

Modélisation des particules organiques dans l'atmosphère

CEREA

Centre d'enseignement et de recherche en environnement atmosphérique
Laboratoire commun École des Ponts ParisTech / EDF R&D
Université Paris-Est

Contexte : Les composés organiques constituent une fraction significative de la masse des particules fines (c'est-à-dire, celles qui ont un diamètre égal ou inférieur à 2,5 microns) présentes en suspension dans l'atmosphère. Ces particules peuvent avoir un effet néfaste sur la santé (elles sont réglementées depuis 1997 aux Etats-Unis et la commission européenne a émis en 2008 une directive pour leur réglementation 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. Ces particules sont principalement formées dans l'atmosphère par des réactions chimiques qui oxydent des composés organiques volatils. Ces derniers sont émis par des activités humaines (transports par exemple) mais aussi par la végétation. Il est donc essentiel d'élucider les mécanismes qui contribuent à la formation de ces particules organiques et d'identifier leurs principaux précurseurs afin de fournir une base scientifique rigoureuse pour le développement de politiques publiques efficaces pour la réduction des particules organiques.

Sujet : Plusieurs modèles de la formation des particules organiques ont été développés ces dernières années et utilisés dans des modèles de la qualité de l'air. Le modèle actuellement utilisé au CEREA représente l'état de l'art car il tient compte des importantes interactions entre composés organiques et minéraux et est fondé sur une représentation moléculaire (plutôt qu'empirique) des particules organiques. La formulation du modèle a cependant été limitée par la disponibilité de données expérimentales. Par conséquent, il est important de prendre en compte les données expérimentales récentes afin que le modèle intègre l'état actuel des connaissances. L'objectif de cette thèse est donc d'améliorer le modèle en intégrant dans ce cadre théorique l'ensemble des données expérimentales qui sont actuellement disponibles dans la littérature scientifique ainsi que les données expérimentales qui seront obtenues par exemple dans la chambre de simulation du Laboratoire interuniversitaire des systèmes atmosphériques (LISA) de l'université Paris 12 / Université Paris-Est. Par ailleurs, la formation de particules organiques dans les nuages (par réactions chimiques en milieu aqueux et évaporation des gouttelettes), qui est actuellement ignorée dans les modèles de la qualité de l'air, sera ajoutée au modèle. Une collaboration avec le Laboratoire Chimie Provence – Instrumentation et réactivité atmosphérique (LCP-IRA) de l'université d'Aix-Marseille est envisagée pour la réalisation du mécanisme de chimie des nuages. Le modèle sera ensuite évalué avec des résultats obtenus dans des chambres de simulation au LISA et au LCP-IRA afin de quantifier les incertitudes. Ensuite, le modèle de particules organiques sera intégré dans le modèle de la qualité de l'air du CEREA, POLAIR3D/Polyphemus, pour simuler la pollution atmosphérique sur l'Île de France. Les sorties du modèle pourront par exemple être comparées aux mesures de la campagne Megapoli, coordonnée par le LISA, qui comprend des mesures au sol dans Paris et sur le site de Palaiseau et des mesures aéroportées du panache urbain. Le résultat de cette thèse sera un modèle opérationnel de formation des particules organiques qui intégrera une information scientifique récente dans un cadre théorique rigoureux.

Bibliographie :

- Pun, B., C. Seigneur et K. Lohman. Modeling secondary organic aerosol via multiphase partitioning with molecular data, *Environ. Sci. Technol.*, **40**, 4722-4731 (2006).
- Pun, B. et C. Seigneur. Investigative modeling of new pathways for secondary organic aerosol formation, *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 2199-2216 (2007).
- Debry, E. et C. Seigneur, Tracking organic particulate matter in Europe with the SIREAM/AEC aerosol model: comparisons to measured data and sensitivity to model parameters, 26th Annual American Association for Aerosol Research Conference, 24-28 Septembre 2007, Reno, Nevada.
- Debry, E., C. Seigneur et K. Sartelet, Organic aerosols in the air quality platform Polyphemus: Oxidation pathways, hydrophilic/hydrophobic partitioning and oligomerization, International Aerosol Modeling Algorithms Conference, 5-7 Décembre 2007, Davis, California.

Encadrement : Christian Seigneur (directeur de thèse) et Karine Sartelet (chargée de recherche au Cerea)

Lieu : CEREAA, École des Ponts ParisTech, Champs sur Marne (<http://cerea.enpc.fr>)

Durée : 3 ans

Rémunération : 1.600 € nets par mois

Contact : Christian Seigneur, directeur du Cerea, 01 64 15 21 41, seigneur@cerea.enpc.fr