Doctorat, Californa Institute of Technology, Pasadena, California, USA, 1989

[60] **Gao N. P. et al.**, Modeling particle dispersion and deposition in indoor environments. Atmos Environ. 41(18), 3862-3876(2007). doi: 10.1016/j.atmosenv.2007.01.016

[61] **Bin Z., et al**., Particle dispersion and deposition in ventilated rooms-testing and evaluation of different Eulerian and Lagrangian models. Build Environ. **43**, 388-397(2008). doi: 10.1016/j.buildenv

[62] **Xiangdong L. et al.**, An Eulerian-Eulerian model for particulate matter transport in indoor spaces. Build Environ. 86, 191-202(2015). doi: 10.1016/j.buildenv.2015.01.010

[63] **Lamalle D.,** Simulations aux grandes échelles de panaches libre et impactant, Thèse de Doctorat, Université de Lyon, France, 2014.

[64] **Holmberg S. el al.**, Air flow and particle control with different ventilation systems in a classroom. Indoor Air. 13(2), 200-204(2003). doi: 10.1034/j.1600-0668.2003.00186.x

[65] **Rondeau A**., Etude de la mise en suspension aéraulique appliquée à la problématique des poussières dans le futur tokamak ITER, Thèse de Doctorat, Uniersité Paris-sud, France, 2015.

[66] **Mohamedi B.,** Simulation de l'établissement de l'ébullition nucléée par l'approche CFD, Thèse de Doctorat, Université Yahia FARES, Médéa, Algerie, 2015.

[67] **Fluent 6.3**, User's Guide, Fluent Inc. Centerra Resource Park, 10 Cavendish Court, Lebanon, NH 03766, 2006.

[68] **Goncalves E.**, Résolution Numérique des Equations d'Euler Monodimensionnelles, Institut National Polytechnique Grenoble**,** France, 2004

[69] **Fluent 6.3 Tutorial guide**, Fluent inc., Centerra Resource Park, 10 Cavendish Court, Lebanon, NH 03766, version September 2006

[70] **Scheme-Programmierung** in FLUENT 5 & 6**,** Mirko Javurek Institut für Strömungsprozesse und Wärmeübertragung, Johannes Kepler Universität Linz, Österreich

[71] **ANSYS Inc.,** Fluent User's Guide Version 14.5.0, Fluent, Inc, 2012.

[72] **Hanhui J. et al.**, Numerical prediction of indoor airborne particle concentration in a test chamber with drift-flux model, Journal of Thermal Science, 20 (2), 161-166 (2011). doi: 10.1007/s11630-011-0452-y

[73] **Chang T. J. et al.**, Numerical investigation of airflow pattern and particulate matter transport in naturally ventilated multi-room buildings. Indoor air. **16,** 136-152(2006). doi: 10.1111/j.1600-0668.2005.00410.x

[74] **Gabruck R.S. et al.**, Evaluation of the reactive and optics model of emissions (ROME), Atmos. Environ., 33, 383-399 (1999).