

Dynamique d'une particule aérosol organique à l'aide d'un système d'équations algébriques différentielles ordinaires.

Chantal LANDRY, EPFL, Suisse

Alexandre CABOUSSAT, Université de Houston, USA

Jiwen HE, Université de Houston, USA

Jacques RAPPAZ, EPFL, Suisse

Mots-clés : système d'équations algébriques différentielles, EDOs discontinues, minimisation de l'énergie de Gibbs, problème de détection d'événements, chimie computationnelle.

Les particules aérosols que l'on trouve dans l'atmosphère sont issues d'une part de sources naturelles comme les poussières de volcans ou les embruns; et d'autre part, d'émissions anthropogéniques telle la combustion des carburants. Ces émissions ont fortement augmenté durant ce dernier siècle et ont des impacts néfastes sur la santé, la visibilité, la couche d'ozone et l'équilibre du rayonnement terrestre. Il est donc d'une grande importance de comprendre leur fonctionnement et de construire un modèle numérique capable de simuler leur évolution en taille, nombre et composition.

Ce travail présente la dynamique des particules aérosols de type organique plongées dans un gaz de même composition chimique, dont le modèle mathématique s'appuie essentiellement sur le transfert de masse entre le gaz et l'aérosol, et l'équilibration interne chimique de la particule. Pour ce faire, nous utilisons un système d'équations algébriques différentielles ordinaires semi-implicite. La partie différentielle ordinaire décrit le flux de masse entre la particule et le gaz, alors que l'équilibre chimique interne se traduit par des équations algébriques qui sont issues d'un problème de minimisation de l'énergie de Gibbs que l'on résout à l'aide d'une méthode de point intérieur couplée avec une procédure d'identification de phases actives (cf. [1],[2]). Durant l'évolution temporelle de ce système, le nombre de phases liquides présentes dans la particule changent, ce qui a pour conséquence de créer une discontinuité dans la fonction de transfert de masse, et donc dans le système d'EDO. En plus de cette discontinuité et du problème de minimisation de l'énergie de Gibbs, une autre difficulté émerge du fait qu'il est extrêmement difficile de déterminer exactement quand est-ce qu'un changement du nombre de phases actives se produit.

Dans cet exposé, nous présenterons les méthodes numériques utilisées pour résoudre ce problème complexe de chimie computationnelle ainsi qu'un certain nombre de résultats qui montrent l'efficacité de notre programme à déterminer l'évolution en taille et en composition de particules aérosols de type organique.

Références

- [1] AMUNDSON, N., CABOUSSAT, A., HE, J.-W. AND SEINFELD, J.H., *A primal-dual interior-point method for an optimization problem related to the modeling of atmospheric organic aerosols*, Journal of Optimization Theory and Applications, 2006.
- [2] AMUNDSON, N., CABOUSSAT, A., HE, J.-W. AND SEINFELD, J.H., *An optimization problem related to the modeling of atmospheric organic aerosols*, C.R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, 2005, 340, 765-768.

Chantal LANDRY – chantal.landry@epfl.ch

Institut d'analyse et de calcul scientifique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Station 8 1015 Lausanne, Suisse.

Alexandre CABOUSSAT – caboussat@math.uh.edu

Department of mathematics, University of Houston, 651 Philip G Hoffman Hall, Houston, Texas 77204-3008, USA.

Jiwen HE – jiwenhe@math.uh.edu

Department of mathematics, University of Houston, 651 Philip G Hoffman Hall, Houston, Texas 77204-3008, USA.

Jacques RAPPAZ – jacques.rappaz@epfl.ch

Institut d'analyse et de calcul scientifique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Station 8 1015 Lausanne, Suisse.