

Modélisation et simulation de la qualité de l'air

Bruno Sportisse

`Bruno.Sportisse@cerea.enpc.fr`

CEREA (Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique),
Laboratoire Commun EDF R&D et Ecole des Ponts et Chaussées
Projet CLIME de l'INRIA

Journée SMAI/IHP, "Mathématiques et Environnement", 29 Mars 2007

Pourquoi modéliser la qualité de l'air ?

Composition chimique de l'atmosphère

- L'atmosphère : un réacteur chimique (oxydation).
- Des espèces à l'état de *traces* : du ng m^{-3} au $\mu\text{g m}^{-3}$.

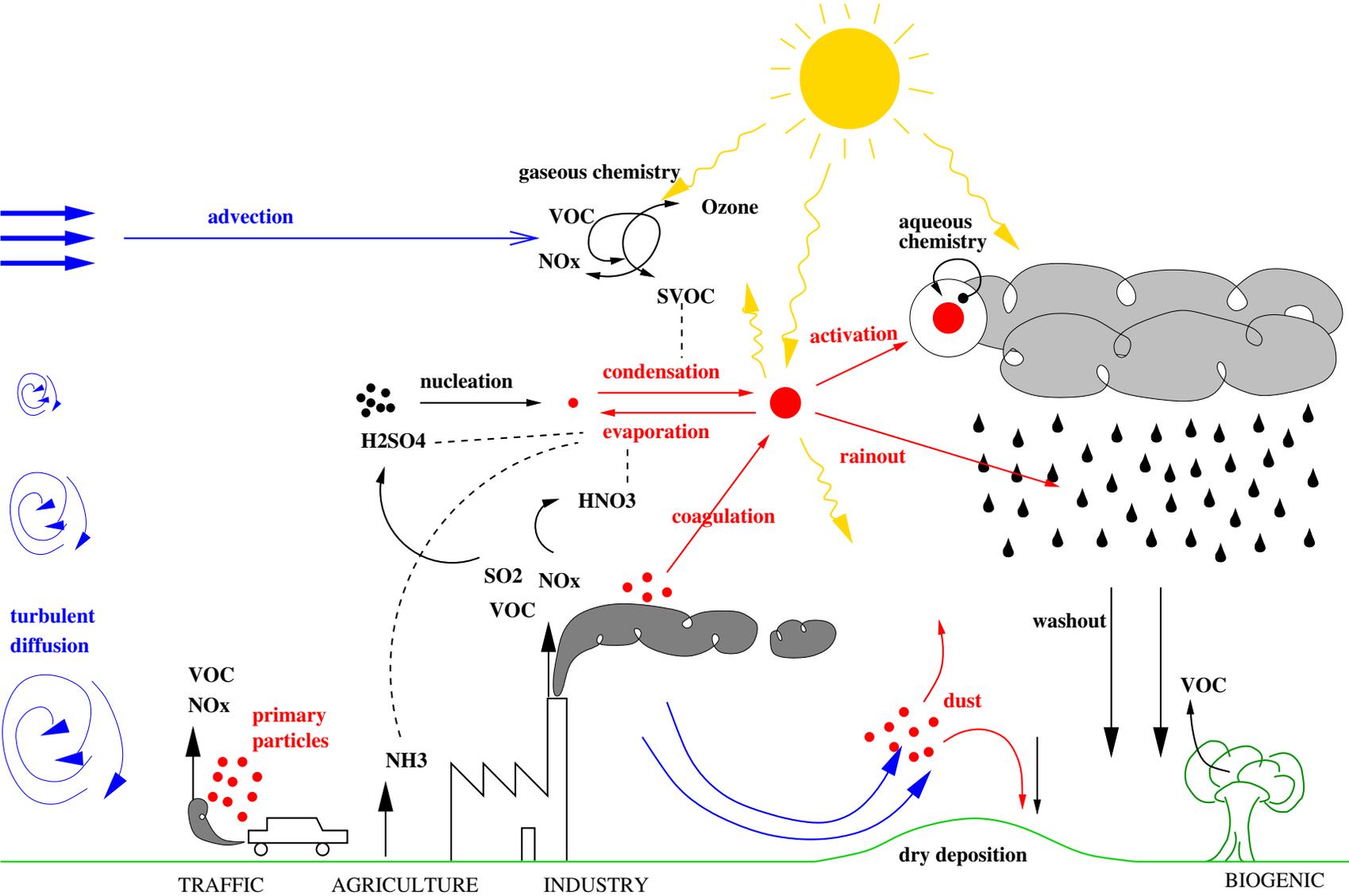
Applications

- Risque (NBC).
- Pollution photochimique (ozone, oxydes d'azote, composés organiques volatiles).
- Pollution transfrontière (métaux lourds, "pluies acides").
- Capacité oxydante de l'atmosphère (temps de résidence).
- Gaz à effet de serre.
- Trou d'ozone stratosphérique (composés chlorés/bromés).
- Etc.

Rôle de la modélisation

- Compréhension des processus.
- Prévion (contexte du risque industriel).
- Etudes d'impact et de scénario.

Compréhension des processus



Accident de Tchernobyl, 25 avril-5 mai 1986

Simulation Polyphemus, Centre Technique de Crise IRSN/CEREA

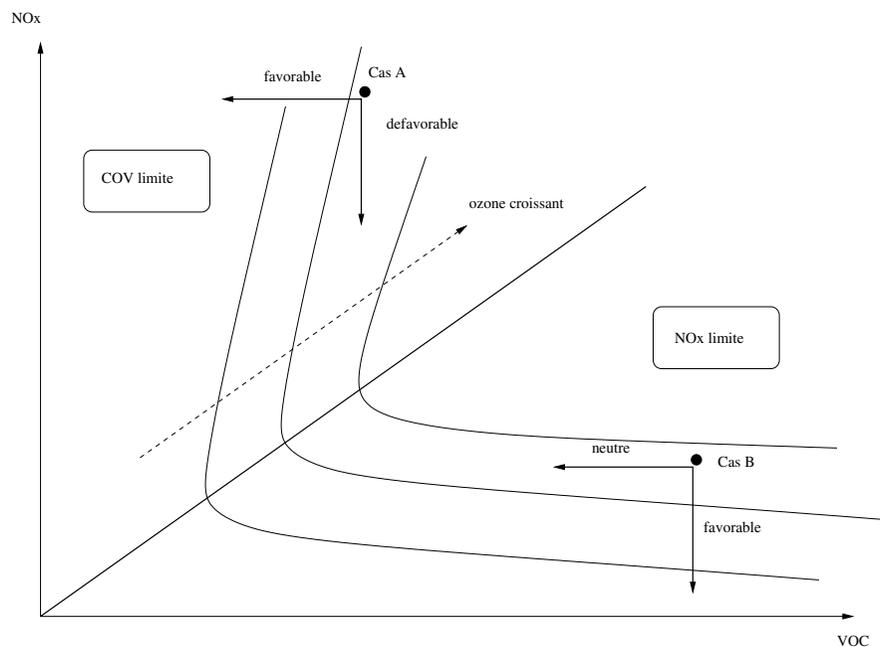
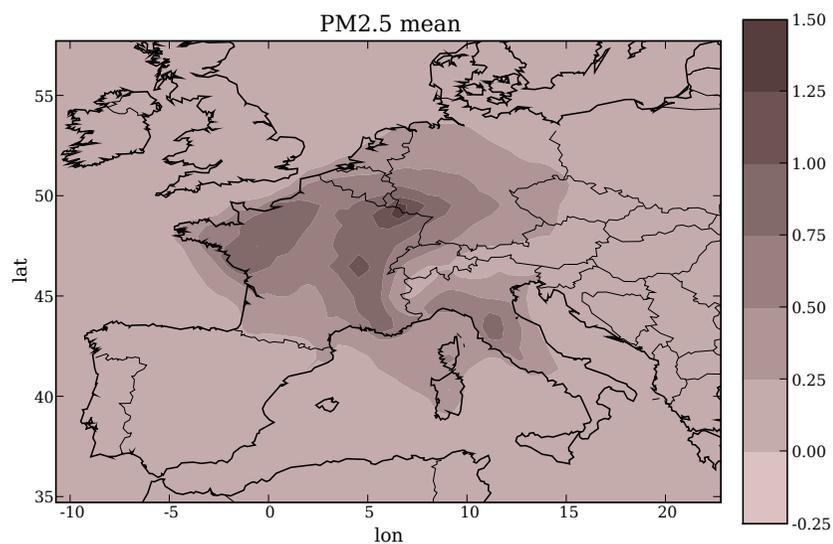
 Film

D. QUÉLO, M. KRISTA, M. BOCQUET, O. ISNARD, Y. MINIER, AND B. SPORTISSE, *Validation of the POLYPHEMUS system : the ETEX, Chernobyl and Algeciras cases*, *Atmos. Env.*, (2007). doi :[10.1016/j.atmosenv.2007.02.035](https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2007.02.035)

Etude d'impact

Simulation Polyphemus de l'impact des émissions françaises EDF (année 2001) dans le cadre du processus NEC/CAFE (National Emission Ceilings/Clean Air For Europe)

Crédit : Yelva Roustan (CEREA).



- Comment générer de belles couleurs ?

Modèles de Chimie-Transport (CTM)

Equation de dispersion réactive : EDP d'advection-diffusion-réaction

- Evolution en temps pour la concentration en phase gazeuse c_i :

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \underbrace{\operatorname{div}(V c_i)}_{\text{advection}} = \underbrace{\operatorname{div}\left(\rho K \nabla \frac{c_i}{\rho}\right)}_{\text{diffusion turbulente}} + \underbrace{\chi_i(c, t)}_{\text{chimie gazeuse}} - \underbrace{\Lambda_i(x, t) c_i}_{\text{lessivage}} + \underbrace{S_i(x, t)}_{\text{sources volumiques}}$$

- Conditions aux limites au sol :

$$-K \nabla c_i \cdot n = \underbrace{E_i(x, t)}_{\text{émissions surfaciques}} - \underbrace{v_i^{dep}(x, t) c_i}_{\text{dépôt sec}}$$

- Conditions aux limites latérales (si domaine à aire limitée).

Quels enjeux mathématiques et numériques ?

Interactions entre échelles et représentation des processus non résolus

Analyse numérique pour les processus réactifs multiphasiques

Méthodes avancées : couplage aux données mesurées et traitement de l'incertitude

B. SPORTISSE, *A review of current issues in air pollution modeling and simulation*, Journal of Computational Geosciences, (2007).

doi :10.1007/s10596-006-9036-4

Paramétrisation sous-maille

Echelles microphysiques

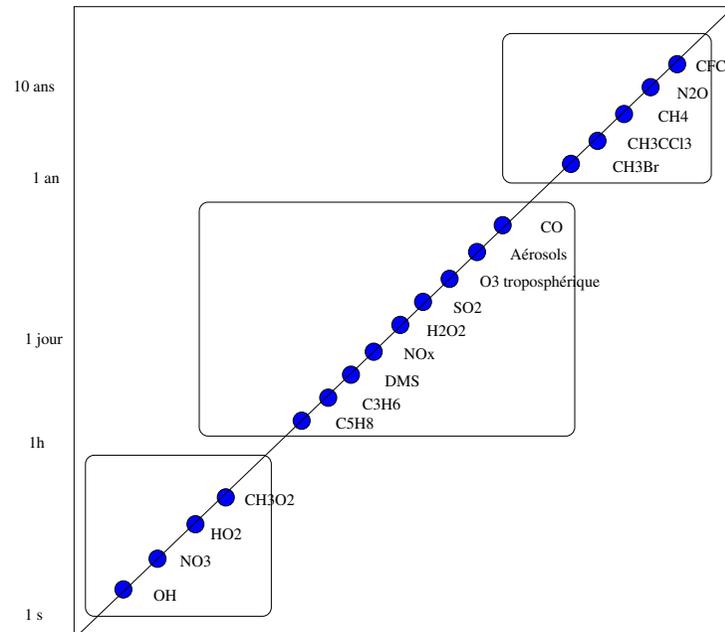
- Aérosols (non minéraux) : 1 nm - 10 μm .
- Gouttes de nuage : 1 μm - 100 μm .
- Gouttes de pluie : 0.01 mm - 0.1 mm.

Echelles numériques (mailles)

- Local (CFD) : 1 m.
- Régional : 1 km.
- Continental : 10-100 km.

Echelles de temps du transport

- Couche Limite Atmosphérique : quelques heures.
- Transport continental : quelques jours.
- Transport transcontinental : 1-2 semaines.
- Mélange hémisphérique : quelques mois.
- Mélange inter-hémisphérique : une année.



Ex. 1 : microphysique

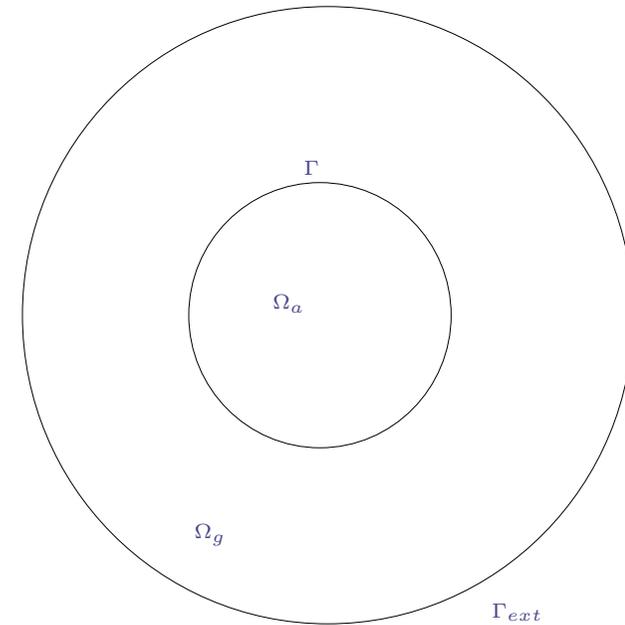
Le nuage est un réacteur chimique.

- Transfert de masse et chimie aqueuse (production du sulfate).
- Phases gazeuse Ω_g et aqueuse Ω_a :

$$\frac{\partial c_g}{\partial t} + D_g \Delta c_g = \chi_g(c_g), \quad \frac{\partial c_a}{\partial t} + D_a \Delta c_a = \chi_a(c_a)$$

avec une loi de transfert à la surface de la goutte Γ .

- La diffusion est beaucoup plus rapide que la chimie : développements asymptotiques D_a et $D_g \rightarrow \infty$.



B. SPORTISSE AND R. DJOUAD, *Mathematical investigation of mass transfer for atmospheric pollutants into a fixed droplet with aqueous chemistry*, J.

Geophys. Res., 108 (2003), p. 4073

B. SPORTISSE AND L. DU BOIS, *Numerical and theoretical investigation of a simplified model for the parameterization of below-cloud scavenging by falling raindrops*, Atmos. Env., 36 (2002), pp. 5719–5727

Ex. 2 : effet de ségrégation/chimie turbulente

Downdraft O_3 (entraînement)/**Updraft** NO (émissions)

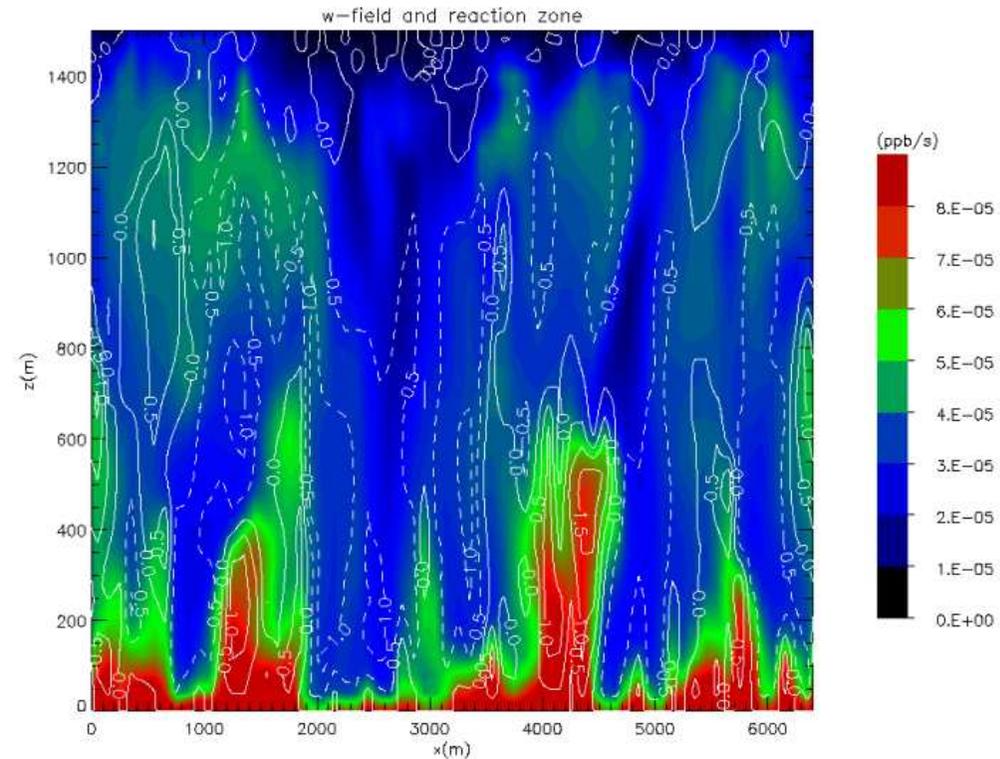
- Réaction de titration $NO + O_3 \rightarrow NO_2$.
- Constante cinétique :

$$\omega = k \langle NO \rangle \langle O_3 \rangle \left(1 + \underbrace{\frac{\langle NO' O_3' \rangle}{\langle NO \rangle \langle O_3 \rangle}}_{I_s} \right)$$

avec $\Psi = \underbrace{\langle \Psi \rangle}_{\text{moyenne}} + \underbrace{\Psi'}_{\text{fluctuation}}$.

Schéma de fermeture

- Tous les modèles : $I_s = 0$.
- Comment modéliser l'intensité de ségrégation $I_s \in [-1, 0]$?



Crédit : J.F. Vinuesa (JRC)

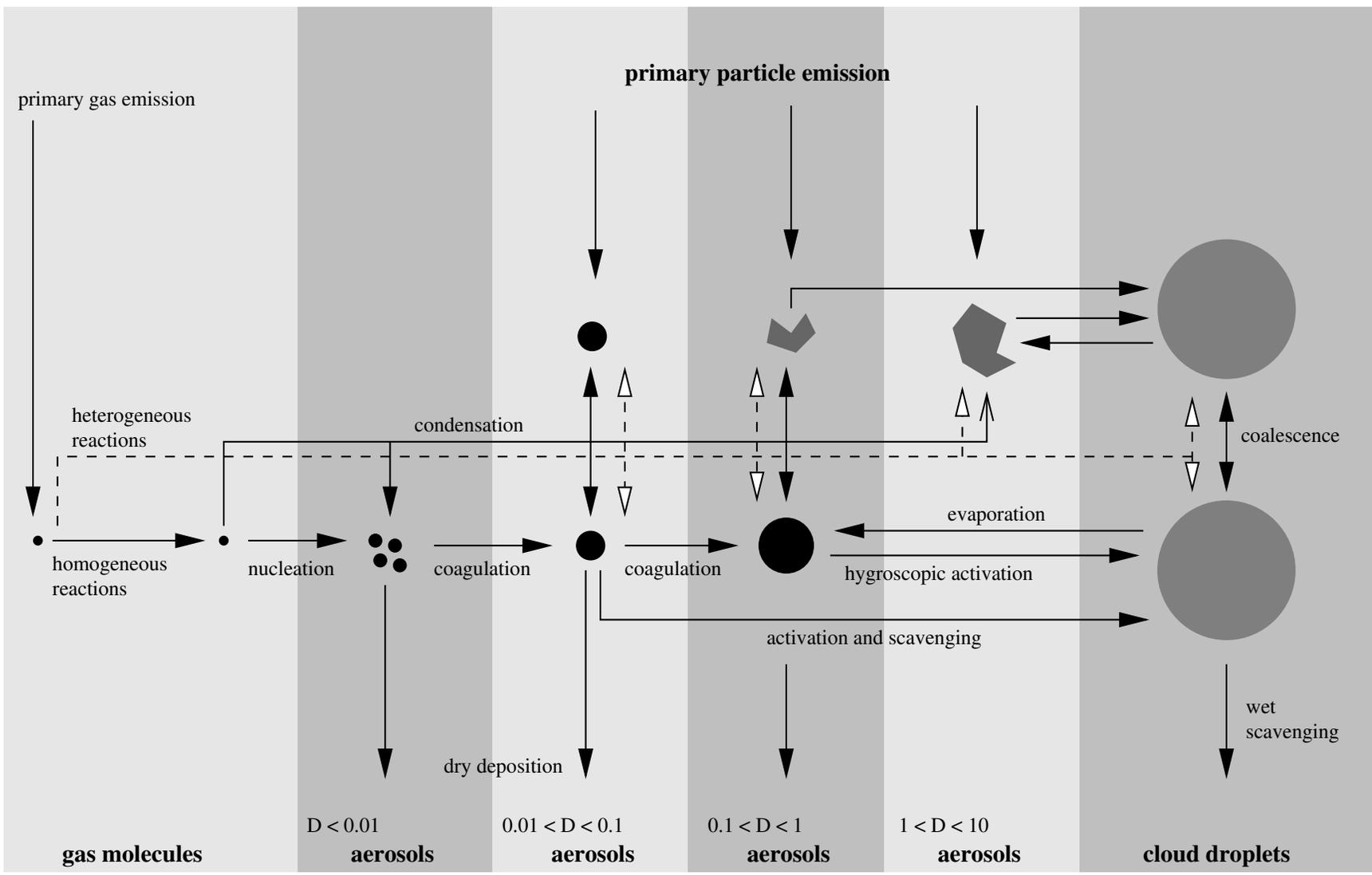
Quels enjeux mathématiques et numériques ?

Interactions entre échelles et représentation des processus non résolus

Analyse numérique pour les processus réactifs multiphasiques

Méthodes avancées : couplage aux données mesurées et traitement de l'incertitude

Dynamique des aérosols



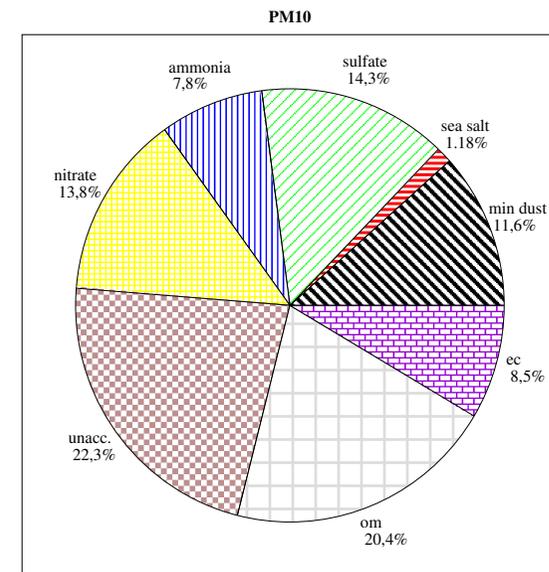
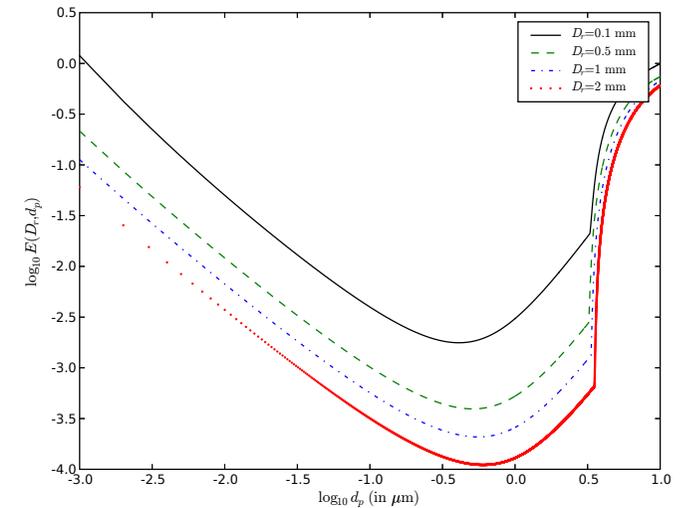
Analyse numérique/processus multiphasiques

Dimension du système (par maille de calcul)

- Passif : une espèce.
- Gazeux : 50-100 espèces gazeuses (schémas agrégés).
- Diphasique : 10-50 espèces dissoutes.
- Aérosols : 20 espèces par classe de taille par famille d'aérosol considérée (mélange interne).
Typiquement : $20 \times 10 \simeq 200$ variables (une famille).

Dispersion des échelles de temps (raideur/stiffness)

- Des radicaux ($\epsilon = 10^{-10}$ s) aux espèces inertes.
- Réduction d'ordre : $\Delta t / \epsilon \rightarrow \infty$.



General Dynamics Equation (GDE)

Distribution en nombre (m : masse de l'aérosol)

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t}(m, t) = & \underbrace{\frac{1}{2} \int_{m_0}^{m-m_0} K(u, m-u)n(u, t)n(m-u, t) du}_{\text{gain coagulation}} - \underbrace{n(m, t) \int_{m_0}^{\infty} K(m, u)n(u, t) du}_{\text{perte coagulation}} \\ & - \underbrace{\frac{\partial(I_0 n)}{\partial m}}_{\text{cond./évap.}} + \underbrace{\delta(m_0, m)J_0(t)}_{\text{nucléation}} \end{aligned}$$

Simulation numérique

- Problème hyperbolique.
- Equilibre thermodynamique (discontinuités : transition de phase & hystérésis).
- Résolution en taille grossière en 3D.

E. DEBRY AND B. SPORTISSE, *Numerical simulation of the General Dynamics Equation (GDE) for aerosols with two collocation methods*, *Appl. Numer. Math.*, (2006). doi :10.1016/j.apnum.2006.08.002

———, *Solving aerosol coagulation with size-binning methods*, *Appl. Numer. Math.*, (2006). doi :10.1016/j.apnum.2006.09.007

A ce stade ...



Quels enjeux mathématiques et numériques ?

Interactions entre échelles et représentation des processus non résolus

Analyse numérique pour les processus réactifs multiphasiques

Méthodes avancées : couplage aux données mesurées et traitement de l'incertitude

Incertitudes dans les CTM

Différentes sources

- Données d'entrées : émissions, météo, LUC.
- Paramétrisations physiques.
- Numérique (schémas & discrétisation).
- Bugs.

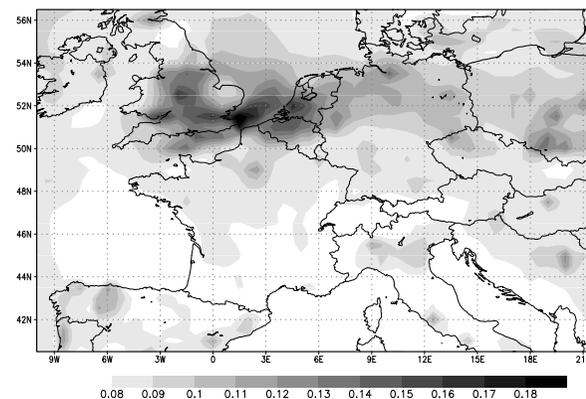
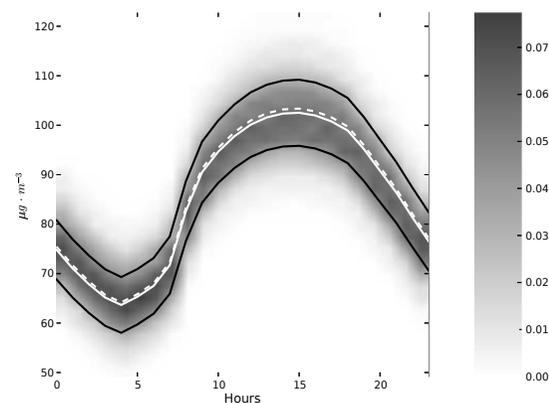
Incertitudes sur les données d'entrée

Donnée	Incertitude
Atténuation nuageuse	$\pm 30\%$
Vitesses de dépôt (O_3 et NO_2)	$\pm 30\%$
Conditions aux limites (O_3)	$\pm 20\%$
Émissions anthropogéniques	$\pm 50\%$
Émissions biogéniques	$\pm 100\%$
Constantes photolytiques	$\pm 30\%$

V. MALLET AND B. SPORTISSE, *Uncertainty in a chemistry-transport model due to physical parameterizations and numerical approximations : an ensemble approach applied to ozone modeling*, J. Geophys. Res., 111 (2006)

Monte Carlo : moyenne et variance (ozone)

Crédit : Vivien Mallet (CEREA/CLIME)



Assimilation de données/modélisation inverse

Réseaux de mesures

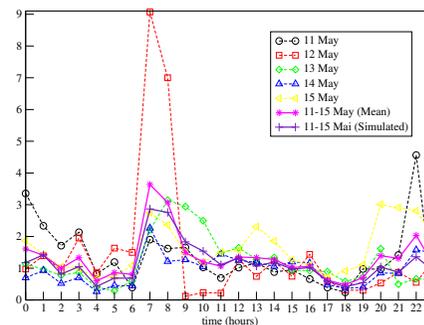
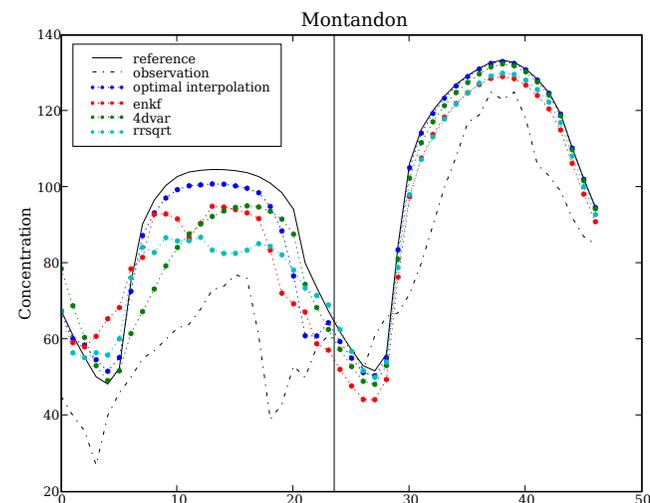
- Capteurs terrestres.
- Données satellitaires.

Spécificités

- Plus un problème aux conditions limites (et forçages) qu'aux conditions initiales.
- Modélisation inverse.
- Dimension.

D. QUÉLO, V. MALLET, AND B. SPORTISSE, *Inverse modeling of NO_x emissions at regional scale over Northern France. Preliminary investigation of the second-order sensitivity*, J. Geophys. Res., 110 (2005)

Assimilation de données ozone (Crédit : Lin Wu/CEREA/GLIME)



Modélisation inverse émissions

Sensibilité de second-ordre

- Paramètres incertains mais non contrôlés.
- Optimisation de réseau.

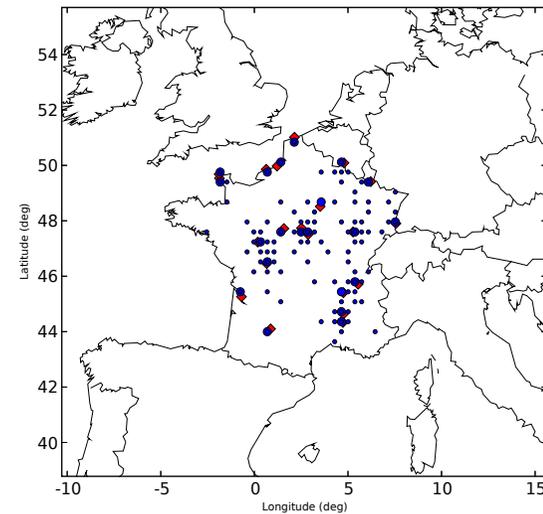
Cas linéaire (radionucléides)

- Localisation de source : Film

M. BOCQUET, *High resolution reconstruction of a tracer dispersion event : application to ETEX*, Quart. J. Roy. Meteor. Soc., (2006)

Network design

Crédit : Marc Bocquet/CEREA/CLIME



Prévision d'ensemble

Peut-on avoir confiance en un modèle ?

- Peu d'observables.
- Prévision versus impact.

Ensemble \mathcal{E} de modèles : $\{M_m(\cdot)\}_m$

- Moyenne d'ensemble :

$$EM(\cdot) = \frac{1}{|\mathcal{E}|} \sum_{M \in \mathcal{E}} M_m(\cdot)$$

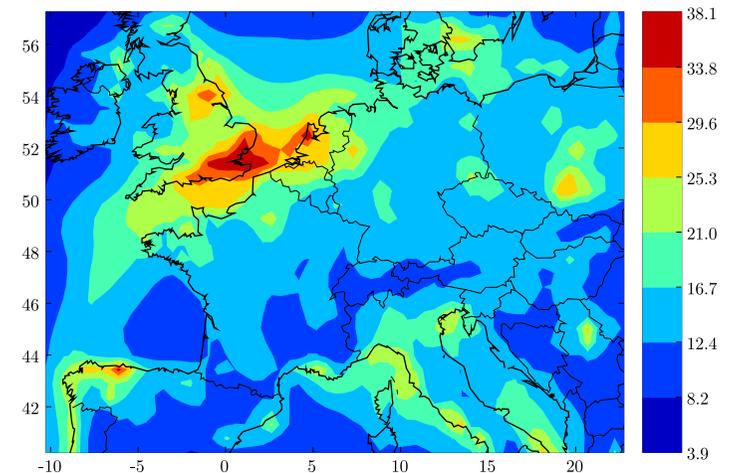
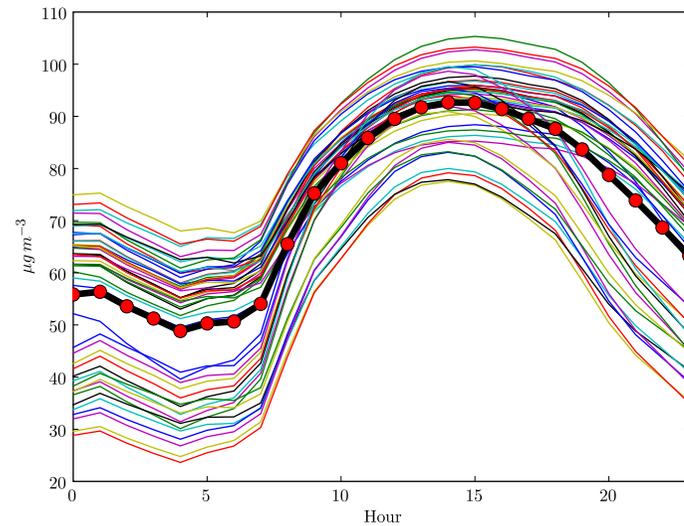
- Super-ensemble :

$$ELS(\cdot) = \sum_m \alpha_m M_m(\cdot)$$

avec des poids α_m à prédire et à corriger en fonction des observations.

V. MALLET AND B. SPORTISSE, *Ensemble-based air quality forecasts : a multi-model approach applied to ozone*, J. Geophys. Res., 111 (2006), p. 18302

Ensemble & incertitude relative (run Polyphemus ozone)



Conclusion

Hot topics

- **Résolution spatiale** : vers le kilomètre.
→ paramétrisation, calcul parallèle et maillage non structuré.
- **Résolution chimique** : aérosols organiques secondaires ($\times 2$), mélange externe ($\times 10$).
→ schémas numériques et optimisation.
- **Modélisation intégrée** : de l'activité économique aux impacts.
→ réduction de modèles.
- **Incertitudes** : mono-modèle versus multi-modèles.
→ calcul scientifique, contrôle stochastique et statistiques.

Mathématiques et environnement

- Proximité très forte aux applications.
- Système jouet versus système réel (dimension).