OPUR : Observatoire des Polluants Urbains en Île de France
Thème de recherche : Apport de l'atmosphère
Action de recherche : 1.1 – Évaluation des apports atmosphériques par modélisation

MODÉLISATION DES FLUX DE DÉPÔTS ATMOSPHÉRIQUES DE MÉTAUX DANS DES BASSINS VERSANTS EN MILIEUX URBAIN

Thèse de doctorat de Laëtitia Thouron

UNIVERSITÉ PARIS-EST

Thèse présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Paris-Est

Spécialité : Sciences et Techniques de l'Environnement

par

Laëtitia Thouron

Ecole Doctorale : SCIENCES, INGENIERIE ET ENVIRONNEMENT

Modélisation dynamique multi-échelle de la pollution atmosphérique en milieu urbain

Thèse soutenue le 30 mai 2017 devant le jury composé de :

Directeur de thèse :

Christian Seigneur	CEREA, École des Ponts Paris Tech

Rapporteurs :

Marianne Hatzopoulou	Université de Toronto
José Maria Baldasano	Université Polytechnique de Catalogne

Examinateurs :

Isabelle Calmet	École Centrale Nantes
Fabrice Dugay	Airparif, Paris
Catherine Liousse	LA, Toulouse

Invités :

Bertrand Carissimo	CEREA, École des Ponts Paris Tech
Yelva Roustan	CEREA, École des Ponts Paris Tech

ABSTRACT

Urban air pollution has been identified as an important cause of health impacts, including premature deaths. In particular, ambient concentrations of gaseous pollutants such as nitrogen dioxide (NO_2) and particulate matter (PM_{10} and $PM_{2.5}$) are regulated, which means that emission reduction strategies must be put in place to reduce these concentrations in places where the corresponding regulations are not respected. Besides, air pollution can contribute to the contamination of other media, for example through the contribution of atmospheric deposition to runoff contamination.

The multifactorial and multiscale aspects of urban make the pollution sources difficult to identify. Indeed, the urban environment is a heterogeneous space characterized by complex architectural structures (old buildings alongside a more modern building, residential, commercial, industrial zones, roads, etc.), non-uniform atmospheric pollutant emissions and therefore the population exposure to pollution is variable in space and time.

The modeling of urban air pollution aims to understand the origin of pollutants, their spatial extent and their concentration/deposition levels. Some pollutants have long residence times and can stay several weeks in the atmosphere ($PM_{2.5}$) and therefore be transported over long distances, while others are more local (NO_x in the vicinity of traffic). The spatial distribution of a pollutant will therefore depend on several factors, and in particular on the surfaces encountered. Air quality depends strongly on weather, buildings (canyon-street) and emissions.
The aim of this thesis is to address some of these aspects by modeling: (1) urban background pollution with a transport-chemical model (Polyphemus / POLAIR3D), which makes it possible to estimate atmospheric pollutants by type of urban surfaces (roofs, walls and roadways), (2) street-level pollution by explicitly integrating the effects of the building in a three-dimensional way with a multi-scale model of transport chemistry (SinG) and a computational fluid dynamics model (*Code_Saturne*) and (3) a microscale process which is the traffic-related resuspension of the particles present on the road surface with three different formulations (deterministic, semi-empirical and empirical).

The interest of this thesis is to compare and evaluate the operability and performance of several air quality models at different scales (region, neighborhood and street) in order to better understand the characterization of air quality in an urban environment.

RÉSUMÉ

La pollution atmosphérique en milieu urbain a été identifiée comme une cause importante d'impacts sanitaires, y compris de décès prématurés. En particulier, les concentrations ambiantes de polluants gazeux tels que le dioxyde d'azote (NO_2) et de particules (PM_{10} et $PM_{2,5}$) sont réglementées, ce qui implique que des stratégies de réductions d'émissions doivent être mises en place pour diminuer ces concentrations dans les lieux où la réglementation correspondante n'est pas respectée. Par ailleurs, la pollution atmosphérique peut contribuer à la contamination d'autres milieux, par exemple à travers la contribution des dépôts atmosphériques à la contamination des eaux de ruissellement.

Les aspects multifactoriels et multiéchelle de la pollution en ville rendent l'identification des sources difficile. En effet, le milieu urbain est un espace hétérogène caractérisé par des structures architecturales complexes (bâti ancien côtoyant un bâti plus moderne, zones résidentielles, commerciales, industrielles, axes routiers…), des émissions de polluants atmosphériques non uniformes et par conséquent une exposition de la population à la pollution qui est variable dans l'espace et le temps.

La modélisation de la pollution atmosphérique urbaine a pour vocation de comprendre l'origine des polluants, leur étendue spatiale et leur niveau de concentrations/dépôts. Certains polluants ont des temps de résidence long et peuvent séjourner plusieurs semaines dans l'atmosphère ($PM_{2,5}$) et donc être transportés sur de longues distances, d'autres au contraire, sont plus locaux (NO_x en proximité du trafic). La répartition spatiale d'un polluant dépendra alors de plusieurs facteurs et notamment des surfaces rencontrées. La qualité de l'air, elle, dépend fortement des conditions météorologiques, du bâti (rue-canyon) et des émissions.

L'objectif de cette thèse est de traiter certains de ces aspects en modélisant : (1) la pollution urbaine de fond avec un modèle de chimie-transport (Polyphemus/POLAIR3D), qui permet d'estimer les dépôts de polluants atmosphériques par type de surfaces urbaines (toits, murs et chaussées), (2) la pollution à l'échelle de la rue en intégrant explicitement les effets du bâti de manière tridimensionnelle avec d'une part un modèle multiéchelle de chimie-transport (SinG) et d'autre part un modèle de mécanique des fluides (*Code_Saturne*) et (3) un processus de micro-échelle qui est la réémission des particules présentes sur la chaussée par le trafic routier avec trois formulations différentes (déterministe, semi-empirique et empirique).

L'intérêt de cette thèse est de pouvoir comparer et évaluer l'opérabilité et la performance de plusieurs modèles de qualité de l'air à plusieurs échelles (région, quartier et rue) afin de mieux appréhender la caractérisation de la qualité de l'air en milieu urbain.

REMERCIEMENTS

Mes premiers remerciements sont destinés à mes encadrants successifs qui m'ont introduit dans l'univers de la mesure et de la modélisation atmosphérique alors que je venais d'une formation plutôt océanographique environnementale sur la pollution des systèmes aquatiques.

Je pense d'abord à Emilie Perraudin, encadrante d'un stage court sur la mesure des flux de dépôt de HAP sur la zone du bassin d'Arcachon.

Je pense ensuite à Irène Korsakissok, encadrante d'un stage plus long sur les rejets dans l'air après l'accident nucléaire à Fukushima.

Je pense enfin à Christian Seigneur, directeur de cette thèse. Je tiens à souligner particulièrement ses qualités pédagogiques, sa disponibilité et sa sérénité qui m'ont permis d'avancer tranquillement dans le travail bibliographique, de simulation numérique et d'écriture.

Je remercie les membres du jury, pour avoir accepté d'évaluer mes travaux et d'avoir fait le déplacement jusqu'à Paris pour assister à ma soutenance. Je remercie les examinateurs Isabelle Calmet, Fabrice Dugay et Catherine Liousse. Je remercie Marianne Hatzopoulou pour avoir accepté la visio-conférence et d'être rapporteuse de cette thèse. Je remercie expressément José Maria Baldasano pour avoir présidé cette soutenance. Je rermercie Bertrand Carissimo et Yelva Roustan pour avoir co-encadré cette thèse et d'avoir accepté de prendre siège à la soutenance en tant qu'invités. Le manuscript a pu être affiné par la suite grâce aux remarques, questions et discussions abordées lors de la soutenance. Merci d'avoir contribué à faire avancer pertinemment cette recherche et de l'avoir placé dans des dimensions actuelle et opérationnelle.

Mon expérience avec la plate-forme de simulation Polyphemus et WRF aurait été plus farouche sans l'aide de Yelva Roustan, Carole Legorgeu et Younseob Kim et avec *Code_Saturne* sans l'aide de Bertrand Carissimo et Raphaël Bresson. Un grand merci à eux pour les conseils techniques et scientifiques.

Merci également à Sylvain Dores et Youngseob Kim qui ont facilité mon travail sur ordinateur.

Ma thèse a pu être financée grâce au projet TrafiPollu, un projet financé par l'ANR. Je tiens à souligner d'une part l'initiative de ce projet de modélisation intégrée de la pollution issue du trafic urbain (de la simulation du trafic aux contaminations des eaux de ruissellement en passant par les rejets dans l'air). D'autre part, je remercie l'ensemble de ses acteurs pour les échanges scientifiques et conviviaux au cours des réunions et séminaires. Je remercie spécialement Airparif (Frédéric Mahé, Eve Lecoeur et Fabrice Dugay).

Je n'oublierai pas les moments passés avec l'ensemble des membres du CEREA (pauses déjeuners, goûters partagés, sorties, sport) qui ont édulcoré ces années de thèse.

Je pense en particulier à mes comparses du bureau (Anthony Fillion et Jean-Matthieu Haussaire). Nous avons été dans le même bateau tels des compagnons de fortune. Merci pour les discussions piquantes et les cafés récréatifs.

Je dédie cette thèse à mes parents et mes sœurs. A ma mère pour ses cajoleries et son esprit cartésien. A mon père pour ses taquineries et sa culture de l'Histoire. A mes sœurs, mes inspiratrices, mes luths, bouts de femme exaltés. Vous êtes l'énergie qui m'élève et m'entraîne vers la lumière jusque dans les moments certaines fois caverneux.

A mes amis auxquels je suis liée depuis l'enfance. Vous êtes les racines par lesquelles la sève poursuit sa circulation aujourd'hui.

A toute la famille Chadelle, merci pour la main-forte. J'ai reçu chez vous tant de générosité et de savoirs. La philanthropie qui anime chacun de vous est une denrée rare qu'il est impératif de conserver à l'heure qu'il est.

Mention très spéciale à mon chaperon, on s'est suivi sur les sentiers méridionaux. Merci de ta candeur.

TABLE DES MATIÈRES

Chapitre 1. Introduction 8

1.1. Contexte de la thèse 8

1.2. Enjeux de la pollution de l'air par le trafic routier 9

1.2.1. Sanitaires 9

1.2.2. Environnementaux 9

1.3. Pourquoi modéliser ? 10

1.3.1. Comprendre 10

1.3.2. Prédire 12

1.3.3. Décider 12

1.4. La modélisation atmosphérique en milieu urbain 15

1.4.1. Caractéristiques de la pollution urbaine 15

1.4.2. Processus et intéractions physiques 19

1.5. Présentation des chapitres de la thèse 29

1.5.1. Simulations régionales avec le modèle de chimie-transport "POLAIR3D" en intégrant les effets du bâti sur les dépôts atmosphériques 30

1.5.2. Simulations locales à l'échelle de la rue des concentrations en utilisant un modèle de chimie-transport et un modÈle de mÉcanique des fluides traitant explicitement le bÂti 31

1.5.3. Simulations d'un processus de micro-échelle : la remise en suspension 31

Chapitre 2. Simulations régionales avec le modèle de chimie-transport "POLAIR3D" en intégrant les effets du bäti sur les dépôts atmosphériques 33

2.1. Résumé de l'article 33

2.1.1. Introduction 33

2.1.2. Configuration des données d'entrée des modèles numériques 35

2.1.3. Évaluation de la perfomance des modèles numériques 36

2.1.4. Simulation des dépôts atmosphériques moyens agrégés 37

2.1.5. Simulation des dépôts atmosphériques par type de surface urbaine 38

2.1.6. Conclusion 40

2.2. Article 40

2.2.1. Abstract 40

2.2.2. Introduction 41

2.2.3. Description of models and input data 43

Chapitre 3. Simulations à l'échelle de la rue des concentrations en utilisant un modèle de chimie-transport et un modèle de mécanique des fluides traitant explicitement le bâti 68

3.1. Résumé de l'article 68

3.1.1. Introduction 68

3.1.2. Description des simulations numériques 69

3.1.3. Résultats et discussion 72

3.1.4. Conclusion 78

3.2. Article 79
3.2.1. Abstract 79
3.2.2. Introduction 80
3.2.3. Description of numerical simulations 82
3.2.4. Results and discussion 86
3.2.5. Conclusion 104

Chapitre 4. La réémission des particules après le passage des véhicules à l'échelle de la rue 106

4.1. Résumé de l'article 106
4.1.1. Introduction 106
4.1.2. Description des modèles d'émission de remise en suspension des PM 107
4.1.3. Sensibilité de la formulation de NORTRIP aux précipitations 109
4.1.4. Sensibilité des trois formulations aux caractéristiques du trafic 109
4.1.5. Sources de contribution à la resuspension des particules: par type d'abrasion et catégorie de véhicules 110
4.1.6. Comparaison des simulations de concentrations aux mesures de PM_{10} 110
4.1.7. Discussion et conclusion 111

4.2. Article 112
4.2.1. Abstract 112
4.2.2. Introduction 113
4.2.3. Resuspension model descriptions 115
4.2.4. Model applications 119
4.2.5. Discussion 131
4.2.6. Conclusion 132

Chapitre 5. Conclusions et perspectives 134

5.1. Les simulations régionales avec WRF et POLAIR3D 134

5.2. Les simulations à l'échelle de la rue avec SinG et *Code_Saturne* 135

5.3. Les simulations de la réémission des particules 135

5.4. Conclusions et perspectives générales de la thèse 136

Références bibliographiques 138

Annexes 147

CHAPITRE 1. INTRODUCTION

1.1. CONTEXTE DE LA THÈSE

Les zones de forte densité urbaine, c'est-à-dire les zones où la densité de population est importante sur un tissu urbain, représentent des zones de forte pollution. Par exemple, Paris est une métropole au sens où elle concentre une population relativement importante (6 968 051 habitants recensés en 2013) du fait de la centralisation des pôles économique, technologique, culturel et touristique. Elle connaît régulièrement des épisodes de pollution dépassant les limites fixées par l'Union européenne et les valeurs guide de l'Organisation Mondiale pour la Santé (OMS). Pour les $PM_{2,5}$[1], le dépassement de la valeur guide préconisée par l'OMS (10 $\mu g.m^{-3}$) entraîne des conséquences graves dont près de 19 000 décès prématurés chaque année (dans les villes majeures d'Europe, projet Aphekom, 2008-2011). Ces épisodes de pollution sont reliés d'une part aux fortes émissions anthropiques, d'autre part à l'architecture mais également aux conditions météorologiques, particulièrement lors de conditions anticycloniques. Le trafic routier représente une part importante de la pollution de l'air en ville, notamment pour les polluants tels que les dioxydes d'azote (NO_x) et les particules ($PM_{2,5}$ et PM_{10}). Par ailleurs, le projet Aphekom a montré qu'en moyenne, plus de 50／ de la population de 10 villes européennes, dont Paris, résidait à moins de 150 mètres de rues ou de routes empruntées par plus de 10 000 véhicules par jour, et était donc exposée à des niveaux importants de pollution. Habiter à proximité de voies à forte densité de trafic automobile pourrait être notamment responsable d'environ 15 à 30 % des nouveaux cas d'asthme chez l'enfant, et, de proportions similaires ou plus élevées de pathologies chroniques respiratoires et cardiovasculaires fréquentes chez les adultes âgés de 65 ans et plus.

Dans ce contexte, le projet TrafiPollu s'est attaché à modéliser la pollution en ville et à proximité du trafic par le déploiement d'une chaîne complète de modélisation. Le trafic, les émissions, les concentrations dans l'air, dans les eaux de ruissellement et les dépôts au sol et sur les autres surfaces urbaines (murs et toits) ont permis de comprendre le trajet des polluants et la relation trafic-concentrations-dépôts. Les différents niveaux de modélisation ont pu être confrontés à des mesures réalisées sur le site expérimental. Situé en banlieue parisienne, le cas d'étude de ce projet est donc représentatif d'une pollution urbaine. Il recense un trafic de 22 000 véhicules en moyenne journalière avec notamment une influence de l'autoroute (A86) située en proximité.

Cette thèse correspond à un des maillons de la chaîne de modélisation du projet TrafiPollu, elle intervient au niveau du compartiment atmosphérique et s'intéresse à la qualité de l'air en bordure de chaussée (concentrations, dépôts et réémissions).

[1] Les PM pour matières particulaires d'après l'anglais Particulate Matter désignent les particules en suspension dans l'atmosphère. Les $PM_{2,5}$ sont toutes les particules dans l'air dont le diamètre est inférieur 2,5 µm.

1.2. ENJEUX DE LA POLLUTION DE L'AIR PAR LE TRAFIC ROUTIER

1.2.1. SANITAIRES

De nombreuses études épidémiologiques ont été menées depuis les années 1990 qui mettent en évidence la dépendance entre pollution urbaine et impacts sanitaires à court et long terme (ANSES, 2012). Cependant, peu d'études sanitaires ont été réalisées spécifiquement sur les populations exposées au trafic routier alors que 95⁄ de la population vit sous l'influence de la ville (aire urbaine de plus de 2000 habitants) en France en 2010 (source INSEE, recensement de la population, de 2006 à 2010). Parmi ces études expérimentales et épidémiologiques, une relation de possible causalité a été mise en évidence, induisant une mortalité, un développement et une exacerbation de pathologies cardiovasculaires et respiratoires sur des sujets exposés au trafic routier (Samet, 2007 ; Brugge, 2007 ; HEI, 2010 et OMS, 2005b). Cependant, ces preuves « possibles mais non suffisantes » (HEI, 2010) sont à explorer davantage, notamment en collectant plus de données expérimentales sur la toxicologie associée à l'exposition au trafic (au niveau physiologique, cellulaire et moléculaire). Par ailleurs, des études de réduction de la pollution liée au trafic tels que l'allègement de la circulation à Atlanta pendant les jeux Olympiques de 1996 (Friedman, 2001), la construction de tunnels en Norvège (Bartonova, 1999), le changement de carburant à Hong-Kong (Hedley, 20002) ont révélés être bénéfiques puisque certains symptômes ont été réduits, notamment l'asthme chez l'enfant (OMS, 2005b).

1.2.2. ENVIRONNEMENTAUX

Outre les effets sur la santé, la pollution urbaine induit des dégradations environnementales importantes. Bolund et Hunhammar (1999) ont inventoriés les différents écosystèmes présents en milieu urbain : les arbres d'alignement dans les rues, les pelouses et parcs, les forêts urbaines, les terrains cultivés, les marais, les lacs et les fleuves. Le transfert des polluants dans ces écosystèmes se fait soit directement par dépôts sec et humide, soit indirectement par ruissellement et infiltration des eaux de pluie. La détérioration du bâti est un autre aspect de dégradation liée à la pollution urbaine mais affectant plutôt la conservation dans le temps du patrimoine historique. Parmi les effets sur les écosystèmes urbains, on retrouve notamment la mise à nu des sols (Bernhardt-Römermann et al., 2006) et des changements de végétation aux abords des autoroutes avec notamment un développement propice aux espèces rudérales nitrophytes (« mauvaises herbes » consommatrices d'azote) au détriment d'espèces conifères (Maltby et al., 1995). Cette disparition de la haute végétation est par ailleurs préjudiciable en termes de qualité de l'air puisqu'elle constitue une surface préférentielle de dépôt des polluants et peut donc participer à faire réduire les niveaux de pollution dans la couche atmosphérique plus basse. On peut également citer la contamination des terres cultivées par les polluants métalliques transportés depuis les sources d'émission du trafic, particulièrement pour les espèces feuillues (Säumel et al., 2012), mais aussi la contamination des écosystèmes aquatiques. Par exemple, plusieurs réponses génotoxiques au sein des bivalves ont été associées à la pollution au benzo[a]pyrène et aux métaux (principalement concernant le cuivre) par Gomez-Mendikute et al. (2002) aux abords côtiers de grandes villes. D'autres études ont montré le

lien direct entre concentrations en HAP (Hydrocarbure Aromatique Polycyclique) dans les sols, leur dépôt sous forme solide sur la route ainsi que leur transfert dans les eaux de ruissellement. Liu et al. (2016) ont notamment mis en évidence un fort risque écologique, basé sur le facteur de réponse toxique, concernant la réutilisation des eaux pluviales provenant des zones commerciales urbaines. Le bâti, particulièrement les monuments historiques, font l'objet d'étude de conservation alors que les concentrations en CO_2 (émis en majorité par les voitures diesel) croissantes favorisent la dissolution du calcaire et donc l'érosion pariétale.

1.3. POURQUOI MODÉLISER ?

1.3.1. COMPRENDRE

Les épisodes de pollution printaniers à Paris durant lesquels les dépassements en particules sont élevés (par exemple, les dépassements du seuil d'alerte de 80 $\mu g.m^{-3}$ durant 4 jours entre le 7 et 18 mars 2014) amènent à réfléchir sur les raisons de ce fort niveau de pollution et sur la stratégie de réduction mise en place par les pouvoirs publics. Alors que les décisions de la préfecture de Paris (arrêté inter-préfectoral du 7 juillet 2014) ont visé à réduire le trafic par la circulation alternée dans Paris et dans 22 communes de la petite couronne (restriction de circulation des véhicules dont le numéro d'ordre dans la série de la plaque d'immatriculation se termine par un chiffre pair ou impair sous la forme d'une alternance d'un jour à l'autre) et à promouvoir la gratuité des transports, les niveaux de concentrations ont baissé en mars 2014 en moyenne de 6⁄ pour les particules (PM_{10}) et de 10⁄ pour les oxydes d'azote, notamment en proximité des axes routiers (étude *a posteriori* menée par Airparif, Fritz et al., 2015). La circulation alternée (mise en place le 14 et le 15 mars 2014) a entrainé une réduction moyenne du trafic de 18⁄ à Paris et de 13⁄ en petite couronne. Cependant, l'on peut s'interroger sur l'efficacité de cette décision et sur la compréhension de ces épisodes de pollution qui sont concomitants à une situation météorologique bien particulière (anticyclonique) et à des émissions de particules ne provenant pas uniquement du trafic local.

Une autre étude Airparif menée sur un site trafic parisien (boulevard périphérique de la Porte d'Auteuil) en 2011 révèle que 40% des niveaux de $PM_{2,5}$ mesurés en moyenne annuelle proviennent de l'import (Tonnelier et al., 2015), c'est-à-dire de particules produites hors de l'agglomération parisienne. Sachant que malgré les mesures de réduction du trafic les seuils d'alerte n'ont pas baissé suffisamment, il y a donc là une nécessité de comprendre d'où vient cette forte contribution autrement que du trafic local, de savoir si cette contribution annuelle n'est pas plus élevée sur une période printanière en faisant le lien avec les activités agricoles. L'ammoniac, émis par les épandages d'engrais azoté et dont la durée de vie dans l'atmosphère est plutôt longue (environ une semaine) réagit avec les oxydes d'azote majoritairement émis par le trafic automobile pour former le nitrate d'ammonium sous forme de particules.

Pour comprendre ces situations critiques, les stations de mesure vont fournir une tendance très générale sur l'aire de représentativité des stations, mais elles ne restituent pas toujours une résolution appropriée pour décrire un processus atmosphérique local ou au contraire de plus grande échelle. Par exemple, les stations de mesure de la qualité de l'air en Île-de-France (de l'agence de qualité de l'air Airparif) sont placées en des zones stratégiques (ultra-urbaine

dans Paris, semi-urbaine en banlieue et rurale) et permettent d'observer la qualité de l'air en un point fixe mais avec un espacement non uniforme (Figure 1.1). Leur installation n'est pas particulièrement conçue pour décrire simultanément, de manière continue et tridimensionnelle la pollution atmosphérique sur un domaine. Toutefois, Airparif utilise des modèles de ré-analyses combinés à des mesures afin de produire des cartes de prévision (Pradelle et al., 2011).

Dans ce contexte, les modèles déterministes basés sur la description mathématique et numérique des phénomènes peuvent servir pour suivre ou reconstruire un évènement météorologique ou atmosphérique afin de diagnostiquer l'origine des polluants et des précurseurs, la dimension spatio-temporelle de la pollution. Par ailleurs, en raison des hypothèses de départ, le modèle n'a pas toujours de solution analytique propre et donne une solution numérique approximative. Le caractère aléatoire des processus environnementaux conduit à une irréductible et inhérente incertitude (Oreskes et al., 1994).

En outre, les données d'entrée peuvent aussi porter des incertitudes de mesure. C'est pourquoi un modèle parfait n'existe pas, des indicateurs statistiques permettent alors d'accéder à une évaluation de la performance qui permet de juger si les résultats sont satisfaisants pour l'utilisation des modèles. Deux références (Chang et Hanna, 2004 ; Yu et al. 2006) définissant un ensemble de métriques statistiques sont classiquement utilisées pour l'évaluation des modèles de qualité de l'air.



Figure 1.1 - Répartition spatiale des stations Airparif mesurant le NO_2 (source : Airparif, https://www.airparif.asso.fr/stations/index).

1.3.2. PRÉDIRE

Certains modèles de prédiction sont basés sur des observations tels que les modèles dits « statistiques » ou tels que les modèles pratiquant le deep learning (littéralement « apprentissage profond »), comme le fait par exemple la plate-forme de visualisation en ligne Airvisual (https://airvisual.com) qui permet de visualiser la qualité de l'air en temps réel mais aussi de connaître la prévision (maximum 3 jours) partout dans le monde. Pour ce faire, le site s'appuie sur des modèles météorologiques connus (Numerical Weather Prediction, et notamment le Global Forecast System) et sur des algorithmes d'apprentissage de type deep learning afin d'établir des corrélations entre niveaux de pollution et conditions météorologiques à partir de données historiques observées (de qualité de l'air et météorologiques). Ces modèles dépendent des observations et nécessitent un gros volume de données observées pour pouvoir apprendre tout autant que prédire correctement et avec robustesse. Or, comme nous l'avons mentionné plus haut (section 1.3.1), les observations ne sont pas toujours disponibles pour des résolutions spécifiques (l'implantation des stations de mesure ne donne pas toujours des informations en tout point de l'espace), parfois elles ne sont pas non plus rendues publiques.

L'intérêt des modèles numériques déterministes est que les processus physico-chimiques sont traités explicitement par le jeu d'équations et ne dépendent que des données d'entrée à l'instant initial, évoluant par la suite indépendamment avec leurs propres schémas numériques.

Dans la section 1.4.2.e, les modèles courants de qualité de l'air en mode opérationnel et/ou de recherche sont détaillés. Ces modèles constituent des outils de prévision dont la performance est traditionnellement évaluée par comparaison à des observations via des analyses statistiques (en général au travers des deux références mentionnées en section 1.3.1). Ces modèles peuvent être utilisés en mode prévision, c'est-à-dire pour modéliser un évènement de pollution sans perturbation supplémentaire, ou alors en mode études d'impact (pour tester l'effet d'un paramètre d'entrée) ou encore en mode études de prospection (pour tester différentes stratégies de réduction des émissions par exemple). La variabilité de la météorologie étant attribuée à la prévision, tandis que les modifications des émissions ou d'autres paramètres maîtrisés sont relatives à la prospection et à l'impact.

1.3.3. DÉCIDER

D'un point de vue général, les simulations numériques constituent de vrais outils d'aide à la décision pour les raisons citées plus hauts (section 1.3.1), c'est-à-dire en termes de compréhension des phénomènes et de leur anticipation (grâce à l'utilisation des modèles). Néanmoins, l'opérabilité des modèles numériques est un vrai challenge scientifique car un consensus doit être trouvé entre perfectibilité des modèles, temps de calculs et temps impartis pour décider. En effet, « décider » c'est aussi se placer sous plusieurs contraintes, dont notamment les délais de simulation, la puissance de calcul mise à disposition, la complexité de prise en main. Par exemple, des organismes tels que l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire sont dotés de modèles de crise qui permettent de calculer les rejets radioactifs dans l'air, la direction des panaches et leur dose, en des délais opérationnels tout en conservant une résolution spatio-temporelle satisfaisante. Ces modèles

constituent de précieux outils diagnostiques afin d'assurer une expertise technique de la situation lors d'un accident nucléaire et de conseiller rapidement les pouvoirs publics pour la protection des populations.

Ce rôle de décision émerge du fait des problèmes de santé publique générés par la pollution de l'air, des procédures d'information et d'alerte instituées par les réseaux de surveillance à partir de la LAURE (Loi sur l'air et l'utilisation rationnelle de l'énergie du 30 décembre 1996) sont devenues obligatoires. Ces réseaux constituent des données immédiates d'information, et ne permettent pas d'anticiper la pollution de demain, ou de faire des études d'impact en modifiant les paramètres sensibles. Les simulations en mode opérationnel ou diagnostique permettent d'avoir le recul et de comprendre plus en détail les niveaux de pollution afin de dégager des axes d'action pour les pouvoirs publics (sur des questions de danger nucléaire et de dépassement de seuil par exemple).

La décision vient en dernière instance, après avoir identifié et compris les phénomènes atmosphériques nuisibles. Les conséquences des études post-opératoires de prévisions et d'impact sont la mise en place d'action appropriées. Nous détaillons ci-dessous quelques illustrations d'actions envisagées et nous discutons leur pertinence et leur complexité. Dans le cadre du projet TrafiPollu, différents scénarios sur les émissions sont testés afin d'évaluer leur impact sur les concentrations. Par exemple, les émissions correspondant à une évolution naturelle du parc à l'horizon 2025 avec plus de 90% des véhicules particuliers "récents" et 90 ⁄ des véhicules diesel équipés de filtres à particules ou encore une inversion du ratio diesel/essence au sein des véhicules particuliers (avec ~70⁄ de véhicules essence et ~30⁄ de véhicules diesel) sont simulées. Ces deux scénarios, ayant *a priori* pour but de montrer une diminution de la pollution atmosphérique, se traduisent en effet par une diminution des concentrations en $PM_{2,5}$ d'environ 50% par rapport à un scénario de référence. Les véhicules diesel étant les principaux émetteurs en $PM_{2,5}$ liés au trafic. En revanche, une augmentation de la pollution en monoxyde de carbone de plus de 150⁄ est constatée. Ce scénario de référence correspond à un parc trafic actuel, donc majoritairement constitué par des véhicules particuliers roulant au diesel sans équipement de filtre à particules, observé sur le domaine de TrafiPollu en banlieue parisienne. Or, les effets sur l'atmosphère et sur la santé du monoxyde de carbone sont avérés. Sur la santé, le monoxyde de carbone se fixe à la place de l'oxygène dans le sang, conduisant à un manque d'oxygénation de l'organisme, notamment des organes tels que le cœur et le cerveau, et au décès lors d'une exposition aigüe. Ainsi, à travers cet exemple, on comprend qu'agir sur les émissions afin de réduire la pollution atmosphérique est une décision délicate puisque la diminution d'émission d'un polluant réglementé peut à l'inverse entraîner une augmentation d'un autre polluant réglementé.

Un deuxième exemple est situé à Toulouse, dans le quartier de Bordelongue, pour lequel un projet EUREQUA (Haoues-Jouve et al., 2015) a été développé afin d'estimer l'impact du bâti sur les concentrations dans l'air. Deux scénarios ont été testés, l'un visait à doubler de hauteur la barrière anti-bruit protégeant le quartier résidentiel du périphérique extérieur et l'autre correspondait à la démolition de deux bâtiments afin d'ouvrir la zone d'un point de vue architectural. En élevant la barrière anti-bruit, il était attendu que les concentrations provenant du périphérique soient bloquées et ne puissent se disperser au-delà (c'est-à-dire dans la zone résidentielle). La comparaison des résultats avec une simulation de référence (sans élévation du mur) montra seulement un effet très faible sur les concentrations. Par ailleurs, le deuxième scénario de démolition de bâtiments généra des réponses hétérogènes

dans l'espace. Les concentrations sont apparues d'une part plus diffuses (due à la ventilation) mais ayant une empreinte spatiale beaucoup plus large et d'autre part ont concouru à l'élévation des niveaux de concentrations dans certaines zones. Nous signalons à travers cet exemple, que des actions intuitives (élévation d'un mur anti-bruit pour parer la pollution de l'air) ou contre intuitives (ouverture de l'espace sur des grands axes routiers) peuvent mener à des réponses antagonistes. La nécessité de modélisation est donc essentielle pour pouvoir prendre les meilleures décisions.

1.4. LA MODÉLISATION ATMOSPHÉRIQUE EN MILIEU URBAIN

1.4.1. CARACTÉRISTIQUES DE LA POLLUTION URBAINE

a. Émissions : sources, polluants, granulométrie, réglementations

La contribution d'une source d'émission donnée aux émissions totales dépend des polluants considérés. Par ailleurs, les émissions sont géographiquement variables et restent liées à de nombreux critères spécifiques au territoire (degré d'urbanisation, densité des infrastructures routières, etc.).

Dans cette thèse nous nous intéressons principalement au trafic routier. Nous nous focalisons dans ce paragraphe sur cette source d'émission qui représente une part importante des polluants émis en ville dans l'atmosphère (Figure 1.2). Par exemple, à Paris, les oxydes d'azote (NO_x) sont principalement issus du trafic routier, tout comme les PM (PM_{10}[2] et $PM_{2,5}$) en période non hivernale. Les PM sont autant émis par le chauffage résidentiel l'hiver. Le trafic routier est aujourd'hui responsable d'au moins 50% des émissions totales de NO_x et de PM_{10}, dont plus de 90⁄ proviennent des véhicules diesel. Il contribue également à au moins 10% des émissions d'hydrocarbures, dont 95% proviennent des véhicules diesel. Ces émissions doivent cependant être considérées dans un contexte plus large qui doit prendre en compte la contribution des transformations physico-chimiques dans l'atmosphère (polluants secondaires) et celles du transport à longue distance (pollution de fond).

La relation entre la pollution issue du trafic routier et les émissions de ce trafic n'est pas strictement linéaire puisqu'elle résulte d'émissions directes (polluants primaires) dues aux émanations à l'échappement et aux abrasions du matériel automobile et routier mais également d'émissions indirectes (polluants secondaires) formant de nouveaux polluants après réactions chimiques dans l'atmosphère avec d'autres espèces déjà présentes (précurseurs). L'ozone et la fraction secondaire des particules sont des polluants secondaires. Il est important de noter que ces réactions existent et ne sont pas de la moindre importance surtout considérant que certaines espèces ont un temps de séjour suffisant dans l'atmosphère. Pour autant, nous détaillons dans cette partie uniquement les polluants primaires correspondant, pour certains, aux polluants considérés dans les simulations présentées dans les Chapitres 2, 3 et 4.

Les polluants du trafic routier sont émis principalement sous deux formes, particulaire et gazeuse, qui résultent du type de source et des processus de formation. Néanmoins, une forme semi-volatile (phases gazeuse et particulaire) peut être émise à l'échappement. Les particules proviennent essentiellement de l'échappement et de l'usure des freins, des pneus, de la chaussée ou de la remise en suspension par le passage des véhicules. En revanche, les polluants gazeux proviennent en majorité des émanations de l'échappement et de l'évaporation des carburants. La Figure 1.3 représente les différents polluants émis par le trafic routier en fonction de leurs origines d'émission.

[2] Les PM_{10} sont toutes les particules en suspension dans l'atmosphère de diamètre inférieur ou égal à 10 µm.

Les polluants réglementés dans l'air ambiant par les normes françaises liés aux émissions par le trafic routier sont les NO_x, le dioxyde d'azote (NO_2), le dioxyde de soufre (SO_2), le plomb (Pb), le monoxyde de carbone (CO), l'ozone (O_3), les $PM_{2,5}$, les PM_{10} et le benzène (C_6H_6).

Les polluants et les gaz à effet de serre (GES) non réglementés par les normes françaises mais émis par le trafic routier incluent le dioxyde de carbone (CO_2), l'ammoniac (NH3), le protoxyde d'azote (N_2O), les composés organiques volatils (COV), le cadmium (Cd), le zinc (Zn), le fer (Fe), le cuivre (Cu), l'antimoine (Sb), le chrome (Cr), le nickel (Ni), le sélénium (Se), le baryum (Ba), l'arsenic (As), le mercure (Hg).

Les critères nationaux de qualité de l'air sont définis dans le Code de l'environnement (articles R221-1 à R221-3) et prévoient plusieurs seuils (valeur limite, seuil d'information et de recommandation et seuil d'alerte, valeur cible et valeur guide) pour les polluants réglementés en France (détails et valeurs pour chaque polluant en Annexe A.).

- → D'après le décret n°2008-1152 du 7 novembre 2008, la **valeur limite** correspond au « *niveau de concentration de substances polluantes dans l'atmosphère fixé sur la base des connaissances scientifiques à ne pas dépasser dans le but d'éviter, de prévenir ou de réduire les effets nocifs de ces substances sur la santé humaine ou sur l'environnement dans son ensemble* ».
- → Le **seuil d'information et de recommandation** correspond au « *niveau de concentration de substances polluantes dans l'atmosphère au-delà duquel une exposition de courte durée présente un risque pour la santé humaine des groupes particulièrement sensibles de la population rendant nécessaires des informations immédiates et adéquates*».
- → Le **seuil d'alerte** correspond au « *niveau de concentration de substances polluantes dans l'atmosphère au-delà duquel une exposition de courte durée présente un risque pour la santé de l'ensemble de la population ou de dégradation de l'environnement justifiant l'intervention de mesures d'urgence* ».
- → La **valeur cible** correspond au « *niveau de concentration fixé, dans le but d'éviter, de prévenir ou de réduire les effets nocifs sur la santé humaine et l'environnement dans son ensemble, à atteindre dans la mesure du possible sur une période donnée* ».
- → L'**objectif de qualité (valeur guide)** correspond au « *niveau de concentration de substances polluantes dans l'atmosphère, fixé sur la base de connaissances scientifiques, dans le but d'éviter, de prévenir ou de réduire les effets nocifs de ces substances pour la santé humaine ou pour l'environnement, à atteindre dans une période donnée* ».

La dangerosité mais également les temps de séjour dans l'atmosphère de ces polluants sous forme particulaire dépendent fortement de leur granulométrie. Plusieurs études ont permis d'attribuer une distribution granulométrique en fonction des polluants. Allen et al. (2001), Zielinska et al. (2004), Samara et al. (2005) et Percot et al. (2013) ont mesuré les classes de tailles de plusieurs polluants émis par le trafic routier sur plusieurs études de cas situées respectivement en Angleterre centrale et Ecosse du sud, à Thessalonique (Grèce), dans l'Utah (ouest des États-Unis) et à Nantes en France. Le classement en taille est présenté pour certains polluants (Zn, Cu et les hydrocarbures aromatiques polycycliques « HAP ») dans le Chapitre 2, en section 2.2.3.2.b. Les particules fines ($PM_{2,5}$) sont dangereuses pour la santé puisqu'elles peuvent pénétrer plus profondément dans l'appareil respiratoire et traverser la membrane pulmonaire pour gagner la circulation systémique. De surcroît, les temps de

séjour dans l'air ambiant de ces particules fines sont longs (environ une semaine) puisque les processus de dépôt par interception, inertie et mouvement brownien sont les moins efficaces pour cette classe de taille et que les vitesses de sédimentation sont trop faibles.

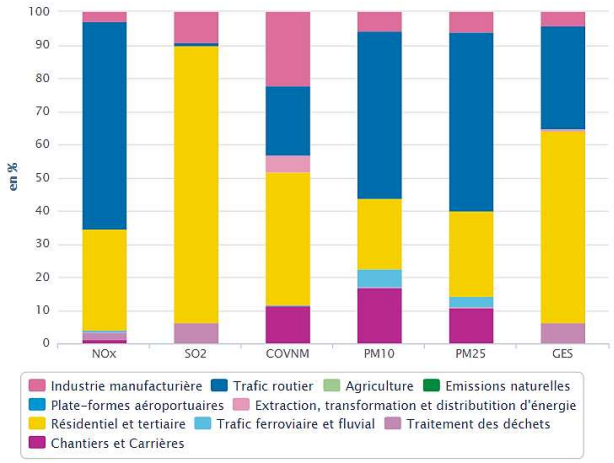


Figure 1.2 - Contribution en % des différents secteurs d'activité aux émissions de polluants pour Paris (estimations faites en 2014 pour l'année 2012, Airparif : https://www.airparif.asso.fr/etat-air/air-et-climat-quelques-chiffres).

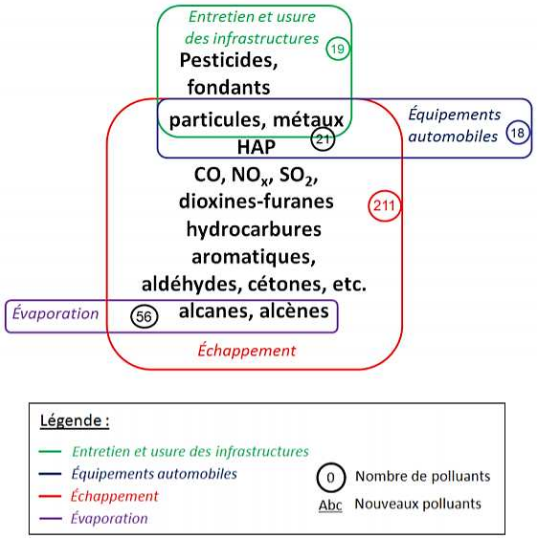


Figure 1.3 - Représentation de la répartition des 325 polluants en lien avec les infrastructures routières en fonction de leurs origines (travaux réalisés en 2004 et présentés dans la saisine ANSES 2010-SA-0283 : https://www.anses.fr/fr/system/files/AIR2010sa0283Ra.pdf).

b. Morphologie de la ville

Un des paramètres importants favorisant la pollution urbaine est certainement la morphologie de la ville. Les centres urbains sont généralement un mélange de bâti ancien et moderne dont les consignes de construction ont évolué. En Île-de-France, le tissu urbain est très hétérogène et s'illustre par une ville extrêmement polymorphe en gamme de dimensions (tours isolées, ilots de tours, habitats collectifs denses, rues-canyons, boulevards haussmanniens, zones commerciales, parcelles non bâties, espaces semi-ouverts, espaces interstitiels variables, etc.).

Pigeon et al. (2014) décrivent l'espace urbain parisien par cinq structures bâties caractéristiques de taille variable: les bâtiments historiques collectifs, les bâtiments collectifs construits à l'après-guerre, les tours hautes, les maisons isolées anciennes et récentes.

Depuis la loi SRU (Solidarité et Renouvellement Urbain) du 13 décembre 2000 et la loi Grenelle II du 12 juillet 2010, la densification urbaine est à nouveau privilégiée afin de réduire les dépenses énergétiques. Cette densification se traduit par la reconstruction sur de l'existant et parfois en favorisant la verticalité (les parcelles libres étant rares) pour les bâtiments n'appartenant pas au patrimoine historique de la ville.

De surcroît, la pression foncière et la recherche de plus-value chez les promoteurs, les appartements situés au dernier étage bénéficiant d'une plus jolie vue et d'un éloignement aux nuisances (sonores, olfactives et atmosphériques), privilégie l'augmentation du nombre d'étages (Maignant 2006). Cependant, si le gain d'étage est avantageux en termes de réduction de l'exposition au niveau de pollution, Airparif montre une baisse de 30% en NO_x entre le rez-de-chaussée et le deuxième étage en bordure d'avenue au niveau de la porte de Gentilly à Paris, il l'est beaucoup moins pour les piétons et les personnes habitant aux étages inférieurs.

Le rapport hauteur du bâti sur largeur de la rue défini l'effet rue-canyon. D'un point de vue géométrique, une rue-canyon désigne une rue étroite par rapport à la hauteur des bâtiments des deux côtés de la rue et sur plus de 100 mètres. Pour former un « canyon », le rapport moyen entre la hauteur du bâti et la largeur de ce type de rue doit être supérieur à 0,5. En fonction de l'angle du vent, une zone de recirculation des polluants plus ou moins étendue peut se former si celui-ci est diagonal ou perpendiculaire à l'axe de la rue. Cette zone de recirculation est liée aux tourbillons (turbulence) qui se créent lorsque le vent est mécaniquement renvoyé de l'autre côté de la rue car contrecarré par le bâti face à lui. Le confinement des polluants dans la rue dépend donc fortement du bâti, ceux-là s'accumulent préférentiellement du côté de la rue sous le vent comme l'illustre la Figure 1.4. Toutefois, une zone de ventilation, c'est-à-dire d'échange avec l'extérieur peut être aussi développée conjointement à la zone de recirculation, surtout si la rue n'est pas complètement canyon (ce qui est souvent le cas en zone résidentielle en banlieue parisienne ou dans les zones commerciales/industrielles).

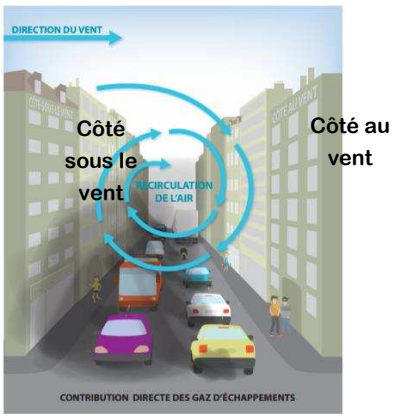


Figure 1.4 - Recirculation de l'air dans une rue-canyon (ATMO Franche-Comté: http://www.atmo-franche-comte.org/sites/atmo-franche-comte.org/files/ATMOFC/3-outils_de_surveillance/1-air_exterieur/3-modelisation/ae_fiche_technique_rues-canyons_2015_atmofc_i.pdf, modifiée).

1.4.2. PROCESSUS ET INTÉRACTIONS PHYSIQUES

a. Météorologie

— Caractéristiques thermiques

La météorologie en ville est spécifique, l'atmosphère y est par ailleurs complexe et hétérogène. L'îlot de chaleur urbain (ICU) est, entre autres, une des particularités de la ville qui correspond à la différence de température entre la zone urbaine et les zones rurales voisines. Cette anomalie thermique se manifeste par une hausse des températures à mesure que l'on se rapproche du centre de la ville et, inversement, par une baisse des températures quand on s'en éloigne. La forme en cloche du profil des températures en fonction du positionnement des aires rurales et urbaine est alors qualifiée d'îlot (Figure 1.5). Les différences entre centre urbain et zones rurales s'échelonnent entre 2 et 12°C d'après un grand nombre d'études d'intensité du maximum de l'ICU (Oke, 1973), respectivement pour des villes de 1000 à plusieurs millions d'habitants.

Plusieurs facteurs favorisent l'intensification de l'ICU, notamment la chaleur additionnelle liée aux activités anthropiques, la faible présence d'eau le mode d'occupation des sols (la répartition des surfaces végétalisées et des surfaces minéralisées), les propriétés radiatives et thermiques des matériaux, la morphologie de la ville, les conditions météorologiques, etc. Les surfaces végétalisées et les sols ont un impact sur le refroidissement en ville par l'effet de l'évapotranspiration, définie comme la quantité d'eau transférée vers l'atmosphère par l'évaporation au niveau du sol perméable et par la transpiration des plantes. L'énergie solaire est donc absorbée d'une part par la photosynthèse des végétaux, d'autre part par les échanges avec le sol et l'atmosphère. En revanche, en ville, l'effet canyon formé par les cavités entre les bâtiments et les matériaux absorbants se traduit par un stockage d'énergie solaire qui n'est pas dissipée rapidement et est réémis plus lentement par rayonnement infra-rouge. De plus, les surfaces urbaines ont un faible albédo, elles réfléchissent moins le rayonnement solaire. Les différences de température de surface sont particulièrement importantes entre la pelouse et le trottoir bitumé, des prises de vue thermiques réalisées par Météo-France mettent en évidence des écarts de 12°C (Figure 1.6).

Généralement l'ICU se caractérise à l'échelle de la ville, mais à l'intérieur de celle-ci peuvent coexister des hétérogénéités avec des quartiers plus chauds et d'autres plus tempérés correspondant à des îlots de fraicheur. Ces comportements climatiques différents sont induits par la variabilité des formes urbaines. Par exemple, l'espace urbain parisien est caractérisé par des zones de micro ICU qui sont plus ou moins développées en fonction des types de quartier (historique ou moderne) comme l'illustre la Figure 1.6. Par ailleurs, ces différences de température provoquent également des effets de brise urbaine qui se définissent par la production d'un vent dans les zones normalement à l'abri. L'étude CAPITOUL (Canopy and Aerosol Particle Interactions in the Toulouse Urban Layer) menée par Météo-France entre 2004 et 2005 révèle que la contiguïté de zones de réchauffement et de refroidissement génère une brise urbaine qui peut atteindre entre 1 et 2 $m.s^{-1}$ dans Toulouse.

L'ICU est aussi influencé par les conditions météorologiques, il est notamment favorisé en situations anticycloniques concordantes avec des épisodes de vent faible (< 3 $m.s^{-1}$) et de ciel dégagé.

De surcroît, les activités anthropiques (chauffage en hiver et climatisation en été) concourent à une intensification de l'ICU. De Munck et al. (2013) ont montré que l'utilisation des climatisations à Paris génère un réchauffement d'environ 0.5°C pour l'année 2003.

— Caractéristiques mécaniques

Au-delà de l'aspect thermique de la ville, les formes urbaines à proprement parlé sont des obstacles à l'écoulement et conditionnent la vitesse et l'orientation du flux d'air météorologique. La spirale d'Ekman est définie comme la modification de la direction du vent dans la couche limite atmosphérique (partie de la troposphère influencée par la surface) du fait des forces de frottement induites par la rugosité liée au bâti ou de la végétation au sol. En ce qui concerne l'intensification du vent, des couloirs d'accélération sont typiques lorsque la direction de celui-ci est favorable à son engouffrement dans la rue. Cet effet d'entonnoir est particulièrement le cas pour des bâtiments de hauteur supérieure à 15 m. Pour des bâtiments plus bas, le vent passe au-dessus de l'obstacle mais des tourbillons peuvent alors se former par effet de sillage en aval du bâtiment. Par ailleurs, comme nous l'avons évoqué en section 1.4.1.b., le sens de l'écoulement est également modifié à l'intérieur d'une rue-canyon (création d'une zone de recirculation) en fonction de l'angle du vent et de l'orientation du bâti par rapport à celui-ci.

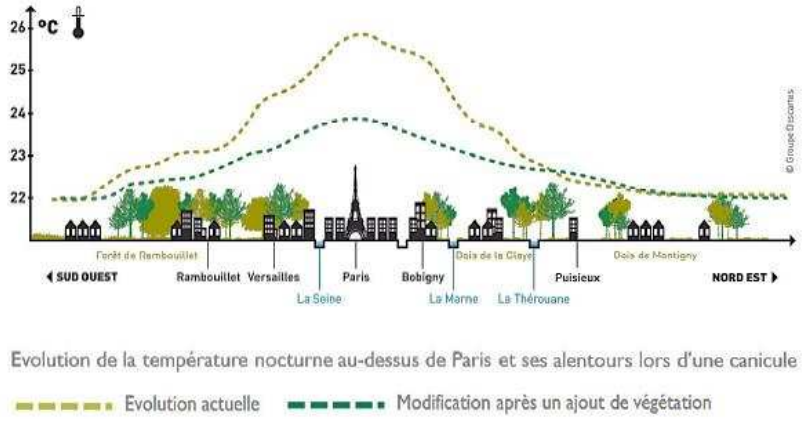


Figure 1.5 - L'îlot de chaleur urbain au-dessus de Paris et de ses alentours lors d'un épisode caniculaire (Météo-France, brochure de 2014 : http://www.meteofrance.fr/documents/10192/22603710/brochure_MF_APC_L_/ C3/ AElot_de_chaleur_urbain_ / C3/ A0_Paris_2013.pdf).

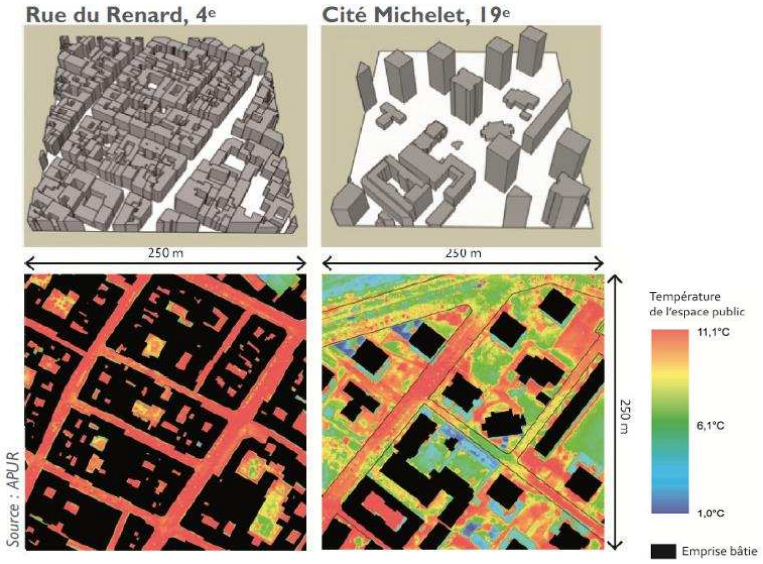


Figure 1.6 - Modélisation numérique 3D du bâti (en haut) et les températures au sol (en bas) pour un tissu historique ancien (à gauche) et un tissu plus moderne (à droite) dans Paris (Météo-France, brochure de 2014 : http://www.meteofrance.fr/documents/10192/22603710/brochure_MF_APC_L_/ C3/ AElot_de_chaleur_urbain_ / C3/ A0_Paris_2013.pdf).

b. Transport atmosphérique: advection et diffusion turbulente

La Couche Limite Atmosphérique (CLA) est définie comme la partie de la troposphère directement soumise à l'influence de la surface terrestre (dynamiquement et thermiquement). D'un point de vue dynamique, plusieurs facteurs de surface (rugosité, orographie, évapotranspiration, etc.) perturbent l'écoulement du fluide, l'échelle de réponse est courte (environ une heure). Par ailleurs, d'un point de vue thermique, les variations diurnes du rayonnement solaire entraînent des modifications thermiques à la surface terrestre, le forçage sur l'écoulement est donc plus long (de l'ordre de la journée). Du fait de cette convection thermique variable, l'épaisseur de la CLA depuis la surface terrestre varie fortement et peut atteindre quelques kilomètres. Dans la CLA, plusieurs couches se développent dans un cycle diurne (Figure 1.7) : la couche de mélange (durant le jour), la couche d'entrainement (couche qui entraîne les masses d'air de l'atmosphère libre, qui est située au-dessus de la CLA, vers l'intérieur de la CLA) et la couche résiduelle (résidu de la couche de mélange des jours précédents).

En météorologie, plusieurs échelles décrivent les phénomènes spatio-temporels atmosphériques. La turbulence, la convection, la diffusion de polluants d'une source localisée sont par exemples représentés à une échelle inférieure à 1 km et dans des temps de réponse de l'ordre de la dizaine de minutes (micro-échelle ou échelle turbulente). La pollution de fond provenant de sites urbains industriels s'étendent plutôt sur l'échelle régionale (méso-échelle, entre 1 et 1000 km, de quelques minutes à quelques jours). A l'échelle synoptique (10^4 km), on retrouve les mouvements situés au-delà de la CLA, par exemple la pollution globale, la circulation des anticyclones, les interactions avec la stratosphère. A l'inverse de la micro- et méso- échelles, l'échelle synoptique n'est pas sous l'influence de la surface terrestre et dépend de la force de Coriolis et du gradient de pression (approximation géostrophique au-dessus de la CLA). Cependant, la force de Coriolis s'exerce aussi en haut de la CLA et tend à s'annuler quand la vitesse du vent devient négligeable près du sol.

Au sein de la CLA, l'advection est définie comme le transport dans la direction horizontale par le vent. Dans la direction verticale, le vent est négligeable, et c'est alors la turbulence qui assure le mélange. On peut visualiser la turbulence par des cascades de tourbillons ayant pour rôle de dissiper l'énergie cinétique de l'écoulement des grandes échelles vers les petites échelles lorsque les grands tourbillons se divisent en tourbillons plus petits. L'origine de la turbulence peut être de deux sortes : dynamique (rencontre d'obstacles) et/ou thermique (convection des masses d'air) sous l'effet des facteurs cités dans le premier paragraphe de cette section. Elle est souvent formulée dans les modèles météorologiques de chimie-transport avec une paramétrisation obtenue par analogie à la diffusion moléculaire. Cependant, la diffusion moléculaire est trop lente (environ 10^5 $m^2.s^{-1}$) pour contribuer significativement à la dispersion, alors que la turbulence est beaucoup plus rapide (de l'ordre de 1 $m^2.s^{-1}$ en condition stable de l'atmosphère et de l'ordre de 100 $m^2.s^{-1}$ en condition instable). Le processus de diffusion turbulente est fondamentalement différent de celui de la diffusion moléculaire et l'analogie avec la diffusion moléculaire qui est généralement utilisée pour des raisons de simplicité peut être remplacée par des paramétrisations plus élaborées dans les modèles de CFD (k-ε, k-w, RANS, LES, etc.). Quelques-unes de ces paramétrisations sont développées en section 1.4.2.d.

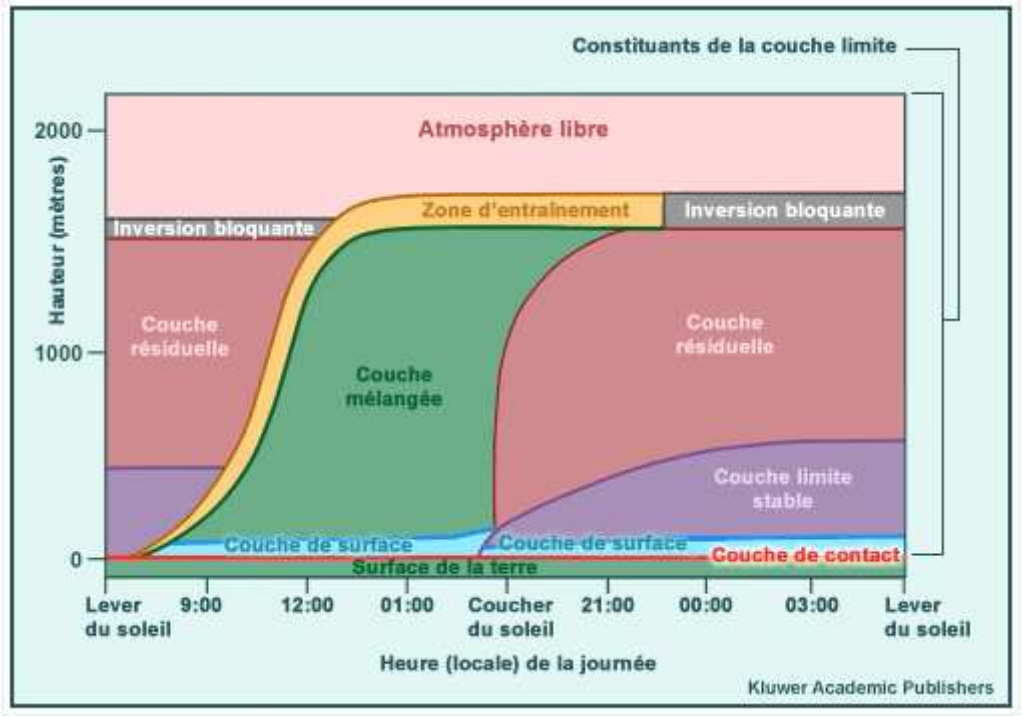


Figure 1.7 – Evolution journalière et variété des structures présentes dans la couche limite atmosphérique (http://www.meted.ucar.edu/nwp/model_physics_fr/print.htm).

c. Dépôts sec et humide et réémission des polluants déposés

Les dépôts sec et humide constituent des puits de polluants qui sont ainsi retirés du compartiment atmosphérique. En revanche, la réémission constitue une source de pollution du sol vers l'atmosphère.

— Dépôt humide

Les précipitations qu'elles soient dans la forme courante (pluie) ou plus anecdotique (neige et graupels) occasionnent les dépôts humides, c'est-à-dire le transfert des polluants de l'atmosphère vers des surfaces par lessivage. Ce lessivage se fait en général par deux mécanismes distincts : le « in-cloud » et le « below-cloud ». Ces deux anglicismes font respectivement référence aux mécanismes de condensation et de capture ayant lieu dans le nuage (« in-cloud ») autour des particules et aux mécanismes de diffusion (brownienne) et d'impact (par inertie et par interception) ayant lieu sous le nuage (« below-cloud ») des gouttes de pluie ou de neige rentrées en collision avec les particules.

Dans le nuage, les particules de polluant servent de noyau de condensation aux gouttes, celles-ci croissent alors en diamètre et forment ainsi le nuage. Tandis que la dissolution en phase aqueuse capte plutôt les polluants de nature gazeuse, la collision est plus efficace pour les polluants de nature particulaire.

Sous le nuage, les particules peuvent être collectées par une goutte de pluie en chute du fait de la diffusion brownienne. Certaines particules ont ainsi une probabilité d'entrer en contact avec les gouttes de pluie en chute. Cependant, l'efficacité brownienne diminue fortement avec la taille des particules, ce mécanisme est surtout efficace pour les petites tailles de particules (< 0,1 µm). L'impact par inertie se produit lorsque la particule est incapable de suivre les lignes de courant se dessinant autour de la goutte de pluie en chute du fait de sa masse. Par son inertie, la particule est alors dirigée vers la goutte et pourra être captée. L'efficacité de l'impaction par inertie concerne surtout les particules de diamètre supérieur à 1 µm. Il y a donc un minimum d'efficacité de lessivage entre 0,1 et 1 µm identifié comme le « Greenflied gap » portant le nom de son découvreur (Figure 1.7). Finalement, l'interception se produit lorsque la particule suit les lignes de courant autour de la chute de la goutte et finie par entrer en contact avec celle-ci du fait de sa taille (>1 µm). En général, l'interception se produit lorsque la distance à la goutte de pluie est égale à la moitié du diamètre de la particule. Ce phénomène est assez peu efficace comparé à celui de l'inertie.

D'autres processus de lessivage peuvent être également mentionnés (thermophorèse, diffusiophorèse et effets électriques). La thermophorèse conduit les particules à se déplacer autour d'un gradient de températures. La diffusiophorèse entraîne les particules à se mouvoir du fait de gradient des concentrations en gaz. Enfin, les forces électriques sont liées à la charge des particules qui les font interagir les unes avec les autres.

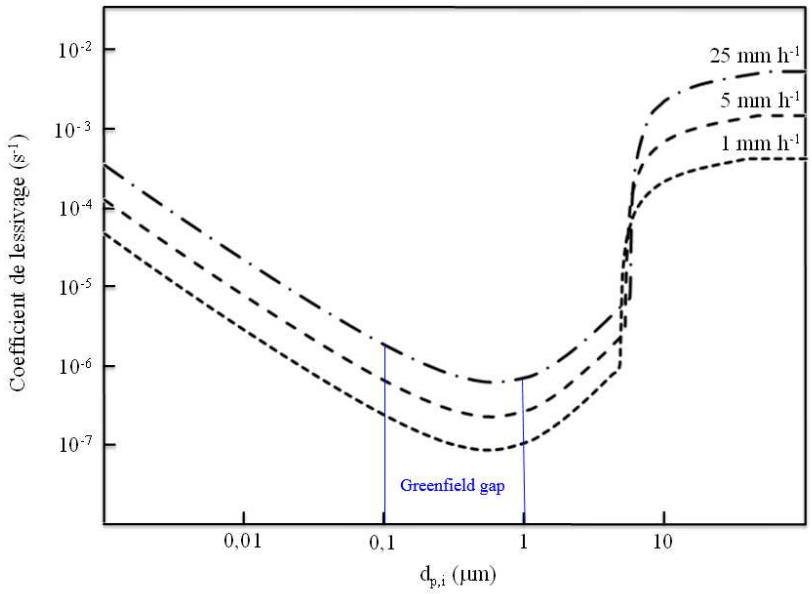


Figure 1.8 - Coefficient de lessivage pour plusieurs intensités de pluie en fonction du diamètre des particules (Seigneur C., 2017, modifié).

L'efficacité du lessivage sous le nuage est en général approchée quantitativement par un coefficient de lessivage (qui peut être calculé de façon théorique ou estimé de façon empirique). Ce coefficient de lessivage dépend de la solubilité des polluants gazeux, de la taille et de la masse volumique des particules ; il dépend aussi de l'intensité de la précipitation et du spectre de taille des gouttes de pluie.

— Dépôt sec

Les dépôts secs sont définis comme le transfert de polluants de l'atmosphère vers les surfaces autrement que par précipitation. Les dépôts secs sont, cependant, gouvernés par plusieurs facteurs dont la turbulence, les propriétés chimiques des espèces, et la nature des surfaces et terrains rencontrés. La turbulence, en particulier près des surfaces, contrôle le taux de polluants déposés. Pour les espèces gazeuses, leur solubilité et leur propriété chimique peuvent affecter leur absorption, adsorption et réactions à la surface. Pour les particules ce sont la taille, la masse volumique et leur forme qui peuvent déterminer la capture à la surface. La nature des surfaces est elle-même un facteur prépondérant dans le dépôt sec. Une surface non réactive ne permettra par l'absorption (pénétration des polluants dans la phase solide ou liquide) ou l'adsorption (les polluants restent à la surface des phases) de certains gaz, une surface lisse favorisera le rebond tandis que les surfaces végétales seront plus enclines au dépôt sec.

Bien qu'il soit difficile de décrire les chemins complets empruntés par les gaz et les particules et leur adhérence à chaque élément surfacique, il est néanmoins généralement accepté qu'à 10 m de hauteur de chacune des surfaces le flux de dépôt sec est proportionnel aux concentrations locales. Le coefficient de proportionnalité correspond à la vitesse de dépôt entre les flux et la concentration. On définit ainsi le flux de dépôt sec comme la quantité de polluant déposé par unité de surface et unité de temps.

Les processus de dépôt sec sont généralement représentés par trois mécanismes opérant en série: (1) le transport aérodynamique vers la couche fine quasi-laminaire (de l'ordre du millimètre) de l'atmosphère, (2) la diffusion brownienne dans la couche fine de l'atmosphère et (3) l'absorption à la surface.

La sédimentation constitue le mode de transport principal pour les particules grossières (environ 10 µm) opérant dans toutes les couches atmosphériques.

Le transport vers la couche fine se fait essentiellement par diffusion turbulente. Près des obstacles (bâtiments et végétation), la fine couche de l'ordre du millimètre est considérée comme stationnaire et est appelée couche « quasi-laminaire ». Dans cette couche, les processus de diffusion brownienne, de sédimentation, d'inertie et d'impaction se produisent et sont plus ou moins efficaces en fonction des tailles de particules (l'efficacité de ces processus en fonction de la taille des particules a été discutée dans le paragraphe sur les dépôts humides). Enfin, alors que les particules sont déposées dès qu'elles entrent au contact de la surface, les polluants gazeux ont deux possibilités : se déposer par adsorption ou absorption dans la surface.

Cette série de processus qui constituent l'ensemble du processus de dépôt sec peut être représenté comme une série de résistances au transport (par analogie à un circuit électrique). Les résistances empilées par ordre de la couche de surface vers la couche fine de l'atmosphère sont les suivantes: la résistance aérodynamique, la résistance quasi-laminaire et la résistance de surface (parfois aussi appelée « résistance de canopée »). La somme de ces trois résistances constitue la résistance finale et correspond à l'inverse de la vitesse de dépôt.

Les résistances aérodynamique et quasi-laminaire diminuent lorsque la vitesse du vent et la taille de la végétation (et des obstacles) augmentent. Par ailleurs, la résistance aérodynamique décroit également en condition atmosphérique instable (forte turbulence liée aux variations du rayonnement solaire la journée). Elle est donc généralement faible en journée et dominante la nuit (en conditions stable ou neutre). En revanche, la résistance quasi-laminaire et la résistance de surface sont moins influencées par les conditions atmosphériques mais plutôt par les propriétés des surfaces rencontrées et les caractéristiques physico-chimiques des polluants. Habituellement, la résistance de surface est formulée pour la végétation, mais Cherin et al. (2015) ont calculé les résistances liées à la présence d'une canopée urbaine (Figure 1.8).

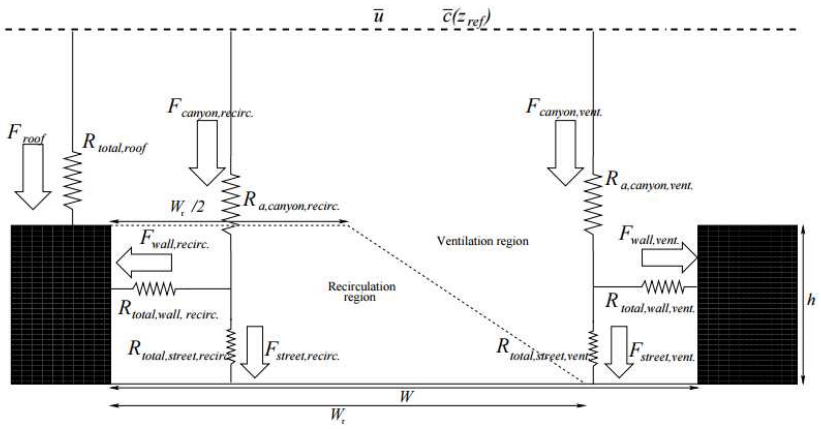


Figure 1.9 - Réseau des résistances impliquées dans le dépôt sec dans une canopée urbaine (Cherin et al., 2015).

— Réémission des polluants déposés

La réémission des polluants peut prendre plusieurs formes en fonction de la nature du processus impliquant la mobilisation des polluants déposés. Ainsi, un processus thermique se manifestant par une augmentation des températures ambiantes pourra occasionner la réémission des polluants semi-volatils alors que des températures plus basses faciliteront leur dépôt. Une succession de dépôts et de réémissions d'un polluant semi-volatil est parfois évoqué sous « l'effet sauterelle », le polluant peut ainsi parcourir de très grandes distances (plusieurs milliers de kilomètres) en faisant plusieurs « sauts » successifs dans l'atmosphère. Par ailleurs, un processus plus mécanique comme l'effet du vent (i.e., soulèvement des poussières désertiques) ou du trafic des véhicules (i.e., soulèvement des particules sur la chaussée) peut provoquer la mobilisation des particules déposées en surface et leur remise en suspension dans le compartiment atmosphérique.

d. Les différentes approches en modélisation de la qualité de l'air : chimie-transport, mécanique des fluides, rue-canyon et hybrides

Les approches déterministes (basées sur les équations d'évolution de la physique ainsi que sur la chimie) de modélisation de la qualité de l'air s'adaptent à l'échelle à laquelle on souhaite faire de la prévision et au processus qui lui sont liés.

Ainsi, l'approche par chimie-transport (appelés « CTM » pour Chemistry Transport Model) est habituellement utilisée à des grandes échelles (de 1 km à plusieurs 100 km) et s'insère dans une représentation eulérienne du phénomène de dispersion des polluants. La représentation eulérienne consiste à suivre le mouvement de l'objet par rapport à un repère fixe (par exemple une station de mesure). Sauf dans le cas des modèles gaussiens utilisés à des échelles plus fines (de quelques mètres de la source à 1 km), une discrétisation de l'équation de chimie-transport s'impose lorsqu'on souhaite résoudre la pollution de l'air à grandes échelles car il n'existe pas de solution analytique de conservation de la masse. La discrétisation d'un domaine se fait dans l'espace en utilisant un maillage tridimensionnel (3D) donc dans les directions horizontales et verticales, généralement de façon régulière (les mailles ont la même dimension). La conservation de la masse est résolue par itérations (dans le temps et dans l'espace) selon des schémas numériques (méthode des différences finies ou des éléments finis par exemple). Les variables (vent, précipitations, concentrations, dépôts, etc.) sont uniformes dans chaque maille. L'advection correspond au transport horizontal par le vent moyen et la diffusion turbulente au transport vertical par la turbulence des polluants. Pour établir un bilan massique des polluants aux extrémités du domaine on a besoin de conditions aux limites dont on distingue deux types (Dirichlet ou Neumann). Les conditions aux limites de Dirichlet fixent la valeur de la concentration (ou des émissions, ou des variables météorologiques) sur la frontière tandis que les conditions aux limites de Neumann en fixent la dérivée. La condition initiale peut aussi être renseignée afin de fournir au modèle un état des variables d'entrée à l'instant auquel sont démarrées les simulations.

Pour des échelles plus fines (< 10 km), les modèles de mécanique des fluides peuvent être utilisés pour simuler les écoulements turbulents atmosphériques. Les écoulements d'un fluide newtonien tel que l'air est régi par les équations de Navier-Stokes qui n'ont, en général, pas de solution analytique pour les modélisations en qualité de l'air. La résolution s'effectue également en discrétisant le volume de calcul en un maillage, qui est plus fin que

ceux des maillages eulériens. Plusieurs approximations sont alors développées pour résoudre explicitement et dans des temps de calcul acceptables les équations de Navier-Stokes : Direct Numerical Simulation (DNS), Large-Eddy Simulation (LES) et Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS). La méthode RANS consiste à résoudre un écoulement moyen et à modéliser les fluctuations de la turbulence par une viscosité turbulente, c'est l'approche la moins couteuse en temps de calcul mais aussi la moins précise. La méthode LES filtre les plus petites échelles de la turbulence (plus petites que la taille du maillage) tandis que les grandes échelles contenant la majeure partie de l'énergie de l'écoulement sont entièrement simulées. Le long des parois des obstacles les échelles de turbulence sont très petites et il faut donc avoir recoure à une discrétisation très fine (donc plus couteuse). La méthode DNS est utilisée pour résoudre entièrement le spectre de la turbulence sans aucune modélisation. Ceci nécessite un maillage suffisamment fin pour capturer jusqu'à la plus petite échelle de turbulence. Le coût de calcul est alors très conséquent rendant cette méthode souvent inappropriée en mode opérationnel. Cependant, cette méthode demeure essentielle pour la compréhension fondamentale de la physique de la turbulence.

Pour des échelles encore plus fines (< 1 km), les « modèles de boîte » considèrent des processus se déroulant à l'intérieur (et en entrée et sortie) d'un petit domaine assimilé à une boîte. Par exemple, les modèles de rue-canyon appartiennent à cette catégorie de modèles, dont la rue et les bâtiments de chaque côté définissent les limites horizontales et verticales de la boîte (i.e., la canopée urbaine). Les concentrations et les dépôts peuvent y être décrits comme homogènes mais peuvent aussi être considérés comme hétérogènes. Une zone de recirculation dans le plan transversal à la rue et un écoulement longitudinal le long de la rue peuvent être représentés conduisant à un gradient de concentrations de chaque côté en fonction de l'angle du vent par rapport à l'axe de la rue. Ces modèles sont paramétriques, c'est-à-dire qu'ils sont définis par différentes paramétrisations théoriques des processus de transport dans et en-dehors de la boîte.

Enfin, des modèles sous-maille (hybrides) permettent de faire le lien entre grande échelle et petite échelles de simulation. Il est parfois utile de pouvoir simuler à la fois la pollution de fond (urbaine et/ou régionale) et la pollution de proximité (axe routier par exemple). Un modèle hybride permet alors de simuler la pollution de fond dans un cadre eulérien et la pollution de proximité avec une approche paramétrique imbriquée dans le cadre eulérien. C'est par exemple le cas de l'approche « Street-in-Grid » (SinG, Kim et al., 2016) pour une résolution des rues en sous-maille.

e. État de l'art des modèles/études en milieu urbain (modes opérationnel et recherche)

Le transport atmosphérique de métaux traces à l'échelle européenne (résolution horizontale de 70 km) a déjà été étudié par Roustan et al. (2006) à l'aide de POLAIR3D, un CTM de la plate-forme de simulation de la qualité de l'air Polyphemus. Plusieurs métaux (plomb, Pb ; cadmium, Cd et mercure, Hg) ont été modélisés (y compris les transformations chimiques pour le Hg) et comparés aux mesures du programme européen de surveillance et d'évaluation (EMEP) pour les concentrations et les flux de dépôts. Dans ces simulations, les flux de dépôt ont été calculés sur de grandes mailles et n'ont pas été résolus en termes de surfaces. Quéguiner et al. (2009) ont effectué des simulations des concentrations de Pb et Cd et des dépôts dans une région méditerranéenne également avec POLAIR3D avec une

résolution spatiale de 50 km. L'accent a été mis sur la contamination des sols et de la végétation. Des simulations sont effectuées de façon routinière par EMEP avec la plate-forme de modélisation GLEMOS pour quantifier le transport intercontinental de certains métaux (Pb, Cd, et surtout Hg) et leur contribution à la pollution à différentes échelles, de régionale (50 km x 50 km) à locale (5 km x 5 km) (Shatalov et al., 2015). Aux États-Unis, des simulations de pollution atmosphériques ont été menées avec le système de modélisation CMAQ à l'échelle continentale avec une résolution horizontale de 36 km pour les métaux traces comme le Pb, le manganèse (Mn), le chrome (Cr), le nickel (Ni) et le Cd (Hutzell et Luecken, 2008). Une évaluation détaillée de la performance du modèle a été effectuée pour les concentrations atmosphériques; le dépôt atmosphérique est simulé par le CMAQ, mais il n'a pas été rapporté. Pour les HAP, Quéguiner et al. (2010) ont utilisé POLAIR3D avec la même résolution spatiale que Roustan et al. (2006) pour simuler le dépôt de BaP sur le sud-est de la France avec une simple décroissance chimique atmosphérique de premier ordre. Ils se sont également concentrés sur la contamination des sols et de la végétation. Une évaluation empirique des dépôts atmosphériques (humide et sec) urbains de plusieurs métaux dans un quartier urbain (Nantes, France) a été réalisée par Percot et al. (2013, 2016) en utilisant des concentrations ambiantes mesurées, des distributions granulométriques et des flux de dépôt humide en combinaison avec des vitesses de dépôt sec estimées à partir d'expériences de laboratoire et de terrain. Les métaux étudiés comprenaient l'arsenic (As), Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, le vanadium (V) et Zn. Le dépôt sec a été résolu par type de surface, cependant les dépôts humides dominent le dépôt atmosphérique total pour tous les métaux sauf As.

Des études antérieures ont simulé des géométries urbaines idéalisées avec une résolution très fine pour comprendre le chemin emprunté par l'écoulement en utilisant des modèles de CFD. Milliez et Carissimo (2007) utilisent Mercure_Saturne, un modèle tridimensionnel adapté à l'écoulement atmosphérique et à la dispersion des polluants (aujourd'hui intégré à *Code_Saturne* développé par EDF R&D, détaillé dans Archambeau et al., 2004) avec une méthode RANS et une fermeture en k-ε. Cet environnement urbain théorique a été simulé par un regroupement uniforme de conteneurs maritimes dans la région du désert ouest de l'Utah avec les dimensions suivantes: 2,54 m de haut, 12,9 m de long et 2,42 m de large. Les concentrations du benzène (C_6H_6) sous la forme d'un gaz neutre ont été simulées et libérées à diverses hauteurs (en proche sol à 5 m) par des sources ponctuelles. Le domaine de simulation était une grille non structurée d'environ 800 000 cellules avec une résolution horizontale de 4 à 0,6 m, respectivement en amont de l'aval au voisinage des obstacles. La résolution verticale varie de 0,3 m près du sol à une hauteur égale au double de la taille des conteneurs, et s'allonge progressivement jusqu'à 4 m au sommet du domaine. Di Sabatino et al. (2007b) ont comparé un modèle CFD (FLUENT, Fluent, 2005) à des modèles intégrés tels que ADMS-Urban (CERC, 2006) dans trois réseaux de bâtiments réguliers différents pour quatre morphologies théoriques différentes (avec une hauteur de canyon fixe de 20 m et une largeur de rue variable de 10, 20, 30 et 40 m). Les émissions linéique et ponctuelle de monoxyde de carbone (CO) ont été dispersées à une hauteur différente dans une couche limite neutre de 800 m dans ADMS-Urban et dans une couche de 150 m dans FLUENT. La résolution horizontale de FLUENT est de 500 m et le nombre final de cellules de calcul est d'environ 500 000 pour les émissions de sources ponctuelle et linéaire. La plus petite dimension des éléments est de 0,5 m dans la région proche de la zone d'émission et près du sol. Chu et al. (2005) ont calculé la dispersion des polluants provenant de sources linéiques parallèles à l'intérieur d'une zone mixte résidentielle et commerciale à Hong Kong sur la base des dimensions réelles des immeubles avec le modèle CFX5.5 couplé à une fermeture turbulente k-ε. Une caractéristique particulière de ces zones est un espacement régulier des

rues avec des bâtiments de même hauteur. Gao et al. (2017) ont simulé les effets thermiques et la dispersion de la pollution sur un véritable quartier urbain situé à Toulouse, caractérisé par une diversité de morphologies urbaines. Le code *Code_Saturne* (CFD) avec une approche RANS et un modèle de fermeture k-ε ont été utilisés. Le nombre de cellules de calcul est de 5 millions avec une résolution horizontale de 0,5 m et une verticale de 1 m au cœur du domaine. Les modèles CFD ne peuvent pas être appliqués à de longues séries chronologiques et ne peuvent pas décrire l'hétérogénéité complète des formes urbaines en raison de la limitation de la puissance de calcul et/ou de la limitation des délais de livraison. Par conséquent, l'impact du bâtiment sur la dispersion des polluants pour une morphologie urbaine complexe a également été évalué par des modèles paramétriques moins coûteux. Comme il a été mentionné ci-dessus, ADMS-Urban est un modèle opérationnel basé sur la formulation paramétrique (Mallet et al., 2013). D'autres modèles paramétriques ont été largement utilisés, tels que le modèle Open Street Pollution (OSPM), évalué à une dizaine de stations de rues caractérisées par une hauteur de bâtiment et une largeur de rue différentes (Ketzel et al., 2012), ou simplement dans une rue-canyon (Ghenu et al., 2008) et le modèle SIRANE (Soulhac et al. , 2011) qui tient compte du transfert des polluants atmosphériques entre les rues connectées en plus des zones de recirculation. Wang et al. (2016) ont comparé trois approches différentes de modélisation paramétrique: CALINE4 (modèle gaussien), OSPM et SIRANE pour quatre segments routiers consécutifs le long d'un axe congestionné par le trafic à Montréal.

La méthode de Positive Matrix Factorization (PMF), une méthode de composante statistique, a été utilisée pour estimer la source non-échappement sur le cas de l'autoroute urbaine de Grenoble et sur la base des mesures de données MOCoPo (Polo Rehn, 2013). Ce résultat PMF a été utilisé par Fallah Shorshani et al. (2015) pour estimer un taux moyen de réémission pour la modélisation de la dispersion atmosphérique. Amato et al. (2016) ont mené un programme expérimental sur le périphérique de Paris et ont utilisé la méthode PMF pour quantifier la contribution de la réémission des PM_{10} aux concentrations de PM_{10} et aux émissions liées à la circulation. L'Agence de protection de l'environnement des États-Unis (U.S. EPA) a mis au point un facteur prédictif d'émission pour la remise en suspension basé sur une régression de 83 essais de PM_{10} en incluant les routes pavées publiques, ainsi que des routes pavées industrielles contrôlées et non contrôlées (U.S. EPA, 2006). Cette approche "AP-42" a récemment été appliquée à la vallée du Pô en Italie pour janvier 2010 (Pepe et al., 2016).

1.5. PRÉSENTATION DES CHAPITRES DE LA THÈSE

D'un point de vue structurel, trois échelles emboîtées peuvent décrire un paysage urbain (Figure 1.9): la méso-échelle (échelle de l'agglomération voire plus), l'échelle locale (échelle du quartier) et la micro-échelle (quelques bâtiments). Sur la verticale, la méso-échelle s'étend au-delà de la canopée urbaine (au minimum jusqu'au sommet de la CLA) tandis que l'échelle locale et la micro-échelle ne s'étendent pas plus loin que la sous-couche rugueuse incluant la canopée urbaine dans la CLA.

La pollution urbaine à la plus petite échelle résulte de la contribution d'un fond urbain et des émissions locales. Ainsi, dans cette thèse, nous modélisons la pollution urbaine au travers de ces trois échelles avec un modèle de chimie-transport de méso-échelle (Polyphemus/POLAIR3D) comme détaillé dans le Chapitre 2, qui permet d'estimer les

concentrations et les dépôts de polluants atmosphériques par type de surfaces urbaines (toits, murs et chaussées). La pollution à l'échelle de la rue en intégrant explicitement les effets du bâti de manière tridimensionnelle avec d'une part un modèle multi-échelle de chimie-transport (SinG) et d'autre part un modèle de mécanique des fluides appliqué à la micro-échelle (*Code_Saturne*) est présentée dans le Chapitre 3. Enfin, un processus de micro-échelle, la réémission des particules présentes sur la chaussée par le trafic routier, est calculé avec trois formulations différentes (déterministe, semi-empirique et empirique) dans le Chapitre 4.

Nos simulations concernent les polluants issus du trafic routier, notamment les oxydes d'azote (NO_x), quelques métaux (Zn et Cu) et quelques HAP (benzo[a]pyrène, benzo[b]fluoranthène, et indéno[1,2,3-cd]pyrène). La chimie atmosphérique n'est pas traitée dans ces simulations, nous faisons l'hypothèse d'une faible réactivité de ces éléments chimiques aux échelles spatio-temporelles simulées en ce qui concerne les métaux et les HAP. Les NO_x sont utilisés ici comme traceurs à l'échelle de la rue et leur transformation en nitrate peut donc être négligée.

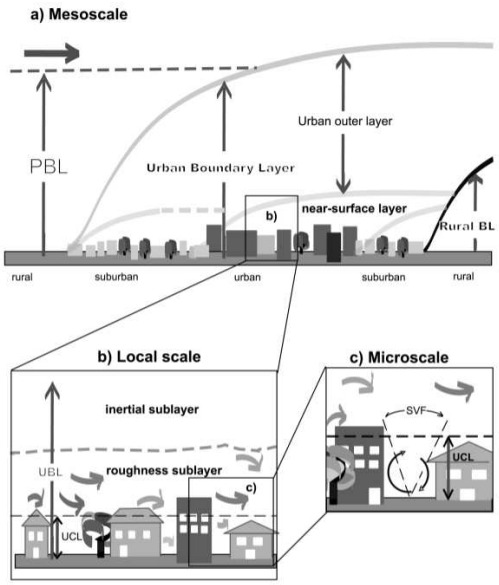


Figure 1.10 - Vue schématique des trois échelles du paysage urbain : a) la méso-échelle, b) l'échelle locale et c) la micro-échelle (Fisher et al., 2006).

1.5.1. SIMULATIONS RÉGIONALES AVEC LE MODÈLE DE CHIMIE-TRANSPORT "POLAIR3D" EN INTÉGRANT LES EFFETS DU BÂTI SUR LES DÉPÔTS ATMOSPHÉRIQUES

A l'échelle régionale (méso-échelle), notre étude porte sur la modélisation de la météorologie et de la pollution de l'air en Europe vers un quartier de la banlieue de Paris, en utilisant une approche d'imbrication (« nesting ») en quatre étapes (sur quatre domaines imbriqués). Les simulations météorologiques et de qualité de l'air utilisent des modèles sous-maille de canopée urbaine pour mieux représenter l'effet de la morphologie urbaine sur l'écoulement, la dispersion atmosphérique et le dépôt de polluants atmosphériques sur les

surfaces urbaines. Cette approche de modélisation permet de distinguer les dépôts de polluants atmosphériques entre différentes surfaces urbaines (toitures, routes et murs). Nos résultats sont comparés à une simulation avec une approche standard de longueur de rugosité pour le dépôt (c'est-à-dire sans représentation supplémentaire de la morphologie urbaine). Nous étudions l'effet de la météorologie, de la distribution granulométrique et de la morphologie urbaine sur le dépôt des polluants atmosphériques.

Ce travail est, à notre connaissance, la première simulation de métaux traces et de dépôts de HAP avec une fine résolution spatiale (1 km x 1 km) sur l'Île-de-France. Ce travail correspond également à la première étude de cas spécifique permettant de distinguer les dépôts de polluants en fonction des surfaces urbaines (toitures, routes et murs) pour trois morphologies typiques de l'Île-de-France.

1.5.2. SIMULATIONS LOCALES À L'ÉCHELLE DE LA RUE DES CONCENTRATIONS EN UTILISANT UN MODÈLE DE CHIMIE-TRANSPORT ET UN MODÈLE DE MÉCANIQUE DES FLUIDES TRAITANT EXPLICITEMENT LE BÂTI

Au niveau intermédiaire, à l'échelle locale, notre étude concerne la quantification et la qualification de la pollution à l'échelle de la rue (en moyenne et en différence de chaque côté de la rue) en intégrant explicitement les effets du bâti de manière tridimensionnelle. Deux approches distinctes sont évaluées en termes d'opérabilité et de performance : d'une part un modèle multi-échelle de chimie-transport et d'autre part un modèle de mécanique des fluides appliqué à la micro-échelle. Nous étudions l'influence de la direction et de la vitesse du vent, du bâti, des conditions aux bords et initiales et la qualité des données d'entrées sur les concentrations pour un cas d'étude situé en banlieue de parisienne.

Ce travail correspond à la première inter-comparaison de modèles modèle multi-échelle de chimie-transport et de mécanique des fluides prenant en compte la morphologie urbaine sur un cas non académique donc sur un cas réel (situé en Île-de-France).

1.5.3. SIMULATIONS D'UN PROCESSUS DE MICRO-ÉCHELLE : LA REMISE EN SUSPENSION

Enfin, à la micro-échelle, notre étude s'intéresse à l'estimation de la réémission des particules (PM) présentes à la surface de la chaussée, avec trois formulations différentes (déterministe, semi-empirique et empirique) pour deux études de cas urbains (région grenobloise et Île-de-France) qui diffèrent en termes de caractéristiques du trafic (débit et vitesse des véhicules) et de météorologie. Nous étudions la sensibilité de la réémission des PM en fonction du trafic, des caractéristiques de l'environnement urbain et des quantités de précipitations afin de pouvoir dégager des recommandations concernant la modélisation de la réémission des PM induite par le trafic.

Ce travail représente la première inter-comparaison de modèles de réémission liés au trafic avec trois formulations différentes. Par ailleurs, nous présentons aussi la première simulation qui peut distinguer les sources de remise en suspension par type d'usure (freins, pneus et

chaussée) et catégorie de véhicules (voiture particulière et poids-lourds) et mettent en évidence les effets du trafic et de la météorologie pour les deux études de cas.

CHAPITRE 2. SIMULATIONS RÉGIONALES AVEC LE MODÈLE DE CHIMIE-TRANSPORT "POLAIR3D" EN INTÉGRANT LES EFFETS DU BÂTI SUR LES DÉPÔTS ATMOSPHÉRIQUES

L'article résumé pour ce chapitre est le suivant :

Simulation of trace metals and PAH atmospheric pollution over Greater Paris: concentrations and deposition on urban surfaces.

L.Thouron, C. Seigneur, Y. Kim, C. Legorgeu, Y. Roustan, et B. Bruge.

Soumis à Atmospheric Environment

2.1. RÉSUMÉ DE L'ARTICLE

2.1.1. INTRODUCTION

Des mesures en station de fond sur la région francilienne sont réalisées par l'agence régionale de qualité de l'air Airparif. Ces observations constituent des données ponctuelles en des sites géographiques fixes. Malgré leur grand nombre, elles ne permettent pas de restituer une variation spatiale suffisamment fine et régulière, en particulier pour des polluants tels que les métaux et les polluants organiques persistants (POP). La modélisation numérique peut apporter une résolution spatio-temporelle plus fine et, si la performance du modèle est jugée suffisante, elle peut être utilisée pour répondre à des questions scientifiques et traiter des problèmes opérationnels.

Nous présentons dans ce chapitre des simulations de dépôts atmosphériques de quelques métaux et POP en milieu urbain. Ces simulations ont été effectuées avec un modèle eulérien de chimie-transport (CTM) « POLAIR3D » développé par le CEREA et intégré à la plate-forme de simulation Polyphemus. Dans ce modèle, les polluants sont transportés dans la direction horizontale principalement par advection et dans la direction verticale principalement par diffusion turbulente. La pollution atmosphérique pouvant être transportée sur des longues distances, nous avons choisi de faire démarrer nos simulations à une échelle européenne (résolution horizontale de 50 km x 50 km) afin d'intégrer le plus de sources possibles. Ces

simulations sont ensuite réalisées sur trois autres domaines imbriqués par descente d'échelle. Ainsi, les modélisations suivantes concernent, la France (sa partie septentrionale, résolution: 15 km x 15 km), l'Île-de-France (4 km x 4km) et un quartier en banlieue est de Paris (1 km x 1 km), à Le Perreux-sur-Marne. Ce quartier fait référence au quartier défini dans le projet TrafiPollu. La résolution verticale est identique pour l'ensemble des domaines. Celle-ci comprend 10 couches dont le sommet de la première est à 15 m pour une première simulation des concentrations atmosphériques. Une deuxième simulation a été réalisée pour les dépôts urbains en rehaussant le sommet du premier niveau à 65 m afin d'y inclure l'ensemble de la canopée urbaine. Nous faisons ici l'hypothèse d'une réactivité lente des polluants traités (zinc, cuivre, benzo[a]pyrène, benzo[b]fluoranthène, et indéno[1,2,3-cd]pyrène) et, par conséquent, aucune réaction chimique n'est simulée. Bien que leur réactivité soit négligeable, il n'en demeure pas moins que ces substances ont une toxicité ou écotoxicité, ce qui justifie le choix de ces polluants pour l'étude. Ces polluants présentent aussi un intérêt biogéochimique pour les laboratoires de modélisation de la pollution des eaux de ruissellement dans les bassins versants, le choix des polluants devant répondre aux besoins de modélisation multi-milieux qui était un des objectifs du projet TrafiPollu.

Le benzo[a]pyrène est particulièrement corrélé à des effets hautement cancérogènes et possède donc le plus haut niveau de toxicité en facteur équivalent (FET = 1). Le FET représente le facteur de toxicité d'un hydrocarbure aromatique polycyclique (HAP) congénère par rapport au benzo[a]pyrène. De la sorte, le benzo[b]fluoranthène et l'indéno[1,2,3-cd]pyrène sont répertoriés comme dix fois moins dangereux que le benzo[a]pyrène (FET = 0.1), mais représentent tout de même un risque potentiel pour la santé selon le Centre International de Recherche en Cancer (CIRC). Ces caractéristiques sanitaires sont étroitement liées à leur taille principale d'émission lorsque ces HAP sont sous forme particulaire. A 25°C, les HAP sont prioritairement absorbés sur la phase particulaire et leur distribution granulométrique se situe essentiellement en dessous de 2,5 µm. Or, les particules fines, de diamètre inférieur à 2,5 µm, peuvent pénétrer profondément l'appareil respiratoire jusqu'aux bronchioles et alvéoles et leur temps de séjour dans le corps humain peut alors atteindre plusieurs semaines. Les HAP, dont font partie le benzo[a]pyrène, le benzo[b]fluoranthène et l'indéno[1,2,3-cd]pyrène, sont produits par combustion incomplète de combustibles tels que la biomasse et certains carburants, et sont largement émis dans les zones de fortes densité de population du fait du chauffage résidentiel (66⁄) et du trafic (25⁄) selon une étude d'Airparif menée en 2010 en région Île-de-France. Comme nous nous intéressons à une période printanière, nous considérons que les HAP simulés ici sont principalement émis par le trafic routier. Le zinc et le cuivre sont également simulés en tant que métaux représentatifs d'une pollution issue du trafic urbain et sont respectivement liés aux rejets des véhicules diesel et à l'abrasion des freins des véhicules routiers. Il s'agit aussi des polluants métalliques mesurés en plus grande quantité au niveau du site expérimental. Leur taille principale d'émission est plus grossière que celle des HAP (0.6 – 40 µm). Leur classification en tant qu'éléments cancéreux n'est aujourd'hui pas claire. Cependant, les organisations de santé s'accordent à mettre en garde contre les expositions répétées et les forts niveaux de concentrations inhalés. Par ailleurs, le cuivre et le zinc sont des produits écotoxiques avérés.

Dans ce présent chapitre, nous souhaitons déterminer le rôle de la morphologie urbaine sur les simulations de dispersion dans l'air des polluants et leur dépôt. L'impact du bâti a été évalué d'une part à travers la météorologie et d'autre part à travers les dépôts secs.

2.1.2. CONFIGURATION DES DONNÉES D'ENTRÉE DES MODÈLES NUMÉRIQUES

Un travail de traitement des données d'entrée est nécessaire pour alimenter le modèle POLAIR3D (Mallet et al., 2007). Par ailleurs, la qualité de ces données d'entrée et leur traitement conditionnent les résultats obtenus en fin de simulation, c'est pourquoi il nous paraît important d'en donner le détail dans ce chapitre.

Les concentrations sont modélisées grâce aux inventaires d'émission provenant d'abord d'EMEP (« European Monitoring and Evaluation Programme ») pour l'Europe, puis d'Airparif pour les autres domaines de simulation. Pour certains polluants comme le benzo[a]pyrène, l'inventaire d'émission européen EMEP est disponible pour l'année 2012 avec une résolution spatiale de 50 km. Notre période de simulation concerne l'année 2014. La simulation est déroulée depuis l'Europe jusqu'au quartier du projet par imbrication. Cependant, aucun inventaire d'émission EMEP n'est pas disponible pour les quatre autres polluants et les conditions aux limites du domaine de l'Île-de-France doivent donc être obtenues de stations de fond du réseau européen EBAS pour le zinc et le cuivre. Par absence de valeur pour les deux autres HAP, le modèle est alors forcé avec des conditions aux limites nulles.

Dans le cadastre d'Airparif, les données sont classées en 205 catégories SNAP (« Standardized Nomenclature for Air Pollutants ») qui sont en fait le détail des 11 catégories principales d'EMEP avec notamment une précision du type de combustible. Des profils temporels sont appliqués afin de restituer une variation des émissions au cours de l'année, d'une semaine et d'une journée. Ces profils datent de 2010.

Une distribution granulométrique est également appliquée à chaque espèce simulée pour chaque classe de taille modélisée (0,01 – 0,04 ; 0,04 – 0,15 ; 0,15 – 0,625 ; 0,625 – 2,5 ; 2,5 – 10 ; 10 – 40 μm de diamètre). Les choix de ces distributions s'appuient sur la littérature scientifique : Allen et al. (2001), Zielinska et al. (2004), Samara et al. (2005), et Percot et al. (2013).

La dispersion des polluants dans l'atmosphère ainsi que leur niveau de concentrations dans l'air dépendent fortement des conditions météorologiques. Nous avons simulé les champs météorologiques avec le modèle WRF (« Weather Research and Forecasting ») développé aux Etats-Unis par une collaboration entre plusieurs centres de recherches dont le NCAR (« National Center for Atmospheric Research ») et les NCEP (« National Centers for Environmental Prediction »). Les mêmes conditions de distribution spatiale que POLAIR3D. Et donc des résolutions commensurables pour chaque domaine ont été utilisées. Dans ces simulations WRF (Skamarock et al., 2008) nous avons utilisé une paramétrisation de la pluie avec le schéma de WSM-3 classes (Hong, Dudhia et Chen, 2004).

Un traitement particulier de la canopée urbaine a été effectué avec le modèle UCM (« Urban Canopy Model »). Il permet notamment de prendre en compte les effets de la géométrie urbaine sur l'écoulement météorologique et a été mis en place pour les deux derniers domaines (Île-de-France et quartier du projet TrafiPollu). Nous y avons distingué, trois types de morphologie urbaine : dense, résidentielle et commerciale/industrielle. Les grandeurs concernant la hauteur des bâtiments, leur largeur et la largeur des rues ont été choisies sur la base d'observations provenant soit de la base de données BDTOPO® de l'IGN mise à disponibilité pour le projet pour le quartier résidentiel (départements 93 et 94), soit de

valeurs trouvées dans la littérature pour le cas de Paris (Pigeon et al., 2014). Les cartes d'occupation des sols utilisées dans ces simulations sont issues de GLC2000 pour l'Europe et la France. Pour les derniers domaines, la carte d'occupation des sols est de résolution beaucoup plus fine et correspond aux données CORINE de 1er niveau. Cependant, les catégories CORINE doivent être converties en catégories USGS (la résolution spatiale reste inchangée) lors des simulations météorologiques avec WRF, car ce modèle n'est compatible qu'avec la nomenclature d'USGS. De plus, trois catégories urbaines sont ajoutées manuellement en identifiant les zones de type résidentiel, dense et commercial/industriel. Ce rajout permet de pouvoir mieux détailler l'effet d'UCM par une polymorphie de l'espace urbain. Dans POLAIR3D, la carte d'occupation des sols est extraite de WRF.

Les vitesses de dépôt sec sont précalculées dans POLAIR3D. Avec l'approche standard du modèle de rugosité (Venkatram and Pleim, 1999 and Zhang et al., 2001) ; elles sont calculées en fonction de la catégorie urbaine rencontrée et dépendent de la turbulence atmosphérique, de la taille des particules et de leur masse volumique. La relation entre vitesse de dépôt et catégorie d'occupation des sols permet notamment d'obtenir des vitesses de dépôt plus importantes sur des zones végétalisées, car celles-ci offrent davantage de surface disponible pour les dépôts secs. Par ailleurs, les dépôts secs sont plus importants dans la journée que la nuit, car l'atmosphère est plus turbulente le jour et favorise alors le transfert des polluants vers les surfaces. Par ailleurs, les vitesses de dépôt sont aussi calculées en intégrant la morphologie du bâti de manière implicite en fonction des types de surfaces urbaines (toits, routes et murs), selon la formulation de Cherin et al. (2015). La morphologie du bâti prise en compte ici est similaire à celle des simulations WRF. En détaillant les vitesses moyennes de dépôt sec en fonction des surfaces urbaines, on constate que ces vitesses de dépôt sec sont homogènes entre les surfaces urbaines pour des tailles de particules comprises entre 0,15 et 2,5 µm. Cependant, pour des particules très fines (< 0,15 µm) ou des particules grossières (> 10 µm), la vitesse de dépôt sur les toits est bien plus importante que celle sur la route ou sur les murs. Lorsque les particules sont plus grossières, celles-ci sont davantage sujettes à la sédimentation et donc à un processus gravitationnel vertical qui influence le dépôt sur les toits et sur la route, et beaucoup moins le dépôt sur les murs.

2.1.3. ÉVALUATION DE LA PERFOMANCE DES MODÈLES NUMÉRIQUES

Les simulations météorologiques WRF ont été comparées à la station de mesures de Météo-France à St Maur, qui est la station la plus proche du site expérimental TrafiPollu. Les résultats des simulations montrent des corrélations journalières satisfaisantes pour la vitesse et la direction du vent à 10 m et la température à 2 m. La vitesse moyenne journalière du vent simulée est 3,5 $m.s^{-1}$ tandis que la vitesse observée est 2,4 $m.s^{-1}$. L'erreur quadratique moyenne du modèle est 1 $m.s^{-1}$, ce qui est acceptable compte tenu des valeurs trouvées dans la littérature. Par exemple, Kim et al. (2013) ont obtenu une erreur quadratique moyenne de 1,64 $m.s^{-1}$ pour une configuration du modèle comparable et pour un cas d'étude situé à Palaiseau, en banlieue parisienne. En ce qui concerne les directions de vent, les directions principales sont reproduites par le modèle. Cependant, un décalage moyen sur l'ensemble de la période de 15° vers l'est est remarqué dans les résultats des simulations. Le modèle semble aussi induire une plus grande fluctuation du vent. Le cumul total des pluies sur la période printanière issu des simulations diffère de 55⁄ par rapport aux observations au site

de St Maur. La corrélation avec les observations est très faible, il est donc possible que le modèle sous-estime les dépôts humides.

Les concentrations simulées avec POLAIR3D ont été comparées aux concentrations mesurées sur le site expérimental, excepté pour le cas du zinc qui n'a pas été mesuré. Les valeurs moyennes obtenues sont satisfaisantes pour l'ensemble des polluants, l'erreur quadratique moyenne est inférieure à 50⁄ de la concentration moyenne observée dans le cas du cuivre. Le cas du cuivre est particulièrement satisfaisant, avec une erreur de 5,4 $ng.m^{-3}$, soit 12⁄ d'erreur par rapport à la valeur moyenne observée. Les mesures annuelles (de 2012) réalisées par Airparif pour le benzo[a]pyrène en milieu urbain francilien sont situées entre les valeurs de 0,13 et 0,20 $ng.m^{-3}$. Les mesures en zone ultra-urbaine telles que celles relevées près du boulevard périphérique à la Porte Dorée à Paris correspondent à des mesures trafic et atteignent des niveaux de 0,24 $ng.m^{-3}$. Ainsi, les mesures de benzo[a]pyrène (sur le site TrafiPollu) réalisées sur le site expérimental sont en deçà de ces observations. Toutefois, la période des mesures correspond à la période printanière qui peut avoir des résultats plus faibles que la moyenne annuelle du fait d'une contribution du chauffage résidentielle significative sur la période hivernale. Pour le benzo[a]pyrène, les concentrations simulées sont surestimées d'environ un facteur 2. Cette surestimation est probablement liée aux conditions aux limites, qui *a contrario* des autres polluants viennent du domaine supérieur (Île-de-France) en utilisant les concentrations héritées des domaines supérieurs (émissions EMEP et Airparif). Pour les autres polluants (benzo[b]fluoranthène et de l'indéno[1,2,3-cd]pyrène), les mesures annuelles (de 2012) d'Airparif varient respectivement entre 0,24 – 0,40 $ng.m^{-3}$ et 0,19 – 0,25 $ng.m^{-3}$. La tendance est à une sous-estimation des concentrations (d'un facteur 10) qui peut être attribuée au fait que des conditions aux limites nulles ont dues être choisies en raison de l'indisponibilité de concentrations de fond mais peuvent également être liées à une première couche de simulation trop profonde.

2.1.4. SIMULATION DES DÉPÔTS ATMOSPHÉRIQUES MOYENS AGRÉGÉS

Les flux de dépôts sec, prenant en compte l'hétérogénéité du bâti, et humide sont d'abord présentés sans distinction des surfaces puis par distinction des surfaces. Dans l'implémentation des calculs de dépôt, les vitesses de dépôt sec sont liées à la catégorie urbaine rencontrée et *a fortiori* à la morphologie la décrivant tandis que les coefficients de lessivage par la pluie en sont indépendants. Les flux de dépôt sec sont calculés avec un modèle classique de hauteur moyenne de rugosité qui dépend de l'occupation des sols (Wesely and Hicks, 2000). Comme les dépôts humides ne sont pas sensibles au bâti, nous détaillons dans un premier temps les flux de dépôt sec. Comme nous l'avons déjà mentionné dans la partie concernant les vitesses de dépôt, les zones végétalisées représentent des zones de dépôt sec maximum en raison de la forte disponibilité de surface. De surcroît, les zones de fort dépôt correspondent, hors de ces zones végétalisées, à des zones de fortes émissions. Ces zones sont essentiellement mises en rapport avec les grands axes routiers tels que l'A3, l'A4 et l'A86.

Les flux de dépôt humide sont proches des flux de dépôt sec pour le cuivre indiquant que les évènements pluvieux sont presqu'aussi efficaces que les processus secs pour transférer ces polluants de l'atmosphère vers les surfaces. Il est possible cependant que les dépôts humides simulés sous-estiment les valeurs réelles de ces dépôts, car les hauteurs de précipitation

sous-estimaient celles mesurées à la station de St Maur. En revanche, ce sont les dépôts secs qui dominent pour les trois HAP. Cette différence entre le cuivre et les HAP résulte de leurs granulométries différentes, puisque les HAP sont entièrement compris dans les particules fines (diamètre < 2,5 μm) alors qu'une fraction des métaux est présente dans les particules grossières (diamètre > 2,5 μm).

Les valeurs de dépôt ne peuvent être comparées à des observations car aucune mesure n'a été faite. Toutefois, nous avons identifié dans la littérature des études expérimentales menées à Nantes et à Paris. L'étude située à Nantes est localisée dans un quartier résidentiel que l'on assimile en termes de caractéristiques urbaines (morphologique mais avec peu de trafic) à notre site expérimental d'étude (banlieue sud-est de Paris) pour les années 2010 et 2011. Dans cet article, la même tendance quantitative (i.e., Zn > Cu > BaP > BbF > IP) est observée pour le dépôt sec entre les métaux et les HAP (Percot et al., 2013). Par ailleurs, Ollivon et al. (2002) ont publié des flux de dépôt totaux (sec et humide) de HAP mesurés sur le toit de l'Université Pierre-et-Marie Curie dans le centre de Paris pour la période 1999-2000 pour plusieurs HAP, incluant le benzo[a]pyrène, le benzo[b]fluoranthène et l'indéno[1,2,3-cd]pyrène. Ces mesures sont donc représentatives des flux de dépôt simulés sans distinction des surfaces urbaines. Pour ces HAP, le dépôt total d'avril à juin 2000 était de 80 $ng.m^{-2}.j^{-1}$. Ce résultat a été corrigé en intégrant la réduction des émissions (allant d'un facteur 2,4 à 4) entre 2000 et 2014, ce qui nous amène à un résultat mesuré se trouvant dans une fourchette de 20 à 33 $ng.m^{-2}.j^{-1}$. Le résultat que nous avons obtenu par nos simulations se trouve dans cette gamme de valeurs (i.e., 22 $ng.m^{-2}.j^{-1}$). Si l'on tient compte des incertitudes associées aux mesures de dépôt total, particulièrement pour la fraction sèche, nous pouvons conclure que nos simulations sont cohérentes avec les mesures faites par Ollivon et al. (2002).

2.1.5. SIMULATION DES DÉPÔTS ATMOSPHÉRIQUES PAR TYPE DE SURFACE URBAINE

L'approche classique par hauteur moyenne de rugosité pour calculer les flux de dépôt secs ne permet pas de tenir compte de leur hétérogénéité spatiale dans les zones urbaines. L'approche par canopée urbaine de Cherin et al. (2015) considère les effets du bâti de manière explicite. Ce modèle est utilisé avec une paramétrisation sous-maille, seul le premier niveau est concerné. Ce premier niveau comporte la canopée urbaine et doit être au moins deux fois supérieur à celle-ci. Le développement de zones de recirculation ou de ventilation est pris en compte à l'échelle de la rue en fonction du rapport de la hauteur du bâti sur la largeur des rues. Par exemple, les morphologies trouvées en zone dense à Paris ne permettent pas la formation d'une zone ventilée (les bâtiments sont plus hauts que les rues sont larges) alors que les zones résidentielle ou commerciale/industrielle sont favorables à la création conjointe d'une zone de recirculation à une zone ventilée (généralement plus étendue).

Les flux de dépôts secs ont été modélisés par distinction des types de surfaces urbaines avec le modèle sous-maille de dépôt de Cherin et al. (2015). Le calcul de résistances propres à chaque surface permet de discrétiser le flux de dépôt sec incident (arrivant au niveau du toit de la canopée) sur des surfaces urbaines (toits, routes et murs). L'approche de Cherin et al. est telle que les flux de dépôt dans la canopée sont impactés par le jeu des résistances. Sur toute la hauteur de la canopée, ces résistances sont traitées en série pour une surface

donnée et en parallèle pour des surfaces distinctes. On retrouve depuis l'atmosphère au-dessus de la canopée vers les parois, les résistances aérodynamiques (au-dessus du toit de la canopée et dans la canopée avec notamment un passage dans les zones recirculée/ventilée puis aux abords des parois) et les résistances par diffusion aux abords des surfaces (en proche paroi). Les résistances aérodynamiques sont gouvernées par les processus de transport turbulent et sont bornées par la hauteur sur laquelle se fait le mélange turbulent (hauteurs de mélange extra et intra canopée). Elles suivent un profil exponentiel inversement proportionnel à la vitesse du vent dans la canopée. Les formulations des résistances aérodynamiques en proche paroi pour les routes et les murs (donc les surfaces intra-canopée) sont identiques, à la différence des hauteurs de rugosité de surface prises en compte. La rugosité est 100 fois plus importante aux abords de la route qu'aux abords d'un mur. La formulation de la résistance aérodynamique au niveau des toits est différente des deux premières (car considérée dans la partie extra canopée). Par ailleurs, sa hauteur de rugosité est plus grande (50 fois plus importante à proximité d'un toit que de la route). Les résistances de surface pour les particules sont associées à une résistance de diffusion dans une couche d'air quasi-laminaire, très fine (quelques millimètres), en contact avec la surface, et dépendent des processus de diffusion brownienne mais aussi d'inertie et d'interception. Les hauteurs de rugosité sont tirées de Zhang et al. (2001).

L'approche utilisée ici est à une échelle régionale. Ainsi, le transfert de masse se fait de l'atmosphère au-dessus de la canopée vers les toits et vers l''intérieur de la canopée. Des zones ouvertes, telles que le sont les zones résidentielle ou commerciale/industrielle dans notre cas, représentent des lieux pouvant présenter de fortes concentrations. En conséquence, les résultats montrent que les dépôts secs sur la route ou les murs sont significatifs. En revanche, les zones très étroites (denses) ne sont pas des zones de fortes concentrations car elles ne permettent pas le développement d'une zone de ventilation, donc d'un échange avec l'atmosphère au-dessus de la canopée. Les dépôts sur la route et sur les murs sont moins importants que ceux au niveau des toits. Dans les zones ouvertes, les dépôts secs dans la zone de ventilation sont plus importants que dans la zone de recirculation du fait de cet échange avec le sommet de la canopée. La contribution de chaque zone au dépôt total dans la canopée est respectivement de 65 et 35⁄ . Pour le cas des zones résidentielles, on observe un dépôt plus important sur la route que sur les autres zones. Chaque maille au sol étant remplie par la géométrie de chaque zone urbaine, dans le cas des zones résidentielles, l'espace est plus occupé par des routes que par du bâti. Par ailleurs, dans le cas d'une considération des sources à l'échelle de la rue, les rues-canyons sont au contraire sujettes au confinement et à l'accumulation des polluants. Outre les morphologies urbaines, la distribution en taille des particules affecte les vitesses de dépôt. Les particules grossières (> 10 µm) sont davantage sujettes au dépôt sur des surfaces planes car elles sont affectées par la sédimentation. Par exemple, les dépôts secs de cuivre (émis principalement dans des tailles grossières) se font majoritairement sur les routes, et largement moins sur les murs. En revanche, les dépôts secs de benzo[a]pyrène, principalement émis dans des gammes de taille plus fines (entre 0.15 et 2.5 µm), sont répartis de manière plus homogène entre les surfaces, dont les murs.

En comparant nos résultats obtenus au niveau du toit avec l'approche de canopée urbaine à ceux obtenus avec l'approche standard de rugosité nous obtenons une très faible différence pour le cuivre, tandis que celle-ci est plus remarquable dans le cas du benzo[a]pyrène (24⁄). Cherin et al. (2015) avait conclu que l'utilisation du modèle de canopée urbaine pour les dépôts secs ne produisait pas de grandes différences en comparaison au modèle standard.

Cependant, notre cas d'étude est légèrement différent puisque nous n'utilisons pas la même morphologie, la même météorologie (la période de simulation étant différente), une distribution granulométrique plus étendue, etc. Ainsi, les différences relatives des vitesses de dépôt entre les deux modèles (canopée et standard) que nous obtenons sont discordantes puisque nos résultats montrent des vitesses toujours moins élevées avec le modèle de canopée que celles avec le modèle standard. Inversement, Cherin et al. avait relevé une différence positive (36⁄). Cette différence s'explique en partie par le fait que les vitesses de dépôt varient avec la météorologie, qui affecte les résistances aérodynamiques (via la turbulence atmosphérique) et la taille des particules (via l'humidité relative). Nous avons par ailleurs mis en évidence l'effet du vent au sommet de la canopée pour deux types de condition (vent fort et vent faible) sur les vitesses de dépôt en fonction des tailles de particules et des deux modèles. De la sorte, les différences entre les deux modèles sont significatives pour les particules dont le diamètre est situé entre 5 et 20 µm pour les cas de vents forts, alors qu'elles sont moindres dans les cas de vents faibles. Les particules de diamètre supérieur à 20 µm ne sont pas influencées par les conditions de vent pour les deux modèles du fait de la prédominance de la sédimentation.

2.1.6. CONCLUSION

En conclusion, l'objectif de ce travail était d'évaluer la capacité à simuler les polluants dans un environnement urbain et d'examiner l'effet de la morphologie urbaine sur les flux de dépôt atmosphériques au travers des surfaces urbaines rencontrées. Ce travail représente la première simulation du dépôt de métaux et HAP avec des résolutions fines (4 km x 4 km et 1 km x 1 km) sur l'Île-de-France. Nous avons également présenté ici la première simulation mise en place pour un cas d'étude spécifique localisé en banlieue sud-est de Paris, pour lequel nous avons pu distinguer spatialement le dépôt en fonction des principales surfaces caractérisant un milieu urbain (toits, routes et murs). Du fait du besoin grandissant de connaître les niveaux de pollution en zone urbaine, nous ouvrons les perspectives de ce travail à des sphères d'étude plus larges, telles que la caractérisation de la remise en suspension via un bilan des dépôts sur la chaussée, une meilleure compréhension des contaminations des eaux de ruissellement en fonction des apports de chaque surface, ou encore la prévention de la dégradation pariétale des bâtiments par la quantification du dépôt sur les murs.

2.2. ARTICLE

2.2.1. ABSTRACT

Urban areas can be subject not only to poor air quality, but also to contamination of other environmental media by air pollutants. Here, we address the potential transfer of selected air pollutants (two metals and three PAH) to urban surfaces. To that end, we simulate meteorology and air pollution from Europe to a Paris suburb neighborhood, using a four-step one-way nesting approach. The meteorological and air quality simulations use urban canopy sub-models in order to better represent the effect of the urban morphology on the air flow, atmospheric dispersion, and deposition of air pollutants to urban surfaces. This modeling approach allows us to distinguish air pollutant deposition among various urban surfaces

(roofs, roads, and walls). Meteorological model performance is satisfactory, showing improved results compared to earlier simulations, although precipitation amounts are underestimated. Concentration simulation results are also satisfactory, with a fractional bias < 0.5 for all metals, except benzo[a]pyrene, whose continental emissions may be overestimated and benzo[b]fluoranthene and indeno[1,2,3,cd]pyrene, whose boundary conditions may be underestimated. PAH deposition fluxes are consistent with earlier measurements obtained in the Greater Paris region. The model simulation results suggest that both wet and dry deposition processes need to be considered when estimating the transfer of air pollutants to other environmental media. Dry deposition fluxes to various urban surfaces are mostly uniform for PAH, which are entirely present in fine particles. However, there is significantly less wall deposition compared to deposition to roofs and roads for trace metals, due to their coarse fraction. Meteorology, particle size distribution, and urban morphology are all important factors affecting air pollutant deposition. Future work should focus on the collection of data that can be used to evaluate the performance of atmospheric models for both wet and dry deposition with fine spatial resolution.

2.2.2. INTRODUCTION

High levels of air pollution are recorded in urban areas, which affect public health via inhalation exposure and may also affect the contamination of other environmental media (water, soil, building surfaces) via atmospheric deposition. In an urban area, air pollution may affect all surfaces, from roofs to walls, roads, vegetation and water bodies, albeit to different extents depending on surface type, pollutant type, and environmental conditions. Because some pollutants are transported over large distances, it is essential to account not only for local urban pollution sources, but also for the long-range transport of air pollution, when assessing air pollution in urban areas. We focus here on air pollution in Greater Paris, a large European urban area that is affected by both local emissions and imported air pollution (Bressi et al., 2014). We study here the atmospheric concentrations and deposition on urban surfaces of five trace elements present in the particulate phase: three polycylic aromatic hydrocarbons (PAH), which are benzo[a]pyrene (BaP), benzo[b]fluoranthene (BbF), and indeno[1,2,3,cd]pyrene (IP), and two metals, which are copper (Cu) and zinc (Zn). PAH are persistent organic pollutants that are highly toxic for human health and the environment. BaP is considered to be the most toxic and is known to be carcinogenic; it is used as the reference in terms of toxicity equivalence factors (TEF = 1). The TEF represents a ratio of the toxicity of a PAH congener to that of BaP. Thus, BbF and IP are considered to be ten times less toxic than BaP (TEF = 0.1), but still represent a potential risk for human health according to the International Agency for Research on Cancer (IARC). PAH result from the incomplete combustion of fuels and biomass. Airparif (2013) assessed that, in 2010 in Greater Paris, PAH were mainly emitted by residential heating (66⁄) and traffic (25⁄) (Airparif is the air quality agency for Greater Paris). However, with warmer weather, emissions from residential heating are not as important and traffic becomes the major PAH source. PAH are principally emitted in the fine particle fraction. In urban areas, copper (Cu) is mainly emitted by traffic, particularly via the brake wear from vehicles. It is considered to be toxic to aquatic organisms. Its main particle size range is coarser than that of PAH, since its emissions result from abrasion processes. Zinc is also mainly emitted by traffic and especially by diesel-engine car and is also present in both fine and coarse particles.

The need to assess the contribution of air pollution to the contamination of other environmental media is growing, in particular for trace pollutants, such as metals and persistent organic pollutants (POP). The interactions between the atmosphere and other media has been studied at regional scales for a variety of air pollutants, but is still in its infancy for urban environments. The ability to model environmental processes in urban areas is challenging because the complex architecture affects the air flow, pollutant dispersion, which may induce an increase of pollution at the street level, and atmospheric deposition processes. Atmospheric transport of trace metals at the European scale (horizontal resolution of about 100 km) has been previously studied by Roustan et al. (2006) using POLAIR3D, a chemical-transport model (CTM) of the Polyphemus air quality simulation platform. Several metals (lead, Pb; cadmium, Cd; and mercury, Hg) were modeled (including chemical transformations for Hg) and compared to measurements of the European Monitoring and Evaluation Programme (EMEP) for concentrations and deposition fluxes. In those simulations, deposition fluxes were calculated over large areas and were not resolved in terms of surfaces. Quéguiner et al. (2009) performed simulations of Pb and Cd concentrations and deposition in a Mediterranean region also with POLAIR3D with a spatial resolution of 50 km. The focus was on the contamination of soils and vegetation. Simulations are performed on a routine basis by EMEP with the GLEMOS platform to quantify the intercontinental transport of some metals (Pb, Cd, and mostly Hg) and their contribution to regional pollution at various scales, from global (50 km x 50 km) to local scales (5 km x 5 km) (Shatalov et al., 2015). In the U.S., air toxic simulations have been conducted with the CMAQ modeling system at a continental scale with a horizontal resolution of 36 km for trace metals such as Pb, manganese (Mn), chromium (Cr), nickel (Ni), and Cd (Hutzell and Luecken, 2008). A comprehensive model performance evaluation was conducted for atmospheric concentrations; atmospheric deposition is simulated by CMAQ, but it was not reported. For PAH, Quéguiner et al. (2010) used POLAIR3D with the same spatial resolution as Roustan et al. (2006) to simulate BaP deposition over southeastern France with a simple first-order atmospheric chemical decay. Their focus was again on the contamination of soils and vegetation. An empirical assessment of the urban atmospheric deposition of several metals (wet and dry) in an urban neighborhood (Nantes, France) has been conducted by Percot et al. (2013, 2016) using measured ambient concentrations, particle size distributions, and wet deposition fluxes in combination with dry deposition velocities estimated from laboratory and field experiments (Roupsard et al., 2013). The metals studied included arsenic (As), Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, vanadium (V), and Zn. Dry deposition was resolved by surface type, but wet deposition was estimated to dominate total atmospheric deposition for all metals except As.

Here, we address the concentrations and atmospheric deposition of trace metals and PAH in an urban environment, namely Greater Paris. The objective is to evaluate our ability to simulate atmospheric concentrations and deposition, and to assess the effect of the urban morphology on atmospheric deposition. In particular, we present a parameterized representation of building morphology to assess its effects on air dispersion and deposition to various urban surfaces. To that end, we use the POLAIR3D CTM, in combination with a meteorological model, the Weather Research and Forecasting model (WRF). Urban sub-models are used in both models. We present first descriptions of the meteorological and air quality models, along with the input data used for the simulations. Next, the results of the model performance are presented for meteorology, atmospheric concentrations and, to the extent possible, atmospheric deposition. Finally, the effect of taking into account urban morphology on atmospheric deposition is discussed.

2.2.3. DESCRIPTION OF MODELS AND INPUT DATA

2.2.3.1 Meteorological modeling

Meteorological simulations were conducted with the Advanced Research Weather (ARW) version of WRF (ARW-WRF v3) (Skamarock et al., 2008). ARW-WRF will simply be referred to as « WRF » hereafter. The simulation period ranges from 03/26/2014 to 06/28/2014. Four nested domains with one-way nesting were used. The first outermost domain (D01) covers western Europe (39°N – 56°N; -5°E - 15°W) with a horizontal grid resolution of about 50 km x 50 km. The second domain (D02) corresponds to northern France (44.7°N – 50.7°N; -1°E - 7°W) with a horizontal grid resolution of about 15 km x 15 km. The third domain (D03) covers the Greater Paris region (48.3°N – 49.1°N; 2°E – 2.8°W) with a horizontal grid resolution of about 4 km x 4 km. The innermost domain (D04) covers the neighborhood of interest (48.7°N – 48.9°N; 2.4°E – 2.7°W) with a kilometric grid resolution. Hereafter, the D04 domain is referred to as the TrafiPollu neighborhood, since this work was part of the eponymous research project (more details about the project are available here: https://sites.google.com/site/trafipollu/). The vertical extent of the modeling domain covers the entire troposphere and ranges from the Earth's surface up to 100 mb (~15 km altitude); it includes 30 layers with finer resolution near the surface. The impact of urbanization on the atmospheric flow is taken into account over the two inner domains (D03 and D04). The largest domain (D01) is constrained by NCEP re-analyzes data for initial and boundary conditions (80 km x 80 km). The results of the model simulation over the largest domain are used as boundary conditions for the next domain and so on till the innermost domain. To minimize error propagation, simulations were reset every 6 days, with one day of spin-up. The main objective here is to assess the performance of WRF with the selected parameterizations before using the WRF output for the POLAIR3D simulations.

Physics options in WRF follow mostly those selected by Kim et al. (2013) for their Greater Paris simulations. The radiation schemes control the surface radiative fluxes for long- and short-wave radiation. The parameterization of those schemes corresponds respectively to Mlawer et al. (1997) and Dudhia et al. (1989). The selected surface layer scheme, which diagnoses the exchange coefficients and the heat transfer near the surface, is MYNN; it is based on a Monin and Obukhov (1954) similarity theory scheme (Nakashini and Niino, 2006). The land surface scheme calculates the surface temperature and humidity and requires land-use information (vegetation, urban areas, surface water bodies, etc.). Over the two outermost domains, D01 and D02, land use was obtained from the U.S. Geological Survey (USGS) database, which includes 30 categories of 30'' resolution (~1 km). Each category is assigned summer/winter values of albedo, emissivity, roughness height, etc. Over the two innermost domains, D03 and D04, land use was obtained from the CORINE database (23 categories), which is more precise (250 m for spatial resolution) and more recent (2006) than the USGS database, which dates back to 1993. Raster data are available at http://www.eea.europa.eu/data-and-maps/data/corine-land-cover-2006-raster. Since WRF is only compatible with the USGS classification, the CORINE land use categories were converted to the 30 USGS categories. In the Greater Paris region, differences between USGS and CORINE have been identified by Kim et al. (2013), who showed that the urban category from CORINE is extended farther southwards and westwards, thereby reflecting the spreading urbanization in those areas. Also, three urban categories were added to describe dense, residential, and industrial/commercial areas. The land surface scheme is NOAH. It takes into account temperature and soil moisture. NOAH data are not directly observed data but are

extracted from model reanalyses (precipitation, radiation, surface, temperature, humidity/moisture, and wind). The planetary boundary layer (PBL) sub-model computes fluxes in the boundary layer (heat, humidity, and momentum) and vertical turbulent diffusion. To be consistent with the surface layer scheme, the PBL is also MYNN type. For the grid-resolved precipitation, the selected parameterization is the Grell-Devenyi Ensemble (Grell and Devenyi, 2002). The cumulus scheme solves the heat, cloud/moisture and surface precipitation at the subgrid scale. However, it is only needed for horizontal grid-spacing greater than 10 km, i.e., only for D01 and D02. The microphysics of clouds affects the heat budget, atmospheric humidity, and surface precipitation. The microphysics parameterization is WSM-3 (Hong et al., 2004). The precipitation rate corresponds to the sum of cumulated precipitation over 1 h (i.e., the time step used for the simulations) calculated by the cumulus for the D01 and D02 domain. The grid-resolved microphysics schemes were also used for the D03 and D04 domains. Over the D03 and D04 domains, meteorological simulations were conducted with an urban canopy model (UCM). UCM is a single-layer model, which includes shadowing from buildings, reflection of short- and long-wave radiation, a wind profile in the canopy layer, and a multi-layer heat transfer equation for roof, wall, and road surfaces (Kusaka et al., 2001). This urban canopy model helps to better characterize the meteorological situations by considering geometric and energy parameters within the urban domain. Loridan et al. (2010), Wang et al. (2011) and Loridan and Grimmond (2012) showed that those features have a significant effect on energy and momentum transfer between urban surfaces and atmosphere. It is recommended for best UCM performance to select input parameters based on observations or validated databases (Tewari et al., 2007). Kim et al. (2013) showed that taking into account UCM with CORINE land use leads to better results in the Greater Paris region, in particular for wind speed.

Table 2.1 summarizes the UCM morphologic parameters used in this study. UCM is combined with the detailed urban use map of the region of interest (CORINE), which here included only one urban category (called « artificial surfaces »). UCM is also coupled with the NOAH land surface model. According to Pigeon et al. (2014), 5 building types describe the residential Parisian park in terms of historical (e.g., Haussmann) apartment buildings, post-war apartment buildings, high-rise buildings, old individual houses, and modern individual houses. Each type of building is associated with characteristic average heights: 21.5, 33.5, 110.2, 5.6, and 2.72 m, respectively. The CORINE database was modified to include at least three additional urban classes representing dense, residential, and industrial/commercial areas. Data relevant to the suburbs (in particular, the TrafiPollu neighborhood) are available in the BDTOPO® database; they correspond to the residential area category. This database provides information about the average height of suburban buildings (9 m), which is lower than the average height in the heart of Paris given by Pigeon et al. (2014). This observation is linked to architectural differences between Haussmann apartment buildings, which are about 6 floor high and suburban residential buildings that rarely exceed 2 or 3 floors (except for some isolated apartment blocks). For the dense area category, the heights of the 5 building types described by Pigeon et al. (2014) were adapted based on local building information. The building height of industrial and commercial areas was chosen according to values found on a construction plan website (Cimbéton, 2008). According to the construction index (Ic), which is defined as the ratio of the building height ($H_{building}$) over the street width (W_{street}), a street is large if this ratio is less than 1. In our case, the residential and commercial/industrial areas correspond to semi-open areas (Ic < 1), while the dense areas are typical of street-canyons (Ic

> 1). One advantage of UCM is that it includes the anthropogenic heat release in the total sensible heat flux over a day. The diurnal variation of anthropogenic heat flux in May is computed based on the diurnal cycle in the local emission inventory for human activities provided by Airparif and is taken from Kim et al. (2013). Other parameters in Table 2.1 are based on Kusaka et al. (2001).

The simulated area is highly urban. The artificial surface area occupies 95⁄ and the natural surface area only 5⁄ of the overall model domain area (D03). The surrounding « rural » areas are assumed to be only natural surfaces. Figure 2.1 shows the spatial distribution of land-use categories over D03 and the associated urban ratio.

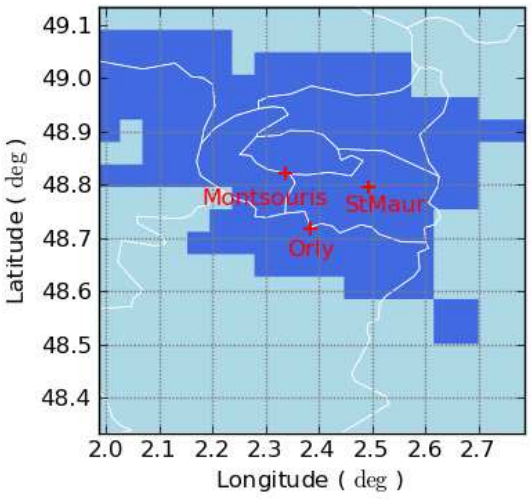


Figure 2.1 - UCM ratio over the Greater Paris domain (D03) with dark blue grid cells corresponding to urban areas having 95⁄ of artificial surfaces and 5⁄ of vegetation. The red crosses symbolize the location of meteorological stations to evaluate the WRF simulations.

Table 2.1 - Geometric and heat transfer parameters used for UCM.

Parameter	Value
Building height (Dense)	27 m
Building height (Residential)	9 m
Building height (Industrial/Commercial)	10 m
Roof* width (Dense)	70 m
Roof* width (Residential)	15 m
Roof* width (Industrial/Commercial)	120 m
Road width (Dense)	20 m
Road width (Residential)	20 m
Road width (Industrial/Commercial)	65 m
Artificial area fraction for an urban grid	0.95
Vegetation area fraction for an urban grid	0.05
Diurnal maximum of the anthropogenic heat flux	70 $W.m^{-2}$
Diurnal profile of the anthropogenic heat flux	see Kim et al. (2013)
Surface albedo of roof, road, and wall	0.20
Surface emissivity of roof, road, and wall	0.97
Volumetric heat capacity of roof, road, and wall	2.01 x 106 $J.m^{-3}.K^{-1}$
Thermal conductivity of roof, road, and wall	2.28 $W.m^{-1}.K^{-1}$

* Building block width

2.2.3.2 Atmospheric concentrations and deposition modeling

a. Overview of the model

The POLAIR3D/Polyphemus three-dimensional (3D) CTM was used to simulate the ambient concentrations and atmospheric deposition of selected trace metals and PAH. The simulated trace metals are Cu and Zn and the PAH are BaP, BbF, and IP. POLAIR3D has been described elsewhere (Boutahar et al., 2004; Roustan et al., 2006; Queguiner et al., 2009, 2010). In these simulations, only transport processes were simulated since the chemical species can be assumed to be chemically inert. The simulated processes include emissions, advective and convective transport, turbulent dispersion, dry deposition, and wet deposition.

The same modeling domains as defined for WRF were used for the POLAIR3D simulations. The innermost domain (D04) covers the TrafiPollu neighborhood; D04 covers an area of 961 km² with a 1 km horizontal resolution. The vertical resolution consists of 10 layers with finer resolution near the surface. A first simulation is performed with a first layer between 0 and 15 m for ambient concentrations as presented in section 2.2.3.4. A second simulation is performed with a deeper first layer (0 - 65 m) to accommodate the urban canopy for deposition as presented in section 2.2.3.5. The period of simulation remains the same, from 03/26/2014 to 06/28/2014.

b. Emissions

Emissions for the outermost domains (D01 and D02) were only available for BaP. Thus, BaP simulations were conducted for all four domains with one-way nesting. For the European (D01) and northern France (D02) domains, the European BaP emission inventory from EMEP, which was available for 2012 with a horizontal resolution of 50 km, was used. For the other four species, simulations were conducted only for the two innermost domains, using prescribed boundary conditions for D03. Simulations over the two innermost domains, i.e., D03 for the Greater Paris region and D04 for the TrafiPollu neighborhood, used the 1 km resolution Airparif emission inventory of 2012. In the Airparif emission inventory, data are classified in 205 Standardized Nomenclature for Air Pollutants (SNAP) categories, which are subcategories of the 11 main standard emitted source categories, with a specification for some sources of the type of fuel used. In this study, we are particularly interested in transportation sources. Temporal profiles were applied to restitute an emission variation over the year, the week, and the day. A particle size distribution was also applied to each species as indicated in Table 2.2. PAH species are entirely present within the fine mode (i.e., particles less than 2.5 μm in diameter), whereas fractions of the trace metals are present in the coarse mode. Those distributions are based on data from Allen and al. (2001), Zielinska et al. (2004), Samara et al. (2005) and Percot et al. (2013).

Table 2.2 - Particle size distributions of the simulated species.

Size range (diameter in µm)	Zn	Cu	PAH
0.01 – 0.04	12.5/	5.75/	0/
0.04 – 0.15	12.5/	5.75/	25/
0.15 – 0.625	12.5/	5.75/	50/
0.625 – 2.5	30.5/	31.25/	25/
2.5 – 10	20.0/	31.5/	0/
10 – 40	12.0/	20.0/	0/

c. Dry deposition velocities

Two model simulations were conducted: with and without distinction of urban surfaces for dry deposition. Dry deposition velocities are computed as a function of the urban category encountered, atmospheric turbulence, particle size and density. The formulation used to compute dry deposition velocities originates from Venkatram and Pleim (1999) and from Zhang et al. (2001). Figure 2.2 presents, over the whole D03 domain and simulation period, the average dry deposition velocities computed as a function of particle size for this study with a classical roughness-length model (Wesely and Hicks, 2000). The relationship between deposition velocity and land-use category leads to greater deposition velocities over vegetated areas since they offer greater available surface areas for dry deposition. Dry deposition is greater during the day than at night due to greater atmospheric turbulence during daytime, which favors vertical pollutant transfer toward the ground. Deposition velocities were also computed as a function of urban surfaces (roof, roads and walls) according to the formulation of Cherin et al. (2015), which includes some implicit treatment of building morphology. The building morphology taken into account here is the same as the one used in the WRF meteorological simulations (see Table 2.1). Other parameters for the application of the urban canopy deposition and the roughness-length models are here specified for the period considered and for the sake of clarity only for the residential area. The roughness lengths used are respectively: $z_{0roughness\ model}$ =0.8 m (Zhang et al., 2001), z_{0roof} = 0.5 m, z_{0wall} =0.0001 m and $z_{0street}$ = 0.01 m. The displacement height is 6 m and the portion of the downwind wall that lies in the recirculation region is 4.7 m.

The dry deposition velocities averaged over the urban area and the simulated period are presented in Table 2.3 by surface type and by particle size section. Dry deposition velocities are similar among surfaces for particle sizes comprised between 0.15 and 2.5 µm. However, for finer particles (< 0.15 µm), dry deposition velocities are within a factor 5 to 7 when comparing roofs to roads and walls, while there are similar between roads and walls. For the coarse mode (> 2.5 µm), deposition velocities for roofs and roads are within the same factor, whereas they differ by an order of magnitude or more when comparing roofs (or roads) and walls. This result is due to the greater influence of the sedimentation process for the coarse

particles (diameter > 2.5 µm) and, therefore, influences deposition to roofs and roads, but not to walls.

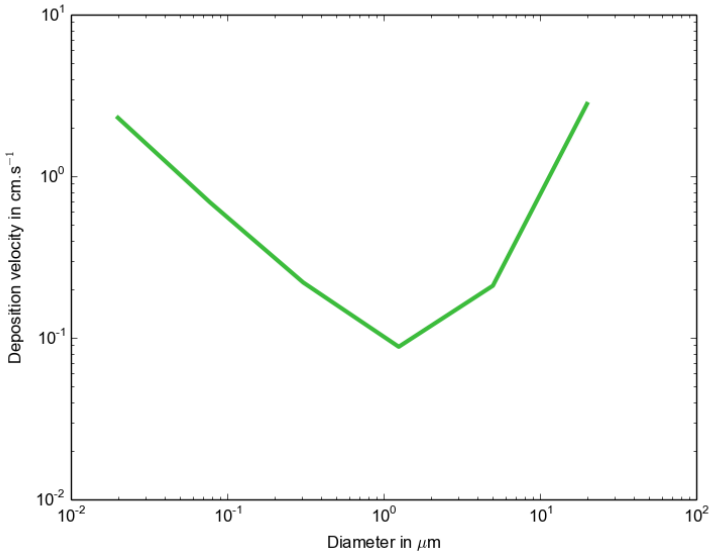


Figure 2.2 - Dry deposition velocity as a function of particle diameter averaged over the innermost domain.

Table 2.3 - Dry deposition velocities as a function of urban surfaces averaged over the urban area and the simulation period with the parametrized urban canopy model.

Size section (diameter range in µm)	Deposition velocity (m.s^{-1})		
	Roofs	Roads	Walls
0.01 – 0.04	3.4 x 10^{-3}	7.7 x 10^{-4}	4.6 x 10^{-4}
0.04 – 0.15	1.1 x 10^{-3}	6.0 x 10^{-4}	4.2 x 10^{-4}
0.15 – 0.625	3.8 x 10^{-4}	3.9 x 10^{-4}	3.2 x 10^{-4}
0.625 – 2.5	1.8 x 10^{-4}	2.5 x 10^{-4}	1.9 x 10^{-4}
2.5 – 10	7.1 x 10^{-4}	8.1 x 10^{-4}	8.7 x 10^{-5}
10 – 40	1.1 x 10^{-2}	8.7 x 10^{-3}	3.4 x 10^{-4}

d. Precipitation scavenging coefficients

Scavenging coefficients are computed as a function of rain intensity, raindrop diameter, collection efficiency, and particle size distribution. The formulation to compute scavenging coefficients is based on Slinn (1983). Figure 2.3 presents the average scavenging coefficients computed for this study as a function of particle size. For particles with a diameter less than 0.1 µm, Brownian diffusion is the most efficient collision mechanism for scavenging. For particles with a diameter greater than 1 µm, the main mechanism is inertial collection and the efficiency of the collision increases with particle size and with rainfall intensity. For particles between 0.1 and 1 µm, the profile highlights the Greenfield gap (Greenfield, 1957) and corresponds to the particles that are the least washed out.

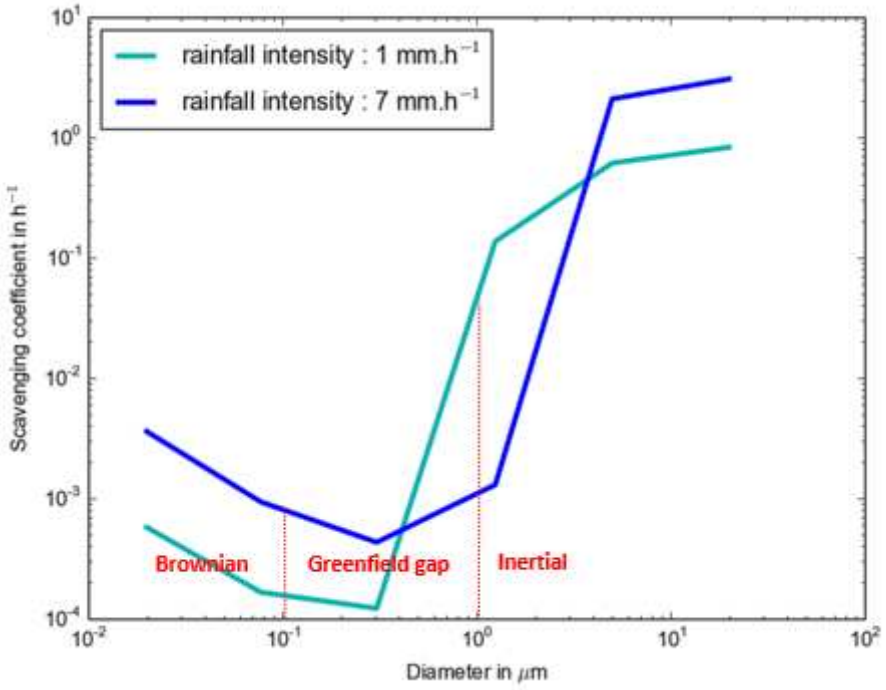


Figure 2.3 - Scavenging coefficient as a function of particle diameter averaged over the innermost domain (D04) and the simulated period (26 March – 29 June 2014).

e. Boundary conditions

Rural background concentrations are obtained from the European observation database (EBAS) for two monitoring stations, Peyrusse Vieille in southwestern France and Revin in northeastern France (Figure 2.4). Boundary concentrations are required for the pollutants that could not be simulated at a larger scale. Thus, except for BaP, data were averaged over the years available prior to 2014 for those two monitoring stations. They are implemented as a uniform value at the four boundaries of the domain for Cu and Zn (Table 2.4). Since there is no station hosting EBAS value for the two PAH (BbF and IP) near our modeling domain (D03), the model was forced by default with null boundary conditions.



Figure 2.4 - Locations of the two monitoring stations from the EBAS database: Peyrusse-Vieille and Revin (source : google earth).

Table 2.4 - Averaged background concentrations implemented in POLAIR3D.

Pollutant	Background concentration ($ng.m^{-3}$)
Zn	12.0
Cu	2.1
BaP*	2.2×10^{-2}
BbF	0
IP	0

* averaged concentration; actual boundary concentrations are spatially-distributed and obtained from the D02 simulation.

f. Land-use

For the two outermost domains, D01 and D02, land-use cover was obtained from the Global Land Cover 2000 Project (GLC2000). GLC2000 is provided by the Joint Research Centre (JRC) of the European Commission's Science and knowledge service. It is available at http://forobs.jrc.ec.europa.eu/products/glc2000/data_access.php. The spatial resolution of the input data is about 1 km and the domain covers the world. Land use is described over 23 categories. For the two innermost domains, Greater Paris (D03) and the TrafiPollu neighborhood (D04), the land-use cover used corresponds to the first-level CORINE data with a spatial resolution of 250 m. As mentioned above, CORINE provides finer and more recent

information than USGS, but CORINE land-use categories were converted into USGS categories for the WRF simulations (the CORINE resolution is preserved). Urban areas are described in both classifications by only one category, titled “artificial surfaces”. In POLAIR3D, the land-use map is extracted from WRF and the incoming spatial resolution is aggregated with respect to the resolution of the simulation grid. Figure 2.5 shows the spatial distribution of land-use categories for D04. The land-use categories are used to spatially distribute emissions of some source categories, but they are also used to compute dry deposition velocities over urban surfaces, as mentioned above.

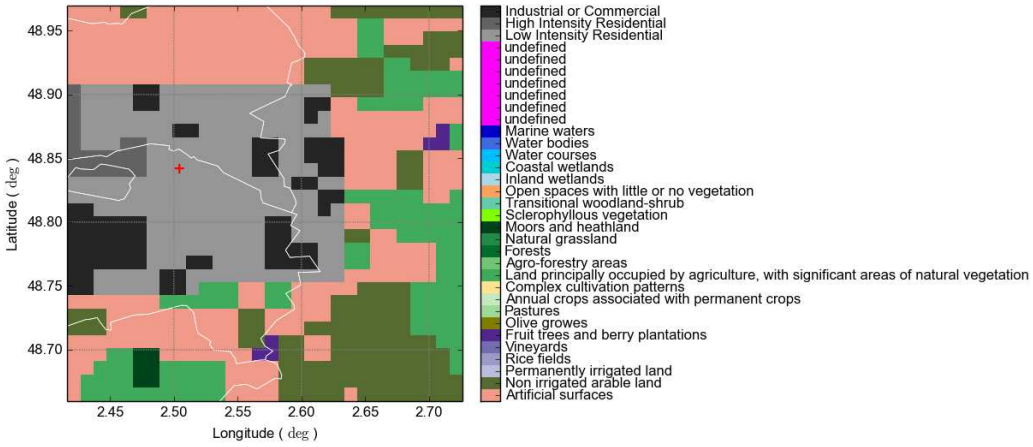


Figure 2.5 - Land-use map for D04 (TrafiPollu neighborhood) with the USGS nomenclature but with CORINE spatial resolution. The red cross illustrates the TrafiPollu experimental site.

2.2.3.3 Performance evaluation of the meteorological simulations

We place our emphasis here on the D03 domain and compare simulation results to observations from the Météo-France monitoring network at 3 selected sites (cf. Figure 2.1): Orly (suburban), St Maur (suburban), and Montsouris (urban). St Maur is the main station of interest, because it is located within 10 km of the TrafiPollu air quality monitoring station and we will evaluate the air quality simulation results at that station. We evaluate WRF performance with 2280 hourly observations (from 03/26/2014 to 06/28/2014) by examining wind speed, wind direction, temperature, and precipitation. We present here only data extracted from D03, because it is the domain with the finest resolution among the four modeling domains that contains all three Météo-France monitoring sites used here. Data were extracted for each 6-day period excluding the 1 day spin-up periods. The analysis of the meteorological WRF fields is done here based on POLAIR3D preprocessing outputs obtained from Polyphemus (Mallet et al., 2007), since they correspond to the meteorological fields used for the air quality simulations. This preprocessing reads and adds all direct WRF outputs into one file for each state variable with a simple interpolation of vertical levels. The performance evaluation follows that of Kim et al. (2013). The statistical indicators used in this study (Table 2.5) are, therefore, the root-mean square error (RMSE), the fractional bias (FB), and the correlation as defined for example by Yu et al. (2006). Kim et al. (2013) obtained a RMSE of 2.9 °C for temperature and a RMSE of 1.6 $m.s^{-1}$ for wind speed at another suburban site in Greater Paris (Palaiseau); we obtain slightly better performance here with a range of 0.2 – 1.1 °C and 0.8 -1.1 $m.s^{-1}$ among the three stations for temperature and wind speed,

respectively. We obtain correlation coefficients between 0.6 and 0.9, as compared to values between 0.3 and 0.7 obtained by Kim et al. (2013) for temperature and wind speed. Wind direction was evaluated by comparing observed and simulated wind roses (Figure 2.6). There is an angular difference of about 15° to the east between observations and simulations. Figure 2.7 presents simulated and observed precipitation amounts. These uncertainties will be kept in mind when modeling atmospheric wet deposition to urban surfaces. We obtain greater uncertainties for precipitation intensities for hourly values; correlation is only 0.1 and the fractional bias (FB) is 0.6 (Kim et al., 2013, did not evaluate WRF performance for precipitation).

Table 2.5 - Statistical performance of the meteorological simulation at three stations.

Montsouris					
	Mean observation	Mean WRF simulation	FB	RMSE	Correlation coefficient
Wind speed	2.9 $m.s^{-1}$	4.0 $m.s^{-1}$	+0.3	1.1 $m.s^{-1}$	0.6
Rain	0.09 $mm.h^{-1}$	0.05 $mm.h^{-1}$	-0.6	0.04 $mm.h^{-1}$	0.1
Temperature	15.0 °C	15.2 °C	+0.02	0.2 °C	0.9
Orly					
	Mean observation	Mean WRF simulation	FB	RMSE	Correlation coefficient
Wind speed	3.4 $m.s^{-1}$	4.2 $m.s^{-1}$	+0.2	0.8 $m.s^{-1}$	0.7
Rain	0.09 $mm.h^{-1}$	0.05 $mm.h^{-1}$	-0.6	0.04 $mm.h^{-1}$	0.1
Temperature	14.3 °C	15.4 °C	+0.07	1.1 °C	0.9
St Maur					
	Mean observation	Mean WRF simulation	FB	RMSE	Correlation coefficient
Wind speed	3.1 $m.s^{-1}$	4.0 $m.s^{-1}$	+0.3	0.9 $m.s^{-1}$	0.7
Rain	0.09 $mm.h^{-1}$	0.05 $mm.h^{-1}$	-0.6	0.04 $mm.h^{-1}$	0.1
Temperature	15.0 °C	15.2 °C	+0.02	0.2 °C	0.9

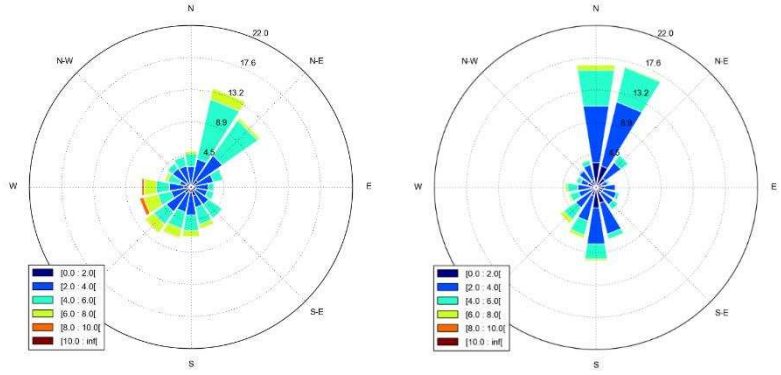


Figure 2.6 - Hourly mean wind directions observed (left) and simulated (right) with frequency (in ／) of each wind speed range at the St Maur station at an altitude of 10 m.

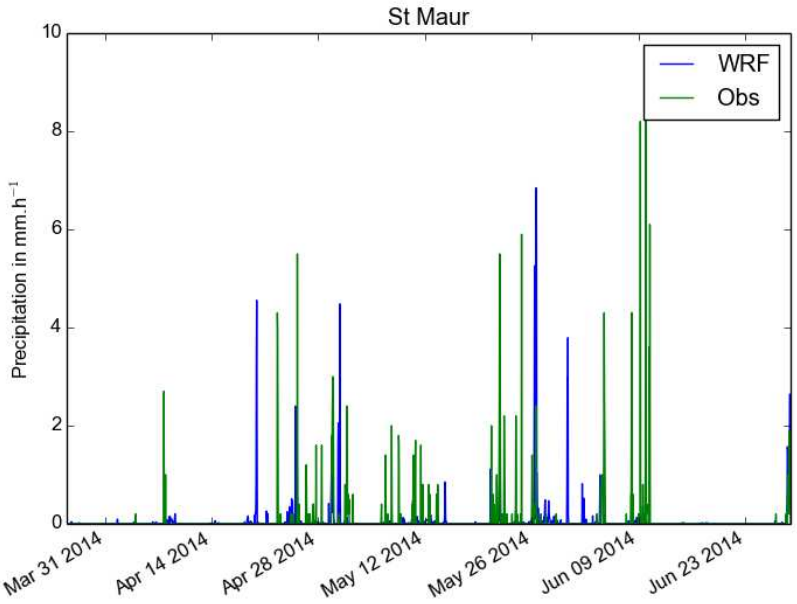


Figure 2.7 - Observed (in green) and simulated (in blue) precipitation in mm.h^{-1}.

2.2.3.4 **Comparison of simulated concentrations to measurements**

Concentrations presented in this section are simulated with a first layer at 15 m. However, simulations have been also performed with a deeper first layer at 65 m for treating dry deposition over the urban canopy. The corresponding results are presented in the supplementary material (Annexe E.).

Simulated concentrations are compared to observed concentrations at the experimental site located on boulevard Alsace-Lorraine (TrafiPollu neighborhood) in the TrafiPollu neighborhood, a divided boulevard with average traffic of 19 000 vehicles/day. No measurements were available for Zn. The agreement between the simulated and observed

concentrations is very good for Cu, but varies among the PAH (Table 2.6). The average simulated and observed concentrations differ by factors of 2.7, and 10 for BaP, BbF, and IP, respectively. Annual observations collected by Airparif (2013) for BaP in Greater Paris in suburban areas range between 0.13 and 0.20 $ng.m^{-3}$. Observations at the Porte Dorée traffic station near the Parisian ring road (boulevard périphérique) are greater with an average concentration of 0.24 $ng.m^{-3}$. Thus, observations at the experimental site are less than other annual observations in the Greater Paris area and, although the model simulation is commensurate with annual observations in the Greater Paris area, it significantly overestimates the experimental site observations. A possible explanation is the time lag of two years between the emission inventories and the period being studied here. Indeed, the Airparif BaP observations decrease by a factor 2 from 2011 to 2014. The EMEP inventory might include data from 2011 in the 2012 inventory used here. Also, observations at the experimental site are measured during the spring period when PAH emissions are lower (no wood burning for residential heating) and the Airparif annual concentrations should, therefore, be slightly greater. No measurements in Greater Paris are available from Airparif for the other pollutants. The underestimation for BbF and IP is assigned, at least in part, to null boundary conditions due to the unavailability of observed background concentrations. For BaP, the overestimation could be related to the boundary conditions that come from the upper simulated domain (TrafiPollu neighborhood) by using legacy concentrations of the upper domains (using EMEP emissions). The spatial distribution maps of concentrations highlight the emission hot spots (Figure 2.8), which are typically high traffic areas (Figure 2.9 to Figure 2.13). Indeed, the maximum concentrations are spatially correlated (r = 0.94 for Cu) to the corresponding maximum emissions, in particular where there are important roadways.

Table 2.6 - Mean simulated and observed concentrations (all particle sizes aggregated) for the spring period (26 March–29 June 2014) at the experimental site.

Pollutant	Zn	Cu	BaP	BbF	IP
Mean simulated concentration ($ng.m^{-3}$)	76.9	42.6	0.22	0.03	0.01
Mean observed concentration ($ng.m^{-3}$)	-	42.1	0.08	0.20	0.10
RMSE ($ng.m^{-3}$)	-	+0.5	+0.14	-0.17	-0.09
FB	-	+0.01	+1.3	+1.5	+1.6

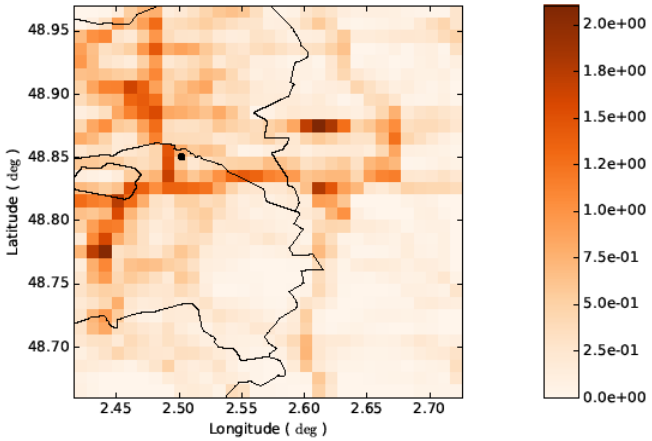


Figure 2.8 - Map of mean emissions of Cu in g.h $^{-1}$ over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station

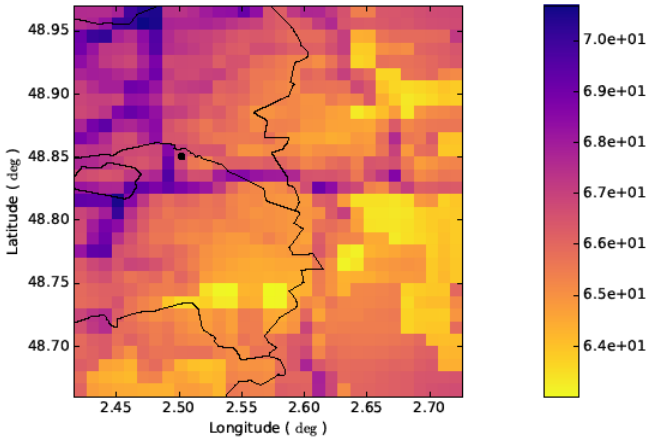


Figure 2.9 - Map of mean simulated concentrations of Zn in ng.m^{-3} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.

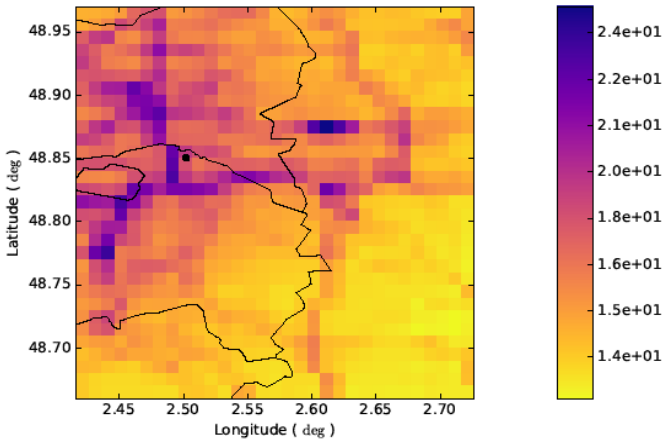


Figure 2.10 - Map of mean simulated concentrations of Cu in ng.m^{-3} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.

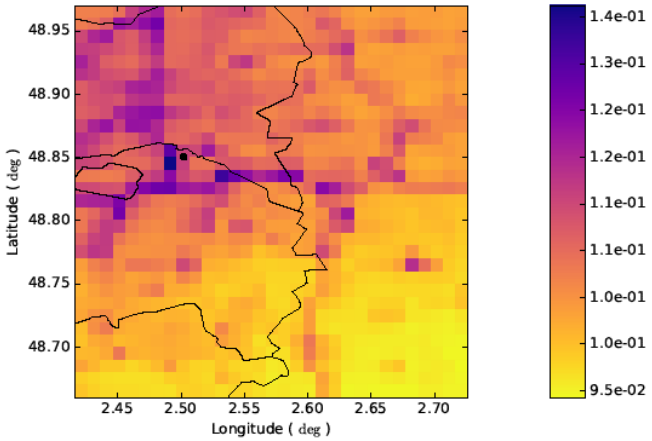


Figure 2.11 - Map of mean simulated concentrations of BaP in ng.m^{-3} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.

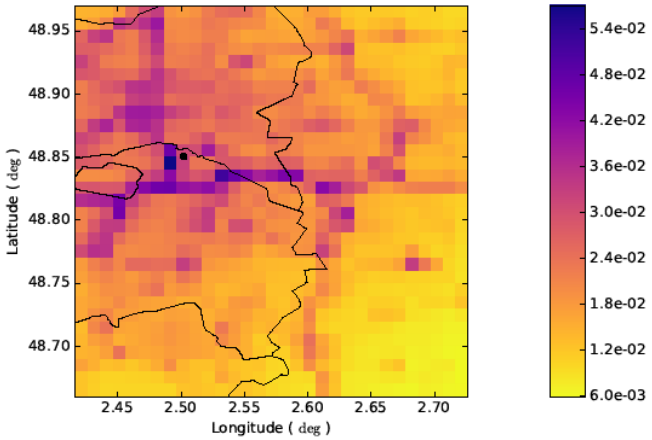


Figure 2.12 - Map of mean simulated concentrations of BbF in ng.m^{-3} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.

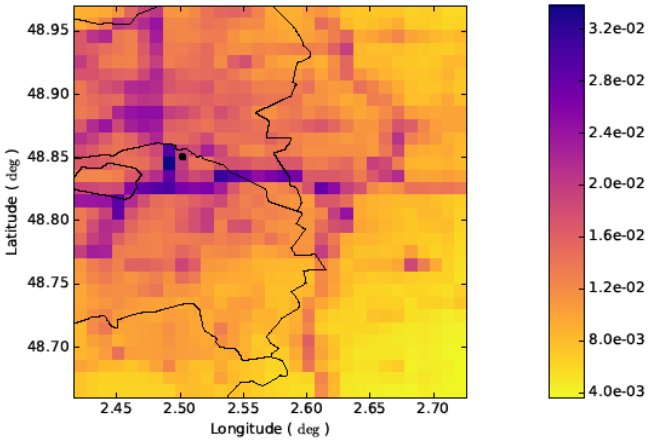


Figure 2.13 - Map of mean simulated concentrations of IP in ng.m^{-3} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.

2.2.3.5 Simulation of atmospheric deposition

Atmospheric deposition fluxes have been simulated with two distinct approaches. First, a standard approach was used. The atmospheric deposition fluxes are calculated using a roughness-length typical of an urban area, but without any further representation of the urban morphology (Wesely and Hicks, 2000). The second approach uses an urban canopy model for atmospheric deposition where three urban surface categories (roofs, roads, and walls) are resolved with a subgrid-scale parameterization of the dry deposition fluxes (Cherin et al., 2015). The effect of this parameterization on atmospheric deposition fluxes of the trace metals and PAH is discussed. The simulations presented in this section were performed using a deeper first layer (65 m) compared to the results presented in section 2.2.3.4., in order to include the urban canopy entirely within the first layer (i.e., the height of the top of the first layer must be at least twice the mean building height simulated).

a. Simulations without distinction of urban surfaces

The dry and wet deposition fluxes are first presented without distinction of urban surfaces using the standard approach in Figures 2.14 and 2.15, respectively, for Cu. The maps of dry and wet deposition fluxes for the other pollutants are provided in the supplementary material (Annexes F. to I.). In the implementation of the deposition computations, dry deposition velocities are calculated as a function of the urban land-use category and urban morphology, whereas the wet scavenging coefficients do not depend on surface characteristics. Accordingly, we discuss first the dry deposition fluxes to describe the effect of the land-use category (see Figure 2.5). In particular, we note a spatial variation of the dry deposition fluxes. For instance, there are maximum and minimum dry deposition in vegetated areas. Agro-forestry areas correspond to maximum deposition due to the large surface available and the presence of leaf, while non-irrigated arable lands correspond to minimum deposition (Figures 2.14). The dry deposition fluxes of the different pollutants (Table 2.7) are in decreasing order of abundance as follows: Zn > Cu > BaP > BbF > IP, which is consistent with the simulated concentrations. Another experimental site located in a Nantes

residential area in western France showed for 2010 and 2011 the same quantitative trend for dry deposition among those metals and PAH (Percot et al., 2013).

The spatial distribution of wet deposition fluxes differs from that of dry deposition fluxes since the former do not depend on the land-use spatial distribution, but depend on local precipitation amounts. It is possible that wet simulated deposition fluxes underestimate the actual values because the simulated precipitation amounts were underestimated at the St Maur monitoring station (see section 2.2.3.3). The scavenging coefficient is sensitive to particle size as illustrated in Figure 2.3. We present here the results of three particle size classes obtained in the grid cell where the TrafiPollu monitoring station is located. Zn is taken as an example, because it is the species that is the most homogenously distributed. The mean wet deposition over the period is 2.0×10^{-3} $ng.m^{-2}.s^{-1}$ for ultrafine particles (diameter < 0.04 µm) and 3.8×10^{-1} $ng.m^{-2}.s^{-1}$ for particles with diameter > 0.15 µm. For particles with diameters comprised between 0.04 and 0.15 µm, wet deposition is 5.0×10^{-4} $ng.m^{-2}.s^{-1}$ and corresponds to the minimum wet deposition for those different particle size classes. This decrease is due to lower scavenging coefficients, the so-called Greenfield gap.

The wet deposition fluxes are similar to the dry deposition fluxes for Zn and Cu indicating that the rainfall events are as efficient as dry processes to transfer metals from the atmosphere to surfaces for the period considered. However, dry deposition dominates for the three PAH. This difference between metals and PAH results from their different particle size distributions. PAH are entirely comprised in the fine particle mode and the so-called Greenfield gap, while a fraction of the metals is present in coarse particles.

The deposition values cannot be compared to local observations since no measurements were available. However, Ollivon et al. (2002) reported PAH total deposition fluxes measured at a Paris station for the 1999-2000 period for several PAH, including BaP, BbF, and IP. The measurements were conducted on the roof of the Pierre-et-Marie-Curie University in downtown Paris and are, therefore, representative of the deposition fluxes simulated without distinction of urban surfaces. For these three PAH, total deposition for the April-June 2000 period was 80 $ng.m^{-2}.d^{-1}$. Correcting for the change in emissions between 2000 and 2014 (reduction by a factor from 2.4 to 4) leads to a range of 20 to 33 $ng.m^{-2}.d^{-1}$, which includes our results (i.e., 22 $ng.m^{-2}.d^{-1}$). Considering the uncertainties associated with the measurements of total deposition (particularly the dry deposition fraction), we may conclude that our simulation results are consistent with measurements in the Greater Paris region of Ollivon et al. (2002).

We also performed a simulation for dry and wet depositions with a thinner layer (top at 15 m); those results are presented in the supplementary material (Annexe J.).

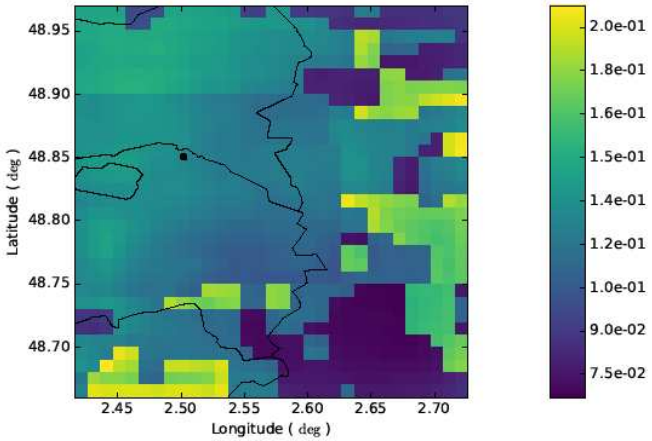


Figure 2.14 - Map of mean simulated dry deposition fluxes of Cu in ng.m^{-2}.s^{-1} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.

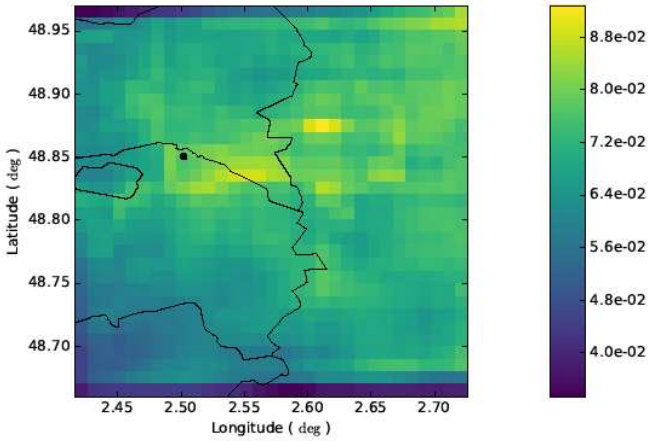


Figure 2.15 - Map of mean simulated wet deposition fluxes of Cu in ng.m^{-2}.s^{-1} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.

Table 2.7 - Mean dry and wet deposition fluxes (all particle sizes aggregated) simulated for each pollutant with roughness-length deposition model (ng.m^{-2}.s^{-1}) for the spring period (26 March– 29 June 2014) at the experimental site.

	Zn	Cu	BaP	BbF	IP
Mean simulated dry deposition flux (ng.m^{-2}.s^{-1})	6.0 x 10^{-1}	1.3 x 10^{-1}	1.9 x 10^{-4}	4.3 x 10^{-5}	2.7 x 10^{-5}
Mean simulated wet deposition flux (ng.m^{-2}.s^{-1})	3.8 x 10^{-1}	7.7 x 10^{-2}	2.6 x 10^{-5}	3.0 x 10^{-6}	1.9 x 10^{-6}

b. Simulations with distinction of urban surfaces

The dry deposition fluxes are distinguished as a function of urban surface types in the simulations conducted with the dry deposition model of Cherin et al. (2015), hereafter referred to as the "urban canopy deposition model". In this model, the urban canopy is located within the first layer of the chemical-tranport model and pollutant transfer is calculated from the atmosphere above the canopy to the recirculated and ventilated zones of the street-canyon and then to the surfaces. Thus, street-canyon concentrations are implicitly calculated as described by Cherin et al. (2015). These urban surfaces correspond to the colored areas in Figures 2.16 and 2.17, the other urban areas correspond to the dry deposition fluxes without this distinction. The computation of deposition fluxes specific to each surface types is presented in Table 2.8. The maps (Figures 2.16 and 2.17) show a great variability of the deposition values within the same urban category, especially for the residential area. This is due to spatial variability of the emissions, which also influence the geographical distribution of dry deposition.

Narrow streets, as found in denser morphologies, represent areas of confined concentrations when considering sources at road level. However, as we simulate deposition within the urban canopy with a regional-scale model, the pollutant mass supply enters into the urban canopy by exchange at the roof level and no pollutant source is located within the urban canyon. Thus, opened areas (such as residential and commercial/industrial areas with low building heights and wide streets) favor greater concentrations within the street-canyon compared to denser morphologies, because in the dense areas, the narrowness of the urban morphology is not conducive to the development of a ventilation zone. Consequently, there is less exchange with the atmosphere above roof-top in a dense area and deposition towards the road and wall surfaces becomes restricted. There is therefore greater deposition on roofs, whereas the residential and commercial/industrial areas show similar deposition fluxes on roofs and roads.

For Cu, the wall deposition fluxes are greater for residential and commercial/industrial areas ($Ic < 1$), than for dense areas. In residential and commercial/industrial areas, a ventilation zone will develop next to a recirculation zone to similar extents for residential and commercial/industrial. Dry deposition in the ventilation zone is greater than dry deposition in the recirculation zone. The contribution of each zone to the total deposition (regardless of the surface type considered, roads or walls) is respectively about 65% and 35%, indicating that the ventilation zone is a major deposition area within the urban canopy. When weighting depositions fluxes by surface areas, since space is occupied more by roads than by buildings, a total dry deposition amount on road surfaces will tend to dominate in residential areas compare to dense or to commercial/industrial areas, which are characterized by larger roof area. In addition, the particle size distribution impacts the deposition velocity, larger particles are more subject to deposition on flat surfaces due to sedimentation. As shown in Table 2.8, deposition of Cu on roads varies by about a factor of 3 among different urban categories, whereas its deposition on walls varies by more than an order of magnitude. On the contrary, BaP (which is present in fine particles) shows wall deposition fluxes that are comparable to roof deposition fluxes in the residential area, because sedimentation to horizontal (or near-horizontal) surfaces is negligible for this particle size range. Differences in dry deposition fluxes between walls and roads are due mostly to differences in their local roughness-lengths,

with smoother surfaces (such as glass on “wall” surfaces) leading to lower deposition velocities than rougher surfaces (such as roads), as reported by Roupsard et al. (2013).

Cherin et al. (2015) concluded that the use of an urban canopy deposition model did not lead to very large differences compared to a standard roughness-length model. Nevertheless, it is of interest to compare the two approaches and, to the extent possible, identify the causes for those differences. Table 2.9 presents the dry deposition fluxes at the TrafiPollu experimental site. If one compares the dry deposition fluxes at roof level, both approaches give similar results for Cu, but the urban canopy model gives a deposition flux of BaP, which is 24% lower than that obtained with the roughness model. For the theoretical case used by Cherin et al. (2015), there is a relative difference of +36% between the urban canopy and the roughness-length deposition models for bulk deposition velocities in the Paris suburb for a monodispersed tracer with a particle diameter of 1 µm and for a building density of 0.4. This annual-average result was obtained with 2011 meteorological conditions. Our results show lower deposition velocities with the urban canopy model, which can be explained by differences in the urban morphology, particle size distributions and wind speed. The urban morphology configuration used by Cherin et al. (2015) includes a building height of 12 m, a roof width of 6.25 m, and a street width of 18.75 m. This morphology, which differs from that of the TrafiPollu neighborhood (see Table 2.1), is less conducive to pollutant transfer from the background atmosphere towards the street-canyon and thereby favors deposition to the roofs. On the other hand, pollutant transfer within the urban canopy for deposition to walls and roads is favored in the case study of Cherin et al. (2015) compared to the TrafiPollu case because the urban canopy mixing length is directly impacted by the urban morphology. In the case of Cherin et al., it is equal to 2.6 m. Here, we applied a different morphology (lower buildings and slightly wide streets), which induces a shorter urban canopy mixing length (1.7 m) and, therefore greater aerodynamic resistances within the canopy. Furthermore, we used full particle size distributions represented with 6 particle size classes ranging from 0.01 to 40 µm. For the simulations conducted here, the relative differences between the urban canopy and standard roughness-length deposition models for bulk velocities are -65% , -45% , -20% , -10% , -20% and -36% , respectively, for the 6 particle size classes at the experimental site (residential area) over the 3-month period for Cu. Since the HAP are distributed over only 3 particle size classes (between 0.04 et 2.5 µm), the relative differences between the urban canopy and the standard roughness-length deposition models are 0% , -45% , -20% , -10% , 0% and 0% . The relative differences by particle size class are identical to those presented for Cu for a given particle size class since the deposition velocities do not depend on chemical composition. The bulk deposition velocity obtained with the urban canopy model is the result of the weighting of each urban surface types available for deposition (roof, roads, and wall). The variation of the relative difference among particle sizes is explained by the variation of the efficiency of processes involved in the deposition velocity, especially in the surface resistances. For the first three classes, the velocity is dominated by processes such as Brownian diffusion, interception and impaction, while the last two classes are more influenced by sedimentation. As illustrated by Cherin et al., deposition velocities vary greatly with meteorology, which affects the aerodynamic resistance (via atmospheric turbulence) and the particle size (via relative humidity) and there is significant variation in the results presented here over the 3-month period. For instance, Figure 2.18 shows the influence of the roof-top wind speed on dry deposition velocity as a function of particle diameter for two wind conditions (heavy and light) of this 3-month period. Between the two roof-top wind conditions, the dry deposition velocity for the urban canopy model follows the same trend, except for particles diameter < 5 µm (surface resistances are therefore ineffective). They are

characterized by greater deposition velocity for the heavy wind conditions. By contrast, the roughness-length dry deposition velocity profile differs between the two roof-top conditions, as it is much greater with heavy wind (due to less aerodynamic resistance). As a consequence, the difference between the urban canopy and the roughness-length models is critical for particles comprised between 5 and 20 µm with heavy wind conditions, while it tends to be slight with light wind conditions. Particles with a diameter greater than 20 µm are not influenced by wind conditions (due to sedimentation) for both models.

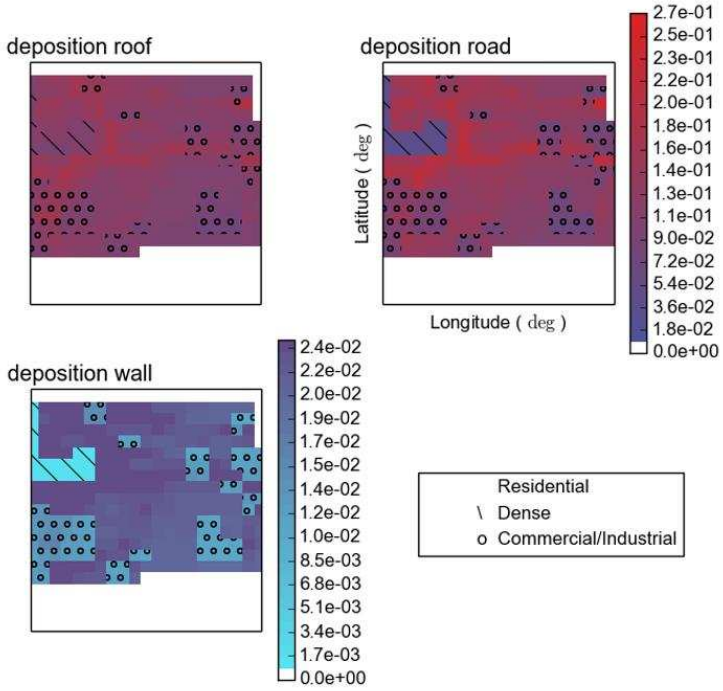


Figure 2.16 - Mean simulated dry deposition fluxes of Cu (all particle sizes aggregated) over the different surfaces ($ng.m^{-2}.s^{-1}$) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The colored area corresponds to the sub-domain simulated with the parameterized urban canopy deposition model with three types of surfaces. The rest of the domain in white corresponds to the standard model of dry deposition without distinction of surface types.

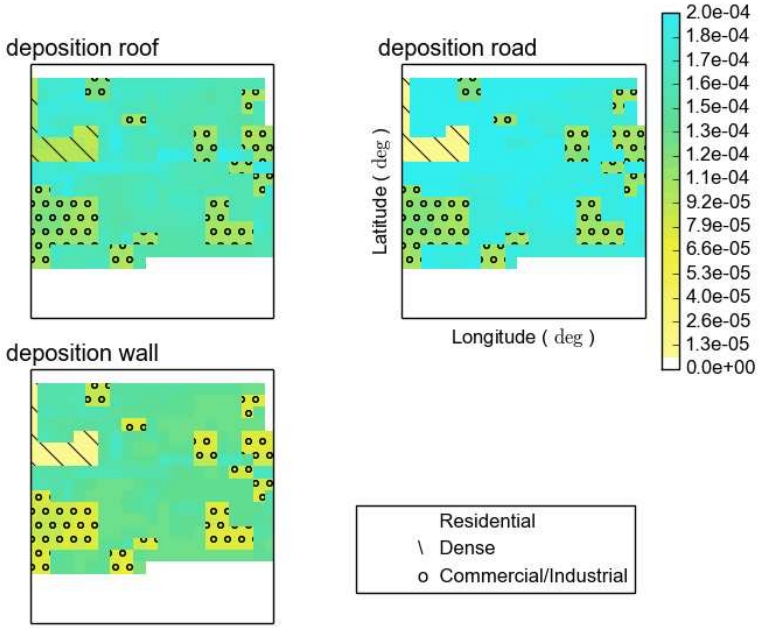


Figure 2.17 - Mean simulated dry deposition fluxes of BaP (all particle sizes aggregated) over the different surfaces ($ng.m^{-2}.s^{-1}$) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The colored area corresponds to the sub-domain simulated with the parameterized urban canopy deposition model with three types of surfaces. The rest of the domain in white corresponds to the standard model of dry deposition without distinction of surface types.

Table 2.8 - Mean simulated dry deposition fluxes ($ng.m^{-2}.s^{-1}$) for all particle sizes aggregated presented as a function of urban surfaces, the three urban categories and averaged over the total surface area of each urban category for the spring period (26 March– 29 June 2014).

Urban category	Cu			BaP			Construction index "Ic" (Hbuilding/Wstreet)	Building density
	Roofs	Roads	Walls	Roofs	Roads	Walls		
Dense	1.1×10^{-1}	4.0×10^{-2}	1.4×10^{-3}	9.5×10^{-5}	1.0×10^{-5}	8.7×10^{-6}	1.4	0.86
Residential	1.2×10^{-1}	1.4×10^{-1}	2.3×10^{-2}	1.6×10^{-4}	2.0×10^{-4}	1.4×10^{-4}	0.5	0.43
Commercial Industrial	1.1×10^{-1}	9.6×10^{-2}	1.2×10^{-2}	1.1×10^{-4}	1.1×10^{-4}	7.9×10^{-5}	0.2	0.52

Table 2.9 - Mean simulated dry deposition fluxes (ng.m^{-2}.s^{-1}) for all particle sizes aggregated as a function of urban surfaces for the spring period (26 March– 29 June 2014) at the experimental site (residential area).

Cu				BaP			
Urban canopy			Roughness	Urban canopy			Roughness
Roofs	Roads	Walls		Roofs	Roads	Walls	
1.3 x 10^{-1}	1.5 x 10^{-1}	2.3 x 10^{-2}	1.3 x 10^{-1}	1.6 x 10^{-4}	2.0 x 10^{-4}	1.4 x 10^{-4}	2.1 x 10^{-4}

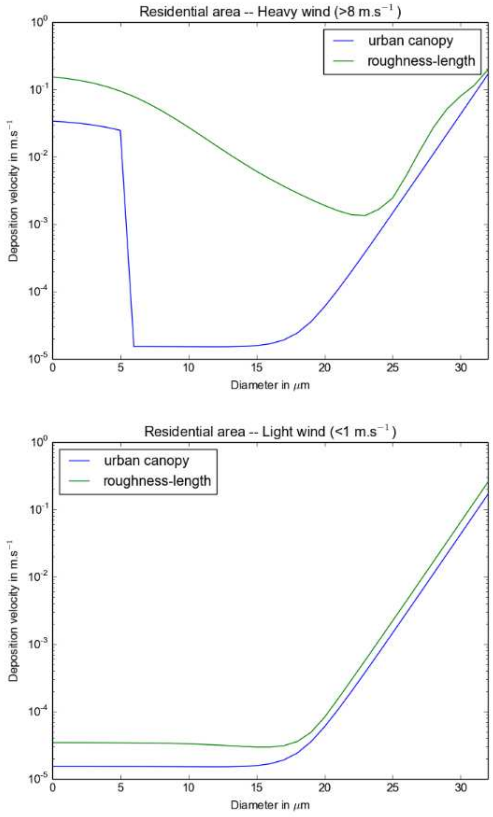


Figure 2.18 - Dry deposition velocity as a function of particle diameter for the urban canopy and roughness-length models for two roof-top wind conditions (heavy and light).

2.2.3.6 Conclusion

The objective of this work was to evaluate our ability to simulate the atmospheric deposition of trace pollutants in an urban area and to investigate the effect of urban morphology on atmospheric deposition fluxes to urban surfaces. WRF and POLAIR3D were used to simulate meteorology and atmospheric pollutants, respectively. Simulations were conducted over four spatial domains, starting from Europe with a 50 km horizontal resolution, down to an urban neighborhood with a kilometric resolution. We extended the analysis to account for the influence of the urban area on meteorology with the WRF Urban Canopy Model (UCM) and on atmospheric deposition with an urban canopy deposition model that allows one to differentiate among urban surfaces (roofs, roads, and walls).

Model performance was evaluated with meteorological data at neighboring stations and air concentrations obtained at a local experimental site. The meteorological simulation shows satisfactory performance for temperature, wind speed and wind direction, but the precipitation amounts are underestimated by nearly a factor of two. For air concentrations, the fractional biases (FB) are below 0.5, except for BaP whose boundary conditions may be overestimated and BbF and IP whose boundary conditions may be underestimated. For BaP, a possible reason is the overestimation of the EMEP European emission inventory. There is also a time lag between the emission inventories used for Europe and France (2012) and the year studied (2014). For instance, annual measurements from Airparif at a Paris traffic site show a BaP concentration decrease by a factor 1.6 between 2012 and 2014, while the mean urban background remains constant (Airparif, 2015). Deposition results have not been evaluated directly with observations since no deposition measurements were conducted at the experimental site. Nevertheless, a comparison with a previous experimental study of total deposition of PAH over Paris (Ovillon et al., 2002) suggests that our PAH deposition fluxes are consistent with those observations.

Regarding atmospheric deposition, we have presented here the first simulation for a specific case study that can distinguish the pollutant deposition as a function of urban surfaces (roofs, roads, and walls). Surface-dependent dry deposition velocities when averaged over all surfaces deposition fluxes were similar to those obtained using the classical roughness-length model, (< 25⁄). The particle size distribution of the trace pollutant was shown to be important for simulating dry deposition velocities. For this case study, dry deposition was found to be greater over road and wall surfaces for relatively open areas due to the development of a large ventilation zone within the urban canopy, whereas deposition to roofs is more important for narrow street-canyons where an air recirculation zone prevents mass exchange between the street-canyon and the atmosphere over the urban canopy. As a consequence, the urban morphology is as sensitive parameter as the particle size distribution for surface deposition. Notable differences were found between metals and PAH, as the former are present in part in coarse particles whereas the latter are entirely present in fine particles. Coarse particles are preferentially deposited to roof and road surfaces due to a significant sedimentation velocity, while fine particles are equally subject to deposition to all surfaces, including walls.

Those simulations open up new perspectives, for instance, to model atmospheric concentrations and deposition fluxes of pollutants within the urban canopy by integrating buildings explicitly in the model formulation in order to better account for urban morphology. They may also help to improve other applications such as traffic-induced resuspension of

particles present on roads by integrating the atmospheric deposition source in addition to road-, brake-, and tire-wear particle sources (which are currently those being considered). The need to differentiate among various contributions of urban surfaces to the contamination of water run-off would benefit from a quantitative information on atmospheric deposition on various urban surfaces as provided here. Finally, assessing the effect of air pollution on buildings requires to be able to distinguish among deposition to roofs, road, and walls. Here, we presented results on deposition of metals and PAH, but the methodology can be extended to include other chemical species (such as acidic species), which may alter building surfaces.

CHAPITRE 3. SIMULATIONS À L'ÉCHELLE DE LA RUE DES CONCENTRATIONS EN UTILISANT UN MODÈLE DE CHIMIE-TRANSPORT ET UN MODÈLE DE MÉCANIQUE DES FLUIDES TRAITANT EXPLICITEMENT LE BÂTI

L'article résumé pour ce chapitre est le suivant :

Intercomparison of two modeling approaches for on-road traffic air pollution at street level including building effects.

Thouron L., Kim Y. , Carissimo B. , Seigneur C. and Bruge B.

Soumis à Environmental Modeling and Assessment

3.1. RÉSUMÉ DE L'ARTICLE

3.1.1. INTRODUCTION

Depuis la fin des années 1990, les tendances de l'aménagement urbain visent une politique de densification, favorisées en particulier par la loi sur la qualité de l'air et l'utilisation rationnelle de l'énergie (1996). Les zones urbaines densifiées contribuent à réduire les distances de transport entre le lieu de vie et le lieu de travail, l'idée générale étant de développer un environnement urbain plus durable. Cependant, la densification urbaine pourrait avoir un impact négatif sur la pollution de l'air en favorisant la construction de bâtiments plus élevés et conduisant à la congestion du trafic dans les zones urbaines. Ces deux aspects sont propices à l'augmentation des émissions de polluants atmosphériques. La modélisation urbaine de la pollution atmosphérique est une tâche difficile si l'on veut comprendre et prédire l'hétérogénéité des concentrations de polluants atmosphériques à l'échelle de la rue, qui résulte de la morphologie urbaine très variable et de la disparité des niveaux d'émission. De plus, la géométrie étriquée des espaces urbains avec des immeubles denses de grande hauteur provoque un écoulement complexe qui peut donner lieu à une répartition inégale des polluants (Chu et al., 2005).

Dans le présent travail, nous comparons les résultats d'écoulement et de dispersion obtenus à partir d'un modèle de mécanique des fluides (CFD, *Code_Saturne*, 2015) et d'un modèle de

qualité de l'air multi-échelle Street-in-Grid (SinG, Kim et al., 2015), au travers d'une étude de cas réelle dans une banlieue parisienne de l'Est. SinG est un nouveau modèle multi-échelle de pollution de l'air urbain combinant un modèle de chimie-transport (CTM) et un modèle de réseau de rue basé sur la formulation générale de SIRANE (Soulhac et al., 2011). Les concentrations simulées sont donc fournies selon les axes routiers définissant chaque rue. *Code_Saturne* est un modèle CFD qui calcule un champ d'écoulement détaillé et, par conséquent, peut fournir une résolution fine des concentrations dans une rue. Nous allons discuter ici des différences entre ces deux approches de modélisation différentes basées sur leur comparaison avec les données obtenues à des stations de mesure lors d'une campagne expérimentale. Nous allons également évaluer leur sensibilité aux principales données d'entrée afin d'identifier leur gamme d'applicabilité.

3.1.2. DESCRIPTION DES SIMULATIONS NUMÉRIQUES

3.1.2.1 Cas d'étude et données d'entrée

Dans cette étude, nous souhaitons simuler la pollution du trafic. Les oxydes d'azote (NO_x) sont des polluants importants du trafic émis dans les villes (rapport ANSES, 2012). Les NO_x se composent d'oxyde nitrique (NO) et de dioxyde d'azote (NO_2). Seul NO_2 est réglementé en fonction de ses concentrations ambiantes. Cependant, les réactions entre NO et NO_2 peuvent conduire à une conversion rapide entre ces deux espèces chimiques. Par ailleurs, les NO_x peuvent être oxydés dans l'atmosphère et mener à la formation d'ozone, de particules fines et de dépôts acides. Cependant, pour les périodes typiques de la dispersion atmosphérique à l'échelle des rue-canyons, les NO_x peuvent être considérés comme quasi-inertes chimiquement. Ainsi, nous nous concentrons principalement sur les concentrations de NO_x ici puisque nous nous intéressons à la dispersion des émissions du trafic routier en milieu bâti. L'expérience de terrain du projet TrafiPollu a été menée pendant une période de trois mois (avril à juin 2014) pour la pollution atmosphérique, sur un grand boulevard dans une banlieue est de Paris (plus de détails sont disponibles sur: https://sites.google.com/Site/trafipollu/home). Au cours de cette période, nous avons sélectionné 5 situations météorologiques différentes. Elles varient d'une part en termes de directions du vent : quasi-perpendiculaires et -parallèles, et diagonale à l'axe du boulevard). D'autre part, elles varient en termes d'émissions. Par ailleurs, des études de sensibilité ont été effectuées avec des situations météorologiques identiques mais avec une approche différente des émissions. Les données d'émissions ont été calculées par Airparif (l'association locale de surveillance de la qualité de l'air) avec HEAVEN, sur la base de données de trafic modélisées avec un modèle de trafic dynamique microscopique, SymuVia. SymuVia est développé et a été appliqué dans le projet TrafiPollu par l'Ifsttar. SymuVia a été appliqué à seulement deux jours standards, un jour de semaine et un jour moyen de fin de semaine. Par conséquent, il existe certaines incertitudes associées aux émissions de trafic puisque les émissions réelles peuvent présenter une plus grande variabilité temporelle que les émissions simulées. Les concentrations de fond ont été obtenues à partir de la simulation multi-échelle SinG au niveau du toit pour la majorité des simulations et de la station de surveillance urbaine la plus proche d'Airparif (Champigny) pour une simulation de sensibilité concernant les émissions. Les données météorologiques ont été extraites d'une simulation réalisée avec WRF (Weather Research Forecasts model, Skamarock et al., 2008), modèle de recherche et de prévision météorologique, car aucune observation locale n'était disponible au cours de la

période d'étude. Le traitement des effets de bâti a été effectué dans le cadre de cette simulation météorologique à l'aide du modèle Urban Canopy (UCM). UCM est un modèle à une seule couche, qui comprend l'ombre des bâtiments, la réflexion du rayonnement à ondes courtes et longues, un profil du vent dans la canopée et une équation de transfert de chaleur multicouche pour les toits, les murs et les routes (Kusaka et al., 2004). Kim et al. (2013) ont démontré dans une application de WRF sur Paris que l'utilisation d'UCM avec des cartes d'occupation des sols CORINE conduit à de meilleurs résultats, en particulier pour les vitesses du vent. Des simulations météorologiques ont été effectuées sur un domaine couvrant la zone de cette étude de cas avec une résolution horizontale de 1,5 km.

Nous nous concentrons ici sur le boulevard Alsace-Lorraine. La zone environnante a des caractéristiques correspondant à un secteur résidentiel/commerciale ; elle est principalement impactée par la circulation locale (environ 22 000 véhicules par jour). La géométrie est typique des zones résidentielles/commerciales avec une faible hauteur de bâtiment plutôt que des immeubles multi-étages typiques du centre-ville résidentiel de Paris. La morphologie de cette rue-canyon est paramétrée dans une étape de prétraitement lors de la configuration de la simulation.

3.1.2.2 Configuration de SinG

Le modèle de réseau de rues, qui suit la formulation de SIRANE (Soulhac et al., 2011), est couplé au CTM POLAIR3D de la plate-forme de modélisation de la qualité de l'air Polyphemus. POLAIR3D a été décrit ailleurs (Boutahar et al., 2004, Sartelet et al., 2012). Le modèle de réseau de rues est utilisé pour simuler les concentrations des espèces chimiques dans la canopée urbaine encastrée dans la couche la plus basse du CTM. Les concentrations dans la partie de cette couche située au-dessus de la canopée urbaine et dans les couches supérieures sont simulées par POLAIR3D. Les interactions entre le modèle de réseau de rue et le CTM hôte se produisent au niveau du toit et dépendent du transfert de masse turbulent vertical. La vitesse de transfert de masse vertical dépend de l'intensité de l'écart type de la vitesse verticale du vent au niveau du toit. La formulation de Lemonsu et al. (2004) est utilisée pour estimer le profil vertical de la vitesse du vent pour calculer la vitesse moyenne du vent dans le canyon de la rue. La formulation tient compte de la morphologie de la rue-canyon, qui affecte le profil du vent à travers le rapport entre la hauteur du bâtiment et la largeur de la rue. Le transfert de masse vertical turbulent au sommet de la rue-canyon ne dépend pas de la morphologie du canyon. Elle n'est définie que par la condition de la turbulence atmosphérique, basée sur Salizzoni et al. (2009). La formulation pour le transfert de masse vertical turbulent prend également en compte le rapport définissant le type de rue-canyon de la hauteur sur la largeur (Schulte et al., 2015). La spécificité du modèle de réseau de rue est la connexion des rues par transfert de masse horizontal. Le transfert de masse horizontal est calculé en utilisant la vitesse moyenne du vent pour chaque rue. Les débits entrants et sortants des différentes rues connectées à une intersection sont équilibrés à travers un transfert de masse au niveau des toits à l'intersection. Le débit entrant total est égal au débit total sortant de l'intersection, y compris le débit entre l'intersection et l'atmosphère sus-jacente au toit.

Le réseau entier est considéré pour les simulations rapportées ici. Il inclut le boulevard Alsace-Lorraine et les rues environnantes. La morphologie est simplifiée et les bâtiments sont moyennés en hauteur (variant entre 7 et 9 m autour du boulevard) et sur chaque segment (577 au total de largeur variant entre 6 et 20 m) trafic/émission fourni par les modèles

trafic/émission sur la base de données géophysiques réelles de l'Institut Géographique National français (IGN).

3.1.2.3 Configuration de Code_Saturne

Code_Saturne est un code de calcul de dynamique des fluides (CFD) développé par EDF R & D (rapport technique, 2015) disponible à: www.code-saturne.org. L'option atmosphérique utilisée dans cette étude est développée au CEREA. Le solveur numérique de *Code_Saturne* est basé sur une approche à volumes finis sur une grille non structurée (générée par le logiciel Salomé, guide de l'utilisateur par Bresson, 2014) et la discrétisation temporelle des équations de Navier-Stokes repose sur un schéma prédicteur-correcteur. Le module de densité constante est utilisé pour résoudre l'écoulement atmosphérique air avec une approche RANS (Reynold Averaged Navier-Stockes équations) pour l'écoulement turbulent. L'approche LES (Large Eddy Simulation) est également disponible dans *Code_Saturne*, mais elle n'est pas appropriée ici car nous utilisons une résolution spatiale variable, grossière sur les bords du domaine et une résolution fine dans le voisinage qui augmente considérablement le temps de calcul. Ici, nous ne résoudrons pas la température potentielle car nous supposons que les effets de stabilité sont beaucoup plus petits que l'effet de mélange induit par les bâtiments. Cette approximation deviendra moins applicable à petite vitesse du vent. L'option d'écoulement stationnaire est sélectionnée pour les caractéristiques de calcul, car nous considérons une période de temps courte qui peut être considérée comme stationnaire correspondant aux heures de pointe typiques du trafic. Nous simulons 15 minutes d'émission pour chaque heure de pointe. Avec cette option, nous supposons que les paramètres météorologiques sont constants sur la période simulée. Le nombre d'itérations satisfait les conditions de Courant et de Fourier, mais aussi les critères de convergence des vents et des concentrations. La turbulence est résolue en utilisant le modèle de fermeture de la turbulence k-ε (Milliez et Carissimo, 2007). Un sous-modèle poreux a été incorporé dans le code pour représenter les effets de la zone de végétation qui entoure la couche urbaine (Zaïdi et al., 2013; Gao et al., 2017). Plus de détails sur les équations et les paramètres utilisés ici sont présentés par Gao et al. (2017). Pour les obstacles de moins de trois mailles, le code revient à une approche implicite dans laquelle la végétation, principalement des haies ou des arbres, et les quartiers environnants sont considérées comme une couche poreuse induisant une force de traînée et une source de. Cette traînée résulte des forces de pression et des forces visqueuses dues à la végétation ; elle est modélisée par une seule force orientée dans le sens opposé à l'écoulement. Ceci est ajouté comme terme source dans les équations de Navier-Stokes (Zaïdi et al., 2013). Deux paramètres physiques sont nécessaires pour calculer la force de traînée, l'indice de densité foliaire et le coefficient de traînée. Ici, on choisit respectivement un indice de densité foliaire de 0,2 pour les haies d'une hauteur de 2 m et de 0,05 pour les arbres d'une hauteur de 8 m selon Hutchison et al. (1986). Le coefficient de traînée est fixé à 0,2 comme proposé dans Zaïdi et al. (2013). Les cas particuliers de parcelles d'herbe, plus petites que les arbres ou les bâtiments, sont traités avec une longueur de rugosité typique mise en œuvre avec les conditions limites du sol. Nous avons ajouté 3 cm à la longueur de rugosité de référence. Les polluants simulés pour les émissions du trafic local (c'est-à-dire les NO_x ici) sont considérés comme des scalaires passifs qui n'influent pas sur les propriétés des fluides (approche traceur). Les polluants sont transportés par le vent et dispersés par la turbulence locale selon la conservation de la masse. Les conditions de limites de Dirichlet pour les scalaires passifs sont données au modèle et sont obtenues à partir du modèle SinG, l'extraction des données se fait au niveau du toit dans les cellules de la maille correspondant à l'emplacement du

quartier de l'étude TrafiPollu. Dans le modèle, les conditions aux limites des scalaires sont données aux bords du domaine de simulation. La même rugosité est donnée à toutes les surfaces urbaines telles que la rue, le mur et le toit (0,01 m). Les conditions météorologiques initiales telles que la température et les composantes du vent en fonction de l'altitude sont obtenues en extrayant les profils de la simulation WRF. D'autres variables sont également extraites de WRF telles que la vitesse de frottement (u^*) et la longueur de rugosité de surface (z_0) pour calculer l'énergie cinétique turbulente (k) et ε en fonction de l'altitude. Dans l'équation (1), κ est la constante de von Karman (0,4) et $C\mu$ = 0,09 est une constante du modèle. Dans l'équation (2), z est la hauteur du niveau auquel on extrait les données.

$$k = \frac{u^{*2}}{\sqrt{C_\mu}} \quad (1)$$

$$\varepsilon = \frac{u^{*3}}{\kappa(z+z_0)} \quad (2)$$

Pour *Code_Saturne*, un maillage est généré avec le logiciel open source Salome et est également basé sur les mêmes données géophysiques SIG d'IGN mais pour un domaine plus petit que la configuration SinG. Nous souhaitons une haute résolution pour nos simulations et nous choisissons alors un maillage horizontal de 2,5 m au cœur du quartier et un maillage vertical resserré sur les premières couches (avec un pas de 1 m puis relâché jusque 500m). Cependant, la taille du maillage augmente vers les bords du domaine. Afin de maintenir des temps de calcul raisonnables, nous avons simplifié la géométrie réelle du bâtiment. Les immeubles voisins ont été regroupés en blocs sans tenir compte des cours fermées et des petites rues. Ce processus de regroupement a abouti à 32 blocs, traités par *Code_Saturne* comme des obstacles. Les formes de blocs ont été simplifiées. Le boulevard Alsace-Lorraine a également été simplifié dans sa forme et la chaussée entière a été sélectionnée sans décrire les allées et l'îlot central divisant les deux voies de circulation.

3.1.3. RÉSULTATS ET DISCUSSION

3.1.3.1 Concentrations moyennes dans la rue : Code_Saturne et SinG

Nous comparons ici les concentrations simulées avec *Code_Saturne* et SinG avec les concentrations moyennes mesurées sur les deux stations de qualité de l'air « E2 » et « E3 » opérées par Airparif. Étant donné que les deux stations sont situées de chaque côté de la rue, nous considérons la moyenne arithmétique comme un substitut raisonnable à la concentration moyenne à la surface dans cette zone. Par conséquent, les concentrations de *Code_Saturne* à ces deux endroits ont été utilisées pour calculer une concentration moyenne de façon similaire. Puisque SinG suppose une concentration uniforme pour chaque segment de rue, la concentration de ce segment de rue spécifique a été utilisée. Des simulations ont été effectuées pour cinq cas spécifiques décrits par des caractérisiques de vitesse de vent, de direction et angle de vent par rapport à l'axe du boulevard et d'émissions.

a. Résumé des résultats obtenus

Il apparaît que la performance moyenne du modèle est satisfaisante avec des erreurs moyennes normalisées de 26⁄ et 22⁄ , respectivement, pour *Code_Saturne* et SinG et des biais moyens normalisés de -17⁄ et -7⁄ , respectivement. Par conséquent, *Code_Saturne* simule des concentrations plus faibles en moyenne que SinG. Cependant, il y a deux cas où *Code_Saturne* simule des concentrations plus élevées que SinG; ces deux cas correspondent à des vents d'est. Un des cas montre une plus grande sous-estimation pour les deux modèles: -69⁄ pour *Code_Saturne* et -31⁄ pour SinG. Ce cas correspond à un vent du sud presque perpendiculaire à l'axe de la rue et à un cas avec de très faibles émissions (un facteur 4 inférieur aux émissions des autres cas). Par ailleurs, une simulation a été reconduite en augmentant les émissions ce qui s'est conclu par un gradient plus marqué entre les deux stations de mesure et une meilleure comparaison aux observations. Cela suggère une sous-estimation des émissions pour ce cas qui correspond à un samedi mais simulé avec des émissions correspondant à un jour type weekend correspondant à un dimanche.

Pour comprendre les résultats résumés ci-dessus, nous explorons les différences entre les deux modèles, notamment en termes des processus physiques simulés et des caractéristiques structurelles de la rue-canyon, avant de présenter et d'interpréter les résultats en termes de performance des modèles.

b. Différences en termes de représentation des processus physiques

Il existe des différences fondamentales entre les deux modèles dans la définition des variables physiques impliquées dans la dispersion atmosphérique. La vitesse du vent et la turbulence sont définies en utilisant les valeurs moyennes de la rue dans SinG, alors qu'elles sont résolues explicitement avec *Code_Saturne*.

SinG est un modèle à plusieurs échelles qui utilise le couplage en ligne entre un modèle régional de chimie-transport (CTM) et un modèle de canopée urbaine. Cette approche permet de traiter les interactions entre le milieu urbain (c'est-à-dire au-dessus du niveau du toit) et la canopée, puisque la pollution de l'air à l'intérieur de la canopée urbaine peut influencer les concentrations à l'échelle régionale et vice versa. À l'échelle locale (dans la rue), la dispersion atmosphérique est influencée par la vitesse moyenne du vent dans rue-canyon et par le transfert de masse vertical turbulent au sommet de la rue-canyon. L'effet de construction est paramétré et affecte à la fois le profil du vent et le coefficient de transfert de masse. Dans *Code_Saturne*, les bâtiments affectent aussi bien le vent que la turbulence, mais ils sont explicitement inclus dans les équations de Navier-Stokes comme conditions aux limites. Les bâtiments sont donc des obstacles perçus par l'écoulement qui modifient sa trajectoire, sa vitesse et son énergie cinétique turbulente. Des variables telles que la vitesse/direction du vent et la turbulence sont calculées explicitement avec l'approche RANS dans toutes les mailles de l'espace (avec une résolution horizontal de 2,5 m dans le boulevard et un maillage vertical resserré sur les premières couches avec un pas de 1 m puis relâché jusque 500m).

Les simulations conduites avec SinG ont été réalisées sur une plus longue période (environ 2280 heures représentant une période de 3 mois) que celles de *Code_Saturne* (7 x 15 min

correspondant aux 6 cas; 5 cas météorologiques et 2 cas d'émission) en raison de contraintes de temps de calcul. Par conséquent, la simulation *Code_Saturne* commence sans aucune connaissance des concentrations antérieures et utilise les concentrations de fond fournies par SinG comme conditions initiales. Par contre, dans la simulation SinG, les polluants s'accumulent au cours des étapes précédentes. Cette différence d'approche peut induire une sous-estimation de *Code_Saturne*, étant donné que les polluants émis dans la canopée urbaine peuvent ne pas avoir suffisamment de temps pour s'accumuler pendant le temps de simulation. Cet inconvénient est particulièrement évident pour les cas où la vitesse du vent est faible, car à une vitesse de vent élevée, les polluants seront renouvelés dans la canopée urbaine pendant la simulation. Comme la rue est d'environ 1 km de long, une vitesse de vent de 1 $m.s^{-1}$ le long de l'axe de la rue correspondra à un renouvellement complet de l'air dans la rue en environ 15 min.

c. Différences en termes de configuration des morphologiques et de la végétation

La morphologie utilisée dans SinG est plus grossière, regroupant parfois deux ou trois bâtiments de la morphologie *Code_Saturne* en un seul bâtiment. Il y a donc plus de couloirs de circulation avec la morphologie de *Code_Saturne*, ce qui peut avoir un impact sur le flux d'air surtout autour des deux stations de mesure (il y a un espace interstitiel important de plusieurs mètres). Par conséquent, les émissions provenant du trafic du boulevard sont davantage susceptibles d'être dispersées dans les rues adjacentes avec la configuration de *Code_Saturne* qu'elles ne le sont avec la morphologie de SinG. SinG n'est pas paramétré pour reproduire les zones de recirculation et de ventilation du flux d'air, puisqu'il suppose une concentration uniforme sur un segment de rue. Par conséquent, il ne fournit qu'une concentration moyenne du segment rue et il n'y a pas de gradient de concentration à travers la rue, alors que *Code_Saturne* fournit une résolution spatiale des concentrations de polluants dans la canopée urbaine. Ainsi, la morphologie peut jouer un rôle important dans la représentation spatiale et les niveaux des concentrations. De plus, il existe une variabilité des hauteurs du bâti entre les deux configurations de modèle, avec une hétérogénéité qui est plus importante avec la morphologie de *Code_Saturne*. Les bâtiments représentés dans SinG sont généralement homogènes, un côté est décrit par la même hauteur de bâtiments, tandis que dans *Code_Saturne*, les plus hauts immeubles sont situés à côté des plus bas bâtiments, c'est donc spatialement plus hétérogène. Par exemple, comme le vent est calculé au sommet de la canopée dans SinG, cela pourrait induire une différence dans le profil du vent par rapport au profil du vent de *Code_Saturne*.

La végétation peut également influer sur l'écoulement en le freinant, en particulier lorsque l'on considère les arbres plus hauts que les haies, les arbustes et les taches d'herbe. Dans *Code_Saturne*, l'effet de la végétation, en particulier des arbres, est pris en compte avec un modèle de porosité. Dans ce modèle, la haute végétation crée une résistance aérodynamique à l'écoulement, ce qui entraîne une diminution de la vitesse du vent et modifie la turbulence (Zaïdi et al., 2013). La quantification de l'impact de la végétation sur les concentrations locales n'a pas été évaluée ici, mais des études antérieures sur l'effet des hétérogénéités micro-échelles de la turbulence ont mis en évidence l'effet de la végétation sur la vitesse du vent et la turbulence. Zaïdi et al. (2013) ont montré que l'utilisation d'un modèle poreux au lieu d'une loi de rugosité classique conduit à des valeurs plus élevées de turbulence (50⁄ de plus globalement) et de vitesse du vent inférieure (50⁄ de moins globalement) près de la

surface (< 40 m). Cependant, l'étendue spatiale de la végétation dans cette étude était plus importante que dans notre cas (il s'agit plus ou moins d'une forêt entourant presque complètement le site, alors que dans notre cas, la végétation est plus dispersée et moins importante que les bâtiments en termes de superficie). Ainsi, l'effet de la végétation sur la vitesse du vent et la turbulence pourrait ne pas être très important dans notre configuration.

Une autre différence structurelle entre les deux modèles est le réseau de rues. Pour SinG, il s'agit d'un réseau quasi-complet couvrant 577 tronçons routiers sur une plus grande surface (de quelques kilomètres de largeur) que celle couverte par *Code_Saturne*, qui comprend 15 tronçons reliés au boulevard (regroupés en un seul) et quelques rues adjacentes. Cette différence n'est certainement pas négligeable compte tenu de l'existence de grandes routes dont l'autoroute A86 prise en compte dans le réseau du modèle SinG. *Code_Saturne* peut manquer la contribution de cette autoroute, qui doit influencer les concentrations aux limites à l'ouest du domaine. Bien que nous prenions en compte les conditions aux limites de SinG dans *Code_Saturne*, celles-ci peuvent être diluées au niveau du toit et l'influence directe au niveau de la rue peut ne pas être correctement représentée à travers ces conditions aux limites. De plus, les émissions du trafic sur le boulevard dans *Code_Saturne* correspondent à la moyenne des émissions des sections constituant le boulevard en SinG. Par conséquent, aux emplacements des stations de mesure, les émissions considérées dans *Code_Saturne* et SinG peuvent différer légèrement.

3.1.3.2 Comparaison des concentrations moyennes au niveau des stations de mesure

Les effets de différents facteurs (vitesse du vent, émissions, concentrations de fond et du bâti) sont étudiés. Il en ressort, un cas avec *Code_Saturne* qui est présenté avec les conditions suivantes: vent faible (0,9 $m.s^{-1}$), émissions importantes (324,7 $\mu g.m^{-1}.s^{-1}$), des concentrations de fond de niveau intermédiaire (contribution de 30% aux concentrations locales au boulevard) et une direction parallèle à l'axe du boulevard (qui n'influence pas tant les concentrations car il y a du vent léger). Ce cas correspond au cas où les concentrations observées sont les plus importantes (201 $\mu g.m^{-3}$). D'autre part, SinG est plus sensible aux émissions élevées (466,1 $\mu g.m^{-1}.s^{-1}$), avec un vent diagonal à l'axe du boulevard mais légèrement moins sensible au fond urbain (contribution de 26%).

Cependant, *Code_Saturne* sous-estime dans son ensemble (-17%) les observations, en particulier pour les cas de vent presque perpendiculaire à l'axe du boulevard (sous-estimation d'un facteur 3). D'autre part, SinG est en moyenne très proche des observations (sous-estimation <-7%), sauf lorsque le vent est très faible (<1 $m.s^{-1}$).

3.1.3.3 Observations générales sur le gradient de concentration et la direction du vent

Le schéma d'écoulement régissant les concentrations aux deux stations de mesure est complexe, en particulier pour les vents du nord, et ne rentre pas bien dans une représentation académique d'une zone de recirculation du côté au vent de la rue et une zone de ventilation sur le côté sous le vent. On peut supposer à ce stade que la zone de recirculation (caractérisée par des concentrations élevées par rapport à l'autre côté de la rue) résulte non seulement de la direction du vent mais aussi d'autres processus qui ne sont pas nécessairement bien intégrés dans le modèle ou même bien identifiés ici (tels que les émissions, l'orientation du bâtiment par rapport au vent, le réseau de rues, etc.). Par

conséquent, une telle complexité dans le cas des vents du nord sera probablement difficile à reproduire. Néanmoins, les vents du sud semblent induire une recirculation naturelle des polluants du côté sud de la rue. Ce processus de recirculation est attendu et, par conséquent, on peut s'attendre à ce que le modèle soit capable de reproduire plus facilement de telles situations associées aux vents du sud.

Les cinq cas classés en fonction de la direction et de l'angle du vent par rapport à l'axe de la rue (quasi-perpendiculaire, quasi-parallèle ou diagonal) montrent des réponses très contrastées même dans les cas où le vent viendrait de la même direction ou ayant un angle par rapport à la rue plus ou moins similaire. Ces contrastes semblent dépendre d'autres facteurs qui peuvent être liés à la fois aux émissions et à la configuration des réseaux de rues. Nous avons vu que les observations elles-mêmes ne sont pas toujours cohérentes avec la direction du vent par rapport à l'axe de la rue et que les incertitudes dans le champ de vent simulé par WRF pourraient affecter les résultats. En effet, pour deux cas sur cinq la vitesse du vent et la direction du vent sont en très bon accord avec les observations à St Maur (la station météorologique la plus proche), la différence relative entre les observations et les simulations est respectivement de -0,26 et +0,2 $m.s^{-1}$ pour la vitesse du vent et 0 et 1° pour la direction du vent. Cependant, pour les autres cas, la différence relative varie entre -1,6 et +0,9 $m.s^{-1}$ pour la vitesse du vent et entre -18 et -40° pour la direction du vent. Il est possible que ces incertitudes existent aussi pour le domaine étudié et cela suggère que pour ces derniers cas, l'incertitude du champ de vent ne peut être négligée. En revanche, les résultats obtenus avec *Code_Saturne* sont cohérents avec la direction et l'angle du vent avec l'axe de la rue. La morphologie choisie de la configuration du bâtiment pour la simulation *Code_Saturne* pourrait induire des zones de trafic excessives et donc une dilution surestimée des concentrations, en particulier dans le cas des vents provenant du sud-est et presque perpendiculaire ou diagonal au boulevard. Les zones de recirculation peuvent également être déplacées quelque peu dans l'espace et que des zones de concentrations élevées sont formées sur le boulevard. Enfin, la simulation du modèle semble très sensible à la configuration des émissions et des conditions aux limites. Deux simulations sont testées, l'une avec des émissions dans le boulevard et des émissions dans les rues adjacentes (émissions différentes) et des conditions aux limites provenant d'une station de fond urbain située à quelques kilomètres du site, l'autre avec des émissions multipliées par quatre. Ces deux simulations montrent respectivement, que dans le premier cas les concentrations sont sous-estimées, et dans le deuxième cas, les gradients de concentrations ainsi que les valeurs sont plus proches des observations. Ces deux approches de modélisation concernant la configuration des émissions et les conditions aux limites indiquent que le gradient de concentration peut être très sensible à cet aspect de la configuration du modèle.

3.1.3.4 Code_Saturne: sensibilité des gradients de concentration à la direction du vent

Certaines caractéristiques des observations ont été identifiées en termes de gradient de concentration entre les deux stations de surveillance situées de chaque côté de la rue en fonction de l'angle entre la direction du vent et l'axe de la rue, ainsi que le quadrant correspondant au vent d'origine. Ici, nous évaluons si les simulations *Code_Saturne* peuvent reproduire les principales caractéristiques de l'effet de la direction du vent sur le gradient de concentration entre les deux côtés de la rue. Comme indiqué précédemment, la station de surveillance sud (E2) a été identifiée comme étant la station la plus influencée par une zone de recirculation selon les observations. Pour caractériser le gradient de concentration entre

ces deux stations et conduire l'analyse des résultats de simulation, nous utilisons (1) le rapport des concentrations à la station sud et nord (E2/E3), (2) la différence entre ces deux stations (E2-E3) et (3) la différence relative {2 (E2-E3) / (E2+E3)}. Bien que les premières et les troisièmes mesures soient liées, elles nous permettent de fournir une comparaison plus complète des gradients de concentration mesurés et simulés. Nous analysons les cinq cas simulés avec *Code_Saturne*. Ces cas comprennent deux cas avec une direction du vent presque parallèle à l'axe de la rue (un cas avec vent du nord-est et un cas avec vent du sud-ouest), deux cas avec une direction du vent diagonale à l'axe de la rue.

Le premier cas correspond à un vent du nord-est presque parallèle à l'axe de la rue dans des conditions de vent calme. Pour ce cas, les concentrations observées s'accumulent préférentiellement du côté du vent alors que le vent vient du nord. Cependant, l'angle du vent par rapport à l'axe de la rue est presque parallèle (7°), ce qui n'explique pas le fort gradient observé entre les deux stations de mesure (ratio de 1,64). D'autre part, la simulation *Code_Saturne* est cohérente avec la direction du vent par rapport à la rue. Le rapport simulé est de 0,85 et la différence relative de concentration est de -16⁄ entre les deux stations, ce qui semble raisonnable étant donné que le vent souffle le long de l'axe de la rue. On notera cependant que la vitesse du vent est très faible (<1 $m.s^{-1}$) et que le développement d'une zone de recirculation n'est pas dominante dans des conditions de vent calme. En outre, la direction du vent simulée avec WRF peut être encore plus variable dans des conditions de vent calme et ne correspond pas exactement à la direction du vent réelle de ce cas.

Le deuxième cas correspond à un vent du sud perpendiculaire à l'axe de la rue avec de faibles émissions. Les observations ainsi que la simulation *Code_Saturne* montrent une réponse similaire à ce vent du sud qui est presque perpendiculaire à l'axe de la rue. Cependant, le gradient est beaucoup plus fort dans les observations (rapport de 1,57 et différence relative de 0,44) que dans la simulation (ratio de 1,14 et différence relative de 0,13). On notera cependant que les concentrations simulées sous-estiment significativement les concentrations moyennes observées d'environ 70⁄ . Par conséquent, il est possible que les émissions utilisées dans la simulation *Code_Saturne* sous-estiment les émissions réelles.

Le troisième cas correspond à un vent sud-est en diagonal à l'axe de la rue. Les observations et la simulation montrent une zone de recirculation sur le côté sud de la rue et les concentrations sont constamment plus élevées du côté au vent. D'autre part, les gradients sont plus prononcés dans les observations (rapport de 1,36 et différence relative de 0,30) par rapport aux gradients obtenus dans la simulation (ratio de 1,14 et différence relative de 0,14).

Le quatrième cas correspond à un vent du sud-ouest presque parallèle à l'axe de la rue. Ce cas montre une plus grande concentration sur l'extrémité sud de la rue, ce qui est compatible avec la direction légèrement méridionale du vent, à la fois dans les observations et la simulation. Le gradient de concentration est cependant plus important dans les observations (rapport de 1,51 et différence relative de 0,40) que dans la simulation (rapport de 1,23 et différence relative de 0,21). Ceci est cohérent avec le cas précédent (également avec un vent du sud), où le gradient de concentration observé était également supérieur à celui du simulateur.

Enfin, le dernier cas (cinquième) correspond à un vent du sud-ouest en diagonal à l'axe de la rue. Lorsque le vent vient du sud-ouest, la simulation montre un gradient de concentration

plus important (rapport de 1,72 et différence de concentration relative de 0,53) que celui obtenu avec le cas lorsque le vent venait du sud-est. D'autre part, des gradients similaires sont obtenus dans les observations pour les deux cas. La différence de concentration est très similaire pour les observations et la simulation (~ 70 $\mu g.m^{-3}$). Cependant, le rapport et la différence relative montrent un gradient plus important pour la simulation que les observations. Le gradient plus fort obtenu dans la simulation pourrait résulter en partie de la configuration du réseau de rues. Par exemple, il y a une rue avec un axe du sud-est située au-dessus des deux stations de mesure, ce qui pourrait conduire à une recirculation accru sur le côté sud de la rue. Le fait que ceci ne soit pas autant reflété dans les observations pourrait être dû à un écoulement de vent plus dissipé (puisque la configuration de simulation *Code_Saturne* ne comprend pas toutes les rues secondaires) et aussi une direction du vent légèrement différente par rapport à celle obtenue à partir des simulations WRF.

3.1.4. CONCLUSION

La mise en œuvre des simulations *Code_Saturne* et SinG et de leurs analyses a été très difficile dans cette étude de cas en raison de la géométrie complexe de ce réseau de rues situé dans une banlieue parisienne pour un quartier résidentiel. C'est un problème tridimensionnel complexe dont le vent régule le transport horizontal et la turbulence agit sur le mélange vertical. Bien que les bâtiments aient été traités explicitement pour représenter les hétérogénéités spatiales dans les champs de concentration et donc pour mieux approcher la réalité, des simplifications ont été apportées à la morphologie urbaine. Nous avons vu que les deux modèles ont des approches différentes à plusieurs égards, les formulations physiques sont spécifiques à chaque modèle, les entités morphologiques ne coïncident pas nécessairement en nombre et dans leur dimension entre les deux modèles et les données d'entrée (émissions, météorologie, concentrations de fond urbaines) sont également différents bien qu'elles proviennent de la même source. En ce qui concerne les différences dans la formulation physique, les paramètres tels que la vitesse du vent et la turbulence diffèrent entre les deux modèles, bien que la formulation de la composante rue-canyon de SinG soit basée sur des simulations réalisées avec *Code_Saturne* pour des configurations idéalisées. Concernant les différentes configurations de la morphologie urbaine; la configuration utilisée dans SinG est une configuration typique de "rue-canyon", tandis que dans *Code_Saturne*, elle est plus ouverte, avec davantage d'espaces interstitiels, favorisant ainsi plus de transport et de dispersion de polluant. Nous avons dû, en effet, faire des choix de représentations, ce qui peut introduire des biais dans les concentrations calculées. Il n'a pas été possible, pour des raisons de temps de calcul et d'espace mémoire, de traiter de façon réaliste tous les bâtiments constituant le parc immobilier du quartier étudié ici à une résolution de 2,5 m. Parmi les autres sources d'incertitude figurent la météorologie (les simulations WRF des directions des vents présentent des décalages parfois marqués jusqu'à 40° pour les cas présentés ici) et les émissions (la variabilité est estimée à 46⁄ pour NO_x entre une approche standard COPERT IV et HEAVEN, modèle d'émissions qui a été spécialement appliqué ici). De plus, la différence structurelle peut influencer les résultats de chaque modèle et aussi leur comparaison. Dans *Code_Saturne*, les émissions ont été considérées dans cette étude comme homogènes sur l'axe entier du boulevard, alors qu'elles ont été segmentées en plusieurs tronçons dans SinG. Cette différence peut avoir eu un léger impact sur la variation spatiale des émissions des rues. Les deux sens du trafic ont été regroupés lors de l'élaboration des estimations des émissions. Si le trafic était

significativement différent entre les deux directions à certaines heures, cela pourrait évidemment affecter le gradient de concentration transverse de la rue.

En dépit de ces caractéristiques et de leurs incertitudes associées (morphologie du bâti, émission, météorologie et des concentrations de fond), nous obtenons des résultats avec *Code_Saturne* en termes de gradients de concentration transversaux qui correspondent aux angles entre la direction du vent et l'axe du boulevard. Cependant, il semble que *Code_Saturne* sous-estime ce gradient dans la plupart des cas. Dans un cas, il a été démontré que l'inclusion des émissions des rues secondaires améliorait l'accord entre *Code_Saturne* et les observations. Dans un autre cas, une sous-estimation des émissions pourrait expliquer la sous-estimation au moins partiellement. En termes de concentrations moyennes dans le boulevard, SinG et *Code_Saturne* sont en bon accord avec les observations, avec une tendance de *Code_Saturne* à sous-estimer plus que SinG, probablement à cause d'un traitement plus complet des concentrations de fond dans SinG. SinG a quelques faiblesses dans la reproduction des niveaux de concentrations lorsque le vent est très faible (<1 $m.s^{-1}$). De plus, nous avons pu montrer que dans une configuration semi-ouverte de rue-canyon avec un réseau urbain complexe, il peut ne pas être approprié de formuler des zones de recirculation et de ventilation, car les observations ne montrent pas de relation claire entre la direction du vent et par rapport à l'axe du boulevard et aux concentrations. D'autres facteurs tels que le réseau routier et les émissions associées peuvent également jouer un rôle important. SinG avec sa formulation moyenne de la rue se compare de manière satisfaisante avec les observations moyennes et peut être approprié pour la plupart des applications. En décrivant plus précisément le champ de concentration dans le réseau de rues, il faudrait simuler l'ensemble des rues du quartier avec un modèle CFD tel que *Code_Saturne*.

Ce travail peut conduire à plusieurs perspectives. D'abord, un terme pourrait être ajouté dans *Code_Saturne* pour tenir compte des turbulences induites par les véhicules, surtout lorsque le trafic est important (heures de pointe) et que la turbulence atmosphérique est faible ou modérée. La morphologie du bâti, pourrait être affinée avec plus de détails autour des stations de mesure. Nous pourrions également utiliser la même configuration morphologique que celle utilisée dans SinG afin de comparer plus directement les deux modèles. Les trottoirs et les îlots centraux pourraient également être distingués dans la rue. Il a été démontré que dans des conditions de vent calme, les émissions des autres rues pouvaient être influentes; ainsi, les émissions des rues secondaires pourraient être discriminées spatialement. Enfin, nous pourrions évaluer quantitativement l'effet de la végétation sur les vitesses du vent, la turbulence et leurs conséquences sur les concentrations. En ce qui concerne SinG, l'effet des vents faibles sur les niveaux de concentration pourrait être évalué plus précisément et l'introduction d'un terme pour traiter la turbulence induite par les véhicules pourrait comme dans *Code_Saturne* être réalisée.

3.2. ARTICLE

3.2.1. ABSTRACT

Given the morphology of urban areas, a modeling approach that accounts for the effect of buildings on air flow and pollutant dispersion is required to describe air pollution in street canyons. Thus, we present here an intercomparison of two models applied to a major boulevard in a Paris eastern suburb. The two models include (1) a computational fluid

dynamics (CFD) model that provides a detailed three-dimensional representation of the atmospheric flow and pollutant dispersion (*Code_Saturne*) and (2) a street-network model with well-mixed steady-state concentrations within street segments and pollutant transfer at street intersections and roof level coupled with a regional chemical-transport model (SinG). Simulations were performed for five cases representing different meteorological conditions (wind direction and wind speed) and emissions. The results of the model simulations are compared to concentration measurements of NO_x at two monitoring stations located on different sides of the boulevard, thereby providing quantitative information on the cross-street concentration gradient. Comparison of the model simulation results for the mean NO_x concentrations show satisfactory performance with mean normalized errors of 26% and 22% and mean normalized biases of -17% and -7% for *Code_Saturne* and SinG, respectively. Differences between the two models are due mostly to different treatments of the urban background. The analysis of the cross-street concentration gradient shows a complex behavior, which does not depend only on the angle between the wind direction and the boulevard axis, but also on the street-network configuration. In most cases, *Code_Saturne* tends to underestimate the concentration gradient. In one case, which is characterized by calm conditions, the treatment of emissions in the surrounding streets was shown to influence the direction of the concentration gradients. Uncertainties in the meteorology, traffic, and emission simulations lead to uncertainties in modeled concentrations. The model intercomparison highlights the uncertainties due to simplifying assumptions in terms of spatial and temporal resolution of the atmospheric flow field and pollutant concentrations.

3.2.2. INTRODUCTION

The trend in urban planning has been toward a densification policy since the late 1990s, in particular with the law on air quality and the rational use of energy (Dablanc, 2008). Denser urban areas help reduce commuting transport distances between home and work locations, the overall idea being to develop a more sustainable urban environment. However, urban densification might have a negative impact on air pollution by favoring construction of higher buildings and leading to traffic congestion in core urban areas. Both aspects are conducive to higher air pollutant emissions. Urban modeling of air pollution is a challenging task if one wants to understand and predict the heterogeneity of air pollutant concentrations at a street scale, which results from the widely varying urban morphology and the disparateness of emission levels. Furthermore, the restricted geometry of city spaces with dense high-rise buildings causes a complex flow, which can give rise to uneven distribution of pollutants (Chu et al., 2005). Previous studies have simulated idealized urban-type geometries with very fine resolution to understand the complex flow by using computational fluid dynamics (CFD) models and we summarize a few selected studies below. Milliez and Carissimo (2007) used a three-dimensional (3D) model adapted to atmospheric flow and pollutant dispersion (*Code_Saturne* an open-source code described by Archambeau et al., 2004) with a Reynolds Average Navier-Stockes (RANS) method and a k-ε turbulence closure. This theoretical urban environment was represented by an array of shipping containers in Utah's West Desert area with following dimensions: 2.54 m high, 12.9 m long, and 2.42 m wide. The concentrations of propylene (C_3H_6), an inert gas released at an upwind location at various heights (from near-ground to 5 m), were measured at a variety of receptor locations. The simulation domain was an unstructured grid of about 800,000 cells with an horizontal resolution ranging from 4 to 0.6 m, respectively upstream from downstream in the vicinity of the obstacles. The vertical

resolution varied from 0.3 m near the ground to a height equal to twice the size of the containers, where it became gradually stretchedup to 4 m at the top of the domain. Good agreement was found with observations as 67⁄ of predictions were within a factor two of observations. However, an overestimation was found near-source, which was attributed to be a characteristic of Eulerian models for flat or complex terrain. Di Sabatino et al. (2007) compared a CFD model, FLUENT (Fluent, 2005) to analytical models such as ADMS-Urban (CERC, 2006) within three different regular building arrays for four theoretical different morphologies (with a fixed street canyon height of 20 m and varying street widths of 10, 20, 30, and 40 m). Emissions of carbon monoxide (CO) from point and line sources were dispersed from different release heights in a neutral boundary layer of 800 m in ADMS-Urban and in a layer of 150 m in FLUENT. The horizontal resolution of FLUENT was 500 m, and the final number of computational cells was about 500,000 for the point and line source emissions. The smallest dimension of the elements was 0.5 m in the region near the release area and near the ground. The results obtained were quite contrasted depending on whether or not one takes into account buidlings and also depending on the value chosen for the Schmidt number. Overestimation was found in case of no buildings, but better agreement was found when using a very low Schmidt number. Better agreement between the models was found when considering buildings, with a greater Schmidt number for sparse canopy and a smaller Schmidt number for middle and large packing density. Chu et al. (2005) computed pollutant dispersion from parallel-line sources inside a mixed residential and commercial area in Hong Kong based on actual dimensions of buildings with the CFX5.5 CFD model using a k-ε turbulence model. A special feature of the area was a regular array of streets with buildings of very similar heights. The results were discussed qualitatively in terms of wind direction with respect to the axis of the street and in terms of wind speed. It was found that lower wind velocity induces more containment of pollutants within the street-canyon. Gao et al. (2017) simulated thermal effects and pollutant dispersion for an actual urban neighborhood located in Toulouse in southwestern France with a realistic diversity of urban morphologies using *Code_Saturne* with a RANS approach and a k-ε turbulence closure. The number of computational cells was 5 million with minimum horizontal and vertical resolutions of 0.5 m and 1 m; the largest cells at the edges of the domain had a horizontal resolution of 20 m. They found good agreement with the experimental data with a slight overestimation of concentrations, however, results were obtained with a locally adjusted emission factor. Sini et al. (1996) developed a CFD model called « CHENSI » to simulate the small-scale atmospheric flows (thermal effects and dispersion of concentrations) with a k-ε turbulence closure over a non-uniform 2D grid ranging from (1 m x 1m) to (7.5 m x 7.5 m) with building height of 20 m and a variable street-canyon width from 6.6 m to 299 m. The results were qualitatively evaluated by analyzing different key factors of the configuration (street-canyon aspect ratio and the differential heating of the wall surfaces). CFD models can provide a detailed representation of the mean flow and turbulence and are, therefore, quite appropriate for applications to complex environments such as urban areas. However, they cannot be applied to long time series and cannot describe the full heterogeneity of urban forms over a large area due to the limitation of computational power and/or the limitation in delivery times.

The effect of buildings on pollutant dispersion within a complex urban morphology has also been assessed with parameterized models, which are computationally less costly to operate. As mentioned above, ADMS-Urban is an operational model based on a parameterized formulation, which has in addition been simplified using a statistical approach to emulate the original model (Mallet et al., 2013). Other parameterized models have been widely used in

urban pollution applications. Such models include for example the Operational Street Pollution Model (OSPM), evaluated for example at about ten street monitoring stations characterized by varying building height and street widths (Ketzel et al., 2012) and in Rouen, in northwestern France (Ghenu et al., 2008), and the SIRANE model (Soulhac et al., 2011), which considers the air pollutant transfer between connected streets with a more advanced approach. Wang et al. (2016) compared three different parametric modeling approaches: CALINE4 (Gaussian line-source model), OSPM and SIRANE for four consecutive road segments along a busy corridor in Montreal based on actual urban morphology.

In the present work, we compare for an actual case study located in an eastern Paris suburb, flow and dispersion results obtained from a CFD model (*Code_Saturne*) and from a Street-in-Grid model (SinG, Kim et al., 2015) . SinG is a new multi-scale model of urban air pollution combining a chemical-transport model (CTM) and a street-network model based on the general formulation of SIRANE. The simulated concentrations are, therefore, provided as concentrations that are along a given street section. *Code_Saturne* is a CFD model that calculates a detailed flow field and, therefore, can provide a fine resolution of concentrations within a street. We will discuss here the differences between these two different modeling approaches based on their comparison to data obtained during a three-month field experiment and assess their sensitivity to major input data in order to identify their range of applicability.

3.2.3. DESCRIPTION OF NUMERICAL SIMULATIONS

3.2.3.1 Input data and case study

In this study, we are interested in simulating traffic-related air pollution. Nitrogen oxides (NO_x) have been shown to be a major traffic pollutant emitted in cities (ANSES, 2012). NO_x consist of nitric oxide (NO) and nitrogen dioxide (NO_2). Only NO_2 is regulated in terms of its ambient concentrations. However, the reactions between NO and NO_2 may lead to rapid conversion between these two chemical species. At the timescales typical of atmospheric dispersion within street-canyons, NO_x can be considered nearly chemically inert. Thus, we focus mainly on NO_x concentrations here. The TrafiPollu field experiment was conducted during a three-month period (April to June 2014) for the atmospheric pollution component, on a major boulevard in an eastern suburb of Paris (more details are available at: https://sites.google.com/site/trafipollu/home). Our simulations were performed using hours selected during this period. We selected 5 different meteorological situations (nearly perpendicular, parallel, and diagonal wind directions to the boulevard axis) corresponding to rush hours. In addition, sensitivity simulations were conducted for two of those cases using different emission approaches. The emission data were computed by Airparif (the local air quality monitoring association) with the HEAVEN emissions model, based on traffic data modeled with a microscopic dynamic traffic model, SymuVia. SymuVia is developed and was applied in the TrafiPollu project by Ifsttar. SymuVia was applied to only two standard days, a week day and a weekend day. Therefore, there are some uncertainties associated with the traffic emissions since actual emissions may show greater temporal variability than the simulated ones. Background concentrations were obtained from the SinG multi-scale simulation at roof level for the majority of the simulations and from the Airparif nearest urban monitoring station (Champigny) for a sensitivity simulation. Meteorological data were

extracted from a simulation conducted with WRF, the Weather Research and Forecasting model, as no local observations were available during the study period. Treatment of building effects was conducted in this meteorological simulation through the use of the Urban Canopy Model (UCM). UCM is a single-layer model, which includes shadowing from buildings, reflection of short- and long-wave radiation, a wind profile in the canopy layer and a multi-layer heat transfer equation for roof, wall and road surfaces (Kusaka et al., 2001). Kim et al. (2013) showed that taking into account UCM with CORINE land-use data leads to better results, in particular for wind speeds. Meteorological simulations were performed over a domain covering the case study area with a resolution of 1.5 km.

We focus here on the Alsace-Lorraine boulevard. The surrounding area has characteristics of a residential/business area impacted mostly by local traffic (about 22,000 vehicles per day). The geometry is typical of residential/business areas with low building height rather than typical multistory residential buildings of Paris city center. The geometry of this street-canyon is parameterized in a preprocessing step during the simulation setup.

3.2.3.2 SinG setup

The street-network model, which follows the formulation of SIRANE (Soulhac et al., 2011), is coupled to the POLAIR3D CTM of the Polyphemus air quality modeling platform. POLAIR3D has been described elsewhere (Boutahar et al., 2004; Sartelet et al., 2012). The street-network model is used to simulate the concentrations of the chemical species in the urban canopy imbedded within the lowest layer of the CTM. The concentrations in this lowest layer above the urban canopy and in the upper layers are simulated by POLAIR3D. Interactions between the street-network model and the host CTM occur at roof top and depend on the vertical turbulent mass transfer. The vertical mass transfer velocity depends on the intensity of the standard deviation of the vertical velocity at roof top. The formulation of Lemonsu et al. (2004) is used to estimate the vertical profile of the wind speed to calculate the mean wind velocity within the street-canyon. The formulation takes into account the street-canyon morphology, which affects the wind profile. The turbulent vertical mass transfer at the top of the street-canyon takes into account the street-canyon of height over width ratio and the external flow (Schulte et al., 2015). The specificity of the street-network model is the treatment of horizontal mass transfer within the streets and its connection with other streets at intersections. At a given intersection, the horizontal mass transfer is computed using the mean wind velocity and dimensions for each street. The total incoming flow rate is then balanced with the total outgoing flow rate from the intersection by the flow between the intersection and the overlying atmosphere at roof top.

The whole network is considered for the simulations reported here. It includes the Alsace-Lorraine boulevard and the surrounding streets as depicted in Figure 3.1. The morphology is simplified and buildings are averaged in height and across each traffic/emission segment provided by the traffic/emission models. Figure 3.1 is a detailed bird-eye view of the morphology considered for the buildings around the Alsace-Lorraine boulevard based on actual geophysical GIS-based data from the French geographical institute (IGN).



Figure 3.1 - Alsace-Lorraine district geometry (2D view) as it is taken into account in SinG (view limited to the area around the boulevard) with building heights in meter based on IGN database and roads based on data from the SymuVia traffic simulation.

3.2.3.3 Code_Saturne setup

Code_Saturne is an open-source computational fluid dynamics (CFD) code developed by EDF R&D (2015; the technical report is available at: www.code-saturne.org. The atmospheric option used in this study is developed at CEREA. The numerical solver of *Code_Saturne* is based on a finite-volume approach on an unstructured grid (generated by Salome software, users's guide by Bresson, 2014) and the time discretization of the Navier–Stokes equations is based on a predictor-corrector scheme. The module for constant density is used here to solve the air flow with a RANS approach for turbulent flow. The LES approach (Large Eddy Simulation) is also available in *Code_Saturne* but it is not appropriate here because we use a variable spatial resolution, coarse on the edges of the domain and a fine resolution within the neighborhood that severely increases computational time. Here we will not solve for the potential temperature because we assume that the stability effects are much smaller than the mixing effect induced by the buildings. This approximation will become less applicable at small wind speed. The steady flow option is selected for the calculation features because we are looking at a specific short period of time which is considered stationary (i.e., typical traffic rush hours). We simulate 15 min of emissions for each rush hour. With this option, we assume that meteorological parameters are constant over the simulated period. The number of iterations satisfy the Courant and Fourier conditions but also the convergence criteria for winds and concentrations. Turbulence is solved using the k-ε turbulence closure model (Milliez and Carissimo, 2007). A porous submodel has been incorporated in the code to represent the effects of the vegetation area, which surrounds the urban canopy layer (Zaïdi et al., 2013; Gao et al., 2017). More details on the equations and parameters used here are presented by Gao et al. (2017). For obstacles smaller than three grid cells, the code reverts to an implicit approach in which vegetation, mainly hedges or trees, and surrounding neighborhoods are considered as a porous layer inducing a drag force and a turbulence source into the air flowing through. This drag consists of the sum of pressure and viscous forces due to the vegetation, which are modeled here by a single force oriented in the opposite direction to the flow. This is added as a source term in the Navier-Stokes equations (Zaïdi et al., 2013). Two physical parameters are required to compute the drag force, which

are the leaf area density index and the drag coefficient. Here, we choose respectively a leaf area density index of 0.2 for hedges with a height of 2 m and of 0.05 for trees with a height of 8 m according to Hutchison et al. (1986). The drag coefficient is set at 0.2 as proposed by Zaïdi et al. (2013). Special cases of grass patches, smaller than trees or buildings, are treated with a typical roughness length implemented with the boundary conditions of soil. We added 3 cm to the reference roughness length. The pollutants simulated for local traffic emissions (i.,e., NO_x here) are considered as passive scalars that do not affect fluid properties (tracer approach). Pollutants are transported by the wind flow and dispersed by local turbulence, and their concentrations are solved by the mass conservation equation. Dirichlet boundary conditions for passive scalars are given to the model and are obtained from the SinG model; the data extraction are done at the roof level in the grid cells corresponding to the neighborhood location. Scalar boundary conditions are given at the edges of the simulation domain. The same roughness length is given to all urban surfaces such as street, wall and roof (0,01 m). Initial meteorological conditions such as temperature and wind components as a function of altitude are obtained by extracting profiles from the WRF simulation. Other variables are also extracted from WRF such as the friction velocity ($u*$) and the surface roughness length (z0) to compute the turbulent kinetic energy (k) and ε as a function of altitude. In equation (1), κ is the von Karman constant (0.4) and $C\mu$ = 0.09 is a constant of the model. In equation (2), z is the height of the level at which we extract the data.

$$k = \frac{u^{*2}}{\sqrt{C_\mu}} \quad (1)$$

$$\varepsilon = \frac{u^{*3}}{\kappa(z+z_0)} \quad (2)$$

For *Code_Saturne*, a mesh is generated with the open source Salome software, it is also based on the same geophysical GIS data from IGN as those used in the SinG simulation, but for a smaller domain than the SinG configuration. We are interested in getting high spatial resolution for our simulations and we choose a mesh size of 2.5 m within the neighbourhood. The mesh size increases toward the edges of the domain. In order to maintain reasonable computational times, we simplified the actual building geometry. Nearby-buildings were grouped into blocks without taking into account enclosed courtyards and small streets. This lumping process resulted in 32 blocks, treated by *Code_Saturne* as obstacles. Block shapes were simplified. The Alsace-Lorraine boulevard was also simplified in its shape and the whole pavement was selected without treating explicitly the walkways and the central dividing island. A view of the geometry before and after changes is shown in Figure 3.2.

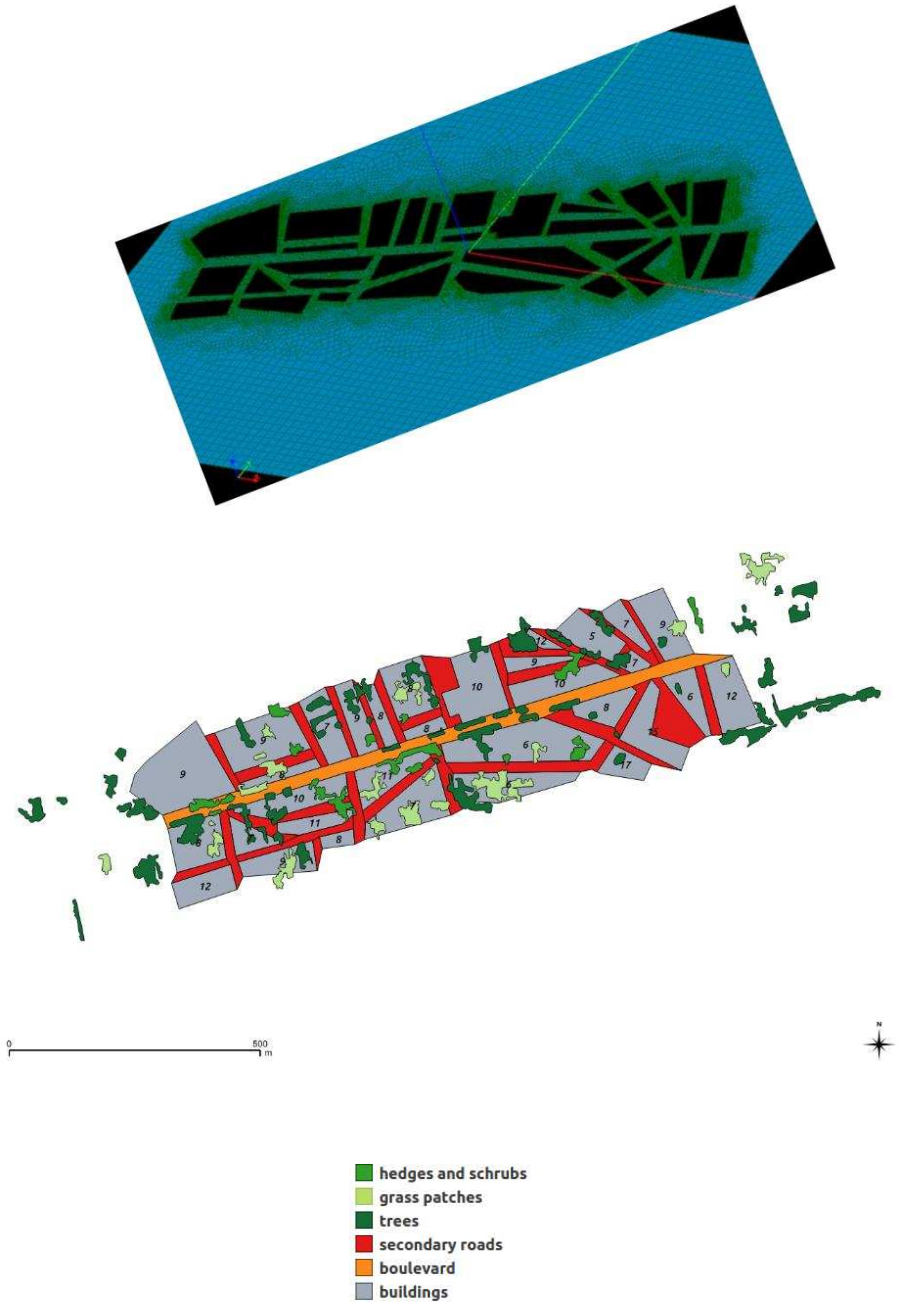


Figure 3.2 - Alsace-Lorraine district geometry (2D view) as it is meshed with Salome (top) and as it is taken into account in Code_Saturne (bottom) with building heights in meter and vegetation based on IGN database.

3.2.4. RESULTS AND DISCUSSION

3.2.4.1 Street-averaged concentrations: Code_Saturne and SinG

We compare here the concentrations simulated with *Code_Saturne* and SinG with the measured concentrations averaged over the two monitoring stations E2 and E3. Since the two stations are located on each side of the street, we consider the arithmetic mean to be a reasonable surrogate for the street-averaged ground-level concentration in that area.

Accordingly, the concentrations of *Code_Saturne* at these two locations were used to calculate a mean concentration similarly. Since SinG assumes a uniform concentration for each street segment, the concentration of that specific street segment was used. Simulations were conducted for five cases, which are summarized in Table 3.1.

a. Summary of the simulation results

The results are presented in Table 3.2. It appears that on average model performance is satisfactory with mean normalized errors of 26% and 22% for *Code_Saturne* and SinG, respectively, and mean normalized biases of -17% and -7%, respectively. Therefore, *Code_Saturne* simulates lower concentrations on average than SinG. However, there are two cases where *Code_Saturne* simulates greater concentrations than SinG; these two cases (1 and 3) correspond to easterly winds. Case 2 shows the largest underprediction for both models: -69% for *Code_Saturne* and -31% for SinG. This case corresponds to a southerly wind nearly perpendicular to the street axis and to a case with very low emissions (a factor of 4 lower than the emissions of the other cases).

To understand the results summarized above, we explore the differences between the two models, in particular in terms of the physical processes being simulated and structural characteristics of the street-canyon, before presenting and interperting the results of the model performance evaluations.

Table 3.1 - Cases identified in terms of emission rate, wind speed, wind direction, wind angle between wind direction and street axis and background concentrations.

Case	Date & time	Emissions rate ($\mu g.m^{-1}.s^{-1}$)		Wind speed ($m.s^{-1}$)	Wind direction (°)	Angle between wind direction and street axis (°)	Simulated background concentration ($\mu g.m^{-3}$)
1	04/29/2014 6 p.m.	324.7		0.9	58	7	55.1
2	03/29/2014 8 a.m.	87.6		4.1	153	88	28.3
3	04/16/2014 6 p.m.	327.7		4.5	109	44	82.4
4	05/08/2014 6 p.m.	324.7		8.1	238	7	39.6
5	04/29/2014 8 a.m.	466.1		2.0	202	43	54.0
6	04/29/2014 6 p.m.	Bd	Streets	0.9	58	7	37.4
		324.7	109.1				
7	03/29/2014 8 a.m.	350.4		4.1	153	88	28.3

Table 3.2 – Measured and simulated concentrations for the five cases, including associated characteristics.

Case	Characteristics	Station	Concentrations (µg.m^{-3})		Concentration gradients	
1	Northeasterly wind nearly parallel to the street axis under calm conditions	E2	Measured	250	E2/E3	1.64
			Code_Saturne	172.3		0.85
		E3	Measured	152	E2-E3	98
			Code_Saturne	202.6		-30.3
		mean	Measured	201.0	(E2-E3)/mean	0.48
			Code_Saturne	187.5		-0.16
			SinG	154.9		-
2	Southerly wind perpendicular to the street axis with low emissions	E2	Measured	128.4	E2/E3	1.57
			Code_Saturne	35.2		1.14
		E3	Measured	81.7	E2-E3	46.7
			Code_Saturne	30.8		4.4
		mean	Measured	105.5	(E2-E3)/mean	0.44
			Code_Saturne	33.0		0.13
			SinG	72.3		-
3	Southeasterly wind diagonal to the street axis	E2	Measured	96.0	E2/E3	1.36
			Code_Saturne	120.6		1.14
		E3	Measured	70.6	E2-E3	25.4
			Code_Saturne	105.5		15.4
		mean	Measured	83.3	(E2-E3)/mean	0.30
			Code_Saturne	113.1		0.14
			SinG	73.3		-

4	**Southwesterly wind nearly parallel to the street axis**	**E2**	**Measured**	**68.4**	**E2/E3**	**1.51**
			Code_Saturne	58.5		1.23
		E3	Measured	45.4	E2-E3	23.0
			Code_Saturne	47.4		11.1
		mean	Measured	56.9	(E2-E3)/mean	0.40
			Code_Saturne	53.0		0.21
			SinG	70.2		-
5	Southwesterly wind diagonal to the street axis	E2	Measured	239.4	E2/E3	1.42
			Code_Saturne	163.9		1.72
		E3	Measured	168.5	E2-E3	70.9
			Code_Saturne	95.1		68.8
		mean	Measured	174.0	(E2-E3)/mean	0.41
			Code_Saturne	129.5		0.53
			SinG	209.4		-
6	Northeasterly wind nearly parallel to the street axis under calm conditions	E2	Measured	250	E2/E3	1.64
			Code_Saturne	78.6		1.32
		E3	Measured	152	E2-E3	98
			Code_Saturne	59.3		19.3
		mean	Measured	201.0	(E2-E3)/mean	0.48
			Code_Saturne	69.0		0.28
			SinG	154.9		-
7	Southerly wind perpendicular to the street axis with low emissions	E2	Measured	128.4	E2/E3	1.57
			Code_Saturne	56.0		1.46
		E3	Measured	81.7	E2-E3	46.7
			Code_Saturne	38.3		17.7
		mean	Measured	105.5	(E2-E3)/mean	0.44
			Code_Saturne	47.4		0.37
			SinG	72.3		-

b. Differences in modeling of physical variables

There are fundamental differences between the two models in the definition of the physical variables involved in atmospheric dispersion. Wind speed and turbulence are defined using street-averaged values in SinG, while they depend explicitly on space and time in *Code_Saturne*.

SinG is a multi-scale model that uses on-line coupling between a regional chemical-transport model (CTM) and an urban canopy model. This approach allows the treatment of interactions between the urban background (i.e., above roof level) and the canopy, since the air pollution within the urban canopy can influence concentrations at the regional scale and vice-versa. At the local scale (within the street), atmospheric dispersion is driven by the mean wind velocity within the street-canyon and the turbulent vertical mass transfer at the top of the street-canyon. The building effect is parameterized and affects both the wind profile and the mass transfer coefficient. In *Code_Saturne*, the buildings also affect both the wind and the turbulence, but they are explicitly included in the Navier-Stokes equations as boundary conditions. The buildings are, therefore, obstacles seen by the flow that modify its trajectory, speed, and turbulent kinetic energy. Variables such as wind speed/direction and turbulence are calculated explicitly with the RANS approach in all the grid cells (with a 2.5 m resolution within the boulevard).

The SinG simulation was performed over a longer period of time (about 2280 hours representing a 3 month-period) than that of *Code_Saturne* (7 x 15 min corresponding to the 6 cases, 5 basic cases and 2 emission sensitivity cases) due to computational time constraints. Therefore, the *Code_Saturne* simulation starts without any knowledge of prior concentrations and uses background concentrations provided by SinG as initial conditions. By contrast, in the SinG simulation, pollutants accumulate during the previous time steps. However, in Code_Saturne we verify that pollutants emitted within the urban canopy have enough time to build up. After a few minutes (less than 15 min), pollutant concentrations reach a stable state, indicating that the simulation time was sufficient to ensure the pollutant loading within the urban canopy. Thus, it was not necessary to simulate periods of time longer than 15 min.

c. Differences in geometric configuration and vegetation

Figure 3.3 shows differences between the representations of the urban morphology used by both models, SinG and *Code_Saturne*. The SinG morphology is coarser, lumping sometimes two or three buildings of the *Code_Saturne* morphology into a single building. There are, therefore, more traffic corridors with the morphology of *Code_Saturne*, which may impact the air flow especially around the two monitoring stations (there is a significant interstitial space of several meters). Therefore, emissions originating from the boulevard traffic are more likely to be dispersed through the adjacent streets with the *Code_Saturne* configuration than they would be with the SinG simpler building morphology. SinG is not parameterized to reproduce wind flow recirculation and ventilation areas, since it assumes a uniform concentration within a street segment. Therefore, it only provides a street-segment averaged concentration and there is no concentration gradient across the boulevard, whereas *Code_Saturne* provides a spatial resolution of the pollutant concentrations within the urban

canopy. Thus, the morphology may play an important role in the concentrations. Moreover, there is a variability in building heights between the two model configurations (see Figure 3.1 for SinG and Figure 3.2 for *Code_Saturne*), with a heterogeneity that is more important with the *Code_Saturne* morphology. Buildings in SinG are generally homogeneous, one side is described by the same height of buildings (see Figure 3.1), while in *Code_Saturne* tall buildings may be next to lower buildings; it is thus more hetereogenous (see Figure 3.2). For instance, as wind is computed based on the wind velocity at the top of the canopy in SinG, the wind profile could be a different from the wind profile of *Code_Saturne*.

The vegetation might also impact the flow, especially when taking into account the trees (in dark green in Figure 3.3) that are taller than the hedges, shrubs, and grass patches. In *Code_Saturne*, the effect of vegetation, in particular trees, is taken into account with a drag porosity model. In this model, tall vegetation creates an aerodynamic drag against the flow, which causes a decrease in wind speed and modifies turbulence (Zaïdi et al., 2013). The quantification of the vegetation impact on local concentrations has not been assessed here but previous studies of the effect of microscale heterogeneities of turbulence highlighted the effect of vegetation on wind speed and turbulence. Zaïdi et al. (2013) showed that using a porous model instead of a classical roughness law led to higher values of turbulence (50% more overall) and lower wind speed (50% less overall) near the surface (below 40 m). However, the spatial extent of the vegetation in that study was more significant than in our case (it almost completely surrounds the site, while in our case vegetation is more scattered and less significant than buildings in terms of surface area). Thus, the vegetation effect on wind speed and turbulence might not be very significant in our configuration.

Another structural difference between the two models is the street network. For SinG, it is a quasi-complete network covering 577 road sections over a larger area (of a couple of kilometers wide) than that covered by *Code_Saturne*, which consists of 15 connected sections for the boulevard (lumped back into a single one) and a few adjacent streets. This difference is certainly not negligible considering the existence of major roads including the A86 motorway, which is taken into account in the network of the SinG model. *Code_Saturne* may well miss the contribution of this highway, which must influence the boundary concentrations west of the domain. Although we take into account boundary conditions from SinG in *Code_Saturne*, these may be diluted at the roof level and the direct influence at the street level may not be properly represented across these boundary conditions. In addition, the emissions from traffic on the boulevard in *Code_Saturne* correspond to the average of the emissions of the sections constituting the boulevard in SinG. Therefore, at the locations of the measurement stations, the emissions considered in *Code_Saturne* and SinG may differ slightly.

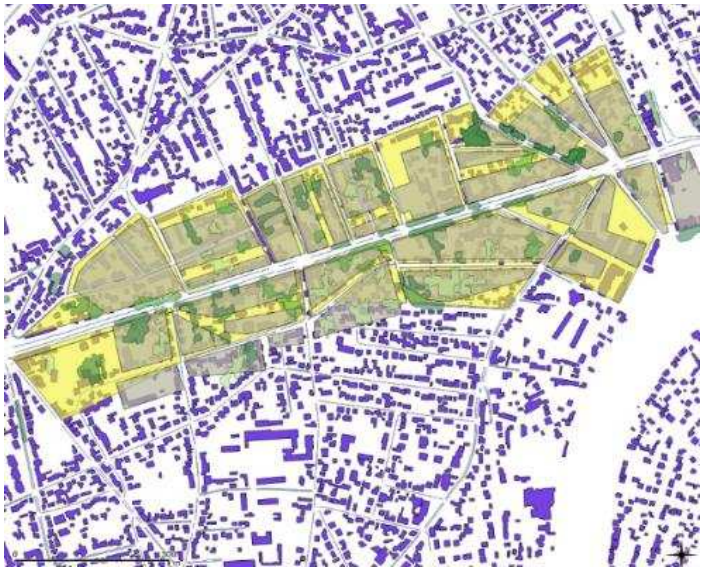


Figure 3.3 - Actual (purple), SinG (light yellow) and Code_Saturne (light grey) building morphology representations and vegetation (green shades) considered in Code_Saturne.

d. Comparison of averaged concentrations at the monitoring stations

— Influence of wind speed

Overall, concentrations are highest when winds are low (≤ 2 $m.s^{-1}$), which is expected as low wind speeds lead to slower advection and less turbulent dispersion. For both models, we observe an anti-correlation between the concentrations and the wind speeds, respectively -0.76 and -0.74 for *Code_Saturne* and SinG, while the observations show a stronger anti-correlation of -0.94. However, there is not a simple linear relationship between the concentrations and the wind speeds for either models (as one would expect from a box or Gaussian model). In particular, *Code_Saturne* shows a more complex relationship between these two variables.

— Influence of emissions

Concentrations increase proportionately with emissions for SinG, because the SinG simulation includes a domain sufficiently large that minimizes the influence of boundary conditions. On the other hand, *Code_Saturne* has a less than proportionnal behavior, because of a smaller modeling domain. The correlations between emissions and concentrations are 0.67 for SinG, 0.60 for Code_Saturne, and 0.34 for observations. The case with low simulated emissions corresponds to the cases with the lowest simulated concentrations for both *Code_Saturne* and SinG. However, this is not the case for the measured concentrations, which suggests that the simulated emissions show too much variability compared to actual emissions.

— Influence of background

Background concentrations are less influential in SinG (the correlation is 0.11) than in *Code_Saturne* (r = 0.58). This result is consistent with that obtained above for the correlations between emissions and concentrations and the much smaller computational domain in *Code_Saturne*. This difference results from the configurations of the two models. In *Code_Saturne*, background concentrations are provided at the boundaries of the domain and are then transported by the wind flow and turbulence into the urban canopy to contribute to local concentrations. On the other hand, in SinG, the background concentrations are influenced by the concentrations calculated in the urban street network. Here, it appears that local concentrations that depend on emissions other than those of the background are dominant. However, a low correlation is obtained between background concentrations simulated and local concentrations with SinG used in both *Code_Saturne* and SinG (concentrations in SinG also come from upwind streets) to calculate the concentrations within the boulevard. This indicates that the simulated background concentrations are not necessarily representative of actual conditions.

— Influence of other variables

There are some cases (simulated and observed) that cannot be related to the effects of wind speeds (case 2 in Tables 3.1 and 3.2) but are related to emissions and vice versa (case 4 in Tables 3.1 and 3.2). For these cases, the analysis is complex because the models show a heterogeneous and non-systematic response. Thus, one of the possible hypotheses would be an effect of the morphology (actual and simulated) on the concentrations in conjunction with wind directions.

— General patterns

A case with *Code_Saturne* is presented (case 1 in Tables 3.1 and 3.2), with the following conditions: low wind (0.9 $m.s^{-1}$), significant emissions (324.7 $\mu g.m^{-1}.s^{-1}$), a medium background (30⁄ contribution to boulevard concentrations) and a direction parallel to the axis of the boulevard (which does not influence the concentrations so much since there is light wind). This case corresponds to the case where the observed concentrations and the concentrations simulated by *Code_Saturne* are the most important (201 and 187 $\mu g.m^{-3}$, respectively). On the other hand, SinG is more sensitive to high emissions (466.1 $\mu g.m^{-1}.s^{-1}$), with a diagonal wind to the boulevard axis but slightly less sensitive to the urban background (26⁄ contribution), those characteristics correspond to case 5 (see Tables 3.1 and 3.2).

Overall, *Code_Saturne* underestimated (-17⁄) the observations, particularly for cases with winds nearly perpendicular to the axis of the boulevard (underestimation by a factor 3). On the other hand, SinG is on average very close to the observations (underestimation <-7⁄), except when the wind is very weak (<1 $m.s^{-1}$).

3.2.4.2 General observations on the cross-street concentration gradient and wind direction features

Before analyzing the spatial variability of the concentrations across the street as measured and simulated by *Code_Saturne*, it appears worthwhile to understand the flow patterns driving the concentrations at the two monitoring stations (Figure 3.4). Accordingly we present here a general analysis of the observed concentrations as a function of the angle between the wind direction and the street axis and the origins of wind directions (quadrants). One should note however that the wind direction data are obtained from a WRF simulation since no meteorological measurements were available in the area. Therefore, they may not represent exactly the actual wind direction above the urban canopy in this area. A detailed performance evaluation of WRF with observations available at a Météo France meteorological monitoring stations located a few kilometers from this area showed satisfactory performance for wind speed and direction. However, there was an average bias of 15° (to the east) between the WRF simulation and the observations. Thus, this uncertainty must be kept in mind when analyzing the results presented below.

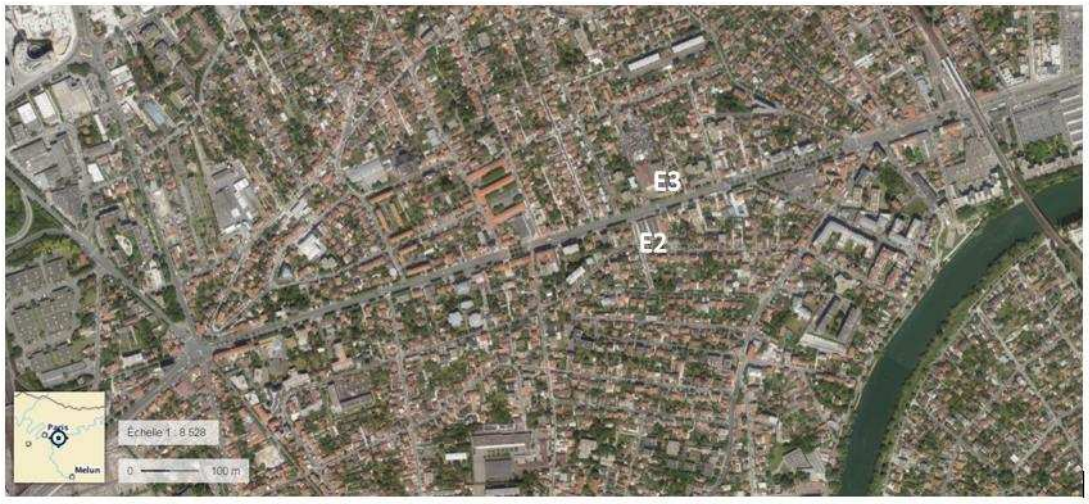


Figure 3.4 - Spatial distribution of the two monitoring stations of air quality on each side of the boulevard (source: géoportail).

Concentrations are mostly higher at the southern station (E2) than at the northern station E3) (67-81⁄) They are typically greater when the wind comes from the southern quadrants (SW 81⁄ and SE 77⁄). They are, however, also more frequently greater when the wind comes from the NE (67⁄) and the concentrations at the southern station are less frequently greater than those at the northern station only when the wind comes from the northwest (42⁄) (see Figure 3.5 for the observation values). Furthermore, differences are much greater on average between the two stations when the wind comes from the southwest, southeast, and northeast than when it comes from the northwest (about a factor of 2.5).

Overall, the recirculation zone is dominantly formed at the southern station according to the observations, which is consistent with an angle of the southern wind perpendicular or diagonal to the street axis, but not with a wind coming from the north. In the measurements, only the northwestern direction induces a recirculation towards the northern station more

frequently than towards the southern station. Indeed, the northeastern direction surprisingly generates a dominant recirculation towards the southern station. However, the recirculation zone in the southern location is more significant with a southwestern direction, which constitutes a more academic case according to the building morphology.

In conclusion, the flow pattern governing concentrations at the two monitoring stations is complex, especially for northerly winds, and does not fit well into an academic conceptual representation of a recirculation zone on the windward side of the street and a ventilation zone on the leeward side. We can assume at this stage that the recirculation area (characterized by high concentrations compared to the other side of the street) does not only result from the wind direction, but is also influenced by other processes that are not necessarily well integrated into the model or even well identified here (such as emissions, building orientation to the wind, street network, etc.). Therefore, such a complexity in the case of northerly winds will probably be difficult to reproduce. Nevertheless, southerly winds appear to induce a natural recirculation of pollutants on the southern side of the street. This recirculation process is expected and, therefore, we can expect that the model will be able to reproduce such patterns associated with southerly winds more easily.

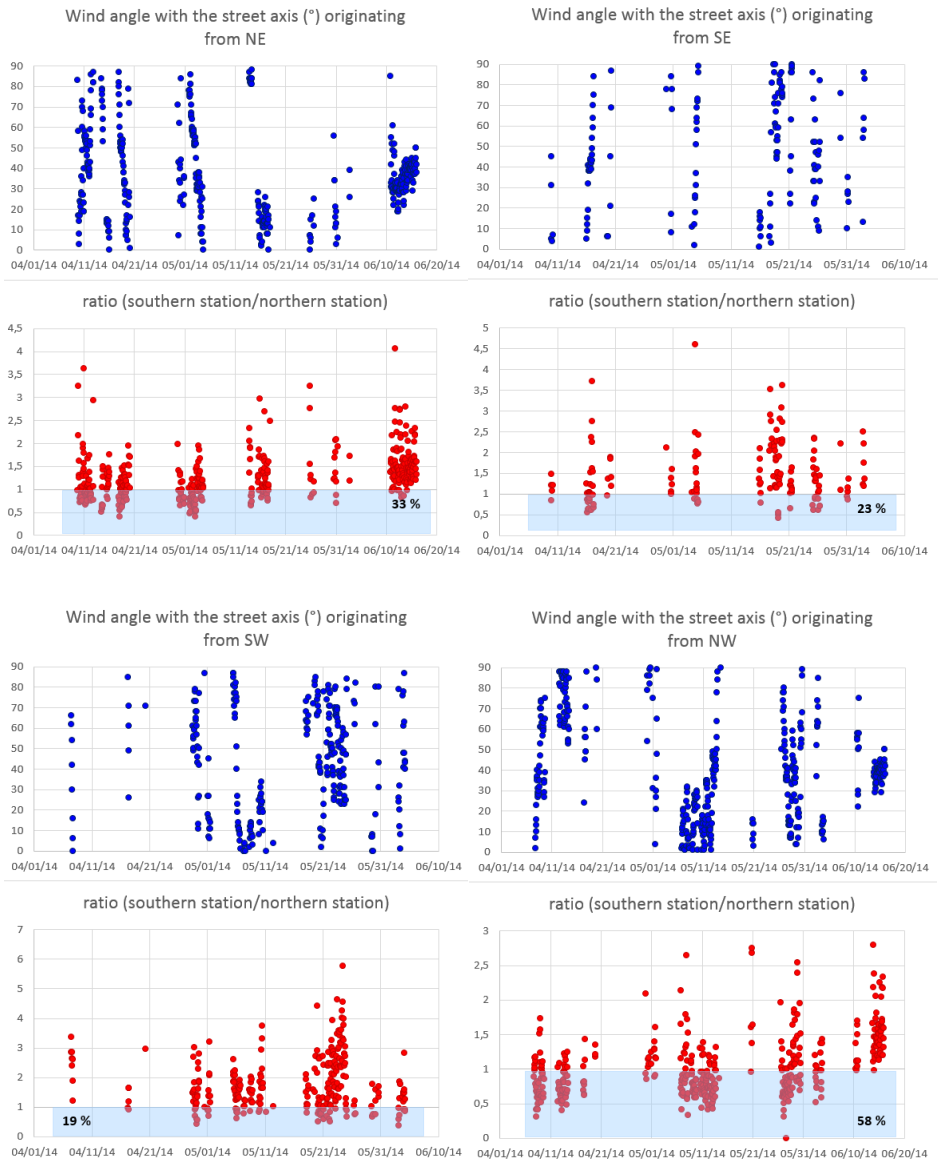


Figure 3.5 - Wind directions according to street axis and its origin by quadrant and the ratio of the southern station (E2) concentration over the northern station (E3) concentration as a function of time. Frequency of ratio lower than 1 is given in ⁄ .

3.2.4.3 Code_Saturne: sensitivity of concentration gradients to wind direction

Some characteristics of the observations were identified above in terms of the concentration gradient between the two monitoring stations located on each side of the street as a function of the angle between the wind direction and the street axis, as well as with the quadrant corresponding to the wind origin. Here, we evaluate whether the *Code_Saturne* simulations can reproduce the main features of the effect of wind direction on the gradient of concentration between the two sides of the street. As noted above, the southern monitoring station (E2) was identified as the station mostly influenced by a recirculation zone according to the observations. Hereafter, to characterize the concentration gradient between these two stations and conduct the analysis of the simulation results, we use (1) the ratio of the concentrations at the southern and northern stations (E2/E3), (2) the difference between these concentrations (E2 – E3) and (3) the relative difference {2 (E2-E3) / (E2 + E3)}. Although the first and third metrics are related, they allow us to provide a more complete comparison of the measured and simulated concentration gradients. We analyze the five cases simulated with *Code_Saturne* below. These cases include two cases with a wind direction nearly parallel to the street axis (case 1 with a northeasterly wind and case 4 with a southwesterly wind), two cases with a wind direction diagonal to the street axis (case 3 with a southeasterly wind and case 5 with a southwesterly wind) and a case with a wind direction nearly perpendicular to the street axis (case 2 with a southerly wind). Case 2 corresponds to traffic emissions that are about 4 times lower than those of the other cases and Case 1 has calm conditions whereas the other cases have wind speeds > 2 $m.s^{-1}$.

a. Case 1: Northeasterly wind nearly parallel to the street axis under calm conditions

Observed concentrations accumulate preferentially on the windward side while the wind comes from the north (Table 3.2). However, the wind angle with respect to the axis of the street is almost parallel (7°), which does not explain the strong gradient observed between the two measurement stations (ratio of 1.64). On the other hand, the *Code_Saturne* simulation is consistent with the wind direction with respect to the street. The simulated ratio is 0.85 and the relative concentration difference is -16⁄ between the two stations, which seems reasonable considering that the wind is blowing along the street axis. One should note however that the wind speed is very low (<1 $m.s^{-1}$) and the development of a recirculation zone is not well defined under calm conditions. Furthermore, the wind direction simulated with WRF may be even more variable in calm conditions and, therefore, may not correspond exactly to the actual wind direction of this case. This case is investigated further below in a sensitivity study.

b. Case 2: Southerly wind perpendicular to the street axis with low emissions

Observations as well as the *Code_Saturne* simulation show a similar response to the southerly wind that is nearly perpendicular to the street axis. However, the gradient is much stronger in the observations (ratio of 1.57 and relative difference of 0.44) than in the simulation (ratio of 1.14 and relative difference of 0.13). One should note however that the simulated concentrations underestimate significantly the observed average concentrations (see above), by about 70⁄ . Therefore, it is possible that the emissions used in the *Code_Saturne*

simulation underestimate the actual emissions. We assume that greater emissions used in the simulation will induce a greater concentration gradient and in better agreement with the observed gradient. To verify this hypothesis, we tested an increase of emissions by a factor 4 (see case 7). The ratio is then 1.46 and the relative difference is 0.37, which are closer to the observed values. These results suggest that estimated emissions seem to be too low for a Saturday morning (03/20/2014). We recall here that the emissions were calculated only for two typical days: one week day (Tuesday) and one weekend day (Sunday), which are not necessarily representative of the other days of the week. For example, there is a lot more traffic on Saturday morning than on Sunday morning.

c. Case 3: Southeasterly wind diagonal to the street axis

With this diagonal southeasterly wind, both the observations and the simulation show a recirculation zone on the southern side of the street and concentrations are consistently higher on the windward side (Table 3.2). On the other hand, the gradients are more pronounced in the observations (ratio of 1.36 and relative difference of 0.30) compared to the gradients obtained in the simulation (ratio of 1.14 and relative difference of 0.14).

d. Case 4: Southwesterly wind nearly parallel to the street axis

This case shows both observations and simulation with greater concentrations on the southern end of the street, which is consistent with the slightly southern direction of the wind. The concentration gradient is however greater in the observations (ratio of 1.51 and relative difference of 0.40) than in the simulation (ratio of 1.23 and relative difference of 0.21). This is consistent with the previous case (also with a southerly wind), where the observed concentration gradient was also greater than the simulated one. However, if we compare the wind speeds observed at the St Maur station located a few kilometers away to the WRF simulations at this station (comparison with observations is not possible at the boulevard), a wind decrease of 20⁄ can be observed, which could lead to less dispersion and therefore lead to greater containment of pollutants within the street (and a greater gradient too). The offset in the direction of the wind is 18° east, which would correspond to a direction of 220° and an angle with the street of 25°. We cannot relate this angle to one of the cases presented here and therefore we cannot discuss qualitatively the impact of this discrepancy.

e. Case 5: Southwesterly wind diagonal to the street axis

When the wind comes from the southwest, the simulation shows a greater concentration gradient (ratio of 1.72 and relative concentration difference of 0.53) than that obtained with case 3, when the wind was from the southeast. On the other hand, similar gradients are obtained in the observations for both cases. The concentration difference is very similar for the observations and the simulation (~70 $\mu g/m^3$). However, the ratio and the relative difference show a greater gradient for the simulation than the observations (see Table 3.2). The stronger gradient obtained in the simulation could result in part from the street network configuration. For example, there is a street with a southeasterly axis located upwind of the two monitoring stations, that could lead to an increased recirculation pattern on the

southern side of the street. The fact that this is not as much reflected in the observations and could be due to a more distributed wind flow (since the *Code_Saturne* simulation configuration does not include all minor streets) and also a slightly different wind direction compared to the one obtained from the WRF simulation. Indeed, if we compare the wind speeds observed at the St Maur station, the observed wind speed is of 45⁄ greater, which could lead to greater dispersion. On the other hand, this is not what *Code_Saturne* simulations indicate. The wind directions are shifted by 40° eastward in the simulations. If we corrected this angle on the *Code_Saturne* simulations, we would obtain a direction of 162°, which is an angle quasi-perpendicular to the axis of the street as in case 2. Case 2 indicates that for this wind configuration the simulated gradient of concentrations is lower, which would be more consistent with observations. However, it should be noted that other factors may be involved such as the level of emissions.

According to Figure 3.6, minimum simulated wind speeds occur in the vicinity of the monitoring stations, in particular near station E2. This is also visible in Figure 3.7, where the concentrations concentrate spatially where the minimum wind speed occurs, preferentialy near E2 (where the concentrations are higher).

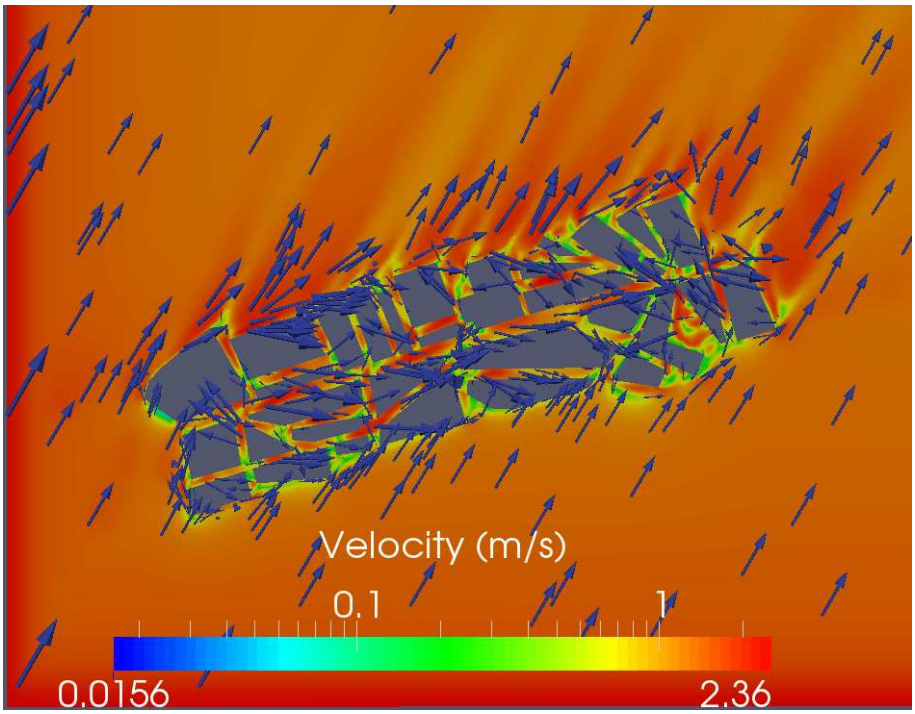


Figure 3.6 - Horizontal cross-section of wind speed (at 0.5 m) within the domain.

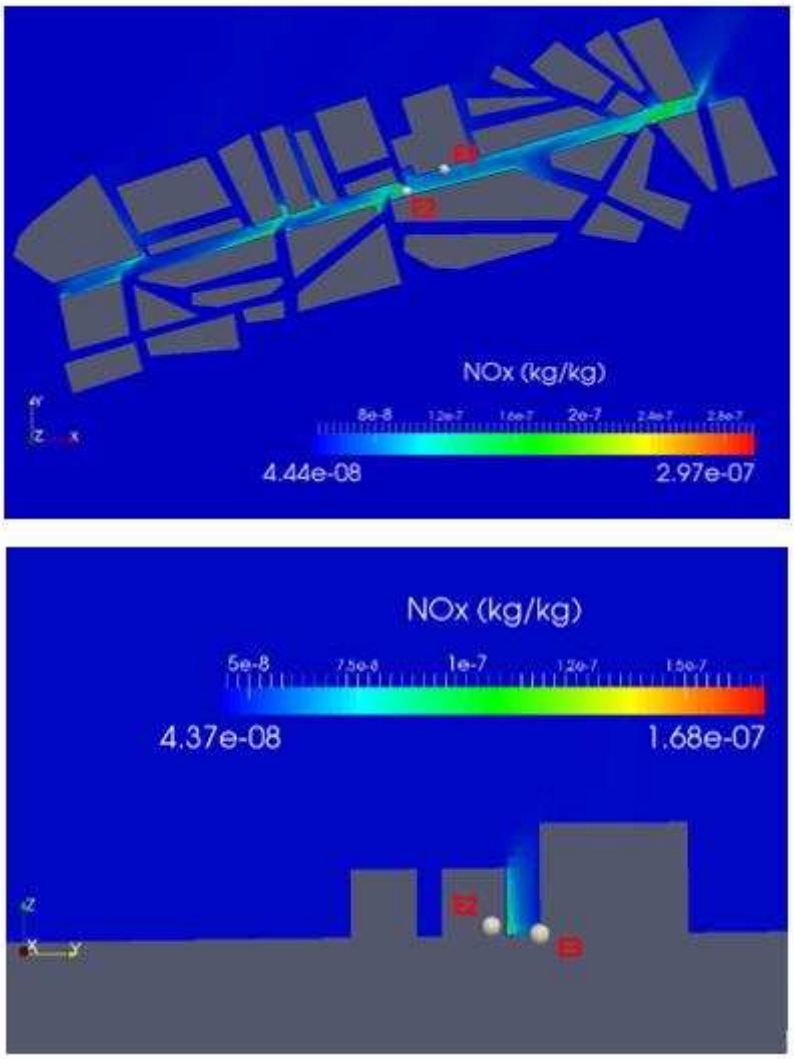


Figure 3.7 - Horizontal cross-section of NO_x concentrations at 0.5 m high (left side) and vertical cross-section of NO_x concentrations within the street-canyon (right side) in the plane between the two monitoring stations. The concentrations are expressed in kg/kg which can be converted to µg.m^{-3} by multiplying by the following factor: 1.204 x 10^{9}.

f. Summary of the Code_Saturne simulations of the concentration gradients

The five cases presented above and categorized in terms of wind direction and angle with respect to the axis of the street (quasi-perpendicular, quasi-parallel or diagonal) show quite contrasting responses even in cases where the wind would come from the same direction or having a more or less similar street angle. These contrasts seem to depend on other factors that may be related to a combination of emissions and street-network configuration. We have seen that the observations are not always consistent with the wind direction with respect to the street axis and uncertainties in the WRF simulated wind field could partially affect the analysis. For cases 1 and 3, wind speed and wind direction are in a very good agreement with observations at St Maur (the nearest meteorological monitoring station), the relative difference between observations and simulations is respectively -0.26 and +0.2 $m.s^{-1}$ for wind speed and 0 and 1° for wind direction. However, for the other cases, the relative difference is varying between -1.6 and +0.9 $m.s^{-1}$ for wind speed and between -18 and -40° for wind direction. These results suggest that for those cases, the uncertainty of the wind field cannot be neglected and we discussed their impact in each case (case 4 is the most impacted by an overestimation of wind speed that induces greater dispersion compared to observations, while case 5 is the most impacted by the wind direction that induces a greater gradient compared to observations). In contrast, the results obtained with *Code_Saturne* are in general consistent with the direction and angle of the wind to the street axis. The chosen design of the building configuration for the *Code_Saturne* simulation could induce excessive traffic areas and, therefore, an overestimated dilution of concentrations, in particular in the case of winds originating from the southeast and almost perpendicular or diagonal to the boulevard. The recirculation zones may also be somewhat shifted in space, as we can see in Figure 3.7 that areas of high concentrations are formed on the boulevard. Finally, the model simulation seems to be very sensitive to the configuration of the emissions and boundary conditions. Indeed, the two modeling approaches used concerning the configuration of emissions and boundary conditions show that the concentration gradient can be very sensitive to that aspect of model configuration.

3.2.4.4 Code_Saturne: sensitivity to emissions

We test here a different approach to the emission configuration and boundary conditions in *Code_Saturne* to investigate their impact on the concentrations simulated at the two measurement stations for case 1; it corresponds to case 6. We first define emissions in the boulevard (with boulevard-specific values) and emissions on the secondary streets (by applying an average of emissions over the entire network except in the boulevard area). The secondary emissions (symbolized in red in Figure 3.2) are identical on each side of the boulevard. In addition, we averaged the street emissions over the whole network (and not only on the sections relating to secondary streets) in order to increase the contributions of the major local roads, especially in order to better account for the influence of the A86 motorway located on the west side of the study area, but not included in the *Code_Saturne* modeling area. This average emission rate is lower (by about a factor of three) than that on the boulevard because some street sections have very low emission values. Boundary conditions are also provided to the model and were obtained from an urban monitoring station (Champigny) located (about 4 km southward) from the study area. This urban

background monitoring station measures a lower level of pollution (22⁄) than the SinG simulated background extracted at the roof level of the urban canopy.

It is interesting to note that the emission configuration of the secondary streets generates a different gradient from that observed with the initial configuration (Table 3.2). Indeed, the contribution of secondary streets seems to have a direct impact on concentrations and induces a gradient in the same direction as the observations, although less pronounced (ratios of 1.24 and 1.64, respectively for simulation and observations). On the other hand, considering the quasi-parallel direction with the street axis, this smaller gradient appears to be consistent with the meteorological input data provided to the model.

3.2.5. CONCLUSION

The implementation of the *Code_Saturne* and SinG simulations and their analyzes were very challenging because of the complex geometry of this actual street-network of a Parisian suburb in a residential district. It is a complex three-dimensional problem whose wind governs the horizontal transport and turbulence the vertical mixing. Although buildings were treated explicitly to represent the spatial heterogeneities in the concentration fields and therefore, to better approach reality, simplifications were made to the urban morphology. We have seen that the two models have different approaches in several respects, the physics formulations are specific to each model, the morphological entities do not necessarily coincide in terms of number and dimensions between the two models, and the input data (emissions, meteorology, urban background concentrations) also differ although they originate from the same sources. Concerning the differences in the physics formulation, parameters such as the wind speed and the turbulence differ between the two models, although the formulation of the street-network component of SinG is based in part on simulations conducted with *Code_Saturne* for idealized configurations. Concerning the different configurations of the urban morphology; the configuration used in SinG is a typical "street-canyon" configuration, while that in *Code_Saturne* is more open, with more interstitial spaces, thereby favoring more pollutant transport and dispersion. We had to make choices of representations, which can introduce biases in the calculated concentrations. It was not possible for reasons of computing time and memory space to process realistically all the buildings constituting the housing stock of the neighborhood studied here at a fine resolution (2.5 m). Other sources of uncertainty include meteorology (the WRF simulations of the wind directions present a regular shift of 15° towards the east compared to the observations on average for the whole 3-month period) and emissions (the variability is estimated to 46⁄ for NO_x between a standard approach COPERT IV and HEAVEN, which has been specifically applied here). Moreover, structural difference may influence the results of each models and also their comparison. In *Code_Saturne*, the emissions were considered here to be as homogeneous over the entire axis of the boulevard, whereas they were segmented into several sections in SinG. This difference may have had a slight impact on the spatial variation of street emissions. The two directions of traffic were lumped together when developing the emission estimates. If traffic differed significantly between the two directions at certain hours, this could of course affect the cross-street concentration gradient.

Despite these characteristics and their associated uncertainties (building morphology, emission, meteorology and background input data), we obtain results with *Code_Saturne* in

terms of cross-street concentration gradients that are consistent with the angles between the wind direction and the axis of the boulevard. However, it appears that *Code_Saturne* underestimates this gradient in most cases. In one case, it was shown that including emissions from side streets improved the agreement between *Code_Saturne* and the observations. In another case, an underestimation of the emissions could explain the underprediction at least partially. In terms of averaged concentrations within the boulevard, SinG and *Code_Saturne* are in reasonably good agreement with the observations, with a tendency of *Code_Saturne* to underestimate more than SinG, probably because of a more comprehensive treatment of the background concentrations in SinG. FAC2 for *Code_Saturne* and SinG are respectively, 0.83 and 0.93; those values are close to 1 indicating overall good performance. SinG has some weaknesses in reproducing the levels of concentrations when the wind is very low (<1 $m.s^{-1}$). Also, we shown that in a semi-open canyon-street configuration with a complex street-network, it may not be appropriate to formulate recirculation and ventilation zones, because observations do not show a clear relationship between wind direction with respect to the boulevard axis and concentrations. Other factors such as the street network and the associated emissions may play an important role as well. SinG with its street-average formulation compares satisfactorily with averaged observations and may be appropriate for most applications. Describing more precisely the concentration field within the street network would require simulating the ensemble of streets with a CFD model such as *Code_Saturne*.

This work may lead to several prospects. First, a term could be added in *Code_Saturne* to account for turbulence induced by vehicles, especially when traffic is significant (rush hours) and atmospheric turbulence low or moderate. The morphology of the buildings, could be refined with more details around the measurement stations. We could also use the same morphological configuration as that used in SinG in order to compare more directly the two models. Sidewalks and the mid-street divider could also be distinguished from the street. It was shown that under calm wind conditions, emissions from other streets could be influential; thus, emissions from secondary streets could be discriminated spatially. Finally, we could quantitatively evaluate the effect of vegetation on wind speeds, turbulence and their consequences on concentrations. Concerning SinG, the effect of low winds on the concentration levels could be evaluated further and consideration could be given to introducing a term to treat the turbulence induced by vehicles.

CHAPITRE 4. LA RÉÉMISSION DES PARTICULES APRÈS LE PASSAGE DES VÉHICULES A L'ÉCHELLE DE LA RUE

L'article résumé pour ce chapitre est le suivant :

Intercomparison of three modeling approaches for road dust réémission using two experimental data sets.

Thouron, L., Seigneur, C., Kim, Y., Mahé, F., André, M., D., Bruge, B., Chanut, H. and Pellan, Y.

Soumis à Transportation Research Part.D

4.1. RÉSUMÉ DE L'ARTICLE

4.1.1. INTRODUCTION

Les émissions directes correspondent aux émissions échappements (polluants émanant du pot d'échappement) et aux émissions liées à l'abrasion du matériel automobile et routier. La réémission est définie comme la remise en suspension des particules par le flux d'air après leur dépôt sur la surface de la route, ce sont donc des émissions secondaires. Mollinger et al. (2007) passa en revue plusieurs expériences de réémission causée par le trafic routier et conclu que le flux d'air est modifié par plusieurs facteurs comme le mouvement, la dimension et le type de véhicule. D'autres facteurs tels que le type de revêtement routier et la présence d'humidité sur la chaussée peuvent aussi affecter la quantité de particules remises en suspension dans l'air ambiant.

Ces réémissions ne sont pas encore réglementées par les directives européennes ni françaises, ni comptabilisées dans les inventaires d'émission, pour autant elles peuvent contribuer significativement à augmenter les niveaux de concentrations dans les zones où le trafic est important. La nécessité de modéliser tous les phénomènes induisant les niveaux de pollution en milieu urbain afin de se rapprocher le plus possible des concentrations observées en bordure de route a amené à considérer à part entière le phénomène de réémission dans la modélisation atmosphérique.

Nous nous intéressons ici à deux études de cas ayant des caractéristiques de trafic différentes. Ainsi, MOCoPo est un projet situé près de Grenoble, dans le sud-est de la France étudiant les effets de la voie rapide d'Echirolles (N87) sur les niveaux de pollution à proximité.

L'autre projet, TrafiPollu, s'intéresse à la pollution près d'un boulevard en zone résidentielle de banlieue parisienne. Nous allons évaluer les émissions liées à la remise en suspension sur ces deux cas d'étude.

Des études précédentes se sont intéressées à quantifier la réémission. Une méthode par analyse en composante principale dite « Positive Matrix Factorisation » (PMF) a été utilisée par Polo Rehn (2013) afin d'estimer le terme source non-échappement sur le cas d'étude de MOCoPo. Sur la période de mesure, la réémission moyenne correspondait à une contribution de 76⁄ par rapport aux émissions directes. Fallah Shorshani et al. (2015) ont utilisé cette valeur moyenne pour leurs simulations de dispersion atmosphérique des polluants liés au trafic routier, toujours sur le cas de MOCoPo. En région parisienne, Amato et al. (2016) conduisirent une étude expérimentale près du boulevard périphérique de Paris et utilisèrent également la PMF pour estimer la réémission induite par le trafic, la valeur moyenne observée est cependant plus basse (22%) qu'au site d'étude de la région grenobloise (MOCoPo). Par ailleurs, l'agence fédérale américaine pour la protection de l'environnement (EPA) propose des facteurs d'émission prédictifs de la réémission sur la base d'une analyse en régression de 83 tests pour divers types de route (U.S. EPA, 2011). Cette approche dite « AP-42 » a été récemment appliquée sur un cas d'étude situé dans la vallée du Po pour janvier 2010 (Pepe et al., 2016). La réémission mensuelle en PM_{10} a été estimée à plus de 60⁄ des émissions du trafic sur un large domaine (85 km x 85 km) couvrant Milan.

Dans cet article, trois modèles issus de la littérature ont été testés. Ces modèles correspondent à trois approches différentes : la méthode empirique de Thorpe et al. (2007), le modèle semi-empirique HERMES (Pay et al., 2011) et le modèle déterministe NORTRIP (Denby et al., 2013).

Le but de cette étude est de (1) comparer ces différentes approches (2) mettre en évidence leur sensibilité à certaines données d'entrée et leur opérabilité et (3) quantifier la réémission des particules présentes sur la chaussée pour ceux deux études de cas.

4.1.2. DESCRIPTION DES MODÈLES D'EMISSION DE REMISE EN SUSPENSION DES PM

Le modèle HERMES a une formulation assez simple qui tient compte du débit et de facteurs de réémission (pour voitures et poids-lourds). Il s'agit d'un modèle semi-empirique développé par Pay et al. (2011) pour un cas d'étude espagnol. Dans cette formulation, les taux de réémission ne sont pas décomposés selon les sources de particules. Cette formulation ne peut donc pas distinguer les sources de contribution telles que la réémission des particules déposées issues de l'abrasion des pneus, des freins ou de la chaussée. Par ailleurs, elle ne dépend pas de la vitesse du trafic, mais seulement du débit.

Le modèle NORTRIP est un modèle déterministe développé par Denby et al. (2013) qui présente quatre différences majeures avec HERMES: (1) il est basé sur un bilan de masse sur la chaussée des particules déposées au lieu d'un taux de réémission par défaut, (2) la vitesse des véhicules en plus du débit pour calculer le taux de réémission est prise en compte, (3) les précipitations et l'humidité sont incluses dans les processus de réémission ainsi que le type de revêtement de la chaussée et (4) des facteurs de réémissions distincts pour les poussières de pneus, freins et chaussée sont pris en compte. Dans cette approche, la production de

particules est due à l'abrasion des freins, des pneus et de la route, mais les dépôts atmosphériques ne sont pas inclus. Les taux d'usure sont obtenus à partir de facteurs d'émissions spécifiques aux différents types de véhicules (taux d'usure de référence), du rapport de vitesse des véhicules sur une vitesse d'usure de référence et d'autres paramètres tels que le type de revêtement de la chaussée ou les conditions du trafic (condition homogène dans nos applications). Les taux d'usure calculés pour le cas d'étude MOCoPo sont comparables aux taux d'usure de référence car le rapport des vitesses (vitesses observées sur vitesse de référence) est proche de 1. En revanche, il existe un facteur 2 entre les vitesses observées et la vitesse de référence d'abrasion pour le cas d'étude TrafiPollu. De la sorte, les taux d'usure sont deux fois moins importants pour les taux d'usure des freins et des pneus. Néanmoins, pour chacun des cas d'étude l'usure de la route domine, avec un taux d'usure dépendant d'un facteur caractéristique du type de revêtement en plus du rapport des vitesses. Le bilan de masse à la surface de la chaussée dépend du taux de production et d'un taux de perte. Le taux de perte correspond à un terme puits proportionnel à la masse de particules présentes sur la chaussée et est exprimé pour chaque type de véhicules en fonction du débit du trafic (nombre de véhicules par heure), et d'un facteur qui caractérise la remise en suspension de particules en fonction de leur tailles (ici PM_{10}) et de la vitesse du trafic. L'équation du bilan de masse est résolue pour donner la masse de particules présentes sur la chaussée en fonction du temps, puis l'émission de particules dans l'atmosphère par réémission.

Le modèle de Thorpe et al. (2007) est uniquement applicable si des observations sont disponibles (en bordure de route et à des stations de fond). Par conséquent, ce n'est pas un modèle prédictif mais diagnostique. Dans cette approche, les émissions de PM_{10} liées au trafic sont calculées à partir des émissions de NO_x liées au trafic et du rapport des concentrations de PM_{10} et de NO_x mesurées en bordure de route, qui sont dues au trafic. Ces concentrations dues au trafic consistent en la différence entre les concentrations mesurées en bordure de chaussée et des concentrations urbaines de fond ; elles représentent donc la contribution du trafic routier roulant sur cette chaussée. Les émissions de NO_x sont obtenues à partir de facteurs d'émissions et du trafic (en termes de types de véhicules, débits et vitesses). On fait l'hypothèse que les émissions dues à l'échappement des véhicules sont des particules fines ($PM_{2,5}$) et que les autres émissions (abrasion et réémission) sont des particules grossières (PM_{10} – $PM_{2,5}$). On obtient ainsi les émissions de particules hors échappement. Pour obtenir les émissions dues à la réémission, on soustrait de ce terme les émissions de particules dues à l'usure par abrasion des freins, des pneus et de la chaussée (obtenues à partir des facteurs d'émission standard). Ce modèle ne distingue pas les sources de réémission et plusieurs contraintes sont placées sur les observations afin d'éviter des valeurs aberrantes et des différences négatives entre les mesures en bordure de route et le fond urbain. Cette dernière méthode peut donc être contraignante et n'a pu être appliquée qu'au cas de MOCoPo.

Dans ces trois modèles, c'est la réémission des PM_{10} (particules < 10 µm) qui est estimée parce que les facteurs d'émission ne sont connus que pour cette taille de particule. En revanche, la réémission des particules peut affecter des gammes de taille allant jusqu'à 40 µm (au-delà les vitesses de sédimentation sont trop élevées et les particules se déposent presqu'immédiatement après avoir été mobilisées).Il y a donc un besoin d'estimer les facteurs d'émission pour les particules de taille allant jusqu'à 40 µm si l'on veut pouvoir évaluer leur réémission dans l'atmosphère.

4.1.3. SENSIBILITÉ DE LA FORMULATION DE NORTRIP AUX PRÉCIPITATIONS

La formulation originale du modèle NORTRIP tient compte d'un facteur de rétention des particules lié à l'humidité de la chaussée. Le diagnostic de ce paramètre est sophistiqué, et nous avons extrait sa valeur du modèle original NORTRIP (Denby et al., 2012) car nous ne l'avons pas implémenté dans notre version du modèle. En revanche, dans notre approche, les précipitations affectent la masse de particules se déposant au sol et donc prêtes à être remises en suspension, non pas par un facteur la retenant à la surface de la chaussée mais en considérant un lessivage complet de celle-ci lorsque l'évènement pluvieux est suffisamment important (> 0.254 $mm.h^{-1}$). Cette hypothèse est basée sur la modélisation hydrologique effectuée dans le projet TrafiPollu s'intéressant à la charge en PM_{10} présente sur la chaussée avant et après un évènement pluvieux. Ces résultats de modélisation suggèrent que > 90⁄ des particules sont lessivées (Hong et al., 2016). En conséquence, cette hypothèse paraît être raisonnable et sa conséquence directe est une remise à zéro de la charge massique en PM_{10} à chaque fois qu'il pleut. Ainsi, nous avons simulé la charge massique selon trois hypothèses pour notre cas d'étude TrafiPollu, une hypothèse de rétention de surface en appliquant le facteur de rétention provenant du modèle original, une hypothèse de lessivage complet en cas d'évènement pluvieux et, enfin, une hypothèse de période sèche (aucune humidité ni pluie n'est considérée). Les résultats montrent que, par rapport à une hypothèse de période sèche la charge massique en PM_{10} est réduite de 61⁄ en utilisant le facteur de rétention, et de 84% dans l'hypothèse d'un lessivage complet de la chaussée. Cette différence impacte directement les résultats finaux d'estimation des émissions liées à la remise en suspension. Nous nous appuyons ici sur l'analyse des données expérimentale/simulée de Hong et al. (2016) pour sélectionner l'hypothèse d'un lessivage complet dans la suite de nos modélisations. Par ailleurs, dans le cas de MOCoPo, l'impact de ces différentes hypothèses est mineur car la pluie n'intervient pas aussi fréquemment (2% contre 8% pour TrafiPollu).

4.1.4. SENSIBILITÉ DES TROIS FORMULATIONS AUX CARACTÉRISTIQUES DU TRAFIC

Les conditions de trafic et leur impact sur les émissions de remise en suspension sont évalués au travers des deux cas d'étude dont les caractéristiques sont bien distinctes. Dans le cas d'étude MOCoPo, la vitesse moyenne est 69 $km.h^{-1}$ et le débit moyen est 4038 $veh.h^{-1}$. En revanche, dans le cas d'étude de TrafiPollu, la vitesse moyenne est 32 $km.h^{-1}$ et le débit moyen est 795 $veh.h^{-1}$, cela correspond respectivement à une réduction d'un facteur 2 et 5. La formulation HERMES donne des émissions comparables aux émissions directes (échappement et abrasion) pour le cas d'étude MOCoPo, alors que dans le cas d'étude de TrafiPollu, ces émissions sont largement supérieures (environ deux fois les émissions directes). La formulation de NORTRIP est dans le premier cas d'étude (MOCoPo) comparable aux émissions directes (82⁄), ce qui est cohérent avec la valeur trouvée par Polo Rehn (2013) basée sur une étude statistique (PMF) des données expérimentales. Dans le second cas, celle-ci est amoindrie et ne représente plus que 9⁄ . Néanmoins, cette valeur est cohérente avec la valeur trouvée (22⁄) en utilisant aussi une PMF en région parisienne par Amato et al. (2016) compte tenu de conditions de trafic légèrement supérieures (zones d'étude près du périphérique parisien alors que notre cas d'étude se situe sur un boulevard en zone résidentielle). Les simulations avec le modèle empirique Thorpe et al. (2007) ne sont réalisées

que sur le cas d'étude de MOCoPo et sur seulement 12 heures non consécutives en raison d'une contribution du fond urbain trop importante sur les concentrations en bordure de route. Les quelques résultats obtenus sont en accord avec NORTRIP.

4.1.5. SOURCES DE CONTRIBUTION A LA RESUSPENSION DES PARTICULES: PAR TYPE D'ABRASION ET CATÉGORIE DE VÉHICULES

Les sources de contribution des particules remises en suspension sont différenciées entre abrasion des pneus, de la route et des freins et entre les différentes catégories de véhicules (voitures et poids-lourds). Les facteurs d'émissions pourraient être majoritairement responsables de la prévalence d'une catégorie plutôt que d'une autre. Cependant, les formulations utilisées pour le calcul des contributions dépendent fortement du débit des véhicules. Ainsi, même si les facteurs d'émission pour les poids-lourds sont en moyenne 2 à 5 fois plus élevés que pour les véhicules légers, les émissions de remise en suspension sont dominées par les écarts entre les proportions de véhicules légers et poids-lourds, qui sont importants (les contributions par catégorie de véhicules pour des fractions du parc automobile qui sont respectivement > 90% et < 10%). Par ailleurs, l'abrasion de la route possède (toutes catégories de véhicules confondues) le facteur d'émission le plus élevé et par conséquent, la plus importante contribution aux émissions totales (> 75%), l'abrasion des freins et celle des pneus sont moins importantes avec respectivement environ 20⁄ et 3⁄ .

4.1.6. COMPARAISON DES SIMULATIONS DE CONCENTRATIONS AUX MESURES DE PM_{10}

La contribution du phénomène de réémission aux émissions directes a été évaluée en simulant les concentrations avec cette source ajoutée aux émissions directes pour des simulations des dispersions atmosphériques des émissions liées au trafic routier. Nous avons utilisé deux modèles de dispersion atmosphérique, adaptés à chaque configuration des sites étudiés. Ainsi, le projet MOCoPo étant situé dans une zone semi-ouverte, nous avons simulé les concentrations avec un modèle gaussien de panache paramétré pour les situations de vents calmes (Briant et al., 2011, 2013, Venkatram et al., 2013, Fallah Shorshani et al., 2015). En revanche, pour le projet TrafiPollu, situé dans une zone très urbaine et donc entourée de bâtiments, il n'aurait pas été approuvé d'utiliser le modèle gaussien. De plus, les stations de mesure pour valider les simulations sont situées trop près de la source d'émission pour permettre au modèle de fournir des résultats fiables. De la sorte, un modèle de rue-canyon avec son réseau de rues connecté a été utilisé. Il s'agit du modèle MUNICH (Kim et al., 2016) développé au CEREA, qui est par ailleurs basé sur la formulation SIRANE (Soulhac et al., 2011) pour la dispersion des polluants dans le réseau des rues. En termes de résultats, la contribution finale de la remise en suspension dans les simulations de la concentration n'apparaît pas clairement du fait d'un signal de fond urbain dominant les concentrations en bordure de route. Dans les deux cas d'étude, le fond urbain contribue à plus de 70% des observations, le reste représentant le signal trafic. De la sorte, les concentrations sur le cas d'étude MOCoPo issues du modèle Gaussien contribuent en moyenne aux concentrations de PM_{10} en bordure d'autoroute respectivement à 5% pour les concentrations directes, et 6% pour les concentrations provenant du processus de réémission (avec HERMES et NORTRIP).

Sur le cas de TrafiPollu, le signal est plus contrasté. Les concentrations modélisées avec MUNICH contribuent à 11, 40 et 2⁄ , respectivement pour les concentrations directes et de remise en suspension (HERMES et NORTRIP). Ainsi, la comparaison à des mesures de PM_{10} en bordure de route ne nous permet pas de conclure en termes de performance des modèles de remise en suspension. La partie fine ($PM_{2,5}$) compose majoritairement les PM_{10} en zone urbaine. Les $PM_{2,5}$ ont un temps de résidence assez long (environ une semaine) en l'absence de précipitations ce qui explique la forte contribution du fond urbain sur les concentrations en bordure de chaussée.

4.1.7. DISCUSSION ET CONCLUSION

La remise en suspension est un processus faisant intervenir des particules provenant d'origines différentes qui sont l'abrasion des freins, du revêtement de la chaussée et des pneus provenant des différentes catégories de véhicules mais qui pourrait aussi provenir de sources non locales. La méthode PMF a été employée dans deux campagnes de mesure (MOCoPo/PM-Drive) dans la région grenobloise par Polo Rehn (2013) et à Paris par Amato et al. (2016) pour quantifier sa contribution aux émissions liées au trafic routier sur la base de données expérimentales obtenues en bordure de chaussée. Les résultats obtenus avec la formulation de NORTRIP sont les plus proches de ces observations par PMF que ceux obtenus avec la formulation de HERMES (82⁄ et 100⁄ , respectivement, versus 76⁄) dans le cas de MOCoPo. A Paris, Amato et al. (2016) ont estimé à 22⁄ la remise en suspension des PM_{10} au niveau du périphérique parisien pour un trafic de 220 000 véhicules par jour (contre 795 pour le cas de TrafiPollu). HERMES et NORTRIP donnent respectivement des résultats allant de 153 et 9⁄ . Les résultats suggèrent que la formulation HERMES pourrait surestimée la remise en suspension dans les deux cas d'étude, avec une surestimation d'autant plus importante en présence de vitesse de véhicules faible. Dans le cas de NORTRIP, nous obtenons des résultats de réémission moins élevés sur le boulevard que près du périphérique, le trafic étant moins important en débit (10 fois moins) et en vitesse (environ 2 fois moins). Par ailleurs, les facteurs d'émission utilisés dans les deux modèles de remise en suspension pourraient ne pas être totalement adaptés aux situations géographiques de nos deux cas d'étude, aux caractéristiques des matériaux (freins, pneus et route) et à leur condition d'utilisation. Pay et al. (2011) mentionnent que les facteurs d'émission utilisés pour HERMES sur le cas de l'Espagne sont volontairement supérieurs à des facteurs d'émission pour l'Europe Centrale afin de tenir compte d'un apport plus important en particules d'origine minérale dans la zone ibérique. Dans NORTRIP, les facteurs d'émission pour les freins et les pneus sont deux fois moins importants pour les voitures que les facteurs EMEP/EEA (Ntziachristos and Boulter, 2013), mais comparables pour les poids-lourds. Les voitures contribuant de manière plus significative à la remise en suspension (du fait de leur plus grand nombre), cette différence pourrait engendrer une sous-estimation de ces deux sources d'abrasion. En revanche, les facteurs d'abrasion de la route (issus du modèle suédois d'abrasion de la route, Jacobson and Wadberg, 2007) sont dans un facteur deux supérieurs par rapport à ceux d'EMEP/EEA, induisant une possible surestimation. L'abrasion de la route est d'autre part le processus produisant le plus de particules et donc de remise en suspension. Par ailleurs, Amato et al. (2016) ont montré que l'abrasion des pneus et les émissions à l'échappement du moteur sont les principales sources de PM_{10} au niveau du périphérique parisien.

En conclusion, NORTRIP du fait de son niveau de détail (distinction des processus d'abrasion, bilan de PM sur la chaussée, prise en compte de la vitesse des véhicules et de l'effet des précipitations) apparaît être le modèle préféré, cependant, les incertitudes au niveau des données d'entrée peuvent altérer les résultats finaux (précipitations, facteur d'émissions, données trafic, etc.). HERMES a montré des résultats encourageants mais sa formulation semi-empirique peut affecter sa robustesse, notamment sur des cas d'étude dont les conditions de trafic et d'environnement divergent. Le modèle NORTRIP est un modèle sensible à la vitesse de véhicules et aux évènements pluvieux, deux aspects qui semblent influencer fortement le processus de remise en suspension. Par ailleurs, les PM présents à la surface de la route ne proviennent pas uniquement des véhicules (telle que considérée dans ces modèles) mais d'un large spectre de sources par dépôts atmosphériques (de la végétation, des industries avoisinantes ou des activités domestiques). Il est donc d'autant plus difficile d'estimer empiriquement la contribution de chaque source. Harrison et al. (2004) ont montré que l'utilisation combinée de la distribution en taille des particules avec des éléments traces permet de séparer les contributions de chaque source identifiée (frein et pneu) de remise en suspension de la masse totale collectée à la surface en gamme de taille (0,9-11,5 µm). Ce genre d'étude pourrait être complémentaire aux études de PMF (Polo Rehn, 2013 et Amato et al., 2016). Il faut également noter que la définition de remise en suspension est difficile à caractériser, les particules de frein et de pneu ayant des composantes directe et indirecte (remise en suspension) délicates à séparer. En perspective, l'effet de la turbulence liée au passage des véhicules ainsi que la contribution des sources autres que le trafic pourraient avoir probablement une grande incidence sur la remise en suspension et devraient être analysés. La hauteur sur laquelle il y a remise en suspension pourrait aussi être évaluée afin d'évaluer la contribution de la remise en suspension dans l'inhalation des concentrations dues au trafic chez les piétons. Par ailleurs, l'influence des particules de diamètre supérieur à 10 µm devrait être approfondie, notamment pour l'évaluation de la pollution des eaux de ruissellement.

En dernières conclusions, il faut noter qu'une stratégie de remplacement du parc automobile en tout électrique, c'est-à-dire en ayant uniquement des véhicules électriques roulant, ne réduirait pas les effets de réémission puisque les particules produites sont essentiellement d'origine mécanique.

Finalement, il y a un réel besoin de développer des expériences contrôlées (1) pour confirmer que le débit et les vitesses gouvernent le processus de remise en suspension et (2) pour mieux caractériser la charge en PM présente sur la chaussée.

4.2. ARTICLE

4.2.1. ABSTRACT

Two observational campaigns were conducted, one in the Grenoble area (southeastern France), for the MOCoPo project, near an urban freeway in 2011 and the other one in a Paris suburb, for the TrafiPollu project, on a major surface street in 2014. PM_{10} concentrations were measured by Air Rhône-Alpes during the last 10 days of September 2011 for MOCoPo and by Airparif during 3 months from April to June 2014 for TrafiPollu. It has been shown that abrasion and resuspension processes represent a significant part of the total primary PM_{10} emissions of road traffic. Hereby, resuspensed emissions originating from the road are

estimated with several approaches and compared to PM_{10} measurements. We consider two different models available in the literature: HERMES (Pay et al., 2010) and NORTRIP (Denby et al., 2013), which differ in terms of formulation. We also apply an empirical method developed by Thorpe et al. (2007), based on near-road and background pollutant observations. The results vary depending on the traffic conditions and the modeling approach. In all cases, the resuspension emissions simulated are high enough to be considered in air quality modeling (ranging from 9 to 150⁄ of the exhaust emissions). Those resuspension models were combined with atmospheric dispersion models to estimate near-road concentrations. We used a Gaussian line-source model for the MOCoPo project and a street-canyon model (MUNICH) for the TrafiPollu project. The contribution of resuspension to traffic-related concentrations is hidden by a strong background contribution, which prevents us from concluding in terms of model performance. Nevertheless, a comparison with another dataset obtained near an urban freeway in Paris suggests that vehicle speed should be taken into account when estimating PM_{10} resuspension emissions.

4.2.2. INTRODUCTION

Resuspension caused by on-road traffic is defined as the suspension by air flow of particles after their deposition on the road surface. Mollinger et al. (2007) reviewed experiments of the resuspension caused by road traffic. The air flow is modified by various factors such as the movement, the shape and the type of vehicles. Other factors such as the type of road surface and the presence of moisture can also affect the amount of resuspension. As a consequence there is no predefined type of pollutants or particle size range since all pollutants available on the surface area can be potentially resuspended. Besides road dust resuspension, traffic is a source of gaseous and particulate air pollutants, and, therefore, resuspension contributes to particulate matter (PM) traffic-related emissions. We investigate here road dust resuspension in two distinct areas: an urban freeway in the Grenoble area in southeastern France and a major suburban surface street near Paris. Measurements of major traffic air pollutants were conducted at near-road monitoring sites for extended periods (two weeks in Grenoble and three months in the Paris suburb). We apply here three different methods to estimate road dust resuspension rates: two deterministic models and one empirical method. In these three models, it is the resuspension of the PM_{10} which is estimated because the emission factors are known only for this particle size. Near-road PM_{10} concentrations are then simulated using atmospheric dispersion models and the effect of taking road dust resuspension by traffic is assessed by comparison with the near-road measurements.

The Grenoble area is near the border between France and Italy and is subject to local as well as international traffic. As part of the MOCoPo project (Measuring and Modeling Traffic Congestion and Pollution), several studies have been conducted to assess the traffic contribution to air pollution. For example, Fallah Sorshani et al. (2015) simulated the air pollutant concentrations at the near-road monitoring site using a Gaussian plume dispersion model augmented with a parameterization for light wind conditions (Venkatram et al., 2013). The same atmospheric dispersion model will be used here to calculate near-road concentrations from direct vehicle emissions (including exhaust and wear abrasions processes) and road dust resuspension for this case study.

The Alsace-Lorraine boulevard located in an eastern Paris suburb has typical characteristics of a residential/business area impacted by local traffic as well as urban background. Despite reductions in pollutant emissions from vehicle exhausts, the PM_{10} concentrations measured near roadways in the Paris region have not decreased as much as expected and resuspension has been suggested as a possibly significant indirect source affecting near-road air quality. One of the objectives of the TrafiPollu project (multi-scale modeling of the pollution emitted from traffic) was to measure and simulate air pollutant concentrations on that suburban boulevard.

The current Nomenclature For Reporting (NFR) air pollutant emissions ignores this process (Amato et al., 2014) and further improvements in emission inventories and modeling will necessarily need to include resuspension. Consequently, there has been a recent interest in the literature to quantify and model resuspension. The HERMES emission model has been improved with the addition of resuspension (Pay et al., 2010). This model was used to compute resuspension emissions for a domain covering Spain for a whole year of simulation (2004). An evaluation of this model led to a good agreement (r = 0.41-0.5), in particular to predict PM_{10} ambient concentrations in dense areas of population. Compared to HERMES, the NORTRIP model (Denby et al., 2013) is more detailed and takes into account traffic speed in addition to traffic flow. Furthermore, it is designed to determine all major processes involved in PM resuspension, such as vehicle wear rates, emissions due to traffic, road dust loading, retention of wear particles, and resuspended PM emissions based on road surface conditions (dry versus wet). Empirical approaches have also been applied to estimate resuspension. For example, Thorpe et al. (2007) calculated the resuspension contribution to PM_{10} concentrations from daily mean PM_{10}, $PM_{2.5}$, and NO_x concentrations. Positive Matrix Factorization (PMF), a principal component method, has been used to estimate the non-exhaust source at the Grenoble urban freeway, based on MOCoPo data measurements (Polo Rehn, 2013). Over the measurement period, the ratio of the non-exhaust source over the vehicle exhaust was estimated to be about 0.76 for PM_{10}. This PMF result was used by Fallah Shorshani et al. (2015) to estimate an average resuspension rate for air dispersion modeling. Amato et al. (2016) conducted an experimental program at the ring road in Paris and used PMF to quantify the contribution of PM_{10} resuspension to traffic-related emissions (22⁄) and near-road PM_{10} concentrations (13⁄). The U.S. Environmental Protection Agency developed a predictive emission factor for resuspension based on a regression analysis of 83 tests for PM_{10} including public paved roads, as well as controlled and uncontrolled industrial paved roads (U.S. EPA, 2006). This “AP-42” approach was recently applied to the Po Valley for January 2010 (Pepe et al., 2016). Monthly PM_{10} resuspension were shown to represent more than 60⁄ of traffic emissions in a large domain (85 km x 85 km) covering Milan.

We apply here the two deterministic methods mentioned above, HERMES and NORTRIP, and the empirical method of Thorpe et al. to estimate road-dust resuspension for both the Grenoble urban freeway and the Paris suburban boulevard. We first describe the resuspension models and the atmospheric dispersion models used in this study. Next, we present the results for the two sites and compare modeling results to measured PM_{10} concentrations. Finally, we discuss the results and provide conclusions and perspectives for further work.

4.2.3. RESUSPENSION MODEL DESCRIPTIONS

4.2.3.1 HERMES

The CALIOPE project aimed at establishing an air quality forecasting system for Spain (Pay et al., 2011). HERMES is the model used in CALIOPE to compute emissions. To estimate resuspension of PM_{10} the original formula adapted for the whole road network of Spain has been simplified here for a single road section (the Echirolles section of an urban freeway near Grenoble) or for a combination of street-segments (boulevard Alsace-Lorraine in an eastern Paris suburb):

$$E_{resuspension} = L_{road} \sum_{v=1}^{2} N_v FE_v \quad (1)$$

$E_{resuspension}$ (expressed in $g.h^{-1}$) represents the resuspension emission rate, which depends on the length of the road (L_{road} in km), the traffic flow N_v (in $veh.h^{-1}$) and the empirical emission factor FE_v ($g.veh^{-1}.km^{-1}$) specified for each type of vehicle for PM_{10}. The emission factors were measured in Berlin and reported by Düring (2002); the values used are respectively 88 $mg.km^{-1}.veh^{-1}$ for light-duty vehicles and passenger cars and 217 $mg.km^{-1}.veh^{-1}$ for heavy-duty vehicles. Therefore, the resuspension contribution depends on traffic flow and the relative fraction of vehicle types. The precipitation effect is included by setting the resuspension rate to zero for the periods when precipitation amount is greater than 0.254 mm (Pay et al., 2011). The resuspension rate cannot be separated into different source contributions such as resuspension of PM_{10} originating from brake, tire and road wear PM_{10}.

4.2.3.2 NORTRIP

The NORTRIP model is a coupled road dust and surface moisture model implemented by the Norvegian Institute for Air Research to predict road-traffic induced PM_{10} emissions via resuspension (Denby et al., 2013). The major differences with the HERMES model are: (1) the use of a PM_{10} mass balance on the road surface taking into account PM_{10} deposition and resuspension processes, instead of default resuspension emission rates, (2) the use of vehicle speed, in addition to traffic flow, to calculate the resuspension rate, and (3) the use of distinct emission factors for brake, tire, and road wear. The surface moisture on pavement may be taken into account in the resuspension rate computation. As discussed below, this aspect was not included in our implementation. The first step is to compute the PM_{10} mass balance on the road surface.

$$\frac{dM}{dt} = P - S \quad (2)$$

M is the PM_{10} mass by unit length of road ($g.km^{-1}$) present on the road surface, t is the time (hour), P the PM_{10} production rate by deposition on the road surface ($g.km^{-1}.h^{-1}$) and S is the PM sink rate by resuspension and run-off ($g.km^{-1}.h^{-1}$).

In this formulation, PM_{10} production is due to wear processes (brake, tire, and road) as defined in Equation (2). The NORTRIP original code (Denby et al., 2012) can take into account

atmospheric deposition of ambient PM_{10}, but it was not included here under first approach. The wear rates depend on vehicle type and the PM_{10} production rate is, therefore, expressed as follows:

$$P = \sum_{v=1}^{2} \sum_{s=1}^{3} N_v U_{v,s} f_{PM_s} \quad (3)$$

In this equation, the *v* index corresponds to vehicle type (light-duty vehicle and passenger car or heavy-duty vehicle); the *s* index corresponds to wear type (brake, tire, or road), N_v corresponds to the traffic flow by vehicle type (veh.h^{-1}), $U_{v,s}$ corresponds to wear rates by abrasion (g.km^{-1}.veh^{-1}) and $f_{PM,s}$ is the fraction of PM_{10} produced by wear processes (*s*: brake, tire and road) which is in the particle size range studied. For each wear process, the emitted fraction present in PM_{10} is 28⁄ for road wear, 10⁄ for tire wear, and 80⁄ for brake wear.

The wear rates are obtained from specific emission factors (reference wear rates) for each vehicle type. The road wear rate by abrasion is expressed as follows:

$$U_{v,road} = U_{v,road,0} h_{pavement} \left(\frac{speed}{speed_{ref,road}}\right) \quad (4)$$

$U_{v,road,0}$ is the reference wear rate (0.15 g.km^{-1}.veh^{-1} for light-duty vehicles and passenger cars and 0.75 g.km^{-1}.veh^{-1} for heavy-duty vehicles obtained from Jacobson et Wagberg, 2007), $h_{pavement}$ is a parameter depending on pavement coating (see Equation (5)) , and $speed_{ref,road}$ the reference speed for road wear (70 km.h^{-1}).

$$h_{pavement} = 2{,}49 + 0{,}144\,NMB - 0{,}069\,MS - 0{,}017\,S \quad (5)$$

NMB (« Nordic Ball Mill ») is the hardness (12.5), *MS* is the maximal size grain (10 mm) and *S* is the amount of grains in the pavement (95⁄). Those characteristics correspond to a semi-coarse asphaltic concrete (BBSG) typical in France for road pavement enduring a middle to high traffic flow (de Bortoli, 2015). As a consequence, $h_{pavementt}$ = 2.6. The tire wear rate is expressed as follows:

$$U_{v,tire} = U_{v,tire,0} \left(\frac{speed}{speed_{ref,tire}}\right) \quad (6)$$

$U_{v,tire,0}$ is the reference wear rate (0.1 g.km^{-1}.veh^{-1} for light-duty vehicles and passenger cars and 0.5 g.km^{-1}.veh^{-1} for heavy-duty vehicles from Snilsberg et al., 2008 and Gustafsson et al., 2008) and $speed_{ref,tire}$ is the reference speed for tire wear (70 km.h^{-1}).

The brake wear rate is expressed as follows:

$$U_{v,brake} = U_{v,brake,0}\, h_{traffic} \quad (7)$$

$U_{v,brake,0}$ is the reference wear rate (0.01 g.km^{-1}.veh^{-1} for light-duty vehicles and passenger cars and 0.05 g.km^{-1} veh^{-1} for heavy-duty vehicles given by Boulter, 2005), $h_{traffic}$ is the driving cycle index that adjusts the brake wear rate for a standard traffic type; here it was set equal to 1.

As an example, the wear rates computed for the boulevard Alsace-Lorraine (TrafiPollu case study) are given in Table 4.1 for a mean traffic speed of ~30 km h^{-1} (lower by about a factor of two compared to MOCoPo case study and the reference values).

Table 4.1 - Wear rates for TrafiPollu (g.km^{-1}.veh^{-1}) for PM_{10}.

Source	Light-duty vehicle	Heavy-duty vehicle
Brake	0.005	0.02
Tire	0.05	0.2
Pavement	0.2	0.9

In the absence of run-off, the sink rate is proportional to the PM_{10} mass present on the road surface and is expressed for each vehicle type as a function of traffic flow, N_v, and as a function of a factor, $f_{v,suspension}$, corresponding to the resuspension of PM_{10} depending on the size range (here PM_{10}) and on the traffic speed.

$$S_v = M \sum_{v=1}^{2} R_v \quad (8)$$

$$R_v = N_v \quad f_{v,suspension} \quad (9)$$

The term $f_{v,suspension}$, represents the resuspended PM_{10} fraction due to a vehicle as a function of its speed and type of vehicles in veh^{-1}.

$$f_{v,suspension} = f_{v,suspension0} \left(\frac{speed}{speed_{ref,suspension}}\right) \quad (10)$$

where $f_{v,suspension,0}$ is the reference fraction (5 x 10^{-6} veh^{-1} for light-duty and passenger cars and 5 x 10^{-5} veh^{-1} for heavy-duty vehicles) and $speed_{ref,resuspension}$ is the reference speed for traffic resuspension of particles (50 $km.h^{-1}$).

As a consequence, the mass balance equation for PM_{10} present on the road surface is expressed as follows:

$$\frac{dM}{dt} = P - M \sum_{v=1}^{2} R_v \quad (11)$$

This equation is solved to obtain the PM_{10} mass present on the road surface as a function of time.

$$M(t) = \frac{P}{\sum_{v=1}^{2} R_v} + \left(M(t=0) - \frac{P}{\sum_{v=1}^{2} R_v} \right) \exp\left(-\sum_{v=1}^{2} R_v \, t\right) \quad (12)$$

The resuspension emission rate is then given as follows:

$$E_{resuspension}(t) = M(t) \sum_{v=1}^{2} R_v(t) \quad (13)$$

4.2.3.3 **Empirical method of Thorpe et al.**

The method of Thorpe et al. (2007) requires observations to estimate the contribution of resuspension to PM_{10} ambient concentrations. Therefore, unlike HERMES and NORTRIP, which only require traffic-related information, it cannot be applied to sites where near-road measurements are unavailable. Nevertheless, since near-road measurements were available for both the MOCoPo and TrafiPollu sites, we applied this empirical method for comparison with the HERMES and NORTRIP deterministic models.

The empirical method of Thorpe et al. (2007) relies on direct wear emission factors for brake, tire and road to estimate PM_{10} road-dust resuspension. The estimation of particle resuspension was originally applied to a major London road. Emissions of PM_{10} are computed from daily exhaust emissions from the traffic (E_{NOx}) in $g.h^{-1}$, which is computed with traffic parameters (flow and speed) and available emission factors and from the ratio of hourly concentrations of PM_{10} over NO_x in $\mu g.m^{-3}$ (excluding the background contribution) from the near-road observations.

The PM_{10} emission term (E_{PM10} in $g.km^{-1}.h^{-1}$) (Equation (14)) due to traffic are computed based on NO_x emissions from traffic and the ratio of traffic-related concentrations of PM_{10} over NO_x measured at a near-road site. The traffic-related concentrations are estimated as the difference between the near-road observations (subscript "traffic") and the urban background (subscript "background"). NO_x emissions, E_{NOx} ($g.km^{-1}.h^{-1}$) is obtained here from emission factors of the CopCETE or HEAVEN emission models (COPERT IV method) based on traffic (vehicle types, flow and speed of each vehicle type).

The PM_{10} emissions are decomposed into three categories: (1) exhaust emissions, (2) direct wear emissions from three different sources (tire, brake, and pavement), and (3), resuspension emissions of PM_{10} on the road surface. In this method, it is assumed that exhaust emissions are fine particles ($PM_{2.5}$) and that other emissions (from wear and resuspension) are coarse particles (i.e., the difference between PM_{10} and $PM_{2.5}$). Thus, the term $E_{PM_{10}-PM_{2.5}}$ (see Equation (15)) represents the non-exhaust PM_{10} emissions.

In our application, we obtain the resuspension emissions by subtracting the terms of direct wear emissions (E_{brake}, E_{tire}, and $E_{pavement}$) from the term of non-exhaust emissions. Direct wear emissions are estimated with emissions from CopCETE and HEAVEN.

$$E_{PM10} = E_{NOx}\left(\frac{[PM_{10}]_{traffic} - [PM_{10}]_{background}}{[NO_x]_{traffic} - [NO_x]_{background}}\right) \quad (14)$$

$$E_{PM10-PM2.5} = E_{PM10}\left(\frac{([PM_{10}]_{traffic} - [PM_{2.5}]_{traffic}) - ([PM_{10}]_{background} - [PM_{2.5}]_{background})}{[PM_{10}]_{traffic} - [PM_{10}]_{background}}\right) \quad (15)$$

$$E_{resuspension} = E_{PM10-PM2.5} - (E_{brake} + E_{tire} + E_{pavement}) \quad (16)$$

4.2.4. MODEL APPLICATIONS

4.2.4.1 Input data and atmospheric dispersion models

Resuspension emissions are computed based on traffic data (speed and flow) that come from SIREDO sensors (MOCoPo) and from AlyceSofreco (TrafiPollu), a French company. In both cases, the traffic and vehicles were monitored by video devices (capture of the licence plates), and the actual and precise vehicle fleet composition was computed using a detailed technical information for each vehicles, obtained from the national vehicle registrations file. It enables a more accurate simulation of the traffic pollutant emission, including its temporal variation (André et al., 2016). Road characteristics were obtained as described above and are similar for both cases. Rainfall events were extracted from meteorological observations performed *in situ* for MOCoPo and at St Maur, a Météo-France weather station close to the TrafiPollu experimental site. However, for the TrafiPollu case study other meteorological data needed for the dispersion simulations were obtained from a meteorological simulation conducted with the Weather Research and Forecasting model (WRF), as no observations were available during the study period.

The Gaussian dispersion model used for the MOCoPo case study has been developed to estimate concentrations near roadways (Briant et al., 2011, 2013), with a modification suitable for light wind conditions (Venkatram et al., 2013, Fallah Shorshani et al., 2015). The formulation of the Gaussian dispersion model is based on an exact Gaussian formula for line sources that has been modified for cases when the wind direction is not perpendicular to the road. The Gaussian plume model for line sources requires input data, which include an emission file, a background concentration file and a meteorological file. The PM_{10} direct vehicle emissions (including exhaust and wear abrasions processes) were obtained from the CopCETE model. CopCETE has been implemented by the French Ministry of Environment and is coordinated by the Normandie-Centre Technical Center of Equipment. It is a tool based on the COPERT methodology improved with some emissions factors derived from French research studies. This model computes exhaust and non-exhaust emissions such as wear emissions (brake, tire and road) for a given road as a function of traffic data. Here, it is applied to the Echirolles freeway section in Grenoble. The background concentration file corresponds to observations from the Les Fresnes site, the nearest urban background site of the local air quality monitoring network (Air Rhône-Alpes). The meteorological file is the same

as that used for rainfall events. More details on the input data for the atmospheric dispersion simulation are provided by Fallah Shorshani et al. (2015). The Gaussian plume model provides simulated concentrations near the Echirolles freeway. Those simulated concentrations corresponding to direct vehicle emissions (including exhaust and wear abrasions processes) are then complemented with concentrations simulated from the resuspension emission models (i.e., HERMES, NORTRIP, and Thorpe et al.) and with background concentrations. They are then compared to PM_{10} near-road concentrations measured by Air Rhône-Alpes.

The Model of Urban Network of Intersecting Canyons and Highways (MUNICH, Kim et al., 2016) is a street-canyon model, which is based on the SIRANE formulation (Soulhac et al., 2011). It is applied here to the TrafiPollu case study, which is characterized by a suburban morphology. MUNICH computes atmospheric dispersion within a street-canyon according to a simplified description of the urban geometry and parametric relationships for pollutant transfer phenomena within, into, and out of the urban canopy. Two main interconnected components define the model: (1) the street-canyon component and (2) the street-intersection component. The urban background at roof level is also connected to those components via inflow/outflow parameters. The turbulent vertical mass transfer at the top of the street-canyon, which is the interface with the background atmosphere, does not depend on the geometry of the canyon. It is only defined by the external flow condition, based on Salizzoni et al. (2009). Direct traffic emissions have been modeled with HEAVEN by Airparif, the local air quality network, based on traffic data modeled with a microscopic dynamic traffic model, SymuVia, developed and applied here by Ifsttar Lyon. SymuVia was applied to two standard days, a week day and a weekend day, which were then used to construct traffic data for the full 3-month period. Background concentrations were obtained from Airparif urban and rural monitoring stations (respectively: Nogent-sur-Marne for PM_{10}, Herpin for $PM_{2.5}$ and Fontainebleau for NO_2). Meteorological data were extracted from a WRF simulation. However, we used St Maur precipitation observations as meteorological WRF simulations were not satisfactory for rain in terms of temporal correlation and cumulative amount. MUNICH provided simulated concentrations over 15 street sections constituting the Alsace-Lorraine boulevard. MUNICH concentrations obtained from direct vehicle emissions were added to those obtained from resuspension and to background concentrations in order to obtain the total simulated PM_{10} that could be compare to those concentration measured at the Airparif stations located on the sidewalks on either side of the boulevard.

4.2.4.2 Sensitivity to precipitation approaches

Moisture on the road surface is not taken into account in our implementation as it is done in the original NORTRIP formulation (Denby et al., 2013). In the original model, the retention factor due to moisture is based on road wetness conditions. When surface moisture modeling results or measurements are available that provide surface moisture levels in mm, then, the retention factor (f_q) is described using a discontinuous linear dependence as follows:

$$f_q = \max(0, \min[1, 1 - g_{ratio}]) \quad (17)$$

where g_{ratio} corresponds to the ratio of the difference between the surface water layer and the minimum surface moisture that inhibits resuspension over the difference between the upper limit for retention and the minimum surface moisture. It represents the liquid water

mass presents on the road surface, which depends not only on precipitation, but also on relative humidity and temperature.

When there is full retention on the surface due to an all-wet road: g_{ratio} = 1 and f_q = 0. The case of an all-wet or all-dry road is rare in this formulation and f_q tends to vary temporally between its two extreme values, 0 and 1. Since we have not implemented the moisture model expressed with Equation (17) in our version of the NORTRIP approach, we used the original NORTRIP model (Denby, 2012) to calculate f_q, which was then used as an input to our model. The retention factor calculated with the original code for our case study is presented in Figure 4.1. It has a significant impact on the variation of PM_{10} mass loading since this retention factor is rarely equal to 0 or 1. Nevertheless, values can be very close to zero when there is suitable humidity in the atmosphere and may approach 1 between rain events. This retention factor is applied on the mass loading equation through the production and sink terms (Denby, 2012).

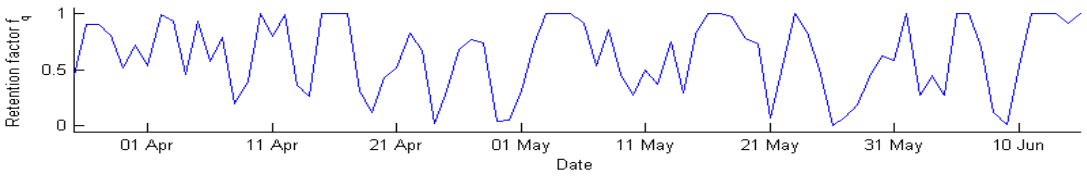


Figure 4.1 - Retention factor computed with the original NORTRIP code (Denby et al., 2012) for the 3-month period of simulation of the TrafiPollu case study.

In our approach, the impact of precipitation has been explicitly integrated assuming that PM_{10} particles present on the road surface are entirely washed away by run-off. This hypothesis is based on results obtained in the TrafiPollu project concerning PM_{10} mass load presents on the road surface before and after a rainfall event. Those modeling results indicate that > 90% of those particles are washed away (Hong et al., 2016). As a consequence, the simple hypothesis of a complete washoff by a moderate or strong rainfall event (> 0.254 $mm.h^{-1}$) seems to be reasonable. The direct consequence of this approach is that PM_{10} mass loading on the road surface is reset to zero each time it rains.

Below, we present results for the TrafiPollu case study obtained with the two approaches for the treatment of PM_{10} retention/washoff in NORTRIP: the results with the NORTRIP orginal rentention calculation and the results obtained with our PM_{10} washoff hypothesis. A comparison to results obtained without considering any precipitation impact on the PM_{10} mass loading is also presented to assess the effect of the two approaches on PM_{10} mass loading. Table 4.2 summarizes the mass loading, the emission of resuspension and direct emissions from wear sources obtained for each approach. The temporal evolution of the PM_{10} mass loading is also illustrated in Figure 4.2. The mass loading results corresponding to the complete washoff of PM over the road surface during rain events show a strong correlation with rainfall since it is directly affected by precipitation. The mass loading goes to zero when the precipitation rate exceeds 0.254 $mm.h^{-1}$ (Figure 4.3). The results between the two formulations are significantly different, the modeling approach with a retention factor gives results of mass loading reduced by 61% compare to a mass loading modeled

considering an entirely dry period. This decrease in mass loading is however less than that obtained with the approach using total whashoff during rain events, which is a reduction of 84⁄ . Finally, the relative difference between our approach and the original NORTRIP approach (Denby et al., 2013) leads to a reducing factor of 58⁄ . As the mass loading controls the resuspension amount available, this disparity might have a direct impact on the final result of resuspension emissions. Based on the analysis of the TrafiPollu experimental data of Hong et al. (2016), we selected here to reset the PM_{10} mass loading to zero when there is significant precipitation for the simulation using the NORTRIP resuspension formulation.

In the MOCoPo case study, the impact of the use of those two different approaches is minor since there is only one rainfall event during the period of interest. Only 5 continuous hours of rainfall were reported during the last two weeks of September 2011 while 177 hours were observed within a 3-month period (April to June 2014), this corresponds respectively to a frequency of rainfall of 2⁄ and 8⁄ . Also, rainfall events are shorter in the Paris suburb than in the Grenoble area. Precipitation data show rain events on the order of about 2 hours in the Paris suburb (see Figure 4.3). However, the lengths of the precipitation events do not affect our calculations, because it is only the length of the dry period (i.e., between two rain events) that leads to a greater accumulation of particles on the road, as shown in Figure 4.2.

The direct emissions of wear particles are computed for each hypothesis. The formulation is as follows:

$$E_{direct,s} = \sum_{v=1}^{2}\sum_{s=1}^{3} U_{v,s}\, f_{PM_s}\, f_{direct,s}\, f_q \quad (18)$$

$f_{direct,s}$ is a factor determining the fraction directly emitted by wear sources. This term is equal to 1 (Denby et al., 2013), which means that all particles produced are emitted to the atmosphere. For the no precipitation (without considering any rainfall event) or with precipitation (complete washoff of road surface), the formulation remains the same except for the value of f_q(set to 1 in the latter hypothesis). For the “precicipitation washoff” and “no precipitation” approaches, the mean direct emission rate of wears has the same value and is greater than the formulation considering the retention factor. Compared to the direct emissions the resuspended fraction is, 47⁄ for the no precipitation hypothesis, 17⁄ when considering the retention factor, and 8⁄ for the case with complete washoff of the road surface when it rains. In the retention factor approach, a rainfall event induces a full wet surface and fewer resuspendable particles.

Table 4.2 - Mean results over the 3-month period for the TrafiPollu case obtained with three approaches of mass loading and associated resuspension emissions.

No precipitation	Retention factor	Precipitation washoff
Mass loading in $g.km^{-1}$		
91 492	35 580	14 800
Emission in $g.km^{-1}.h^{-1}$		
25	6	4
Direct wear emissions in $g.km^{-1}.h^{-1}$		
53	36	53

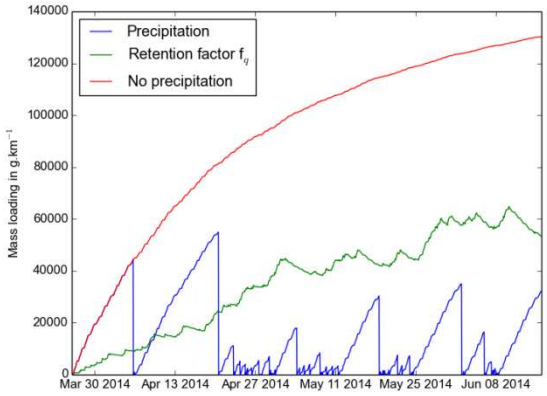


Figure 4.2 - Mass loading for each approach: with complete washoff ("Precipitation" in blue), with a dry weather ("No precipitation" in red) and when applying a retention factor ("Retention factor" in green) for the 3-month period with NORTRIP formulation for the TrafiPollu case study.

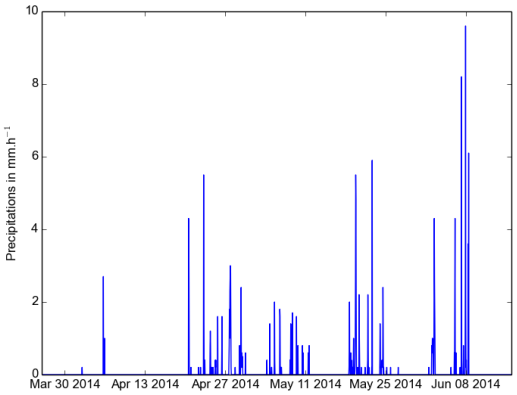


Figure 4.3 - Precipitation at St Maur (Météo France observations) for the 3-month period corresponding to precipitation used in the TrafiPollu case study.

4.2.4.3 Sensitivity to traffic conditions and intercomparison of the three resuspension formulations

Mean emissions computed with the three resuspension models (i.e., HERMES, NORTRIP and Thorpe et al.) are compared to direct PM_{10} vehicle emissions (including exhaust and wear abrasions processes) for both case studies (MOCoPo and TrafiPollu). Table 4.3 indicates some variability of resuspension emission rates between the two case studies and also among the three formulations. The comparison between the two sites shows a greater contribution of resuspension to total vehicle-related PM_{10} emissions in the MOCoPo case, due to traffic characteristics.

Table 4.3 - Mean direct and resuspension emissions due to traffic.

Model	Mean emission rate for MOCoPo ($g.km^{-1}.h^{-1}$)	Mean emission rate for TrafiPollu ($g.\ km^{-1}.h^{-1}$)
direct (CopCETE or HEAVEN)	374	45
HERMES	375	69
Thorpe et al. *	306	-
NORTRIP	308	4

* for valid hours

In the MOCoPo case study, the average vehicle speed is 69 $km.h^{-1}$ and the mean hourly traffic flow is 4038 $veh.h^{-1}$. Resuspension from HERMES is commensurate with direct emissions. NORTRIP is comparable to the direct emissions and represents about 82⁄ . This result is consistent with the value found by Polo Rehn (2013) with the PMF method applied at the Grenoble urban freeway, which is 76⁄ . The empirical method based on Thorpe et al., represents 82⁄ of what is directly emitted by traffic, but it appears only to valid hours (i.e, those with sufficient data to apply the method).

In the TrafiPollu case study, vehicle speeds are significantly lower compared to the MOCoPo freeway case study. Light duty/passenger and heavy-duty vehicles show an average speed of 32 $km.h^{-1}$ and the mean hourly traffic flow is of 795 $veh.h^{-1}$. HERMES resuspension emissions are much greater (about 1.5 times) than the direct emissions, while NORTRIP is much lower compared to direct emissions (about 9⁄). In HERMES, traffic flow is the only key factor considered to calculate resuspension, while in NORTRIP vehicle speed is also taken into account. While traffic speed is low, results show that the resuspension may be high when just taking into account the flow (as in HERMES). Moreover, as there is less traffic, there is less PM_{10} being resuspended and therefore more accumulation of deposited PM_{10} on the road surface, which is then available to be resuspended. However, this accumulation is counteracted by the rainfall events in the NORTRIP model. Indeed, NORTRIP, gives resuspension that is lower by a value of magnitude than direct emissions by considering a mass balance resulting from the effect of washoff and vehicle speed and flow.

Resuspension results from the Thorpe et al. empirical model are not shown for the TrafiPollu study due to the constraints imposed (i.e., non-exhaust/exhaust), which lead to a negative

increment in traffic-related concentrations most of the time. For valid hours (corresponding to positive delta), the Thorpe results are commensurate to NORTRIP emissions for the MOCoPo case study0.

Considering the temporal evolution of resuspended particles, HERMES shows a correlation of 0.7 with the direct emissions (Figure 4.4). Since HERMES resuspension is computed as a function of traffic flow, its profile follows the flow pattern. NORTRIP emissions are impacted by the length of dry periods between rainfall events; consequently they are less correlated to direct emissions (r =0.3). For instance, there is an abrupt decrease at the end of the period (Sunday) displayed on Figure 4.4. At that time, NORTRIP values are more correlated to rainfall event than to direct emissions. As mentioned above, rainfall controls the resuspended mass supply. After each rain event, the PM_{10} mass loading present on the road surface is reset to zero leading to a time-dependent resuspension emission profile over time. The temporal variability of the Thorpe et al. is more heterogeneous since those emissions are computed according to observations ratios, which can be highly fluctuating. For instance, in the MOCoPo case study (see Figure 4.5), the direct and Thorpe et al. resuspension emissions do not follow exactly the same trend (r = 0.5). It suggests that the Thorpe et al. resuspension emissions is not entirely related to direct emissions and that other factors, which may not be accounted for by the models, influence the observed concentrations. Observations could be influenced by another source than traffic emissions.

These resuspension results may also be compared to observations at a traffic monitoring site located near the Paris ring road. It has a high mean traffic day flow (about 220 000 vehicle/day) and 5% of heavy-duty vehicles. The mean average traffic speed varies between 34 and 70 $km.h^{-1}$. The observations show that the contribution of road dust emissions is 22% of local traffic-related PM_{10} (Amato et al., 2016) in our two case studies, we obtained of 100 and 153%, 82 and 9% for HERMES and NORTRIP respectively for our two case studies (MOCoPo and TrafiPollu). Amato et al. (2016) also highlight that road dust emissions can increase PM_{10} depending on the local traffic characteristics which could explain the higher results found in MOCoPo (for example higher traffic speed). These experimental results suggest that HERMES may overestimate resuspension and that NORTRIP may provide a more realistic estimate of resuspension because it takes vehicle speed into account.

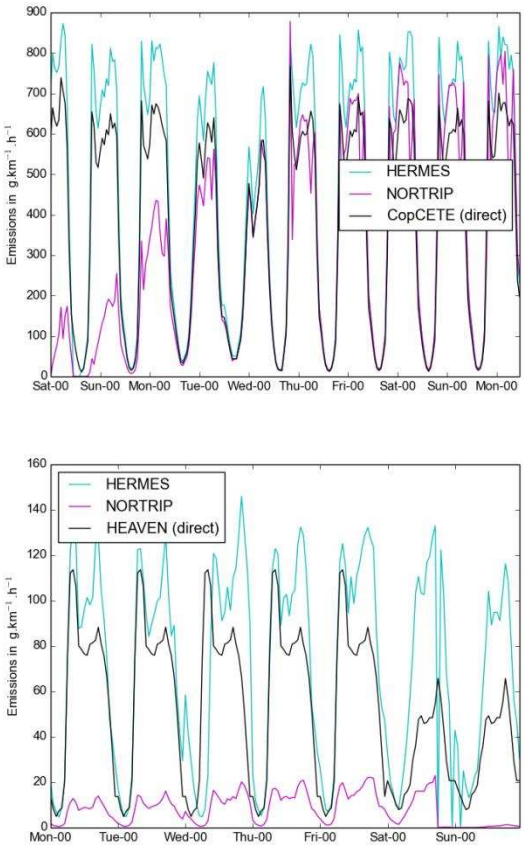


Figure 4.4 - Traffic emissions: HERMES and NORTRIP resuspension and CoPCETE direct emissions for MOCoPo during the last 10 days of September 2011 (top) and for TrafiPollu for one week from 04/31/2014 to 05/07/2014 (bottom; HEAVEN direct emissions).

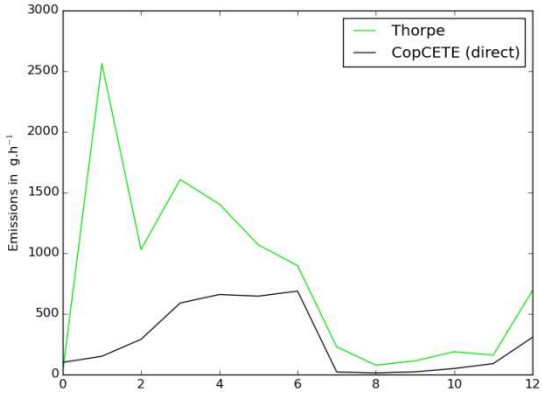


Figure 4.5 - Traffic emissions: Thorpe resuspension emissions and CoPCETE direct emissions for MOCoPO for valid hours.

4.2.4.4 Source contributions: vehicle categories and types of wear

It is of interest to identify which type of vehicles (heavy-duty or light-duty/passenger vehicles) contributes the most to resuspension. The relative contributions to resuspension are summarized by types of vehicle in Table 4.4. Focusing on HERMES and NORTRIP (since the Thorpe method does not differentiate emissions by vehicle types), we note that light-duty and passenger vehicles are contributing most to the resuspended emissions (more than 90%). Even though emission factors for heavy-duty vehicles are greater than those from light-duty and passenger vehicles (Table 4.5), the vehicle fleet plays a major role. Light-duty and passenger vehicles account for 96% of traffic in the MOCoPo Grenoble freeway case study, while heavy-duty vehicles represent only the remaining 4% . A slightly higher proportion (97%) of light-duty and passenger vehicles is observed in the TrafiPollu suburban street-canyon case study, which leads to a greater contribution of this vehicle type to the amount of resuspended PM_{10} modeled in boulevard Alsace-Lorraine (TrafiPollu).

Table 4.6 shows for both case studies that pavement wear is the main mechanical phenomenon at the origin of resuspended PM_{10} among the three types of wears being considered (brake, tire and pavement). Figure 4.6 shows resuspension wear emissions and the total resuspension emissions computed with NORTRIP in the TrafiPollu case study. Pavement-origin emissions follow the temporal variability of total NORTRIP emissions. Pavement wear is amplified by speed of vehicles as described by Equation (4). It is also the case for tire wear (Equation (6)) from Denby et al. (2013) but there is a factor 4 and a factor 2, respectively for light-duty and heavy-duty vehicles, considering the multiplying term of pavement emission factors and the pavement coating parameter in comparison to tire emission factors. Brake wear is a function of the driving cycle as described by Equation (7). In the MOCoPo case study, vehicle speeds are higher and it explains a greater contribution of pavement wear. However, in both case studies, this greater contribution of pavement wear is mainly due to higher emission factors applied compare to tire and brake wear (see Table 4.5).

Table 4.4 - Mean resuspension emissions due to traffic as a function of vehicle type (HDV: heavy-duty vehicle; LDV: light-duty vehicle and PC: passenger car).

Case study	Model	Vehicle type	Mean emission ($g.km^{-1}.h^{-1}$)	Contribution (%)
MOCoPo	HERMES	HDV	30	8
		LDV-PC	345	92
	NORTRIP	HDV	23	7
		LDV-PC	285	93
TrafiPollu	HERMES	HDV	4	6
		LDV-PC	64	94
	NORTRIP	HDV	0.2	5
		LDV-PC	3.8	95

Table 4.5 - Emission factors used for the three models in g.veh^{-1}.km^{-1}.

HERMES (direct)		Thorpe (direct)			NORTRIP (resuspension)		
HDV	0.217	Brake	HDV	0.0590	Brake	HDV	0.05
			LDV-PC	0.0177		LDV-PC	0.01
		Tire	HDV	0.0590	Tire	HDV	0.5
LDV-PC	0.088		LDV-PC	0.0177		LDV-PC	0.1
		Pavement	HDV	0.0380	Pavement	HDV	0.75
			LDV-PC	0.0075		LDV-PC	0.15

Table 4.6 - Mean resuspension emissions computed according to wear source contributions with NORTRIP (g.km^{-1}.h^{-1}).

MOCoPo			TrafiPollu	
Total	308	Contribution	4	Contribution
Pavement	242	79%	3.1	77%
Brake	60	19%	0.8	20%
Tire	6	2%	0.1	3%

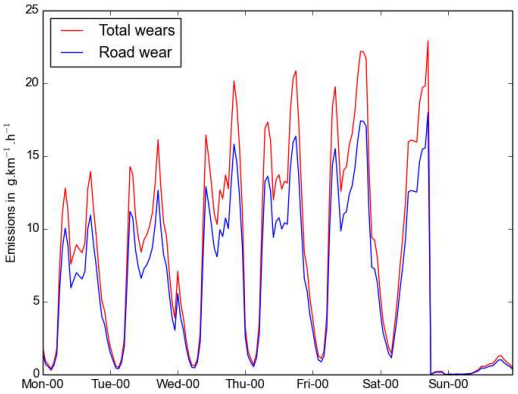


Figure 4.6 - NORTRIP pavement and total wear process emissions for TrafiPollu for one week from 04/31/2014 to 05/07/2014.

4.2.4.5 Comparison with PM_{10} measurements

The simulations were conducted with hourly input and output data, and compared with actual observations. Due to the short distance between the road-traffic emission and the experimental sites in both case studies, particles may be considered as chemically inert. Concentrations result from the sum of the local concentration being simulated and of the urban background concentration measured at a site located few kilometers away. The simulations were performed with the Gaussian plume model with light-wind conditions for the MOCoPo case study. Resuspension PM_{10} emissions added to the exhaust emissions in those simulations. For the TrafiPollu case study, simulations were performed with MUNICH for boulevard Alsace-Lorraine (Paris suburb), which takes into account building effects on pollutant dispersion.

We obtain the best performance in terms of correlation with modeled PM_{10} concentrations from HERMES (see Table 4.7). The correlation coefficient (r) is 0.7, for both, TrafiPollu and MOCoPo. The correlations obtained with NORTRIP are slightly lower (respectively, r = 0.7 and 0.6). The correlation coefficients present a slight difference when comparing with and without resuspension, which is consistent with the little improvement (i.e., 2⁄) reported by Pay et al. (2011) for the whole simulation of Spain. If we compare with Denby et al. (2013), high correlation is obtained when the resuspension module is included in the simulation (r^2 = 0.77 -0.91; with a global improvement of 56⁄ due to resuspension). The local meteorology, the use of sanding during winter, the period of simulation (one year against ten days for MOCoPo and 3 months for TrafiPollu), and the street configuration (street-canyon type against open roadway for MOCoPo and medium open street-canyon for NORTRIP); it may explain those different results.

The final improvement appears to be small compared to the simulation without resuspension because the strong signal of background concentrations dominates those PM_{10} concentrations. The direct emission correlation to observations ranges from 0.6 to 0.7. The mean background concentrations in both case studies contribute up to 70⁄ of the observations; the remainder represents the traffic signal. Mean near-road concentrations highlight that direct concentrations modeled by the Gaussian line plume model contribute to 5⁄ of the mean near-road concentrations. HERMES and NORTRIP account for about 6⁄ . Those results are also influenced by particular meteorological situations occurring in the MOCoPo campaign, such as light wind, and a predominantly upwind location of the station with respect to the freeway. More details are presented by Fallah Shorshani et al. (2015). Mean concentrations modeled with MUNICH show a larger contribution of the traffic signal. Direct modeled concentrations contribute to 11⁄ of the near-road concentrations, HERMES resuspension 40⁄ and NORTRIP resuspension 2⁄ .

The comparison to near-road PM_{10} concentrations does not allow us to conclude in terms of the performance of the resuspension models because the signal of the traffic-related emissions is in great part hidden by the background contribution. This is due to the long atmospheric lifetime of $PM_{2.5}$ (a major part of PM_{10} in urban area) in the absence of precipitation (about a week). Other pollutants with shorter lifetime, such as NO_x, show larger contributions of the traffic emissions (see Table 4.8).

Table 4.7 - Statistical performance for PM_{10} concentrations simulated with Gaussian Plume and MUNICH for the direct emissions with HERMES, NORTRIP and empirical model of Thorpe et al.

Model	Number of samples	Mean value ($\mu g.m^{-3}$)	RMSE ($\mu g.m^{-3}$)
PM_{10} without resuspension	228	19.02	-3.88
PM_{10} with HERMES		19.04	-3.86
PM_{10} with NORTRIP		19.03	-3.87
PM_{10} with Thorpe	12	19.03	-3.87
Observation experimental site	228	22.9	-
Urban background		18.8	-
Model	**Number of samples**	**Mean value ($\mu g.m^{-3}$)**	**RMSE ($\mu g.m^{-3}$)**
PM_{10} without resuspension	1968	20.5	-4.1
PM_{10} with HERMES		22.4	-2.2
PM_{10} with NORTRIP		20.6	-4.0
Observation experimental site		24.6	-
Urban background		20	-

*correlation with observations at the experimental site

Table 4.8 - Mean observed concentrations at the experimental sites and at the background sites (µg.m^{-3}).

MOCoPo	Mean NO_x	Mean PM_{10}	Mean $PM_{2.5}$
	104	24	15
	Mean NO_x background	Mean PM_{10} background	Mean $PM_{2.5}$ background
	26	19	14
TrafiPollu	Mean NO_x	Mean PM_{10}	Mean $PM_{2.5}$
	36	25	13
	Mean NO_x background	Mean PM_{10} background	Mean $PM_{2.5}$ background
	25	20	13

4.2.5. DISCUSSION

As discussed above, the near-road PM_{10} observation of this MOCoPo and TrafiPollu case studies did not allow us to conclude regarding which resuspension model performs best. We address here the comparison of the rates with estimates obtained for experimental data using PMF.

Resuspension is a process that mixes several PM origins. The quantification of resuspension is a challenging point but it has been estimated using PMF in two experimental campaigns, one (MOCoPo/PM-Drive) in the Grenoble area by Polo Rehn (2013) and one in Paris by Amato et al. (2016). Results from NORTRIP are closer to those observations than those of HERMES (82⁄ and 100⁄, respectively, versus 76⁄ with PMF) in the MOCoPo case study. In Paris, Amato et al. (2016) estimate 22⁄ of PM_{10} emissions for resuspension at a ring road with 220 000 vehicles per day. For the TrafiPollu case study, HERMES and NORTRIP simulate 153 and 9⁄ respectively, at Alsace-Lorraine boulevard, where traffic flow is 795 vehicles per day. Therefore, these results suggest that HERMES could overestimate resuspension in both case studies (MOCoPo and TrafiPollu) with greater overestimation at lower traffic speeds.

The NORTRIP emissions can be converted to traffic fleet-average emission factors by dividing the values by the total number of light-duty, passenger and heavy-duty vehicles. We obtain respectively for light-duty, passenger and heavy-duty vehicles, 70 and 140 mg.km^{-1}.veh^{-1} for MOCoPo. This is consistent with the HERMES emissions factors for light-duty vehicles and it is within a factor of two for heavy-duty vehicles. On the other hand, NORTRIP leads to much lower emission factors than HERMES for the TrafiPollu case study, due to lower traffic speed. However, emission factors used in both methods (HERMES and NORTRIP) might not be well adapted to our geographical situation and to tire, brake, and road characteristics and vehicle operation. Pay et al. (2011) mentioned that emission factors applied for Spain are deliberately higher than those for central Europe because there is a higher amount of mineral dust particles in Spain due to climatic conditions (Putaud et al., 2003; Querol et al., 2004). Brake and tire wears used in NORTRIP are from Boulter (2005), they are about half the

EMEP/EEA factors (Ntziachristos and Boulter, 2013) for light-duty vehicles, but similar for heavy-duty vehicles. As light-duty vehicles contribute the most to resuspension, this difference could generate an underestimation of tire and brake origin. On the contrary, the road factors from the Swedish road wear model (Jacobson and Wadberg, 2007) are within a factor of two compared to the EMEP inventory. This leads to a greater contribution of road wear in PM_{10} suspension, while it has been shown by Amato et al. (2016) that carbonaceous PM (i.e., tire wear and motor exhaust) is the main contributing source to PM_{10} mass found at the Paris ring road.

4.2.6. CONCLUSION

In 2011, a two-week measurement campaign was conducted near a freeway in Grenoble. Concentration values were sampled near the roadway than at the background site. However because of a predominantly upwind monitoring site location and mostly calm wind conditions, the results did not allow us to highlight any clear relationship between PM_{10} and traffic data; mainly due to a strong dependency on background contributions that tends to hide the local traffic contribution. In 2014, a three-month measurement campaign was conducted on a boulevard in a Paris suburb. Concentrations simulated with resuspension emissions lead only to a small improvement due to a strong background influence. This result suggest that large traffic flow and favorable meteorological conditions are needed to obtain PM_{10} measurements that clearly reflect the local traffic contribution.

A review of current methodologies to model or estimate from available measurements resuspension emissions has allowed us to clarify the relationships between resuspension rates and traffic parameters. Three approaches were applied: two deterministic models, HERMES and NORTRIP, and one empirical method (Thorpe et al.). HERMES depends mainly on traffic flow and emission factors. This method is highly operational and easily applied. NORTRIP is more detailed, as a mass balance is conducted for PM_{10} deposited and removed from the road pavement. Furthermore, it takes into account many factors such as traffic flow and speed, but also the pavement type. Consequently, it is more complex to apply. For example, rainfall events have to be known with accuracy to apply NORTRIP according to our physical approach because they determine the length of the dry periods during which the PM_{10} load on the road surface (a major input for the calculation of the resuspension rate) can accumulate. The empirical method of Thorpe et al. is based on PM_{10} and NO_x emission factors and on concentration measurements. The fraction between $PM_{2.5}$ and PM_{10} is assumed to be due to resuspension as well as direct emissions from brake, tire and road wear. It can only be applied if such ambient measurements are available; therefore it is mostly a diagnostic tool rather than an operational model.

The traffic fleet characteristics and the associated impact on simulated local concentrations have been assessed by discriminating our calculations according to vehicles types (light-duty/passenger vehicles or heavy-duty vehicles). In both case studies, the traffic fleet was dominated (> 95⁄) by light-duty/passenger vehicles, which in spite of their lower resuspension of road dust PM_{10} than heavy-duty vehicles, lead to more resuspension of particles due to their greater numbers. The road wear process was identified to contribute the most to the total wear-origin resuspension.

NORTRIP, due to its level of details in its formulation appears to be the preferred model, however, uncertainties in the input data may alter the accuracy of the final results. HERMES has shown encouraging results but its simpler formulation may prevent its appreciation to location that differs in terms of traffic and environmental conditions. For NORTRIP method, resuspension emissions are sensitive to traffic speed in conjunction with rainfall events.

A problem encountered in resuspension investigation is the difficulty to discriminate among different factors affecting it. It is even more difficult if we add the fact that dust collected on the road surface comes from a wide range of sources, not just from vehicles but also from vegetation and nearby sources such as industrial and domestic activities. PM_{10} has a long atmospheric residence time and is, therefore, transported over long distances, thereby leading to a mixture of many sources. A review of the literature highlights some studies on the estimation of road pollutants such as brake dust, tire wear and resuspension of non-exhaust traffic particles derived from atmospheric measurements. For instance, Harrison et al. (2004) have shown that the combined use of size distribution information and tracer elements allowed one to separate estimation of the contribution of brake and tire PM_{10} and resuspension to particle mass in a the range 0.9-11.5 µm aerodynamic diameter and their mean contributions. This kind of estimation could be complementary to the study of chemical profiles that has been done with PMF (Polo Rehn, 2013 and Amato et al., 2016). It also points out that the definition of resuspension is difficult to characterize as brake and tire particles have both direct and indirect (resuspended) components that are difficult to clearly separate. Furthermore, more work is needed to evaluate the traffic effect on near-road concentrations via processes such as vehicle-induced turbulence and also to add the contribution of other wear sources to PM_{10} resuspension. Also, the influence of particles of size larger than 10 µm is of interest for water quality assessment and their resuspension should be investigated as well.

Finally, there is real need for controlled experiment (1) to confirm that both traffic flow and speed govern resuspension and (2) to better characterize PM buildings on pavement.

CHAPITRE 5. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Cette thèse propose une approche multi-échelle et multi-modèle pour caractériser la pollution liée au trafic routier en termes de concentrations et dépôts (sec et humide). Dans le but de prendre en compte la pollution de fond ainsi que la pollution de proximité du trafic le déroulement de la thèse a suivi l'ordre du transfert d'échelles, de l'échelle la plus large (régionale) à la plus locale (rue). La thèse s'inscrit dans un cadre de recherche systémique, l'ensemble des principaux éléments gouvernant la pollution urbaine ont été étudiés (émissions et morphologie), ainsi que leurs interactions et leurs interdépendances physiques (météorologie, concentrations et dépôts). Cependant, le volet chimique n'a pas été approfondi. Chaque échelle est représentée par l'utilisation d'un voire plusieurs modèles qui ont alors offert la possibilité de pouvoir être comparés en termes de performance afin de pouvoir orienter leur utilisation dans un but plus ou moins opérationnel.

5.1. LES SIMULATIONS RÉGIONALES AVEC WRF ET POLAIR3D

Ainsi, la première partie de la thèse a concerné la simulation de la pollution de fond à l'échelle régionale. Cette première étape a été capitale puisque ces simulations ont servi à alimenter les modèles employés aux échelles plus fines. La météorologie et les concentrations de fond modélisées ici ont été ensuite fournies en tant que conditions initiales et aux limites aux modèles à l'échelle locale. A l'échelle régionale, la météorologie a été simulée sur plusieurs domaines imbriqués (Europe, France, Île-de-France et quartier de la banlieue parisienne) avec le modèle WRF par descente d'échelle d'un facteur environ quatre. La pollution de fond a été simulée avec le modèle de chimie-transport POLAIR3D sur les mêmes domaines. Un traitement fin de la canopée urbaine a été proposé pour les domaines couvrant l'Île-de-France et le quartier de la banlieue parisienne. L'effet du bâti est intégré dans l'écoulement météorologique avec UCM et dans les dépôts par surface (toits, murs et routes) avec le modèle de Cherin et al. (2015). L'objectif de ces premières simulations était d'évaluer la capacité à simuler les polluants dans un environnement urbain complexe (trois morphologies ont été décrites avec une répartition spatiale hétérogène). Les flux de dépôts atmosphériques ont été discriminés en fonction des surfaces urbaines rencontrées en utilisant le modèle de Cherin et al. (2015). Ils ont également été modélisés sans distinction des surfaces avec une approche classique (Wesely and Hicks, 2000). Les différences entre les deux approches se sont révélées être faibles pour certains polluants comme le cuivre et un peu plus marquées pour le BaP (HAP), suggérant un effet hétérogène du bâti sur les flux de dépôt des polluants atmosphériques notamment entre des polluants de distributions granulométriques différentes. Nous avons obtenu de bonnes performances, que ce soit avec le modèle météorologique WRF, le modèle de concentrations POLAIR3D et le modèle de dépôt de Cherin et al. (2015). Les simulations météorologiques sont particulièrement en bon accord avec les observations pour la vitesse du vent, les directions principales sont conservées avec un léger décalage de 15° vers l'est. Les simulations des concentrations, notamment pour le cuivre, sont cohérentes avec les observations ainsi que les HAP pour les simulations de dépôt total (sec et humide). Des perspectives d'amélioration du modèle ont pu être dégagées de ces simulations, notamment concernant la prise en compte différenciée

de la masse volumique de chaque particule en fonction de sa nature chimique, l'injection de sources locales de pollution dans la canopée au lieu d'utiliser de concentrations simulées avec un modèle régional au niveau du toit de la canopée et le besoin de campagnes expérimentales pour mieux évaluer la performance des modèles de dépôts.

5.2. LES SIMULATIONS À L'ÉCHELLE DE LA RUE AVEC SING ET CODE_SATURNE

Nous nous sommes intéressés en deuxième partie de la thèse à l'échelle locale, c'est-à-dire à la dispersion des concentrations dans une rue sans tenir compte du dépôt. Lors de ces simulations nous avons pu exploiter les émissions émises directement sur le boulevard du site expérimental à l'aide des simulations trafic puis d'émissions réalisées dans le cadre du projet TrafiPollu dans lequel s'inscrit cette thèse. Deux modèles ont été utilisés avec leur spécificité, un modèle de rue-canyon en sous-maille du modèle POLAIR3D (SinG) et un modèle de CFD (*Code_Saturne*). L'intérêt était de pouvoir comparer la performance de ces deux modèles et d'explorer les deux types de résolutions offertes. *Code_Saturne* a été implémenté avec une résolution au cœur du boulevard de 2,5 m sur le plan horizontal, tandis que SinG est résolu sur les longueurs des tronçons du boulevard (dont la longueur varie entre 30 et 180 m). *Code_Saturne* a pu retranscrire l'effet des bâtiments sur l'écoulement avec notamment la formation explicite d'une zone de recirculation lorsque le vent est diagonal ou quasi-perpendiculaire à l'axe de la rue. Cependant, la morphologie du quartier modélisée (basée sur des données réelles) en 3D ne correspond pas vraiment à une rue totalement canyon, en effet il s'agit d'un espace semi-ouvert caractérisé par une largeur de rue plus importante que la hauteur moyenne des bâtiments l'entourant. Ainsi, avec cette configuration il a été possible de se rendre compte que le recours à une formulation de la recirculation n'est pas toujours nécessaire. Et donc, SinG qui fait l'hypothèse d'une concentration uniforme pour un segment de rue et par conséquent ne tient pas compte d'un gradient de concentrations entre les deux côtés du boulevard (autrement dit, la recirculation n'est pas formulée) apparaît comme une solution opérationnellement raisonnable (le temps de calcul étant largement diminué) tout en prenant en compte l'effet du bâti. En revanche, des pistes d'amélioration de la résolution de ces modèles peuvent être énoncées comme intégrer l'effet de la turbulence induite par les véhicules, la réduction de la turbulence par la présence d'arbes, ou bien une meilleure représentation du bâti (sans simplification autour des stations de mesure par exemple).

5.3. LES SIMULATIONS DE LA RÉÉMISSION DES PARTICULES

Enfin, nous avons pu quantifier et explorer l'effet de la réémission des particules sur les concentrations au niveau du boulevard au sein du site expérimental. Nous avons pu mettre en évidence la variabilité du processus de la réémission des particules au travers de trois modèles (empirique, semi-empirique et déterministe) mais également en fonction des conditions de circulation (trafic, parc roulant) et de météorologie (périodes sèches, périodes humides). Ce processus de micro-échelle est souvent pointé du doigt pour améliorer les simulations de concentrations faites en bordure de chaussée. Il a donc été important de pouvoir quantifier la contribution réelle de la réémission (totale et discrétisée en sources) sur deux cas d'étude concrets et différents en termes de circulation du trafic et de météorologie.

De plus, la comparaison des trois formulations a permis de mettre en lumière leur opérabilité et leur cohérence. Nous avons conclu que la formulation déterministe (NORTRIP) de par son degré de détails était la formulation préférée, elle intègre notamment un bilan de masse sur la chaussée et explicitement les effets de la pluie. Cependant, la formulation semi-empirique (HERMES) est tout aussi pertinente à utiliser en mode opérationnel (car moins complexe) sur des études de cas où les vitesses sont suffisamment élevées (autoroute, boulevard périphérique par exemples). En revanche, la formulation totalement empirique (Thorpe et al.) n'est pas appropriée lorsque les concentrations en bordure de chaussée sont dominées par le fond. Des perspectives peuvent être envisagées afin d'améliorer ces simulations, notamment d'intégrer le dépôt autre que celui des particules produites par usure mécanique (freins, pneus et chaussée) considéré comme base dans le modèle NORTRIP. Il serait par exemple intéressant de pouvoir coupler NORTRIP à un modèle de sous-maille comme SinG qui pourrait fournir des données de dépôt sur la chaussée en considérant toutes les sources d'émissions et tous les types de dépôts. Par ailleurs, ces simulations ont été réalisés afin de pouvoir se comparer à leur référence bibliographiques, cependant, les facteurs d'émission utilisés n'ont pas été nécessairement représentatifs de la localisation géographique de nos cas d'étude ou encore des conditions environnementales ou de trafic. Une autre des perspectives de ce travail serait d'adapter les facteurs d'émission à des données plus récentes et plus seyantes.

5.4. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES GENERALES DE LA THESE

Finalement, au travers de cette thèse nous avons pu mettre en place et utiliser une chaîne complète de simulation depuis nos données d'entrée des modèles (météorologie et émissions) à nos simulations des résultats (concentrations et dépôts). Cette approche est novatrice car elle a réuni au-delà du compartiment atmosphérique une modélisation de l'ensemble des processus qui interviennent dans la pollution de l'air et des eaux de ruissellement en ville (trafic, émissions, concentrations, dépôts et ruissellement). Nous avons pu confronter l'approche modélisation totale à des observations et évaluer l'intérêt, la pertinence et l'opérabilité d'une telle chaîne de modélisation pour la qualité de l'air en milieu urbain. Cette chaîne de modélisation nous a permis (1) de comprendre les processus propres à chaque échelle, (2) de tester nos modèles sur des cas d'étude concrets, (3) d'évaluer la pertinence et la représentativité intrinsèques à chaque modèle ainsi que la cohérence des modèles entre eux. La chaine de modélisation réalisée peut se résumer par la Figure 5.1, à l'échelle régionale les modèles météorologique (WRF) et de chimie-transport (POLAIR3D) sont résolus et fournissent (en extrayant les informations au niveau de la maille concernée) les données aux limites du domaine (échange au niveau du toit dans la canopée urbaine ou aux cinq faces de la boîte) et à l'état initial pour les modèles à l'échelle locale (respectivement, la canopée urbaine de SinG et *Code_Saturne*). Ils sont également utilisés pour calculer un processus de micro-échelle (la réémission des particules).

Lors de ces simulations nous avons pu mettre en évidence l'importance des données d'entrée dans la qualité des résultats finaux obtenus. Par exemple, une imprécision dans les données de précipitations induit une imprécision dans le dépôt humide, ou encore dans le bilan en masse des particules sur la chaussée pour la réémission. Une imprécision de la direction du vent induit une imprécision dans le sens de circulation des polluants, notamment

dans une rue-canyon. Une imprécision des données du trafic génèrent des imprécisions du taux d'usure des freins, des pneus et de la chaussée mais aussi des émissions directes échappement et des concentrations qui leur sont associées. Le système de la modélisation étant constitué d'éléments interdépendants, l'introduction d'une incertitude génère un effet domino de propagation des erreurs sur l'ensemble de la chaîne. C'est pourquoi, nous réalisons que ce genre d'étude nécessite des données observées pour pouvoir comparer à chacun des niveaux de modélisation la fiabilité des résultats avancés ainsi qu'une quantification des incertitudes propagées.

En perspectives de cette thèse, nous estimons que des campagnes de mesures, notamment pour les dépôts (humide et sec), seraient opportunes pour pouvoir évaluer de manière précise (dans une zone géographique représentative) les modèles de dépôt utilisés. Par ailleurs, il peut être envisagé de coupler les modèles trafic/émissions aux modèles de la qualité de l'air à l'échelle d'une agglomération afin de simuler de manière dynamique la pollution liée aux infrastructures routières et de pouvoir prédire et étudier l'effet du trafic et de ses émissions sur la qualité de l'air de manière plus intégrée que celles actuellement utilisées. Au cours de cette thèse, nous avons également pu transférer des données de dépôts (sec et humide) à des laboratoires d'hydrologie. Cependant, il pourrait être intéressant pour la qualité des eaux de ruissellement de pouvoir coupler directement les modèles de la qualité de l'air à des modèles d'hydrologie.

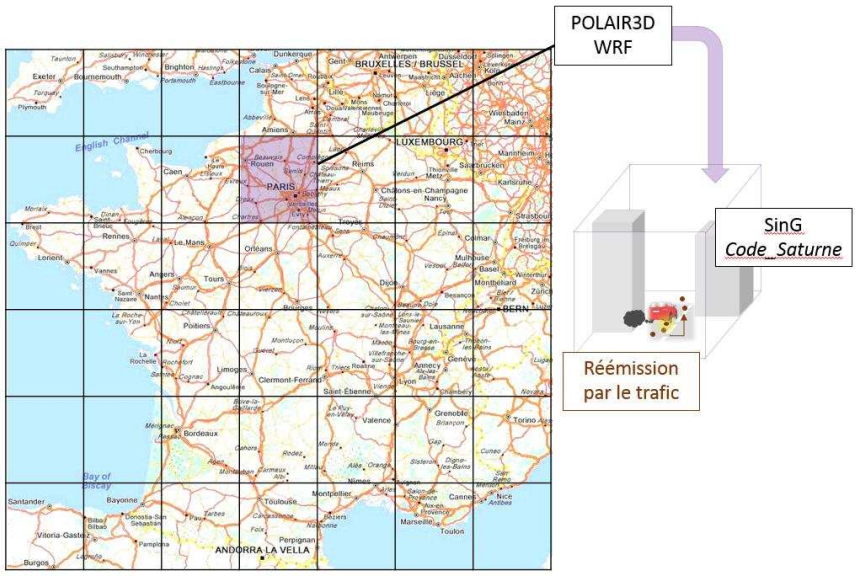


Figure 5.1 - Modélisation de la pollution du trafic routier : les différentes échelles couvertes par les modèles régionaux (POLAIR3D, WRF), les modèles locaux (SinG, Code_Saturne) et de micro-échelle (réémission).

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Airparif, 2013. Surveillance & information sur la qualité de l'air en Greater Paris - Pollution atmosphérique au Benzo(a)pyrène et autres Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP) – Cas de la région Greater Paris. http://www.airparif.asso.fr/_pdf/publications/bilan-hap-130702.pdf.

Airparif, 2015. Surveillance & information sur la qualité de l'air en Greater Paris - Bilan année 2014. http://www.airparif.asso.fr/_pdf/publications/bilan-2014.pdf.

Allen A.G., Nemitz E., Shi J.P., Harrison R.M., Greenwood J.C., 2001. Size distribution of trace metals in atmospheric aerosols in the United Kingdom. *Atmospheric Environment*. 35. 4581-4591.

Amato F., Cassee F., Denier van der Gon H., Gehrig R., Gustafsson M., Hafner W., Harrison R. , Jozwicka M., Kelly F. , Moreno T., Prevot A., Schaap M., Sunyer J., Querol X., 2014. Urban air quality: The challenge of traffic non-exhaust emissions. *Journal of Hazardous Materials*. 275. 31-36.

Amato F., Favez O., Pandol_ M., Alastuey A., Querol X., Moukhtar S., Bruge B., Verlhac S., Orza J. A. G., Bonnaire N., Le Priol T., Petit J. -F, Sciare J., 2016. Traffic induced particle resuspension in Paris: Emission factors and source contributions. *Atmospheric Environment*. 129. 114-124.

André M., Lejri D., Can A., Pasquier A, 2016. Étude de sensibilité de l'estimation des émissions du trafic. Livrable 2.1. du projet TRAFIPOLLU - Modélisation multi-échelles de la pollution due au trafic dans un environnement urbain. IFSTTAR, Bron. 74 p.

ANSES, 2012. Sélection des polluants à prendre en compte dans les évaluations des risques sanitaires réalisées dans le cadre des études d'impact des infrastructures routières. 199 p.

Archambeau F., Mechitoua N., Sakiz M., 2004. Code Saturne : a finite volume code for the computation of turbulent incompressible flows – industrial applications. *International Jounal On Finite Volumes*. 1.

Bartanova A., Clench-Ara J., Gram F., Walker S.E., 1999. Air pollution exposure monitoring and estimation. Part V. Traffic exposure in adults. *Journal of Environmental Monitoring*. 1. 337-340.

Bernhardt-Römermann M., Kirchner M., Kudernatsch T., Jakobi G., Fischer A., 2006. Changed vegetation composition in coniferous forests near to motorways in Southern Germany: the effects of traffic-born pollution. *Environmental Pollution*. 143. 572-581.

Bolund P. and Hunhammar S., 1999. Ecosystem services in urban area. *Ecological Economics*. 29. 293-301.

Boulter P.G., 2005. A Review of Emission Factors and Models for Road Vehicle Non-exhaust Particulate Matter. TRL Limited, Wokingham, UK. (TRL Report PPR065). *Atmospheric Environment*. 77. 283-300.

Boutahar J., Lacour S., Mallet V., Quélo D., Roustan Y., Sportisse B, 2004. Development and validation of a fully modular platform for numerical modelling of air pollution: Polair3D. *International Journal of Environmental Polluion*. **22**. 1-2.

Bressi, M., Sciare J., Ghersi V., Mihalopoulos N., Petit J.E., Nicolas J.B., Moukhtar S., Rosso A., Féron A., Bonnaire N., Poulakis E., Theodosi C., 2014. Sources and geographical origins of fine aerosols in Paris (France). *Atmospheric Chemistry and Physics.* **14.** 8813–8839.

Bresson R., 2014. User's guide. http://docs.salome-platform.org/7/gui/GEOM/.

Briant R., Korsakissok I. and Seigneur C., 2011. An improved line source model for air pollutant dispersion from roadway traffic. *Atmospheric Environment*. **45**. 4099-4107.

Briant R., Seigneur C., Gadrat M., Bugajny C., 2013. Evaluation of roadway Gaussian plume models with large-scale measurements campaigns. *Geoscientific Model Development*. **6**. 445-446.

Brugge D., Durant J.L., Rioux C., 2007. Near-highway pollutants in motor vehicle exhaust : a review of epidemiologic evidence of cardiac and pulmonary health risks*. Envrionmental Health*. **6**. 23.

CERC, 2006. ADMS-Urban, USER Guide. Available from Cambridge Environmental Research Consultants, Cambridge, UK.

Chang J.C., Hanna S.R., 2004. Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics*. **87**. 167-196.

Cherin. N., Roustan. Y., Musson-Genon. L., Seigneur. C., 2015. Modelling atmospheric dry deposition in urban areas using an urban canopy approach. *Geoscientific Model Development*. **8**. 893-910.

Chu A.K.M., Kwok R.C.W., Yu K.N., 2005. Study of pollution dispersion in urban areas using Computational Fluid Dynamics (CFD) and Geographic Information System (GIS). *Environmental Modelling & Software*. **20.** 273-277.

Cimbéton, Centre d'information sur le ciment et ses applications, 2008. Composition des bâtiments d'industrie de commerce et de stockage. *Vers une architecture de composants en béton*. B.60. 50 p.

Code_Saturne, 2015. Technical report. http://code-saturne.org/cms.

Dablanc L., 2008. Urban goods movement and air quality policy and regulation issues in European cities. *Journal of Environmental Law*. **20**. 245-266.

De Bortoli A. 2015. Characteristics of a semi-coarse asphaltic concrete (BBSG) for road pavement in France. Private communication.

De Munck C., Pigeon G., Masson V., Meunier F., Bousquet P., Tréméac B., Merchat M., Poeuf P., Marchadier C., 2013. How much air conditioning increase air temperatures for a city like Paris, France? *International Journal of Climatology*. **33**. 210-227.

Denby B.R., 2012. NORTRIP emission model user guide. Norwegian Institute for Air Research.

Denby B.R., Sundvor I., Johansson C., Pirjola L., Ketzel M., Norman M., Kupiainen K.,Gustafsson M., Blomqvist G., Omstedt G., 2013. A coupled road dust and surface moisture model to predict non-exhaust road traffic induced particle emissions (NORTRIP). Part 1: Road dust loading and suspension modelling. *Atmospheric Environment*. 77. 283-300.

Di Sabatino S., Buccolieri R., Pulvirenti B., Britter R., 2007b. Flow and pollutant dispersion modelling in street canyons using Fluent and ADMS-Urban. *Environmental Modeling & Assessment.* 13. 369-381.

Dudhia. J., 1989. Numerical study of convection observed during the winter monsoon experiment using a mesoscale two-dimensional model. *Journal of the Atmospheric Sciences*. 46. 3077-3107.

Düring I., Jacob J., Lohmeyer A., Lutz M., Reichenbacher W., 2002. Estimation of the "non-exhaut pipe" PM10 emissions of streets for practical traffic air pollution modelling. *11th Intl. Symposium on Transport and Air Pollution, Graz University of Technology, Institute for Internal Combustion Engines and Thermodynamics*. 1. 309-316.

Fallah Shorshani M., Seigneur C., Polo L., Chanut H., Pellan Y., Jeffrezo J.L, Charron A., André M., 2015. Atmospheric dispersion modeling near a roadway under calm meteorological conditions. *Transportation Research*. 34. 137-154.

Fisher B., Kukkonen J., Piringer M., Rotach M.W, Schatzmann M., 2006. Meteorology applied to urban air pollution problems: concepts from COST 715. *Atmospheric Chemistry and Physics*. 6. 555–564.

Fluent, 2005. 6.2 User's Manual. http://www.fluent.com.

Friedman M.S., Powell K.E., Hutwagner L., Graham L.M., Teague W.G., 2001. Impact of changes in transportation and commuting behaviors during the 1996 Summer Olympic Games in Atlanta on air quality and childhood asthma. *JAMA*. 285. 897-905.

Fritz A., Dugay F., Honoré C., Sanchez O., Ghersi V., Songeur C., Pernot P., Mahé F., Moukhtar S., Sciare J., 2015. Bilan de l'épisode de pollution de mars 2014 et évaluation de la mise en place de la circulation alternée le 17 mars 2014 en Île-de-France. *Pollution atmosphérique*. Numéro spécial. Mars 2015.

Gao Z., Bresson R., Qu Y., Milliez M., Demunck C., Carissimo B., 2017. High resolution unsteady RANS simulation of wind, thermal effects and pollution dispersion for studying urban renewal scenarios in a neighborhood of Toulouse. Accepted in *Urban Climate*.

Ghenu A., Rosant J-M., Sini J-F., 2008. Dispersion of pollutants and estimation of emissions in a street canyon in Rouen, France. *Environmental Modelling & Software*. 23. 314-321.

Gomez-Mendikute A., Etxeberria A., Olabarrieta I., Cajaraville M.P., 2002. Oxygen radicals production and actin filament disruption in bivalve haemocytes treated with benzo(a)pyrene. *Marine Environmental Research*. 54. 431-436.

Greenfied, S.M., 1957. Rain scavenging of radioactive particulate matter from the atmosphere. *Journal of Meteorology.* **14.** 115-125.

Grell G.A., Devenyi D., 2002. A generalized approach to parametrizing convection combining ensemble and data assimilation techniques. *Geophysical Research Letters*. **29**.

Gustafsson M., Blomquist G., Gudmundsson A., Dahl A., Jonsson P., Swietlicki E., 2008. Factors affecting PM10 emissions from road pavement wear. *Atmospheric Environment*. **43**. 4699-4702.

Haoues-Jouve S., Lemonsu A., Adolphe L., Berry-Chikhaoui I., Bouyer J., Bridier S., Can A., Carissimo B., Chouillou D., Dorier E., Flamand A., Gaudio N., Gauvreau B., Hidalgo J., Hoornaert S., Lafille J., Le Bras J., Levy J.P., Ludwig S., Marchandise S., Masson V., Nguyen D., Richard I. and Pellegrino M., 2015. Meeting environmental quality requirements at neighborhood scale: an original transdisciplinary approach allying human and physical 26 sciences (the EUREQUA project). *9th International Conference on Urban Climate, Toulouse, France*.

Harrison R. M., Jones A. M., Lawrence R. G., 2004. Major component composition of PM10 and PM2.5 from roadside and urban background sites. *Atmospheric Environment*. **38**. 4531-4538.

Hedley A.J., Wong C.M., Thach T.Q., Ma S., Anderson H.R., 2002. Cardiorespiratory and all-cause mortality after restrictions on Sulphur content of fuel in Hong Kong: an investigation study. *Lancet*. **360**. 1646-1652.

HEI (Health Effects Institute), 2010. Traffic-related air pollution: a critical review of the literature on emissions, exposure, and health effects. Special report **17**. Boston, Massachussets: 386 p.

Hutchison, B.A., Matt, D.R., Mcmillen, R.T., 1986. The architecture of a deciduous forest canopy in eastern Tennessee, USA. *Journal of Ecology*. **74**. 635-646.

Hong Y., Bonhomme C., Chebbo G-H., 2016. New insights into the urban washoff process with detailed physical modelling. *Science of the Total Environment*. **573**. 924-936.

Hong. S.Y., Dudhia J., Chen S.H., 2004. A revised approach to ice microphysical processes for the bulk parametrization of clouds and precipitation. *American Meteorological Society*. **132**. 103-120.

Hutzell W. T., Luecken D. J., 2008. Fate and transport emissions for several trace metals over the United States. *Science of the Total Environment*. **396**. 164-179.

Jacobson T., Wagberg L., 2007. The Swedish National Road and Transport Research Insitute, Linkoping. (VTI notat 7-2007) (in Swedish).

Ketzel M., Jensen S.S., Brandt J., Ellermann T., Olesen H.R., Berkowicz R., Hertel O., 2012. Evaluation of the street pollution model OSPM for measurement at 12 street stations using using newly developed and freely available evaluation tool. *Civil & Environmental Engineering*. S1:004.

Kim Y., Sartelet K., Raut J.C., Chazette P., 2013. Evaluation of the Weather Research and Forecast/Urban model over greater Paris. *Boundary-Layer Meteorology*. **149**. 150-132.

Kim Y., Wu Y., Seigneur C. and Roustan Y., 2016. Multi-scale modeling of urban air pollution: development of a Street-in-Grid model. Conference proceeding. *European Geosciences Union (EGU2016, Vienna, Austria)*. *Geophysics Research Abstracts*. **18**. EGU2016-7390

Kusaka H., Kondo H., Kikegawa Y., Kimura F., 2001. A simple single-layer urban canopy model for atmospheric models: comparison with multi-layer and slab models. *Boundary-Layer Meteorology*. **104**. 463-490.

Lemonsu, A., C. S. B. Grimmond, V. Masson., 2004. Modeling the surface energy balance of the core of an old mediterranean city: Marseille. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*. **43**. 312-327.

Liu L., Liu A., Li Y., Zhang L., Zhang G., Guan Y., 2016. Polycyclic aromatic hydrocarbons associated with road deposited solid and their ecological risk: Implications for road stormwater reuse. *Science of the Total Environment*. **563**. 190–198.

Loridan T., Grimmond C.S.B., Grossman-Clarke S., Chen F., Tewari M., Manning K., Martili A., Kusaka H., Best M., 2010. Trade-offs and responsiveness of the single-layer urban canopy parametrization in WRF : an offline evaluation using MOSCEM optimization algorithm and field observations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. **136**. 997-1019.

Loridan T., Grimmond C.S.B., 2012. Multi-site evaluation of an urban land-surface model: intra-urba heterogeneity, seasonality and parameter complexity requirements. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. 138. 1094-1113.

Maignant G., 2006. Modélisation de la dispersion de polluants à l'échelle intra-urbaine, mise en place d'indicateurs morphologiques. Document de travail pour la laboratoire ESPACE (Etudes des structures, des processus d'adaptation et des changements des espaces). 16 p.

Mallet V., Quélo D., Sportisse B., De Biasi M., Ahmad M., Debry E., Korsakissok I., Wu L., Roustan Y., Sartelet K., Tombette M., Foudhil H., 2007. Technical note: the air quality modeling system Polyphemus. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussion*. **7**. 6459-6486.

Mallet V., Tilloy A., Poulet D., Brocheton F., 2013. Reduction and emulation of ADM-Urban. *HARMO 15. 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Madrid, Spain*.

Maltby L., Forrow D.M., Boxall A.B.A., Calow P., Betton C.I., 1995. The effects of motorway runoff on freshwater ecosystems: 1. Field study. *Environmental Toxicology and Chemistry*. **14**. 1079-1092.

Milliez M., Carissimo B., 2007. Numerical simulations of pollutant dispersion in an idealized urban area, for different meteorological conditions. *Boundary-Layer Meteorol*. **122**. 321-342.

Mlawer Eli. J., Taubman S. J., Brown P. D., Iacono M. J., and Clough S. A., 1997. Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated–k model for the longwave. *Journal of Geophysical Research*. **102**. 16663–16682.

Mollinger A., Nieuwstadt F., Scarlett B., 2007. Model Experiments of the Resuspension Caused by Road Traffics. *Aerosol Science and Technology.* 19. 330-338.

Monin A.S. and Obukhov A.M., 1954. Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. *Contrib. Geophy. Inst. Acad. Sci*. USS. 151. 163-187.

Nakashini M. and Niino H., 2006. An improved Mellor-Yamada level-3 model: its numerical stability and application to a regional prediction of advection fog. *Boundary-Layer Meteorology*. 119. 397-407.

Ntziachristos L., Boulter P., 2013. EMEP/EEA emission inventory guidebook. Section road surface wear.

Oke T. R., 1973. City size and the urban heat island. *Atmospheric Environmental*. 7. 769– 779.

Ollivon D., Blanchoud H., Motelay-Massei A., Garban B., 2002. Atmospheric deposition of PAHs to an urban site, Paris, France. *Atmospheric Environment*. 36. 2891-2900.

OMS (Organisation Mondiale de la Santé)- World Health Organisation, 2005b. Health effects of transport-related air pollution. *Copenhagen : WHO-Regional Office for Europe*. 205 p.

Oreskes N., Shrader-Frechette K., Belitz K., 1994. Verification, validation, and confirmation of numerical models in the earth sciences. Sciences. 263. 641-646.

Pay M., Jimenez-Guerrero P., Baldsano J. M. 2011. Implementation of resuspension from paved roads for the improvement of CALIOPE air quality system in Spain. *Atmospheric Environment*. 45. 802-807.

Pepe N., Lonati G., Pirovano G., Bedogni M., 2016. AP-42 approach for PM traffic resuspension estimation over a milan domain. *21st International Transport and Air Pollution Conference (TAP 2016), Lyon, France.*

Percot S., Ruban V., Roupsard P., Maro D., Millet M., 2013. Use of beryllium-7 as a surrogate to determine the deposition of metal and polycyclic aromatic hydrocarbon through urban aerosols in Nantes, France. *Atmospheric Environment*. 74. 338-345.

Percot S., Ruban V., Roupsard P., Maro D., Millet M., 2016. A new method for assessing the contribution of atmospheric deposition to the stormwater runoff metal load in a small urban catchment. *Water Air Soil Pollution*. 227.180.

Pigeon G., Zibouche K., Bueno B., Le Bras J., Masson V., 2014. Improving the capabilities of the Town Energy Balance model with up-to-date building energy simulation algorithms: an application to a set of representative buildings in Paris. *Energy and buildings*. 76. 1-14.

Pradelle F., Brocheton F., Chabanon B., Honoré C., Dugay F., Léger K., Dambre F., Mallet V., Tilloy A., 2011. The "Votre Air" project: development of a modelling tool to assess the real atmospheric exposure in Paris. *14th international conference on harmonisation within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes., Kos, Greece.*

Putaud J-P., Van Dingenen R., Baltensperger U. , Brüggemann E., Charron A., Facchini M-C., Decesari S., Fuzzi S., Gehrig R., Hansson H-C, et al. 2003. A European aerosol phenomenology: physical and chemical characteristics of particulate matter at kerbside, urban, rural and background sites in Europe. *European Commission*. 55.

Polo Rehn L., 2013. Caractérisation et impacts des émissions de polluants du transport routier : Apports méthodologiques et cas d'études en Rhône Alpes. *Doctoral Thesis*. Université de Grenoble.

Quéguiner S., Ciffroy P., Roustan Y., Musson-Genon L., 2009. Multimedia modelling of the exposure to cadmium and lead released in the atmosphere - Application to industrial releases in a Mediterranean region and uncertainty/sensitivity analysis. *Water Air Soil Pollution*. 198.199-217.

Quéguiner S., Musson-Genon L., Roustan Y., Ciffroy P., 2010. Contribution of atmospheric emissions to the contamination of leaf vegetables by persistent organic pollutants (POPs): Application to Southeastern France. *Atmospheric Environment*. 44. 958-967.

Querol X., Alastueya A., Ruiza C.R., Artiñanob B., Hanssonc H.C, Harrisond R.M., Buringhe E., ten Brinkf H.M., Lutzg M., Bruckmannh P., Straehli P., Schneiderj J., 2004. Speciation and origin of PM10 and PM2.5 in selected European cities. *Atmospheric Environment*. 38. 6547-6555.

Roupsard, P., Amielh, M., Maro, D., Copalle, A., Branger, H., Connan, O., Laguionie, P., Hébert, D., Talbaut, M., 2013. Measurement in a wind tunnel of dry deposition velocities of submicron aerosol with associated turbulence onto rough and smooth urban surfaces. *Journal of Aerosol Science*. 55. 12-24.

Roustan Y., Bocquet M., Musson-Genon L., Sportisse B., 2006. Modelling mercury, lead and cadmium at European scale. *Pollution Atmosphérique*. 191. 317-326.

Salizzoni P., Soulhac L., Mejean P., Perkins R., 2009. Street canyon ventilation and atmospheric turbulence. *Atmospheric Environment*. 43. 5056-5067.

Samara C., Demetra V., 2005. Size distribution of airborne particulate matter and associated heavy metals in the roadside environment. *Chemosphere*. 59. 1197-1206.

Samet J.M., 2007. Traffic, air, pollution, and health. *Inhalation Toxicology*. 19. 1021-1027.

Sartelet K., Couvidat F., Roustan Y., Seigneur C., 2012. Impact of biogenic emissions on air quality over Europe and North America. *Atmospheric Environment*. 53. 131-141.

Säumel I., Kotsyuk I., Hölscher M., Lenkereit C., Weber F., Kowarik I., 2012. How healthy is urban horticulture in high traffic areas? Trace metal concentrations in vegetable crops from plantings within inner city neighbourhoods in Berlin, Germany. *Environmental Pollution*. 165. 124-132.

Schulte N., Tan S., Venkatram A., 2015. The ratio of effective building height to street width governs dispersion of local vehicle emissions. *Atmospheric Environment*. 112. 54-63.

Seigneur C., 2017. Pollution Atmosphérique. Sous presse. *Belin*.

Shalatov V., Ilyin I., Gusev A., Travnikov O., 2015. Heavy metals and persistent organic pollutants: multi-scale modelling and trend analysis methodology. EMEP technical report.

Sini J-F., Anquetin S., Mestayer P.G., 1996. Pollutant disperion and thermal effects in urban street canyons. *Atmospheric Environment*. **15**. 2659-2677.

Skamarock W. C., Klemp J. B., Dudhia J., Gill D. O., Barker D. M., Duda M. G., Huang X. Y., Wang W., Powers J. G., 2008. A description of the advanced research WRF version 3. NCAR Technical note-475+STR. 113 p.

Slinn W.G.N., 1983. Precipitation scavenging in atmospheric sciences and power production. U.S. department of Energy, Washington, D.C.

Snilsberg B., 2008. The influence of driving speed and tires in road dust properties. *Doctoral Thesis*. Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway.

Soulhac L., Salizzoni P., Cierco. F-X. Perkins R., 2011. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; part I, presentation of the model. *Atmospheric Environment*. **45**. 7379-7395.

Tewari M., Chen F., Kuska H., Miao S., 2007. Coupled WRF/Unified Noah/Urban-canopy modeling system. NCAR. 22 p.

Tonnelier J.P., Guidotti S., Lossec B., Baraer F., Desplat J., 2015. La météorologie et les pics de pollution. Etdue de cas de décembre 2013 et mars 2014. *Pollution atmosphérique*. Numéro spécial. Mars 2015.

Thorpe A., Harrisson R., Boulter P., McCrae I., 2007. Estimation of particle resuspension source strength on a major London Road. *Atmospheric Environment*. **41**. 8007-8020.

U.S EPA, 2006. Air Emissions Factors and Quantification report. AP42 Section 13.2.1 Paved Roads (update November 2006).

Venkatram A., Pleim J., 1999. The electrical analogy does not apply to modeling dry deposition of particles. *Atmospheric Environment*. **33**. 3075-3076.

Venkatram A., Snyder M., Isakov V., 2013. Modeling the impact of roadway emissions in light wind, stable and transition conditions. *Transportation Research*. *D.* **24.** 110-119.

Wang Z.H., Bou-Zheid E., Au S.K., Smith J.A., 2011. Analyzing the sensitivity of WRF's single-layer urban canopy model to parameter uncertainty using advanced Monte Carlo simulation. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*. **50**. 1795-1814.

Wang A., Fallah-Shorshani M., Junshi X., Hatzopoulou M., 2016. Characterizing near-road air pollution using a local-scale emission and dispersion models and validation against in-situ measurements. *Atmospheric Environment*. **142**. 452-464.

Wesely M. L. and Hicks B. B., 2000. A review on current status of knowledge on dry deposition. *Atmospheric Environment*. **34**. 2261-2282.

Yu S., Eder B., Dennis R., Chu S-H., Schwartz S. E., 2006. New unbiased symmetric metrics for evaluation of air quality models. *Atmospheric Science Letters*. **7**. 26-34.

Zaïdi H., Dupont E., Milliez M., Musson-Genon L., Carissimo B., 2013. Numerical Simulation of the microscale heterogeneities of turbulence observed on a complex site. *Boundary-Layer Meteorol*. **147**. 237-259.

Zhang L., Gong S., Padro J., Barrie L., 2001. A size-segregated particle dry deposition scheme for an atmospheric aerosol module. *Atmospheric Environment*. **35**. 549-560.

Zielinska B., Sagebiel J., Arnott W. P., Rogers C. F., Kelly K. E., Wagner D. A., Lighty J. S., Sarofim A. F., Palmer G., 2004. Phase and size distribution of polycyclic aromatic hydrocarbons in diesel and gasoline vehicle emissions. *Environmental Science & Technology*. **38**. 2557-2567.

ANNEXES

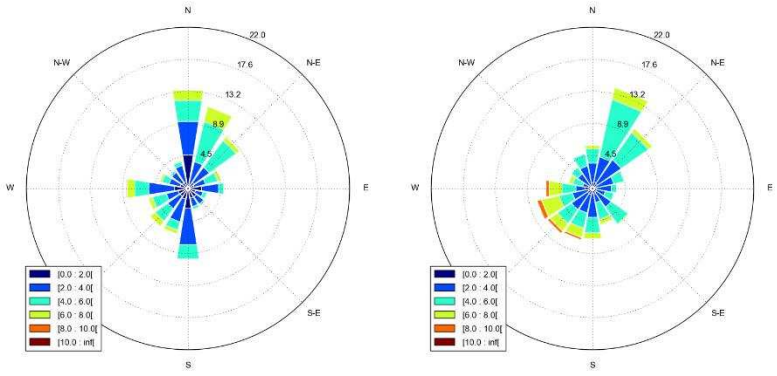
A. Polluants réglementés dans la législation française

POLLUANTS	DOMAINE	VALEURS REGLEMENTAIRES
SEUILS D'ALERTE		
Dioxyde de soufre (SO_2)	santé	500 µg/m^3/heure sur 3 heures consécutives
Dioxyde d'azote (NO_2)	santé	400 µg/m^3/heure
		400 µg/m^3/heure pendant 3 heures consécutives
		200 µg/m^3/heure pendant 2 jours consécutifs et nouveaux risques
Ozone (O_3)	santé	240 µg/m^3/heure sur 3 heures consécutives
		240 µg/m^3/heure pour une protection sanitaire pour toute la population
PM_{10}	santé	80 µg/m^3 en moyenne sur 24 heures
SEUILS D'INFORMATION ET DE RECOMMANDATION		
Dioxyde de soufre (SO_2)	santé	300 µg/m^3/heure
Dioxyde d'azote (NO_2)	santé	200 µg/m^3/heure
Ozone (O_3)	santé	180 µg/m^3/heure
PM_{10}	santé	50 µg/m^3 en moyenne sur 24 heures

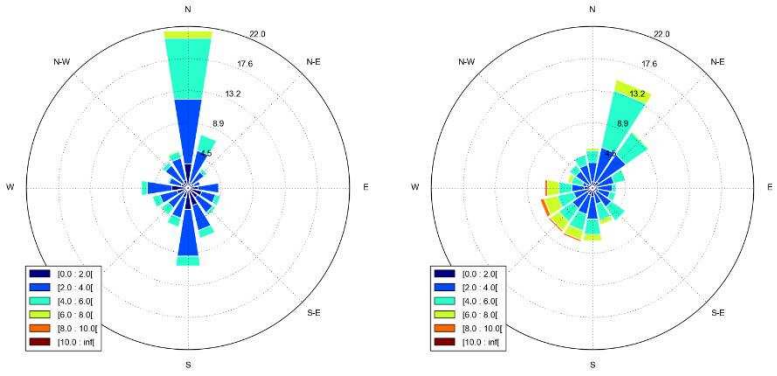
VALEURS LIMITES		
Benzène (C_6H_6)	santé	5 µg/m³ en moyenne annuelle
Dioxyde de soufre (SO_2)	santé	350 µg/m³ /heure à ne pas dépasser plus de 24 heures par an
	santé	125 µg/m³ /jour à ne pas dépasser plus de 3 jours par an
Dioxyde d'azote (NO_2)	santé	200 µg/m³ /heure à ne pas dépasser plus de 18 heures par an
	santé	40 µg/m³ en moyenne annuelle
Monoxyde de carbone (CO)	santé	10 000 µg/m³ en maximum journalier de la moyenne glissante sur 8 heures
PM_{10}	santé	50 µg/m³ /jour à ne pas dépasser plus de 35 jours par an
	santé	40 µg/m³ en moyenne annuelle
$PM_{2,5}$	santé	25 µg/m³ en moyenne annuelle dès 2015
		20 µg/m³ en moyenne annuelle dès 2020
Plomb (Pb)	santé	0,5 µg/m³ en moyenne annuelle
VALEURS CIBLES		
Ozone (O_3)	santé	120 µg/m³ en maximum journalier de la moyenne sur 8 heures, à ne pas dépasser plus de 25 jours par an, moyenne sur 3 ans
	végétation	18 000 (µg/m³).h pour l'AOT calculé à partir de valeurs horaires entre 8h et 20h de mai à juillet, moyenne sur 5 ans
$PM_{2,5}$	santé	25 µg/m³ en moyenne annuelle depuis 2010
	santé	20 µg/m³ en moyenne annuelle dès 2015
Arsenic (As)	santé et environnement	6 ng/m³ en moyenne annuelle du contenu total de la fraction PM_{10}
Cadmium (Cd)	santé et environnement	5 ng/m³ en moyenne annuelle du contenu total de la fraction PM_{10}
Nickel (Ni)	santé et environnement	20 ng/m³ en moyenne annuelle du contenu total de la fraction PM_{10}
Benzo[a]pyrène	santé et environnement	1 ng/m³ en moyenne annuelle du contenu total de la fraction PM_{10}

OBJECTIFS DE QUALITE		
Ozone (O_3)	santé	120 µg/m³ en maximum journalier de la moyenne glissante sur 8 heures sur une année civile
	végétation	6 000 (µg/m³).h pour l'AOT calculé à partir de valeurs horaires entre 8h et 20h de mai à juillet
PM_{10}	santé	30 µg/m³ en moyenne annuelle civile
$PM_{2,5}$	santé	10 µg/m³ en moyenne annuelle civile
Benzène (C_6H_6)	santé	2 µg/m³ en moyenne annuelle civile
Plomb (Pb)	santé	0,25 µg/m³ en moyenne annuelle civile
Dioxyde de soufre (SO_2)	santé	50 µg/m³ en moyenne annuelle civile

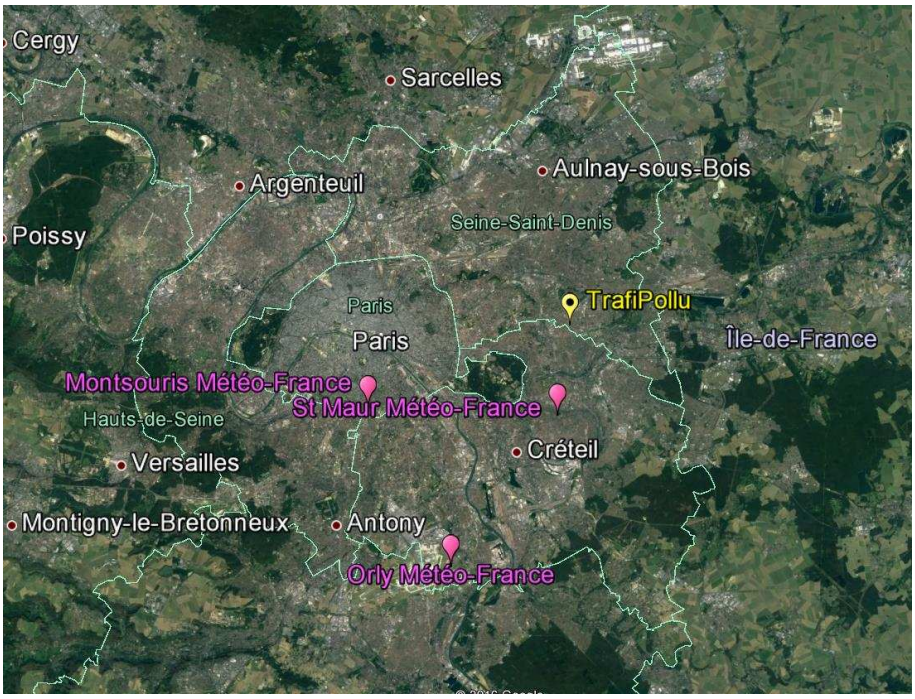
B. Hourly mean wind directions observed (left) and simulated (right) with frequency (in %) of each wind speed ranges at Orly station at an altitude of 10 m.



C. Hourly mean wind directions observed (left) and simulated (right) with frequency (in %) of each wind speed ranges at Montsouris station at an altitude of 10 m.



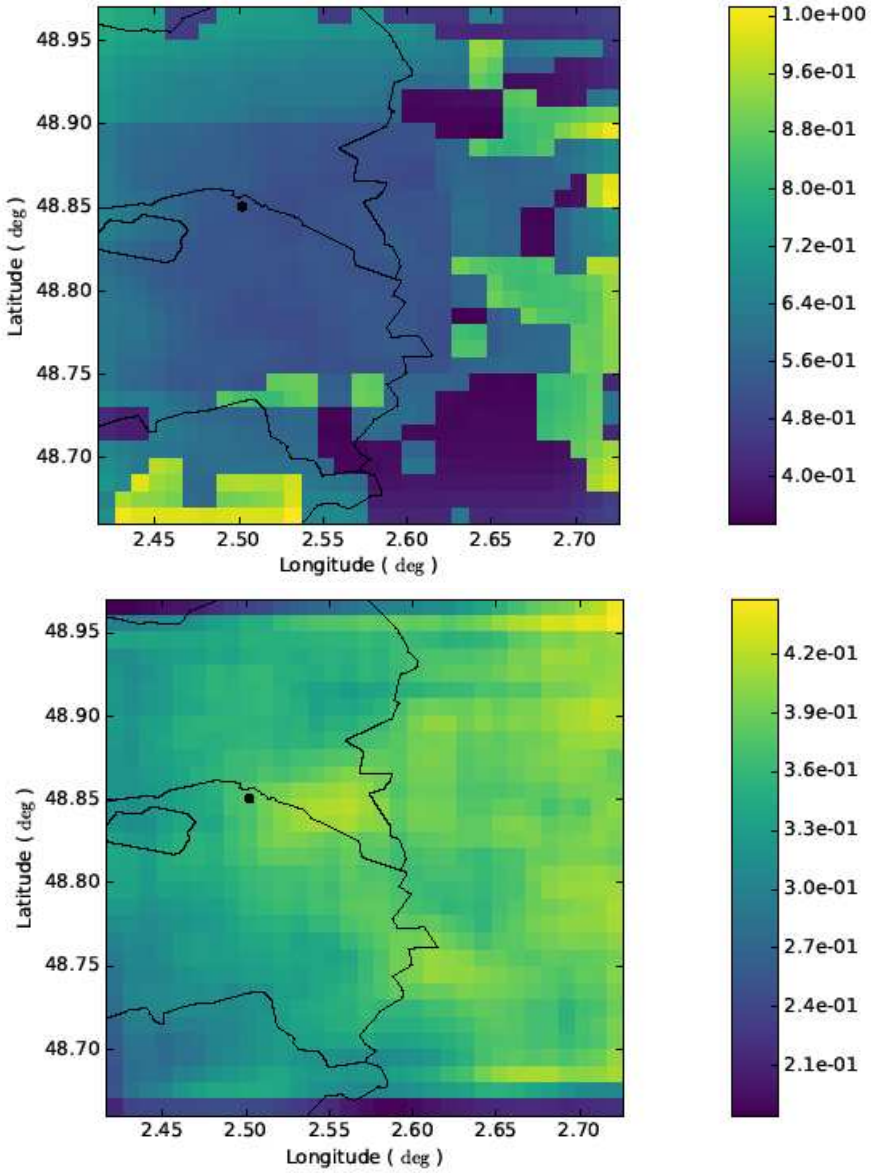
D. Location of each Météo-France stations compare to the experimental site “TrafiPollu” (source: google earth).



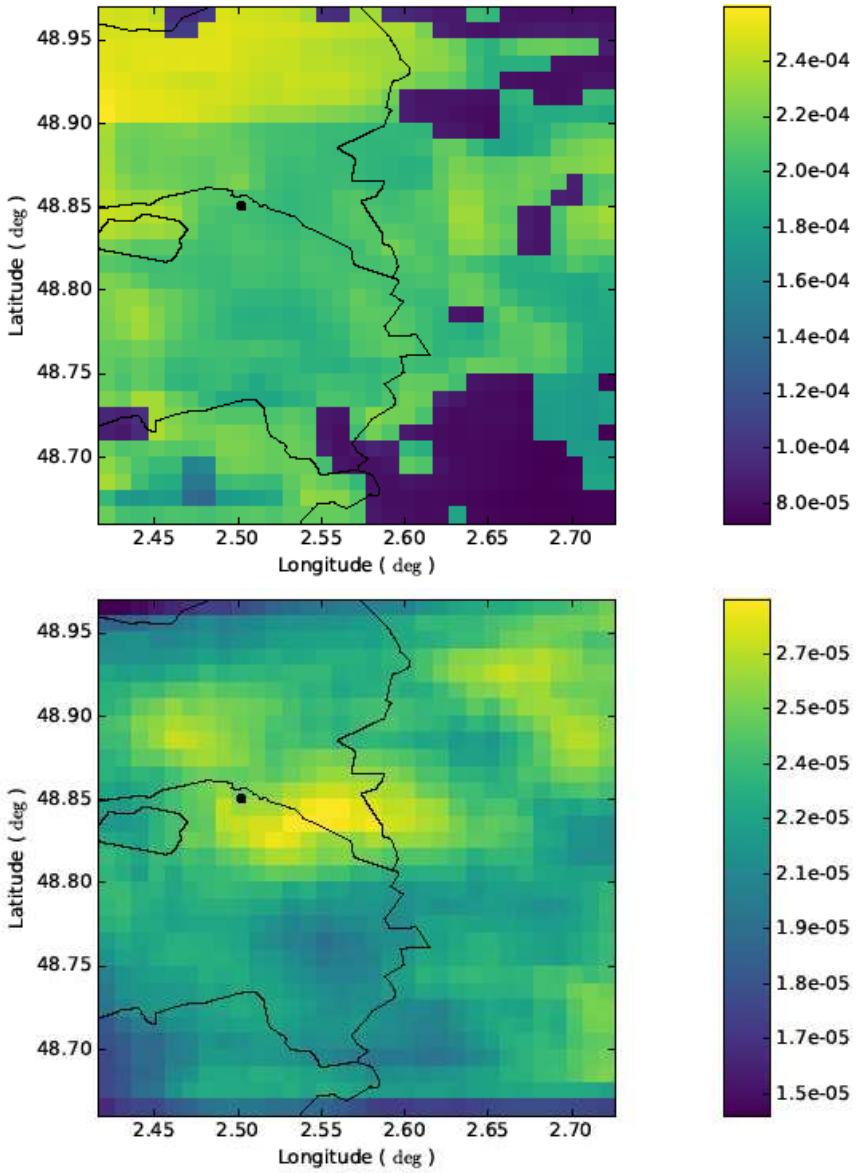
E. Mean simulated and observed concentrations (all particle sizes aggregated) for the spring period (26 March – 29 June 2014) at the experimental site with a first layer of 65 m.

	Zn	Cu	BaP	BbF	IP
Mean simulated concentration ($ng.m^{-3}$)	76.9	15.4	0.11	0.02	0.012
Mean observed concentration ($ng.m^{-3}$)	-	42.1	0.08	0.20	0.10
RMSE ($ng.m^{-3}$)	-	-26.7	+0.03	-0.18	-0.088
FB	-	+0.9	-0.3	+1.6	+1.6

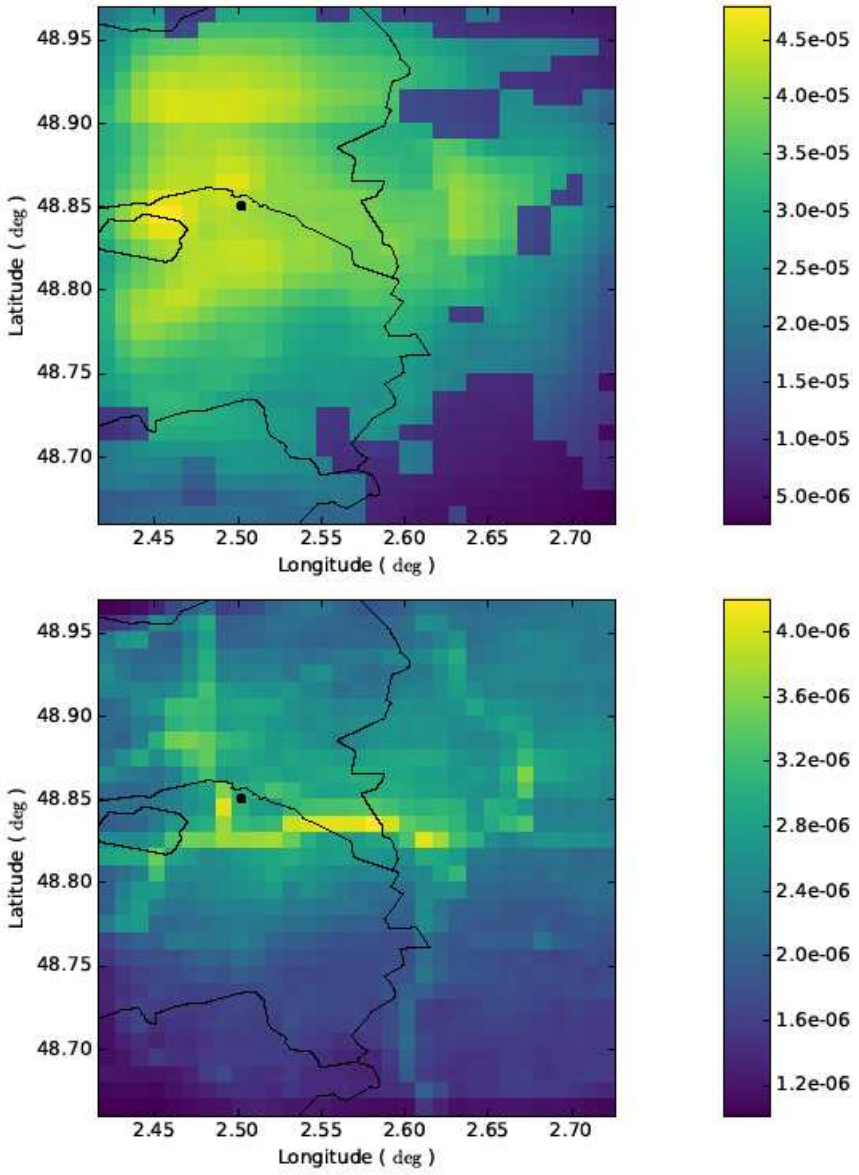
F. Map of mean simulated dry (top) and wet (bottom) deposition fluxes of Zn in ng.m^{-2}.s^{-1} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March– 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.



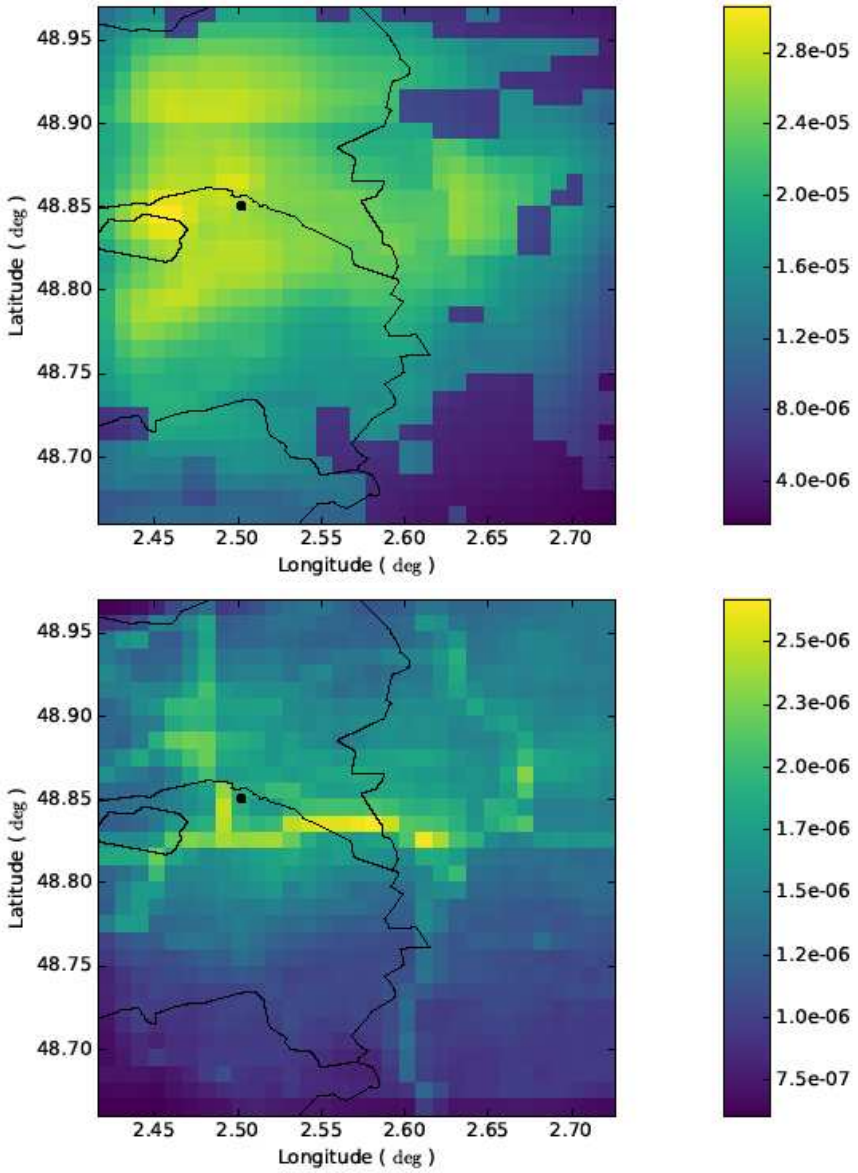
G. Map of mean simulated dry (top) and wet (bottom) deposition fluxes of BaP in ng.m^{-2}.s^{-1} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March – 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.



H. Map of mean simulated dry (top) and wet (bottom) deposition fluxes of BbF in ng.m^{-2}.s^{-1} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March – 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.



I. Map of mean simulated dry (top) and wet (bottom) deposition fluxes of IP in ng.m^{-2}.s^{-1} over D04 (TrafiPollu neighborhood) for the spring period (26 March – 29 June 2014). The black dot corresponds to the experimental station.



J. Mean dry and wet deposition fluxes (all particle sizes aggregated) simulated for each pollutant with roughness-length deposition velocities model ($ng.m^{-2}.s^{-1}$) for the spring period (26 March – 29 June 2014) at the experimental site with a first layer of 15 m.

	Zn	Cu	BaP	BbF	IP
Mean simulated dry deposition flux ($ng.m^{-2}.s^{-1}$)	8.4×10^{-1}	2.0×10^{-1}	3.9×10^{-4}	7.8×10^{-5}	4.9×10^{-5}
Mean simulated wet deposition flux ($ng.m^{-2}.s^{-1}$)	3.7×10^{-1}	7.6×10^{-2}	2.6×10^{-5}	1.8×10^{-6}	3.0×10^{-6}