

Modèle MODDAS

Fiche de présentation

MODDAS en quelques mots

Le modèle MODDAS/SMOP (MOdel of Dispersion and exchAnge or gaseous and particulate pollutants over the Short range) est un modèle lagrangien stochastique (LS) de dispersion polluants gazeux et de particules, couplé à un modèle multicouche d'échange avec la végétation. Le modèle de dispersion est basé sur la simulation des trajectoires de particules fluides sous l'effet de la turbulence qui est soit paramétrée dans la couche limite et le couvert soit calculé par le modèle *k-e* THETIS (<http://thetis.enscbp.fr/>). L'effet de la végétation sur le dépôt des particules par est pris en compte via les effets d'impaction, de sédimentation sur les éléments de végétation. Ce modèle qui est lourd en temps de calcul présente un intérêt surtout pour l'étude des aménagements et de scénarios. Le modèle est en 2D pour les gaz et le dépôt est calculé en 3D pour les particules.

Mots clés : dispersion en champ proche, dépôt, modèle résistif, ammoniac, pesticides, pollens, particules

Laboratoire de développement : UMR INRA-AgroParisTech - EGC "Environnement et Grandes Cultures EGC", Thiverval-Grignon

Site internet : <http://www6.versailles-grignon.inra.fr/egc/Productions/Logiciels-Modeles/MODDAAS-SMOP>

Contact : Benjamin Loubet (loubet@grignon.inra.fr)

Description détaillée

Domaine d'application

Le modèle MODDAS est un modèle de dispersion et d'échange de polluants gazeux et de particules. Il est utilisé pour estimer le dépôt de polluants à proximité de sources (< 5 km). Il a été développé pour étudier le dépôt d'ammoniac (Loubet, 2000; Loubet et al., 2006) et a été ensuite adapté (SMOP) aux pollens (Jarosz, 2003; Jarosz et al., 2005, Jarosz, 2004). Le modèle MODDAS/SMOP est un modèle de recherche qui est particulièrement utile pour déterminer l'efficacité d'aménagements sur la dispersion des polluants et contaminants. Il a été utilisé pour estimer l'efficacité des zones boisées pour capturer l'ammoniac émis par les bâtiments d'élevage (Bealey, under review).

Principe

The two models were developed in this research to study NH₃ and pollen deposition near hot-spots: MODDAAS is for NH₃ and SMOP is for pollen. They are both based on the same superimposition principle given in eq. 1 (Thomson, 1987).

$$\chi(x, y, z) = \chi_{bgd} + \int_{\text{all } x_s \text{ and } y_s} S(x_s, y_s, z_s) D(x, y, z | x_s, y_s, z_s) dx_s \quad (1)$$

The MODDAAS model is further based on another essential concept regarding the bi-directional exchange of NH₃, where it is showed that a bi-directional model is equivalent to a "sum" of two unidirectional models, in the sense that the flux is the sum of the fluxes in each pathway (Figure 1). This concept is advantageous in that it separates a surface model which is completely explicit (the surface emission potential and resistances are known) with one which is implicit (the atmospheric concentration is unknown). The equation that is then used to couple the dispersion and the exchange model is then:

$$\chi_i = \chi_i^{\text{ref}} - \sum_{j=1}^{N_{\text{can}}} D_{ij}^{\text{dep}} \left(\frac{\chi_j}{r_j^{\text{dep}}} \right) \quad i=1..N \quad (2)$$

where c^{ref} is the sum of the background concentration, the concentration generated by all known sources and the compensation points, assuming no deposition is occurring, r_{dep} is the virtual deposition resistance and D is the dispersion matrix, while i, j are numberings indexes and N_{can} is the number of canopy cells. If the resistances are independent of the atmospheric concentration, the coupling results in a linear system which is solved with common methods (Loubet et al., 2006). The limits of this

approach are that no chemical reactions can be taken into account in the gas-phase (because of the superimposition principle) and that the resistances are not dependent upon the concentration (which excludes some ways of accounting for saturation of the surfaces).

Limites

→ Actuellement le modèle est en 2

dimensions : verticale / horizontale

- Les réactions chimiques dans l'atmosphère ne sont pas prises en compte.
- Le dépôt n'est paramétré pour les particules les plus fines (PM2.5)
- Lourd en temps de calcul (entre 30 min et 2 h pour une simulation)

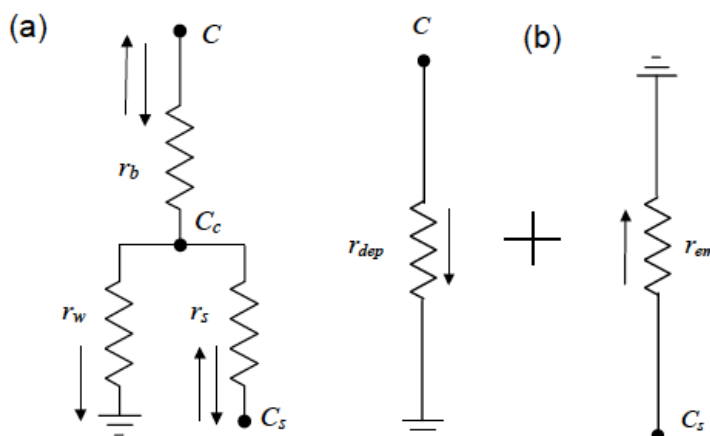


Figure 1. Resistance scheme model for NH₃ exchange at the leaf scale. (a) Standard representation of the model and (b) representation of the model with two additive pathways. Here r_b , r_w and r_s are the boundary layer, cuticular and stomatal resistances, and r_{dep} and r_{em} are virtual deposition emission resistances. C and C_s are the air concentration and the stomatal compensation point. Taken from Loubet et al., 2006.

Initialisation, paramètres ajustables, variables d'entrée / forçages

Forçage / Paramètre	Description	Valeur « standard »	min	max
Forçage				
u_* ^(a)	Vitesse de frottement	0.3 m s ⁻¹	0.1	1.5
z_0 ^(a)	Longueur de rugosité	10 mm (sol nu)	10	1000 (forêt)
d ^(a)	Hauteur de déplacement	0 (pas de couvert)	0	10 (forêt)
L ^(a)	Longueur d'Obukhov	-10 ⁵ (neutre)	+10 (stable)	-10 (instable)
Paramètres				
R_s (gaz) ^(b)	Résistance stomatique	60 s m ⁻¹ (blé)	0	Inf
R_w (gaz) ^(b)	Résistance cuticulaire	Inf (sec)	0 (humide)	Inf
d_p ^(c)	Diamètre des particules	Dépend de la source	0.01 µm	20 µm
C_{bgd} ^(d)	Concentration de fond	0	-	-
L_{source} ^(e)	Taille de la zone émettrice	100 m	0.1	5000

(a) Les caractéristiques de surface sont homogènes sur l'ensemble du domaine.

(b) La résistance stomatique est en parallèle de la résistance cuticulaire. Il n'y a pas de dépôt au sol dans le modèle actuel. En fixant R_w à une valeur infinie, et en fixant $R_s = R_c$ on a le modèle de vitesse de dépôt. $V_d(z) = 1 / (R_a(z) + R_b + R_c)$.

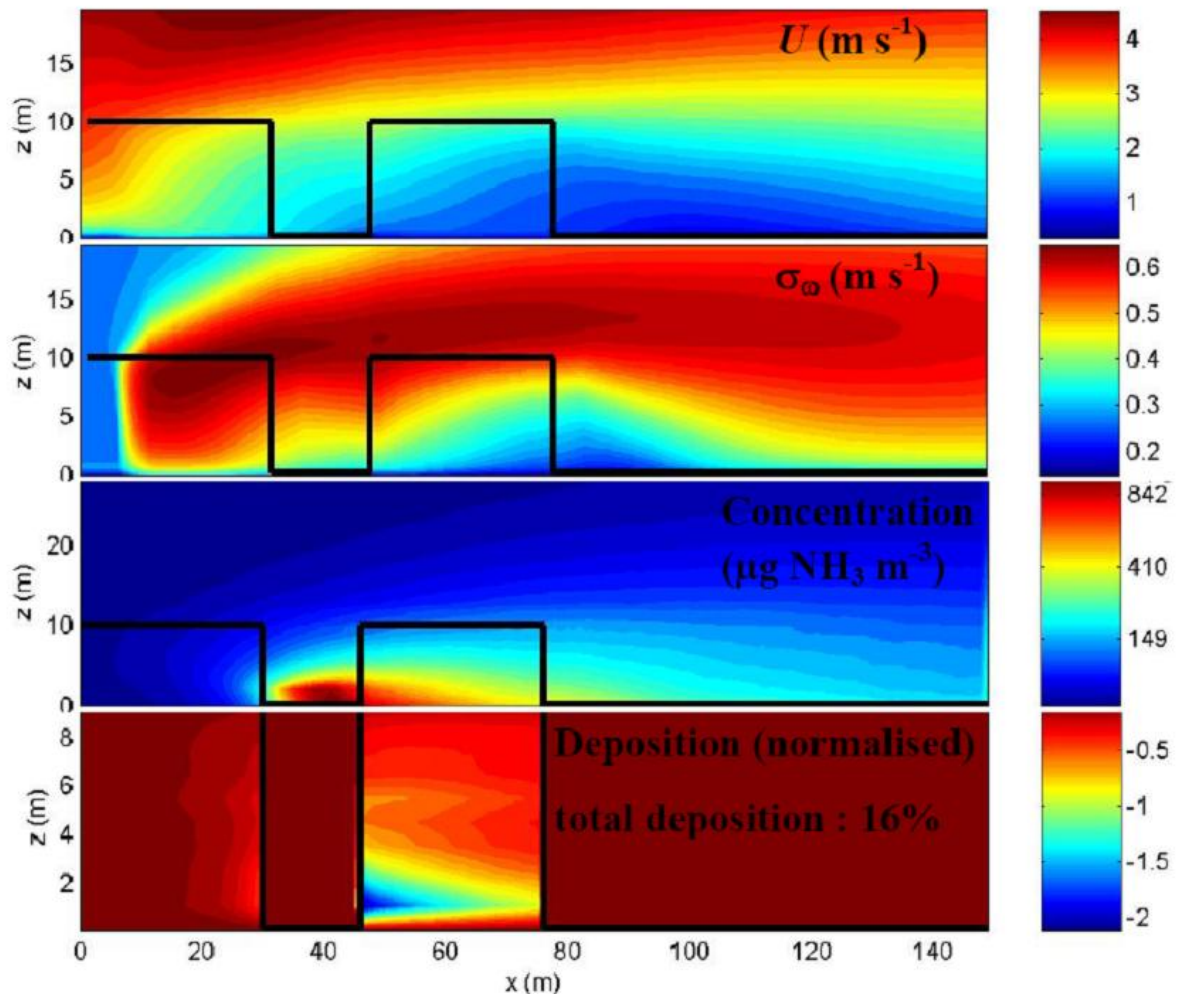
(c) Le diamètre de la particule est unique pour un « run » donné. La vitesse de dépôt correspondante est définie par $V_d = 1 / (R_a + R_b + R_a R_b V_s) + V_s$, où V_s est la vitesse de sédimentation, et R_b est paramétré d'après Seinfeld et Pandis (1998) en fonction du nombre de Schmidt et de Stokes et du nombre de Cuningam. Par ailleurs la diffusivité de la particule est modifiée pour tenir compte des effets d'inertie pour les grosses particules d'après Bouvet et al. (2006).

(d) La concentration de fond est ajoutée à la concentration issue des sources dans tout le domaine.

(e) La longueur de la source est celle dans la direction du vent.

Variables de sortie principales

Paramètre	Description
$C(x,z)$	Concentration dans tout le domaine à une hauteur donnée et à la surface
$Fz(x,z)$	Flux vertical spatialisé



Caractéristiques techniques

- ↳ Logiciel pré-requis : C++ (Visual C++ ou g++)
- ↳ Langage informatique : C++
- ↳ Système d'exploitation : Windows ou Linux
- ↳ Nombre de lignes de code : environ 10000 lignes
- ↳ Présence d'un guide d'utilisation : oui

Couplage

Le modèle est couplé à Volt'air

Utilisateurs

INRA

CEH Edinburgh

Publications - Références

Jarosz, N., Loubet, B., Durand, B., Foueillassar, X. & Hubert, L. 2005. Variations in maize pollen emission and deposition in relation to microclimate. *Environmental Science & Technology*, **39**, 4377-4384.

Jarosz, N., Loubet, B., Durand, B., McCartney, A., Foueillassar, X. & Huber, L. 2003. Field measurements of airborne concentration and deposition rate of maize pollen. *Agricultural and Forest Meteorology*, **119**, 37-51.

Publications - Références (suite)

Jarosz, N., Loubet, B. & Huber, L. 2004. Modelling airborne concentration and deposition rate of maize pollen. *Atmospheric Environment*, **38**, 5555-5566.

Loubet, B. 2000. *Modélisation du dépôt sec d'ammoniac atmosphérique à proximité des sources*. Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse.
(http://tel.ccsd.cnrs.fr/documents/archives0/00/00/32/50/index_fr.html).

Loubet, B., Asman, W.A.H., Theobald, M.R., Hertel, O., Tang, Y.S., Robin, P., Hassouna, M., Dammgén, U., Genermont, S., Cellier, P. & Sutton, M.A. eds. 2009. *Ammonia Deposition Near Hot Spots: Processes, Models and Monitoring Methods*. Springer Netherland.

Loubet, B., Cellier, P., Genermont, S., Laville, P. & Flura, D. 2003. Measurement of short-range dispersion and deposition of ammonia over a maize canopy. *Agricultural and Forest Meteorology*, **114**, 175-196.

Loubet, B., Cellier, P., Milford, C. & Sutton, M.A. 2006. A coupled dispersion and exchange model for short-range dry deposition of atmospheric ammonia. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **132**, 1733-1763.

Marceau, A., Saint-Jean, S., Loubet, B. & Huber, L. 2011. Biophysical characteristics of maize pollen: variability during emission and consequences on dispersal. *Field crops research*, **Accepted**.

Thomson, D.J., 1987. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, **180**: 529-556