

Sujet de thèse

Estimation des émissions des précurseurs des particules par Modélisation Inverse

Contexte

Ce thèse a pour but de mieux estimer les émissions des précurseurs d'aérosols organiques. En qualité de l'air, les particules sont formées de différents composés dont certains sont directement émis dans l'atmosphère (comme le carbone suie, une fraction du carbone organique, les poussières minérales, les sels marins, ...) tandis que d'autres sont formés par réactions chimiques dans l'atmosphère.

Les composés organiques représentent une partie importante des concentrations en $PM_{2.5}$. Une partie est directement émise lors de la combustion, mais une grande partie est secondaire, c'est-à-dire qu'elle est formée après l'émission de précurseurs gazeux dans l'atmosphère. Ces précurseurs sont des composés organiques volatils qui sont ensuite oxydés pour former des composés semi-volatils qui peuvent alors se partitionner entre les phases gazeuse et particulaire.

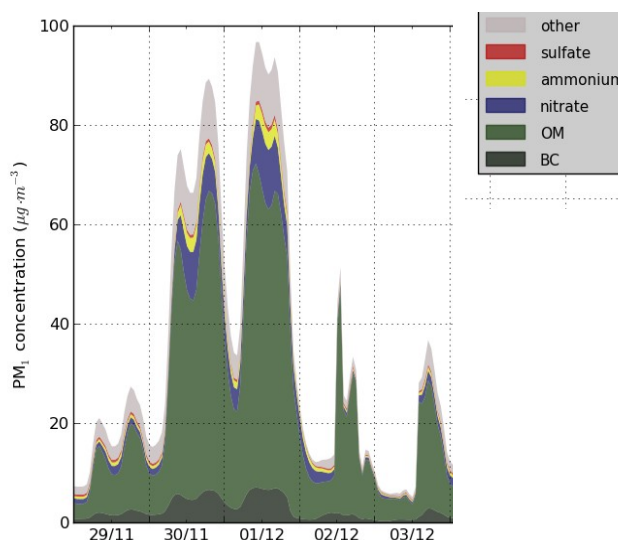


Figure 1: Concentrations des composés des particules simulées avec POLYPHEMUS lors du pic de pollution de début décembre 2016

Projet

Cependant, en intégrant cette chimie dans les modèles de qualité de l'air, il est apparu qu'il n'est pas possible de correctement représenter les concentrations d'organiques (OM) observées in situ en hiver. Des mesures en chambre ont montré que certains composés organiques directement émis ne sont pas complètement pris en compte dans les inventaires d'émissions. Ces composés sont des composés organiques semi volatils (COSV) qui existent en phases gazeuse et particulaire. Ces composés sont émis surtout par le trafic routier et le secteur résidentiel (combustion). Seules leurs émissions en phase particulaire sont prises en compte dans les inventaires d'émissions. Ces COSV contribuent de manière importante à la formation des aérosols organiques secondaires, surtout lors des périodes hivernales, aussi bien sur la France que sur l'Île-de-France (Couvidat et al. 2012, Zhu et al. 2016). La figure 1 montre les concentrations de particules à Paris calculées lors du pic de pollution de début décembre 2016 avec le modèle POLYPHEMUS en approximant les émissions de COSV.

La modélisation inverse a pour but de déterminer les valeurs inconnues de paramètres du modèle en se basant sur la connaissance du modèle, des observations directes ou indirectes, et nos connaissances a priori sur ces paramètres. Longtemps sous- ou mal exploitée en chimie atmosphérique et en particulier en inversion des émissions de polluants, la modélisation inverse dans ce domaine a récemment fortement progressé grâce à l'utilisation de techniques matures. Il est par exemple aujourd'hui possible d'estimer objectivement la fiabilité du résultat de ces inversions.

Avec la mise en place récente de réseaux de mesures performants et de techniques de modélisation inverse éprouvées, nous proposons d'améliorer les inventaires d'émissions, aussi bien de carbone suie que de COSV précurseurs des aérosols organiques, afin d'améliorer les simulations de qualité de l'air et ainsi notamment améliorer la capacité à prévoir des épisodes de pollution particulaire.

Bibliographie:

- Couvidat F., Debry E., Sartelet K.N., and Seigneur C. (2012), A hydrophilic/hydrophobic organic (H2O) aerosol model: Development, evaluation and sensitivity analysis. J. Geophys. Res., 117, D10304, doi:10.1029/2011JD017214.
- Zhu S., Sartelet K., Healy R., Wenger J. (2016), Simulation of particle diversity and mixing state over Greater Paris: A model-measurement inter-comparison Faraday Discussions, 189, 547 - 566, DOI: 10.1039/C5FD00175G.

Localisation de la thèse:

Cette thèse sera conduite au CEREAS sur le site de l'École des Ponts (Champs-sur-Marne).

Collaborations:

Cette thèse s'effectuera en partenariat avec les associations de surveillance de la qualité de l'air Airparif, AtmoPicardie, ainsi qu'avec le laboratoire de recherche LSCE (Laboratoire des sciences du climat et l'environnement).

Mots clés:

Qualité de l'air, émissions, modélisation inverse.

Durée:

3 ans, début de la thèse: automne 2017

Compétences recherchées: physique/chimie de l'atmosphère, modélisation numérique, informatique, mathématiques appliquées (assimilation de données).

Contacts:

Karine Sartelet (karine.sartelet@enpc.fr), Marc Bocquet (marc.bocquet@enpc.fr)