

FIGURE II.5 – En haut de gauche à droite, les concentrations de HCHO ($\mu\text{g.m}^{-3}$) le 05 juillet 2009 à 15h simulée par les modèles : LOTOS, FARM, CHIMERE, SILAM et WRF-CMAQ. En bas de gauche à droite dépôt sec de HCHO en $\mu\text{g.m}^{-3}$ le 05 juillet 2009 à 3h (Sofiev *et al.*, 2011).

II.3 Développement d'une version dédiée à l'étude des mégapoles

II.3.1 Développement d'un calcul de flux

Afin de quantifier l'impact des mégapoles sur leur environnement proche et lointain, j'ai implémenté un calcul de flux dans le modèle CHIMERE. L'idée est de pouvoir quantifier le bilan de la quantité de polluants entrant et sortant d'une zone géographique donnée. Bien sur, ce terme de flux est calculé par le schéma numérique de transport (voir partie II.1.1), mais ne fait pas partie des données de sorties conventionnelles. En outre, accéder à la quantification de ce terme de flux doit permettre de fermer le bilan chimique dans chaque maille du modèle. C'est-à-dire de pouvoir réaliser un bilan complet d'une zone donnée en termes de sources et de puits aussi bien physiques que chimiques pour n'importe quelle espèce du mécanisme chimique. Je présenterai tout d'abord la résolution des équations différentielles

dans le modèle CHIMERE, ce qui me permettra dans un 2^{ème} temps d'expliquer comment j'ai procédé au calcul et à l'exploitation en sortie de ce nouveau paramètre. La troisième partie sera consacrée à une validation de mon calcul, et enfin en quatrième partie je présenterai la nouvelle possibilité de calcul du terme de production chimique d'une espèce secondaire.

II.3.1.1 Fonctionnement du solveur numérique

Comme nous l'avons vu en partie II.1.1), l'équation II.1 n'admet pas de solution analytique. Ce type d'équation est en principe résolu par séparation des opérateurs, c'est-à-dire que les dérivées partielles de chaque processus (émissions, dépôt, chimie, advection et diffusion) sont calculées séparément. La variation de concentration de l'espèce considérée peut ainsi être obtenue en sommant chaque terme calculé indépendamment. La méthode numérique utilisée dans le modèle pour résoudre ces équations est adaptée de l'algorithme de second ordre TWO-STEP proposé par Verwer (1994). Le système d'équation est résolu suivant une méthode de Gauss-Seidel schématisée sur la Figure II.6. Dans chaque maille et à chaque pas de temps chimique ($5 \leq \Delta t^c \leq 10$ minutes pour la version continentale), le solveur va calculer les termes de source (P) et de puits (L) pour chaque processus (Émissions, Transport, Diffusion, Dépôt et Chimie). Durant ce pas de temps, les variables météorologiques sont considérées comme constantes, et les flux d'espèces chimiques (P et L transport et diffusion) sont recalculés à chaque pas de temps physique ($\Delta t^p \sim 10$ minutes).

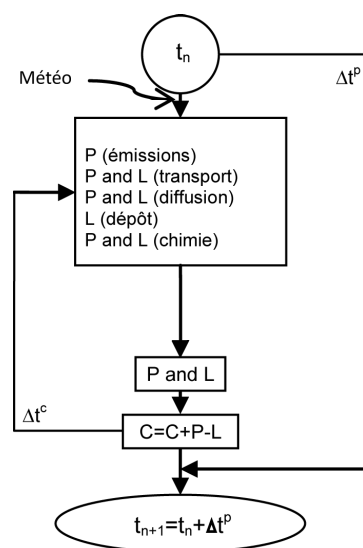


FIGURE II.6 – Schématisation de la méthode de séparation des opérateurs dans le modèle CHIMERE.

II.3.1.2 Méthode du calcul de flux

La méthode que j'ai développée consiste alors à intégrer les flux entrants et sortants (exprimés en $\text{molécules.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$ dans le solveur) sur tous les pas de temps physiques en fonction de leur direction, pour chaque maille du modèle et pour chaque espèce souhaitée. Pour des raisons de volume de fichier, j'ai choisi de ne faire calculer par le modèle que les flux horizontaux au nord et à l'est ainsi que les flux verticaux (au sommet de chaque boîte). Afin de disposer de toutes les directions, les flux Sud, Nord et descendants seront déduits de par la coïncidence des faces communes aux différentes mailles (voir Figure II.7). Pour utiliser ces résultats dans le cadre d'une simulation, il suffira donc de définir les contours d'une zone émettrice (par exemple une région contenant une mégapole) et de sommer les flux entrants et sortants aux bornes de ce sous-domaine. Le dépôt étant calculé, les émissions données en entrée du modèle et le bilan du transport réactif donné par ce calcul de flux, il est donc possible de déduire de ces calculs le terme de production chimique de chaque composé secondaire, et ce en chaque point de maille de la grille.

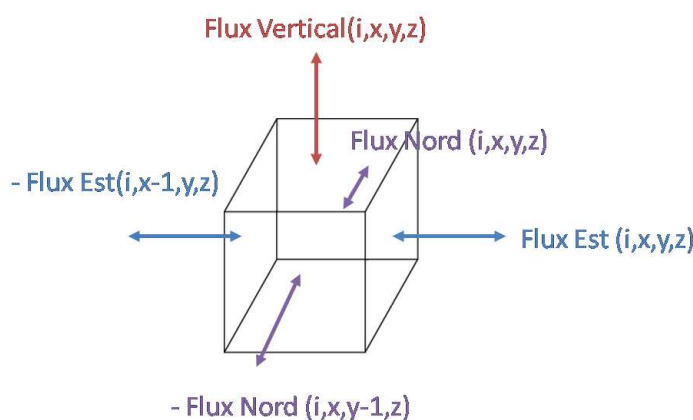


FIGURE II.7 – Schématisation du calcul de flux dans une maille du modèle.

II.3.1.3 Validation de la méthode

Afin de tester la validité de cette méthode et la robustesse de son codage, j'ai introduit dans le modèle une espèce inerte. Cette espèce ne possède aucun puit (chimie ou dépôt) et est simplement émise durant toute la durée de la simulation sur un domaine ciblé, avec le même profil spatio-temporel que les émissions de CO de la région émettrice - soit le BeNeLux pour cet exemple. Elle est transportée à l'intérieur du domaine par le schéma de transport

régissant l'ensemble des espèces. En théorie la variation de concentration par pas de temps, et en chaque point du modèle, hors de la zone d'émission peut être calculée comme la somme des flux entrants et sortants de la maille considérée. Il est donc possible de valider l'implémentation de mon calcul en comparant le delta de concentration entre deux pas de temps et la somme des flux.

Une illustration du champ de concentration (en ppbv) de ce traceur après plusieurs jours de simulation est représentée sur la Figure II.8. Les concentrations les plus fortes sont logiquement simulées sur la zone d'émission (>300 ppbv). Le traceur est ensuite transporté loin de la source d'émission avec des concentrations plus modérées, de l'ordre d'une dizaine de ppbv après plusieurs centaines de kilomètres de transport. L'évolution des concentrations en fonction du temps en un point noté j à l'est de la zone d'émission est représentée sur la II.9, en ppbv.

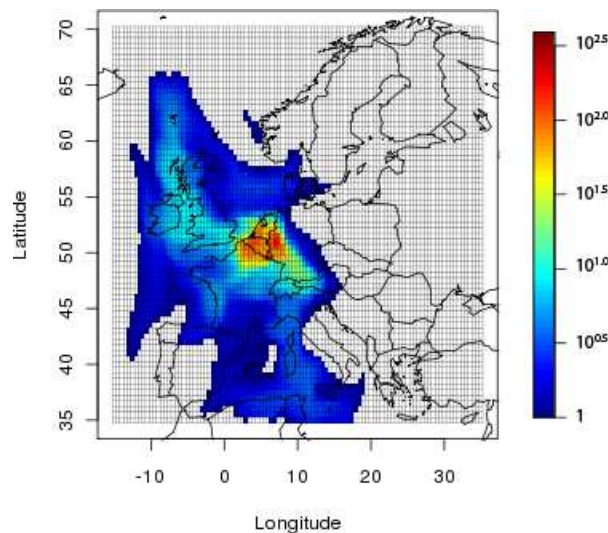


FIGURE II.8 – Champ de concentrations d'un traceur inerte émis avec le même profil spatio-temporel que le CO sur la région du BeNeLux (ppbv), après une vingtaine de jours de simulation

Jusqu'au 22 juin, la zone considérée n'est pas impactée par l'espèce inerte émise. À partir de cette date, le panache de ce traceur impacte la zone, où le modèle simule une concentration maximale de 6 ppbv le 29 juin. À partir de ce profil temporel, il est possible de calculer la variation de concentration à chaque pas de temps au point j selon :

$$\Delta Trac_i(t) = [Trac_i]_t - [Trac_i]_{t-1} \quad (\text{II.12})$$

J'ai représenté ce calcul de variation de concentration en bas à gauche de la Figure II.9 en $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{h}^{-1}$. Le flux net en fonction du temps est représenté à côté sur la même figure en $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{h}^{-1}$. Les valeurs positives représentent des imports dans la maille j et les valeurs négatives des exports. Comme on peut le voir en haut à droite la variation horaire du flux net est identique à la variation de concentration de l'espèce inerte.

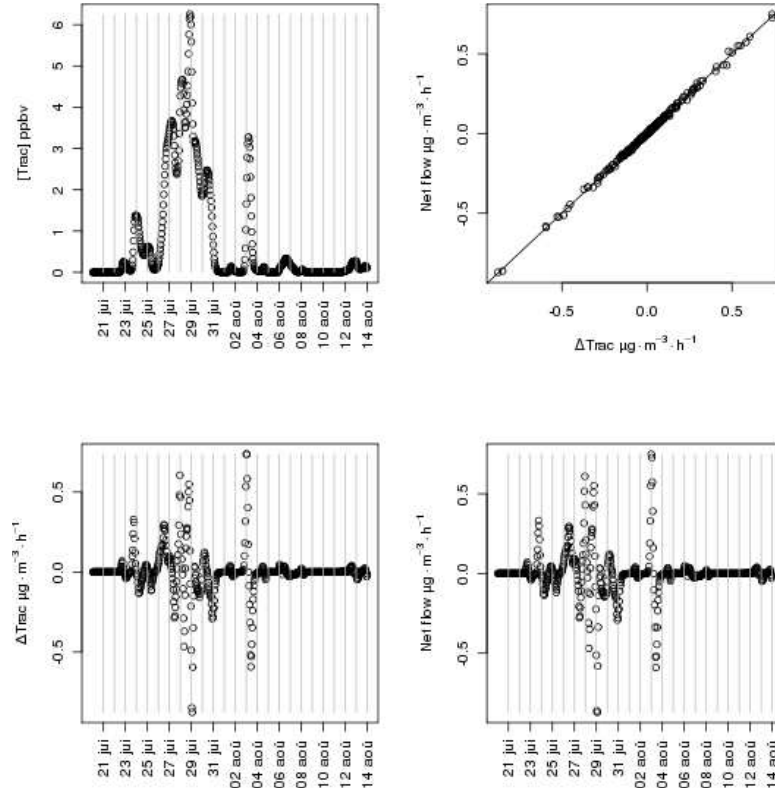


FIGURE II.9 – Évolution temporelle d'un traceur inerte émis avec le même profil spatio-temporel que le CO sur la région du BeNeLux (ppbv) et transporté en un point situé à $20,5^{\circ}\text{E}$; $63,0^{\circ}\text{N}$: En haut à gauche l'évolution de la concentration du traceur (ppbv), en haut à droite le flux net de traceur ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{h}^{-1}$) en fonction de la variation de concentration, en bas à gauche les variations de concentrations du traceur en fonction du temps ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{h}^{-1}$), et en bas à droite la variation du flux net en fonction du temps ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{h}^{-1}$)

Une autre méthode existe pour calculer les flux d'espèces chimiques. Elle a été utilisée par Jakobs et Memmesheimer (2010) dans le cadre de CityZen. Elle consiste à calculer ces flux de manière « offline » à partir des champs de concentrations horaires d'une espèce i dans les mailles j et $j+1$, et des composantes du vent (zonal et méridien pour les flux respectivement Est/Ouest et Nord/Sud de la maille j) :

$$F_i = \frac{C_j^i + C_{j+1}^i}{2} \times V_{vent} \quad (\text{II.13})$$

Nous appellerons cette méthode « WIND ». Cette méthode suggère que les concentrations d'une espèce chimique et les paramètres météorologiques varient linéairement d'une heure sur l'autre. Or nous avons vu en II.3.1.1 que les équations étaient résolues à tous les pas de temps chimiques et que les flux dérivant des paramètres météorologiques et chimiques étaient recalculés à tous les pas de temps physiques. En intégrant les flux directement dans le solveur du modèle, la méthode développée dans CHIMERE devrait donc mieux représenter les flux, notamment pour les espèces réactives comme les NO_x ou l'ozone.

La Figure II.10 représente l'évolution temporelle des flux Nord, Sud, Ouest et Est de l'espèce traceur au même point que précédemment selon les deux approches. L'évolution temporelle des flux est identique avec les deux méthodes, et les valeurs obtenues par les deux méthodes sont pour la plupart des points extrêmement proches, mais l'intensité des flux peut être significativement différente notamment au moment où les flux changent de direction. En moyenne, alors que la méthode implémentée dans CHIMERE estime un flux net d'export de $0,14 \mu\text{g.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ représentant ici la quantité importée par le dessus de la boîte, la méthode WIND estime un flux deux fois plus petit. Pour une espèce réactive comme l'ozone, cette erreur atteint un facteur 8 dans les mêmes conditions.

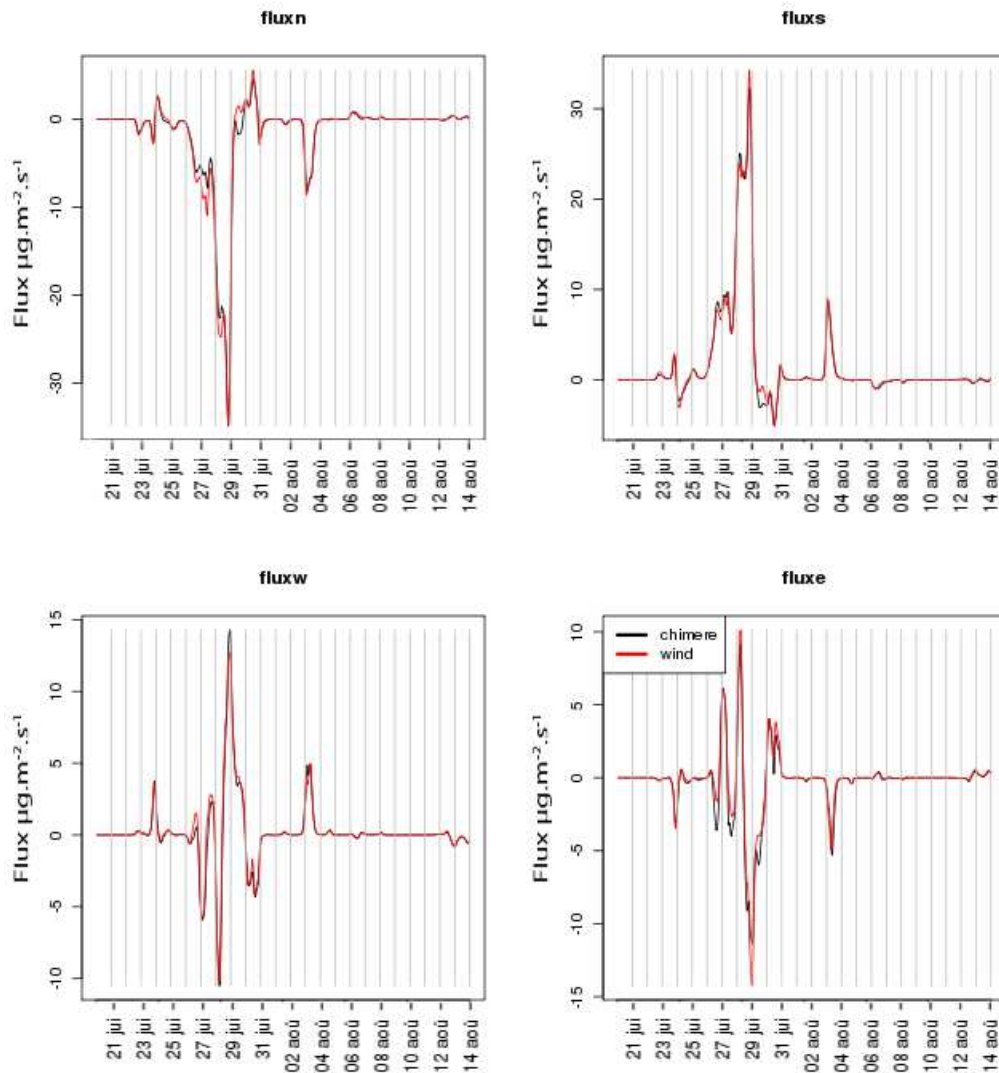


FIGURE II.10 – Évolution temporelle des flux d'un traceur inerte émis avec le même profil spatio-temporel que le CO sur la région du BeNeLux et transporté en un point situé à 20,5°E ; 63,0°N : les flux Nord en haut à gauche, à droite les flux Sud, en bas à gauche le flux Ouest et à droite le flux Est exprimés en $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$. En noir la méthode développée dans le modèle CHIMERE, en rouge la méthode basée sur les vitesses de vent. Les valeurs positives représentent des imports et les valeurs négatives des exports

II.3.1.4 Calcul de production d'une espèce secondaire

La quantification du terme de production d'ozone est un élément clé pour comprendre la formation de photo-oxydants. Bien que non mesurée directement, il existe différentes méthodes permettant de retrouver ce terme à partir de données de mesures (Coll *et al.*, 2005). Ces méthodes ont été utilisées dans divers campagnes de terrain, mais leurs résultats peuvent être en désaccord (Trainer *et al.*, 2000; Kleinman *et al.*, 2000) et son souvent difficilement comparables aux résultats des modèles. C'est pourquoi il est important de quantifier ce terme

de façon précise dans les modèles. Le calcul de flux implémenté dans CHIMERE nous permet d'avoir accès à tous les termes de l'équation II.1 : dépôt, flux, émissions et variation de la concentration de l'espèce considérée. Si le dépôt est fourni par le modèle à une résolution horaire, on peut donc calculer en post-traitement, pour une espèce réactive notée X , le terme de production-consommation selon :

$$P_X(t) = \Delta[X](t) + \text{dépôt}_X(t) - \text{Flux}_{entrants_X}(t) + \text{Flux}_{sortants_X}(t) - \text{Émissions}_X(t) \quad (\text{II.14})$$

Prenons l'exemple de l'ozone. L'ozone est une espèce secondaire, elle ne possède pas de terme d'émission, elle peut se déposer et être transportée. Son terme de production est donc calculé comme suit :

$$P_{O_3}(t) = \Delta[O_3](t) + \text{dépôt}_{O_3}(t) - \text{Flux}_{entrants_{O_3}}(t) + \text{Flux}_{sortants_{O_3}}(t) \quad (\text{II.15})$$

L'évolution temporelle de ces différents termes est représentée pour la même case que précédemment en Figure II.11. La production d'ozone dérivée de ces différents processus est représentée en bas à droite en $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{h}^{-1}$. Le cycle diurne obtenu est caractéristique de cette espèce, avec une phase de production durant la journée (valeurs positives) et de consommation durant la nuit (valeurs négatives).

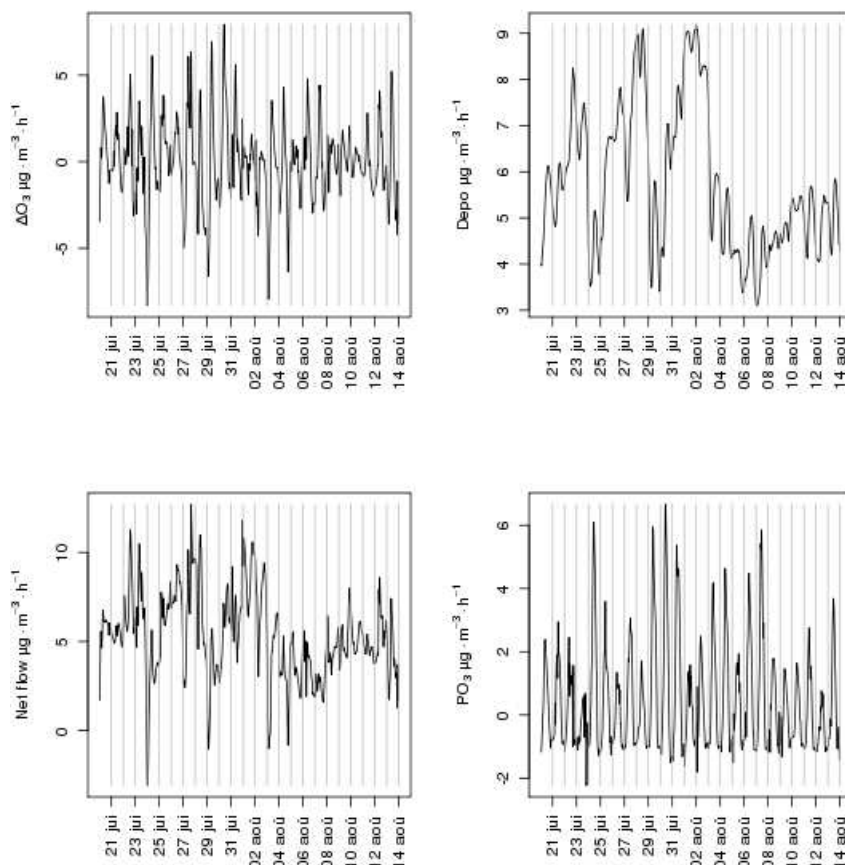


FIGURE II.11 – Évolution temporelle des différents termes de l'équation II.15 ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{h}^{-1}$) en un point situé à $20,5^{\circ}\text{E}$; $63,0^{\circ}\text{N}$: en haut à gauche la variation des concentrations d'ozone, à droite la variation horaire du dépôt sec, en bas à gauche la variation horaire du flux net total, et à droite la variation de production d'ozone déduite de ces trois précédents termes.

II.3.2 Implémentation d'un nouveau schéma chimique

L'implémentation d'un nouveau schéma chimique, où la représentation des espèces radicalaires ainsi que celle des espèces organiques est raffinée par rapport à MELCHIOR, doit permettre dans mes travaux d'offrir une spéciation plus détaillée des COV émis et transportés dans le modèle (et de leurs dérivés radicalaires ou organiques stables), et donc une meilleure représentation de la réactivité instantanée des panaches. Elle doit donc aussi permettre de mieux simuler les voies réactionnelles et la production dans le temps et dans l'espace de leurs dérivés oxydés. De cette manière, on s'attend à une meilleure représentation qualitative et quantitative des radicaux et on peut espérer optimiser la représentation de la production d'ozone dans les panaches, sur des durées de 1 à 2 journées après l'émission. Enfin, le raffi-