

---

# Cours SGE

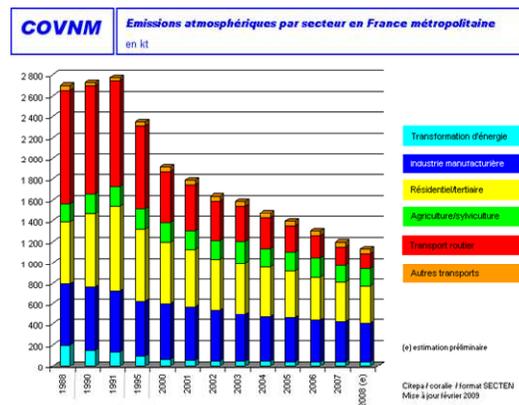
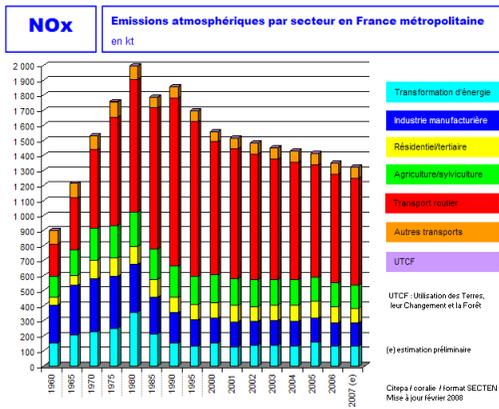
## « Modélisation de la pollution atmosphérique »

### Introduction

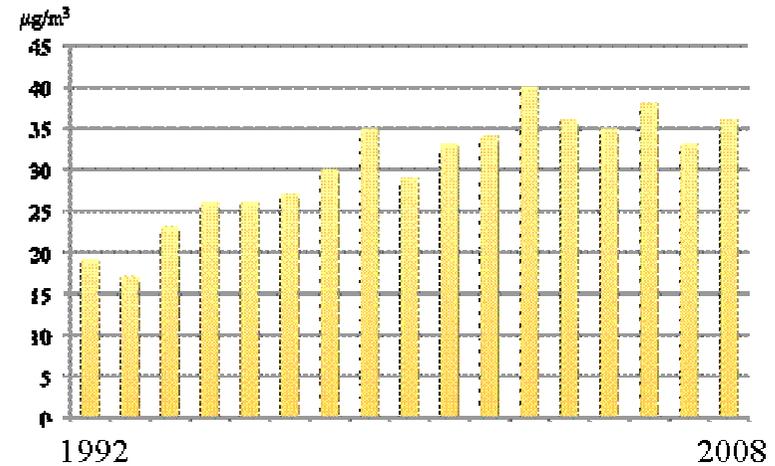
Christian Seigneur

Cerea

# La pollution atmosphérique : Un système complexe et non-linéaire



Concentrations annuelles d'ozone en Île de France



Pourquoi les concentrations d'ozone n'ont-elles pas diminué alors que les émissions de précurseurs (oxydes d'azote et composés organiques volatils) ont diminué ?

# Systeme non-lineaire :

## Effet des emissions de gaz precurseurs sur les PM<sub>2.5</sub>

Changement  
simule des  
concentrations de

Sulfate

Nitrate

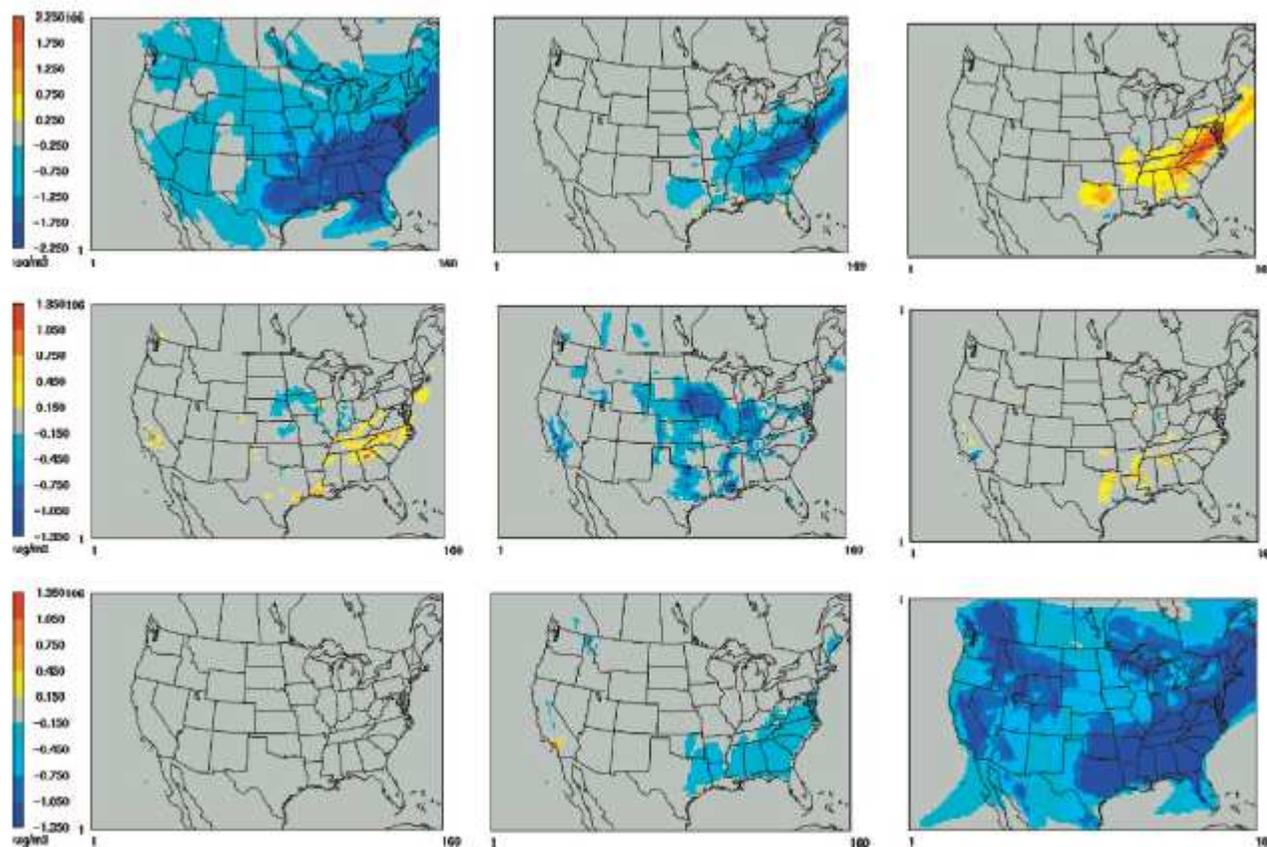
Carbone  
organique

Diminution de 50% des emissions de

SO<sub>2</sub>

NO<sub>x</sub>

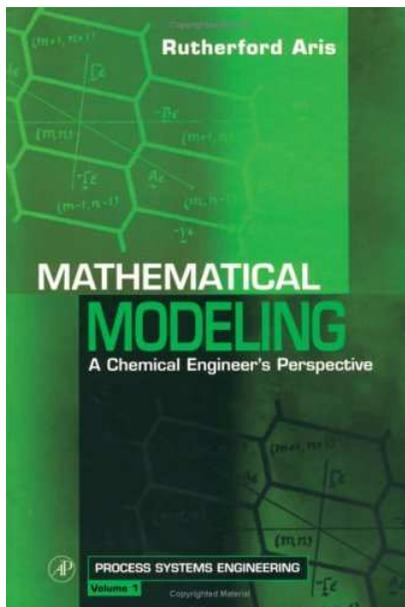
COV



# Modélisation

---

Qu'est ce qu'un modèle ?



« A mathematical model is a representation, in mathematical terms, of certain aspects of a nonmathematical system »

Rutherford Aris, *Mathematical Modeling: A Chemical Engineers's Perspective*, Academic Press, 1999

# Modélisation

---

Qu'est ce qu'un modèle ?

C'est une représentation de la réalité au moyen de concepts, d'équations mathématiques et, si nécessaire, d'algorithmes numériques

« A mathematical model is a representation, in mathematical terms, of certain aspects of a nonmathematical system »

Rutherford Aris, *Mathematical Modeling: A Chemical Engineers's Perspective*, Academic Press, 1999

# Modélisation

---

Qu'est ce qu'un modèle ?

« The art and crafts of mathematical modeling are exhibited in the construction of models that not only are consistent in themselves and mirror the behavior of [the actual system], but also serve some useful exterior purpose »

Rutherford Aris, *Mathematical Modeling: A Chemical Engineers's Perspective*, Academic Press, 1999

# Modélisation

---

Qu'est ce qu'un modèle ?

- Le modèle doit être correct d'un point de vue mathématique

« The art and crafts of mathematical modeling are exhibited in the construction of models that not only are consistent in themselves and mirror the behavior of [the actual system], but also serve some useful exterior purpose »

Rutherford Aris, *Mathematical Modeling: A Chemical Engineers's Perspective*, Academic Press, 1999

# Modélisation

---

Qu'est ce qu'un modèle ?

- Le modèle doit être correct d'un point de vue mathématique
- Il doit représenter la réalité le mieux possible

« The art and crafts of mathematical modeling are exhibited in the construction of models that ~~not only are consistent in themselves and~~ mirror the behavior of [the actual system], but also ~~serve some useful exterior purpose~~ »

Rutherford Aris, *Mathematical Modeling: A Chemical Engineers's Perspective*, Academic Press, 1999

# Modélisation

---

Qu'est ce qu'un modèle ?

- Le modèle doit être correct d'un point de vue mathématique
- Il doit représenter la réalité le mieux possible
- Il doit être utile pour des applications concrètes

« The art and crafts of mathematical modeling are exhibited in the construction of models that not only are consistent in themselves and mirror the behavior of [the actual system], but also serve some useful exterior purpose »

Rutherford Aris, *Mathematical Modeling: A Chemical Engineers's Perspective*, Academic Press, 1999

# Modélisation : Trois éléments

---

Un modèle comprend les trois éléments suivants :

- Des hypothèses
- Des principes fondamentaux
- Des relations mathématiques entre les variables

# Modélisation : Hypothèses

---

Les hypothèses définissent l'état d'opération du système. Par exemple :

- Transformation adiabatique des masses d'air
- Atmosphère = gaz parfait
- Goutte de nuage = solution aqueuse idéale
- État stationnaire pour les transformations chimiques de certaines espèces

# Modélisation : Principes fondamentaux

---

Des principes fondamentaux (lois universelles) régissent le comportement du système :

- Conservation de la quantité de mouvement
- Conservation de la quantité de chaleur
- Conservation de la masse
  
- Certaines découlent des hypothèses faites sur le système :
  - Loi des gaz parfaits, loi de Henry...

# Modélisation : Relations mathématiques

---

Les relations mathématiques sont les équations du modèle qui décrivent l'évolution des variables (par exemple les concentrations de polluants) en fonction du temps et de l'espace :

- Équations fondamentales (équations de Navier-Stokes, équation de diffusion atmosphérique, équation générale dynamique des aérosols...)
- Équations empiriques (paramétrisations) déduites de données expérimentales
- Relations statistiques entre des variables du modèle

# Modélisation de la pollution atmosphérique

---

Pourquoi vouloir modéliser la pollution atmosphérique ?

- les mesures donnent une photographie à un instant donné de la pollution atmosphérique



# Modélisation de la pollution atmosphérique

---

Pourquoi vouloir modéliser la pollution atmosphérique ?

- les mesures donnent une photographie à un instant donné de la pollution atmosphérique

Mais,

- elles ne donnent aucune indication sur la pollution qui pourrait être due à une nouvelle source (installation industrielle, route...)
- elles ne permettent pas de définir les actions pour réduire la pollution atmosphérique (elles peuvent cependant donner des indications)
- elles ne permettent pas de prévoir la pollution
- elles ne fournissent des informations qu'à des endroits limités et/ou pour des périodes limitées

# À quoi sert un modèle ?

---

## (1) Recherche scientifique

- Un modèle permet de réunir un grand nombre d'informations sur un système dans un cadre rigoureux et cohérent
- Le modèle peut donc être utilisé pour aider à la compréhension du système lors d'investigations scientifiques

# À quoi sert un modèle ?

---

## (2) Applications opérationnelles

- Études d'impact pour une nouvelle source de pollution



# À quoi sert un modèle ?

---

## (2) Applications opérationnelles

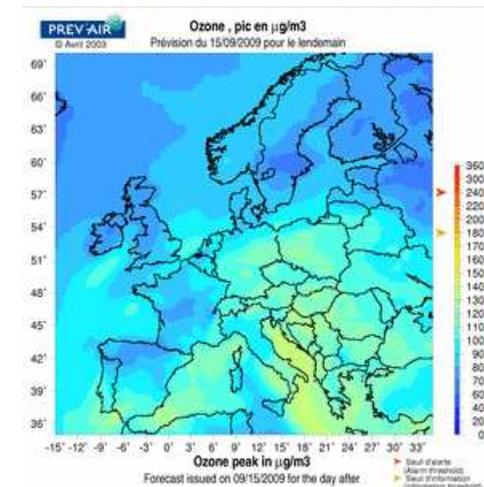
- Études d'impact pour une nouvelle source de pollution
- Scénarios de prospective pour comprendre l'évolution de la pollution atmosphérique dans le futur et pour sélectionner des stratégies de réduction d'émissions de polluants



# À quoi sert un modèle ?

## (2) Applications opérationnelles

- Études d'impact pour une nouvelle source de pollution
- Scénarios de prospective pour comprendre l'évolution de la pollution atmosphérique dans le futur et pour sélectionner des stratégies de réduction d'émissions de polluants
- Prédiction de la qualité de l'air

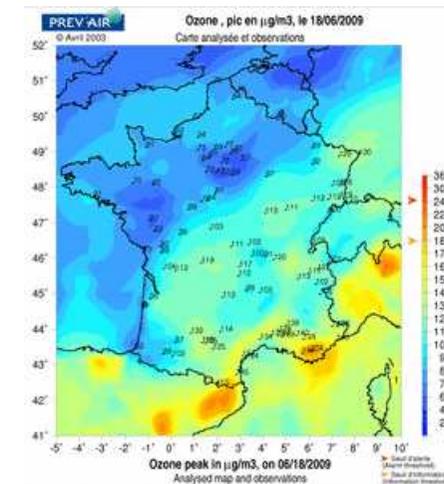


Source : [www.prevoir.org](http://www.prevoir.org)

# À quoi sert un modèle ?

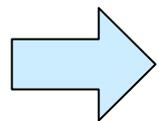
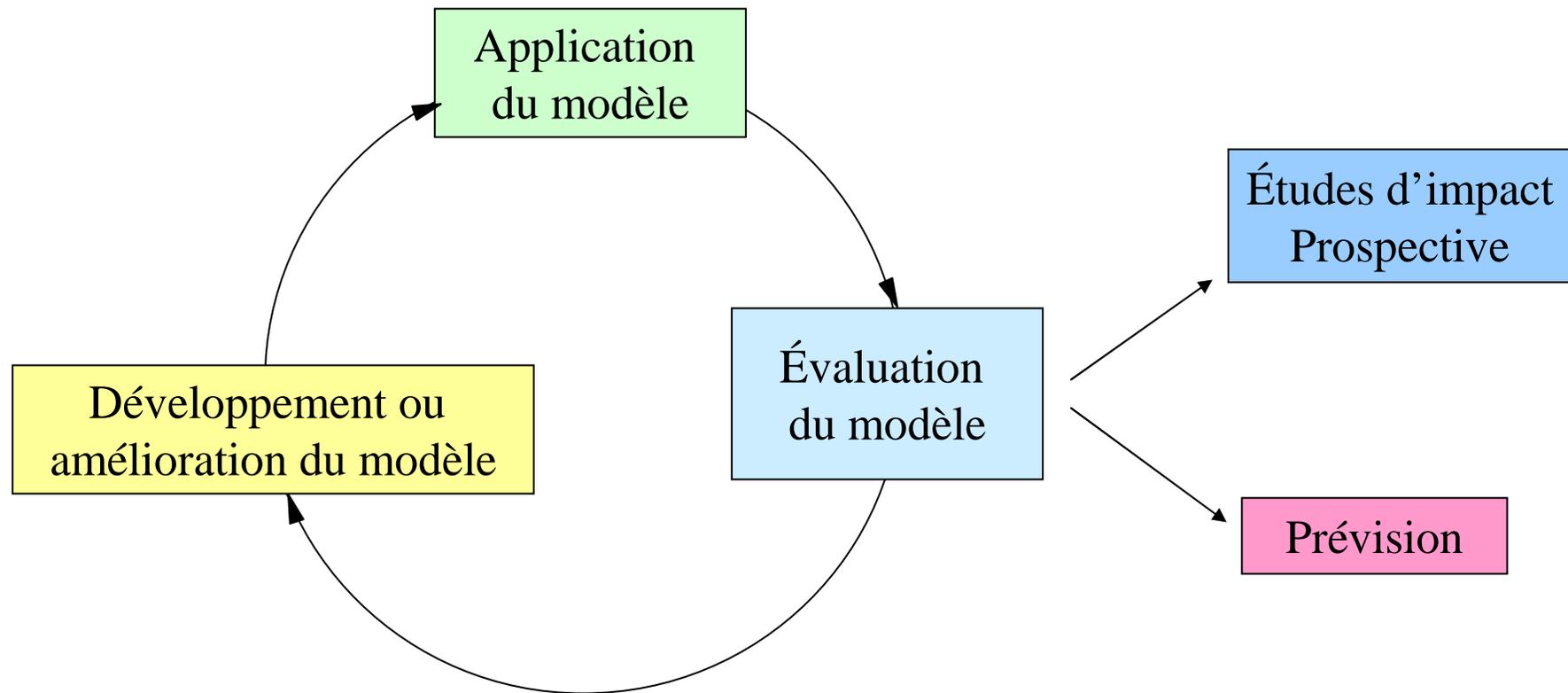
## (2) Applications opérationnelles

- Études d'impact pour une nouvelle source de pollution
- Scénarios de prospective pour comprendre l'évolution de la pollution atmosphérique dans le futur et pour sélectionner des stratégies de réduction d'émissions de polluants
- Prévion de la qualité de l'air
- Cartographie de la pollution



Source : [www.prevoir.org](http://www.prevoir.org)

# L'utilisation des modèles en pollution atmosphérique



Le cycle peut être effectué plusieurs fois jusqu'à ce que le modèle soit jugé représenter la réalité (d'après les mesures) suffisamment correctement : il peut alors être utilisé pour diverses applications

# Modélisation

---

On peut distinguer :

- les modèles conceptuels
- les modèles statistiques
- les modèles déterministes

# Modèles conceptuels

---

Ils énoncent de façon qualitative les processus physiques et chimiques qui sont perçus comme étant les plus importants pour définir la pollution atmosphérique étudiée

Ils forment la base des modèles statistiques et déterministes qui visent à quantifier ces processus au moyen d'équations mathématiques

# Modèles statistiques

---

Ils consistent à relier différentes variables (par exemple émissions de polluants et concentrations de polluants dans l'atmosphère) par des équations qui représentent des relations statistiques

Les processus qui relient ces variables sont donc représentés de façon implicite dans ces équations statistiques

# Modèles statistiques

---

Ils peuvent être utilisés pour réaliser une attribution quantitative des sources de pollution aux niveaux de pollution mesurés (pour les polluants primaires)

$$x_{ij} = \sum_{k=1}^p g_{ik} f_{kj} + e_{ij}$$

Concentration mesurée du polluant j dans l'échantillon i

Contribution de la source k dans l'échantillon i

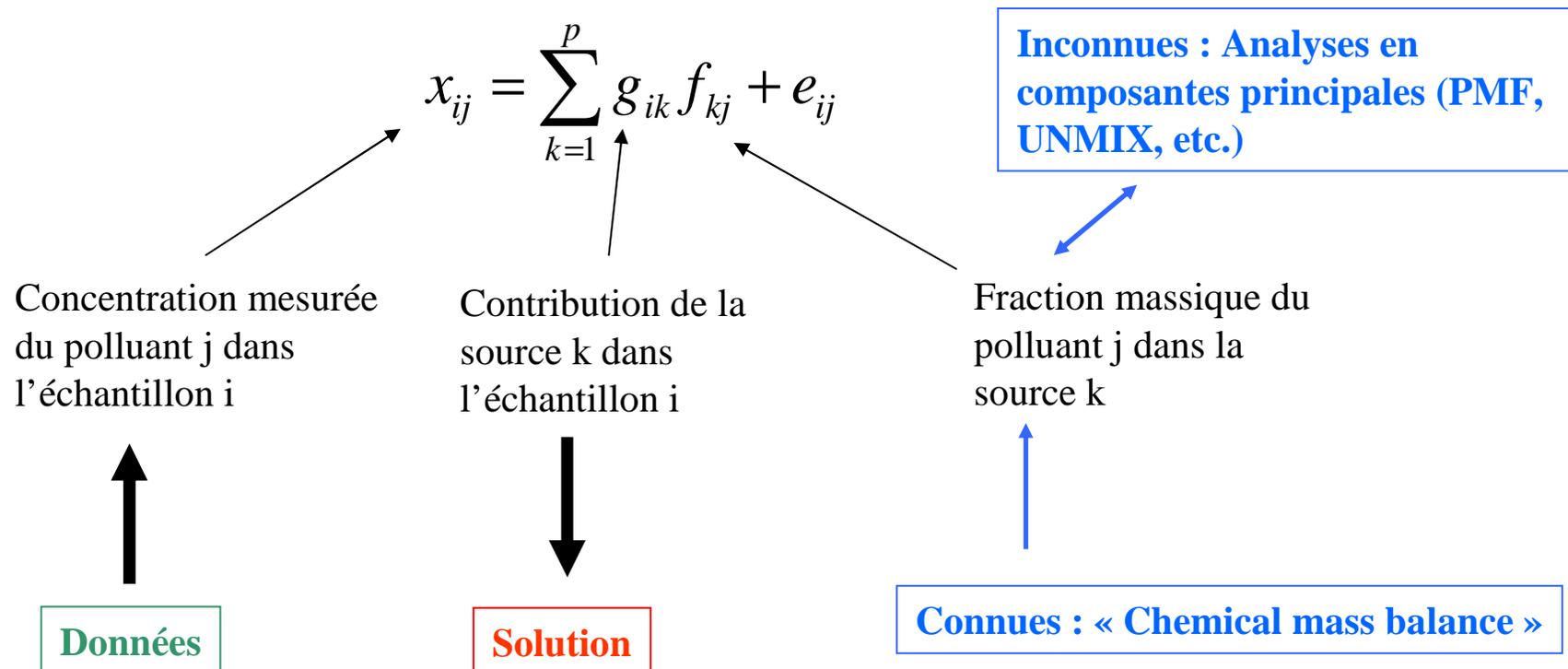
Fraction massique du polluant j dans la source k

Partie non expliquée par le modèle

Friedlander, S.K., Chemical element balances and identification of air pollution sources, *Environ. Sci. Technol.*, **7**, 235-248 (1973)

# Modèles statistiques

Ils peuvent être utilisés pour réaliser une attribution quantitative des sources de pollution aux niveaux de pollution mesurés (pour les polluants primaires)



# Modèles déterministes

---

- Ils consistent à mettre sous forme d'équations mathématiques les processus identifiés dans le modèle conceptuel
- Dans la grande majorité des cas, il n'y a pas de solution analytique au système d'équations mathématiques et il faut développer une solution numérique (approximative)

# Modèles déterministes

---

Le modèle mathématique comprend :

- les équations représentant les processus physico-chimiques
- les conditions aux limites du domaine modélisé
- les conditions initiales au début de la période modélisée

# Modèles déterministes

## Processus physico-chimiques

---

Les équations mathématiques comprennent :

- les équations représentant les processus physico-chimiques
- les conditions aux limites du domaine modélisé
- les conditions initiales au début de la période modélisée

Conservation de la masse lors des phénomènes de transport,  
de transformations chimiques et de changements de phase

# Modèles déterministes

## Conservation de la masse

---

L'équation de chimie-transport (appelée aussi équation de diffusion atmosphérique ou équation de conservation de la masse) est utilisée pour représenter l'évolution des concentrations de polluants en fonction de l'espace et du temps

$$\underbrace{\frac{\partial C_i}{\partial t} + u_x \frac{\partial C_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial C_i}{\partial y} + u_z \frac{\partial C_i}{\partial z}}_{\text{advection}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left( K_{xx} \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{yy} \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{zz} \frac{\partial C_i}{\partial z} \right)}_{\text{diffusion}} + \underbrace{R_i(c_1, c_2, \dots, c_n)}_{\text{chimie}} + \underbrace{E_i(x, y, z, t)}_{\substack{\text{sources} \\ \text{(émissions)}}} - \underbrace{S_i(x, y, z, t)}_{\substack{\text{puits} \\ \text{(dépôts)}}$$

Reynolds, SD, Roth, PM, Seinfeld, JH, Mathematical modeling of photochemical air pollution – 1. Formulation of the model, *Atmos. Environ.*, **7**, 1033 (1973)

# Modèles déterministes

## Conditions aux limites

---

Les équations mathématiques comprennent :

- les équations représentant les processus physico-chimiques
- les conditions aux limites du domaine modélisé
- les conditions initiales au début de la période modélisée

« All boundary conditions rise from nature »

Neal Amundson (1916-), cité par Aris (1999)

# Modèles déterministes

## Conditions aux limites

---

Les équations mathématiques comprennent :

- les équations représentant les processus physico-chimiques
- les conditions aux limites du domaine modélisé
- les conditions initiales au début de la période modélisée

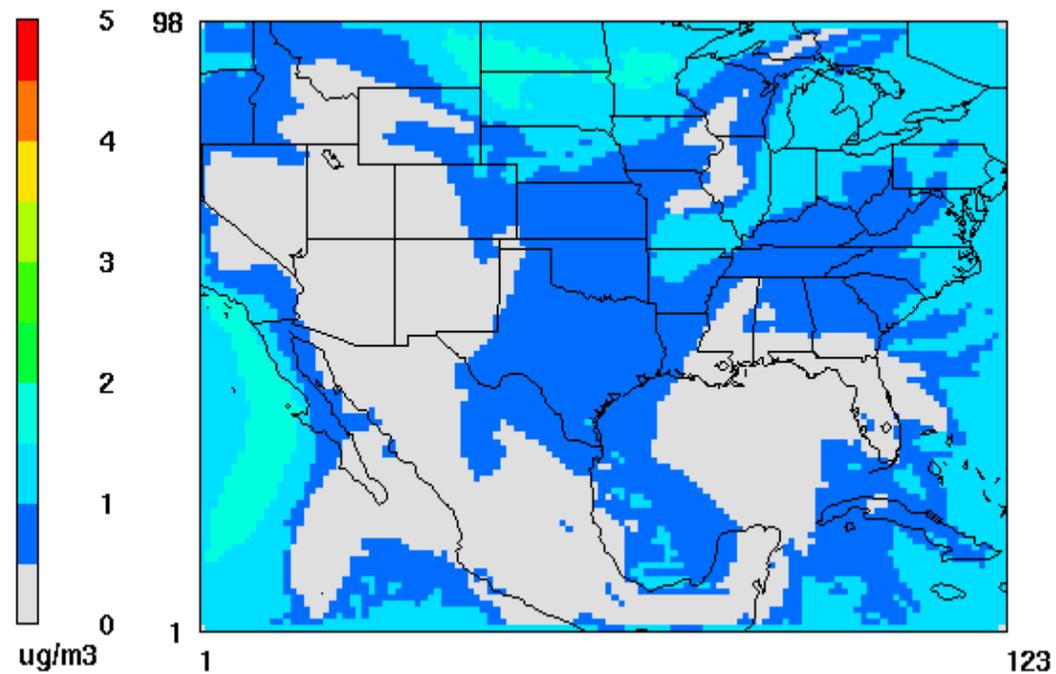
« All boundary conditions rise from nature »

Neal Amundson (1916-), cité par Aris (1999)

Les conditions aux limites sont un élément important du modèle et elles doivent être estimées à partir de données représentant le mieux possible la réalité (mesures ou sorties d'un autre modèle)

# Effets des conditions aux limites

---



Concentrations de sulfate particulaire sur les États-Unis dues aux conditions aux limites  
(Simulation effectuée avec le modèle CMAQ)

# Modèles déterministes

## Conditions initiales

---

Les équations mathématiques comprennent :

- les équations représentant les processus physico-chimiques
- les conditions aux limites du domaine modélisé
- les conditions initiales au début de la période modélisée

Leur influence est beaucoup moins importante qu'en météorologie :

- Météorologie : système chaotique très sensible aux conditions initiales
- Pollution atmosphérique : ~ système d'exponentielles décroissantes

# Modèles déterministes

## Conditions initiales

Effet d'une perturbation  
dans un système stable

Solution originale →

Solution perturbée →



Leur influence est beaucoup moins importante qu'en météorologie :

- Météorologie : système chaotique très sensible aux conditions initiales
- Pollution atmosphérique : ~ système d'exponentielles décroissantes

# Modèles déterministes

## Conditions initiales

Effet d'une perturbation  
dans un système chaotique

Solution originale →

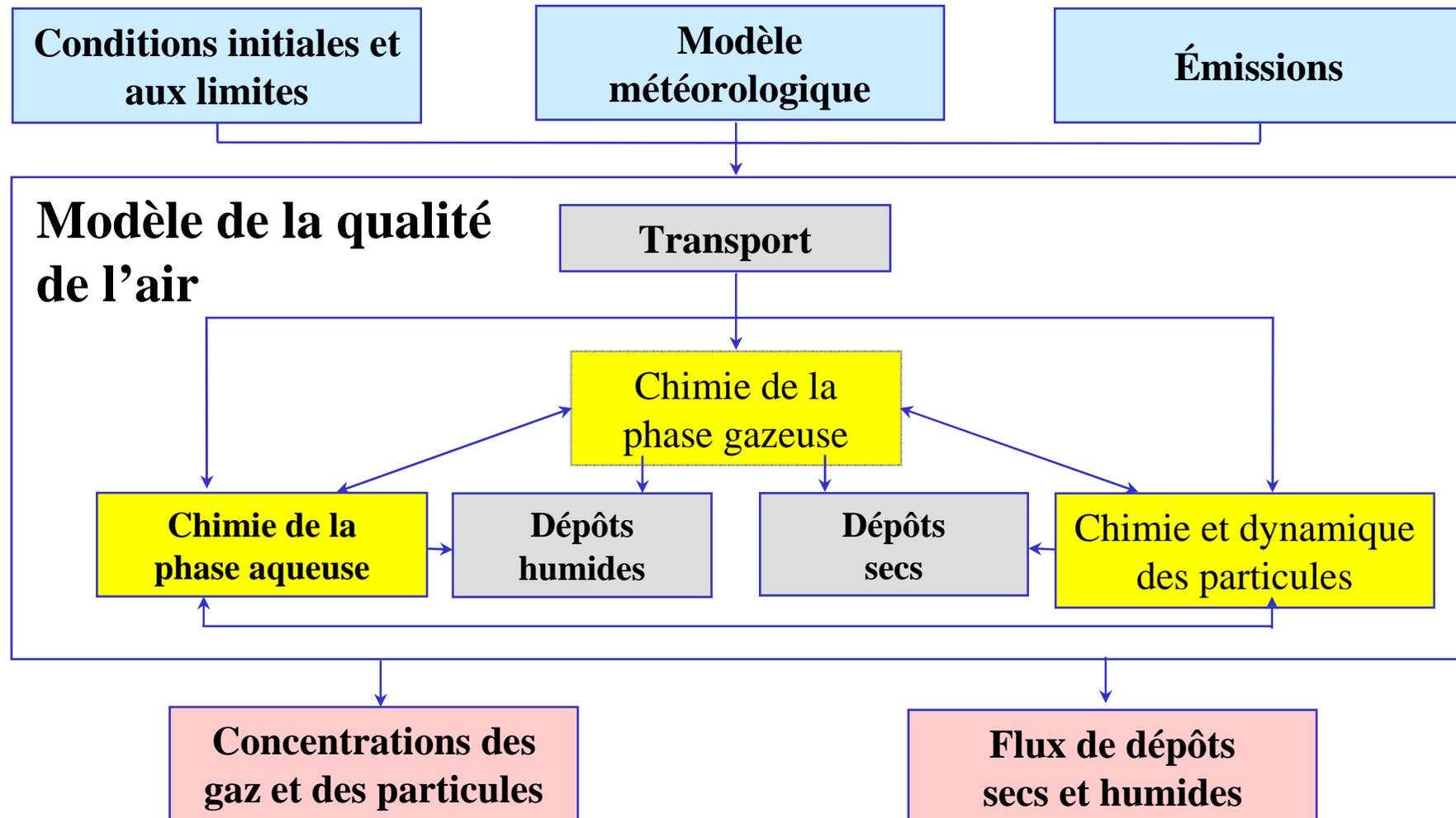
Solution perturbée →



Leur influence est beaucoup moins importante qu'en météorologie :

- Météorologie : système chaotique très sensible aux conditions initiales
- Pollution atmosphérique : ~ système d'exponentielles décroissantes

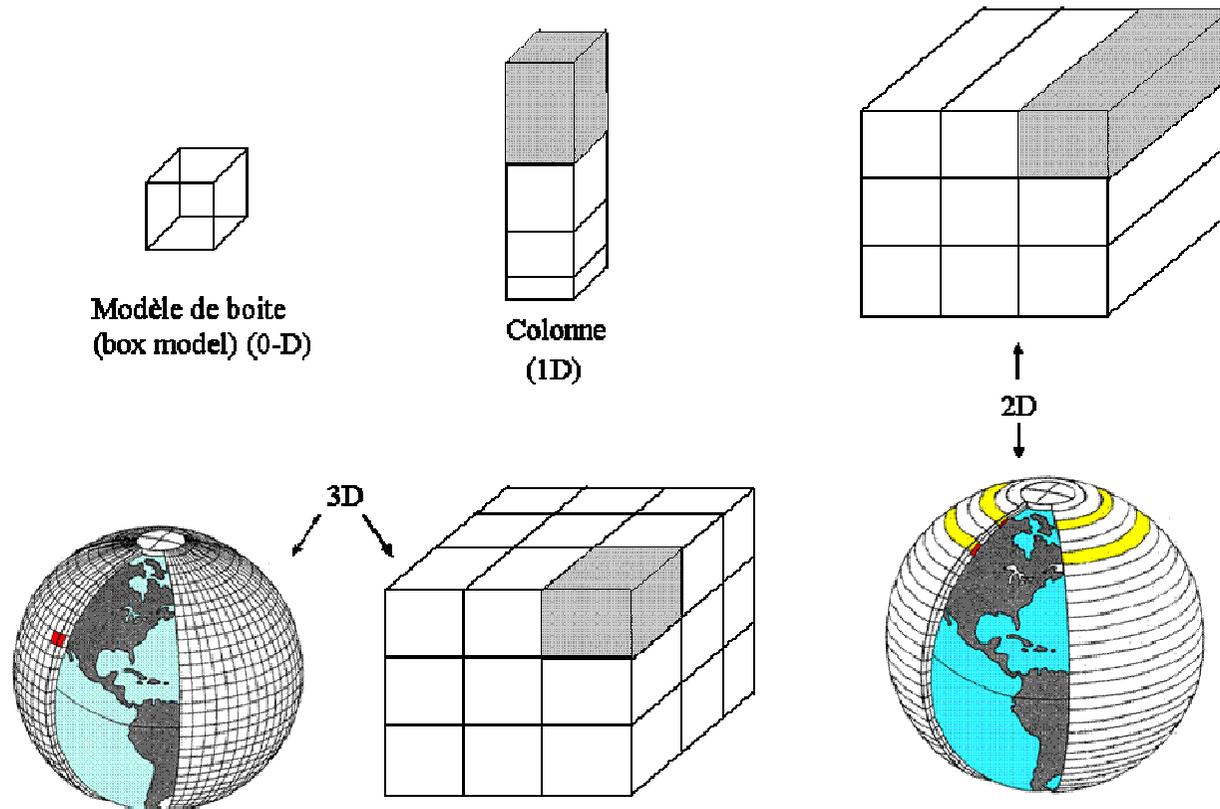
# Représentation schématique d'un modèle de chimie-transport



# Modèles déterministes

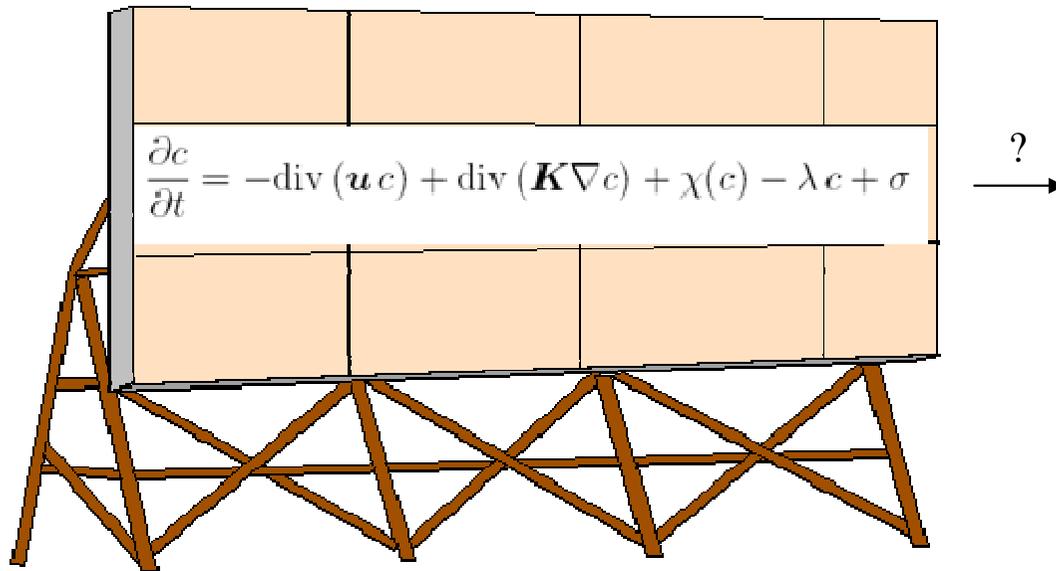
## Représentations spatiales

Les modèles à mailles vont des modèles boîtes (0D)  
à des modèles tri-dimensionnels (3D)



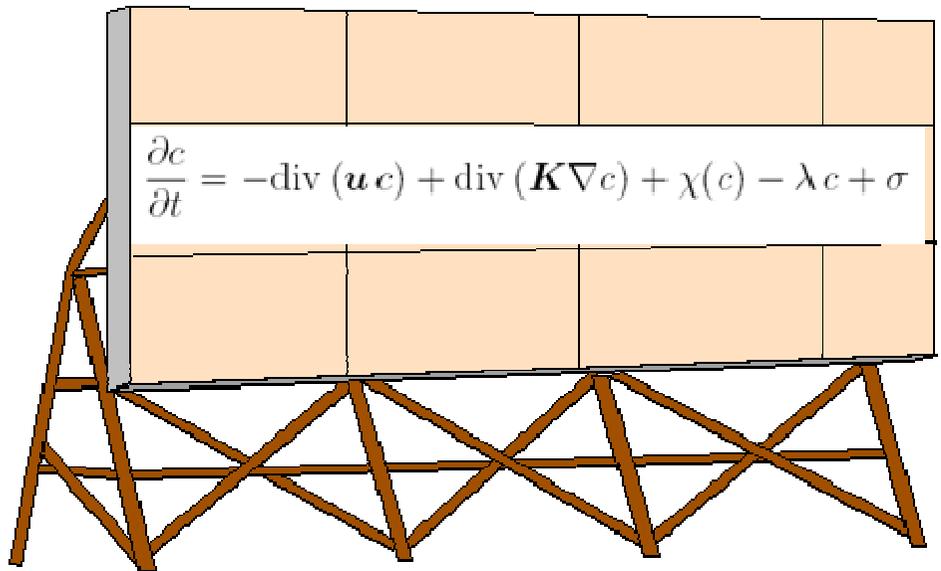
# Modélisation de la pollution atmosphérique

Équations mathématiques

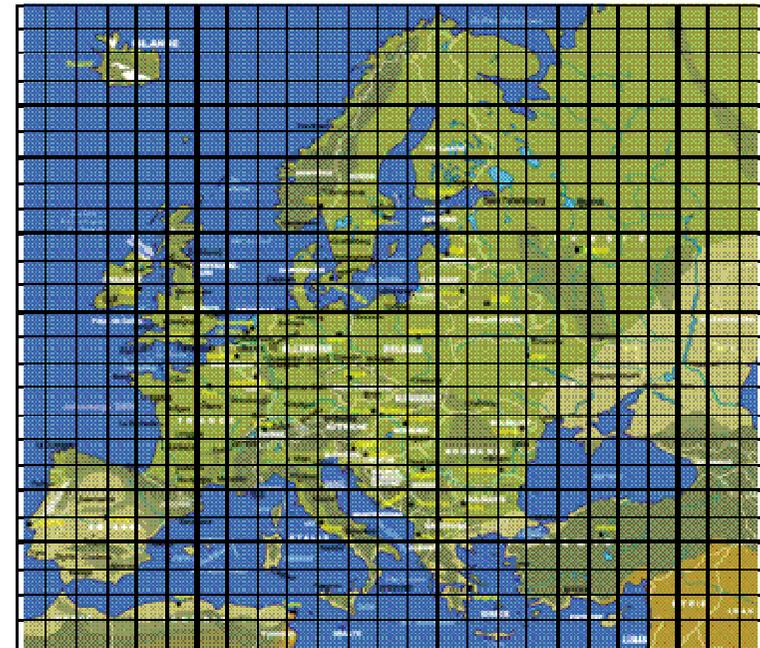


# Modélisation de la pollution atmosphérique

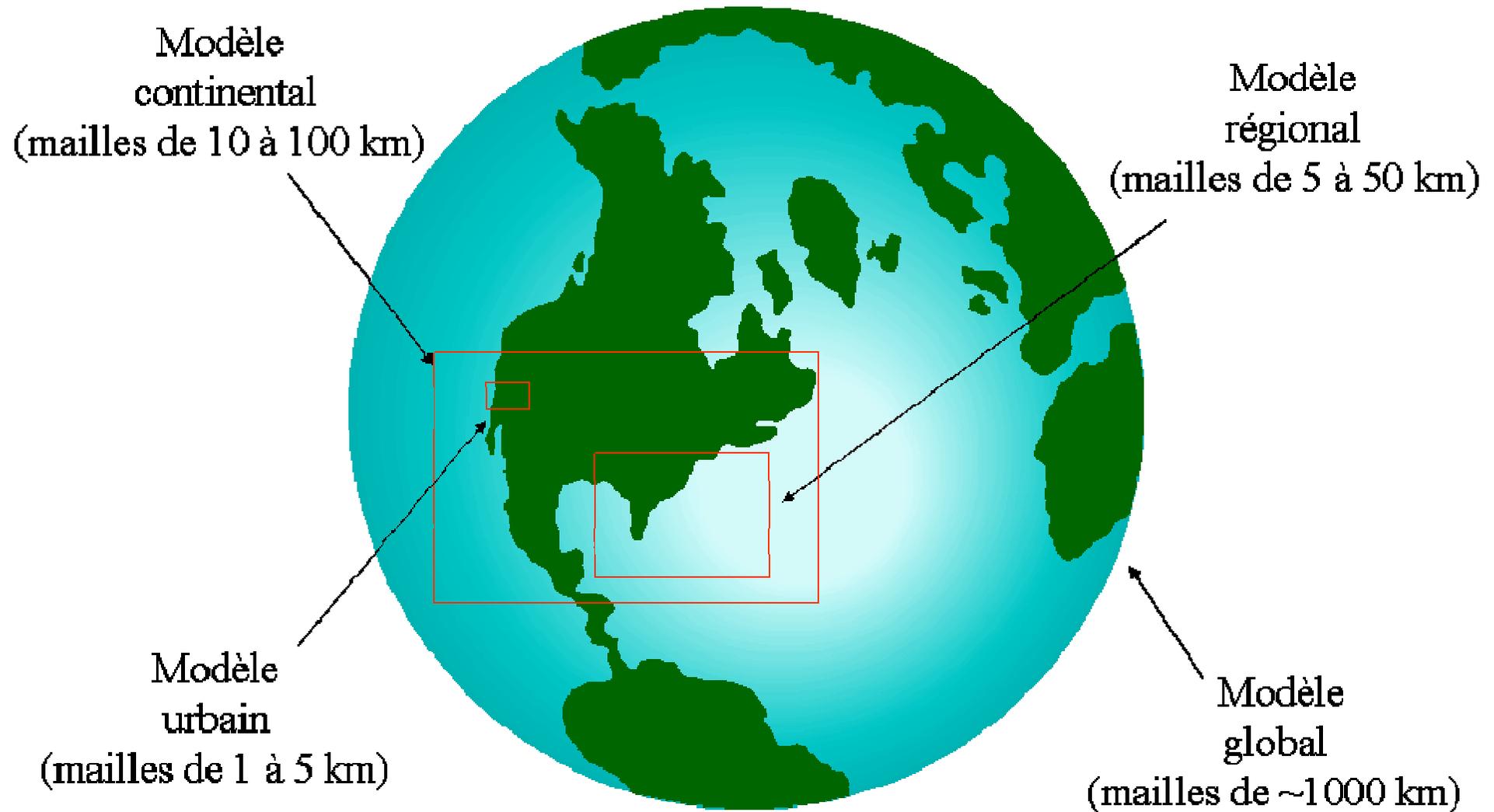
Équations mathématiques



Solution numérique dans un maillage



# Plusieurs échelles spatiales en modélisation



# Modèles déterministes

## Incertitudes

---

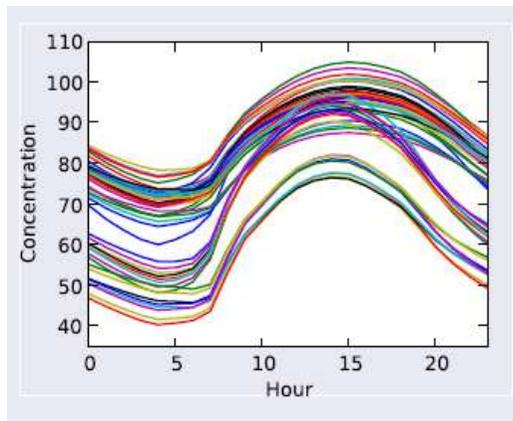
Il y a des incertitudes liées aux modèles déterministes :

- le modèle conceptuel peut être incomplet ou partiellement faux
- les équations mathématiques ne représentent pas toujours exactement les processus physico-chimiques
- les algorithmes numériques introduisent souvent des erreurs
- les données d'entrée (météorologie, émissions, ...) sont incertaines
- les conditions aux limites et les conditions initiales ne sont pas parfaitement connues
- les résolutions spatiale et temporelle du modèle ne permettent pas de résoudre tous les phénomènes (valeurs moyennes résolues dans les mailles du modèle et par heure)

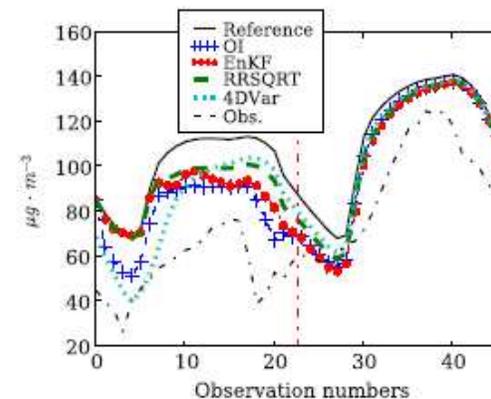
# Modèles déterministes

## Incertitudes

On peut réduire ces incertitudes en assimilant des mesures



Différentes simulations de concentrations d'ozone obtenues avec différents modèles et bases de données d'entrée

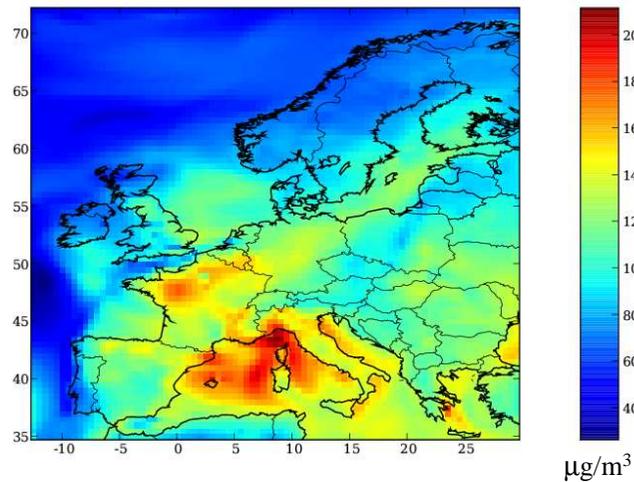


Exemple d'assimilation de mesures d'ozone lors d'une simulation

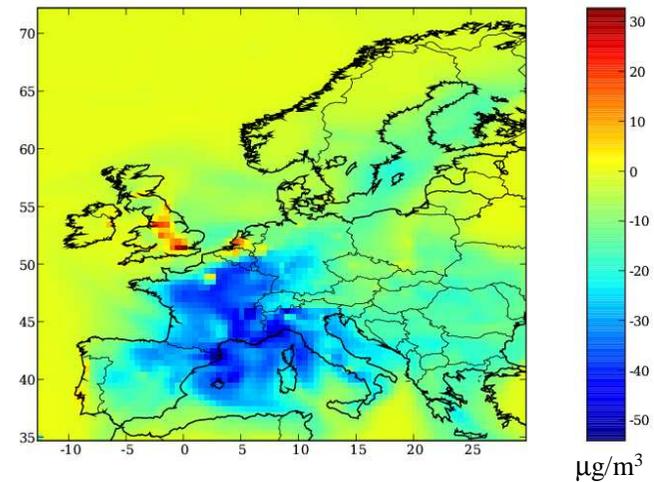
# Prospective : Scénarios d'émissions futures

---

Les modèles déterministes peuvent être utilisés pour évaluer comment une évolution future des émissions affectera la pollution atmosphérique



Simulation pour le 26 juillet 2001

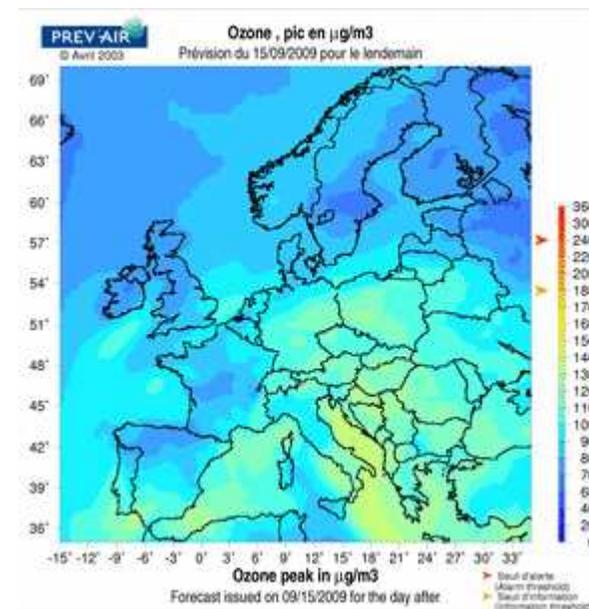


Effet de la suppression du trafic routier

# Prévision de la qualité de l'air

La prévision de la qualité de l'air peut se faire soit avec des modèles statistiques, soit avec des modèles déterministes

La personne responsable de la prévision peut utiliser ces différentes sources d'information pour émettre la « meilleure » prévision



Source : [www.prevoir.org](http://www.prevoir.org)

# Avantages et inconvénients des modèles

## Modèles statistiques

---

- Avantages
  - Ils sont fondés sur des mesures et sont donc ancrés dans la réalité (avec malgré tout l'incertitude liée aux mesures)
- Inconvénients
  - Les processus physico-chimiques ne sont pas traités explicitement
  - Ils ne peuvent pas être utilisés pour prédire des évolutions futures si la relation n'est pas linéaire (par exemple dans le cas de polluants atmosphériques secondaires tels que l'ozone et les  $PM_{2,5}$ )

# Avantages et inconvénients des modèles

## Modèles déterministes

---

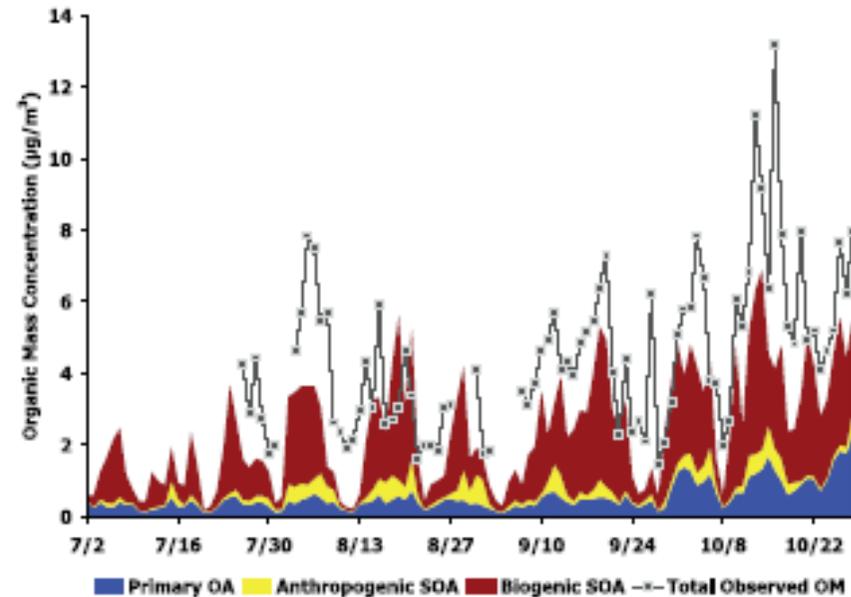
- Avantages
  - Les processus physico-chimiques sont traités explicitement (avec malgré tout les incertitudes associées à toute modélisation)
  - Ils peuvent être utilisés pour prédire des évolutions futures même si la relation n'est pas linéaire (par exemple dans le cas de polluants atmosphériques secondaires tels que l'ozone et les  $PM_{2,5}$ )
- Inconvénients
  - Les incertitudes associées à la formulation du modèle et aux données d'entrée peuvent être importantes
  - Une évaluation du modèle avec des mesures ne garantit pas que le modèle peut représenter avec précision une évolution future des émissions (c'est-à-dire des conditions différentes de celles de l'évaluation)

# Modélisation des particules organiques

La simulation permet d'identifier les contributions de différentes origines des particules :

- anthropiques et biogéniques
- primaires et secondaires

Cependant, sans mesures, on ne peut pas vérifier si ces contributions correspondent bien à la réalité

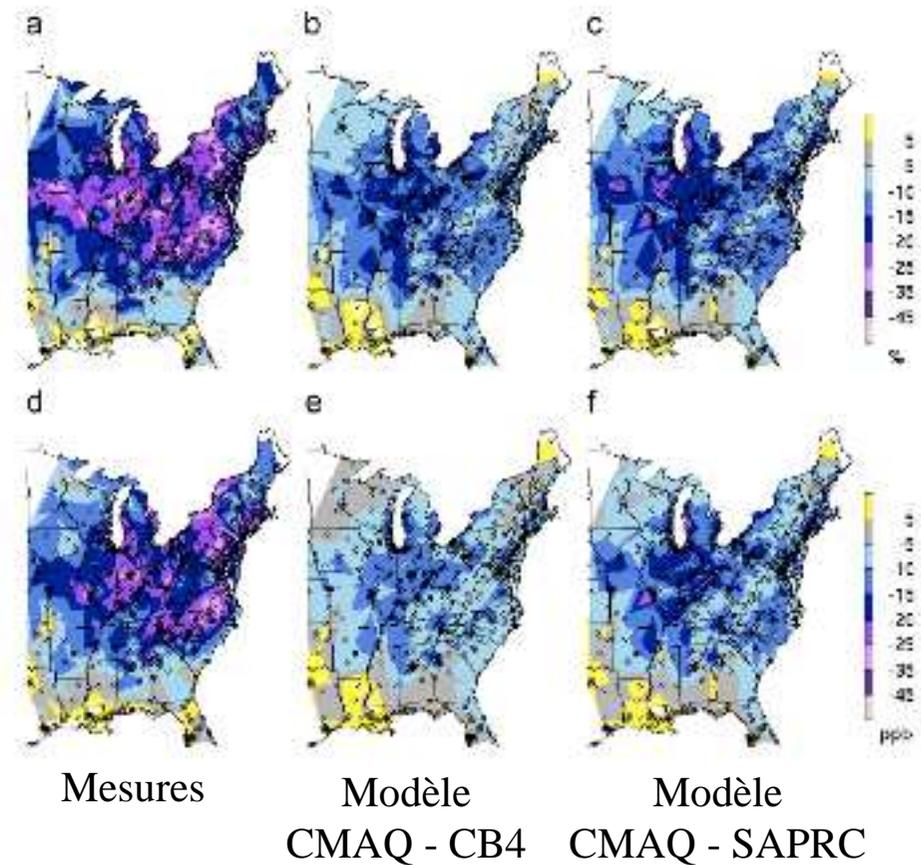


Pun et al., *J. Geophys. Res.*, **111**, D06302, doi:10.1029/2004JD005608 (2006)

# Évolution des concentrations d'ozone

Effet d'une réduction des émissions de  $\text{NO}_x$  des centrales électriques à charbon de l'est des États Unis entre 2002 et 2004 : les modèles sous-estiment l'effet de la réduction des émissions

Source : Gilliland et al.,  
*Atmos. Environ.*, **42**, 5110, 2008



# Prospective :

## Stratégies de réduction des émissions

---

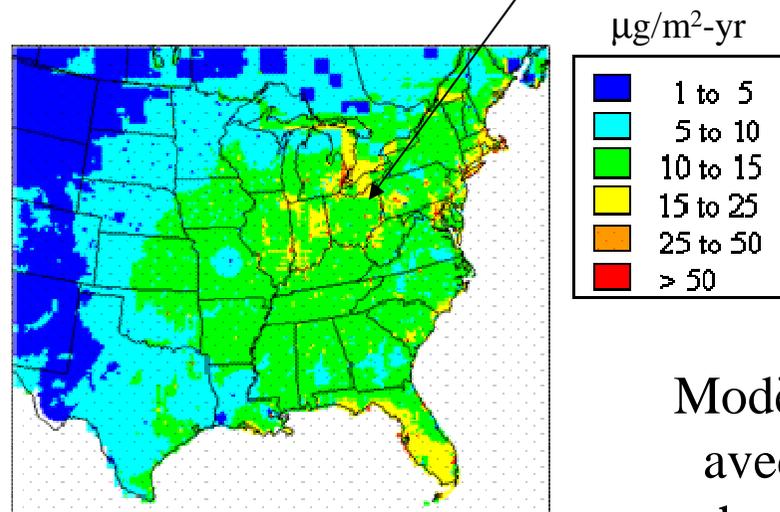
Les modèles statistiques peuvent être utilisés pour estimer les contributions de diverses sources de pollution aux concentrations de polluants primaires.

Les modèles déterministes peuvent être utilisés pour évaluer les effets d'une stratégie de réduction des émissions pour les polluants primaires et secondaires. Cependant, les résultats sont généralement fortement affectés par les incertitudes liées à la modélisation.

Par conséquent, il est préférable d'utiliser plusieurs modèles et même plusieurs types de modèles pour créer une meilleure crédibilité des résultats de la modélisation (« weight of evidence » de l'agence fédérale des États-Unis, U.S. Environmental Protection Agency).

# Comparaison de différents types de modèles : Contributions de sources à la pollution

Contribution aux dépôts humides de mercure à Steubenville, Ohio, États-Unis des sources de combustion au charbon



Modèle statistique de  
type source-récepteur  
(PMF et UNMIX)

Modèle déterministe 3D  
avec un pas de maille  
horizontal de 20 km

70 ± 15%

62% ± ?

Keeler et al., *Environ. Sci. Technol.*, **40**,  
5874-5881 (2006)

Seigneur et al., *Environ. Sci. Technol.*, **38**,  
555-569 (2004)

# Déroulé du cours

---

## Lundi 11

|               |              |                            |
|---------------|--------------|----------------------------|
| 9h30 – 10h30  | Introduction | Christian Seigneur (Cerea) |
| 10h45 – 12h45 | Dynamique    | Maya Milliez (Cerea)       |
| 14h00 – 16h00 | Dynamique    |                            |

## Mardi 12

|               |                      |                        |
|---------------|----------------------|------------------------|
| 8h30 – 10h30  | Chimie               | Bernard Aumont (Lisa)  |
| 10h45 – 12h45 | Chimie               |                        |
| 13h30 – 15h30 | Aérosols             | Édouard Debry (Ineris) |
| 16h00 – 18h00 | Modèles statistiques | Alain Dutot (Lisa)     |

# Déroulé du cours

---

## Mercredi 13

|               |                      |                            |
|---------------|----------------------|----------------------------|
| 9h30 – 12h30  | Dépôts – émissions   | Christophe Boissard (Lisa) |
| 14h00 – 16h00 | Modèles statistiques | Alain Dutot (Lisa)         |

## Jeudi 14

|              |                                       |                       |
|--------------|---------------------------------------|-----------------------|
| 8h30 – 12h30 | Modèles de<br>chimie-transport (CTMs) | Vivien Mallet (Cerea) |
|--------------|---------------------------------------|-----------------------|

## Mercredi 20

|               |                        |                      |
|---------------|------------------------|----------------------|
| 8h30 – 12h30  | Mise en œuvre des CTMs | Isabelle Coll (Lisa) |
| 14h00 – 16h00 | TP de modélisation     |                      |