Modélisation et simulation numérique de la dynamique des particules ultrafines appliquée aux atmosphères libres et confinées

Marion DEVILLIERS – Marion.DEVILLIERS@ineris.fr – devillim@cerea.enpc.fr

Directeur de thèse : Christian SEIGNEUR – CEREA – Laboratoire commun Ecole des ponts ParisTech / EDF R&D – CHAMPS-SUR-MARNE – seigneur.christian@cerea.enpc.fr

Thèse suivie à l'INERIS par Edouard DEBRY - DRC/ DECI/ MOCA

Contexte / questionnement scientifique

L'utilisation accrue des nanoparticules (particules de diamètre inférieur à 100 nm) dans l'industrie et leur aptitude à pénétrer dans l'organisme, notamment par les voies respiratoires, posent de nouvelles questions environnementales et de santé publique. Il s'agit d'une problématique autant liée à l'air intérieur qu'extérieur, du fait de la présence de sources dans les deux environnements.

Les nanoparticules ou particules ultra fines contribuent très peu aux indicateurs $PM_{2.5}$ et PM_{10} de la masse des particules dans l'atmosphère, ce qui explique qu'elles étaient jusqu'à récemment peu étudiées. En revanche, elles constituent la quasi-totalité du nombre de particules atmosphériques. Les prochaines réglementations en matière de nanoparticules devraient d'ailleurs s'attacher au nombre plutôt qu'à la masse.

Objectifs de la thèse

Du fait de sa mission, l'INERIS a engagé en 2009 un programme de recherche en collaboration avec le laboratoire CEREA (Laboratoire Commun École des Ponts ParisTech - EDF R&D) pour développer un modèle numérique de simulation de la dynamique des particules dans l'atmosphère et les ambiances confinées. Ce modèle doit être aussi satisfaisant pour les nanoparticules que pour les particules plus grossières, il doit aussi garder un temps de calcul compétitif pour être inséré dans des modèles de CFD ou de qualité de l'air.

Méthode

La dynamique des nanoparticules dans l'atmosphère dépend essentiellement des trois processus : la condensation/évaporation, la coagulation et la nucléation. Ces processus, bien connus pour des particules plus grossières, doivent être réétudiés pour tenir compte des phénomènes physiques spécifiques aux nanoparticules. Nous avons choisi d'étudier chaque processus séparément, en commençant par le plus complexe numériquement, la condensation/évaporation, pour les intégrer au fur et à mesure dans un modèle complet.

Avancement des travaux / Résultats / Discussions

Pour rappel, l'année précédente a été consacrée à l'étude de la condensation/évaporation, processus pour lequel a été développée une nouvelle approche numérique tenant compte de l'effet Kelvin. Cette approche s'appuie sur une discrétisation en plusieurs sections du spectre de taille des particules, chaque section étant caractérisée par un diamètre représentatif, et sur un algorithme de redistribution des particules sur chaque section, après condensation/évaporation. Sa nouveauté est de redistribuer le nombre pour les nanoparticules et la masse pour les particules fines et grossières, c'est-à-dire la quantité la plus pertinente pour chaque taille.

Ce premier travail a été soumis cette année au « Journal of Aerosol Science », puis le travail a porté sur la coagulation et la nucléation. La distribution de nanoparticules est très sensible à ces deux processus. La coagulation, due à l'agitation thermique, peut diminuer de moitié la concentration de nanoparticules en quelques heures. La nucléation peut la faire augmenter de plusieurs ordres de grandeur dans le même laps de temps, en air extérieur.

La coagulation a été implémentée en suivant l'approche sectionnelle. Nous nous sommes posé la question de l'intégration du noyau de coagulation sur chaque section ou de prendre directement sa valeur au diamètre représentatif de la section. Nous nous sommes également posé la question de la prise en compte des forces de Van der Waals. Ce sont des forces d'attraction entre particules qui, si elles sont négligeables pour les grosses particules, peuvent renforcer significativement la coagulation des nanoparticules.

Les derniers travaux en cours portent sur l'intégration de la nucléation au modèle déjà constitué. Ce processus se traduit par un terme source dans la première section, dont la limité inférieure est 1nm. Différentes stratégies de résolution numérique par couplage ou découplage des processus sont à l'étude.

Conclusions / Perspectives

Un nouveau modèle de dynamique des nanoparticules a été développé. Il se montre autant précis pour le nombre de particules que pour leur masse, et inclut les processus physiques spécifiques aux nanoparticules, effet Kelvin pour la condensation/évaporation et forces de Van der Waals pour la coagulation.

De part sa conception, ce modèle est apte à être intégré dans des modèles de chimie-transport tels que **CHIMERE** (IPSL/LMD), et dans des modèles de CFD comme **Mercure/Code_Saturne** (EDF R&D/CEREA). Pour des applications en air intérieur, il sera nécessaire d'inclure les phénomènes de dépôt aux parois.

Publications et Communications

Article dans une revue avec comité de lecture

- M. DEVILLIERS, E. DEBRY, K. SARTELET, C. SEIGNEUR : "*A New Algorithm to Solve Condensation/Evaporation for Ultra Fine, Fine and Coarse Particles*", Journal of Aerosol Science, en relecture

Conférences et colloques en France

- M. DEVILLIERS, C. SEIGNEUR, E. DEBRY, B. BESSAGNET : "*Simulation numérique de la condensation/évaporation et de la coagulation des nanoparticules*", ASFERA, CFA (Congrès Français sur les Aérosols) janvier 2011
- M. DEVILLIERS, C. SEIGNEUR, E. DEBRY, B. BESSAGNET : "*Modélisation et simulation numérique de la dynamique des nanoparticules appliquées aux atmosphères libres et confinées*", Les Journées Techniques RSEIN/OQAI, « Les particules de l'air intérieur », session : « Nouveaux outils, nouveaux polluants », novembre 2010

Conférences internationales

- M. DEVILLIERS, C. SEIGNEUR, E. DEBRY, K. SARTELET : "*A New Algorithm to Solve Condensation/Evaporation Growth and Coagulation of Nanoparticles*", EAC (European Aerosol Conference), Manchester, septembre 2011
- M. DEVILLIERS, C. SEIGNEUR, E. DEBRY, K. SARTELET : "*A New Algorithm to Solve Condensation/Evaporation Growth and Coagulation of Nanoparticles*", EGU (European Geosciences Union), General Assembly 2011, Vienne, avril 2011

Mots clés : Nanoparticules, Aérosols, Modélisation, Condensation, Evaporation, Coagulation, Nucleation, Numérique, Lagrangien, Kelvin, Van der Waals, Couplage, Découplage, Splitting