

Offre de Post-doctorat :

Amélioration de la chimie organique des aérosols pour la prévision de chimie-transport sur l'Europe.

Contexte scientifique :

Les particules présentes en suspension dans l'atmosphère peuvent avoir un effet néfaste sur la santé. Elles sont réglementées en France et dans l'Union Européenne. Par ailleurs, ces particules ont un effet direct sur le climat par diffusion du rayonnement solaire et un effet indirect par le rôle que ces particules jouent dans la formation des nuages. Les particules sont émises par différentes sources : industrielles, trafic automobile, océan, désert etc. Les modèles de qualité de l'air permettent de simuler les concentrations de polluants à partir d'un inventaire d'émissions, de données météorologiques et de conditions aux limites du domaine étudié. La prévision des aérosols nécessite d'avoir un bilan correctement complet et contraint à la fois en terme d'émissions puis de chimie sur ces flux émis. De nombreuses incertitudes existent sur la représentation des espèces organiques dans les modèles et sur leurs sources primaires.

Les concentrations en aérosols organiques sont importantes en hiver à cause des émissions de combustion, et de la présence d'aérosols organiques semi-volatils, tandis qu'en été les concentrations en aérosols organiques sont principalement dues aux composés biogéniques. Les composés gazeux primaires émis dans l'atmosphère se transforment et peuvent se condenser sur les particules. Ainsi, bien qu'une grande partie des aérosols organiques observés en été est d'origine biogénique (70% à Marseille selon El Haddad et al., 2011), la formation de ces aérosols est une conséquence des interactions de composés biogéniques et anthropiques (Sartelet et al., 2012). Les composés biogéniques peuvent être hydrophiles ou hydrophobes et peuvent avoir des interactions plus ou moins fortes avec les composés inorganiques. Il est donc primordial de bien représenter les phases aqueuses et organiques hydrophobiques de ces composés (Couvidat et Seigneur, 2011), ainsi que les transitions entre les différentes phases. Des comparaisons modèle/mesures effectuées dans le cadre de la campagne Megapoli (<http://megapoli.lisa.univ-paris12.fr/>) suggèrent qu'il serait également nécessaire de considérer plusieurs phases organiques pour correctement modéliser la condensation des espèces organiques semi-volatiles sur les particules.

Objectifs :

Ce projet a pour but d'améliorer la représentation des aérosols organiques dans les modèles de chimie-transport utilisés à des fins opérationnelles, pour affiner les prévisions à quelques jours sur l'Europe.

Pour améliorer à la fois « émissions » puis « chimie des aérosols prenant en compte ces émissions », deux axes principaux sont définis:

- (i) une meilleure quantification des sources:
 1. naturelles, notamment les sels marins,
 2. anthropiques pour les composés organiques et la chimie associée;
- (ii) un nouveau schéma intégrateur de la chimie de ces sources pour les aérosols organiques.

Méthodologie :

Le post-doctorat développera et intégrera dans le modèle de qualité de l'air Polyphemus du CEREAS

- une paramétrisation des émissions de sels marins pour les espèces organiques (d'après Gantt et al., 2011),

- un modèle d'aérosol organique secondaire performant au niveau du temps de calcul, représentant les changements de phases organique et aqueuse et intégrant les espèces semi-volatiles manquantes des inventaires d'émission.

Le modèle Polyphemus sera évalué par le biais de comparaisons aux observations sol du réseau EMEP de 2002/2003 (Couvidat et al. 2012), et à des observations plus récentes (mesurées par les réseaux EMEPet dans le cadre de ChArMEx (The Chemistry-Aerosol Mediterranean Experiment) en Corse).

Collaboration :

Des collaborations avec des chercheurs du Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) sont à prévoir, notamment pour l'intégration du nouvel intégrateur de chimie organique dans le modèle de qualité de l'air Chimere développé au LMD.

Financement et durée :

Ce projet est financé par GMES-MDD et Ademe. Le salaire proposé est d'environ 2000 euros nets sur une durée de 18 mois.

Compétences requises :

Le candidat devra avoir une thèse en modélisation de la qualité de l'air et/ou des aérosols, et avoir démontré des capacités à publier en premier auteur dans des revues scientifiques de rang A. Une expérience en modélisation 3D avec un modèle de chimie transport est primordiale. Des compétences fortes en thermodynamique et chimie sont nécessaires (une formation en génie chimique serait souhaitable). De bonnes connaissances et des expériences en programmation en C++, python et fortran sont également essentielles.

Date de début souhaitée : 1^{er} janvier 2013.

Candidatures : Merci d'envoyer vos candidatures (CV + lettre de motivation) à Dr Karine Sartelet (sartelet@cerea.enpc.fr) avant le 31 octobre 2012.

Bibliographie :

- Couvidat F. and Seigneur C. (2011), Modeling secondary organic aerosol formation from isoprene under dry and humid conditions. *Atmos. Chem. Phys.*, vol. 11, 893-909
- 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.*, Vol 117, D10304.
- El Haddad et al., *Atmos. Chem. Phys.*, 11, 2059–2079, 2011
- Gantt B., Meskhidze N., Facchini M. C., Rinaldi M., Ceburnis D., and O'Dowd C. D. (2011), Wind speed dependent size-resolved parameterization for the organic mass fraction of sea spray aerosol, *Atmos. Chem. Phys.*, 11, 8777-8790.
- Sartelet K.N., Couvidat F., Seigneur, C. and Roustan Y. (2012), Impact of biogenic emissions on air quality over Europe and North America. *Atmos. Env.*, 53, p131-141.