

Principe de mise en place d'un modèle opérationnel régional

Needs and requirements for the implementation of a regional air quality model

Mlle Fanny SIMON (*)

RÉSUMÉ

L'étude de la qualité de l'air à l'échelle régionale et notamment des processus conduisant à la formation des photooxydants comme l'ozone fait intervenir plusieurs phénomènes complexes et intimement liés les uns aux autres : connaissance des polluants émis, météorologie, transport-dispersion, chimie atmosphérique. La modélisation s'avère être l'outil indispensable pour analyser ces phénomènes et pour étudier l'impact de différents scénarii de modification des émissions au niveau de la qualité de l'air. Pour pouvoir mettre en place un modèle opérationnel de pollution atmosphérique à l'échelle régionale, il est nécessaire de mener au préalable un grand travail d'acquisition et d'élaboration des données d'entrée (données topographiques et de caractérisation de l'occupation du sol, conditions météorologiques et données de qualité de l'air, connaissance de la variation spatio-temporelle des émissions). Le choix de ces données et leur disponibilité sont en effet des points cruciaux qui conditionnent la qualité et la précision des résultats de simulation.

ABSTRACT

There are numerous factors affecting air quality like the spatial and temporal distribution of emissions, the spatial and temporal variations in meteorological elements (wind fields, solar insolation, temperature, dynamics of the boundary layer ...), the chemical reactions...

The use of a regional model is particularly suited for simulating these processes and for evaluating the effects of different emission control scenarios on urban and regional air quality.

In order to run a model, it is first necessary to prepare inputs from observed meteorological, emissions and air quality data.

1. Introduction

Si le gain au niveau des émissions de telle ou telle mesure est relativement facile à connaître, il n'en est pas toujours de même de son impact au niveau de la qualité de l'air. En effet, les processus mis en jeu dans les phénomènes de pollution atmosphérique sont fort complexes et dépendent de bien d'autres facteurs que l'intensité des émissions. Cette complexité est particulièrement grande pour la pollution oxydante car les polluants concernés ne sont pas, pour la plupart, directement émis dans l'atmosphère mais formés dans l'atmosphère à partir d'autres composés. Ainsi, l'étude de la qualité de l'air à une échelle régionale nécessite de disposer de nombreux éléments complexes et intimement liés les uns aux autres : connaissance de la répartition spatio-temporelle

des polluants émis, description de l'état de l'atmosphère, prise en compte des phénomènes de transport-dispersion et des réactions chimiques intervenant dans l'atmosphère. La modélisation déterministe à l'échelle régionale s'avère être l'outil indispensable pour traiter l'évolution des polluants sur des échelles de l'ordre de 10 km à quelques 100 km afin d'analyser les phénomènes de pollution, notamment photooxydante, et pour étudier l'impact de différents scénarii de modification des émissions au niveau de la qualité de l'air.

2. Description d'un modèle déterministe

Par modèle déterministe, on entend un outil qui tente de représenter numériquement les processus de dispersion, diffusion et de transformation des polluants et qui permette ainsi d'établir une chaîne de cause à effet entre le couple (émissions, conditions météorologiques) et les concentrations ambiantes dans le domaine

(*) Ingénieur Etudes, AIRPARIF, 10 rue Crillon, 75194 Paris Cedex 04.

modélisé. Dans l'absolu, le développement de tels modèles serait une tâche insurmontable, à cause de la variété des processus à prendre en compte, de la multitude des composés à traiter et de la diversité des sources et de leur variabilité spatiale et temporelle. Aussi, il est indispensable de développer des méthodologies de simplification du problème. Des efforts importants ont été menés et continuent de l'être aux Etats-Unis, et dans une moindre mesure en Europe, pour tenter d'élaborer des modèles d'émission-transport-chimie pertinents adaptés à chaque cas. Les outils de modélisation à l'échelle régionale sont dans l'ensemble déjà bien avancés et il s'agit maintenant de les adapter et de les appliquer en vraie grandeur sur certaines régions du territoire.

Un modèle déterministe utilise généralement de manière séquentielle un modèle de simulation de l'écoulement et un modèle de simulation de la dispersion des composés passifs et réactifs pour déterminer les distributions de polluants dans le milieu.

2.1. Le modèle d'écoulement météorologique

Il existe deux grands types de modèles météorologiques qui sont très différents dans leur conception :

⇒ les modèles dits diagnostics, qui utilisent les données météorologiques disponibles pour évaluer le champ tridimensionnel des paramètres météorologiques à l'instant des mesures. Ces modèles combinent généralement une simple interpolation des données disponibles avec un schéma correctif qui force la solution finale à satisfaire l'équation de conservation de masse. Ils donnent ainsi des résultats qualitatifs sans passer par une résolution des équations non linéaires des écoulements.

⇒ les modèles dits pronostics, qui résolvent les équations dynamiques et thermodynamiques de conservation de la masse, de la chaleur, du mouvement, de façon plus ou moins exacte (type de modélisation adopté pour les flux turbulents), afin de pouvoir prévoir l'évolution en temps des paramètres météorologiques. Le code calcule alors à chaque pas de temps les principales variables météorologiques, à savoir les trois composantes du vent, la température, l'humidité et la pression en toute maille du domaine.

2.2. Le modèle de dispersion-chimie

Il s'agit de représenter le transport et la dispersion des polluants passifs mais aussi réactifs dans l'écoulement modélisé précédemment. Pour cela, les modèles utilisent un module de transport-dispersion des polluants et un mécanisme chimique. La prise en compte de la photochi-

mie est un problème fort complexe en raison du très grand nombre d'espèces et de réactions chimiques à prendre en compte.

Les outils les plus adaptés à ce type de modélisation à l'échelle d'une région sont les modèles dits « eulériens » qui calculent une solution numérique directe sur un maillage tridimensionnel du domaine, d'une forme discrétisée de l'équation de base de transport-diffusion d'un scalaire (c'est-à-dire d'un polluant) représentée ci-dessous :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = S_o - S_i + D$$

	I	II
avec : t	: temps	
x,y,z	: coordonnées cartésiennes	
u,v,w	: composantes de vitesse du vent suivant (x,y,z)	
C	: concentration moyenne en une substance	
S _o	: terme source	
S _i	: terme puits	
D	: terme de diffusion	
I	: variation locale (terme non stationnaire)	
II	: terme de transport par l'écoulement moyen	

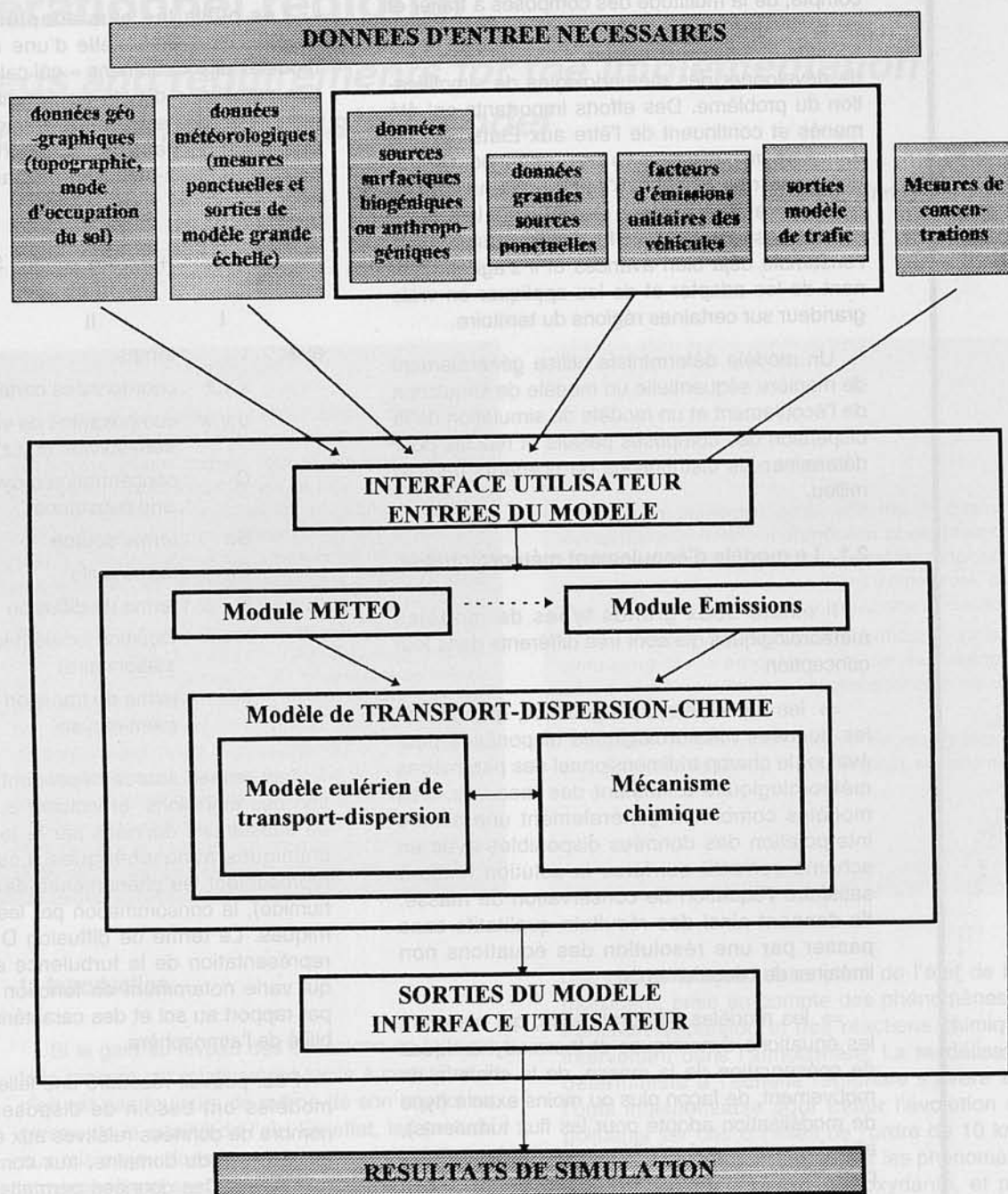
Les termes source dépendent de la description des émissions, et incluent aussi la création de substances données par le jeu de réactions chimiques atmosphériques. Les termes puits représentent les phénomènes de dépôt (sec ou humide), la consommation par les réactions chimiques. Le terme de diffusion D dépend de la représentation de la turbulence atmosphérique qui varie notamment en fonction de la hauteur par rapport au sol et des caractéristiques de stabilité de l'atmosphère.

Pour pouvoir résoudre une telle équation, les modèles ont besoin de disposer d'un certain nombre de données relatives aux émissions, à la topographie du domaine, aux conditions météorologiques. Ces données permettent de caractériser les paramètres intervenant dans le calcul des termes source et puits, du champ tridimensionnel des conditions météorologiques et du terme de diffusion.

2.3. Schéma de principe

Le schéma de principe qui est proposé en figure 1 présente une articulation possible des différents modules constitutifs d'un système de modélisation et les types de données dont on doit disposer en entrée pour assurer l'alimentation et le bon fonctionnement de ces modules.

Figure 1.
Schéma de principe d'un système de modélisation de la pollution atmosphérique
Input data modeling system-organisation



3. Le problème des données d'entrée à acquérir

Pour pouvoir représenter au mieux les phénomènes de pollution atmosphérique, les modèles ont besoin d'un certain nombre de données d'entrée. Le choix de ces données et leur disponibilité sont des problèmes cruciaux qui conditionnent la qualité et la précision des résultats de simulation.

Certaines données comme les données géographiques, météorologiques, les données de concentration sont indispensables à l'élaboration et au fonctionnement du modèle à l'échelle régionale. Les autres relatives aux émissions constituent ce que l'on pourrait appeler « le carburant » du modèle. Pour tester un scénario, il faut en effet fournir des informations adaptées sur les sources d'émissions.

3.1. Les données nécessaires à l'élaboration et au fonctionnement du modèle

• Données géographiques et topographiques

Pour pouvoir représenter graphiquement le domaine et calculer le champ de vent, le système de modélisation a besoin d'un modèle descriptif du terrain. Il est en outre nécessaire de disposer de certaines informations géographiques relatives :

- à la nature du sol (eau, forêt, bâti dense, autres types) pour pouvoir calculer des constantes caractéristiques du sol (albédo, émissivité, rugosité ...) qui interviennent au niveau du calcul du champ de vent, au niveau du calcul des émissions surfaciques (voir plus loin) et au niveau de la caractérisation des phénomènes de déposition sèche,
- à la densité de population pour pouvoir élaborer un modèle de répartition géographique de la population au cours du temps et présenter des cartes d'exposition à la pollution de fond en sortie
- à la localisation de lieux particuliers (ex : crèches, écoles, hôpitaux, stades) pour caractériser la pollution de fond à laquelle sont soumises les personnes sensibles.

• Données météorologiques

Des données météorologiques sont nécessaires pour la bonne représentation des champs de vent et de certains paramètres intervenant dans le module de chimie.

Pour le calcul de champ de vent, il est souhaitable de disposer de mesures de paramètres météorologiques (vitesse et direction du vent, pression, température, humidité...) en différents points du domaine et si possible à différentes altitudes (radiosondages, données issues de mâts, profils verticaux réalisés par des techniques de sondages acoustiques ou électromagnétiques du type SODAR, RASS...) pour pouvoir déterminer des paramètres importants en pollution atmosphérique (hauteur de la couche de mélange, température d'inversion, gradient thermique). Afin de déterminer les conditions aux limites latérales du domaine modélisé, il apparaît nécessaire en outre de disposer de résultats de modèles de plus grande échelle (modèle Arpege par exemple). Notamment, lorsque l'on souhaite modéliser plusieurs heures d'évolution, il faut avoir des informations sur le temps qu'il fait bien au-delà de la région étudiée.

Pour la bonne représentation des mécanismes de transformations chimiques des polluants dans l'atmosphère, il est nécessaire de disposer d'informations sur certains paramètres météorologiques comme l'humidité, la pluviométrie, la nébulosité et le rayonnement.

• Données de mesures de concentrations

Pour valider les modèles (comparaison simulation/mesures) et pour déterminer les conditions initiales (travail en air pollué, initialisation du modèle de dispersion), il est nécessaire de disposer de mesures de concentration à l'intérieur du domaine, que ce soit au niveau du sol comme en altitude. Un soin particulier doit également être apporté pour déterminer les conditions aux limites du domaine afin de pouvoir prendre en compte les phénomènes de transport interrégional de polluants. Ceci nécessite de disposer de données de mesure à l'extérieur du domaine de modélisation également. Les données de mesure de concentrations que les réseaux de surveillance de la qualité de l'air détiennent sont essentielles à ce niveau, de même que les campagnes intensives de mesures de concentration en altitude (mesures aéroportées) qui peuvent être menées dans le cadre de projets de recherche industriels ou universitaires.

3.2. Les données d'émissions

D'une manière générale, pour pouvoir comparer les résultats des simulations avec les données de mesures de concentration, il est nécessaire de prendre en compte les différentes sources d'émissions de polluants en apportant une attention particulière à la représentation des variations spatiales et temporelles des rejets. Ces différentes sources sont :

• Les sources fixes ponctuelles

Sous cette catégorie, on regroupe les sources qui sont suffisamment importantes pour être prises en compte individuellement : cheminées industrielles, centrales thermiques, incinérateurs, chauffage urbain, stockages industriels de combustibles ou de solvants...

Il est nécessaire de disposer des émissions liées à ces sources si l'on souhaite pouvoir tester les types de scénario suivants :

- influence de mesures technologiques prises au niveau des industries comme un changement de combustible ou l'emploi de nouvelles technologies de dépollution,
- fermeture ou création d'un centre industriel,
- détermination rétrospective de la contribution des sources industrielles dans une pointe de pollution.

Pour cela, il est important de disposer d'une information exacte sur la localisation géographique des rejets des cheminées et sur les paramètres permettant de déterminer les surhauteurs de cheminée (température du rejet en sortie de cheminée, diamètre de la cheminée, vitesse d'éjection des gaz). Un panache émis sous la couche d'inversion n'aura en effet pas du tout le même comportement dynamique ni le même

impact au niveau de la qualité de l'air qu'un panache émis au-dessus.

Il est nécessaire de connaître la composition chimique des rejets des sources fixes ponctuelles en polluants et en espèces intervenant dans le mécanisme chimique.

Il est enfin indispensable de connaître la variation temporelle des flux émis, et ceci, à un pas de temps compatible avec la précision souhaitée au niveau des sorties de modèle.

Néanmoins, la représentation des émissions des grandes sources industrielles est relativement simple, parce qu'il s'agit d'émissions statiques et assez régulières dans le temps. Les données d'émissions semblent assez bien connues et répertoriées. Les industriels et le CITEPA disposent ainsi de données sur les caractéristiques des sources et leurs émissions. Les inventaires des sources fixes industrielles doivent toutefois être encore affinés pour ne pas se limiter aux émissions réglementées ou pour assurer un niveau de détail temporel suffisant (de l'ordre de l'heure).

- *Les sources fixes surfaciques*

Sont considérées comme sources fixes surfaciques les éléments suivants : chauffage domestique, pertes par évaporation des véhicules, émissions biogéniques, trafic diffus, petites sources industrielles...

Les émissions liées à ces sources sont loin d'être négligeables, même si elles sont diffuses et il apparaît nécessaire de les caractériser correctement. Notamment, l'impact des pertes de composés organiques volatils l'été par évaporation doit être quantifié au niveau de la formation des photooxydants.

La caractérisation des émissions surfaciques peut se faire à partir des données de mode d'occupation du sol et de facteurs d'émissions propres à chaque type de source. Là-encore, il est important de bien prendre en compte les paramètres qui peuvent influencer les facteurs d'émissions tels que la température extérieure, la saison, le jour et l'heure considérés...

- *Les sources mobiles*

Les principales sources mobiles sont constituées par les trafics routier, aérien, ferroviaire et fluvial.

La connaissance des émissions de polluants primaires liées aux sources mobiles et notamment au trafic automobile est généralement beaucoup moins avancée que celle relative aux sources fixes. Ceci est d'autant plus préoccupant que le trafic routier est, du moins en Ile-de-France, le principal responsable de la pollution atmosphérique urbaine.

Trafic routier :

Il semble inutile de concevoir un système de prise en compte des émissions qui ne puisse pas considérer de manière réaliste les variations dans l'espace et dans le temps de la circulation automobile. De plus, pour mener certaines études de prospective, on ne peut se contenter d'un simple inventaire d'émissions car celui-ci ne fournirait qu'une image figée dans le temps. Il faut donc modéliser les variations spatiales et temporelles des émissions liées au trafic. Cela se fait à partir des données issues d'un modèle de trafic et des facteurs d'émissions des véhicules :

- *la détermination des flux de véhicules à partir d'un modèle de trafic*

La circulation automobile est déjà mesurée et modélisée de manière approfondie par les organismes responsables de sa gestion au sein d'une région. Toutefois, les modèles existants ont essentiellement été développés pour étudier le dimensionnement des infrastructures.

Aussi, ils sont avant tout utilisés pour modéliser les périodes de trafic les plus denses, donc les heures de pointe du matin ou du soir. Or, il est nécessaire pour le système de modélisation de disposer de valeurs des émissions et donc de trafic pendant les autres périodes également.

De plus, il serait nécessaire d'avoir une répartition du trafic par type de véhicules, ce que les modèles ne font pas pour l'instant.

Il convient donc dans un premier temps d'évaluer la pertinence des modèles de trafic disponibles et de sélectionner le modèle le plus adéquat qui pourra être adapté aux besoins spécifiques de la modélisation des émissions. Idéalement, un modèle de trafic adapté doit pouvoir fournir les sorties suivantes :

Par brin du réseau et par zone de trafic et pour chaque tranche horaire :

- flux de véhicules
- répartition par mode (véhicules particuliers, poids lourds, transports en commun, autres modes) et par type de véhicules (essence catalysé, essence non catalysé, diesel...)
- vitesse moyenne par type de véhicules
- part des trajets effectués à froid/à chaud

Un tel travail d'adaptation des modèles actuels de trafic nécessite un grand effort de méthodologie, de traitement des données disponibles et de réflexion.

- *le développement de la base de données facteurs d'émissions*

Une fois les flux de véhicules localisés dans le temps et dans l'espace, on peut associer les émissions correspondantes à condition de connaître les facteurs d'émissions des véhicules en fonction de leurs caractéristiques de fonction-

nement (vitesse, départ à froid ou à chaud, technologie et âge du véhicule, température ...). La connaissance de ces facteurs d'émissions commence à être bien développée grâce à de nombreuses études menées sur le parc de véhicules en circulation (exemple : études INRETS).

Trafic aérien :

Les émissions liées au trafic aérien sont particulièrement importantes au sol (évaporation de COV) et lors de la phase de décollage des avions.

• La spéciation des espèces

Les modèles photochimiques traitent un nombre de substances chimiques primaires beaucoup plus importantes que les classes de substances disponibles en sortie du modèle d'émissions. La classe des hydrocarbures, par exemple, recouvre un grand nombre d'espèces chimiques primaires, dont le comportement lors de réactions chimiques dans le milieu atmosphérique est fort différent. De même, la classe particules incorpore des particules de taille variée dont les effets sur la santé peuvent être différents. Aussi, il s'agit d'effectuer une spéciation des émissions. Pour chaque type de source, il faut disposer de données de partition des émissions.

Si l'on admet que le système de modélisation représentera correctement les transformations de polluants dans l'espace et leurs réactions, il apparaît clairement que la qualité de la modélisation dépendra de la qualité des données d'entrée.

Notamment, la disponibilité de données de mesures météorologiques et de qualité de l'air et la précision de la représentation des émissions sont fondamentales pour une mise en œuvre du système et pour pouvoir faire les tests souhaités de scénarii.

4. Conclusion

Les attentes vis-à-vis de modèles déterministes permettant de prendre en compte les phénomènes de pollution atmosphérique intervenant à une échelle régionale sont fortes, notamment de la part des pouvoirs publics qui souhaitent pouvoir tester l'impact de différents scénarii de réduction des émissions au niveau de la qualité de l'air. Les outils qui permettent de faire de la modélisation existent à l'heure actuelle et il s'agit avant tout de réaliser des interfaces entre les différents modules existants afin de pouvoir appliquer les modèles en vraie grandeur pour les évaluer et les valider. La mise en œuvre opérationnelle de tels outils nécessite au préalable un grand travail d'acquisition et d'élaboration des

données d'entrée qui ne peut être réalisé qu'en collaboration étroite entre les réseaux de surveillance de la qualité de l'air et les organismes détenteurs d'éléments permettant de caractériser la topographie, la météorologie ou les émissions issues de sources fixes ou mobiles.

5. BIBLIOGRAPHIE

- J. H. SEINFELD, « Ozone air quality models : a critical review », *JAPCA* **38** : 616 (1988).
- L. MUSSON-GENON, « La modélisation du transport de la pollution », *Annales des Mines* : 44 (nov. 1990).
- V. FRADON, « Modélisation numérique de la pollution atmosphérique en région parisienne : bibliographie des modèles existants, applicabilité », rapport de stage effectué à la Direction de la Protection de l'Environnement, Mairie de Paris (1994).
- S. VILETTE, « Les modèles numériques de dispersion de la pollution atmosphérique à l'échelle de l'agglomération », rapport de stage ENGREF, (1994).
- P. A. SALOMON, « Regional photochemical measurement and modeling studies : a summary of the Air & Waste Management Association International Specialty Conference », *J. Air & Waste Manage. Assoc.* **45** : 253 (avril 1995).
- N. MOUSSIOPOULOS, « The EUMAC Zooming Model : model structure and applications », EUROTRAC publications (march 1994).
- D. POPPE, Y. ANDERSSON-SKÖLD, A. BAART, P.J.H. BUILTJES, « Gas-phase reactions in atmospheric chemistry and transport models : a model intercomparison », EUROTRAC publications (february 1996).
- H. HASS, P. J.H. BUILTJES, D. SIMPSON and R. STREN, « Comparison of photo-oxidant dispersion model results », EUROTRAC publications (february 1996).
- J. DA MASSA, « Technical Guidance Document : photochemical Modeling », California Environmental Protection Agency, Air Resources Board (avril 1992).
- « Guideline for regulatory application of the Urban Airshed Model », U.S. Environmental Protection Agency, Office of Air Quality Planning and Standards (juillet 1991).
- « Sacramento area modeling analysis for the 1994 state implementation plan », California Environmental Protection Agency, Air Resources Board (avril 1995).
- S. WAKAMATSU, I. UNO and R. A. WADDEN, « Specification of source characteristics for ozone prediction in a complex airshed », *Air pollution modeling and its application VIII* (1991).
- E. YOTTER, D. WADE, « Development of a gridded motor vehicle emission inventory for the southern California air quality study », *AMWA paper* **89-137.2** (1989).