

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieure et de la Recherche Scientifique
Université Abou-Bekr Belkaid-Tlemcen



MEMOIRE



Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES-DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique des polymères

Par :

Mme EDDINE Meriem Nadjat

Sur le thème

**AGREGATION DES OLIGOMERES AU
SEIN DES
AEROSOLS SECONDAIRES**

Soutenu publiquement le 12 Juillet 2021 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mr BOUCHAOUR Tewfik	Professeur	Université de Tlemcen	Président
Mr BOUSSAID Abdelhak	Professeur	Université de Tlemcen	Examineur
Mr AMEUR Djilali	Docteur	Université de Tlemcen	Encadreur
Mme DIB Joanna	Docteur	Université de Tlemcen	Co-encadrant

Année universitaire : 2020-2021



Dédicaces

Je dédie ce modeste travail aux êtres qui me sont les plus chers : mes parents à qui je dois reconnaissance de m'avoir donné et assuré la vie.

A ma mère. Tu es mon amour le plus fort, sans toi mère, je ne serais arrivée à cette conservation.

A mon père, avec tout mon respect et ma tendresse en signe d'affection et de reconnaissance, tu resteras pour moi un exemple de sacrifice et de bonté.

A mon frère et mes sœurs qui n'ont cessé de m'encourager.

A mon très cher mari TOUIL MOHAMMED qui m'a soutenue tout au long de mon parcours universitaire, sans oublier ma petite princesse DJIHENE.

A mes beaux parents et ma belle sœur pour leur soutien moral.

A tous les enseignants de l'institut de physique.

A l'ensemble des étudiants de l'institut de physique et surtout ceux de ma promotion.

Que ce travail soit l'accomplissement de vos vœux tant allégués, et le fruit de votre soutien infaillible, merci d'être toujours là pour moi.





Remerciements

Je remercie ALLAH le tout puissant de m'avoir donné le courage, et la volonté d'élaborer ce modeste travail.

Mes chaleureux remerciements s'adressent à mon encadreur Monsieur AMEUR Djilali et Co-encadreur Madame DIB Joanna pour leurs précieux conseils, leurs efforts, orientations efficaces, leurs suggestions et leurs encouragements durant mon travail.

Table des matières

Nomenclature.....	4
Liste des figures.....	6
Liste des tableaux.....	8
Introduction.....	11
Chapitre 1 : Etude bibliographique	
I. Définition de la pollution.....	14
II. Les différentes sources de la pollution.....	14
III. Les effets de la pollution sur la santé humaine.....	18
IV. Définition des aérosols.....	21
1. Les différents types d'aérosols.....	22
2. Origine des aérosols atmosphérique.....	23
a. Les aérosols naturels.....	24
b. Les aérosols anthropogènes.....	25
V. La composition chimique des aérosols.....	26
VI. Les risques des aérosols.....	28
VII. Définition des oligomères.....	31
VIII. La relation entre les oligomères et les aérosols.....	31
Chapitre 2: Approche numérique et statistique du processus de coagulation des aérosols affectant le climat mondial	
I. Introduction.....	37
II. Équations de Smoluchowski.....	39
III. Simulations numériques.....	42
IV. La simulation de Monte Carlo.....	42
Chapitre 3: Les résultats numériques	
I. Influence du pas de temps sur l'erreur sur les moments d'ordre 2.....	46
1. Cas du N=50000.....	46
2. Cas du N=1300000.....	47
3. Cas du N=70000.....	48
II. Moment d'ordre 2.....	49
1. Moment d'ordre 2 correspondant à un pas du temps $\Delta\mathbf{T} = \frac{T}{900}$ et pour un nombre de particules égal à 1750000.....	50

2. Moment d'ordre 2 correspondant à un pas du temps $\Delta\mathbf{T} = \frac{T}{700}$ et pour un nombre de particules égal à 1450000.....	50
3. Moment d'ordre 2 correspondant à un pas du temps $\Delta\mathbf{T} = \frac{T}{700}$ et pour un nombre de particules égal à 850000.....	52
III. Analyse du Central Processing Unit (CPU time).....	52
Conclusion.....	54
Références.....	55

Nomenclature

SO₂ : Le dioxyde de soufre

NO_x: Les oxydes d'azote

NO et NO₂: Les oxydes d'azote

COV: L'ammoniac et les composés organiques volatils

COSV: Les composés organiques semi-volatils

H₂SO₄: L'acide sulfurique

NO : L'oxyde nitrique

SO₂ : Le dioxyde de soufre

CO : Le monoxyde de carbone

HAP : Les hydrocarbures aromatiques polycycliques

NO₂ : Le dioxyde d'azote

PM₁₀ et PM₂ : Des particules dans l'air

CFC : les chlorofluorocarbures

CH₃Br : le bromure de méthyle

CH₄ : le méthane

COVID-19 : c'est une maladie causée par un nouveau coronavirus

SOA : l'aérosol organique secondaire

PIAMS : spectromètre de masse à photo ionisation en aérosol

NAMS : spectromètre de masse à nano aérosol

PDE : équation d'équilibre de population

Liste des figures

Figure 1. La pollution de l'air (https://bit.ly/2PSGNny)	17
Figure 2. La pollution de l'eau (https://bit.ly/3muDrUdure3)	17
Figure 3. La pollution du sol (https://bit.ly/3ml3KMn)	18
Figure 4. Les effets de la pollution de l'air sur la santé et sur l'environnement en image (https://bit.ly/3fFJKmd)	19
Figure 5. Photo d'aérosol au microscope électronique (<i>Marie, C. [2007]</i>)	20
Figure 6. Les aérosols naturels (https://bit.ly/3cL5JGx)	25
Figure 7. Les aérosols anthropiques (https://bit.ly/3fD9Whq)	26
Figure 8. Schéma du système respiratoire et diamètre de pénétration des particules (<i>Waed .A, Oberdörster et al. 2005-2017</i>)	31
Figure 9. Processus chimiques et physiques de la formation et de la déposition des aérosols (<i>Prettiny, Ma. [2016]</i>)	33
Figure 10. Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant entre $\frac{T}{400}$ et $\frac{T}{600}$ pour un nombre de particules égal à 50000.	47
Figure 11. Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant entre $\frac{T}{100}$ et $\frac{T}{600}$ pour un nombre de particules égal à 1300000.	48
Figure 12. Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant entre $\frac{T}{300}$ et $\frac{T}{600}$ pour un nombre de particules égal à 700000.	49
Figure 13. Comparaison entre moment analytique et moment numérique d'ordre2 correspondant à un pas de temps égal à $\frac{T}{900}$ et un nombre particules de l'ordre de 1750000.	50
Figure 14. Comparaison entre moment analytique et moment numérique d'ordre2 correspondant à un pas de temps égal à $\frac{T}{700}$ et un nombre particules de l'ordre de 1450000.	51
Figure 15. Comparaison entre moment analytique et moment numérique d'ordre2 correspondant à un pas de temps égal à $\frac{T}{700}$ et un nombre particules de l'ordre de 850000.	52

Liste des tableaux

- Tableau 1.** Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant entre $T/400$ et $T/600$ pour un nombre de particules égal à 50000. 46
- Tableau 2.** Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant entre $T/100$ et $T/600$ pour un nombre de particules égal à 1300000. 47
- Tableau 3.** Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant entre $T/300$ et $T/600$ pour un nombre de particules égal à 700000. 48
- Tableau 4.** Temps CPU moyen de 10 pas de temps différents variant entre $\Delta T=T/100$ et $\Delta T=T/1000$, correspondant à divers nombres de particules variant entre 10000 et 1600000. 53



Introduction

Introduction

Depuis longtemps, par rapport à l'offre de plus en plus limitée de l'humanité, l'intérêt de l'homme a été de répondre à sa demande toujours croissante. S'il a réussi ces projets, il a par contre négligé l'impact de ses actions sur l'environnement, car la Terre, la mer, l'air, les êtres vivants (végétaux et animaux) et les hommes eux-mêmes ont subi des dommages importants. Le mécanisme de formation de la pollution gazeuse est maintenant bien connu. Depuis plus de 30 ans, notre compréhension de ces phénomènes nous a permis d'établir des conceptions pour contrôler les deux principaux polluants tels que le dioxyde de soufre SO_2 ou les oxydes d'azote NO_x , mais aussi les oxydes secondaires comme l'ozone O_3 . Les émissions des principaux polluants ainsi contrôlés ont été réduites, leur concentration est désormais stable. En revanche, la tendance de la concentration d'ozone est beaucoup plus inquiétante. Afin d'expliquer cette tendance, les observations et les modèles montrent qu'il envisage le transport de polluants sur le continent. En fait, les sources régionales ne peuvent pas expliquer le développement, l'intensité et la persistance des incidents de pollution dans les zones urbaines et rurales. C'est pourquoi les appels interurbains pollués sont devenus le centre d'attention aujourd'hui.

Au cours des dix dernières années, les particules atmosphériques ont joué un rôle clé dans le bilan de rayonnement de la Terre. L'absorption directe et la diffusion peuvent également modifier indirectement la nature et la durée de vie du nuage de rayonnement du soleil et du tellure. De plus, l'aérosol est le principal problème de la santé publique.

En effet, il y a des diverses sources d'émissions d'aérosols atmosphériques, quelle que soit leur source biogénique ou artificielle. Leur impact personnel reste aujourd'hui très incertain. En augmentant le niveau des gaz à effet de serre et du réchauffement climatique, les catastrophes ont sensibilisé les populations aux problèmes environnementaux locaux et régionaux, en particulier la pollution de l'air urbain et des environnements industriels, jusqu'à l'échelle

Introduction

mondiale. A l'heure actuelle, les pays développés ont fait de cette question une préoccupation majeure en intensifiant les actions de protection de l'environnement. Il existe de nombreux outils disponibles pour lutter contre la pollution.

Ce mémoire s'organise en trois chapitres.

Le 1^{er} chapitre présente le contexte scientifique de cette étude, soulignant ainsi l'intérêt d'analyse pour approfondir les connaissances scientifiques actuelles. Les impacts environnementaux et les problèmes de santé liés à la pollution seront présentés, ainsi qu'une description des types et sources d'aérosols atmosphériques et leurs compositions chimiques.

Dans le 2^{ème} chapitre, on s'intéressera à l'étude du processus de coagulation des aérosols atmosphériques grandement amélioré par les forces de Van der Waals et surveillé par le mouvement brownien. On analysera une méthode de résolution de l'équation de coagulation de Smoluchowski en employant la méthode probabiliste de Monte Carlo.

Finalement, le 3^{ème} chapitre vise à présenter les résultats numériques.



*Chapitre 1: Etude
bibliographique*

I. Définition de la pollution

La pollution est la dégradation ou la modification de l'environnement généralement liée aux activités humaines par la diffusion directe ou indirecte de substances chimiques, physiques ou biologiques, qui peuvent être toxiques pour les organismes vivants ou interférer plus ou moins avec les fonctions naturelles des écosystèmes. En outre, son impact sur la santé humaine et animale peut également entraîner la migration ou l'extinction de certaines espèces qui ne peuvent s'adapter à l'évolution de leur milieu naturel [1]. La pollution est habituellement sous formes des substances mais aussi sous formes des ondes, elle s'attaque à l'air, à l'eau, au sol, à notre organisme....etc.

II. Les différentes sources de la pollution

À l'heure actuelle, il y a de nombreuses discussions sur la pollution par les gaz à effet de serre. Ces gaz sont libérés par les voitures, les camions et certaines usines. Cependant, le dioxyde de carbone a toujours existé naturellement dans la nature. Les animaux le relâchent lorsqu'ils respirent tous les jours. Si le dioxyde de carbone d'aujourd'hui est considéré comme un polluant, c'est parce qu'il s'est accumulé de manière anormale dans l'air au cours des 100 dernières années. Dans la plupart des cas, la pollution des sols et des rivières provient de sources chimiques ou biologiques. Elle provient des usines, d'engrais agricoles, d'eaux usées rejetées par l'homme ...

En outre, le circuit de refroidissement de l'usine rejette de l'eau chaude dans la rivière. Certaines algues ont commencé à se multiplier et les poissons sont morts. C'est ce qu'on appelle la pollution thermique.

➤ **La pollution atmosphérique**

L'atmosphère est un système complexe qui agit comme un véritable mélange d'espèces chimiques. La compréhension de ce système est essentielle pour mieux répondre à la menace de pollution atmosphérique pour notre environnement. Le concept d'environnement fait référence à tous les systèmes naturels dans lesquels les organismes évoluent. Il y a une différence entre la pollution photochimique et la pollution particulaire.

La pollution photochimique concerne principalement l'ozone et le dioxyde de soufre SO_2 , tandis que la pollution particulaire implique le sulfate, le nitrate, l'ammonium, les particules carbonées, la fumée noire et la poussière industrielle. En phase gazeuse, on peut citer spécifiquement l'ozone, les oxydes de soufre, les oxydes d'azote NO et NO_2 , regroupés sous l'appellation NO_x , l'ammoniac et les composés organiques volatils COV. Parmi les nombreux thèmes existants, la pollution de l'air occupe une place majeure, notamment en raison de ses multiples effets à l'échelle mondiale, régionale et locale: le changement climatique, la réduction de la couche d'ozone stratosphérique, les dépôts de polluants et leurs conséquences, les risques pour la santé et la dégradation des bâtiments.

La pollution de l'air peut être d'origine naturelle (éruptions volcaniques, pollen, incendies de forêt, etc.), mais principalement des activités humaines ou des activités anthropiques (transport, chauffage individuel et collectif, industrie, agriculture, incinération des ordures ménagères, activités domestiques, etc.).

Après rejet, les polluants sont transportés et dispersés dans l'atmosphère, et des réactions chimiques se produisent entre elles, notamment sous l'action du rayonnement solaire. En particulier, l'oxydation des COV produira plusieurs milliers de composés organiques semi-volatils COSV. Les polluants restent dans l'atmosphère pendant plusieurs mois, puis ils sont finalement déposés à la surface par dépôt sec ou emportés par les précipitations (dépôt

humide). Certains produits chimiques tels que l'acide sulfurique H_2SO_4 et le COSV, se condensent facilement et forment une phase particulaire [2].

Les polluants atmosphériques peuvent être divisés en deux catégories principales: Les polluants primaires et les polluants secondaires.

- ❖ **Les polluants primaires** sont généralement associés aux activités humaines (trafic routier, industrie, chauffage, agriculture, etc.) et sont directement rejetés dans l'air à partir d'une certaine source. Les principaux polluants sont l'oxyde nitrique NO, le dioxyde de soufre SO_2 , le monoxyde de carbone CO, les métaux lourds (plomb, arsenic, cadmium et nickel), les composés organiques volatils COV) et les hydrocarbures aromatiques polycycliques HAP.
- ❖ **Les polluants secondaires** ne sont pas rejetés directement dans l'air. Ils sont formés par des réactions chimiques entre différents polluants majeurs déjà présents dans l'air. Par exemple: L'ozone O_3 se forme lorsque les oxydes d'azote et les hydrocarbures réagissent sous l'action du rayonnement ultraviolet du soleil, c'est en partie la raison pour laquelle il y a plus d'ozone au printemps et en été. Les pluies acides, qui sont le résultat de l'acidification de l'eau de pluie, qui non seulement capte divers polluants, mais capte également les dépôts secs de ces polluants SO_2 et NO_x .

Certains polluants comme le dioxyde d'azote NO_2 et les particules dans l'air PM10 et PM2 sont à la fois des polluants primaires et secondaires [3]. La formation de pollution atmosphérique consiste à introduire des substances directement ou indirectement dans l'atmosphère et dans les espaces confinés par l'homme. Ces substances ont des conséquences néfastes qui peuvent :

- Mettre en danger la santé humaine, endommager les ressources biologiques et les écosystèmes.

- Affecter le changement climatique.
- Détériorer des substances ou causer odeurs excessives selon *la loi de 1996 sur l'air et l'utilisation raisonnable de l'énergie*.



Figure 1. La pollution de l'air (<https://bit.ly/2PSGNny>)



Figure 2. La pollution de l'eau (<https://bit.ly/3muDrUd>)ure3)



Figure 3. La pollution du sol (<https://bit.ly/3ml3KMn>)

III. Les effets de la pollution sur la santé humaine

La pollution atmosphérique peut avoir des effets à court et à long terme sur la santé. La pollution de l'air urbain augmente le risque de maladies respiratoires aiguës comme la pneumonie, et chroniques comme le cancer du poumon et de maladies cardiovasculaires.

La pollution atmosphérique affecte différemment différents groupes de personnes. Des effets plus graves sur la santé sont observés chez les personnes déjà malades. En outre, les groupes vulnérables tels que les enfants qui ont des difficultés à accéder aux soins médicaux, les personnes âgées et les familles à faible revenu sont plus sensibles aux effets destructeurs de la pollution atmosphérique [4]. Les polluants atmosphériques ont non seulement un impact négatif sur les humains et l'environnement, mais aussi directement ou indirectement sur le climat. A cette échelle, deux principaux phénomènes de pollution sont mis en évidence:

- ❖ "le Trou dans la couche d'ozone": La destruction de l'ozone stratosphérique est causée par l'action de certains produits chimiques à base de chlore et de brome par exemple, les chlorofluorocarbures CFC, et ces composés sont causés par des

activités humaines. Des mesures sont prises pour réduire les émissions de ces substances dans l'air, par exemple, la production de CFC a été complètement arrêtée depuis 1994 en répondant au Protocole de Montréal.

- ❖ À mesure que la concentration de gaz à effet de serre augmente, ce qui entraîne un réchauffement climatique ou une destruction. Au cours du 20e siècle, le réchauffement global de la planète a été observé à + 0,5 ° C. Si ce phénomène persiste et s'intensifie, le réchauffement climatique peut entraîner la fonte complète des glaciers et une élévation du niveau de la mer.

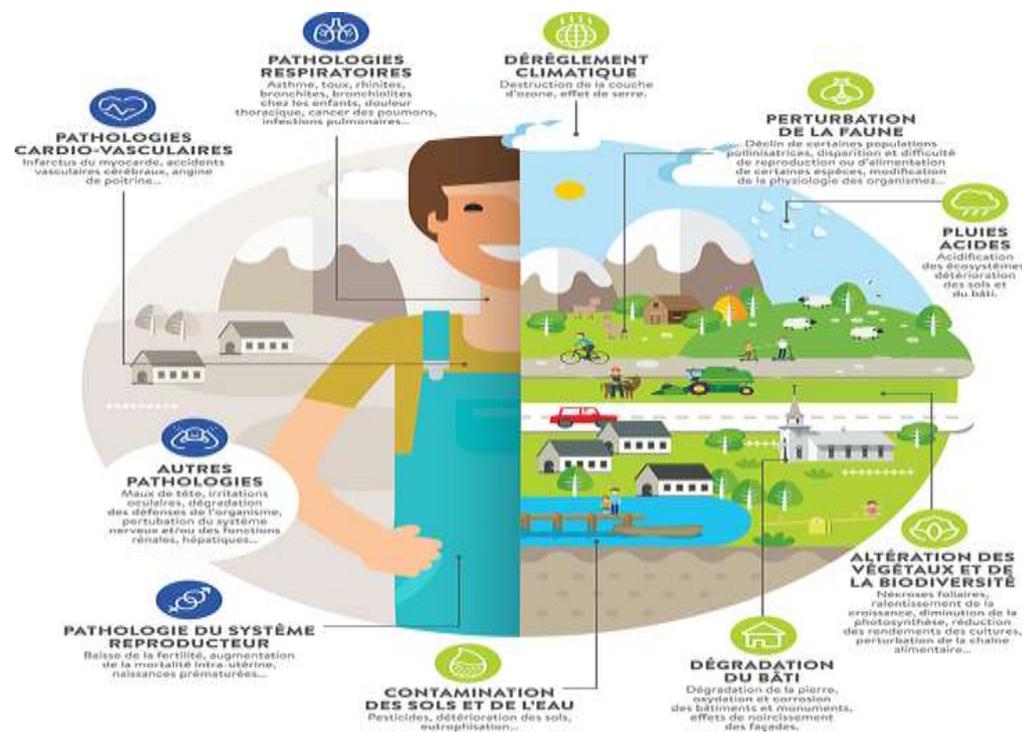


Figure 4. Les effets de la pollution de l'air sur la santé et sur l'environnement en image
(<https://bit.ly/3fFJKmd>)

La loi sur la prévention de la pollution a attiré l'attention de l'industrie, du gouvernement et du public, c'est-à-dire sur l'importance de réduire la pollution grâce à des modifications rentables des matières premières, de la production et de l'utilisation. Les réglementations existantes et

les ressources industrielles nécessaires pour se conformer aux réglementations sont concentrées sur le traitement et l'élimination, de sorte que les opportunités de réduire la source sont souvent manquées.

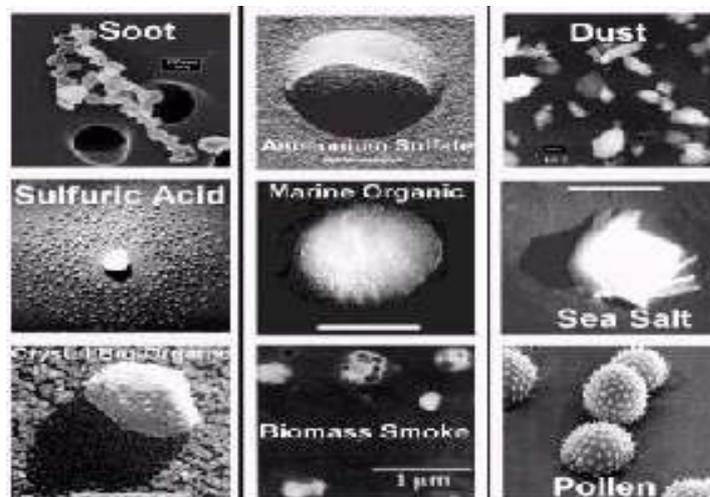


Figure 5. Photo d'aérosol au microscope électronique (Marie, C. [2007])

La réduction de la source est radicalement différente et plus bénéfique que la gestion des déchets ou le contrôle de la pollution, et elle fait référence à des procédures qui évitent que des produits chimiques nocifs ne soient rejetés dans l'atmosphère avant le recyclage, le traitement ou l'élimination [5]. Cela implique des modifications d'équipement ou de technologie, des modifications de processus ou de système, une reformulation ou une refonte du produit, le remplacement de la matière première, etc....

Les générateurs d'aérosols occupent une place importante dans notre vie quotidienne (bombes aérosols, déodorants, flacons de crème, etc...)

Malheureusement, ces récipients sous pression constitués d'au moins un produit actif, un solvant et un gaz propulseur posent certains problèmes d'environnement et de santé. De nombreux aérosols émettent des composés organiques volatils COV. Cependant, ces substances peuvent former de l'ozone troposphérique en présence de lumière, qui est à la base

de maladies respiratoires comme l'asthme chez les personnes sensibles. Ce gaz contribue également à 13% au réchauffement climatique. En fait, pour le rayonnement terrestre, la lumière infrarouge qu'il absorbe est 2000 fois celle du dioxyde de carbone. Cependant, la contribution des aérosols à ce phénomène est faible car elle ne représente que 0,04% des émissions totales de COV [6]. Il convient tout d'abord de définir ce dont on veut parler et d'explicitier ce que l'on entend par le terme «aérosol».

IV. Définition des aérosols

Un aérosol est un système multi phase formé de particules et de gaz. Physiquement, on fixe arbitrairement une valeur supérieure à la taille des particules pouvant former un aérosol, en utilisant une vitesse de chute maximale et en tenant compte de l'emplacement.

Mais en fait, «aérosol» est généralement synonyme de «particule». Les aérosols sont l'un des principaux vecteurs de pollution de l'air et de radioactivité. Les polluants condensés existent dans l'air sous forme de particules en suspension appelées aérosols. Leur taille varie de quelques nanomètres à des dizaines de microns.

Afin de purifier l'atmosphère, l'aérosol peut être transféré au sol de plusieurs manières. En présence de précipitations, des particules existant dans l'atmosphère locale du nuage peuvent être incorporées par divers processus physiques et chimiques, dans les gouttelettes d'eau qui forment le nuage. Ce phénomène s'appelle « *le phénomène de pluie* ». Les pluies torrentielles, lorsqu'elles tombent, seront à nouveau remplies de polluants, emportant ainsi l'air ambiant, ces polluants seront ensuite collectés et rejetés dans le sol connu sous le nom « *phénomène de récurage* ».

Par conséquent, les aérosols sont collectés par des gouttelettes, et ainsi les polluants sont réduits par aspersion compte tenu de la diversité de ce domaine d'application. Ceci a fait l'objet de nombreuses études portant sur les types de capture de particules.

Les aérosols sont constitués d'un mélange de composés organiques et inorganiques. Le processus de la production des fractions inorganiques est bien connu. Mais à propos de la matière organique, sa composition, son processus de formation et son vieillissement chimique qu'elle subit sont beaucoup moins bien renseignés [7]. Cela peut s'expliquer par des faits de nombreux composés organiques volatils COV présents dans l'atmosphère peuvent être les précurseurs des aérosols sachant que leurs processus chimiques sont très compliqués. Cependant, la fraction organique de l'aérosol représente 20% à 90% des aérosols fins, dont 30% à 70% proviennent de sources secondaires, c'est-à-dire résultant de l'oxydation des composés organiques volatils en phase gazeuse [8]. C'est pourquoi la communauté scientifique porte une part importante de ses efforts depuis de nombreuses années pour comprendre la fraction organique de cette particule.

1. Les différents types d'aérosols

Il existe deux types d'aérosols dans l'atmosphère: Aérosol de gaz naturel et aérosol de pollution. Les principales sources d'aérosols sont l'érosion du sol (croûte ou aérosols terrestres) et les vagues d'éclaboussures (aérosols océaniques).

Les aérosols cristaux sont dispersés dans l'atmosphère sous l'action du vent. Ils sont principalement composés d'oxydes métalliques, d'aluminosilicates et de débris végétaux. Les aérosols marins sont produits par les pulvérisations océaniques. Les gouttelettes d'eau remplies de sel marin s'évaporent et provoquent la formation de cristaux solides. Ils sont bien

sûr composés de chlore et de sodium, mais ils sont également composés de nitrate et de sulfate. Ce dernier est appelé "sulfate de mer" [9].

2. Origine des aérosols atmosphériques

Le diamètre de ces particules varie du plus petit nanomètre au plus grand d'une dizaine de microns. Les particules atmosphériques ont deux origines. Les aérosols émis directement dans l'atmosphère sont appelés aérosols primaires. Par conséquent, les aérosols formés par conversion gaz/ particules peuvent être utilisés comme aérosol secondaire. Ces particules changent de taille et de composition pendant le transport. Les aérosols se forment par condensation ou évaporation de substances gazeuses, par condensation avec d'autres particules, par réactions chimiques ou par activation en présence de vapeur d'eau sursaturée pour devenir des nuages et des gouttelettes de brouillard.

❖ Mode grossier d'aérosol ($D_p > 1\mu\text{m}$)

Le motif grossier des aérosols est principalement dû à l'action mécanique, qui est due au vent agissant à la surface des continents et des océans, les principaux aérosols issus des ressources naturelles sont le sel marin, la poussière du désert et les matières biologiques (pollen, débris végétaux, etc.). Ces grosses particules sont principalement éliminées par sédimentation gravitaire. L'évolution de ces grosses particules dans l'atmosphère est principalement contrôlée par le processus source/ transport/ dépôt. La description de ces processus physiques ne rentrera pas dans le cadre de cette recherche.

❖ Mode fin d'aérosol ($D_p < 1\mu\text{m}$)

Le motif fin des aérosols est principalement lié aux processus physiques et chimiques de transformation gaz/ particules, qui sont réalisés par nucléation et/ ou condensation sur des particules préexistantes. Selon que la conversion gaz/ particules s'effectue

directement dans l'atmosphère ou avant d'être rejetée dans l'atmosphère, ces procédés conduisent respectivement à des aérosols primaires ou secondaires. Ces fines particules ont également une source majeure liée à l'émission de particules formées lors du processus de combustion. Après diffusion à la surface de la terre, les particules les plus fines ($D_p < 0,1 \mu\text{m}$) sont principalement éliminées par dépôt sec. Dans la plage de $0,1 < D_p < 1 \mu\text{m}$, la perte d'aérosol causée par le dépôt sec est très lente et la taille des particules change. Lorsque ces particules présentent une bonne hygroscopicité, elles participent à l'activation du nuage et sont principalement éliminées par précipitation.

Les petits aérosols d'un diamètre compris entre $0,1$ et $1 \mu\text{m}$ ont une longue durée de vie. Par conséquent, ils peuvent être transportés par un transport de longue distance, provoquant de multiples interactions avec le milieu environnant et par une interaction avec les nuages à haute altitude. Ces fines particules sont principalement causées par l'impact des aérosols sur l'environnement. Ces excellents aérosols peuvent pénétrer profondément dans les organismes humains ou végétaux. De plus, leur taille est proche de la longueur d'onde de la lumière visible, de sorte qu'ils sont soupçonnés d'avoir un impact plus important sur la visibilité et le climat que les grosses particules. La composition chimique de ces aérosols fins est l'un des paramètres clés qui déterminent leur impact environnemental. La description de ce déphasage fait l'objet de ce travail.

a. Les aérosols naturels

Les principaux aérosols sont les particules de sel marin, la poussière de sol soufflée par le vent, les sulfates naturels et les aérosols provenant de l'activité volcanique et les aérosols des incendies de forêt naturels (carbone noir). L'abondance naturelle de ces types d'aérosols peut être modifiée par les activités humaines. Par exemple, la déforestation expose de grandes superficies de terres et augmente la quantité de poussière dans l'atmosphère.

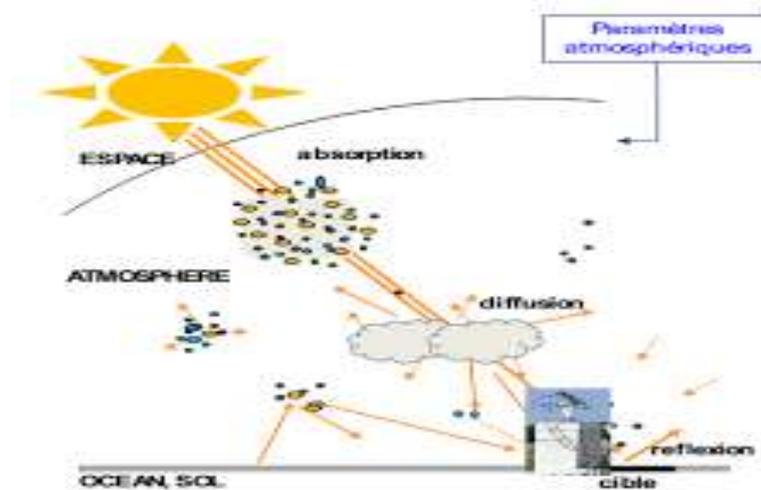


Figure 6. Les aérosols naturels (<https://bit.ly/3cL5JGx>)

b. Les aérosols anthropogènes

Les principaux aérosols d'origine anthropique sont les sulfates et les nitrates, les aérosols carbonés (particules de noir de carbone, suie et carbone organique) et les poussières minérales. Beaucoup proviennent de la combustion de combustibles fossiles. Le sulfate se compose des particules d'acide sulfurique partiellement ou totalement neutralisées par l'ammoniac sous forme de gouttelettes liquides ou partiellement cristallines. Le nitrate est formé à partir d'acide nitrique et d'ammoniac. Le carbone organique est un mélange complexe de produits chimiques dans le processus de combustion des combustibles fossiles et des biocarburants. Ils sont formés directement (particules primaires) ou sont produits par condensation de gaz organiques semi-volatils ou peu volatils (particules secondaires). Le noir de carbone, y compris la suie et le charbon de bois, est une substance noire, solide ou semblable à du goudron, particulièrement riche en carbone. Ce sont les principales particules produites par la combustion incomplète des combustibles fossiles et de la biomasse. Les principales sources de poussières minérales sont l'agriculture (récolte, agriculture,

augmentation des pâturages), l'industrie (production et transport de ciment) et la transformation de grandes masses d'eau.

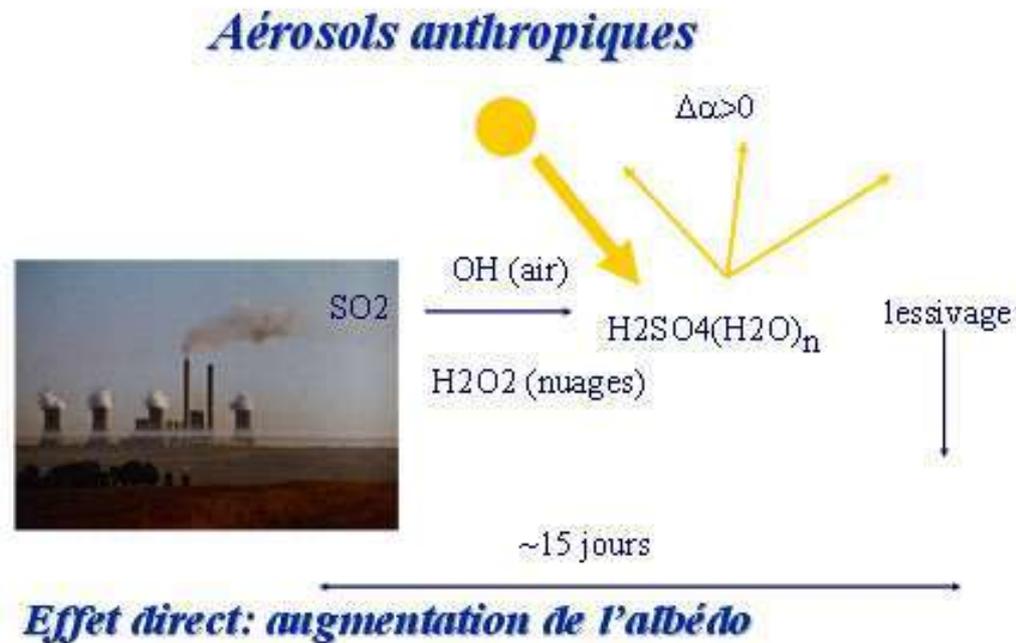


Figure 7. Les aérosols anthropiques (<https://bit.ly/3fD9Whq>)

V. La composition chimique des aérosols

La composition chimique des particules joue un rôle décisif dans sa dynamique, ses propriétés optiques et ses dommages possibles. La composition chimique des aérosols sur un site donné dépend en même temps à la proximité de sources d'émissions et de transformations physico-chimiques souffertes au cours de leur histoire. En général, on trouve une fraction inorganique et autre organique qui constituent des phases séparées. La phase inorganique est une phase aqueuse et / ou solide (cristaux de sels) en fonction du taux d'humidité, y compris les sulfates, les nitrates, l'ammonium, les chlorures et le sodium, ainsi que d'autres espèces minérales (calcium, silice). Quelques espèces organiques hydrophobes peuvent également être présentes dans cette fraction. [1]

La fraction organique est composée de milliers composés organiques semi-volatils(COSV), dont la modélisation ne peut pas considérer précisément comme le stade inorganique. Par conséquent, les aérosols organiques restent un sujet d'exploration aujourd'hui ouverts, en raison de leur science imprévisible, intégrant des coopérations avec le stade inorganique, une information encore insuffisante sur leurs voies de formation et sources de diffusion [11].En tout cas, ils sont fondamentaux: ils sont en grande partie dans la part des particules fines, surtout dans les zones urbaines comme l'isoprène [2].

Dans cette partie, nous détaillons les processus physico-chimiques qui modifient la taille et la composition chimique des aérosols lors de leur transport et diffusion dans l'air. Mesures d'accumulation / dissipation et de coagulation suivi des particules fortes et / ou fluides préalablement encadrées. Espèces vaporeuses à faible pression de fumée imbibée se consolider sur les particules. Autre chose, les espèces solubles dans l'eau ou à l'état naturel peuvent également être recueillir par rétention comme indiqué par les lois de Henry ou Raoult. Dans le cas où les conditions environnementales (température, humidité, etc.) changent, quelques catégories d'animaux peuvent disparaître du stade particulaire. Cet échange de masse, l'accumulation ou la disparition, est résolue pour chaque composé semi-volatil par la distinction entre son facteur de pression incomplet dans l'état gaz et à l'extérieur de la molécule. Le dernier est attendu à l'équilibre thermodynamique rapide avec l'agencement synthétique du aéroporté, nous discutons de l'équilibre thermodynamique local (ou ouvert). À l'inverse, nous discutons de l'équilibre thermodynamique global(ou puis à nouveau fermé) lorsque les flux d'accumulation compensent précisément les flux de dissipation pour chaque classe de taille.

La coagulation est le processus par lequel deux particules entrent en collision et coalescent. Cette interaction maintient la masse des produits en conserve sous pression, mais aide à la

diminution de leur nombre dans la population puisqu'avec deux particules. La coagulation devient énorme au moment où la concentration de la molécule est élevée.

Quelques phénomènes sont responsables de la collision de particules entre eux. Citons par ordre croissant, les phénomènes de flux laminaire, ruisseau tempétueux, sédimentation et mouvement brownien. Les derniers résultats de l'agitation thermique du milieu dans lequel se trouve l'aérosol, c'est le principal responsable de la coagulation des conserves sous pression perceptible tout autour. Prise en charge des forces de Van der Waals et / ou des forces ioniques renforces le mouvement brownien sur les particules super fines, tandis que les forces visqueuses le ralentissent sur les particules fines et grossières. On note que les forces de van der Waals jouent un rôle important dans le «collage» des particules après l'impact. Généralement, seul le mouvement brownien est détenu par le modélisateur, dans tous les cas, la sédimentation et le ruisseau tempétueux pourraient être plus productifs à d'énormes particules [3].

VI. Les risques des aérosols

Nous sommes bien conscients de l'effet de serre, qui est provoqué par l'interaction entre certains rayonnements à la surface de la terre et les soi-disant «gaz à effet de serre», similaires aux serres agricoles. Mais quel est l'effet causé par l'aérosol?

En fait, les particules atmosphériques interagissent avec les rayons du soleil en réfléchissant une partie de la lumière dans l'espace comme un miroir, ce qui représente une grande quantité d'énergie que la surface de la Terre n'absorbera pas. Les petites particules en suspension dans l'atmosphère pourront également agir comme des noyaux de condensation de la vapeur d'eau, formant ainsi des nuages. Par ces deux effets, les aérosols jouent un rôle dans le refroidissement du climat.

Tous les aérosols ne se comportent pas de la même manière. Selon leur composition, certaines particules peuvent également provoquer un réchauffement climatique. Le carbone noir - un aérosol émis par la combustion de la biomasse (chauffage au bois) et des combustibles fossiles (déplacements motorisés) a une puissante capacité à absorber le rayonnement solaire incident. L'impact sur le climat peut être ressenti même après le dépôt. En recouvrant la surface du sol, en particulier la neige ou la glace, ces particules induisent l'absorption d'une trop grande quantité d'énergie solaire.

Pour ces deux raisons, l'effet de serre causé par la suie seule est supérieur à celui de certains gaz à effet de serre (comme le méthane (CH₄)). En climatologie, on dit que le noir de carbone réduira l'albédo de la terre. L'albédo fait référence à la réflectivité d'une surface. Cette quantité permet de caractériser la part de l'énergie solaire réfléchie dans l'espace. Les éléments qui ont le plus d'impact sur l'albédo terrestre sont les nuages, la neige, la glace et les aérosols. Néanmoins, il a été déterminé que les aérosols dans leur ensemble ont tendance à refroidir considérablement le climat.

Prenons l'exemple du COVID-19 qui est le discours de l'heure qui occupe le monde entier. Lorsque les humains respirent, parlent, chantent, toussent ou éternuent, ils émettent des gouttelettes qui se mélangent à l'air ambiant pour former des «aérosols respiratoires». Les grosses gouttelettes tombent rapidement au sol, l'aérosol respiratoire est généralement décrit comme étant composé de très petites gouttelettes d'un diamètre inférieur à 5 microns ou un dixième de la largeur d'un cheveu humain.

Généralement, des gouttelettes se forment lorsque le liquide "en forme de feuille" éclate. Si vous avez soufflé des bulles de savon, vous avez peut-être été témoin de ce phénomène: parfois, lorsque vous soufflez des bulles de savon, les bulles ne se forment pas complètement, mais se divisent en plusieurs petites gouttelettes.

Un phénomène similaire se produit dans les voies respiratoires humaines, qui sont généralement recouvertes d'un liquide appelé mucus. Parfois, de petites feuilles et des "brins" se forment à la surface des voies respiratoires, en particulier là où ils s'ouvrent et se ferment souvent. On peut le voir, par exemple, dans les poumons profonds, lorsque les bronchioles et les sacs aériens se dilatent et se contractent pendant la respiration, dans le larynx, les cordes vocales vibrent lorsque la parole est produite, ou dans la bouche, lorsque la langue est en discussion, les lèvres se déplacent. Le flux d'air créé en respirant, en parlant ou en toussant brise alors ces couches de mucus, tout comme lorsque vous soufflez avec force dans des bulles de savon. La taille de la gouttelette dépend de la source de la gouttelette et de la façon dont elle est produite dans les voies respiratoires.

Bien que la toux soit le mécanisme qui produit le plus de gouttelettes, des études ont montré que parler pendant deux à trois minutes peut produire autant de toux que possible. Les gouttelettes de moins de 5 microns peuvent être suspendues dans l'air pendant plusieurs minutes, voire plusieurs heures, car l'influence de la résistance de l'air sur elles est bien supérieure à la gravité. De plus, lorsque des gouttelettes contenant des virus sont en suspension dans l'air en raison de l'évaporation, leur teneur en eau diminue. Cependant, même si la majeure partie du liquide s'évapore, ces gouttelettes ne disparaîtront pas, elles deviendront seulement plus petites. Cependant, plus la taille de la gouttelette est petite, plus elle sera suspendue longtemps dans l'air. De plus, les gouttelettes de plus petit diamètre sont plus efficaces et pénètrent plus profondément dans le système pulmonaire, augmentant ainsi le risque d'infection.

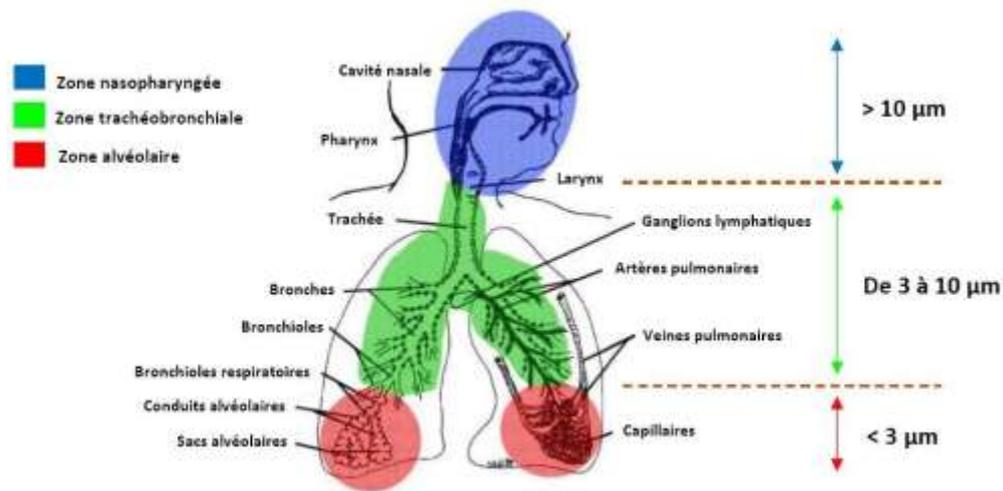


Figure 8. Schéma du système respiratoire et diamètre de pénétration des particules

(Waed .A, Oberdörster et al. 2005-2017)

VII. Définition des oligomères

Lorsque les groupes associés sont différents les uns des autres, les molécules constituent des oligomères. Les oligomères sont des composés dont les monomères constitutifs ne sont pas très répétitifs. Les 3 à 9 molécules de monomères qui sont réunies pour former une molécule plus grande sont des oligomères. Ces étuis multifonctionnels regorgent d'essence organique. En revanche, les polymères sont des molécules avec au moins deux radicaux libres de la même espèce. L'oligomérisation est un processus chimique qui convertit les monomères en complexes macromoléculaires grâce à un degré limité de polymérisation. Le nombre réel d'agréations est généralement compris entre 10 et 100.

VIII. La relation entre les oligomères et les aérosols

Selon les rapports, la formation de molécules oligomères est une étape importante dans la production d'aérosols organiques secondaires. En présence d'aérosol de germe acide, l'alpha-pinène réagit avec l'ozone pour former un aérosol, qui se caractérise par une mesure de masse précise et une spectrométrie de masse.

Les produits d'oligomérisation entre 200 et 900 μm ont été détectés par ionisation électro spray et ionisation par désorption laser assistée par matrice. Les masses précises et les

produits de dissociation de ces ions sont cohérents avec les produits primaires connus de la réaction ("monomères") avec et / ou sans les produits de décomposition catalysés par un acide monomère attendus dans diverses combinaisons.

Des oligomères aussi gros que des tétramères ont été détectés. Il est suggéré que la condensation d'aldol et la réaction gem-diol sont des moyens possibles de former des oligomères. Une mesure de masse précise révèle également des produits de réaction qui ne peuvent pas être expliqués par une simple oligomérisation des monomères et des produits de décomposition des monomères, ce qui indique l'existence de canaux de réaction complexes. La réaction chimique conduisant à la formation d'oligomères apporte une réponse raisonnable aux problèmes liés à la production d'aérosols organiques secondaires dans l'atmosphère. Il est peu probable que les monomères jouent un rôle important dans la formation et la croissance des noyaux dans l'atmosphère car leur pression de vapeur Kelvin est trop élevée pour être distribuée de manière significative dans la phase des particules. L'agrégation fournit un mécanisme pour favoriser la partition de la phase particulaire.

L'aérosol organique secondaire (SOA) formé par la réaction de l'ozone avec des mono terpènes (bêta-pinène, delta3-carène, limonène et sabinène) a été étudié dans un tube d'écoulement à l'aide d'un réacteur en une courte période de 3 à 22 s. Un spectromètre de masse à photo ionisation en aérosol (PIAMS) a été utilisé pour l'analyse chimique en ligne afin d'obtenir la composition moléculaire, et un spectromètre de masse à nano aérosol (NAMS) a été utilisé pour la composition élémentaire. Les données de composition moléculaire ont montré que des dimères et oligomères d'ordre supérieur se sont formés en quelques secondes après le début de la réaction, indiquant qu'il n'y avait pas d'obstacle cinétique inhérent à la formation d'oligomères. La formation d'oligomères étant rapide, il est impossible d'impliquer de nombreuses étapes dans son processus de formation.

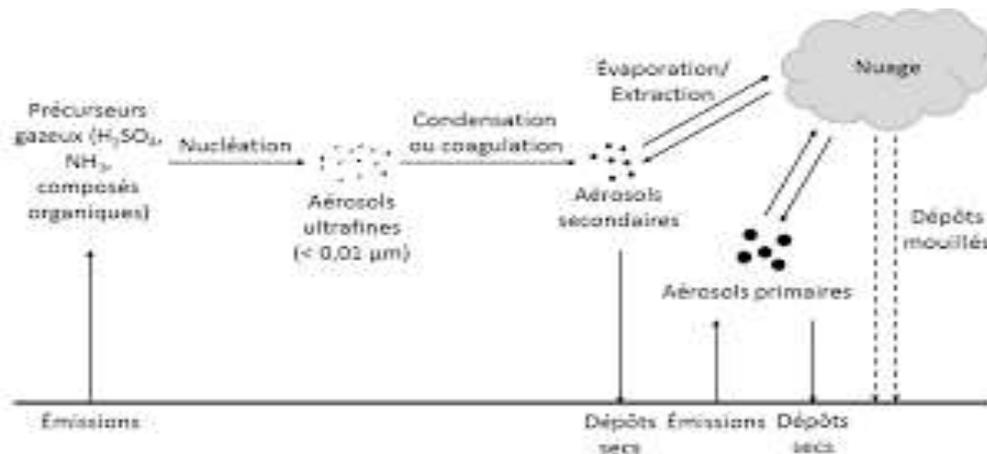


Figure 9. Processus chimiques et physiques de la formation et de la déposition des aérosols

(Prettiny, Ma. [2016])

Le but de ce mémoire est de mieux comprendre les phénomènes physiques liés à l'atterrissage des aérosols à travers le système d'arrosage qui produit des gouttelettes d'eau, contribuant ainsi à améliorer la modélisation de ces phénomènes dans les calculs de sûreté nucléaire. La recherche comprenait d'abord l'utilisation de gouttelettes d'eau pulvérisées pour synthétiser les connaissances sur le mécanisme de collecte des aérosols représentant les produits de fission. Les aspects théoriques et applicatifs sont pris en compte.



Chapitre 2

*Approche numérique et statistique
du processus de coagulation des aérosols
affectant le climat mondial*

Chapitre 2 Approche numérique et statistique du processus de coagulation des aérosols affectant le climat mondial

Ce mémoire vise l'étude du processus de coagulation des aérosols atmosphériques grandement amélioré par les forces de Van der Waals et surveillé par le mouvement brownien. Nous nous concentrons sur l'évolution de la concentration massique des particules et nous nous concentrons sur le changement de densité des particules au cours des processus de croissance de ces dernières. Nous analysons une approche pour résoudre l'équation de coagulation de Smoluchowski en utilisant la méthode probabiliste de Monte Carlo basée sur l'utilisation de nombres aléatoires dans des expériences répétées. De plus, plusieurs simulations numériques ont été mises en œuvre pour évaluer le temps CPU et leur précision en termes de concentrations massiques. Nous montrons que le pas de temps influence l'erreur au moment 2 ainsi que le nombre total de particules simulées.

I. Introduction

Les aérosols atmosphériques représentent un mélange complexe de particules microscopiques solides ou liquides en suspension dans l'atmosphère, d'origine naturelle et anthropique. Ils sont constitués de terre, de poussière de route, d'argile ou de pollution atmosphérique. En fait, les aérosols ont un effet profond sur nos vies de manières différentes et cela dépend de leur taille [4]. En outre, les aérosols affectent le climat mondial de la biosphère et la santé personnelle, raison pour laquelle les effets des aérosols sur l'environnement et la santé ont fait l'objet de plusieurs recherches scientifiques.

Plusieurs études ont montré qu'en raison de leur petite taille, ces particules peuvent pénétrer très profondément dans le corps humain et être liées à un risque accru de crises d'asthme et, par la suite, à une mortalité accrue. De plus, en absorbant et en diffusant le rayonnement solaire entrant, les aérosols peuvent altérer l'équilibre radiatif des écosystèmes.

Chapitre 2 Approche numérique et statistique du processus de coagulation des aérosols affectant le climat mondial

En fait, les particules d'aérosol jouent un rôle essentiel dans la formation des nuages. De nombreux types de particules atmosphériques peuvent agir comme des noyaux de condensation nuageuse sur lesquels la vapeur d'eau se condense. Leur nombre et leur composition peuvent également affecter la quantité de gouttelettes d'eau contenues dans un nuage, la durée de vie et les précipitations.

Les particules d'aérosol varient en taille, concentration et distribution à la fois spatialement et temporellement. Leur concentration dans l'atmosphère est variable en raison de l'hétérogénéité des compositions chimiques et des sources, des interactions avec les nuages et le rayonnement solaire et tellurique.

L'un des problèmes essentiels de la physique des aérosols est la coalescence due aux processus de transformation microphysique. La dynamique des particules d'aérosols dépend de divers processus tels que la condensation/ évaporation, suivie de phénomènes de nucléation, de coagulation et de dépôt final, mais certains phénomènes supplémentaires doivent être pris en compte comme les forces de Van der Waals pour la coagulation. Au niveau macroscopique des aérosols, de nombreuses études [1, 2, 5, 9] mettent en évidence expérimentalement l'augmentation significative du taux de coagulation des particules. Il est en effet essentiel pour la coagulation des nanoparticules, où les forces de Van der Waals n'agissent que sur de petites particules.

II.Équations de Smoluchowski

Les débuts de la compréhension classique de l'agrégation découlent des travaux de Smoluchowski, une équation d'équilibre de population décrivant les phénomènes de croissance et de division pour la population de nanoparticules, caractérisée par sa répartition en densité de taille.

Chapitre 2 Approche numérique et statistique du processus de coagulation des aérosols affectant le climat mondial

La solution de l'équation de Smoluchowski reste un problème spécial et a été largement étudiée pendant de nombreuses années, y compris la solution analytique et numérique [3, 6]. C'est à dire que le taux de collision par unité de masse est dû au mouvement brownien, qui consiste en un mécanisme inter-particules modifiant la distribution granulométrique, et le taux d'agglomération des particules dépend de la probabilité de contact des particules et de l'efficacité de cette dernière. Il découle de l'hypothèse que les collisions sont binaires et que les fluctuations de densité sont suffisamment faibles pour que les collisions se produisent au hasard.

Par conséquent, les distributions de taille élémentaire révèlent un modèle intéressant et l'étude de l'analyse numérique de certains comportements du modèle de fragmentation de la coagulation constitue un réel défi. Ce dernier reçoit plus d'attention en fait dans les domaines émergents de la science des aérosols, de la science des nuages et dans d'autres domaines environnementaux.

Les équations intégral-différentielles de Smoluchowski ont été initialement proposées par Müller sur la base des recherches de Smoluchowski pour le processus de coagulation [7,8], et a la forme à l'état instable de:

$$\frac{\partial c}{\partial t}(i, t) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K(i-j, j) c(i-j, t) c(j, t) - \sum_{j=1}^{\infty} K(i, j) c(i, t) c(j, t) \quad (1)$$

$$K(i, j) = 1 \text{ et } c(i, 0) = c_i(0) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = 1 \\ 0 & \text{autre} \end{cases} \quad \forall i \in \mathbb{N}^*, t > 0 \quad (2)$$

Le système (1) est déduit pour un ensemble de particules 1, 2, 3, ... ou toute autre masse entière au temps t , où :

Chapitre 2 Approche numérique et statistique du processus de coagulation des aérosols affectant le climat mondial

- $c(i, t)$ désigne le numéro de distribution granulométrique généralement défini par une distribution continue.
- $c(i, t) \Delta i$ représente la concentration en nombre de particules dont la masse de particule unique est comprise entre i et $i + \Delta i$.
- Deux particules de masse i et j fusionnent en une seule particule, leur probabilité de fusion est $K(i, j)$ qui est le noyau de coagulation, proportionnel à la densité de ces deux particules.
- Physiquement, nous supposons que le nombre et la masse totale sont finis et que $K(i, j)$ est non négatif et symétrique.
- Le premier terme de droite représente la vitesse d'agglomération d'aérosols de masse k par agglomération de n'importe quelle paire d'aérosols de masses i et j .
- Le second terme rend compte de la perte d'aérosols de masse k par agglomération avec d'autres aérosols.
- La variance de $c(i, t)$ est donnée par la fusion de particules de masses i et j et par la disparition de particules de tailles $(i + j)$ suite à une fusion avec une autre particule.

La masse de distribution granulométrique est représentée par $\check{c}(i, t)$ tel que $\check{c}(i, t) \Delta i$ représente la concentration massique des particules avec une masse particulaire unique entre i et $i + \Delta i$. Les distributions de masse et de nombre sont liées par la masse de particule unique :

$$\check{c}(i, t) = i c(i, t)$$

Dans notre étude, la densité des particules est constante en raison des particules à un seul composant, donc les distributions de masse et de volume sont équivalentes.

A présent au lieu d'approcher la densité, nous approcherons la masse volumique qui satisfait l'équation suivante :

Chapitre 2 Approche numérique et statistique du processus de coagulation des aérosols affectant le climat mondial

$$\frac{\partial \check{c}}{\partial t}(i, t) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \check{K}(i-j, j) \check{c}(i-j, t) \check{c}(j, t) - \sum_{j=1}^{\infty} \check{K}(i, j) \check{c}(i, t) \check{c}(j, t) \quad (3)$$

$$\check{c}(i, 0) = \check{c}_i(0), \text{ OÙ } \check{c}(i, t) = ic(i, t) \text{ et } \check{K}(i, j) = \frac{K(i, j)}{j} \quad (4)$$

Une solution analytique est donnée par :

$$c(i, t) = \frac{\left(\frac{t}{2}\right)^{i-1}}{\left(1 + \frac{t}{2}\right)^{i-1}}$$

Lorsque les particules d'aérosol se déplacent dans le gaz vecteur, elles se heurtent et se collent les unes aux autres, formant une seule particule. Ce processus s'appelle la coagulation. Le taux de coagulation d'une population de particules dépend de la concentration des particules et de l'efficacité de coagulation des particules.

Dans ce mémoire, nous concentrons notre étude sur le moment d'ordre 2, qui correspond à la concentration en nombre de particules coagulées, et nous comparons le moment approximatif d'ordre 2 :

$$M_{2,N}(t) = \sum_{K=1}^N i_{N,n}(k)$$

Aux moments analytiques d'ordre 2 sur l'intervalle $[0, T]$:

$$M_p(t) = \sum_{i=1}^{\infty} i^p c(i, t) = \sum_{i=1}^{\infty} i^{p-1} \check{c}(i, t)$$

ou

Chapitre 2 Approche numérique et statistique du processus de coagulation des aérosols affectant le climat mondial

$$M_2(t) = t + 1$$

III. Simulations numériques

Les calculs ont tous été effectués sur un ordinateur Intel (R) Core i7-3632 CPU 3,2 GHz avec 4 Go de mémoire. Pour toutes les solutions numériques et analytiques, le temps total était à l'unité. Dans la présente étude, la performance des simulations numériques est évaluée à l'aide d'un critère proposé pour évaluer la précision de la méthode, c'est-à-dire que la méthode analytique étudiée et la méthode numérique de référence sont considérées comme ayant la même précision dans la résolution des équations de Smoluchowski si les erreurs relatives absolues sont inférieures à 0,050.

IV. La simulation de Monte Carlo

La simulation de Monte Carlo est une quantité numérique utilisant des processus aléatoires qui emploie des nombres pseudo-aléatoires généralement générés par un algorithme, visant à simuler des phénomènes qui ont une ou plusieurs variables aléatoires.

De plus, les méthodes de Monte Carlo sont des méthodes de simulation probabilistes utilisées pour résoudre des problèmes variés en sciences appliquées. Leur principe est basé sur le théorème central limite où une variable peut être approchée par des évaluations répétées et indépendantes.

Le terme de Monte Carlo a vu ses débuts dès la fin de la Seconde Guerre mondiale, principalement dans le cadre d'un projet américain portant sur le développement de l'arme nucléaire. De plus, la simulation Monte Carlo présente un double avantage puisque d'un côté son utilisation est simple et d'un autre côté, elle est facilement appliquée à un très large éventail de

***Chapitre 2* Approche numérique et statistique du processus de coagulation des aérosols affectant le climat mondial**

problèmes. Cette dernière a prouvé son efficacité dans de nombreux domaines scientifiques et appliqués tels que les mathématiques, la finance, la physique, la biologie, etc...

Dans ce travail, nous développons et analysons la méthode de Monte Carlo pour les phénomènes d'agglomération des aérosols atmosphériques. Nous nous intéressons à la simulation numérique des équations de Smoluchowsky. Nous écrivons l'équation vérifiée par la densité de distribution de masse. Pour la simulation de la coagulation, les particules numériques évoluent en utilisant des nombres aléatoires pour les simulations MC. Toutes nos simulations numériques mettent en évidence que les solutions numériques obtenues par les algorithmes MC convergent vers les solutions analytiques.

***Chapitre 2* Approche numérique et statistique du processus de coagulation des aérosols affectant le climat mondial**



Chapitre 3

Les résultats numériques

I. Influence du pas de temps sur l'erreur sur les moments d'ordre 2

1. Cas du N=50000

Tableau 1. Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant

entre $\frac{T}{400}$ et $\frac{T}{600}$ pour un nombre de particules égal à 50 000.

Pas du temps	$\Delta T = \frac{T}{400}$	$\Delta T = \frac{T}{500}$	$\Delta T = \frac{T}{600}$
Erreur sur le moment 2	0.000586	0.000174	2.00e-05
Erreur relative sur le moment 2	0.0293	0.0087	0.001

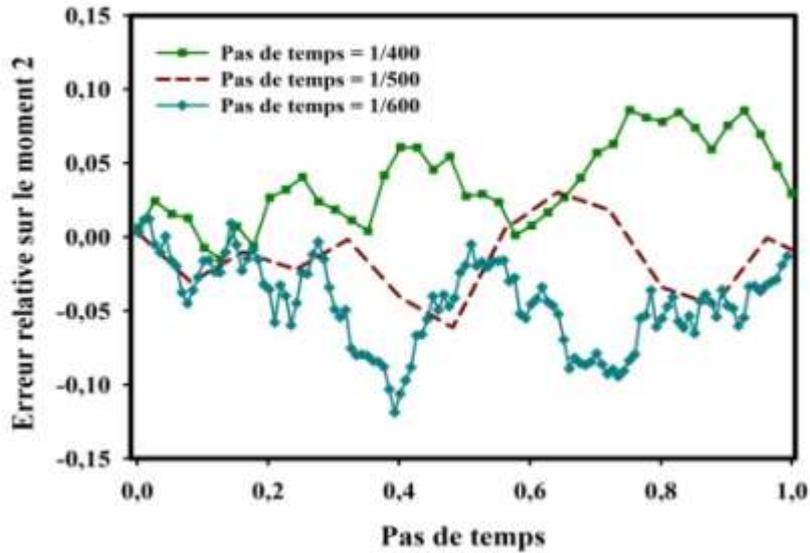


Figure 10. Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant

entre $\frac{T}{400}$ et $\frac{T}{600}$ pour un nombre de particules égal à 50000.

2. Cas du N=1300000

Tableau 2. Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant

entre $\frac{T}{100}$ et $\frac{T}{600}$ pour un nombre de particules égal à 1 300 000.

Pas du temps	Erreur relative sur le moment 2	Erreur sur le moment 2	Pas du temps	Erreur relative sur le moment 2	Erreur sur le moment 2
$\Delta T = \frac{T}{100}$	0.055808	0.0011162	$\Delta T = \frac{T}{400}$	0.016962	0.00033923
$\Delta T = \frac{T}{200}$	0.055115	0.0011023	$\Delta T = \frac{T}{500}$	0.012462	0.00024923
$\Delta T = \frac{T}{300}$	0.046077	0.00092154	$\Delta T = \frac{T}{600}$	0.010885	0.00021769

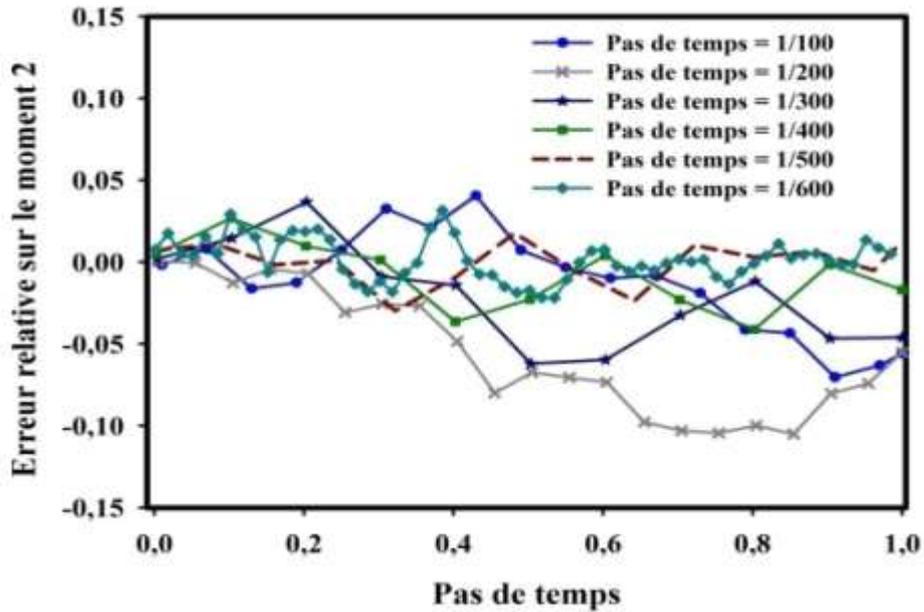


Figure 11. Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant entre $\frac{T}{100}$ et $\frac{T}{600}$ pour un nombre de particules égal à 1 300 000.

3. Cas du N=700000

Tableau 3. Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas du temps variant

entre $\frac{T}{300}$ et $\frac{T}{600}$ pour un nombre de particules égal à 700 000.

Pas du temps	$\Delta T = \frac{T}{300}$	$\Delta T = \frac{T}{400}$	$\Delta T = \frac{T}{500}$	$\Delta T = \frac{T}{600}$
Erreur sur le moment 2	0.00094143	0.00082714	0.00068857	0.00019143
Erreur relative sur le moment 2	0.047071	0.041357	0.034429	0.0095714

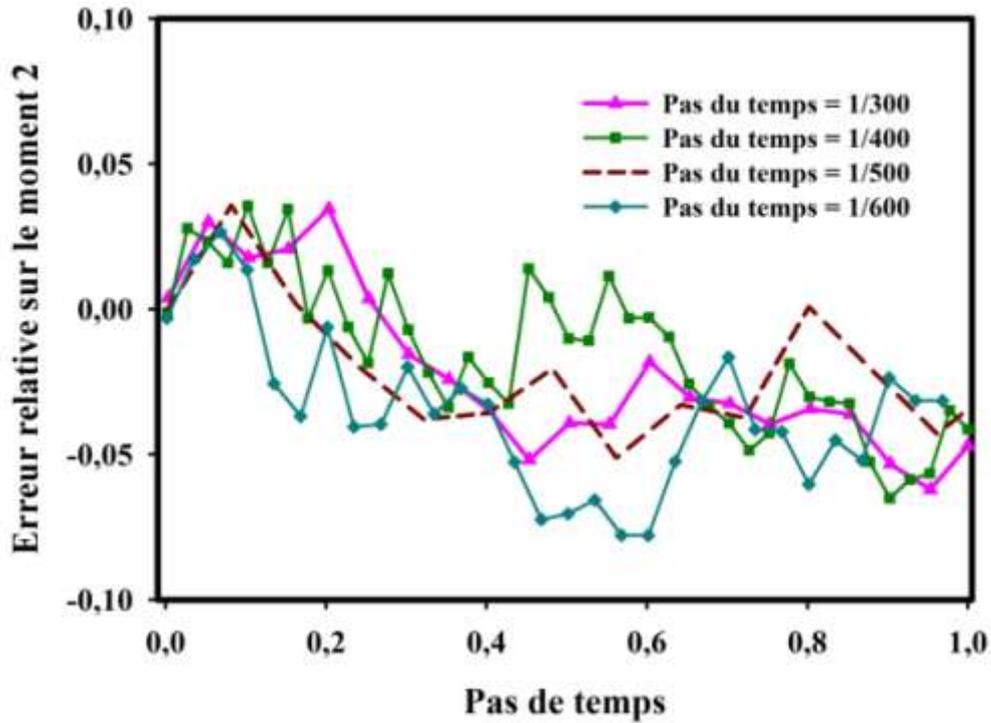


Figure 12. Erreur relative sur le moment d'ordre 2 correspondant à des pas de temps variant

entre $\frac{T}{300}$ et $\frac{T}{600}$ pour un nombre de particules égal à 700 000.

II. Moment d'ordre 2

Dans cette étude, les simulations numériques ayant été effectués mettent en évidence que les solutions numériques calculées par les algorithmes MC convergent vers les solutions exactes, c'est-à-dire la méthode analytique étudiée et la méthode numérique de référence sont considérés comme ayant la même précision dans la résolution de SE si les erreurs relatives absolues sont inférieures à 0,050.

1. Moment d'ordre 2 correspondant à un pas du temps $\Delta T = \frac{T}{900}$ et pour un nombre de particules égal à 1 750 000

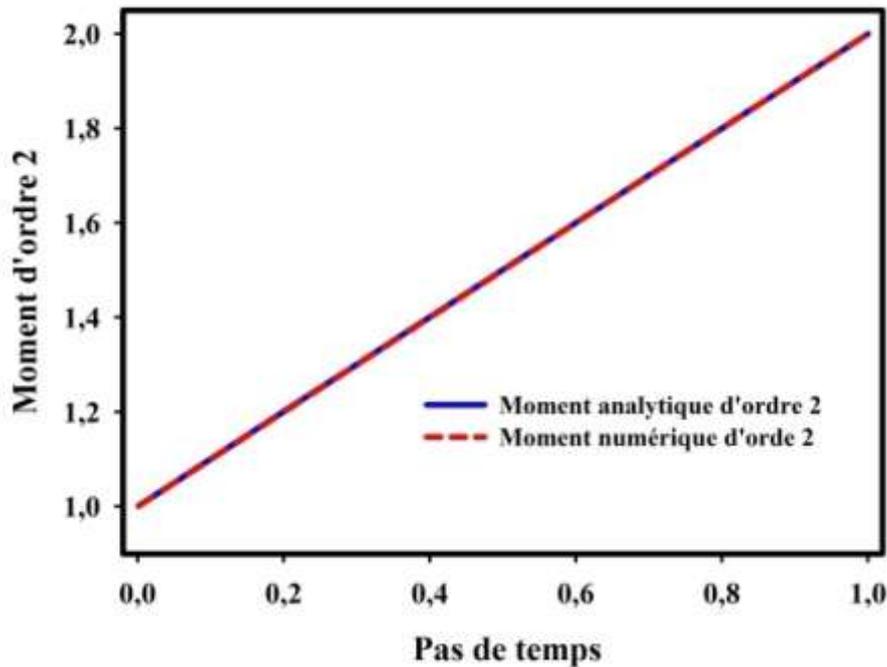


Figure 13. Comparaison entre moment analytique et moment numérique d'ordre 2 correspondant à un pas de temps égal à $\frac{T}{900}$ et un nombre de particules de l'ordre de 1 750 000.

On note que le moment analytique d'ordre 2 est égal à 2, pendant que le moment numérique d'ordre 2 est égal à 1,9999. Ainsi correspondant à une erreur sur le moment d'ordre 2 de l'ordre de $7,1429 \times 10^{-5}$ équivalent à une erreur relative sur le moment d'ordre 2 égale à 0,0035714, clairement inférieure à 0,05 selon les critères de convergence internationale.

2. Moment d'ordre 2 correspondant à un pas du temps $\Delta T = \frac{T}{700}$ et pour un nombre de particules égal à 1 450 000

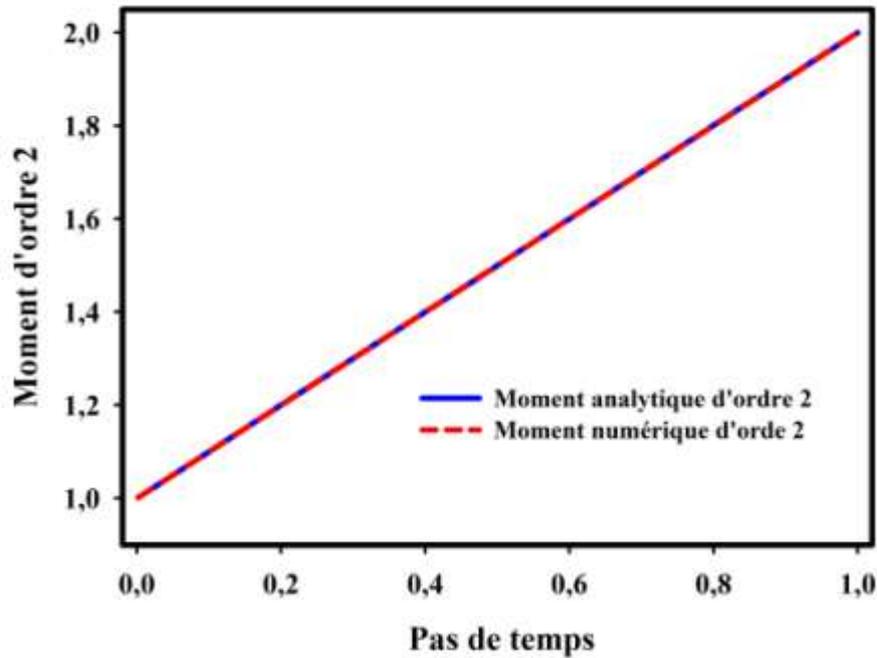


Figure 14. Comparaison entre moment analytique et moment numérique d'ordre2 correspondant à un pas de temps égal à $\frac{T}{700}$ et un nombre particules de l'ordre de 1 450 000.

On note que le moment analytique d'ordre 2 est égal à 2, pendant que le moment numérique d'ordre 2 est égal à 2,0001. Ainsi correspondant à une erreur sur le moment d'ordre 2 de l'ordre de $-7,7241 \times 10^{-5}$ équivalent à une erreur relative sur le moment d'ordre 2 égale à -0.0038621, clairement inférieure à 0.05 selon les critères de convergence internationale.

3. Moment d'ordre 2 correspondant à un pas du temps $\Delta T = \frac{T}{700}$ et pour un nombre de particules égal à 850 000

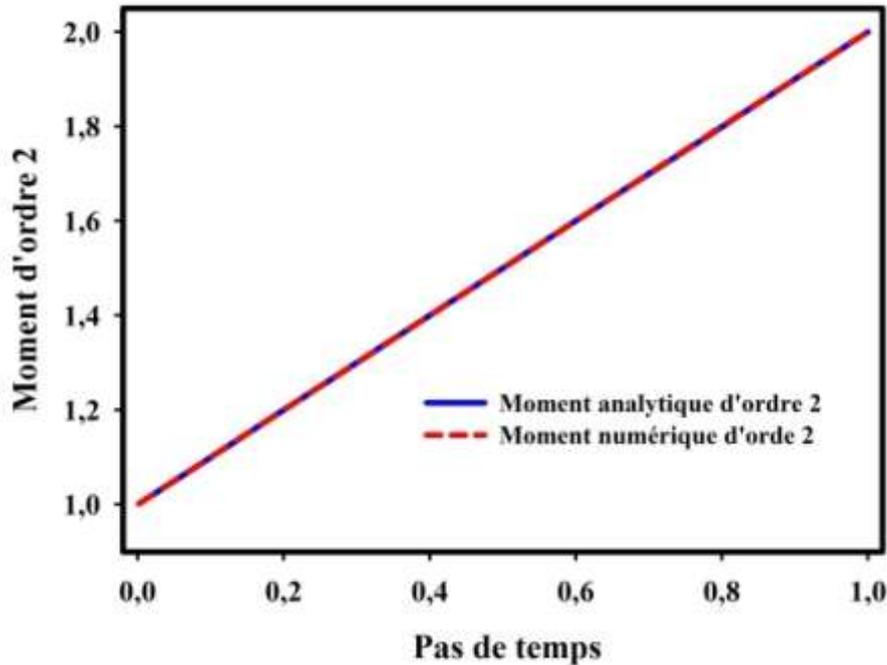


Figure 15. Comparaison entre moment analytique et moment numérique d'ordre 2 correspondant à un pas de temps égal à $\frac{T}{700}$ et un nombre particules de l'ordre de 850 000.

On note que le moment analytique d'ordre 2 est égal à 2, pendant que le moment numérique d'ordre 2 est égal à 1,9999. Ainsi correspondant à une erreur sur le moment d'ordre 2 de l'ordre de 5.4118×10^{-5} équivalent à une erreur relative sur le moment d'ordre 2 égale à 0.0027059, clairement inférieure à 0.05 selon les critères de convergence internationale.

III. Analyse du Central Processing Unit (CPU time)

Le temps CPU permet de quantifier le temps qu'un processus de programme unique a activement requis un CPU en éliminant les interférences. En d'autres termes, il mesure le nombre de secondes pendant lesquelles le processeur a été occupé. Alors que le temps réel écoulé mesure le temps réel pris depuis le début d'un programme informatique jusqu'à la fin.

Tableau 4. Temps CPU moyen de 10 pas de temps différents variant entre $\Delta T=T/100$ et $\Delta T=T/1000$, correspondant à divers nombres de particules variant entre 10000 et 1600000.

Nombre de particules	Temps moyen du CPU	Nombre de particules	Temps moyen du CPU
1 600 000	26,71	300 000	28,02
1 550 000	27,56	250 000	27,76
1 500 000	29,47	240 000	29,45
1 450 000	29,37	230 000	32,80
1 400 000	29,68	220 000	32,65
1350 000	29,46	210 000	30,98
1 300 000	30,36	200 000	33,27
1 250 000	29,89	190 000	29,93
1 200 000	30,30	180 000	30,82
1 150 000	28,79	170 000	28,81
1 100 000	29,13	160 000	28,43
1 050 000	30,96	150 000	27,19
1 000 000	26,82	140 000	28,88
950 000	28,96	130 000	29,45
900 000	29,25	120 000	29,54
850 000	27,50	110 000	27,83
800 000	28,39	100 000	27,65
750 000	30,22	90 000	28,05
700 000	28,14	80 000	28,76
650 000	28,38	70 000	32,26
600 000	30,90	60 000	28,80
550 000	29,35	50 000	28,18
500 000	30,44	40 000	30,19
450 000	27,95	30 000	33,57
400 000	28,04	20 000	31,59
350 000	27,84	10 000	28,14

Conclusion générale

Les aérosols atmosphériques représentent un mélange dynamique complexe de particules microscopiques de gouttelettes solides ou liquides en suspension dans l'atmosphère. Les particules atmosphériques proviennent de nombreuses sources différentes consistant en à la fois des origines naturelles et/ ou des activités anthropiques. Les aérosols influencent le bilan énergétique de la Terre.

En effet, la procédure d'interaction entre les flux de rayonnement solaire/ terrestre et les aérosols atmosphériques jouent un rôle primordial dans l'influence du climat de la Terre en diffusant la lumière et changeant la réflectivité de la Terre. De plus, les aérosols sont d'une importance capitale pour la formation des nuages. Par conséquent, les aérosols modifient l'albédo planétaire en affectant la nébulosité et la température moyenne mondiale.

L'objectif de ce travail consiste à étudier grandement le processus de coagulation des aérosols atmosphériques renforcée par les forces de Van der Waals et surveillée par le Brownien mouvement. Nous analysons une approche pour résoudre la coagulation de Smoluchowski équation utilisant la méthode probabiliste de Monte Carlo basée sur l'utilisation de nombres aléatoires dans des expériences répétées. De plus, plusieurs des simulations numériques ont été mises en œuvre et évaluées concernant leurs temps d'unité centrale (CPU) et leur exactitude en termes de concentrations massiques. Tous nos tests numériques montrent que les solutions calculées par les algorithmes MC convergent vers les solutions exactes.

Références

1. Alam, A., Shi, J.P., Harrison, R.M.: Observations of new particle formation in urban air. *J. Geophys. Res.*, (108) D3, 4093, doi:10.1029/2001JD001417 (2013).
2. Ameer, D., Dib, J., Belalia, S., Raspo, I.: Statistical study for colloidal suspensions coagulation. In: *ICEMAEP2018 Proceeding* (2018).
3. Babovsky, H.: On a Monte Carlo scheme for Smoluchowski's coagulation equation. *Monte Carlo Methods Appl.* 5, 1–18 (1999).
4. EPA: Integrated science assessment for particulate matter. Tech. rep., U.S. Environmental Protection Agency, Washington D.C., USA (2009).
5. Friedlander, S.K.: *Smoke, Dust and Haze Fundamentals of Aerosol Behavior*. 2nd edn. WileyInterscience 1977333p. John Wiley & Sons, Inc, New York (2000).
6. Kruis, F.E., Maisels, A., Fissan, H.: Direct Simulation Monte Carlo Method for Particle Coagulation and Aggregation. *AIChE J.* (46), 1735–1742 (2000).
7. Müller, H.: Zur Allgemeinen Theorie der Raschen Koagulation *Kolloid chem. Beih.* (27), 223-250 (1928).
8. Smoluchowski, M.: Versucheiner Mathematischen Theorie der coagulations kinetikKolloider. *Z. PhysChem* (92), 129–168 (1917).
9. Twomey, S.: *Atmospheric Aerosols*. Elsevier Scientific Publishing Co., New York, (1977).

Résumé. L'atmosphère est composée essentiellement de gaz. Outre ces gaz, l'atmosphère renferme également des aérosols, des particules microscopiques liquides ou solides en suspension dans l'air. Ces particules atmosphériques jouent un rôle clef sur l'environnement suite à leurs répercussions nocives sur la santé de la population et les écosystèmes. Dans ce mémoire, on s'intéresse en particulier aux aérosols organiques secondaires (AOS). Ces composés organiques semi-volatils vont évoluer par polymérisation pour former de nouveaux composés de fort poids moléculaire ayant la structure d'oligomères participant aux AOS. Dans ce contexte, nous nous intéressons à l'étude du temps estimé pour une meilleure coagulation des AOS et de leurs composantes.

Mots clés : Aérosols organiques secondaires (AOS), méthode de Monte Carlo, polymérisation, coagulation

Abstract. The atmosphere is made up mostly of gases. In addition to these gases, the atmosphere also contains aerosols, microscopic liquid or solid particles suspended in the air. These atmospheric particles play a key role in the environment due to their harmful repercussions on the health of the population and the ecosystems. In this thesis, we are particularly interested in secondary organic aerosols (OSA). These semi-volatile organic compounds will evolve by polymerization to form new compounds of high molecular weight having the structure of oligomers participating in OSA. In this context, we are interested in the study of the estimated time for a better coagulation of OSA and their components.

Key words: Secondary organic aerosols (OSA), Monte Carlo method, polymerization, coagulation

ملخص. يتكون الغلاف الجوي في الغالب من غازات . بالإضافة إلى هذه الغازات ، يحتوي الغلاف الجوي أيضًا على هباء أو سائل مجهري أو جزيئات صلبة معلقة في الهواء . تلعب جزيئات الغلاف الجوي هذه دورًا رئيسيًا في البيئة نظرًا لتداعياتها الضارة على صحة السكان والنظم البيئية . في هذه الأطروحة ، نحن مهتمون بشكل خاص بالهباء الجوي العضوي الثانوي (OSA) . سوف تتطور هذه المركبات العضوية شبه المتطايرة عن طريق البلورة لتشكيل مركبات جديدة ذات وزن جزيئي مرتفع لها بنية أوليغومرات تشارك في OSA . في هذا السياق ، نحن مهتمون بدراسة الوقت المقدر لتخثر OSA ومكوناته بشكل أفضل .

الكلمات المفتاحية : الهباء الجوي الثانوي (OSA) ، المركبات العضوية شبه المتطايرة ، البلورة ، التخثر

