Modélisation d'une population d'aérosols multi-sources et recherche des contributions de chaque source à l'échelle urbaine avec le modèle de dispersion CHIMERE

Hilel DERGAOUI – Hilel.DERGAOUI@ineris.fr

Directeur de thèse : Christian SEIGNEUR - CEREA - Champs-sur-Marne - seigneur@cerea.enpc.fr

Thèse suivie à l'INERIS par Edouard DEBRY - Direction des Risques Chroniques – Pôle Modélisation environnementale et décision – Modélisation atmosphérique et cartographie environnementale

Contexte

Cette thèse a été lancée à l'initiative de l'INERIS dans le but de répondre à plusieurs questions sur l'impact environnemental et sanitaire de la pollution particulaire. L'intérêt croissant pour l'exposition de la population aux particules atmosphériques à l'échelle urbaine nécessite la mise en place de politiques publiques de réduction des émissions de polluants (particules ou précurseurs gazeux) qui contribuent à cette pollution. Par conséquent, il est essentiel d'identifier les sources qui contribuent aux concentrations ambiantes de particules et de quantifier leurs contributions. En raison de la complexité des relations entre émissions et concentrations ambiantes de particules, il est nécessaire d'avoir recours à des modèles pour représenter ces relations entre émissions et concentrations.

Les particules sont un sujet de modélisation difficile du fait de la multiplicité de leurs tailles, de leurs compositions chimiques et de leurs sources d'émissions (y compris précurseurs gazeux). La plupart des modèles de qualité de l'air utilisent une représentation simplifiée d'une population de particules. Celle-ci est généralement divisée en plusieurs classes de diamètres allant de quelques nanomètres à une dizaine de micromètres. Dans chaque classe de diamètres, on fait l'hypothèse que les particules ont toutes la même composition chimique, ce que l'on appelle le mélange interne.
Or, dans la réalité et plus précisément près des sources d'émissions, la population de particules peut avoir plusieurs compositions chimiques pour une même classe de diamètres, ce que l'on désigne par mélange externe, du fait que la composition chimique des particules varie selon les types de sources (trafic routier, chauffage urbain, industries, végétation, ...). L'hypothèse du mélange interne revient ainsi à négliger le temps de mélange entre des particules de différentes sources, ce qui peut mener à des résultats erronés pour le calcul de l'exposition et des propriétés physico-chimiques des particules, dont certaines, comme l'effet radiatif, sont avant tout sensibles à la composition chimique.

Objectif

L'objectif de cette thèse est le développement d'un modèle numérique résolu en taille de la dynamique des particules en levant l'hypothèse de mélange interne, afin de suivre plusieurs compositions chimiques par classe de tailles. Une nouvelle approche est présentée dans laquelle la composition chimique des particules est elle-même discrétisée suivant la fraction d'un ou plusieurs des constituants chimiques (suie, sulfate, ...), cette représentation est nommée «mélange externe».
Cette approche a pour but de mieux représenter une population de particules à l'échelle locale et de particulariser des compositions chimiques typiques de certaines sources

Le modèle développé a vocation à être intégré au modèle de dispersion Chimere pour des études de scénario et d'impact à l'échelle locale.

Travaux effectués

Rappel

En première année, après une étude bibliographique sur les différents modèles d'aérosols en mélange interne et externe, une nouvelle formulation du mélange externe a été proposée par rapport à l'existant et validée par rapport à un cas d'étude simplifiée, tiré de Seigneur *et al* (1986).

En deuxième année, le modèle de coagulation développé a été étendu au cas général d'une population d'aérosols multi-composée, du type de Chimere. Etant donné la complexité croissante d'un tel modèle, une attention toute particulière a été portée à l'optimisation numérique et au choix des algorithmes de calcul.

Avancement

Des expériences de coagulation en mélange interne et externe ont été menées dans la chambre CESAM du LISA, des comparaisons entre les mesures et les simulations du modèle on été effectuées.

Conclusions / Perspectives

Un modèle de coagulation en mélange externe a été développé et validé. Ce modèle nous permet ainsi de suivre l'évolution d'une population de particules résolue en taille et en composition sous l'effet de la coagulation.
Des premières comparaisons à des données de mesures ont pu être réalisées.
Ce modèle doit être étendu aux phénomènes de condensation/évaporation avant d'être incorporé dans des modèles de qualité de l'air pour l'étude des particules en mélange externe et la quantification des contributions des différentes sources d'émissions.

Articles

H. Dergaoui, K. Sartelet, E. Debry, C. Seigneur. Modeling coagulation of externally mixed particles:sectional approach for both size and chemical composition (en cours de soumission)

Communications

- DIALLO A.O.**, DERGAOUI H.,** DEBRY E., BESSAGNET B., ROUIL L. Modélisation de la dynamique du mélange de particules de suie avec des gouttelettes d'acide sulfurique. Actes du 25ème Congrès Français sur les Aérosols (CFA 2010), 13-14 janvier 2010, Paris**.**

- **DERGAOUI H**., DEBRY E., SARTELET K., SEIGNEUR C., BESSAGNET B., ROUIL L. A new method to simulate coagulation and of an externally mixed particle population. EGU general assembly, 3-8 April 2011, Vienna, Austria. [Communication orale] Vol. 13, EGU2011-11583

  DERGAOUI H., Karine Sartelet, Edouard Debry, Christian Seigneur. A new model to simulate coagulation of externally mixed particles, International Aerosol Modeling Algorithms Conference, 30 November- 2 December 2011, Davis, California, USA.

Mots clés : particules, particules primaires/secondaires, aérosols, modélisation, échelle locale, coagulation, condensation/évaporation, mélange interne, mélange externe, contribution de sources.