

# NUMERICAL SIMULATION OF ATMOSPHERIC DISPERSION: APPLICATION FOR THE INTERPRETATION AND ASSIMILATION OF POLLUTION OPTICAL MEASUREMENTS

Nowadays the control and surveillance of gas and particles emitted into the atmosphere is done more through optical systems, e.g. multi-spectral cameras, LIDARS, satellites images, etc. Optical instruments allow the measurement of pollutant concentration in the plume. It is believed that, in the future, optical instruments at high frequency resolution should work with or replace the current fixed and punctual monitoring networks. So they could contribute to a major technological leap in detecting substances in the atmosphere.

In the industrial sector, the use of optical measurements could contribute to:

- ⑩ A better knowledge of industrial sites.
- ⑩ Management of the future regulatory controls, made through remote sensing addressed to measure COV and methane.
- ⑩ Improvement of physical representability of dispersion models employed for prevention of major risks.
- ⑩ An approach validated for critical environmental events.
- ⑩ Recognition of emission sources.

Current work is focused on the enhancement and interpretation of the results of optical measurements thanks to the numerical modelling of atmospheric dispersion. In order to make the most of the new experimental data, characterised by a high sampling frequency and a strong level of fluctuations, a robust direct simulation approach is required. It has to be able to capture not only the mean state of turbulent flow and of plume dispersion but also its higher moments, which better characterise the non-linear and instantaneous behaviour.

The strategy of the present work is based on a gradual increment of complexity. Before dealing with the atmospheric dispersion and modelling methods to simulate higher moments, we treat the study of the Atmospheric Boundary Layer (ABL) and its simplest modelling strategy, such as the RANS model. Working with them, we have been faced with one big source of uncertainties: the boundary conditions, e.g. inflow profiles, ground roughness and others. The proper setting of boundary conditions enable to reduce numerical errors and correctly interpreted the final results. Although decades of studies, this issue is still open due to the extremely complexity of the ABL. Even the simple case of a Surface Boundary Layer (SBL) in neutral conditions can present difficulties due to the appropriate application of boundary conditions and the equilibrium of the coefficients of the turbulence models. Some cases from the literature are reproduced to understand the problem and apply the solutions suggested. This allowed to become familiar with cases encountered later on.

Subsequently we pass to investigate the LES approach to model the SBL in neutral conditions together with the dispersion of a passive scalar and the related boundary conditions. The previous steps contribute to the development of a LES methodology employed to simulate numerically the atmospheric dispersion of a passive scalar. The development of the methodology has identified some physical and numerical criteria that could condition the validity and the accuracy of the approach adopted. In fact, the application of the criteria to simulate a wind tunnel experiment, conducted in the *Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique of the École Centrale de Lyon*, was useful to validate the LES methodology. The validation turned out to be more complex

than expected because compromises were necessary to violate the fewest criteria. In this context, our methodology was validated with the appropriate interpretation of the results.

Finally, all the acquired knowledge is used to simulate a real scenario, i.e. a test case of the *TotalEnergies Anomaly Detection Initiatives (TADI)* project, an experiment organised by TotalEnergies with the participation of different optical instruments manufacturers and developers. The numerical results are conceived in such way as to be able to interpret and assimilate the optical measurements. In particular using multi-spectral camera SIMAGAZ.

Key words:

- ⑩ Atmospheric boundary layer
- ⑩ Turbulent dispersion
- ⑩ Large-Eddy Simulation
- ⑩ Field optical measurements
- ⑩ Model validation

# **SIMULATION NUMÉRIQUE DE LA DISPERSION ATMOSPHÉRIQUE : APPLICATION POUR L'INTERPRÉTATION ET L'ASSIMILATION DES MESURES OPTIQUES DE LA POLLUTION**

Actuellement le contrôle et la surveillance des émissions de gaz et particules émises dans l'atmosphère s'effectuent de plus en plus par des systèmes optiques, comme les images des caméras multispectrales, LIDARS, satellite, etc. Ces instruments optiques permettent la mesure des polluants dans le panache. À l'avenir, les instruments optiques à haute résolution de fréquence devraient fonctionner avec ou remplacer les réseaux de surveillance fixes et ponctuels actuels. Ils pourraient donc contribuer à un saut technologique majeur dans la détection de substances dans l'atmosphère.

Dans le milieu industriel, l'exploitation de mesures optiques pourrait contribuer à :

- ⑩ Une meilleure connaissance des émissions des sites industriels.
- ⑩ La maîtrise des futurs contrôles réglementaires par « remote sensing » comme la mesure des COV et de méthane.
- ⑩ Une amélioration de la représentativité des modèles de dispersion utilisés en prévention des risques majeurs.
- ⑩ Une approche validée en cas d'évènement environnemental majeur.
- ⑩ Identification et caractérisation des sources d'émission.
- ⑩ Éviter les fuites et les catastrophes environnementales.

Le travail actuel porte sur la valorisation et l'interprétation des résultats de mesures optiques grâce à la modélisation numérique de la dispersion atmosphérique. Afin de tirer le meilleur parti des nouvelles données expérimentales, caractérisées par une fréquence d'échantillonnage élevée et un niveau élevé de fluctuations, une approche de simulation directe robuste est requise. L'approche doit pouvoir capter non seulement l'état moyen de l'écoulement turbulent et de dispersion du panache mais aussi ses moments supérieurs, qui caractérisent mieux le comportement non linéaire et instantané.

La stratégie du travail est basée sur une augmentation progressive de la complexité. Avant d'aborder la dispersion atmosphérique et les méthodes de modélisation pour simuler des moments plus élevés, nous traitons l'étude de la Couche Limite Atmosphérique (CLA) et sa stratégie de modélisation la plus simple, comme le modèle RANS. Même le cas simple d'une Couche Limite de Surface (CLS) dans des conditions neutres peut présenter des difficultés en raison de l'application appropriée des conditions aux limites et de l'équilibre des coefficients des modèles de turbulence. Quelques cas de la littérature sont reproduits pour comprendre le problème et appliquer les solutions proposées. Cela a permis de familiariser avec des cas rencontrés par la suite.

Par la suite, nous passons à l'étude de l'approche LES pour modéliser la CLS dans des conditions neutres avec la dispersion d'un scalaire passif et les conditions aux limites associées. Les étapes précédentes contribuent au développement d'une méthodologie LES utilisée pour simuler numériquement la dispersion atmosphérique d'un scalaire passif. Le développement de la méthodologie a permis d'identifier certains critères physiques et numériques qui pourraient conditionner la validité et la précision de l'approche adoptée. En fait, l'application des critères pour simuler une expérience en soufflerie, menée dans le *Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique de l'École Centrale de Lyon*, a été utile pour valider la méthodologie LES. La validation s'est avérée plus complexe que prévu car des compromis ont été nécessaires pour violer le moins de critères. Dans ce contexte, notre méthodologie a été validée avec l'interprétation appropriée des résultats.

Enfin, toutes les connaissances acquises sont utilisées pour simuler un scénario réel, c'est-à-dire un cas test du projet *TotalEnergies Anomaly Detection Initiatives (TADI)*, une expérience organisée par TotalEnergies avec la participation de différents fabricants et développeurs d'instruments optiques. Les résultats numériques sont conçus de manière à pouvoir interpréter et assimiler les mesures optiques. Notamment à l'aide de la caméra multispectrale SIMAGAZ.

Mots clés :

- ⑩ Couche limite atmosphérique
- ⑩ Dispersion turbulente
- ⑩ Simulation des grandes structures de la turbulence
- ⑩ Mesures optiques de terrain
- ⑩ Validation du modèle