

22^e Congrès International Technique NATO/CCMS sur la Modélisation de la Pollution de l'Air et ses Applications

22nd NATO/CCMS International Technical Meeting
on Air Pollution Modelling and its Application

Clermont-Ferrand (2-6 juin 1997)

Y.-B. POINTIN, N. CHAUMERLIAC et A.-I. FLOSSMANN (*)

Présentation générale

Cette conférence s'est déroulée dans le cadre de la SATCAR à Clermont-Ferrand, entre le 2 et le 6 juin 1997. Elle a été organisée scientifiquement par le Dr S.-E. GRYNING du Risø National Laboratory (Danemark) et localement par le Dr N. CHAUMERLIAC du Laboratoire de Météorologie Physique (La.M.P./CNRS) et de l'Observatoire de Physique du Globe de Clermont-Ferrand (OPGC de l'université Blaise-Pascal ou Clermont-II), avec l'appui de nombreux organismes et sponsors.

Elle fait partie d'un cycle de conférences organisées tous les 12 à 18 mois sous l'égide du Committee on Challenges of Modern Society (CCMS) depuis 1971 ; la précédente conférence (21st) s'étant déroulée à Baltimore, Maryland (USA) en novembre 1995. Ces conférences ont pour but de rassembler et de faire dialoguer les scientifiques de tous les pays spécialistes de la simulation numérique des phénomènes associés à toutes sortes de pollution de l'air atmosphérique. Cette année, 150 scientifiques provenant de 40 pays et de 5 continents ont participé aux travaux de la 22nd NATO/CCMS International Technical Meeting de Clermont-Ferrand.

Cette conférence a été organisée en 5 sessions centrées chacune sur un thème précis et débutant par un exposé invité faisant une revue des connaissances actuelles, des méthodes utilisées et des problèmes restant posés. Chaque session a ensuite donné lieu à des exposés oraux, ou à des présentations de posters, des différents travaux sur le thème de la session. Chaque présentation était suivie d'une discussion, souvent animée, ouverte aux membres de l'auditoire. L'ensemble des présentations, posters et discussions fera l'objet d'un livre édité par Plenum Press.

(*) Laboratoire de Météorologie Physique/OPGC,
CNRS, Université Blaise-Pascal.

Session 1 : pollution à l'échelle régionale

La première session avait pour thème la simulation numérique des phénomènes de pollution à l'échelle régionale. Dans son exposé invité, le Dr R. PIELKE a indiqué quelles doivent être les qualités d'un modèle de simulation dont les résultats sont destinés à servir d'outil pour la mise au point d'une politique de réduction des pollutions atmosphériques, par exemple, en limitant réglementairement certaines émissions. Ce modèle doit non seulement reproduire le mieux possible l'écoulement atmosphérique, en particulier autour des reliefs ou en présence de jets localisés de basses couches, mais doit aussi estimer correctement la turbulence qui est le moteur de la diffusion des polluants. De plus, les résultats de ce modèle doivent être relativement insensibles à de faibles variations de la résolution spatiale et temporelle du modèle, des coefficients des paramétrisations utilisées (valeur de la constante de VON KARMAN, par exemple), ou des valeurs attribuées aux caractéristiques du sol (albédo, humidité, hauteur de rugosité, etc.). Les simulations doivent également prendre en compte l'instationnarité des écoulements (oscillations inertielles, brises de mer ou de terre, etc.), et l'hétérogénéité spatiale des conditions au sol (flux de chaleur sensible et latente, etc.). Pour être correctement interprétés et comparés aux mesures, les résultats doivent également être obtenus pour un ensemble de nombreuses simulations basées sur des conditions initiales, ou des valeurs de paramètres, légèrement différentes pour représenter les incertitudes naturelles. Malgré toutes ces sources d'erreurs, il est désormais possible d'utiliser des modèles régionaux atmosphériques pour étudier la climatologie de la dispersion des polluants.

Après cet exposé invité, les résultats de l'utilisation, appliquée à diverses régions du monde (Afrique, Canada, Europe Centrale, Sicile, etc.), de plusieurs modèles numériques simulant les

émissions, le transport, les transformations chimiques et les dépôts d'aérosols et/ou d'espèces chimiques polluantes, ont été présentés et généralement comparés à des mesures de concentrations réalisées dans des stations au sol. Ces résultats montrent qu'il est important de prendre en compte de façon réaliste les écoulements atmosphériques et les émissions des polluants, en particulier, l'impact des aérosols (G. CAUTENET), des zones de réservoir de polluants (G. KALLOS), des brises de mer (P. GROSSI), de l'agrégation des sources (M. ULIASZ), des transports par la convection (J. EDY), de la topographie locale (R. SALVADOR), de l'interaction entre brise de mer et orographie (J. POTTIER), ainsi que de la résolution spatiale des sources et de la topographie (K. NESTER). De même, il convient de simuler correctement les transformations chimiques entre les espèces et, en particulier, l'influence des concentrations de divers oxydants (S. PRYOR, B. SCHELL), d'un grand nombre de réactions (J. LANGNER), ainsi que de divers paramètres météorologiques, du taux d'émission et des conditions initiales et latérales (S. HANNA). Les modélisations montrent également l'influence de la photolyse, dont le taux dépend du bilan radiatif qui est fortement influencé par la couverture nuageuse (R. McNIDER), et de la chimie en phase aqueuse (N. AUDIFFREN). L'analyse de la sensibilité des équations chimiques aux diverses concentrations peut être réalisée en intégrant les équations du modèle tangent (Y. YANG) et la séparation des différentes échelles de temps dans les mesures des stations peut être obtenue en filtrant spécifiquement les séries temporelles (S. RAO). Les plus grandes incertitudes pour ces modèles semblent être : les émissions et les dépôts des divers polluants anthropogéniques ou naturels, l'importance de certaines espèces chimiques, les réactions en présence de phases liquide et solide dans les nuages, le cycle de vie des aérosols après l'évaporation des gouttes, etc.

Session 2 : transports de grande échelle

La deuxième session avait pour thème la simulation numérique des phénomènes de transport de pollution de grande échelle, jusqu'à l'échelle globale de la terre, avec, en particulier, les simulations de l'expérience ETEX (European Tracer EXperiment). Dans son exposé invité, le Dr P. BUILTJES a rappelé les différentes utilisations possibles des modélisations numériques :

1. l'analyse et l'interprétation des mesures chimiques ;
2. la recherche de l'importance relative des différents processus physico-chimiques et la comparaison avec de nouvelles paramétrisations ;

3. la recherche de nouveaux phénomènes non encore observés et la planification d'expériences pour confirmer les mécanismes supposés ou pour mettre à jour de nouveaux mécanismes ;

4. le test de l'efficacité d'une politique de réduction des pollutions atmosphériques.

Le Dr P. BUILTJES a ensuite fait un tour d'horizon des aspects connus et de ceux qui restent à éclaircir. Ainsi, le transport horizontal par le vent est généralement bien modélisé, alors que le transport vertical, en particulier par les nuages convectifs, reste mal représenté. De même, les réactions chimiques essentielles sont connues, mais pas les concentrations habituelles de certaines espèces oxydantes (ROH , H_2O_2 , HNO_3 , etc.) ; ce qui nécessite encore des efforts pour les mesurer. Les émissions estimées de SO_2 conduisent à une bonne simulation des concentrations mesurées ; mais pas celles de CO qui doivent être améliorées. Le dépôt sec des espèces chimiques ne paraît pas être le même au nord de l'Europe qu'au sud, et doit donc dépendre des conditions hydrothermiques des sols. Les autres améliorations possibles portent sur :

1. l'utilisation des données de certains satellites récents, ou en projet, destinés à fournir des valeurs de concentrations gazeuses dans la basse troposphère ;

2. l'utilisation de calculateurs plus rapides permettant d'utiliser les mécanismes chimiques complets, au lieu de développer des mécanismes réduits, et permettant d'améliorer les études de sensibilité, les méthodes interactives de visualisation des résultats, et les méthodes d'assimilation de données ;

3. une meilleure connaissance des sources d'émissions naturelles et anthropogéniques, et une utilisation des mesures prenant mieux en compte leurs représentativités spatiale et temporelle et leur validité.

Les exposés des résultats de simulation de dispersion à grande échelle montrent également l'importance de la résolution de l'équation de sédimentation/dépôt par une méthode de moments indépendante de la distribution des aérosols ou des gouttes (M. GALPERIN), de l'estimation correcte des émissions et de la prise en compte du lessivage par les précipitations (W. GUELLE, T. KITADA, S. NICKOCVIC), du dépôt du SO_2 gazeux sur les aérosols pour former du sulfate (I. UNO, H. XIAO), de la valeur du coefficient du dépôt local dans la zone d'émission (J. BARTNICKI) et de la convection sur le transport planétaire (W. COLLINS). L'utilisation de l'équation adjointe, automatiquement générée à partir du programme de simulation du transport de CO_2 , permet (T. KAMINSKI), par une méthode inverse se basant sur les mesures et sur des informations a priori, d'améliorer les estimations des inten-

sités et des localisation des émissions et des puits du CO₂.

Pendant l'expérience ETEX (K. NODOP), un gaz inerte a été relâché d'un site de Bretagne, avec un taux constant pendant une dizaine d'heures. Ce gaz s'est dispersé et a été entraîné dans un panache par le vent dominant depuis l'Europe de l'ouest jusque sur l'Europe centrale. Des milliers d'échantillons d'air ont été capturés toutes les trois heures, pendant quatre jours entourant l'arrivée du panache dans 168 stations. Les analyses de ces échantillons fournissent le temps d'arrivée du panache et l'évolution temporelle des concentrations du gaz dans l'air ambiant. Les résultats des simulations (F. DESIATO, A. STRAUME, G. GRAZIANI) dépendent fortement des conditions météorologiques puisque les comparaisons avec les mesures sont bonnes lors du premier lâcher pour lequel l'écoulement était assez uniforme en Bretagne, alors que les comparaisons sont plutôt mauvaises pour le deuxième lâcher qui a eu lieu quelques heures avant le passage d'un front qui a fortement perturbé le panache.

Session 3 : développements récents

La troisième session avait pour thème les développements récents dans la simulation numérique de la pollution atmosphérique. Dans son exposé invité, le Dr W. PHYSICK a fait le point sur les connaissances actuelles en théories de la turbulence et leurs conséquences sur la simulation de la dispersion d'un panache de polluants à l'échelle locale. La comparaison avec des mesures expérimentales, réalisées dans un caisson d'eau stratifiée par un gradient de salinité de façon à représenter l'atmosphère de la couche limite planétaire, permet de sélectionner une forme synthétique de la densité de probabilité de la vitesse verticale turbulente. La forme sélectionnée varie dans l'épaisseur de la couche de mélange et permet d'ajuster au mieux les différents moments turbulents de la vitesse verticale, et de mieux simuler l'évolution de la concentration au sol d'un gaz émis par une haute cheminée dans un écoulement atmosphérique (une autre forme définie par un polynôme de Hermite est discutée par A. WINTHER JENSEN). Le Dr W. PHYSICK a montré ensuite la nécessité de bien estimer l'épaisseur de la couche de mélange et son évolution par l'entraînement turbulent à son sommet. Il a également expliqué que, pour un modèle lagrangien de diffusion, les conditions utilisées au sol et au sommet de la couche de mélange peuvent y conduire à une accumulation artificielle de particules. Il a donc proposé une condition à appliquer à la zone du sommet de la couche de mélange pour permettre l'échange de

particules entre celle-ci et la couche stable la surmontant.

Les autres exposés ont montré qu'il est possible de simuler (D. STEYN) l'évolution temporelle de la hauteur de la couche de mélange avec, soit un modèle simple unidimensionnel, soit à partir du profil vertical de l'énergie cinétique turbulente calculée par un modèle régional, ou de simuler (F. FREEDMAN) la décroissance nocturne de la turbulence qui transforme la couche de mélange en une couche résiduelle de plus en plus stable. Un modèle non local de turbulence (S. ZILITINKEVICH) permet d'expliquer la diffusion à contre gradient et un modèle de simulation des aérosols marins (S. GONG), prenant en compte leur distribution en taille, montre que les plus petits noyaux (0,13 à 0,25 μm de rayon) peuvent être transportés sur des milliers de km. La simulation de l'évolution des espèces mercurées (G. PETERSEN) restitue le contenu en mercure des précipitations mais il manque des données pour valider le comportement des oxydes et de chlorures de mercure. L'utilisation d'un modèle de pollution urbaine (J. SINI), comprenant les émissions par le trafic et la simulation de l'écoulement dans une rue-canyon, permet de simuler les très grandes hétérogénéités spatiales des polluants. L'utilisation d'un modèle atmosphérique à maille verticale variable permet (P. SAHM) de tester différents mécanismes chimiques traitant différemment les réactions des oxydes d'azote avec et en présence d'aldéhydes. La dispersion d'un panache est plus fidèlement simulée (P. DE HAAN) avec un modèle de bulles s'échappant régulièrement de la cheminée d'émission, se déplaçant par le vent turbulent et grossissant par diffusion, ou avec un modèle lagrangien de turbulence (S. HEINZ) forcé par la chaleur du panache. Un modèle de dépôt de polluants sur la végétation montre (D. NOWAK) que les arbres plantés en ville diminuent de 4 à 68 %, suivant les espèces, la pollution de l'atmosphère. L'introduction d'un modèle de déplacement d'un feu de forêt, dépendant des conditions orographiques, météorologiques et du couvert végétal, dans un modèle régional météorologique incluant un module de dispersion et de chimie des polluants montre (C. BORREGO) que le dégagement de chaleur du feu peut modifier localement l'écoulement et la dispersion des polluants. Un modèle statistique basé sur des mesures météorologiques permet (N. URQUIZO) de prédire les contenus en eau et en sulfate des brouillards sur 3 montagnes canadiennes. La forte corrélation existant, dans un panache turbulent, entre les différentes concentrations ponctuelles, et qui modifie significativement le taux moyen des réactions chimiques non linéaires, doit être pris en compte (L. DELAMARE) par un modèle de micro-mélange turbulent. Un modèle hémisphérique d'aérosol simulant la chimie des sulfates et le carbone particulaire (T. IVERSEN), et incluant le lessivage par les

nuages, montre que la distribution spatiale annuelle des particules est très hétérogène, avec des maxima au-dessus de l'Europe, de l'Amérique et de l'Asie de l'est, impliquant un flux radiatif global négatif, c'est-à-dire vers l'espace.

Un modèle intégré de dispersion des polluants est développé par l'Environmental Protection Agency (EPA) américaine. Ce modèle (D. BYUN) combine différents modules de chimie, de diffusion, d'advection, de panache, d'aérosol, etc., en utilisant les données de modèles météorologiques de routine. De même, un modèle intégré de pollution urbaine est mis en place en Grande-Bretagne (D. CARRUTHERS), incluant une banque de données des émissions dues aux automobiles et aux activités industrielles et domestiques. Une hiérarchie de modèles météorologiques et chimiques de différentes échelles, spécifiquement imbriqués, est utilisée (D. LANGMANN) pour simuler les évolutions des paramètres dynamiques et chimiques lors d'un épisode de 5 jours.

Session 4 : pollutions accidentelles

Cette courte quatrième session avait pour thème les pollutions atmosphériques accidentelles. Le modèle intégré RODOS (T. MIKKELSEN) est destiné à permettre une estimation en temps réel de la dispersion d'émissions radioactives accidentelles. Ce modèle accepte comme données météorologiques initiales des mesures locales, des analyses ou des prédictions de services opérationnels, etc., utilise une banque de données sur les centrales nucléaires et sur les types d'accidents pour fournir les débits probables des émissions, détermine les paramètres de dispersion (vent local modifié par l'orographie, hauteur de la couche de mélange, etc.), calcule les concentrations du panache radioactif et en déduit les doses radioactives déposées au sol par le vent et la turbulence. Les tests conduits sur l'expérience ETEX sont prometteurs. Un programme expérimental de grande envergure (G. BRIGGS), basé à la fois sur des mesures en soufflerie et sur des mesures d'un site expérimental de plusieurs centaines de mètres de côté, a pour but de documenter la dispersion de polluants dans différentes conditions de turbulence (rugosité de surface), de stabilité, de cisaillement du vent, de température relative de l'air du panache, etc. Les résultats en soufflerie dans des conditions neutres de l'écoulement montrent que la vitesse d'entraînement turbulente conditionnant la dispersion n'est pas influencée par la hauteur des rugosités de la surface tant que le panache est proche de la neutralité, mais qu'elle en dépend si le panache est nettement plus chaud que l'air ambiant.

Session 5 : évaluation et vérification des modèles

La dernière et cinquième session avait pour thème la vérification et la validation des modèles de simulation. Dans son exposé invité, le Dr B. CARISSIMO analyse les résultats d'une étude de la pollution en région parisienne par un modèle météorologique régional non hydrostatique incluant un modèle d'émissions dues aux automobiles et aux activités industrielles et domestiques, un modèle de chimie en phase gazeuse très complet, et un modèle eulérien de dispersion de polluants. Ces analyses montrent qu'il est particulièrement important de bien spécifier les conditions météorologiques (vent, température, humidité) des premières centaines de mètres au-dessus du sol et que seules des mesures à haute densité sont adéquates. Les mesures de concentration réalisées à trois niveaux sur la Tour Eiffel montrent, qu'en présence d'une couche de mélange épaisse, les concentrations obtenues sont bien simulées par le modèle ; alors qu'en présence d'une couche très basse, les concentrations au-dessus de la couche sont influencées par des polluants émis en altitude. Les simulations des conditions de pollution sont généralement satisfaisantes, sauf pendant les périodes de vent calme ou lors de l'apparition de brouillard.

Les autres exposés ont montré qu'il est possible d'estimer la distribution des sources comme un champ turbulent (G. ADAMKIEWICZ) dont les coefficients sont ajustés (problème inverse) pour que les concentrations simulées soient proches des observations. Différents modèles de détermination de la hauteur de la couche de mélange, facteur déterminant de la dispersion de polluants, ont été testés (F. BEYRICH) pour différentes conditions météorologiques et quelques recommandations ont été dégagées. L'évaluation et la vérification des modèles doit reposer (M. SOFIEV) sur un ensemble de tests statistiques plus complexes que le simple calcul de la moyenne et de la variance de l'erreur, mais doit utiliser le calcul des fonctions d'auto et d'intercorrélations, du rang statistique, etc. Des tests de sensibilité, sur différents aspects de la simulation de la chimie atmosphérique à l'échelle régionale, montrent (W. GONG) qu'il est important de prendre en compte les différentes influences des nuages (lessivage, taux de photolyse, chimie en phase humide, etc.). Un modèle de simulation de la pollution urbaine (A. KARPPINEN), basé sur un modèle de couche de mélange, un modèle de dispersion à partir de diverses sources, et un modèle d'émissions dues au trafic routier, montre que le modèle simule correctement les concentrations de NO_2 , sauf à une station située à un carrefour important entouré de grands immeubles. Un modèle lagrangien de 2 boîtes, simulant la couche de mélange et la couche résiduelle,

couplé à un modèle d'émissions et à un modèle chimique, permet de prédire opérationnellement (J. ZIMMERMANN) la teneur en ozone dans les villes, de tester la sensibilité des résultats à différents processus, et de montrer l'importance de la dynamique. Les comparaisons des simulations de la pollution, par les modèles EMEP et EURAD, indiquent (H. HASS) que les comportements simulés par les deux modèles sont bien corrélés, mais qu'ils sous-estiment le dépôt des polluants par la pluie. L'analyse des budgets de production de l'ozone par les différents processus physiques et chimiques au-dessus de toute l'Europe montre (P. BUILTJES) que la plus grande photo-production de l'ozone aux basses latitudes est partiellement compensée par une plus grande longueur du jour en été et par une plus faible concentration des précurseurs de l'ozone aux latitudes élevées. La simulation de la circulation météorologique influencée par l'orographie et une brise de mer indique (C. SORIANO, M. COPE) que le modèle simule correctement l'écoulement, mais sans respecter exactement les heures de changement de direction du vent sous l'effet de la brise de mer ; cette déficience a des répercussions sur la simulation des concentrations de polluants. Le développement d'un nuage orographique dans un modèle non hydrostatique conduit (G. GÉREMY), grâce à un modèle microphysique détaillé, à la simulation du spectre des gouttes, dont les caractéristiques sont proches de celles du spectre mesuré au sommet de la montagne, et dont dépend l'évolution des espèces chimiques. Un modèle opérationnel de simulation de la pollution (T. OHARA), basé sur un modèle météorologique régional, un inventaire des sources, et un modèle de chimie et de transport, donne une bonne estimation des concentrations mesurées, à condition que la situation météorologique de grande échelle soit bien obtenue. La dispersion d'un polluant inerte relâché au-dessus d'une vallée profonde est simulée par trois modèles (M. GREEN) pendant plus d'un mois ; les modèles sous-estiment la dispersion des polluants et généralement ne prennent pas suffisamment en compte la canalisation de l'écoulement par la vallée à topographie complexe. Une analyse bayésienne d'un modèle simple de diffusion (R. RAMANOWICZ), basée sur le fait que les mesures sont entachées d'erreurs, permet de remonter aux caractéristiques des sources, en précisant l'intervalle de confiance des observations. Un modèle lagrangien de dispersion (A. GRAFF), basé sur un générateur de champs turbulents cohérents résultant d'une superposition de tourbillons indépendants, permet de bien simuler la diffusion d'un panache pour des conditions de stabilité variées, même si les concentrations sont légèrement sous-estimées dans les cas stables. Un ensemble d'outils pour valider un modèle de diffusion d'un panache a été développé (H. OLESEN), comprenant des données expérimentales et des outils pour éva-

luer les performances du modèle testé ; la méthodologie déployée dans ces outils est en discussion en vue de sa standardisation. Différents modèles de diffusion (E. FERRERO), basés sur une forme spécifique de la densité de probabilité de la vitesse verticale turbulente, montrent que la forme résultant d'un développement de type Gram-Charlier du troisième ou quatrième ordre donne de meilleurs résultats pour la dispersion d'un panache, en l'absence d'un vent moyen.

Conclusions

Comme le montrent les présentations résumées ci-dessus, ainsi que les posters, ces journées ont donné lieu à des présentations de résultats très impressionnants, et également à de nombreuses et fructueuses discussions en séances, se poursuivant souvent en dehors des locaux de la conférence. Différents modèles de simulation ont été comparés, évalués et discutés, et chaque participant est reparti en ayant fait le plein d'idées nouvelles à essayer, de nouvelles données à tester, et de collaborations à établir.

Les comparaisons des résultats des simulations avec les données expérimentales montrent qu'il est d'ores et déjà possible d'analyser, pour chaque situation particulière, les conséquences d'une politique réglementaire visant à diminuer les pics de pollution. En effet, certaines études suggèrent qu'il ne suffit pas de simplement réduire certaines sources pour diminuer la concentration en ozone troposphérique. Ainsi, suivant le rapport initial entre la concentration en oxydes d'azote et celle en composés carbonés volatiles, une diminution de la concentration en oxydes d'azote peut paradoxalement conduire à une augmentation de la concentration en ozone.

Dans le but de faire le bilan et d'ébaucher une prospective, P. BUILTJES a estimé, lors de son exposé invité, que 90 % des processus impliqués dans les phénomènes de pollution atmosphérique nous sont maintenant connus. Certains aspects, comme l'intensité des émissions naturelles et anthropogéniques, comme les processus de chimie en phase liquide et solide dans les nuages, comme l'importance de certaines espèces peu étudiées telles que les espèces radicalaires, doivent encore faire l'objet d'études approfondies. De même, l'utilisation de nouvelles données, en particulier les profils de certaines espèces mesurés par de nouveaux ou futurs satellites, doit permettre d'accroître notre connaissance de la pollution à l'échelle du globe. De plus, la puissance de plus en plus grande des calculateurs vectoriels et des programmes de visualisation des données conduisent à des simulations de plus en plus réalistes, en éliminant au fur et à mesure les hypothèses simplificatrices, ou les trop faibles résolutions spatiales et temporelles des précédentes simulations.