

Modélisation du mercure, du plomb et du cadmium à l'échelle européenne.

Yelva Roustan

Doctorat de l'École Nationale des Ponts et Chaussées

Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique

ENPC / EDF R&D

12 décembre 2005



Des substances utiles...

Mercure: production de chlore, amalgames dentaires, fongicides et bactéricides, orpaillage

Plomb: batteries électriques, pigments de peinture, essence

Cadmium: revêtements anticorrosion, accumulateurs électriques, pigments de peinture, alliages à bas point de fusion

Présents dans le pétrole et le charbon

Mais toxiques et bioaccumulables!

Mercure: reins et système nerveux (hydrargyrisme)

Plomb: anémie, reins et système nerveux (saturnisme)

Cadmium: accumulation dans les reins, désordres osseux et pulmonaires

Convention sur la Pollution Atmosphérique Transfrontalière à Longue Distance (1979)

Protocole d'Aarhus (1998)

Plan

Métaux lourds et modélisation

Simulations

Analyse de sensibilité et modélisation inverse



Métaux lourds et modélisation

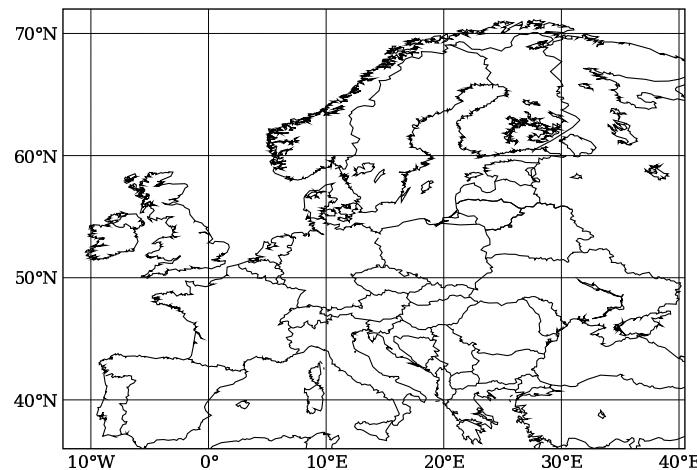
Métaux lourds et modélisation

	forme/état	concentration	temps de vie
Hg ⁰	élémentaire	1.5-2 ng.m ⁻³	mois
Hg ^{II}	oxydé	10-100 pg.m ⁻³	heure, jour
Hg _p	particulaire	10-100 pg.m ⁻³	jour, semaine
Pb	particulaire	1-10 ng.m ⁻³	jour, semaine
Cd	particulaire	0.1-1 ng.m ⁻³	jour, semaine

Métaux lourds et modélisation

- Transport à longue distance

- Domaine continental
(système ouvert)



- Calcul de long terme pour l'étude d'impact

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

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

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u} c)}_{(1)} + \operatorname{div}(\mathbf{K} \nabla c) + \chi(c) - \lambda c + \sigma$$

(1) advection par le vent

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u} c)}_{(1)} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K} \nabla c)}_{(2)} + \chi(c) - \lambda c + \sigma$$

(1) advection par le vent, (2) diffusion turbulente

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u} c)}_{(1)} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K} \nabla c)}_{(2)} + \underbrace{\chi(c)}_{(3)} - \lambda c + \sigma$$

(1) advection par le vent, (2) diffusion turbulente, (3) chimie

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u} c)}_{(1)} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K} \nabla c)}_{(2)} + \underbrace{\chi(c)}_{(3)} - \underbrace{\lambda c}_{(4)} + \sigma$$

(1) advection par le vent, (2) diffusion turbulente, (3) chimie, (4) perte par lessivage

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u} c)}_{(1)} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K} \nabla c)}_{(2)} + \underbrace{\chi(c)}_{(3)} - \underbrace{\lambda c}_{(4)} + \underbrace{\sigma}_{(5)}$$

(1) advection par le vent, (2) diffusion turbulente, (3) chimie, (4) perte par lessivage, (5) émission dans le volume.

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u} c)}_{(1)} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K} \nabla c)}_{(2)} + \underbrace{\chi(c)}_{(3)} - \underbrace{\lambda c}_{(4)} + \underbrace{\sigma}_{(5)}$$

(1) advection par le vent, (2) diffusion turbulente, (3) chimie, (4) perte par lessivage, (5) émission dans le volume.

$$\text{Flux} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} c_{\text{lim}} \quad \text{si} \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} > 0$$

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u} c)}_{(1)} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K} \cdot \nabla c)}_{(2)} + \underbrace{\chi(c)}_{(3)} - \underbrace{\lambda c}_{(4)} + \underbrace{\sigma}_{(5)}$$

(1) advection par le vent, (2) diffusion turbulente, (3) chimie, (4) perte par lessivage, (5) émission dans le volume.

$$\text{Flux} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} c_{\text{lim}} \quad \text{si} \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} > 0$$

$$(\mathbf{K} \cdot \nabla c) \cdot \mathbf{n} = E - v_d c$$

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u} c)}_{(1)} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K} \cdot \nabla c)}_{(2)} + \underbrace{\chi(c)}_{(3)} - \underbrace{\lambda c}_{(4)} + \underbrace{\sigma}_{(5)}$$

(1) advection par le vent, (2) diffusion turbulente, (3) chimie, (4) perte par lessivage, (5) émission dans le volume.

$$\text{Flux} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} c_{\text{lim}} \quad \text{si} \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} > 0$$

$$(\mathbf{K} \cdot \nabla c) \cdot \mathbf{n} = \underbrace{E}_{(6)} - v_d c$$

(6) émission de surface

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u} c)}_{(1)} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K} \cdot \nabla c)}_{(2)} + \underbrace{\chi(c)}_{(3)} - \underbrace{\lambda c}_{(4)} + \underbrace{\sigma}_{(5)}$$

(1) advection par le vent, (2) diffusion turbulente, (3) chimie, (4) perte par lessivage, (5) émission dans le volume.

$$\text{Flux} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} c_{\text{lim}} \quad \text{si} \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} > 0$$

$$(\mathbf{K} \cdot \nabla c) \cdot \mathbf{n} = \underbrace{E}_{(6)} - \underbrace{v_d c}_{(7)}$$

(6) émission de surface, (7) perte par dépôt sec.

Équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u} c)}_{(1)} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K} \cdot \nabla c)}_{(2)} + \underbrace{\chi(c)}_{(3)} - \underbrace{\lambda c}_{(4)} + \underbrace{\sigma}_{(5)}$$

(1) advection par le vent, (2) diffusion turbulente, (3) chimie, (4) perte par lessivage, (5) émission dans le volume.

$$\text{Flux} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} c_{\text{lim}} \quad \text{si} \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} > 0$$

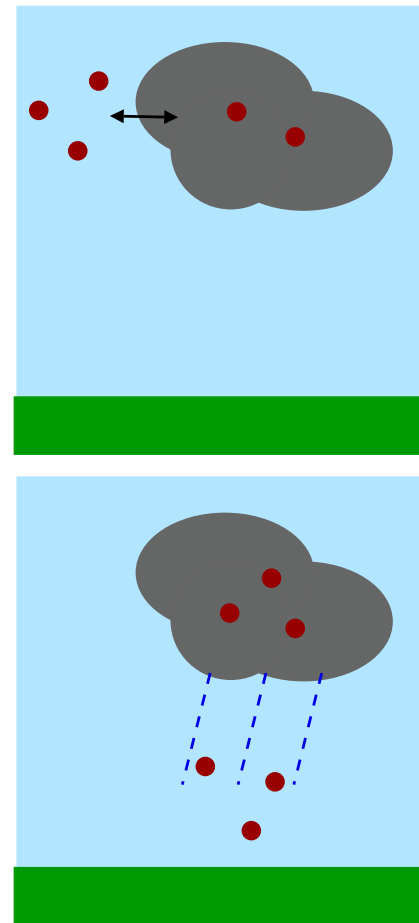
$$(\mathbf{K} \cdot \nabla c) \cdot \mathbf{n} = \underbrace{E}_{(6)} - \underbrace{v_d c}_{(7)}$$

(6) émission de surface, (7) perte par dépôt sec.

$$c_0 = c(t = 0)$$

Dépôt humide

- transfert de masse dans la phase aqueuse nuageuse
 - retrait de l'atmosphère lors des précipitations
- (1) d'une partie de la masse présente dans l'eau nuageuse
- (2) d'une partie de la masse présente dans le volume balayée par l'eau précipitante



Dépôt humide

Transfert de masse de l'atmosphère vers la surface:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{humide}} = -\lambda c$$

Dépôt humide

Transfert de masse de l'atmosphère vers la surface:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)_{\text{humide}} = -\lambda c$$

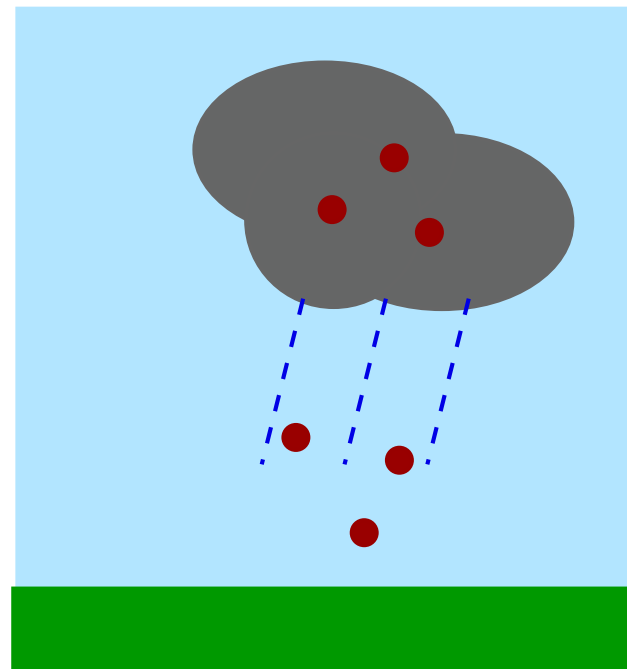
Lessivage des gaz

- par les nuages

$$\lambda_n = \frac{e^{-\tau_n/\tau_v} - 1}{\tau_n}$$

- par les précipitations

$$\lambda_{p,g} = \frac{\alpha P_0}{\tau_t} e^{-\beta}$$



Dépôt humide

Transfert de masse de l'atmosphère vers la surface:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{\text{humide}} = -\lambda c$$

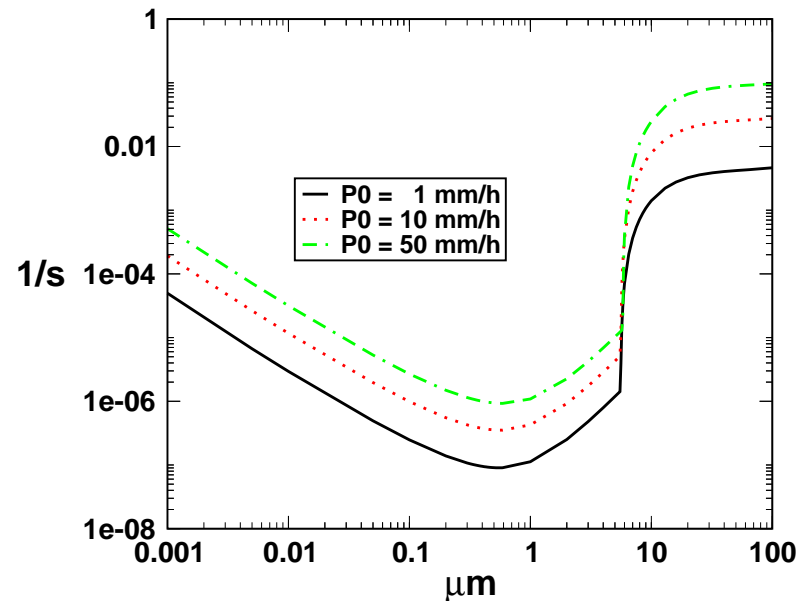
Lessivage des particules

- par les nuages

$$\lambda_n = \frac{e^{-\tau_n/\tau_v} - 1}{\tau_n}$$

- par les précipitations

$$\lambda_{p,p} = \frac{3}{2} \frac{E_{\text{ff}} P_0}{D_r}$$



Dépôt sec

Transfert de masse de l'atmosphère vers la surface:

$$\text{Flux}_{\text{sec}} = v_d c$$

Dépôt sec

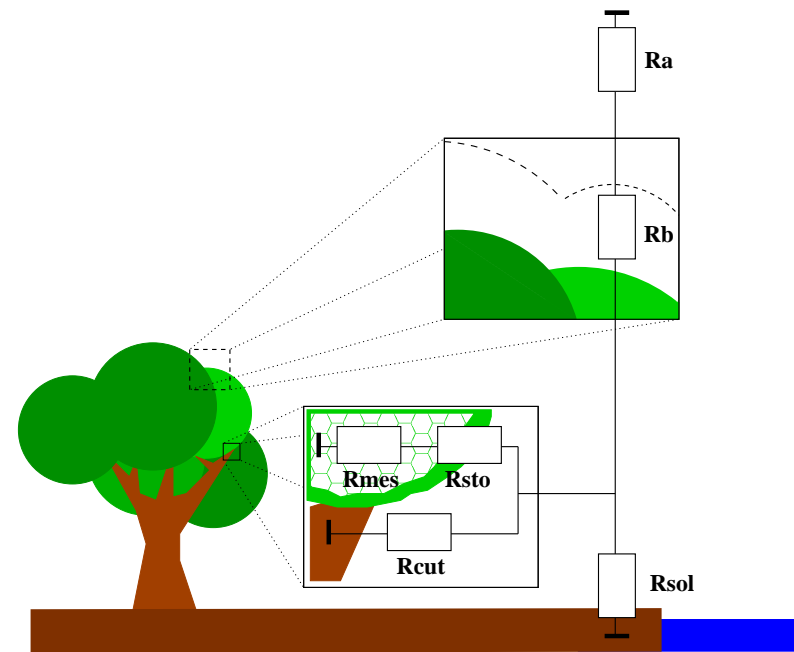
Transfert de masse de l'atmosphère vers la surface:

$$\text{Flux}_{\text{sec}} = v_d c$$

Dépôt des gaz

- diffusion turbulente
- diffusion moléculaire
- captation par la surface

$$v_d = \frac{1}{R_a + R_b + R_c}$$



$$1/R_c = 1/R_{sol} + 1/R_{cut} + 1/(R_{mes}+R_{sto})$$

Dépôt sec

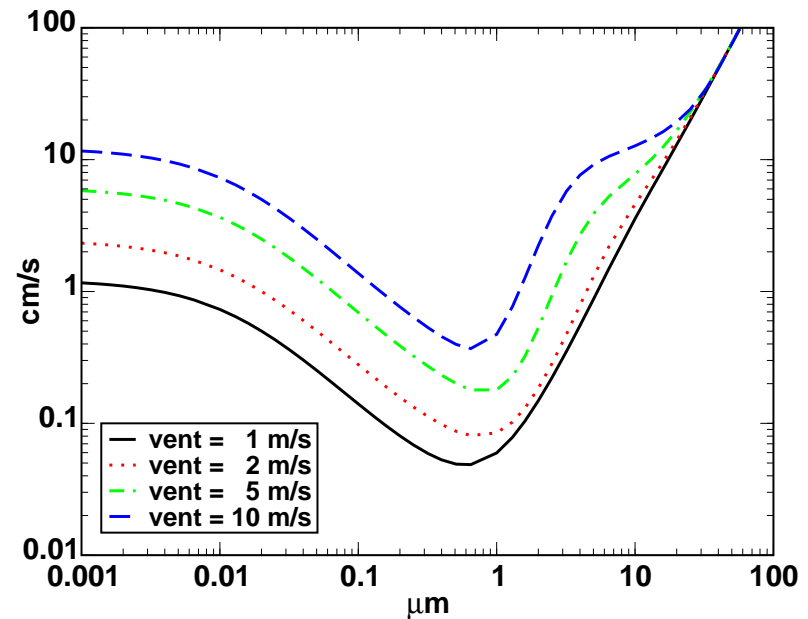
Transfert de masse de l'atmosphère vers la surface:

$$\text{Flux}_{\text{sec}} = v_d c$$

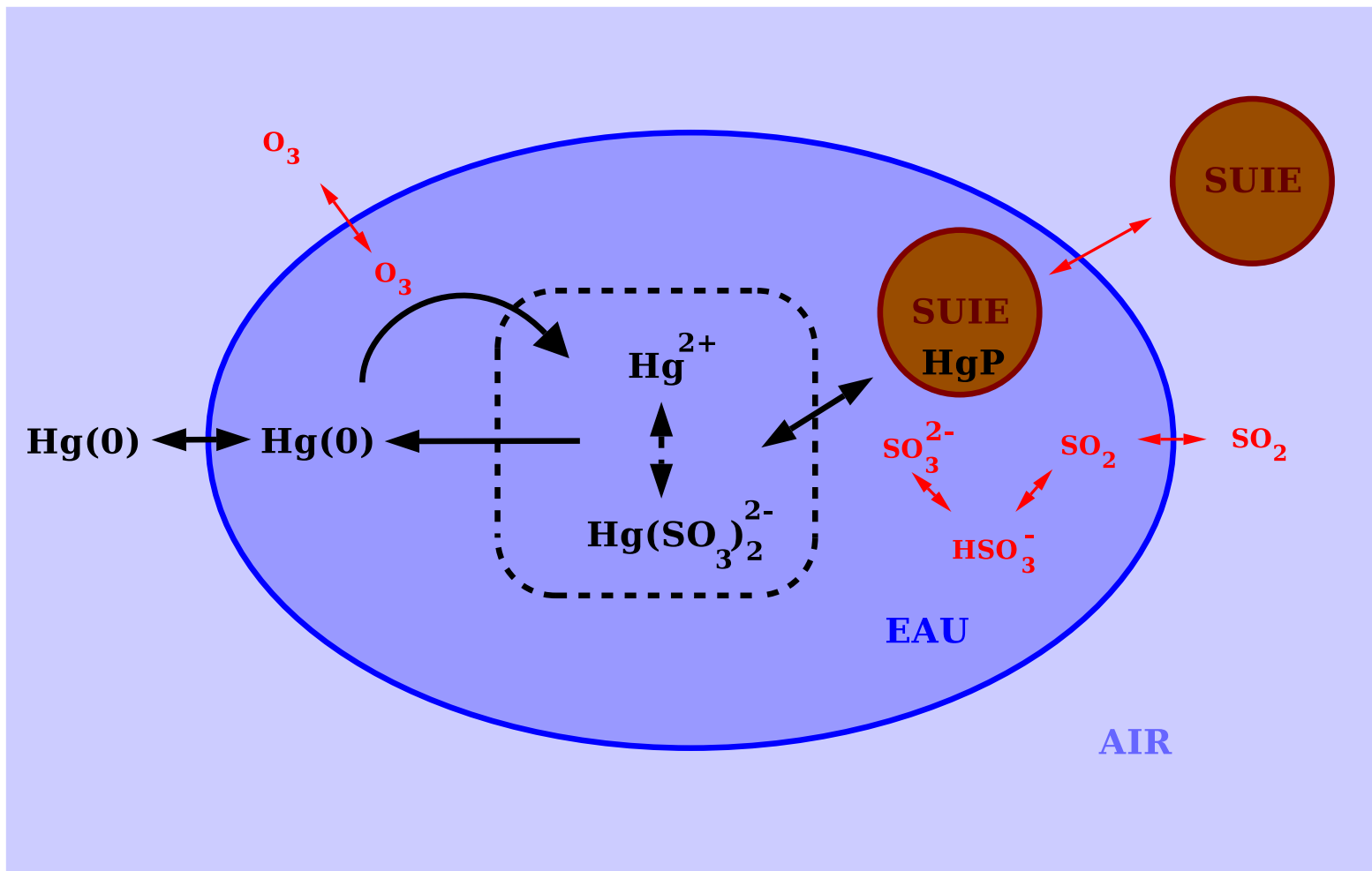
Dépôt sec des particules

- vitesse de sédimentation
- diffusion turbulente
- captation par la surface

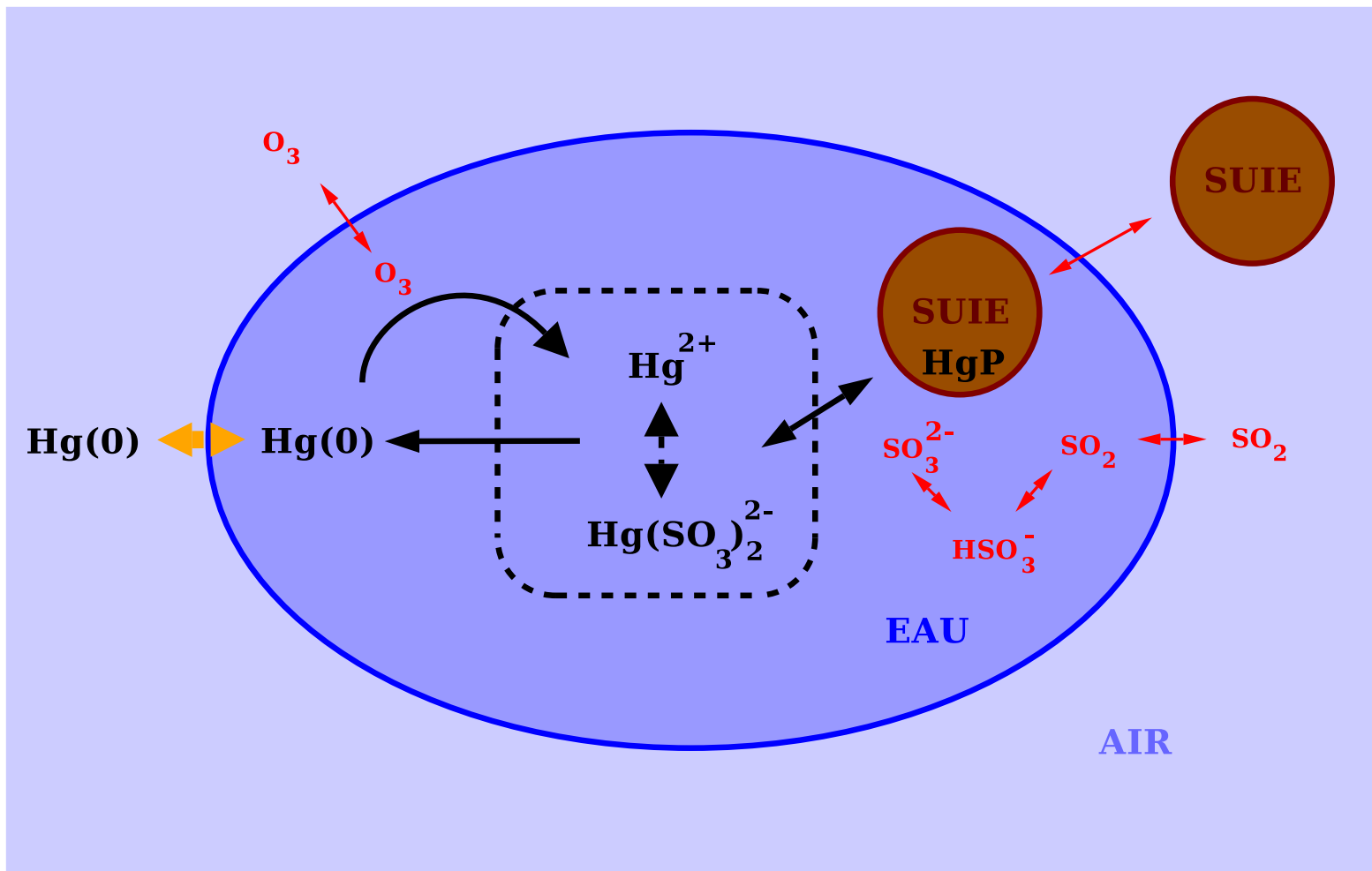
$$v_d = v_g + \frac{1}{R_a + R_s}$$



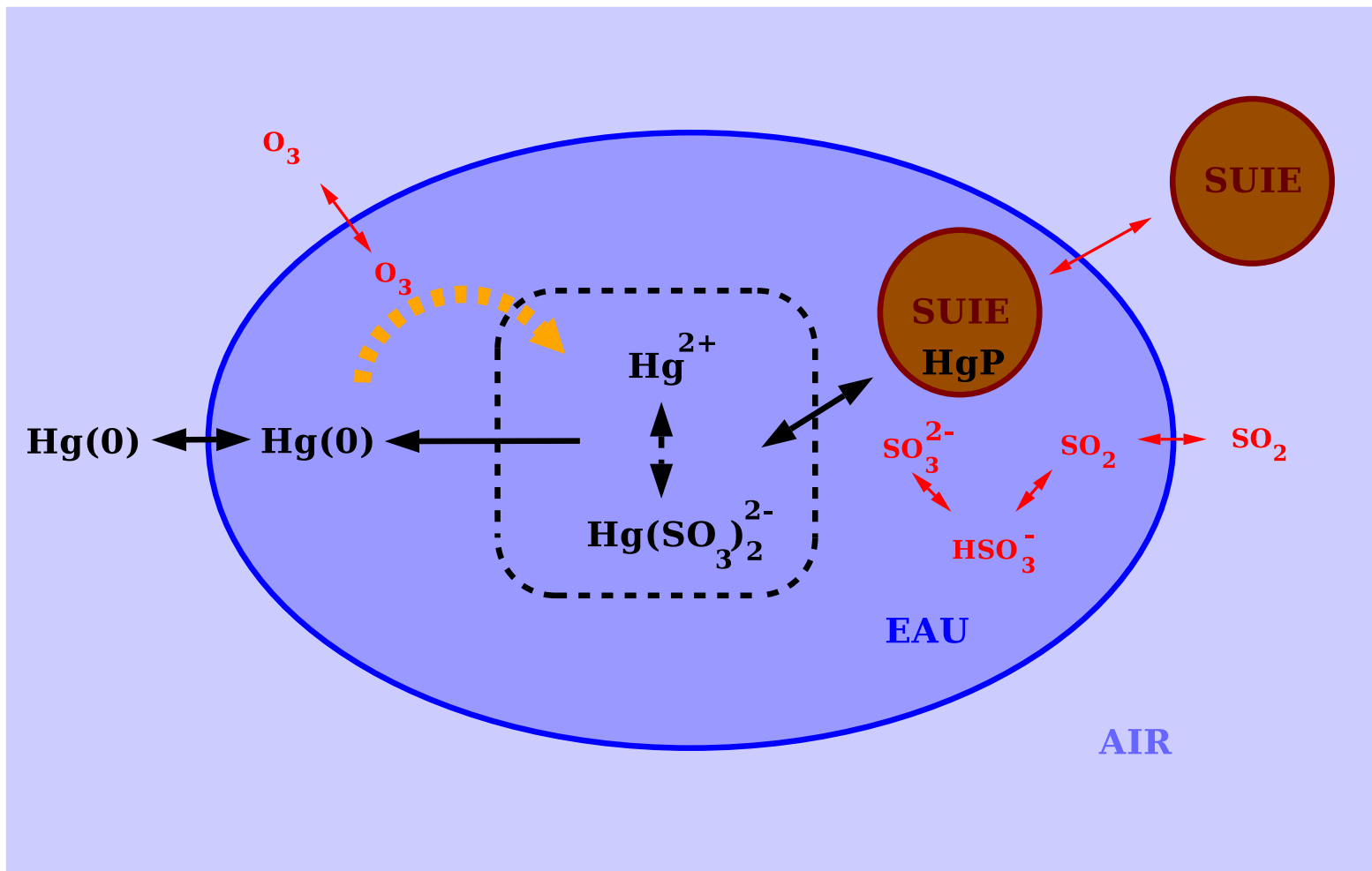
Modèle chimique de Petersen (1995)



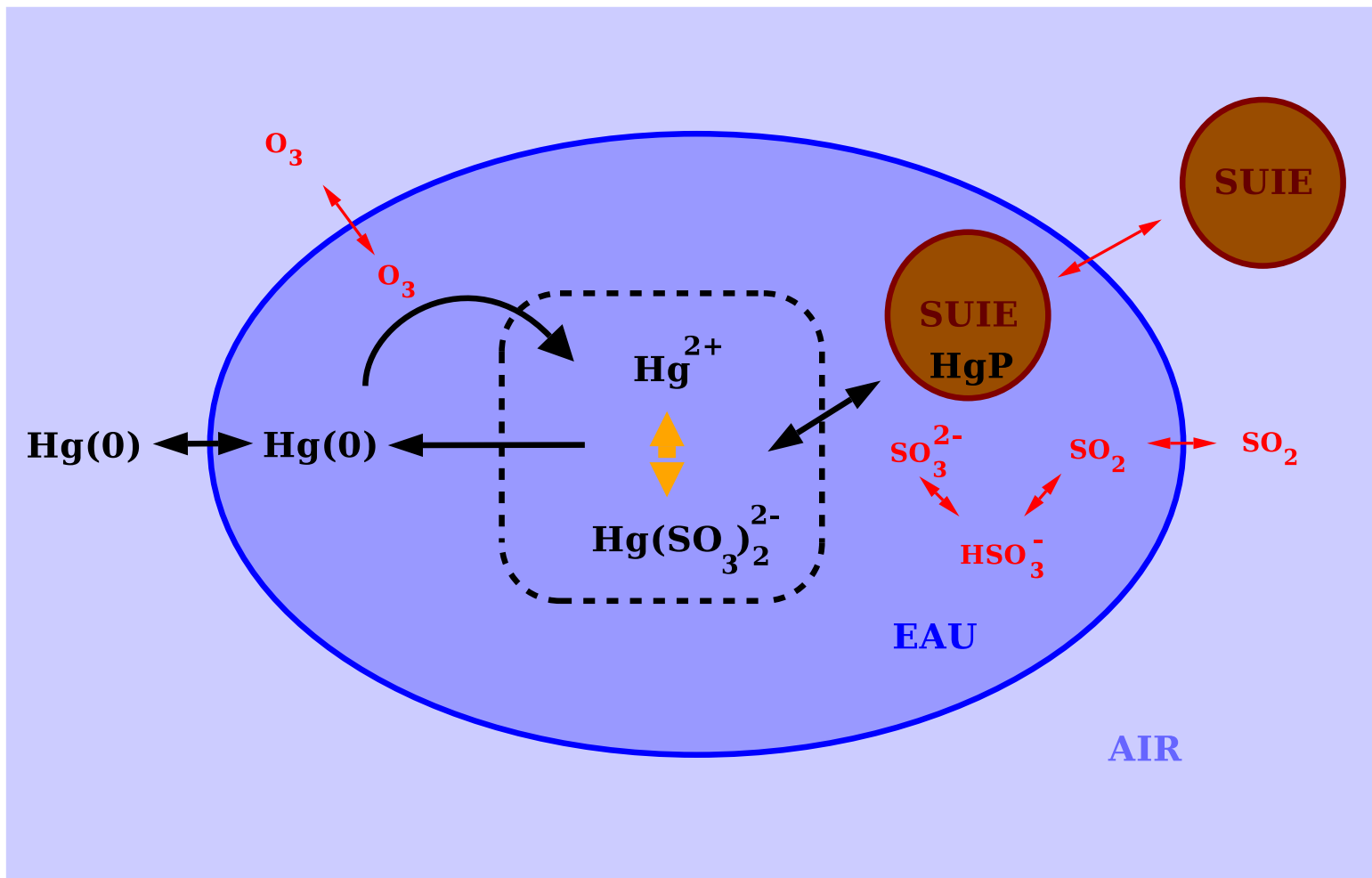
Modèle chimique de Petersen (1995)



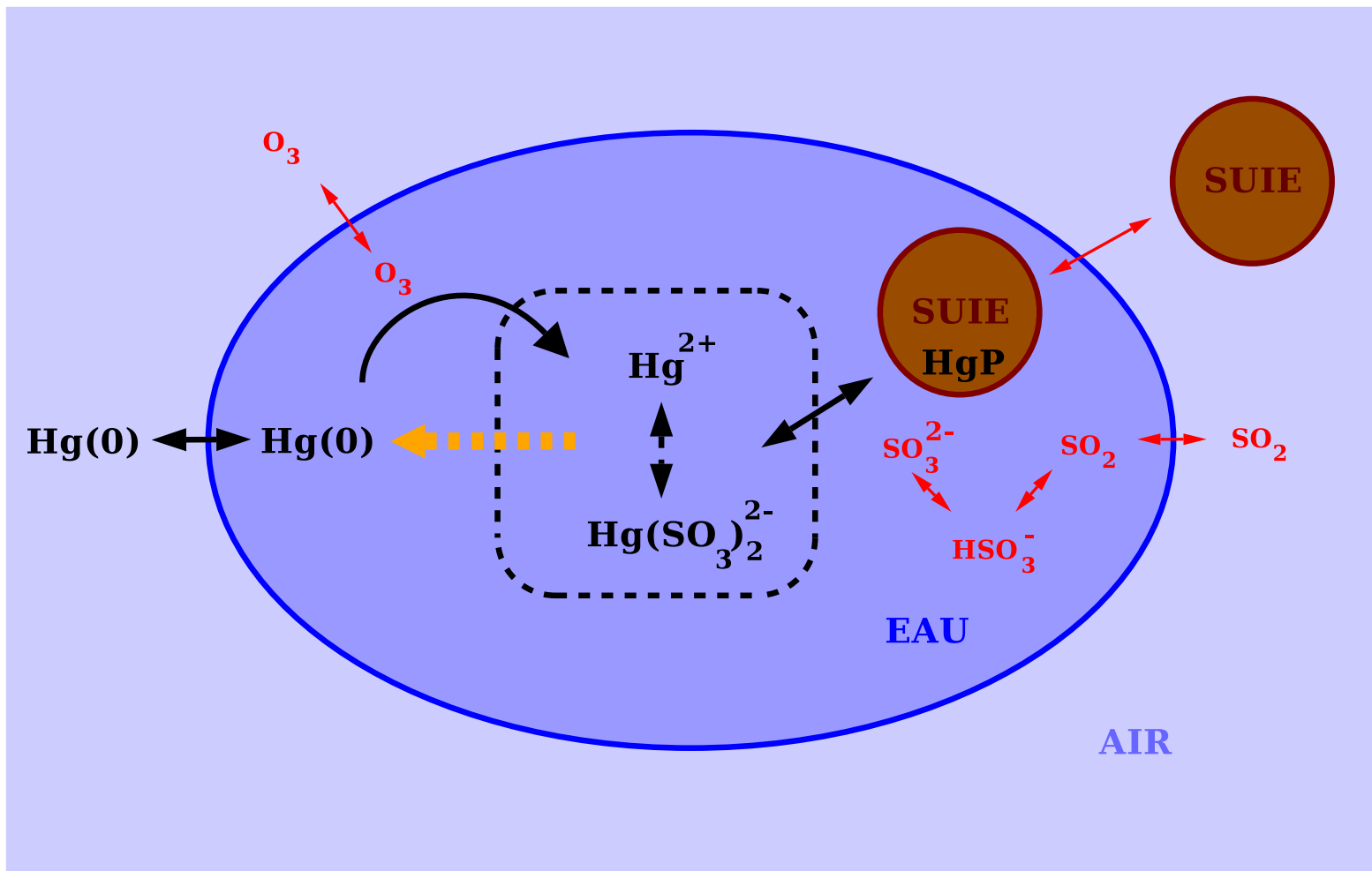
Modèle chimique de Petersen (1995)



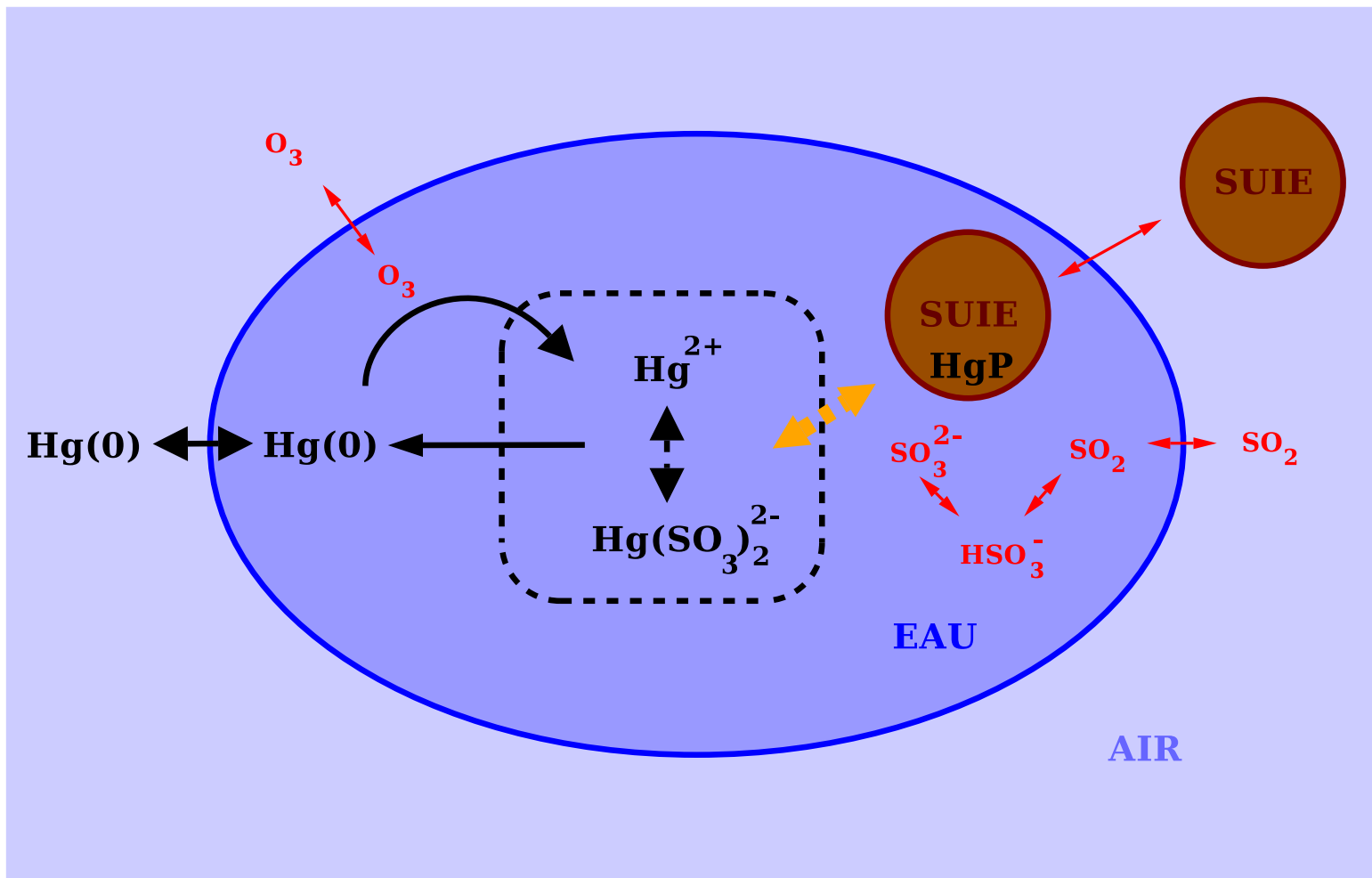
Modèle chimique de Petersen (1995)



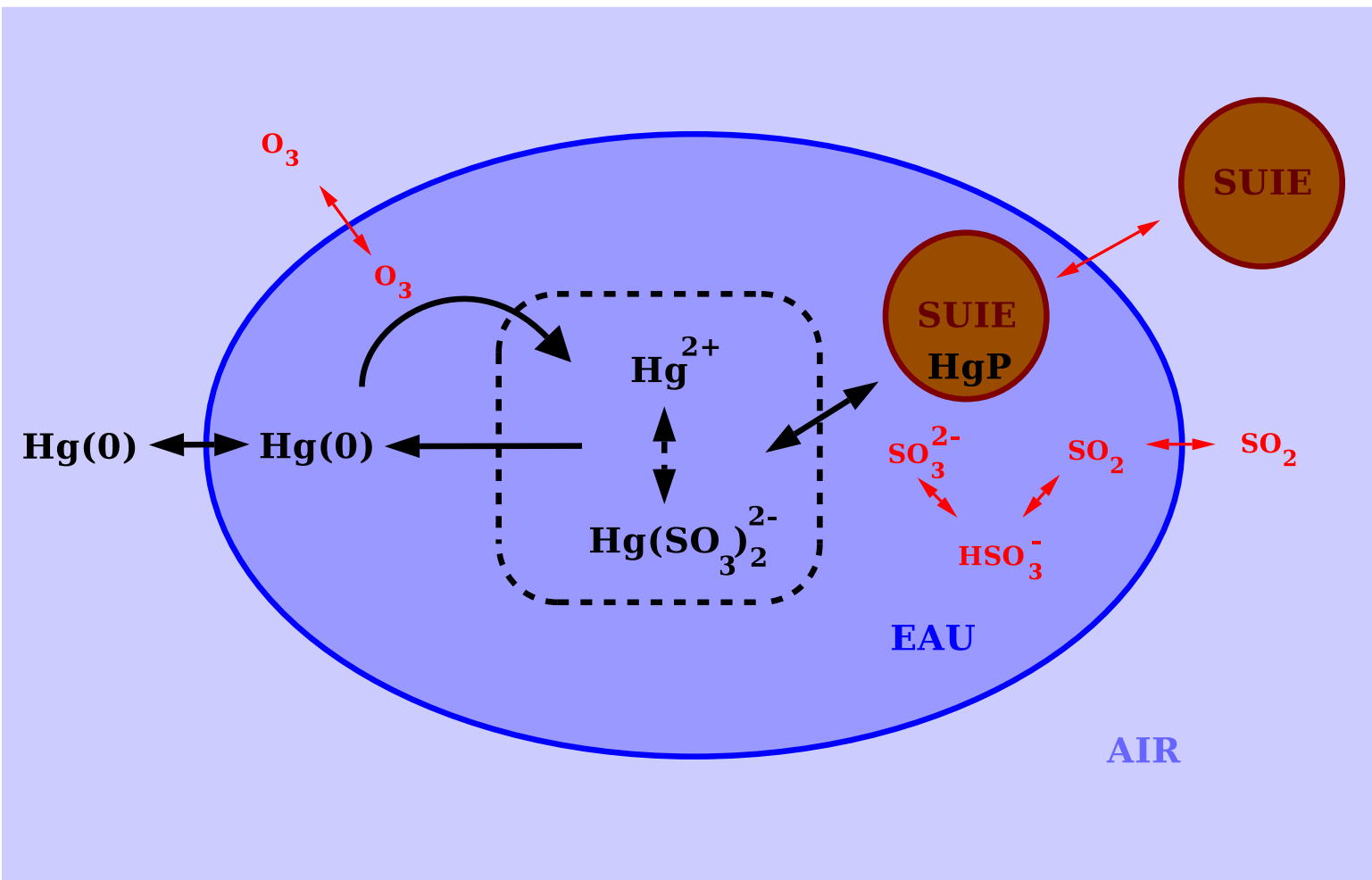
Modèle chimique de Petersen (1995)



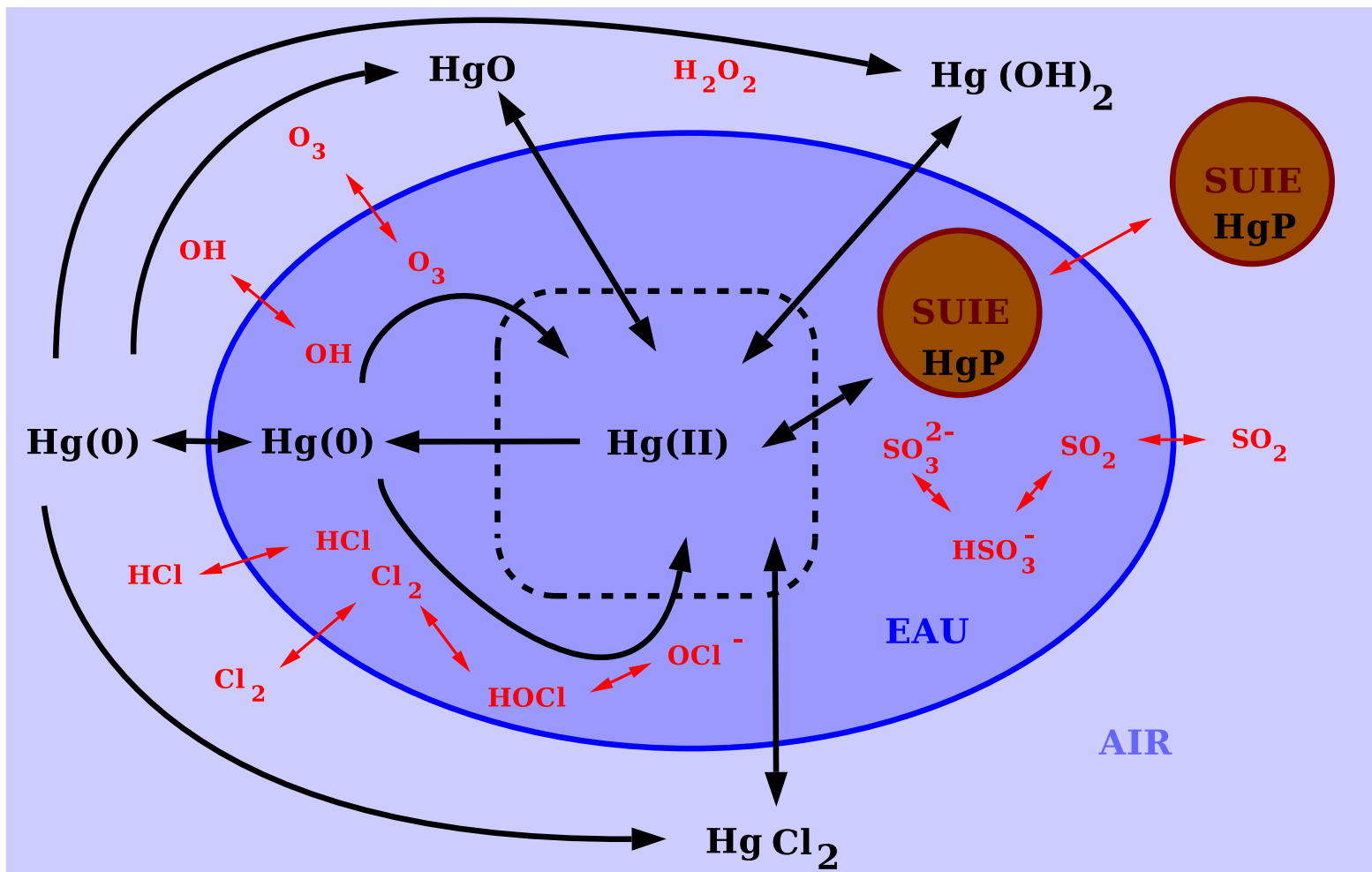
Modèle chimique de Petersen (1995)



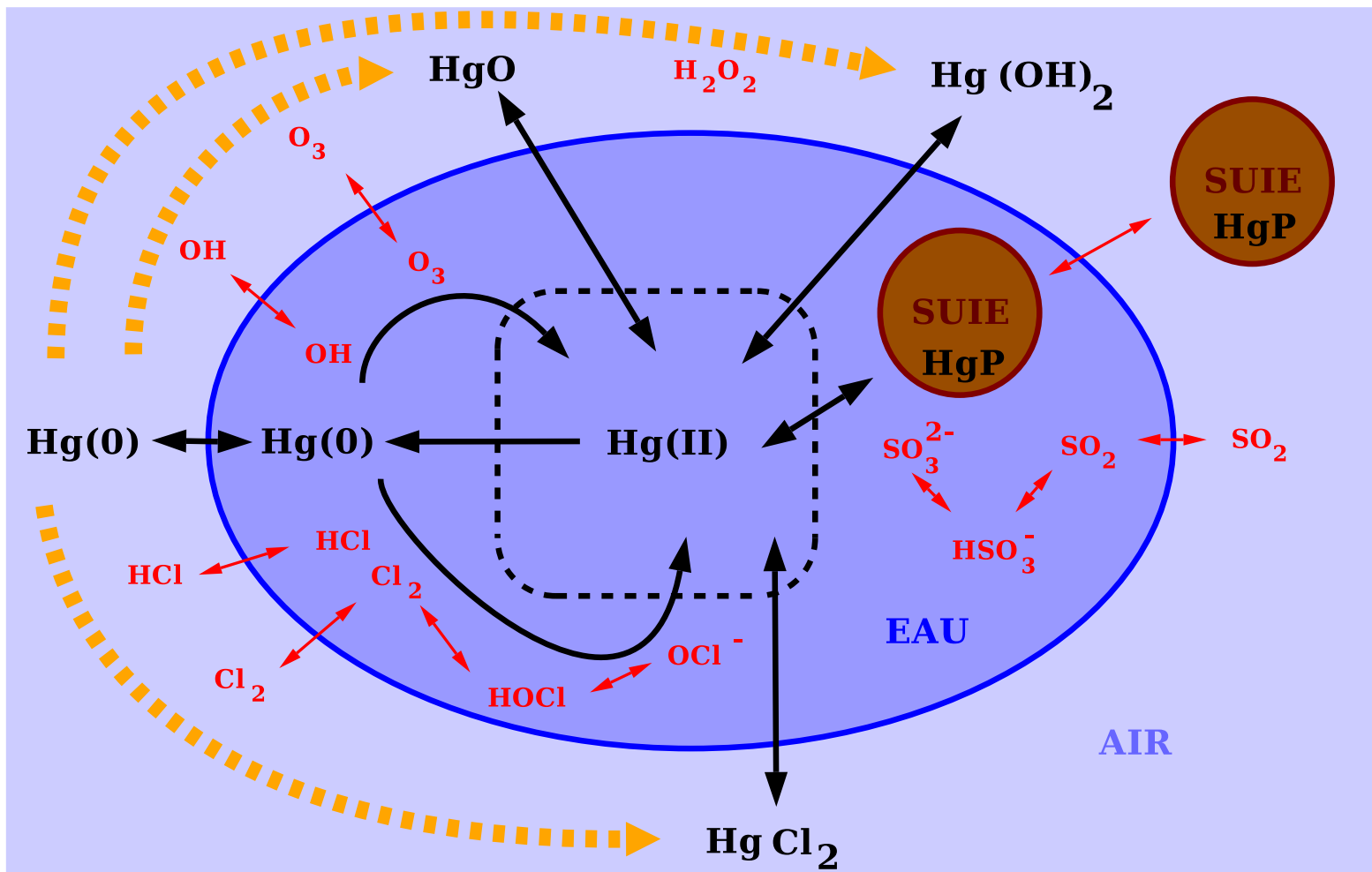
Modèle chimique de Petersen (1995)



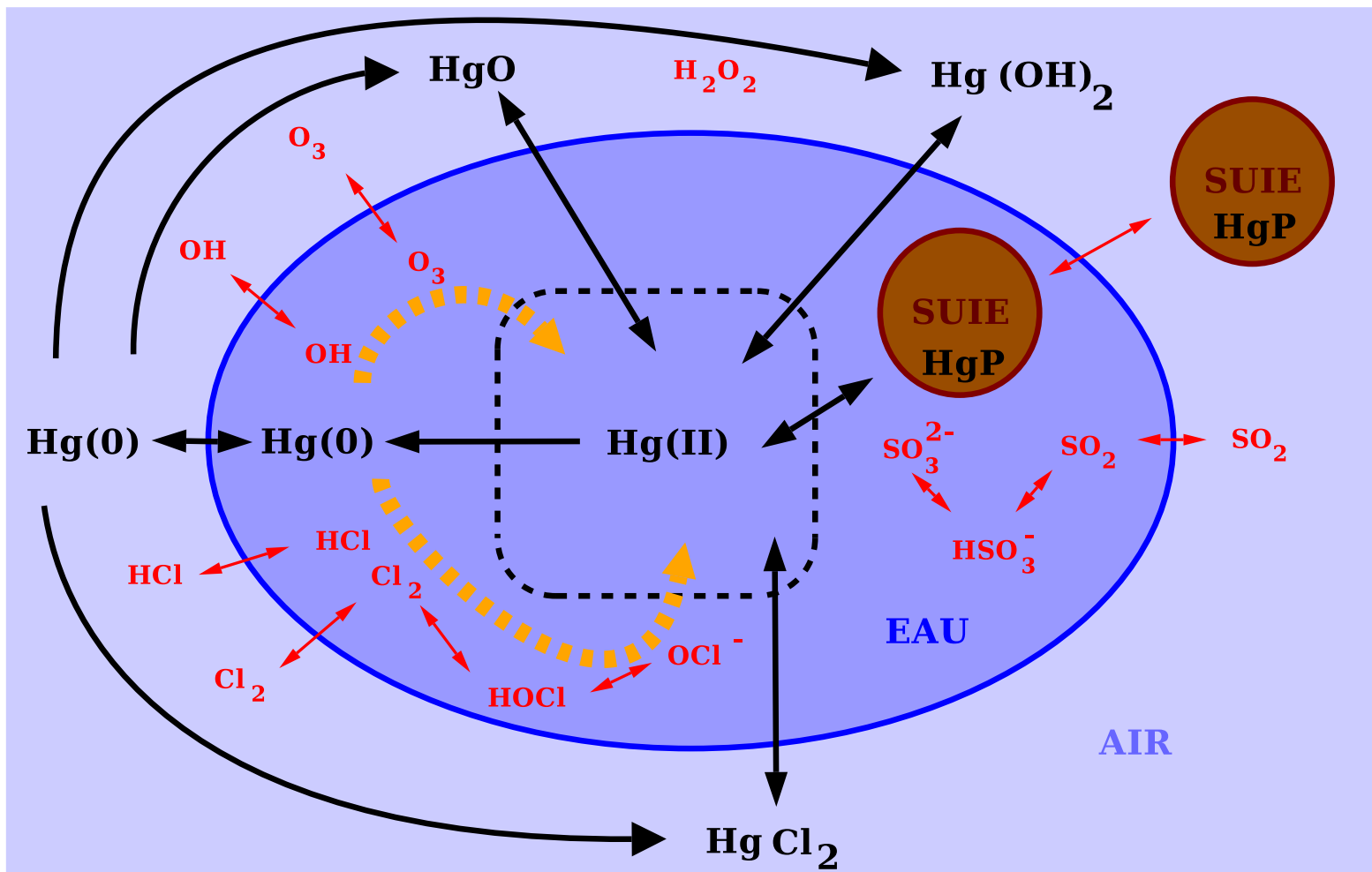
Modèle chimique complété (Ryaboshapko [2002])



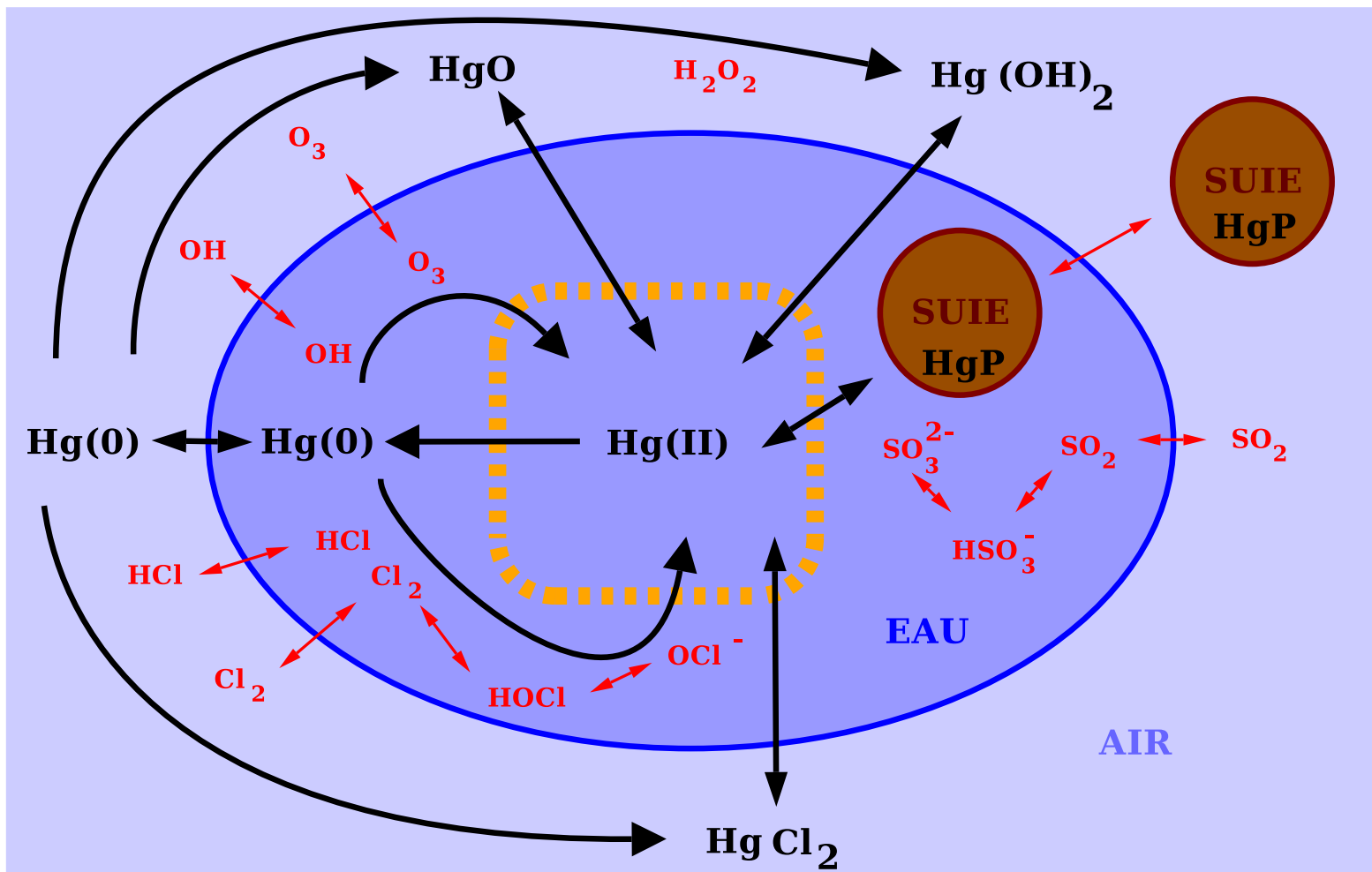
Modèle chimique complété (Ryaboshapko [2002])



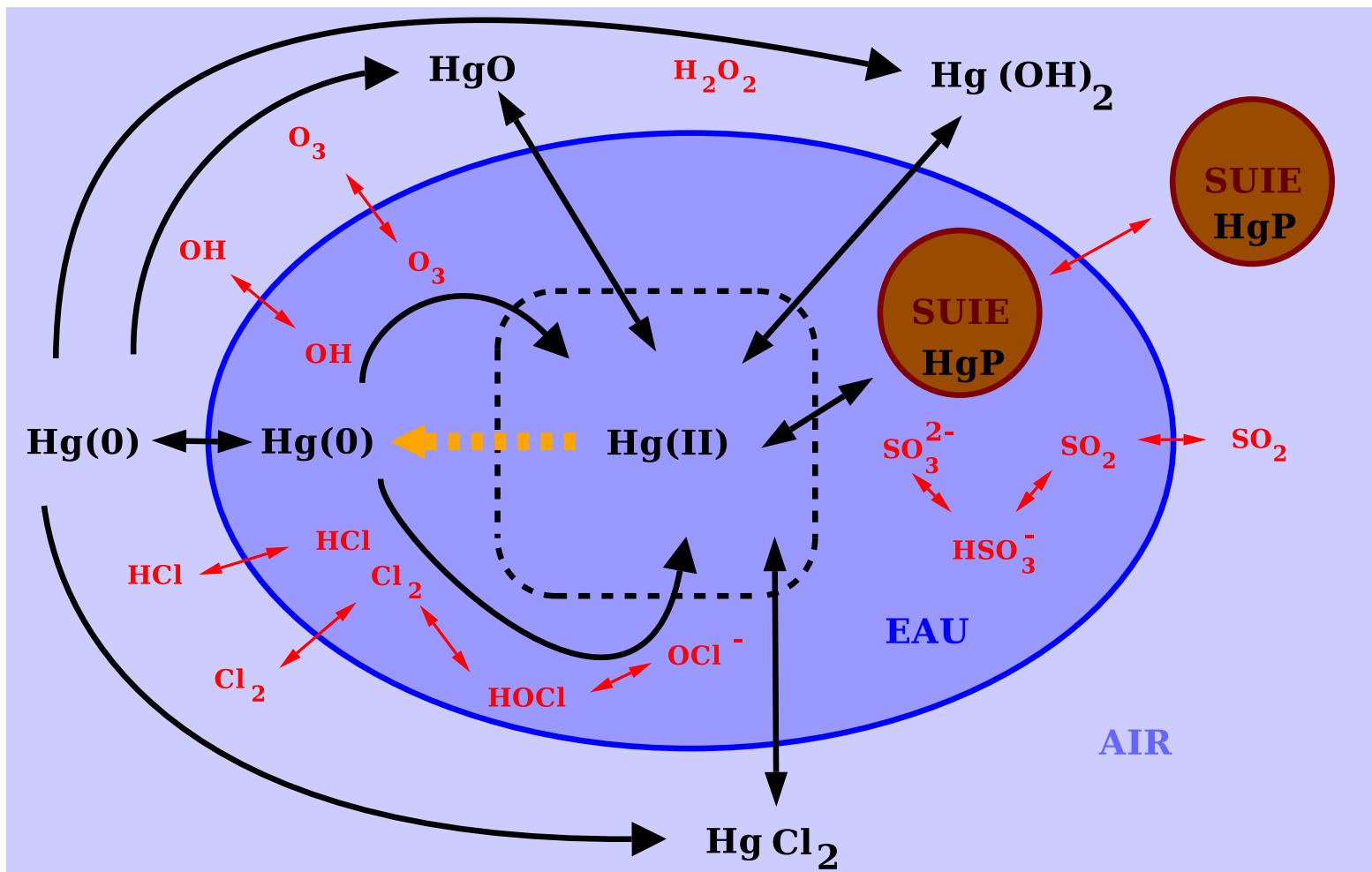
Modèle chimique complété (Ryaboshapko [2002])



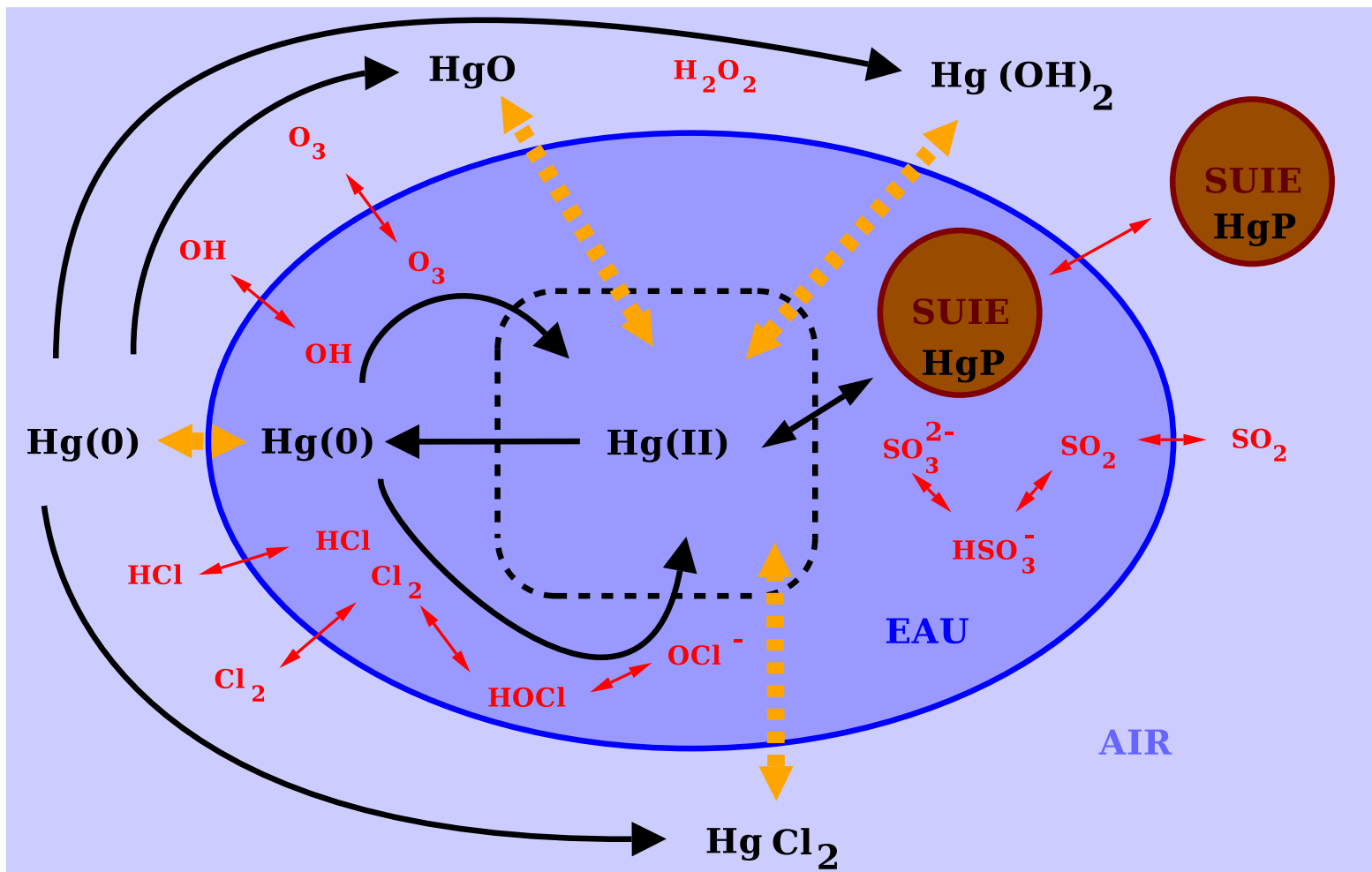
Modèle chimique complété (Ryaboshapko [2002])



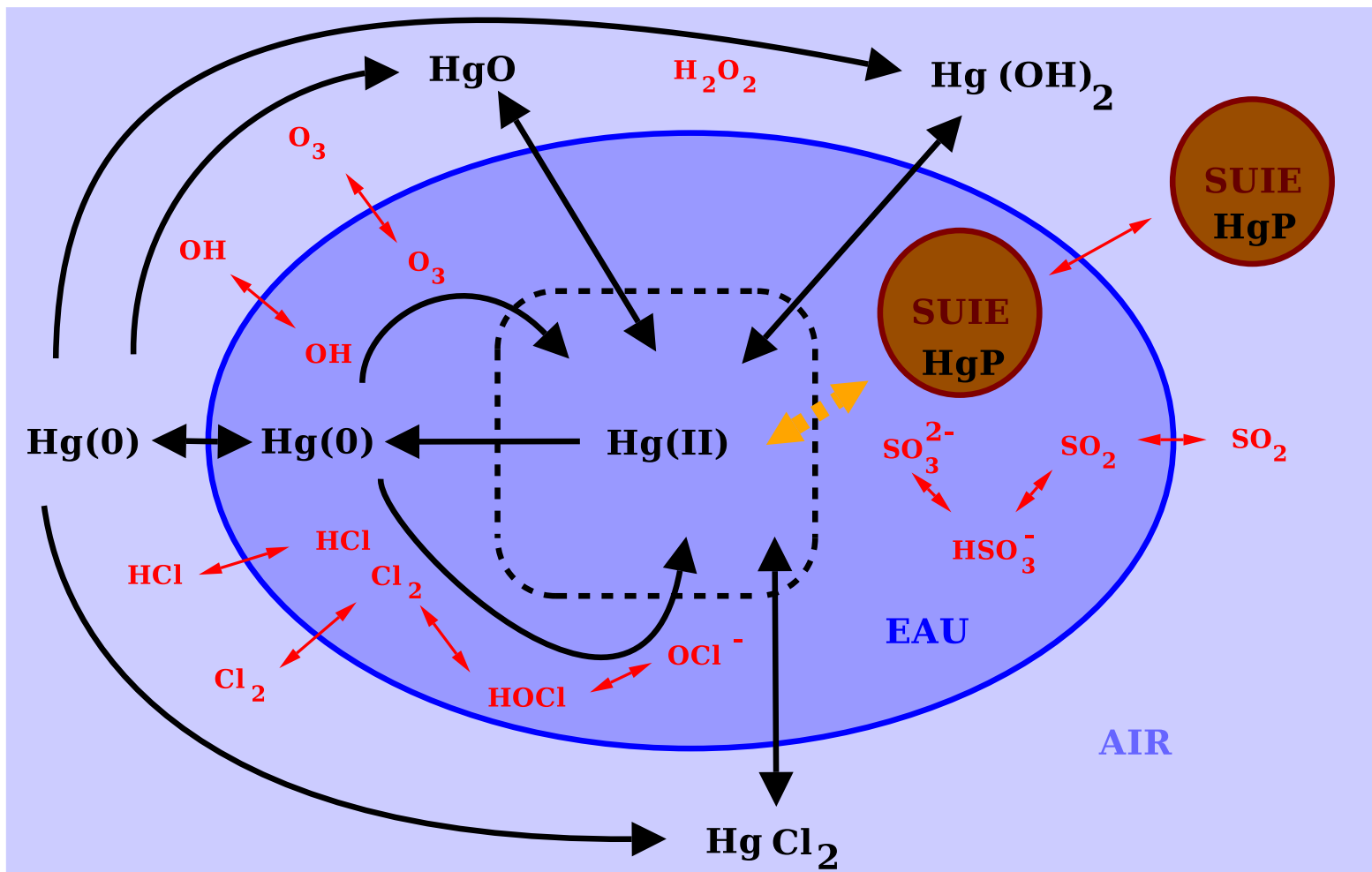
Modèle chimique complété (Ryaboshapko [2002])



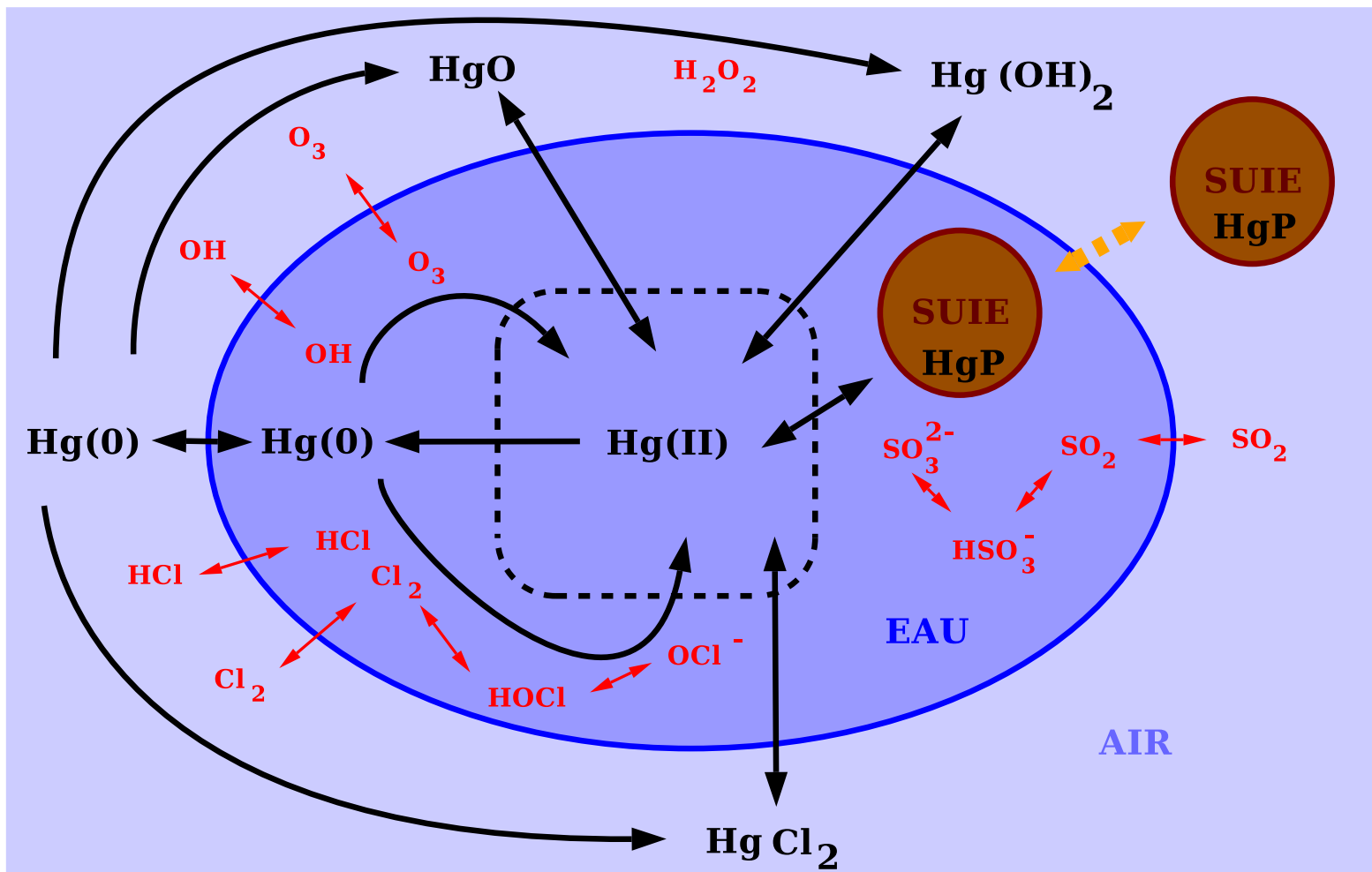
Modèle chimique complété (Ryaboshapko [2002])



Modèle chimique complété (Ryaboshapko [2002])



Modèle chimique complété (Ryaboshapko [2002])



Population de particules “métalliques”

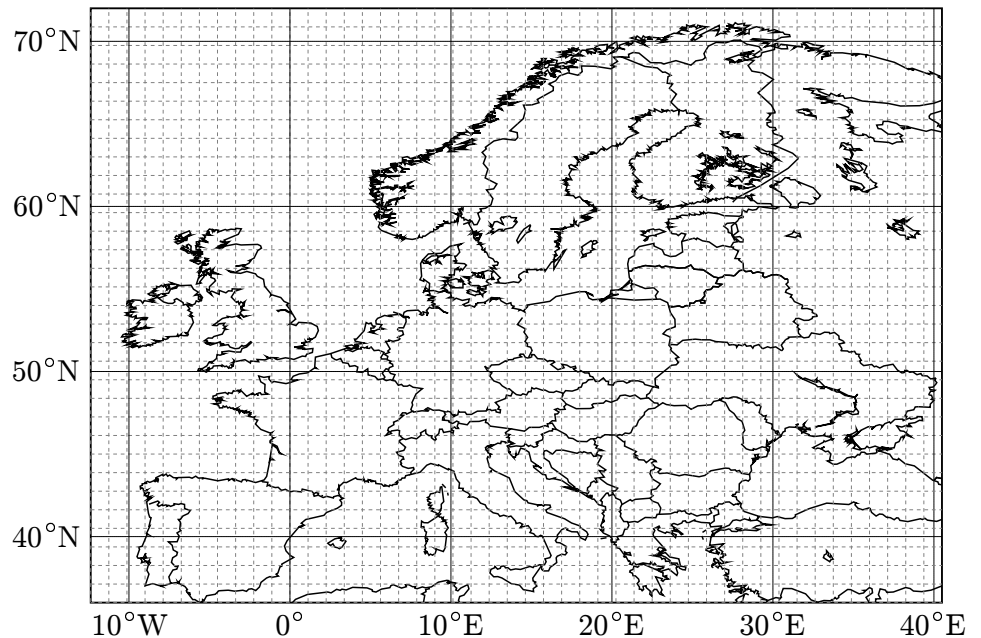
- population de taille fixe - DMM
(Hg_p $0.61 \mu\text{m}$, Pb $0.55 \mu\text{m}$ et Cd $0.84 \mu\text{m}$)
- approche multi-diamètres
10 diamètres représentatifs ($0.015 \mapsto 7.5 \mu\text{m}$)
- modèle d'aérosol résolu en taille (SIREAM)
10 classes de taille ($0.01 \mapsto 10 \mu\text{m}$)



Simulations

Domaine & Données

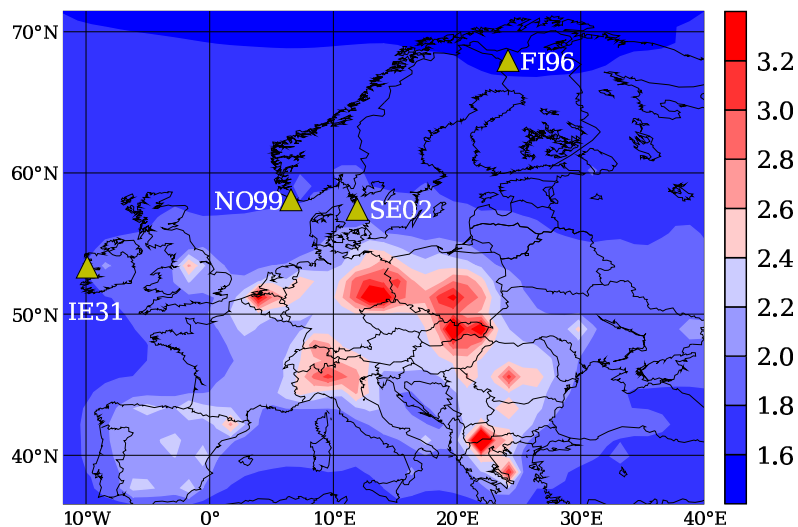
année 2001	900 s
12.375°W à 37.125°E	1.125°
36°N à 72°N	1.125°
0 - 5233 m (hauteur relative)	14 niveaux verticaux
météorologie	ECMWF
conditions aux limites, initiales et émissions	MSC-E
occupation des sols	RIVM
mesures	CCC



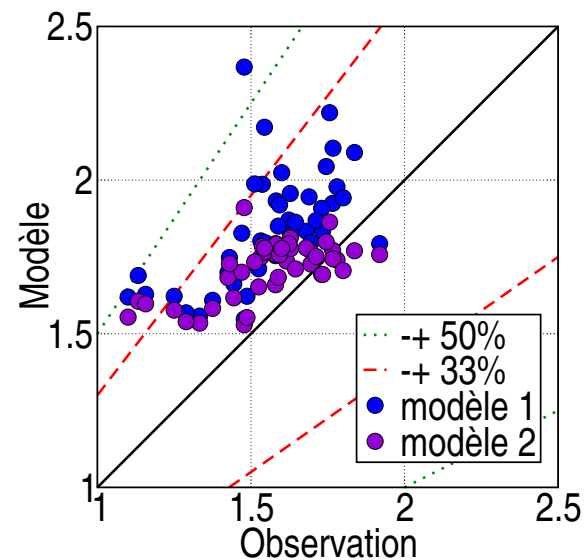
Modèle de chimie-transport POLAIR3D
Plateforme de simulation Polyphemus

Concentration totale de mercure gazeux (ng.m^{-3})

moyenne annuelle



moyenne mensuelle



moyenne annuelle

IE31 FI96 NO99 SE02

observation

1.64 1.32 1.65 1.66

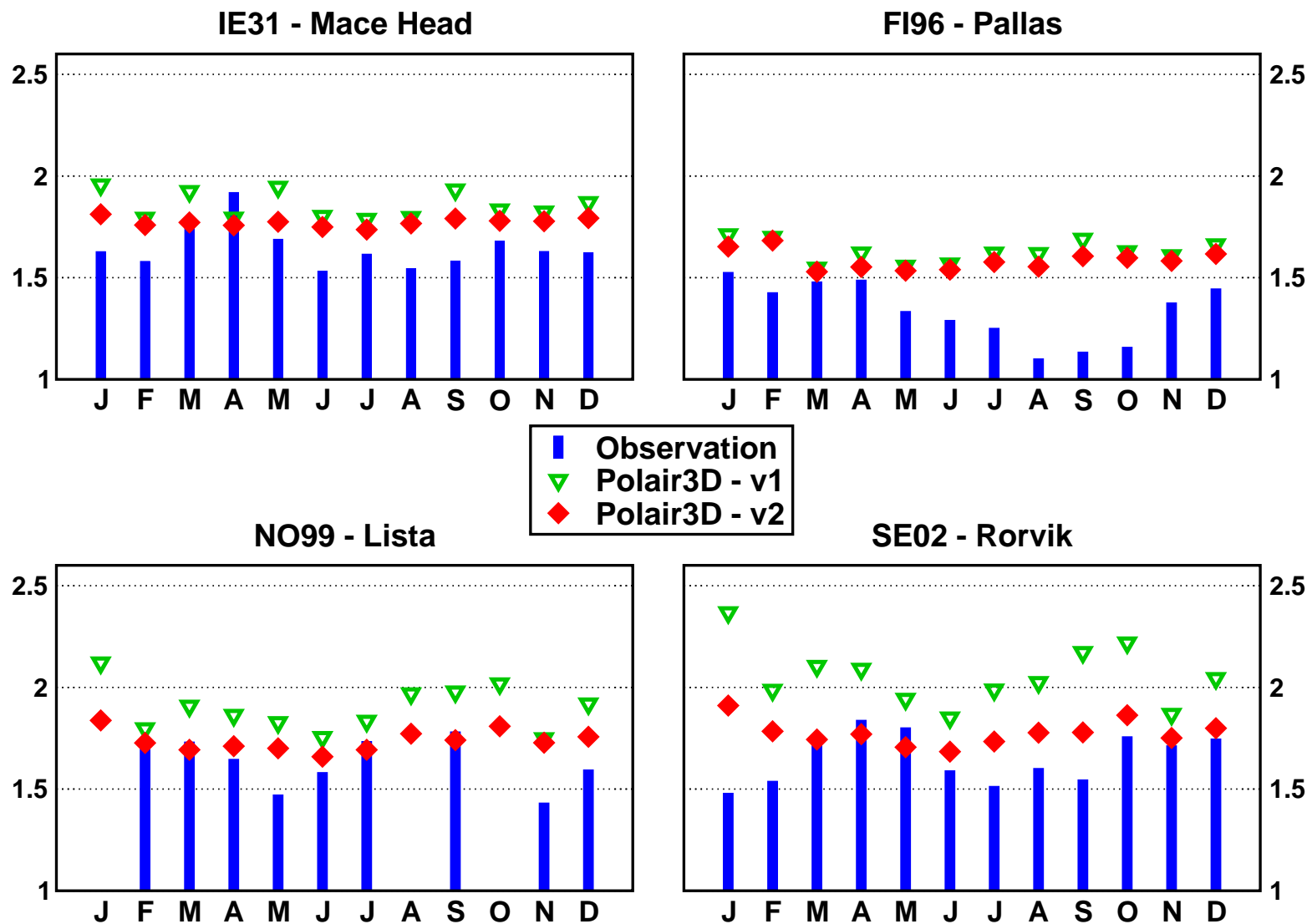
modèle de Petersen (modèle 1)

1.85 1.62 1.89 2.04

modèle complété (modèle 2)

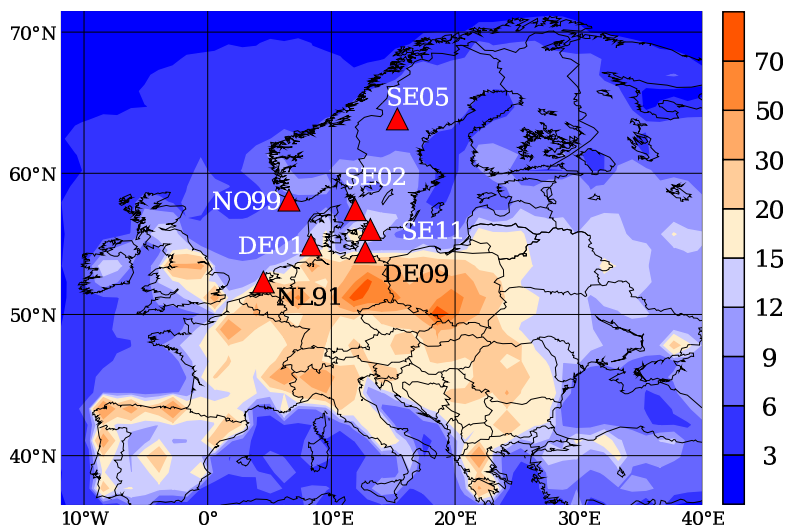
1.81 1.58 1.79 1.88

Concentration totale de mercure gazeux (ng.m^{-3})

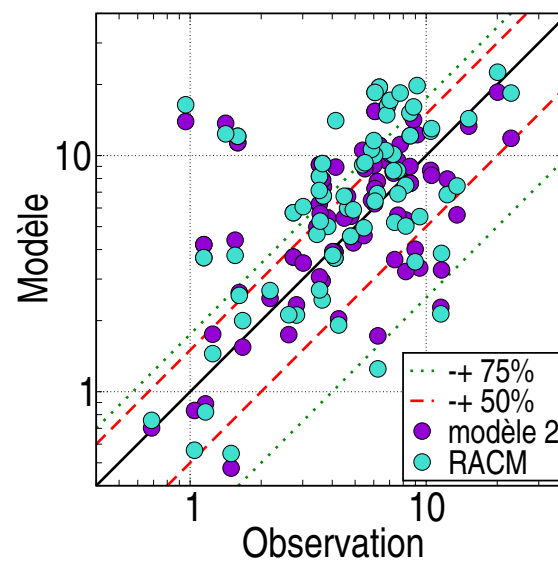


Flux de dépôt de mercure ($\text{g.km}^{-2}.\text{an}^{-1}$)

dépôt total - 2001

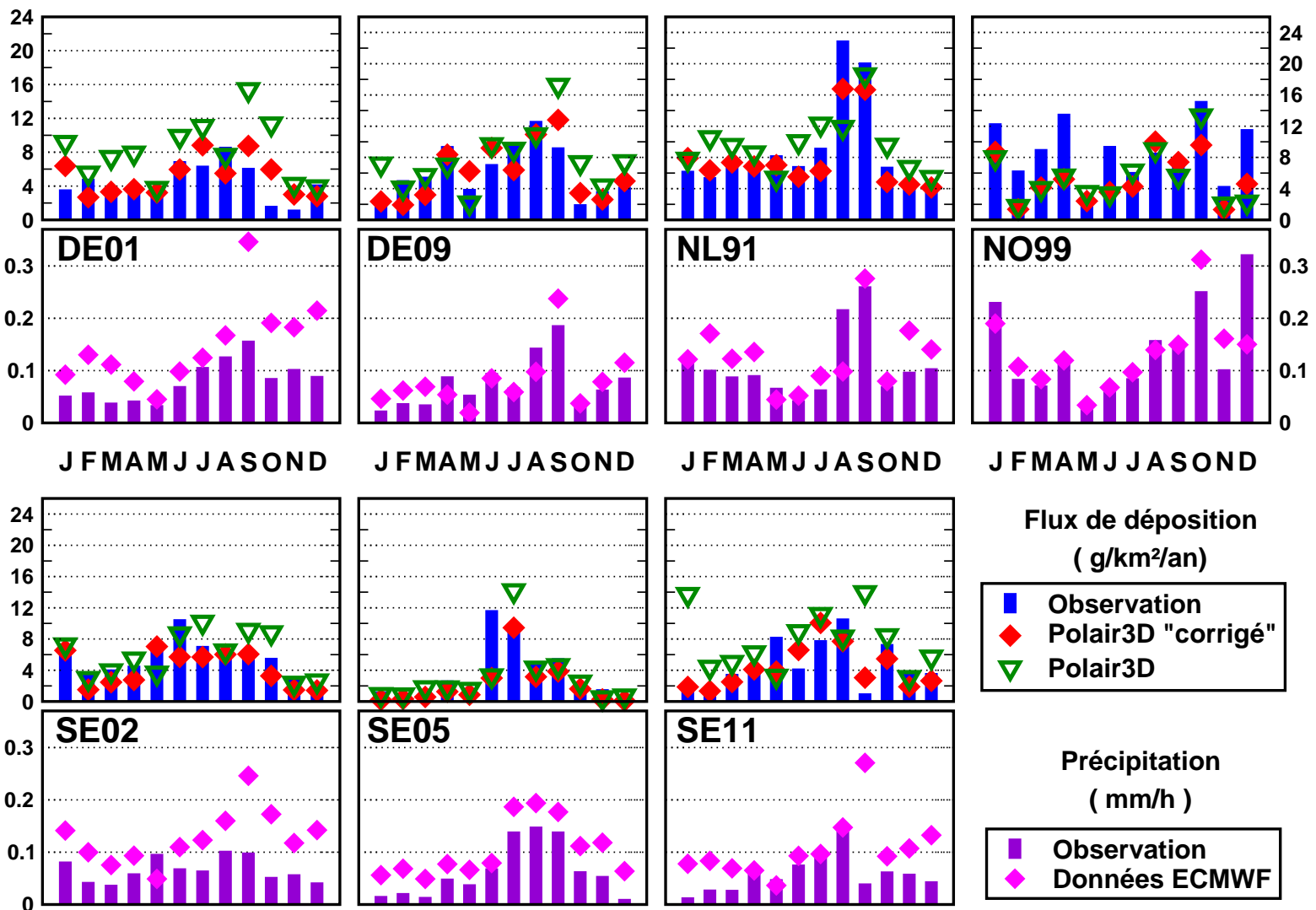


dépôt humide
moyenne mensuelle



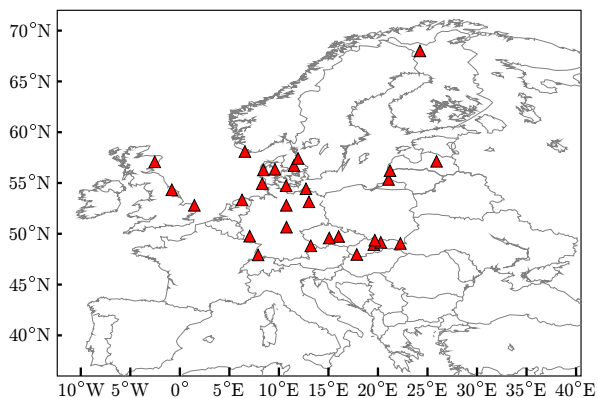
dépôt humide - 2001	DE01	DE09	NL91	NO99	SE02	SE05	SE11
observation	4.4	6.2	9.1	8.9	5.4	3.6	4.7
modèle complété	5.0	6.0	7.9	5.2	4.2	2.1	4.2
RACM	6.4	7.9	9.6	6.5	5.4	2.4	5.7

Flux de dépôt humide de mercure ($\text{g.km}^{-2}.\text{an}^{-1}$)

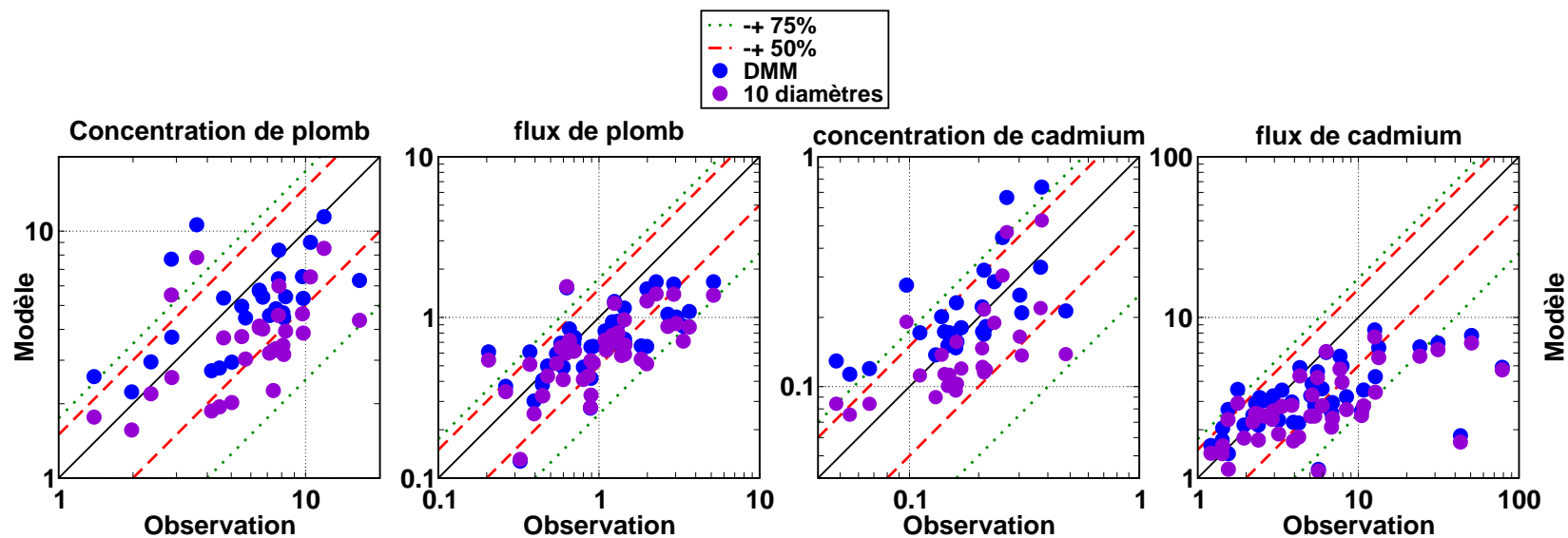
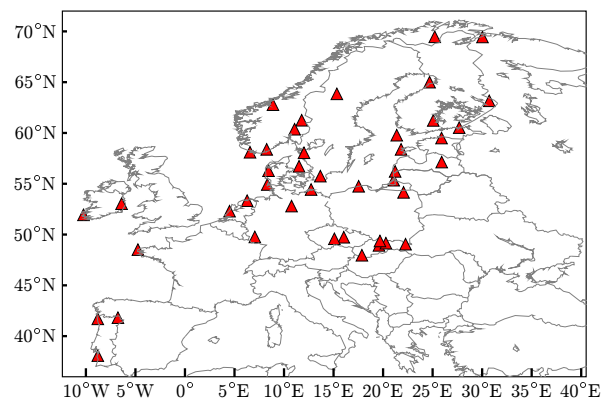


Plomb et cadmium

Concentration dans l'air

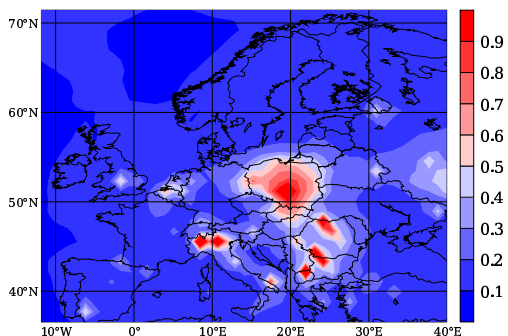


Flux de dépôt humide

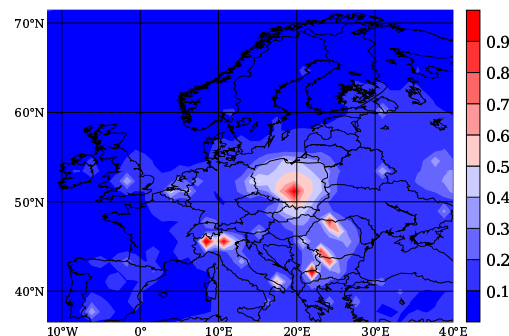
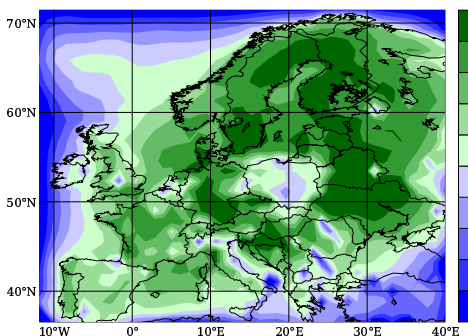


Cadmium

Concentration dans l'air (ng.m^{-3})

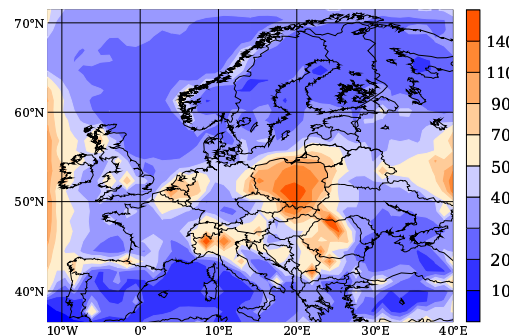
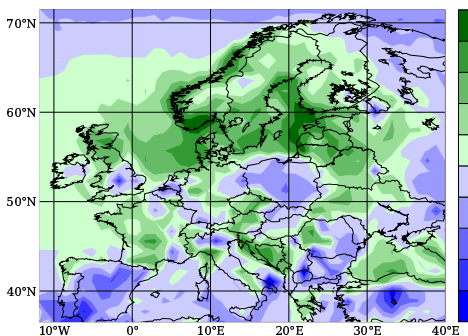
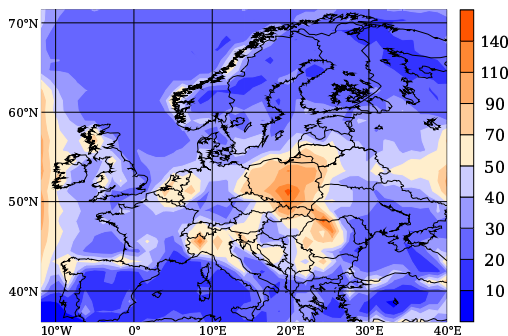


modèle DMM - (1)



modèle
multi-diamètres - (2)

$$\Delta = 200 \frac{(1) - (2)}{(1) + (2)}$$



Flux de dépôt total ($\text{g.km}^{-2}.\text{an}^{-1}$)



Analyse de sensibilité et modélisation inverse

Analyse de sensibilité

$$y = f(x) \longrightarrow \frac{\delta y_i}{\delta x_j}$$

Approche directe

- méthode “indirecte” (différences finies)
- méthodes directes (équation de la perturbation)

Approche adjointe

- méthode adjointe

Analyse de sensibilité

équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}c) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c) + \Lambda c = \sigma$$

Analyse de sensibilité

équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}c) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c) + \Lambda c = \sigma$$

équation de la mesure:

$$\pi_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \quad \mu_i = \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \pi_i(\mathbf{x}, t) c(\mathbf{x}, t)$$

Analyse de sensibilité

équation de transport: $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}c) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c) + \Lambda c = \sigma$$

équation de la mesure:

$$\pi_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \quad \mu_i = \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \pi_i(\mathbf{x}, t) c(\mathbf{x}, t)$$

équation adjointe:

$$-\frac{\partial c_i^*}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{u}c_i^*) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c_i^*) + \Lambda c_i^* = \pi_i$$

Analyse de sensibilité

$$\forall (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_-, \quad c_i^*(\mathbf{x}, t) = 0,$$

$$(\mathbf{K} \cdot \nabla c_i^*) \cdot \mathbf{n} = v_d c_i^*|_b \quad \text{et} \quad c_i^*(\mathbf{x}, 0) = 0$$

$$\mu_i = \underbrace{\int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c_i^* \sigma}_{\text{émission volumique}} + \underbrace{\int_{\partial\Omega_0} d\mathbf{x} c_i^* c}_{\text{condition initiale}}$$

$$- \underbrace{\int_{\partial\Omega_b} dt d\mathbf{S} \cdot (c_i^* \mathbf{E})}_{\text{émission surfacique}} - \underbrace{\int_{\partial\Omega_+} dt d\mathbf{S} \cdot (c_i^* c \mathbf{u})}_{\text{conditions aux bords}}$$

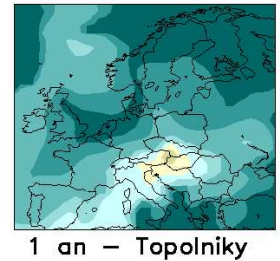
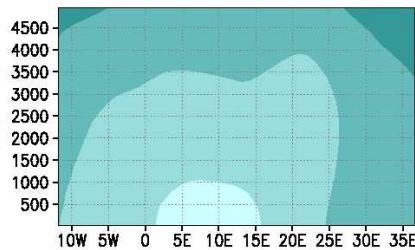
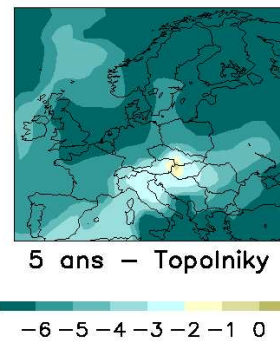
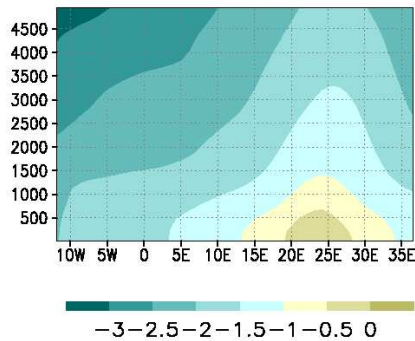
a priori: $f^{*,k} \neq f^{k,*}$

	Pallas		Topolniki	
	“direct”	adjoint	“direct”	adjoint
Nord	0.580	0.579	0.180	0.177
Ouest	0.445	0.453	1.16	1.13
Sud	0.005	0.005	0.107	0.106
Est	0.503	0.502	0.135	0.137
Source	0.086	0.086	1.06	1.06
Bilan	1.63	1.63	2.71	2.67

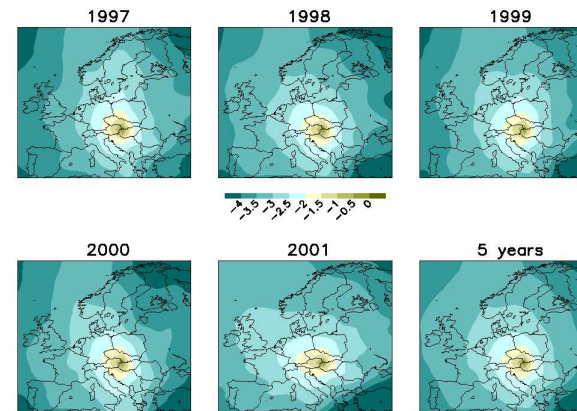
Contributions aux concentrations modélisées (ng.m⁻³)

Applications

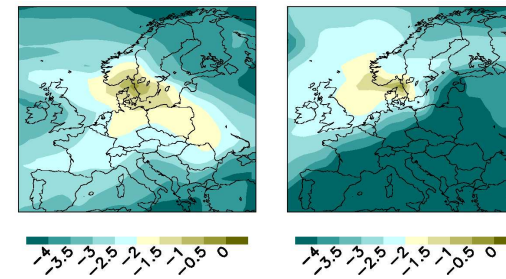
sensibilité aux conditions limites et initiales



sensibilité aux émissions



mesure annuelle



mesure mensuelle

$$\log_{10}(\bar{s} / \bar{s}_{\max})$$

\bar{s} : moyenne de la sensibilité

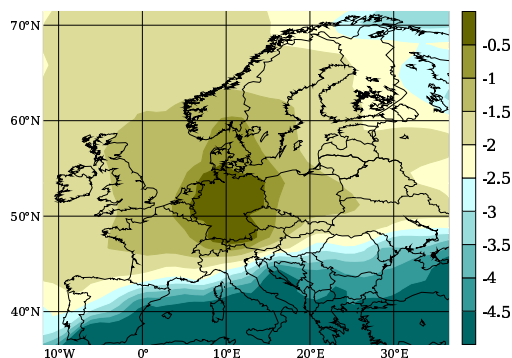
\bar{s}_{\max} : maximum sur le domaine de \bar{s}

Applications

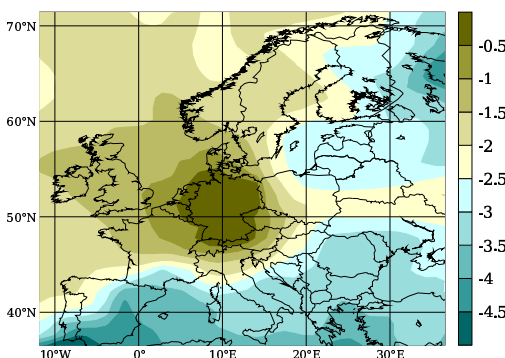
Pollution transfrontière

exemple: Allemagne - 2001

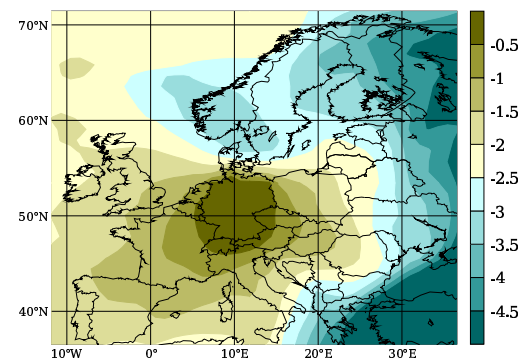
Janvier



Février



Mars



$$\log_{10}\left(\bar{s} / \bar{s}_{\max}\right)$$

\bar{s} : moyenne mensuelle de la sensibilité aux émissions

\bar{s}_{\max} : maximum sur le domaine de \bar{s}

Analyse de sensibilité

Avec le modèle complété:

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}\mathbf{c}) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla\mathbf{c}) + \mathbf{\Lambda}\mathbf{c} + \mathbf{M}\mathbf{c} = \sigma$$

Analyse de sensibilité

Avec le modèle complété:

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}\mathbf{c}) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla\mathbf{c}) + \mathbf{\Lambda}\mathbf{c} + \mathbf{M}\mathbf{c} = \sigma$$

équation de la mesure:

$$\mu_i = \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \langle \boldsymbol{\pi}_i(\mathbf{x}, t), \mathbf{c}(\mathbf{x}, t) \rangle$$

Analyse de sensibilité

Avec le modèle complété:

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}\mathbf{c}) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla\mathbf{c}) + \mathbf{\Lambda}\mathbf{c} + \mathbf{M}\mathbf{c} = \sigma$$

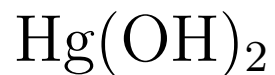
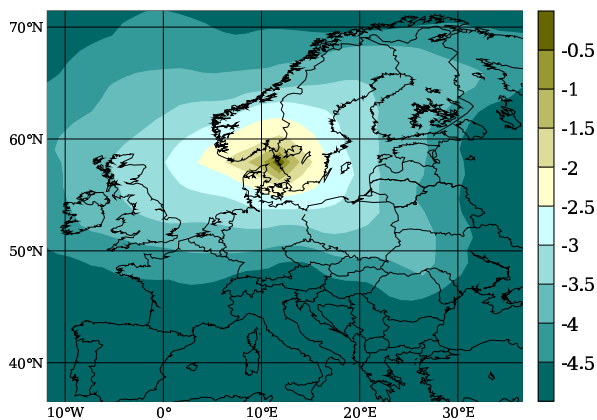
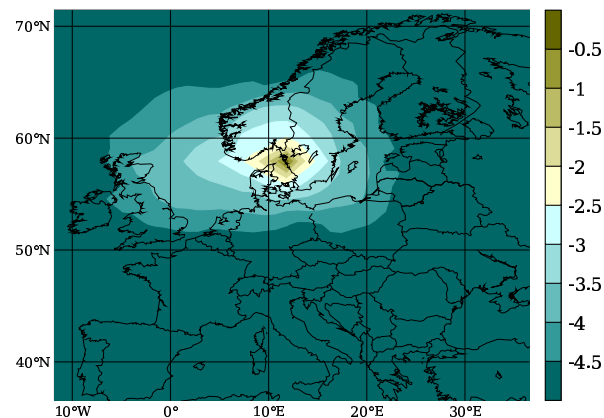
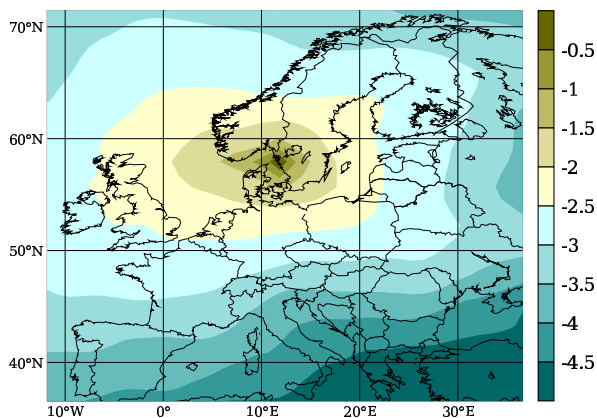
équation de la mesure:

$$\mu_i = \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \langle \boldsymbol{\pi}_i(\mathbf{x}, t), \mathbf{c}(\mathbf{x}, t) \rangle$$

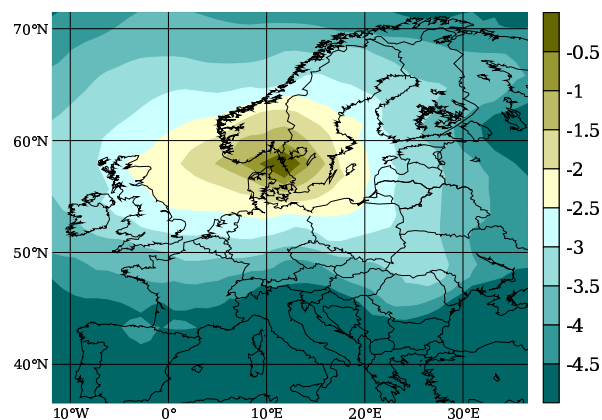
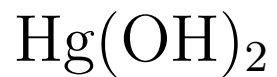
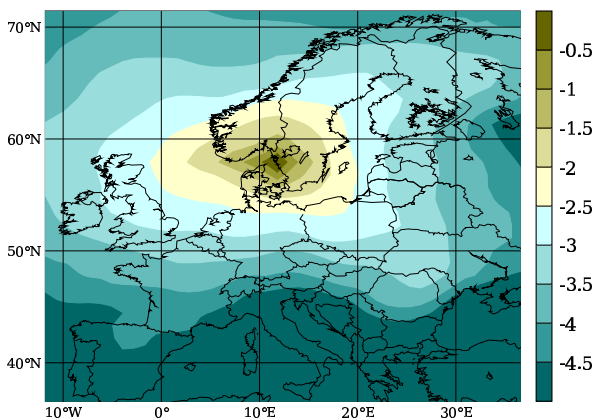
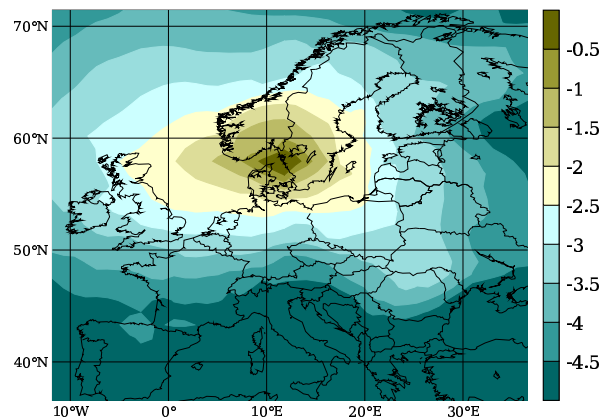
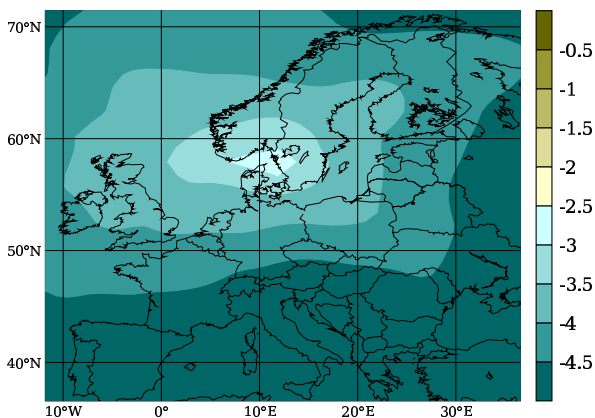
équation adjointe:

$$-\frac{\partial \mathbf{c}_i^*}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{u}\mathbf{c}_i^*) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla\mathbf{c}_i^*) + \mathbf{\Lambda}\mathbf{c}_i^* + \mathbf{M}^T\mathbf{c}_i^* = \boldsymbol{\pi}_i$$

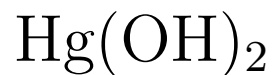
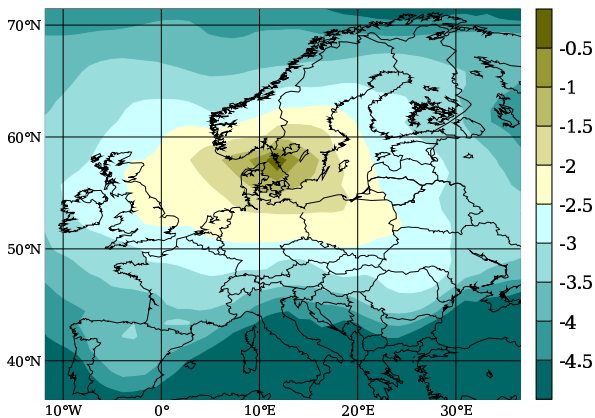
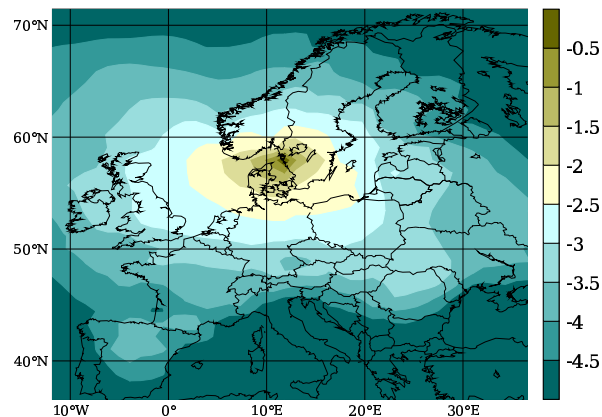
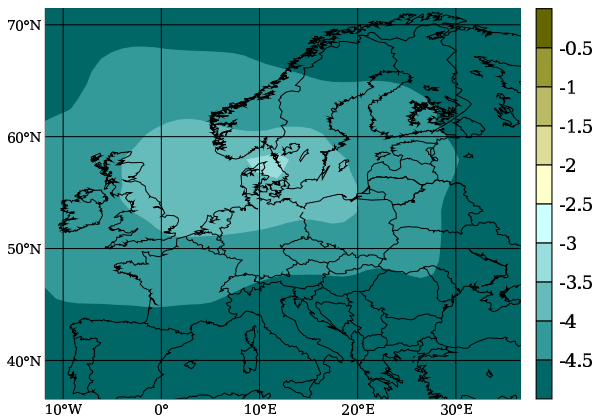
Sensibilité de la concentration



Sensibilité du dépôt sec



Sensibilité du dépôt humide



Modélisation inverse

$$\mu_i = \sum_{k \in \bar{\Omega}} c_{i,k}^* \sigma_k + \sum_{k \in \bar{\partial\Omega}_0} c_{i,k}^* c_k + \sum_{k \in \bar{\partial\Omega}_b} c_{i,k}^* E_k + \sum_{k \in \bar{\partial\Omega}_+ \cap \bar{\partial\Omega}_f} c_{i,k}^* c_k^f u_k$$

Modélisation inverse

$$\mu_i = \sum_{k \in \bar{\Omega}} c_{i,k}^* \sigma_k + \sum_{k \in \bar{\partial\Omega}_0} c_{i,k}^* c_k + \sum_{k \in \bar{\partial\Omega}_b} c_{i,k}^* E_k + \underbrace{\sum_{k \in \bar{\partial\Omega}_+ \cap \bar{\partial\Omega}_f} c_{i,k}^* c_k^f u_k}_{\text{conditions aux bords}}$$

Modélisation inverse

$$\mu_i = \sum_{k \in \bar{\Omega}} c_{i,k}^* \sigma_k + \sum_{k \in \bar{\partial\Omega}_0} c_{i,k}^* c_k + \sum_{k \in \bar{\partial\Omega}_b} c_{i,k}^* E_k + \underbrace{\sum_{k \in \bar{\partial\Omega}_+ \cap \bar{\partial\Omega}_f} c_{i,k}^* c_k^f u_k}_{\text{conditions aux bords}}$$

paramètres à inverser: coefficients pour les faces
Ouest, Nord et Est du domaine (λ , $n=3$)

$$\frac{\delta \mu_i}{\delta \lambda_f} = \sum_{k \in \bar{\partial\Omega}_+ \cap \bar{\partial\Omega}_f} c_{i,k}^* c_k^f u_k$$

Modélisation inverse

mesures assimilées: concentrations mensuelles
à Mace Head et Pallas (μ , $p=24$)

Modélisation inverse

mesures assimilées: concentrations mensuelles
à Mace Head et Pallas (μ , $p=24$)

$$\text{matrice } 24 \times 3 \quad \rightarrow \quad [\mathbf{H}]_{i,f} = \frac{\delta\mu_i}{\delta\lambda_f}$$

Modélisation inverse

mesures assimilées: concentrations mensuelles
à Mace Head et Pallas (μ , $p=24$)

$$\text{matrice } 24 \times 3 \quad \rightarrow \quad [\mathbf{H}]_{i,f} = \frac{\delta\mu_i}{\delta\lambda_f}$$

$$J = \frac{1}{2} [\boldsymbol{\mu} - \mathbf{h} - \mathbf{H}\boldsymbol{\lambda}]^T \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{\mu} - \mathbf{h} - \mathbf{H}\boldsymbol{\lambda}] + \frac{\gamma}{2} [\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_b]^T \mathbf{B}^{-1} [\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_b]$$

Modélisation inverse

mesures assimilées: concentrations mensuelles
à Mace Head et Pallas (μ , $p=24$)

$$\text{matrice } 24 \times 3 \quad \rightarrow \quad [\mathbf{H}]_{i,f} = \frac{\delta\mu_i}{\delta\lambda_f}$$

$$J = \underbrace{\frac{1}{2} [\boldsymbol{\mu} - \mathbf{h} - \mathbf{H}\boldsymbol{\lambda}]^T \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{\mu} - \mathbf{h} - \mathbf{H}\boldsymbol{\lambda}]}_{\text{erreur d'observation}} + \frac{\gamma}{2} [\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_b]^T \mathbf{B}^{-1} [\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_b]$$

Modélisation inverse

mesures assimilées: concentrations mensuelles
à Mace Head et Pallas (μ , $p=24$)

$$\text{matrice } 24 \times 3 \quad \rightarrow \quad [\mathbf{H}]_{i,f} = \frac{\delta\mu_i}{\delta\lambda_f}$$

$$J = \frac{1}{2} [\boldsymbol{\mu} - \mathbf{h} - \mathbf{H}\boldsymbol{\lambda}]^T \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{\mu} - \mathbf{h} - \mathbf{H}\boldsymbol{\lambda}] + \underbrace{\frac{\gamma}{2} [\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_b]^T \mathbf{B}^{-1} [\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_b]}_{\text{terme d'ébauche}}$$

Modélisation inverse

mesures assimilées: concentrations mensuelles
à Mace Head et Pallas (μ , $p=24$)

$$\text{matrice } 24 \times 3 \quad \rightarrow \quad [\mathbf{H}]_{i,f} = \frac{\delta\mu_i}{\delta\lambda_f}$$

$$J = \frac{1}{2} [\boldsymbol{\mu} - \mathbf{h} - \mathbf{H}\boldsymbol{\lambda}]^T \mathbf{R}^{-1} [\boldsymbol{\mu} - \mathbf{h} - \mathbf{H}\boldsymbol{\lambda}] + \frac{\gamma}{2} [\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_b]^T \mathbf{B}^{-1} [\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_b]$$

minimisation de J :

$$\boldsymbol{\lambda}^* = \boldsymbol{\lambda}_b + [\gamma\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H}]^{-1} \times \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} (\boldsymbol{\mu} - \mathbf{h} - \mathbf{H}\boldsymbol{\lambda}_b)$$

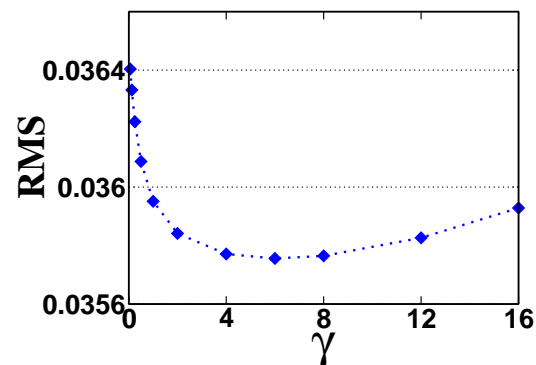
$$\text{et } \boldsymbol{\mu}^* = \mathbf{H}\boldsymbol{\lambda}^* + \mathbf{h}$$

Modélisation inverse

mesures assimilées: concentrations mensuelles
à Mace Head et Pallas (μ , $p=24$)

$$\text{matrice } 24 \times 3 \quad \rightarrow \quad [\mathbf{H}]_{i,f} = \frac{\delta\mu_i}{\delta\lambda_f}$$

$$J = \frac{1}{2} [\mu - h - \mathbf{H}\lambda]^T \mathbf{R}^{-1} [\mu - h - \mathbf{H}\lambda] + \frac{\gamma}{2} [\lambda - \lambda_b]^T \mathbf{B}^{-1} [\lambda - \lambda_b]$$



Concentration dans l'air (ng.m⁻³)

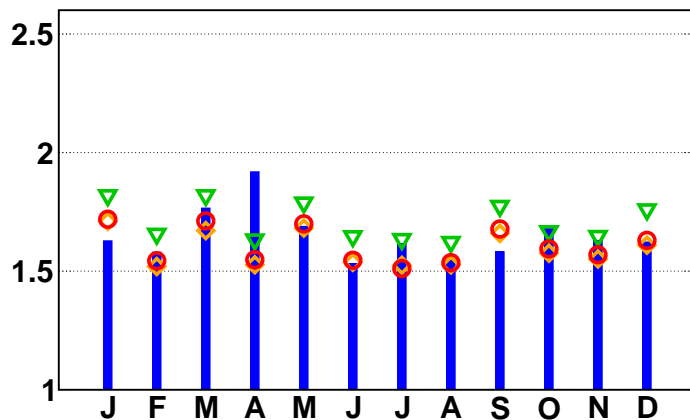
	Mace Head (IE31)		Pallas (FI96)		Lista (NO99)		Rörvik (SE02)	
	FB	FE	FB	FE	FB	FE	FB	FE
climatique 2002	-3	6	-19	20	-8	8	-17	17
3 variables - 2002	4	5	-3	8	2	6	-8	10
14 variables - 2002	3	5	-0.4	2	2	6	-9	10

FB= biais fractionnel et FE=erreur fractionnelle absolue (en %)

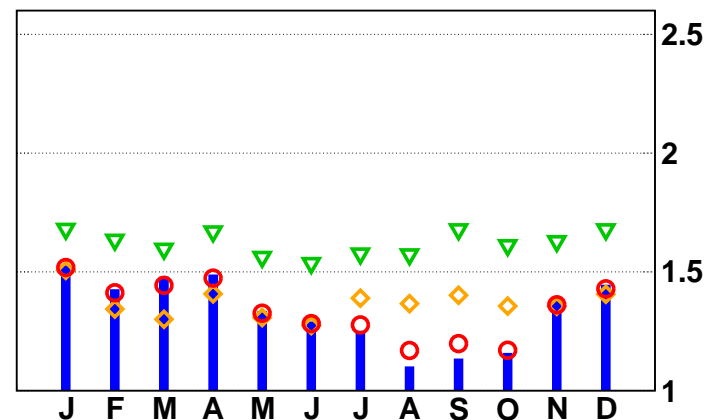
Assimilation des conditions aux bords avec le modèle de Petersen

Concentration dans l'air (ng.m⁻³)

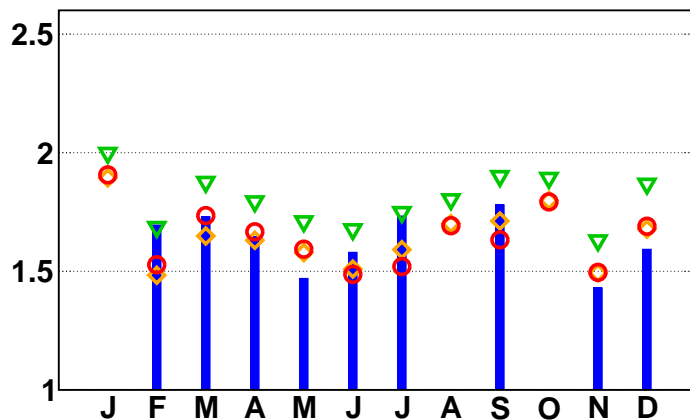
IE31 - Mace Head



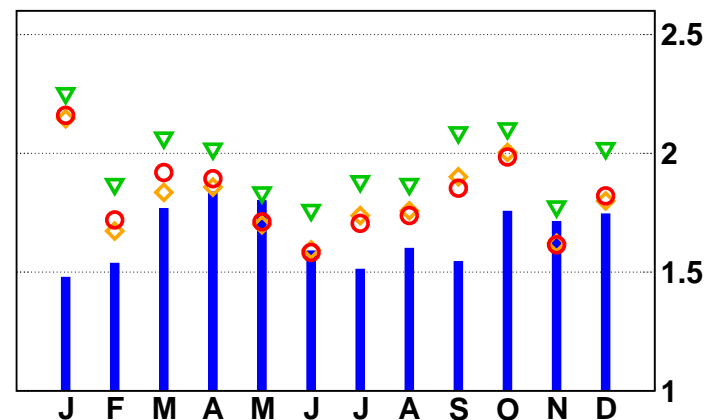
FI96 - Pallas



NO99 - Lista



SE02 - Rorvik



■ Observation
▼ Polair3D climatique 2002

◆ Polair3D 2002 - 3 variables
○ Polair3D 2002 - 14 variables



Conclusion & perspectives

Conclusion & perspectives

Modélisation

- Mercure
 - ▶ Chimie détaillée nécessaire
 - ▷ Extension du domaine de simulation
- Plomb et cadmium
 - ▶ Influence de la distribution en taille
 - ▷ Processus de dépôt humide
 - ▷ Extension aux autres métaux lourds

Étude d'impact multi-milieu

Conclusion & perspectives

Analyse de sensibilité et modélisation inverse

- Quantification des sensibilités
 - ▶ Paramètres “linéaires”
 - ▷ Paramètres “non-linéaires” (ex: constante cinétique)
- assimilation de données
 - ▶ Inversion des conditions aux limites
 - ▷ Inversion des émissions
 - ▷ Mesure de dépôt

Étude multi-polluants

FIN