

# **Modélisation numérique de la pollution atmosphérique : Quels modèles pour quels usages ?**

Christian Seigneur

Cerea

<http://cerea.enpc.fr>

# La modélisation numérique :

## Usage et modèles

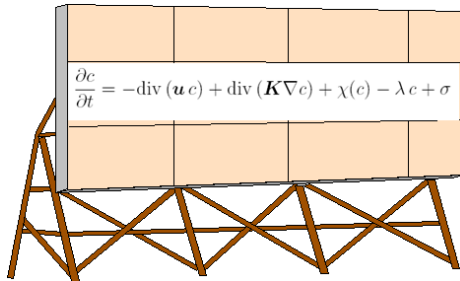
---



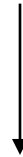
Modèle conceptuel

# La modélisation numérique :

## Usage et modèles



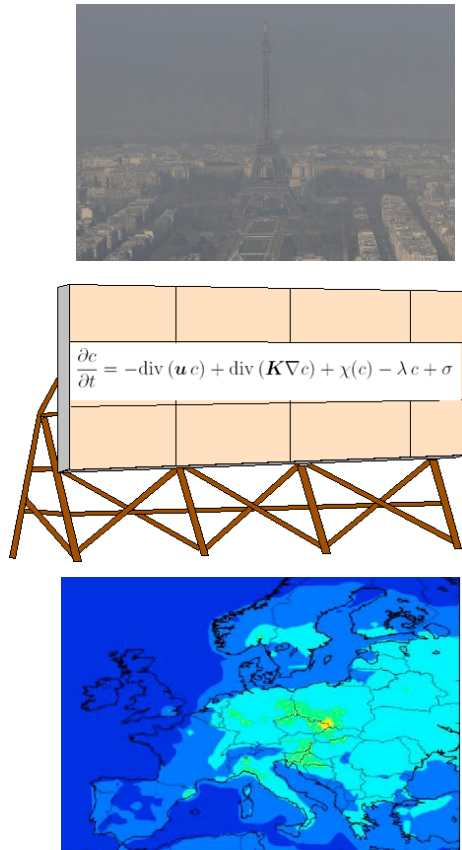
Modèle conceptuel



Modèle mathématique

# La modélisation numérique :

## Usage et modèles



Modèle conceptuel



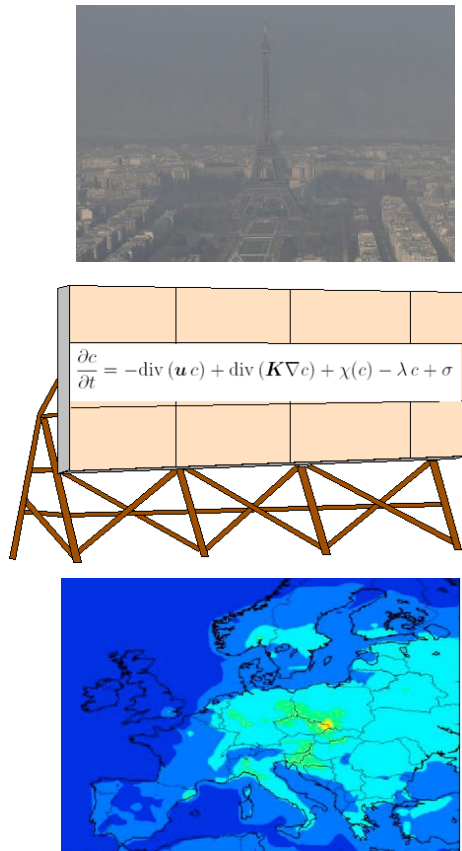
Modèle mathématique



Modèle numérique

# La modélisation numérique :

## Usage et modèles



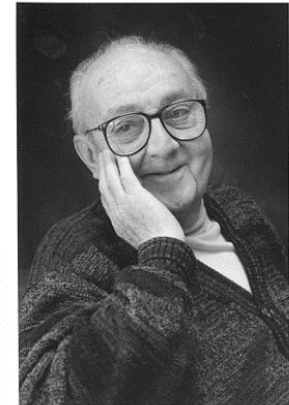
Modèle conceptuel



Modèle mathématique



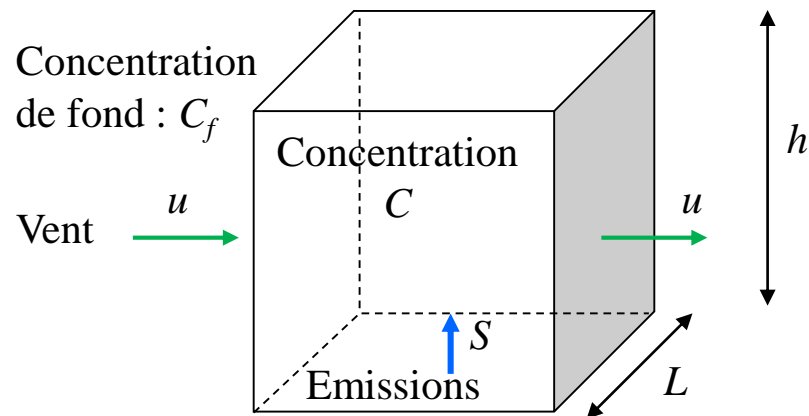
Modèle numérique



George E. P. Box  
(1919 – 2013)

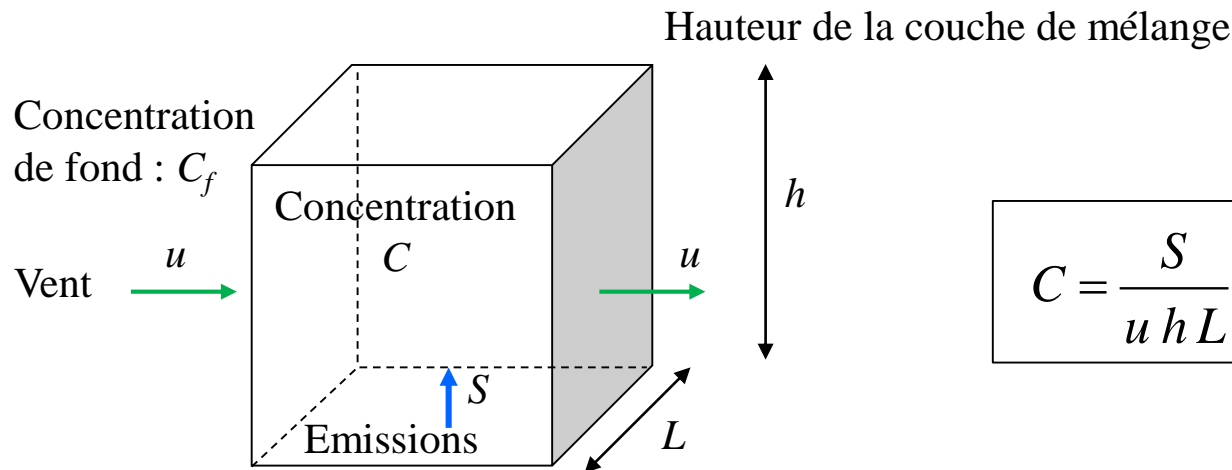
« Tous les modèles sont faux, mais certains sont utiles »

# Un modèle simple : Le modèle boîte



# Le modèle boîte

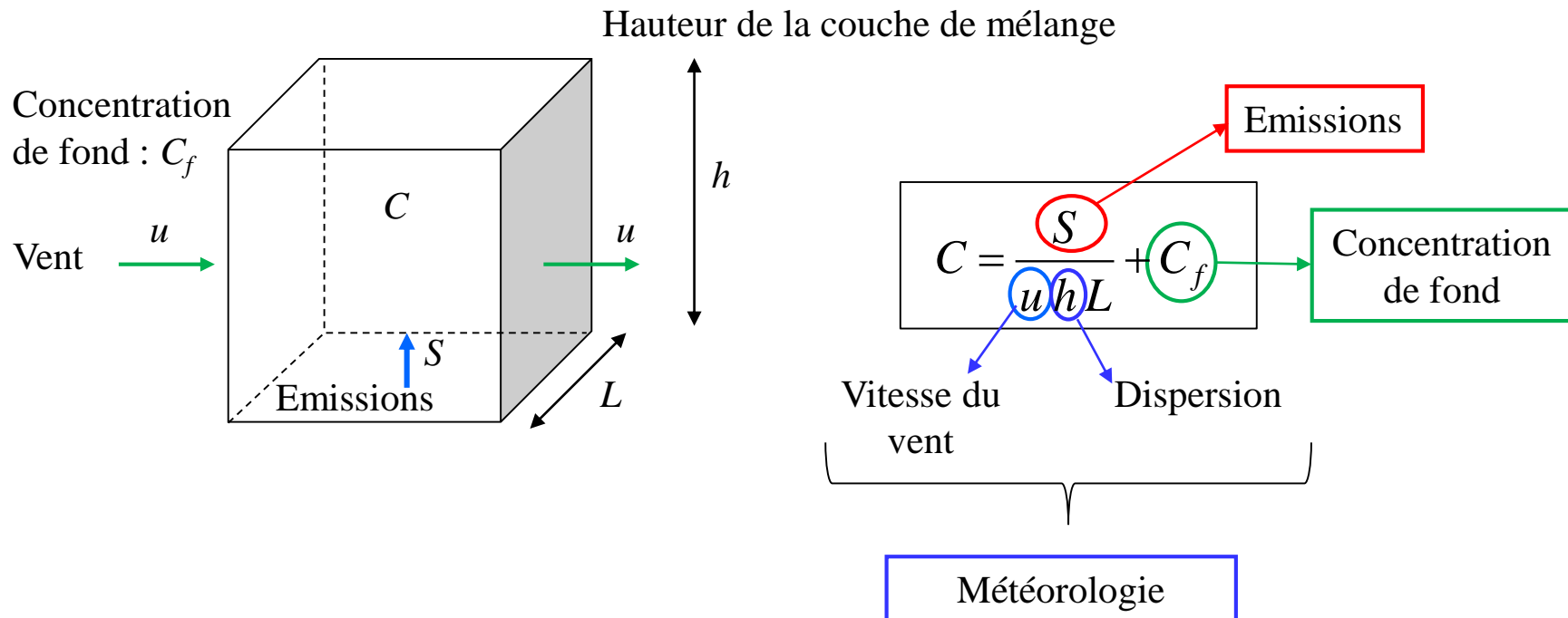
Le modèle boîte :  
(1) Une équation



$$C = \frac{S}{u h L} + C_f$$

# Le modèle boîte

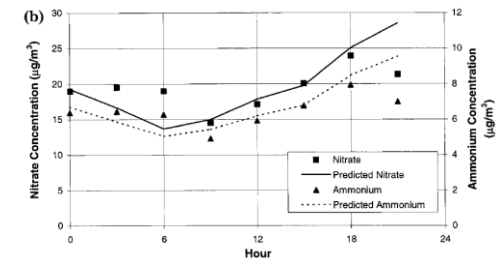
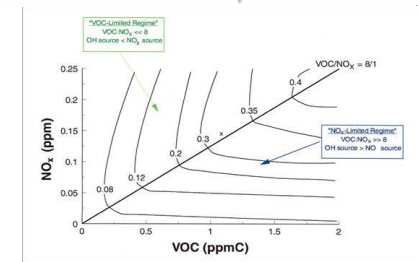
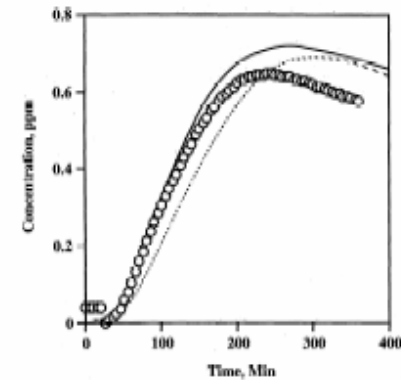
Le modèle boîte :  
(1) Une équation  
(2) Des données d'entrée



# Le modèle boîte :

## Quels usages ?

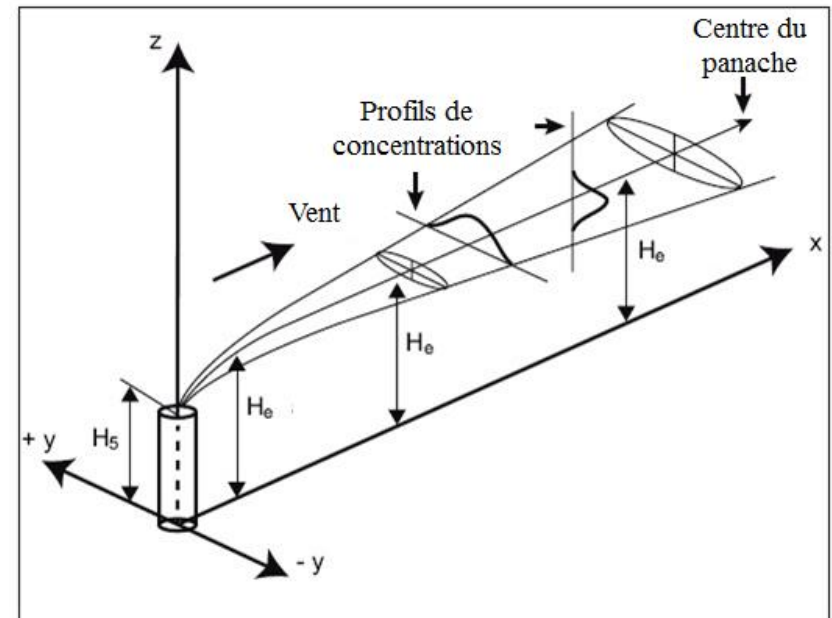
- Simulations numériques des expériences en chambre de simulation pour tester les mécanismes chimiques
- Diagrammes EKMA : Outil majeur des années 1980 pour les stratégies de réduction d'ozone
- Simulations régionales d'investigation préliminaire



# La pollution atmosphérique locale :

## Le panache d'une cheminée

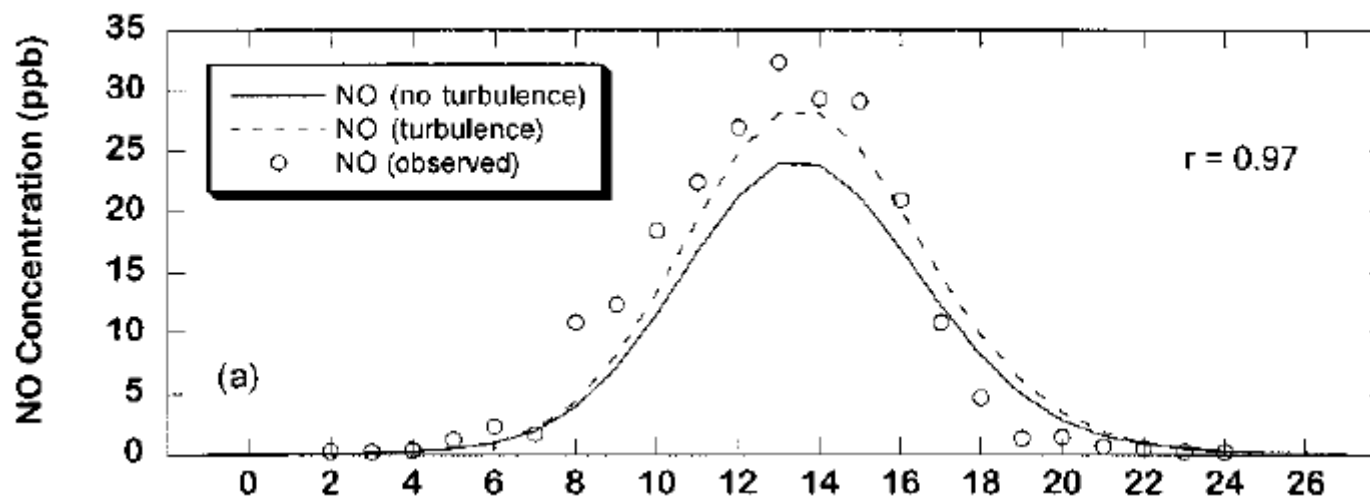
Le modèle de panache gaussien



# Le modèle de panache gaussien

## Une représentation idéalisée

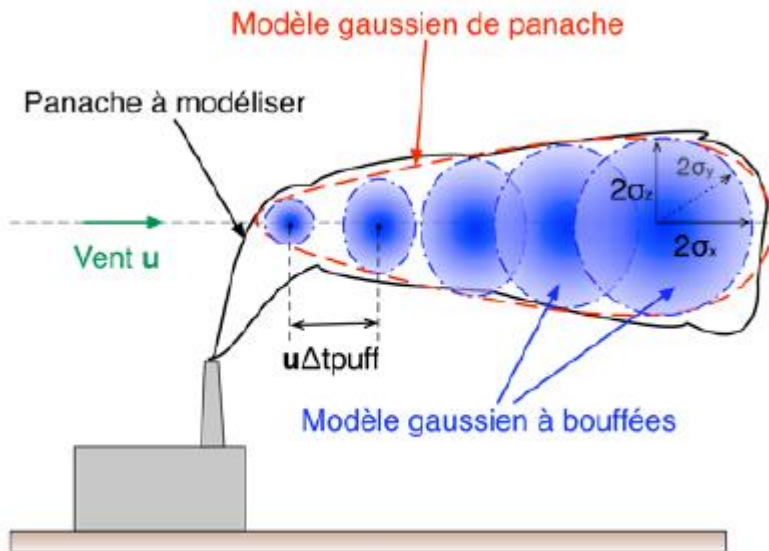
Mesures et représentation gaussienne  
des concentrations de NO  
dans un panache de centrale électrique au charbon



Source : Karamachandani et al., *Environ. Sci. Technol.* (2002)

# Le modèle à bouffées

## Une représentation plus réaliste des panaches

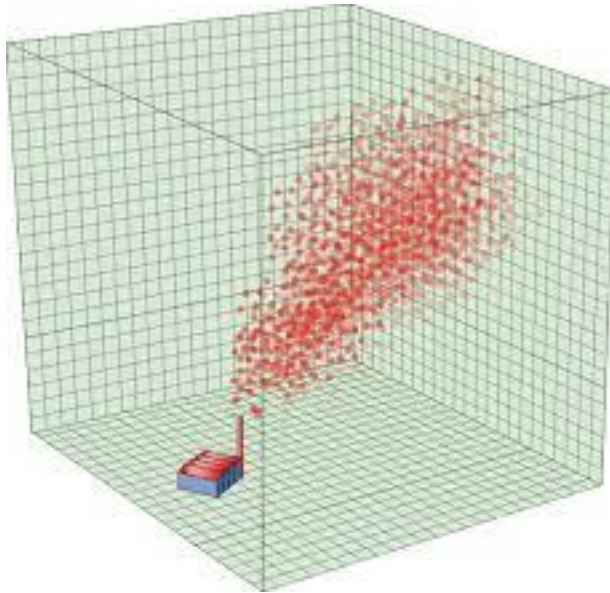


- Le panache est discrétisé en un ensemble de bouffées émises de la source
- Chaque bouffée peut suivre un parcours distinct selon les vents et la turbulence
- Une chimie complexe peut être traitée dans le volume de chaque bouffée

Les modèles à bouffées permettent de suivre les panaches sur de longues distances et de traiter des transformations chimiques complexes (formation de particules...)

# Le modèle à « particules »

## Une représentation plus réaliste de la dispersion

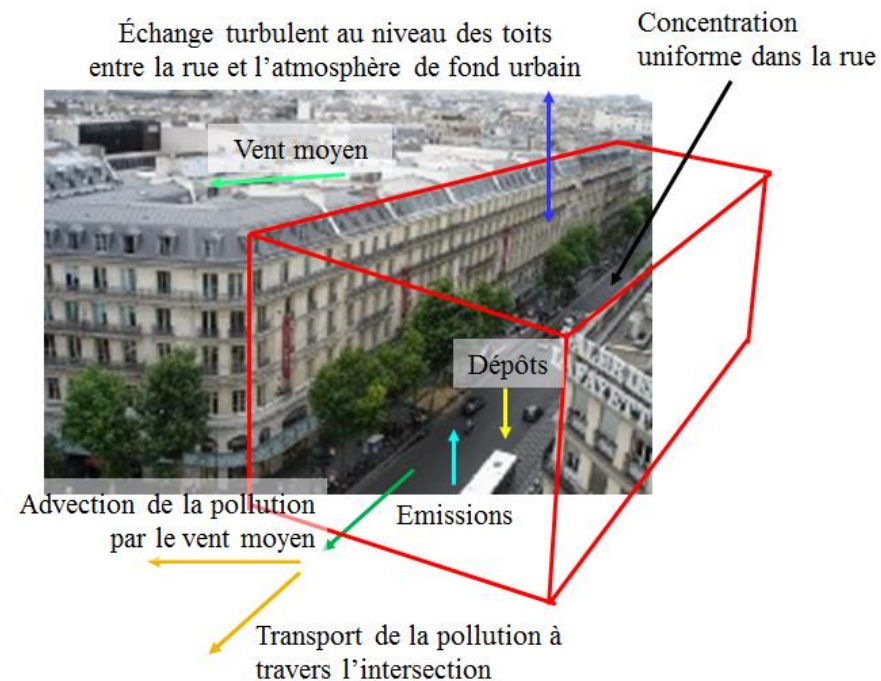


- Les « particules » sont ici des particules numériques qui permettent de simuler la dispersion atmosphérique
- Ils représentent bien la dispersion atmosphérique à partir de données d'entrée météorologiques
- Ils ne sont pas adaptés pour simuler une chimie atmosphérique complexe

Les modèles à « particules » permettent de suivre les panaches sur de longues distances et de traiter des configurations complexes (bâti, relief...)

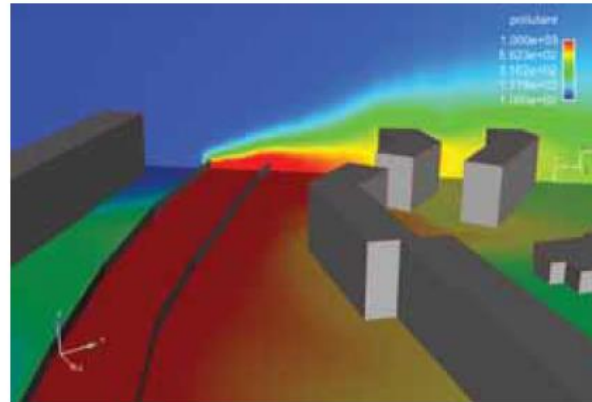
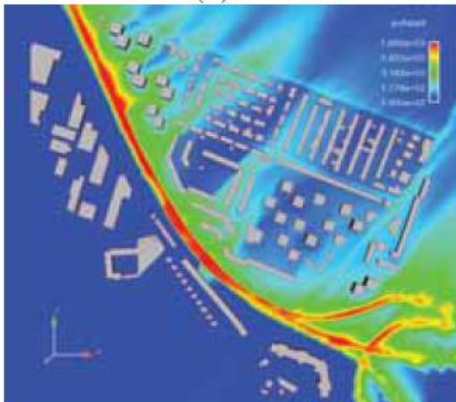
# Les modèles de rue-canyon

- Ils peuvent être basés sur un modèle boîte pour représenter les concentrations dans une rue
- Certains modèles différencient les zones de recirculation et de ventilation dans la rue
- Le traitement du transport des polluants dans le réseau de rues peut prendre en compte la variabilité de la direction du vent



# Modèles de mécanique des fluides

- Les modèles de mécanique des fluides (CFD)
  - Résolution de l'écoulement (vent, turbulence...) très fine (traitement explicite des obstacles)
  - Transformations chimiques possibles
  - Temps de calcul prohibitifs pour des périodes et domaines conséquents

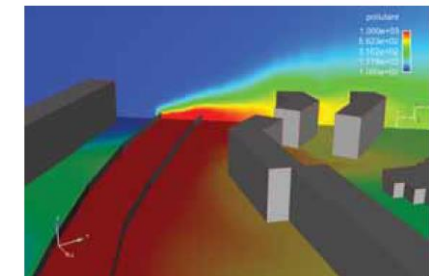
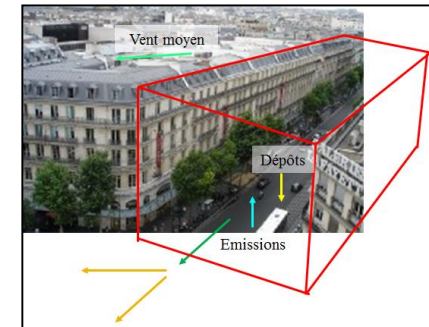
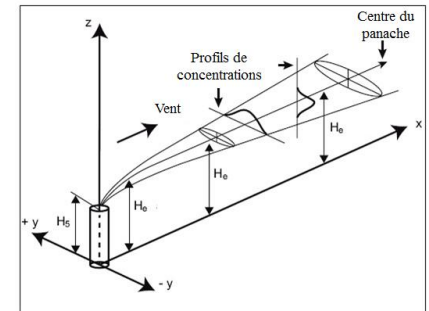


Simulation d'un quartier à Toulouse ; Source : Gao et al., Cerea, 2017.

# Les modèles de pollution locale

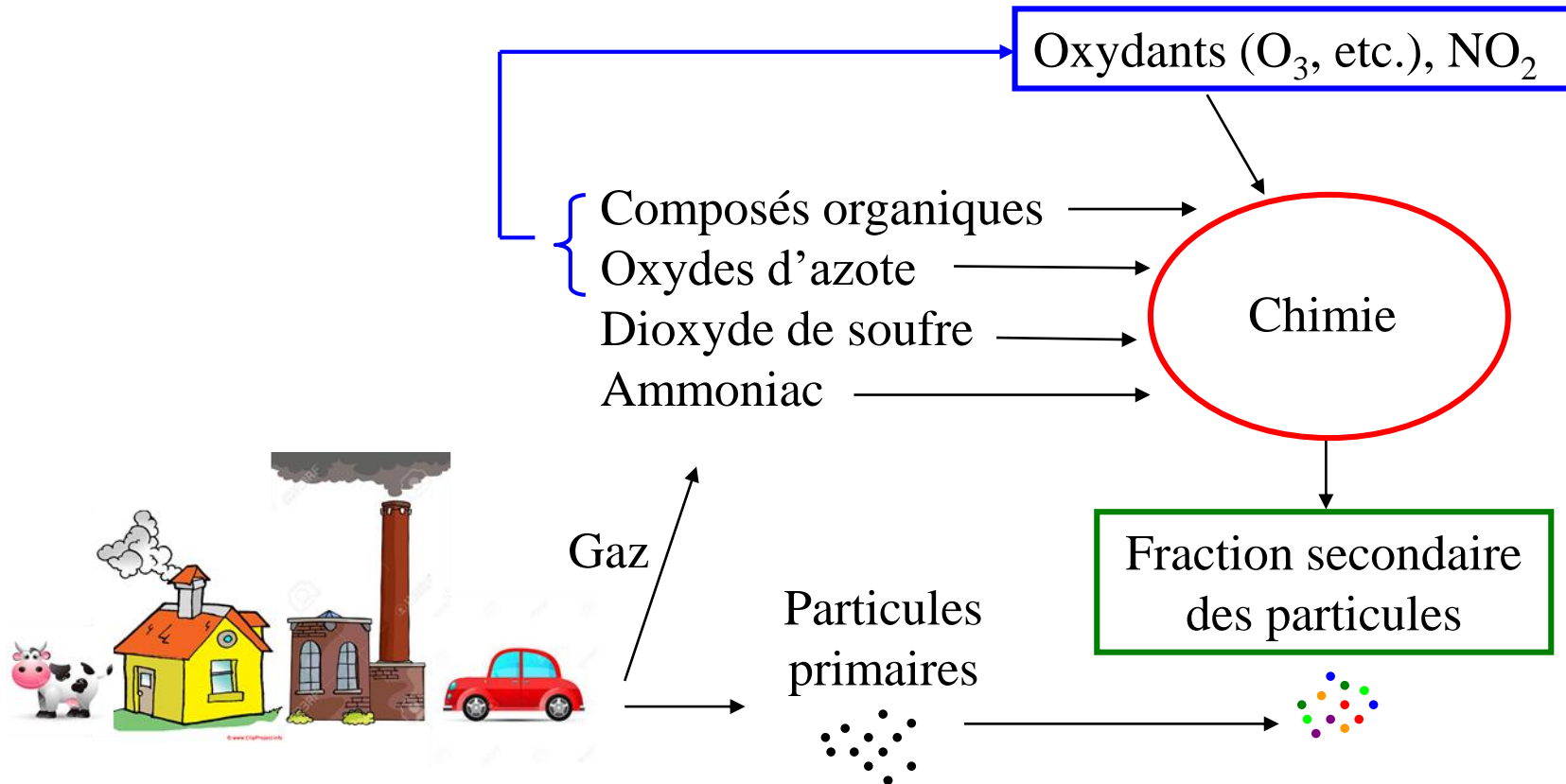
## Quels modèles pour quels usages ?

- Les modèles de panaches gaussiens sont appropriés pour les impacts locaux de sources ponctuelles (cheminées), linéiques (routes), surfaciques et volumiques (sites industriels), mais le nombre de sources est limité
- Les modèles de rues-canyons sont utiles pour estimer les concentrations de polluants à l'échelle de la rue, mais ils ne calculent pas (ou mal) la pollution urbaine de fond
- Les modèles de CFD peuvent traiter des configurations complexes (relief, bâti...), mais les coûts de calcul sont élevés

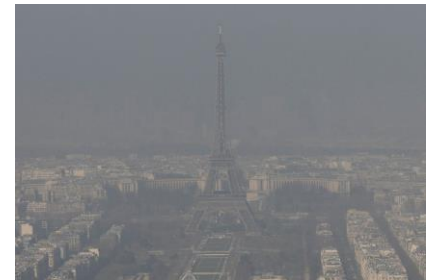
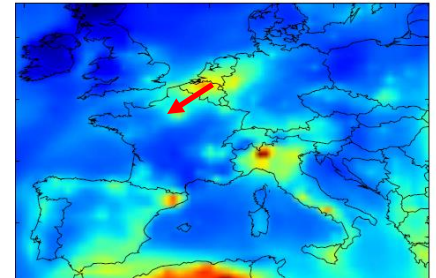
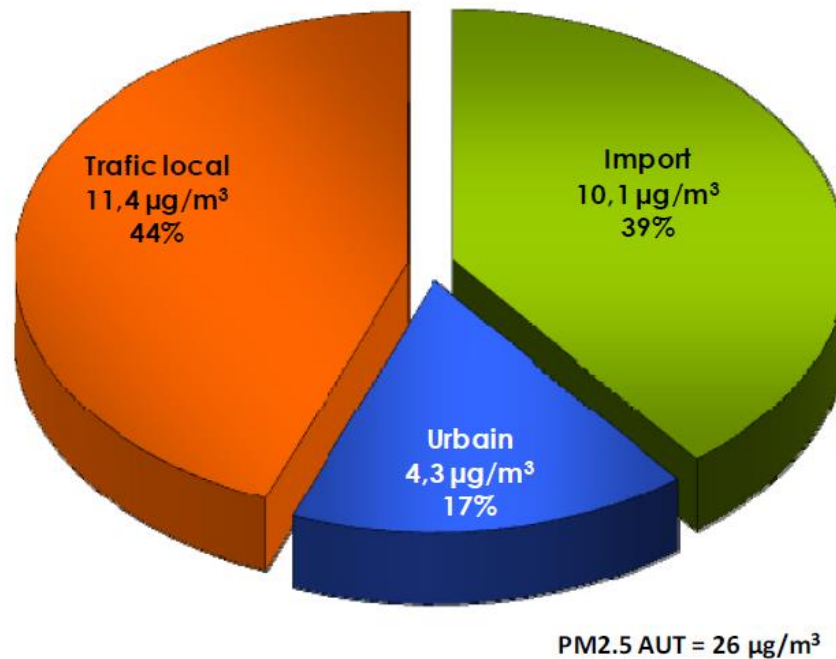


# Ozone, dioxyde d'azote et particules fines

## Un système chimique complexe



# La pollution atmosphérique : Un phénomène multiéchelle



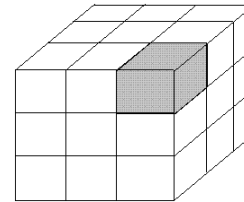
Concentrations annuelles de particules fines ( $\text{PM}_{2.5}$ )  
près du boulevard périphérique à Paris :  
(Source : Airparif, 2011)

# Les modèles de chimie-transport (CTM) :

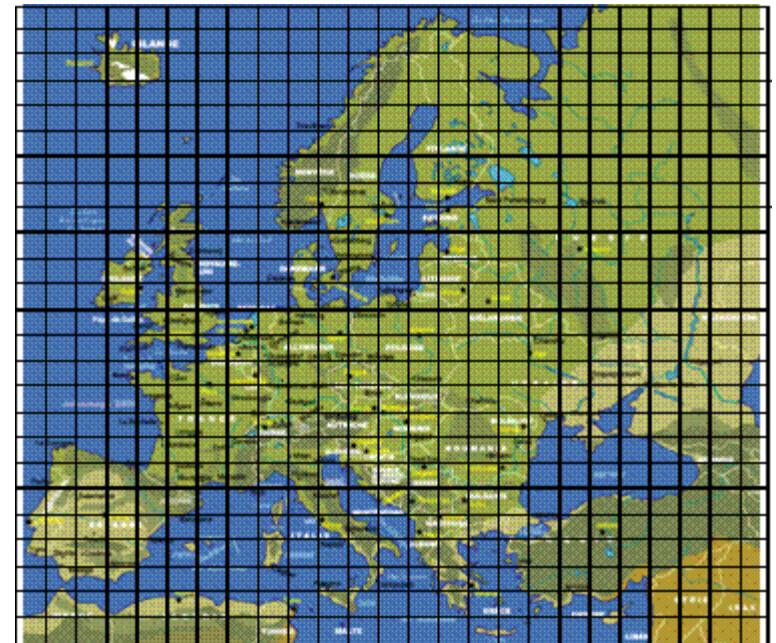
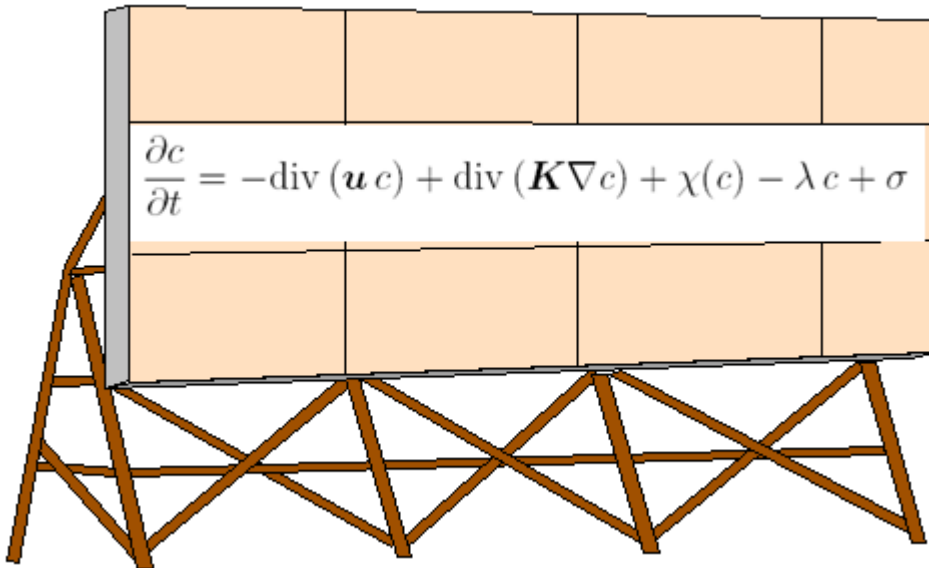
## Chimie et transport à longue distance

Modèle mathématique

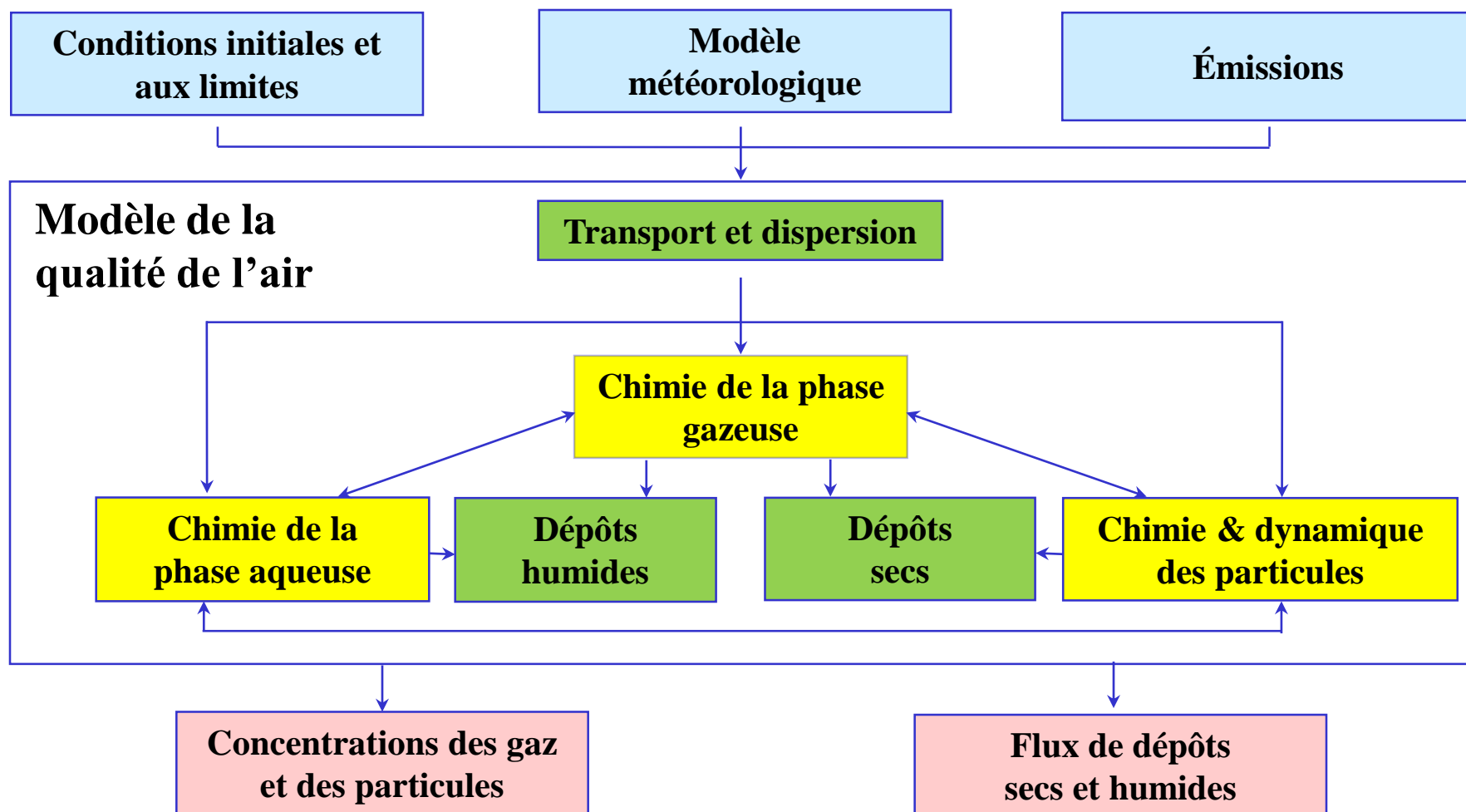
$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\text{div}(\mathbf{u}c) + \text{div}(\mathbf{K}\nabla c) + \chi(c) - \lambda c + \sigma$$



Solution numérique  
dans un maillage 3D

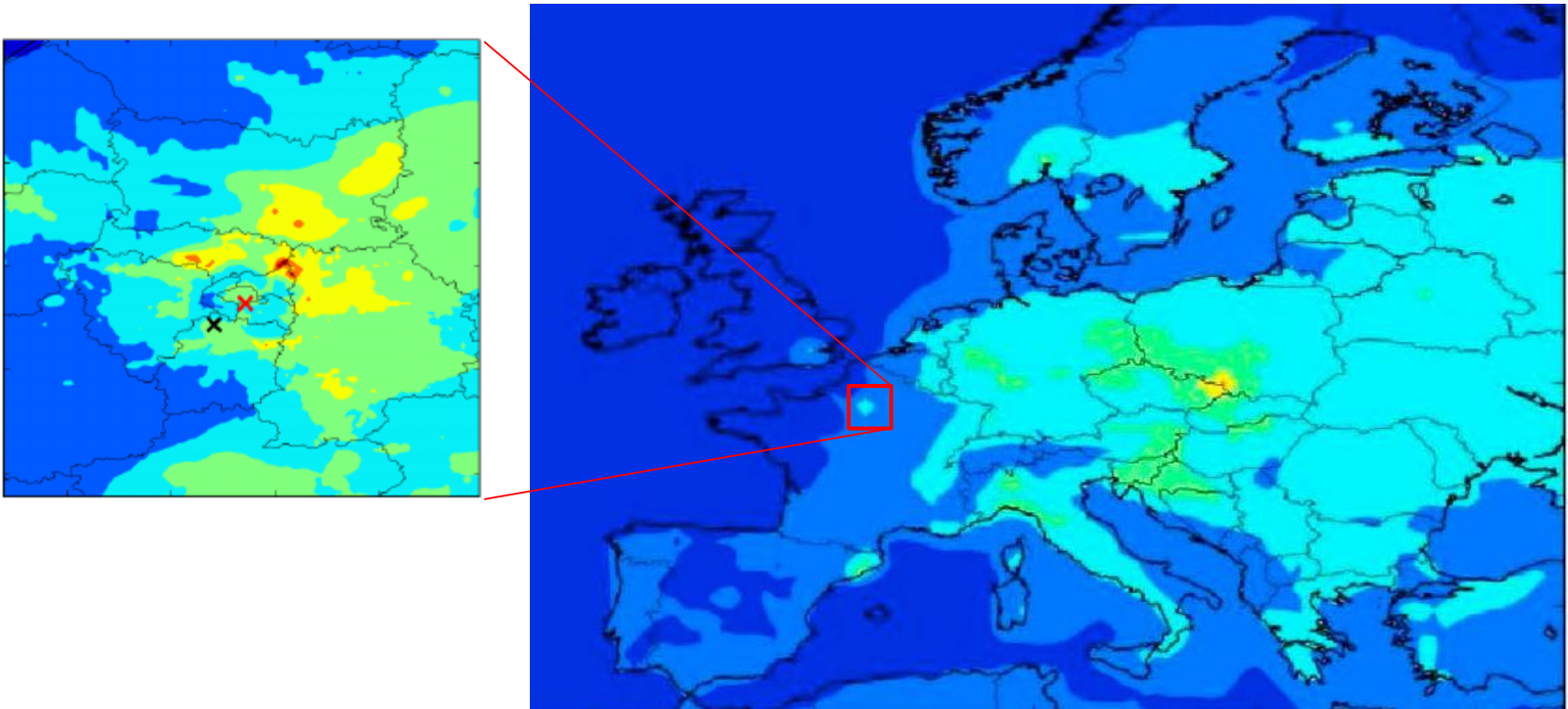


# Les modèles de chimie-transport (CTM) : Chimie et transport à longue distance



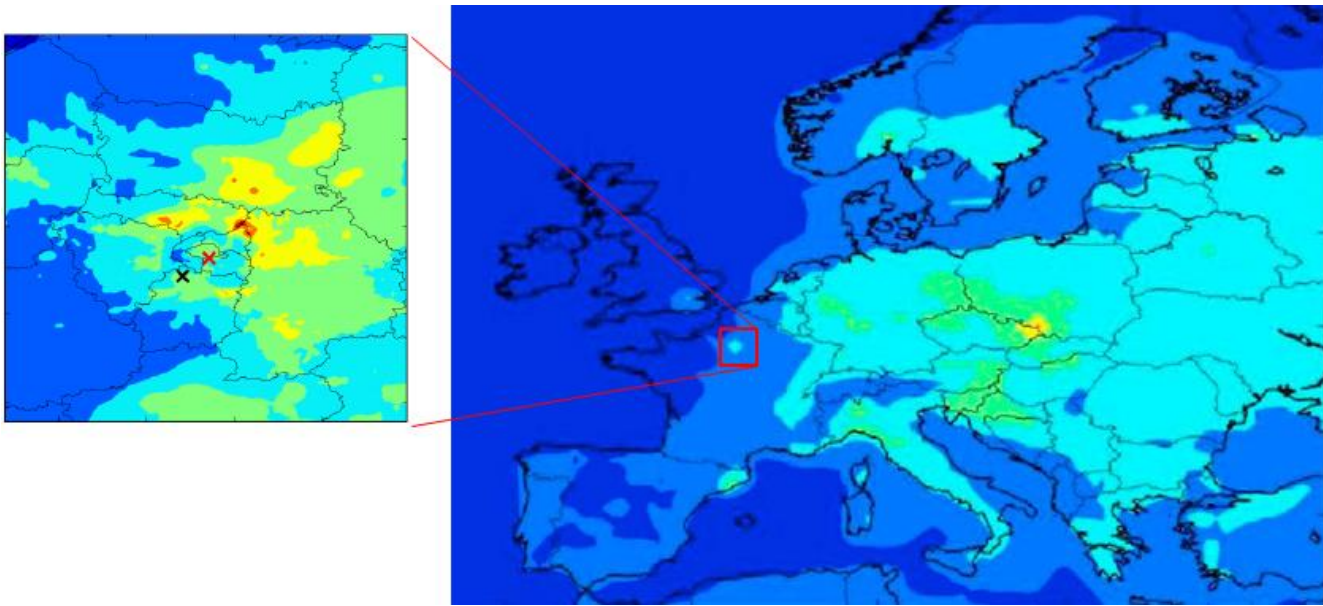
# Chimie et transport à longue distance : Descente d'échelles

Utilisation de domaines imbriqués à différentes résolutions spatiales



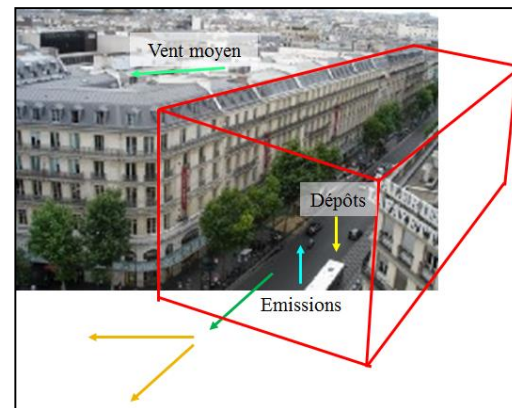
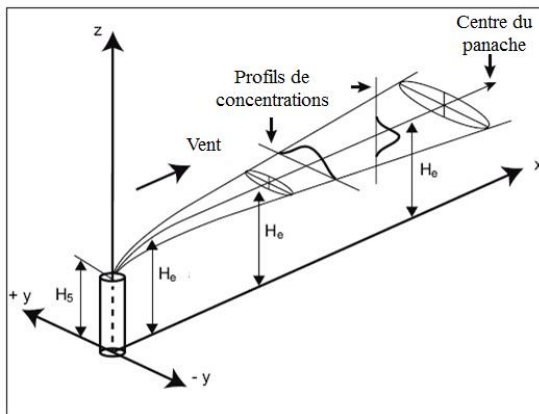
# La pollution atmosphérique : Un phénomène multiéchelle

- Les CTM peuvent simuler le transport atmosphérique de la pollution à longue distance et la pollution de fond (dont les polluants secondaires)



# La pollution atmosphérique : Un phénomène multiéchelle

- Les CTM peuvent simuler le transport atmosphérique de la pollution à longue distance et la pollution de fond (dont les polluants secondaires)
- Les modèles de proximité (panache, rue-canyon) peuvent simuler la pollution près des sources



# La pollution atmosphérique :

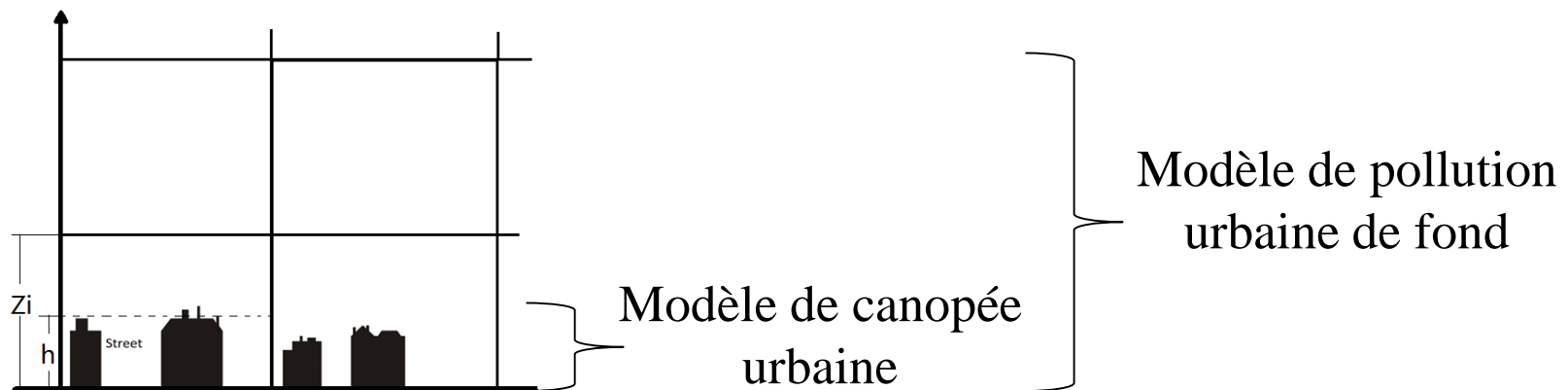
## Un phénomène multiéchelle

---

- Les CTM peuvent simuler le transport atmosphérique de la pollution à longue distance et la pollution de fond (dont les polluants secondaires)
- Les modèles de proximité (modèles de panache, modèles de rue-canyon) peuvent simuler la pollution près des sources
- Les modèles multiéchelles combinent les deux approches dans un même modèle
  - Sites industriels
  - Trafic routier, maritime, aérien
  - Réseau de rues en zone urbaine

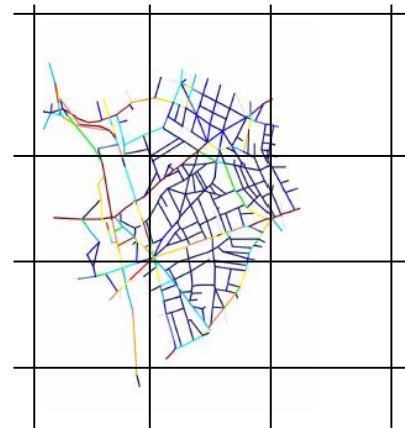
# Modélisation multiéchelle : Pollution urbaine

Coupe verticale



Vue horizontale du réseau  
de rues :

- Réseau du modèle de canopée urbaine
- Maillage du modèle de pollution urbaine de fond

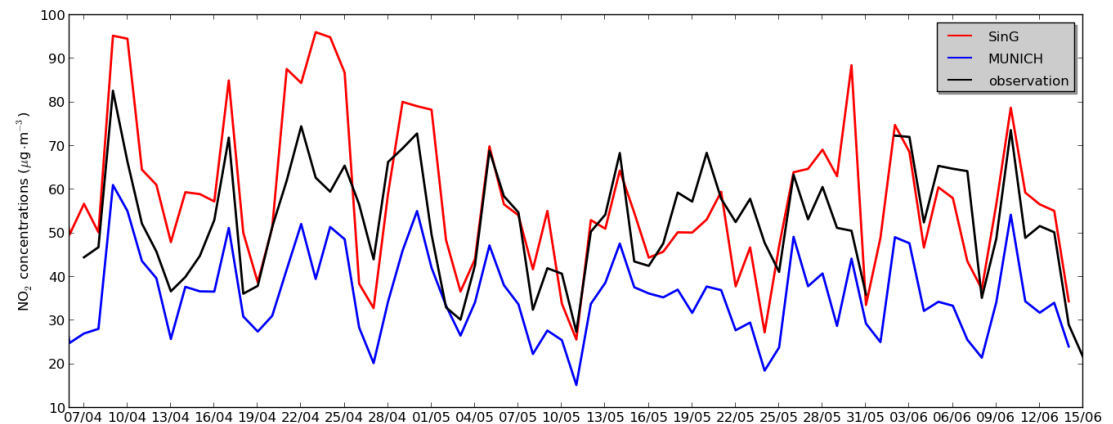


# Modélisation multiéchelle :

## Pollution urbaine

Les modèles multiéchelles permettent d'obtenir une meilleure performance tout en simplifiant la modélisation (une seule simulation au lieu de deux)

Concentrations de  $\text{NO}_2$  sur un boulevard suburbain



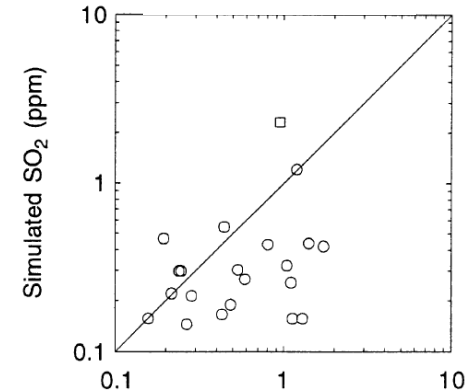
Modèle de rues-canyon : 30% d'erreur moyenne  
Modèle multiéchelle : 17% d'erreur moyenne

# Qu'est ce qu'un bon modèle ?

Critères de performance des modèles :  
biais, erreur, corrélation...

Ces critères varient selon le polluant :

- $\text{SO}_2$  : un facteur 2 la moitié du temps

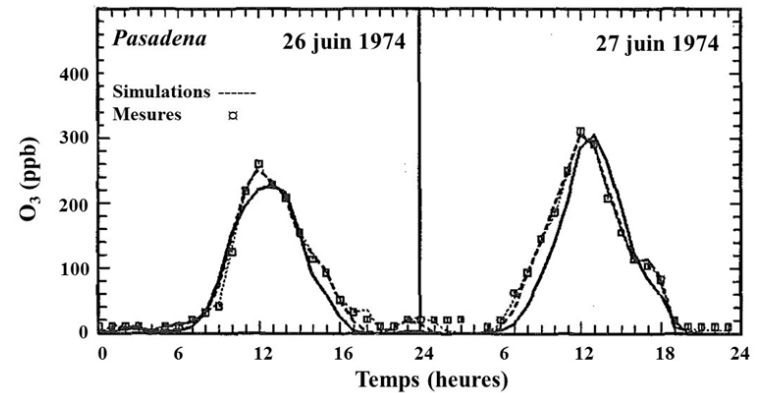


# Qu'est ce qu'un bon modèle ?

Critères de performance des modèles :  
biais, erreur, corrélation...

Ces critères varient selon le polluant :

- $\text{SO}_2$  : un facteur 2 la moitié du temps
- Ozone : 35% d'erreur

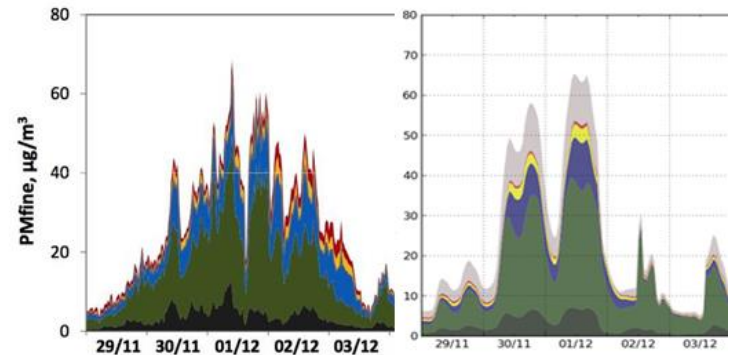


# Qu'est ce qu'un bon modèle ?

Critères de performance des modèles :  
biais, erreur, corrélation...

Ces critères varient selon le polluant :

- $\text{SO}_2$  : un facteur 2 la moitié du temps
- Ozone : 35% d'erreur
- Particules fines : 75% d'erreur pour les composants majeurs et 200% pour les composants mineurs (évaluation diagnostique)



Observations au SIRTa  
(Source : SIRTa/ IPSL –  
LSCE / INERIS)

Simulation  
Polair3D/Polyphemus  
(Source : CEREa)

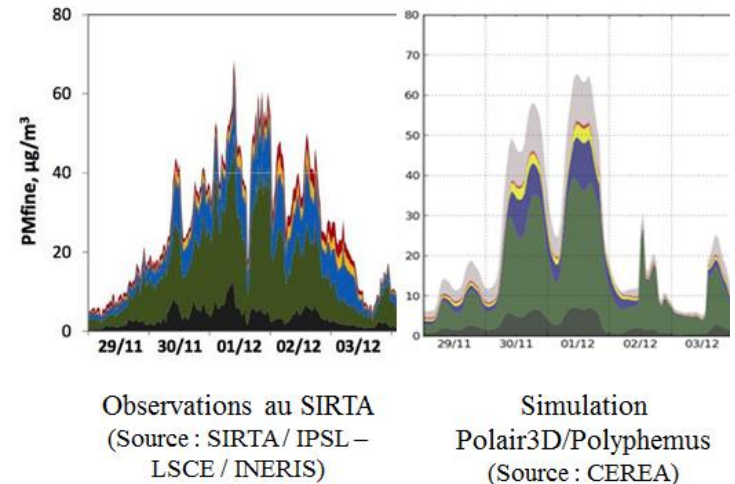
Pic de pollution de novembre-décembre 2016

# Qu'est ce qu'un bon modèle ?

Critères de performance des modèles :  
biais, erreur, corrélation...

Ces critères varient selon le polluant :

- $\text{SO}_2$  : un facteur 2 la moitié du temps
- Ozone : 35% d'erreur
- Particules fines : 75% d'erreur pour les composants majeurs et 200% pour les composants mineurs (évaluation diagnostique)

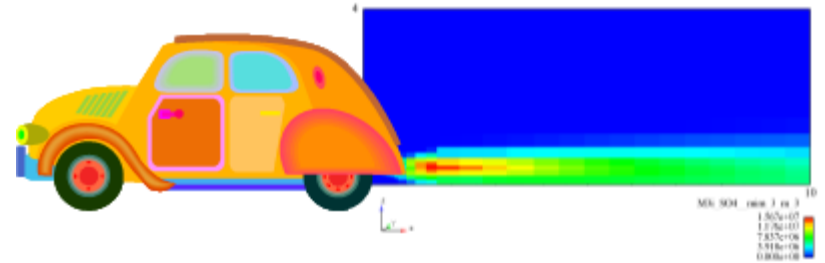


Pic de pollution de novembre-décembre 2016

Le critère de performance est défini à partir de la  
capacité des « bons » modèles à reproduire les mesures

# À quoi sert un modèle ?

Recherche : investigations scientifiques



Simulation de la formation de nanoparticules avec le modèle d'aérosols du CEREIA incorporé dans *Code\_Saturne*

# À quoi sert un modèle ?

---

Recherche : investigations scientifiques

Usages opérationnels :

- Études d'impact pour une nouvelle source de pollution



# À quoi sert un modèle ?

---

Recherche : investigations scientifiques

Usages opérationnels :

- Études d'impact pour une nouvelle source de pollution
- Scénarios de prospective (stratégies de réduction d'émissions polluantes)

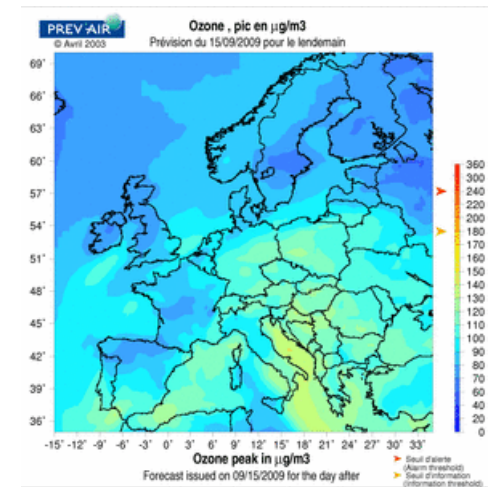


# À quoi sert un modèle ?

Recherche : investigations scientifiques

Usages opérationnels :

- Études d'impact pour une nouvelle source de pollution
- Scénarios de prospective (stratégies de réduction d'émissions polluantes)
- Prédiction de la qualité de l'air



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

# À quoi sert un modèle ?

Recherche : investigations scientifiques

Usages opérationnels :

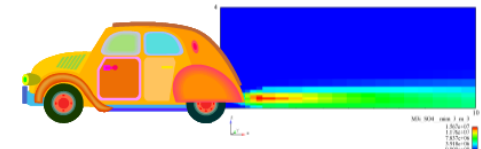
- Études d'impact pour une nouvelle source de pollution
- Scénarios de prospective (stratégies de réduction d'émissions polluantes)
- Prévion de la qualité de l'air
- Cartographie de la pollution



Source : [www.airparif.asso.fr](http://www.airparif.asso.fr)

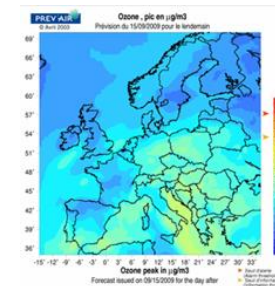
# À quoi sert un modèle ?

Recherche : investigations scientifiques



Usages opérationnels :

- Études d'impact pour une nouvelle source de pollution
- Scénarios de prospective (stratégies de réduction d'émissions polluantes)
- Prévision de la qualité de l'air
- Cartographie de la pollution



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



Source : [www.airparif.asso.fr](http://www.airparif.asso.fr)

# Usage des modèles en pollution atmosphérique

