

ECOLE DES MINES DE DOUAI

Département Energétique Industrielle

Etude n° 3

**MODELES DE DISPERSION DE PARTICULES EN
MILIEU URBAIN**

Isabelle DESCAMPS, Michel-Ange MEUNIER, Jean-Luc HARION
Novembre 2000

Table des matières

1	Introduction	2
2	Situation actuelle	3
2.1	Activité des réseaux de surveillance en matière de modélisation	3
2.2	Groupements de recherche	5
3	Outils de modélisation atmosphérique	5
3.1	Inventaire des polluants particuliers en zone urbaine	5
3.2	Principe de fonctionnement	7
3.2.1	Les entrées	8
3.2.2	Les sorties	10
3.2.3	Modélisation physique	10
3.3	Recensement des outils existants	11
3.3.1	Le type d'outil idéal, les critères de choix et des exemples	11
3.3.2	Les modèles retenus	13
3.4	Evaluations des modèles retenus	14
3.4.1	Le modèle Drag&Fly Air	14
3.4.2	Le modèle ARIA Régional	27
3.4.3	Le modèle ARIA Local	29
3.4.4	Le modèle SUBMESO	31
3.4.5	Le modèle UAM-V	35
3.4.6	Le modèle OPANA	37
3.4.7	Le modèle LADM	40
3.4.8	Le modèle Flexpart	42
3.4.9	Le modèle Fluidyn Panache	44
3.4.10	Le modèle CALPUFF	47
3.4.11	Le modèle ISCST3	50
3.4.12	Le modèle AEROPOL	52
3.4.13	Le modèle ADMS	53
3.5	Comparaisons	55
4	Conclusion	57
	Nomenclature	58
	Glossaire	60
	Annexe	66
1	Questionnaire envoyé aux centres de surveillance de la qualité de l'air	66

Préface

L'Ecole des Mines de Douai réalise depuis plusieurs années des travaux portant sur l'application de modèles numériques de dispersion et de transport de polluants. Jusqu'à présent, les travaux ont porté sur des polluants gazeux.

L'objectif est de prévoir les éventuelles zones d'influence par une cartographie de la répartition des polluants. Il devient alors possible de décider des résolutions à prendre pour en éviter les conséquences néfastes. Les polluants dans l'atmosphère sont nombreux du fait de la diversité des sources. Certains polluants ont un comportement plus facile à modéliser que d'autres car ils suivent l'écoulement fluide. Les particules solides ou liquides ont pour leur part, dans certains cas, des comportements différents. Elles peuvent sédimenter rapidement ou avoir de long temps de séjour dans l'atmosphère, ou encore être transformées. De plus, les zones urbaines, espaces auxquels nous nous intéresserons plus particulièrement ici, sont le siège de nombreuses modifications de l'écoulement d'air de par l'existence de constructions diverses ou du relief. Les phénomènes qui y prennent place doivent aussi être traités différemment que dans le cas d'une atmosphère rurale.

Le présent rapport s'intéresse à la modélisation du comportement de particules solides ou liquides dans l'atmosphère d'une ville. Il s'agit ici de faire un recensement et une évaluation des divers modèles existants capables de résoudre de manière convenable le problème de détermination de la concentration de particules en suspension dans l'air et du taux de déposition des poussières en zone urbaine.

1 Introduction

Cette étude préliminaire est divisée en deux parties :

- La première concerne la situation actuelle, tant au niveau de l'activité des associations de surveillance de la qualité de l'air que de celle des groupements de recherche. Le but de ces regroupements de compétences autour de thèmes relatifs à l'environnement permet, après consensus, d'optimiser les avancées sur les travaux concernant les outils de modélisation. Cette optimisation passe souvent par un approfondissement de la connaissance des phénomènes physiques et chimiques mis en jeu dans le processus.
- La deuxième partie traite des outils de modélisation. Tout d'abord, un inventaire des polluants particuliers des zones urbaines permet de poser les grandes lignes sur la nature granulométrique des particules. Ensuite, il est utile de rappeler le fonctionnement de l'outil tant du point de vue de l'utilisateur que de celui des concepts physiques. Pour terminer, après avoir estimé les besoins des réseaux de surveillance en matière de simulation, nous aborderons les notions retenues pour l'élaboration des critères de choix de modèles auxquels nous nous sommes conformés. Les modèles retenus seront alors décrits et comparés.

2 Situation actuelle

2.1 Activité des réseaux de surveillance en matière de modélisation

Dans le but de cerner au mieux les activités et équipements des réseaux de surveillance en matière de pollution atmosphérique, un questionnaire ciblé a été élaboré et envoyé aux 42 associations. Un exemplaire de ce questionnaire est présenté en Annexe 1.

Le tableau 1 regroupe l'ensemble des réponses aux questions qui ont été adressées à chacun des réseaux de surveillance de la qualité de l'air. Le publipostage de ces questionnaires a été réalisé en première phase de l'étude pour permettre d'obtenir un taux acceptable de réponses à traiter lors de la rédaction définitive du rapport.

Actuellement, 27 réseaux ont répondu. Le résultat est indicatif d'une situation marquée : la majorité des réseaux n'utilise pas de logiciels numériques de modélisation de dispersion de polluants.

Seuls 9 réseaux envisagent la simulation de la dispersion particulière. En effet, la priorité est donnée aux polluants gazeux tels que les oxydes d'azote, l'ozone et le dioxyde de soufre.

En effet, les oxydes d'azote sont principalement émis par la circulation automobile ; or, la congestion du trafic est un problème majeur à résoudre par les municipalités de chaque ville.

L'ozone est un polluant plutôt observé en zone interurbaine. Il est responsable du smog photochimique et participe activement à l'effet de serre. Dans la troposphère, ce polluant secondaire est formé suite à de nombreuses réactions chimiques et photochimiques. C'est le polluant qui dépasse le plus souvent les normes notamment l'été par fort ensoleillement.

Le dioxyde de soufre est, quant à lui, principalement d'origine industrielle et est principalement responsable du phénomène des pluies acides.

Cependant, la recherche scientifique sur les particules a considérablement évolué depuis 10 ans. Ceci est en grande partie dû à l'effet nocif des particules sur la santé, notamment aux PM10 qui proviennent des véhicules Diesel. Une autre raison est, d'après Zmirou [51], la relative stagnation et parfois l'augmentation (après plus de deux décennies de baisse importante), des immissions mesurées en zone urbaine, dont la cause serait liée à une substitution partielle progressive des sources fixes par les sources mobiles, notamment en milieu urbain. C'est pourquoi, les réseaux de surveillance de la qualité de l'air en France devraient le plus rapidement inclure dans leur priorité la simulation numérique de la dispersion particulière.

Tableau 1 . Résultat du dépouillement des réponses au questionnaire

Nom du centre de surveillance	Simulation de la dispersion particulaire		
	oui	non	envisagé
AIRAQ		×	×
AIR BREIZH		×	×
AIRLOR		×	×
AirNormand		× (SO ₂ -NO _x uniquement)	
Air Pays de la Loire	×		
AIRPARIF	×		
AMPADI LR	×		
AMPASEL		×	
AREMA		×	×
AREMARTOIS		×	×
AREQUA		×	×
ARPAM		×	
ARQAL		×	
ARSQA		×	
ASCOPARG		×	
ASPA	×		
ASQAB		×	
ATMOSF'AIR		×	×
COPARLY		× (travaux en cours)	
ESPOL		×	
L'AIR DES 2 SAVOIE		×	×
LIG'AIR		×	
MADININAIR		×	
MONACO		×	
OPAL'AIR		×	
ORA Guyane			
QUALITAIR 06		×	×

2.2 Groupements de recherche

Il nous a semblé important, en amont des outils numériques, de présenter également une synthèse des activités de recherches concertées plus globales portant sur la modélisation et l'optimisation des résultats. Les groupements de recherche offrent d'importantes quantités d'informations, tant en matière de physique qu'en matière de validations numériques.

A une énumération longue et pénible des acronymes existants en matière de groupements ou de projets de recherche concertés, nous préférons la présentation, en quelques lignes, du sous-projet d'EUROTRAC, nommé SATURN.

SATURN est un rassemblement de compétences de chercheurs organisant une répartition de travaux spécifiques, au profit de l'amélioration de la compréhension des processus de pollution de l'air en zones urbaines. La distribution des tâches se divise en quatre branches d'activités :

- MOD : modélisation,
- VAL : validation,
- EXP : expérimentation,
- INT : intégration des différents résultats de travaux dans le projet commun.

Dans le groupe SATURN-MOD, (Ecole centrale de Nantes), deux sous-groupes de personnes travaillent sur le développement de modèles de type local et à l'échelle urbaine (MOD1 et MOD2). Dans le cadre de MOD2 six systèmes de modélisation ont été développés.

Un des points importants de cette étude est de préciser que la structure d'un modèle de dispersion de particules dans l'atmosphère est souvent un modèle *architecture* intégrant un certain nombre de sous-programmes traitant chacun une partie du problème. Un exemple type est le modèle SUBMESO dont nous détaillerons les sous-programmes dans la partie 3. La qualité d'un tel modèle réside dans sa capacité à évoluer vers une modélisation fine des processus mis en cause dans la dispersion de polluants particuliers.

3 Outils de modélisation atmosphérique

3.1 Inventaire des polluants particuliers en zone urbaine

Cette partie s'attachera à répertorier les différents types de particules que l'on peut rencontrer dans l'atmosphère. Dans nos villes, on recense essentiellement trois sources de production de pollution particulaire, les sources de production liées :

- au trafic automobile,
- au chauffage des habitations,
- aux activités industrielles.

D'autres sources de pollution peuvent être issues des transports sur de longues distances. Elles interviennent alors en tant que conditions aux limites et non en tant que sources dans les calculs.

Les informations relatives à la caractérisation des particules présentes dans l'air sont d'une importance capitale si l'on désire avoir une meilleure compréhension des mécanismes de dispersion de ce type de polluant. Des mesures sur site urbain, de la répartition granulométrique en aérosols ont ainsi été effectuées par exemple par Sokhi & al. [44]¹. Les analyses détaillées de ces auteurs concernent la taille, la forme, la densité moyenne ainsi que la composition chimique en éléments métalliques tels que Cd, Cu, Fe, Pb et Zn. D'après des analyses par microscope électronique, il existe une grande variété de caractéristiques physiques. Il semble que les caractéristiques physiques dépendent en général de la taille des particules considérées. La figure 1 visualise une particule de grande taille typiquement récoltée par les capteurs dans l'air urbain. Ces grosses particules seraient essentiellement formées par les éléments Na, Cl et Fe, éléments moins denses que Pb et Zn composant généralement les particules de petites tailles.

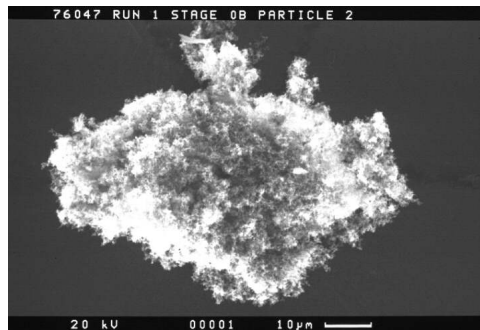


Figure 1 . Image d'une particule typique de grande taille présente dans l'air des cités (Sokhi & al. [44])

Sokhi & al. [44] confirment de plus une homogénéité de leurs résultats avec ceux d'autres chercheurs.

Par des mesures de caractérisation similaires effectuées en zones rurale et urbaine, Pakkanen & al. [35] montrent, en accord avec [44], que les particules de petites tailles se composent essentiellement d'oxyde de soufre. Le but de l'étude de Pakkanen & al. [35] est de retrouver la relation existant entre les émissions et les mesures par sondages, ainsi que les éventuelles interactions gaz/particules. En s'intéressant à une même plage granulométrique (PM_{2.5}), les auteurs tendent à prouver qu'une modification s'opère sur la composition et la morphologie de ces particules lorsqu'elles sont récoltées en zone urbaine et rurale. Ils observent une évaporation des particules de nitrate d'ammonium composant la classe PM_{2.5}. Cette évaporation correspond à environ 10% en masse pour cette taille de particules et peut ainsi créer une sous-estimation lors des sondages. Toujours pour ce même type de particules, leur composition semble être issue des gaz d'échappement du trafic automobile. Pour la classe de particules PM₁₅, les composants principaux se rapprochent plus des poussières liées au revêtement de la route.

Moon & al. [28] cité par Vignati & al. [48] donnent une estimation de la répartition granulométrique basée sur des mesures en laboratoire pour les gaz d'échappement

1. Document accessible par : <http://aix.meng.auth.gr/lhtee/saturn/annualrep98/Sokhi.html>

des moteurs diesels. Ils remarquent une modification de la répartition granulométrique selon le temps mis entre l'émission et la mesure. En fait, plusieurs processus physiques interviennent après l'éjection des gaz dans l'atmosphère :

- la dilution,
- la coagulation : phénomènes dus aux mouvements browniens des particules qui finissent par adhérer entre-elles et forment des particules de dimensions plus grandes. Le phénomène de coagulation fait également baisser la concentration en particules,
- la condensation et les interactions possibles avec des particules de plus grosses tailles.

Le processus le plus important vis-à-vis de la modification de la répartition granulométrique semble être la condensation, la dilution pouvant compenser la coagulation [48]. Une corrélation existe entre le taux d'humidité et la concentration en particules.

Perego & al. [36] mettent pour leur part en lumière l'importance de l'influence des particules dans l'équilibre radiatif des atmosphères polluées alors que la plupart des modèles n'intègrent pas ce paramètre. La figure 2 montre l'importance, au contraire, des particules dans l'équilibre radiatif des atmosphères polluées, et donc sur la dynamique fluide qui gère le transport et la dispersion des polluants.

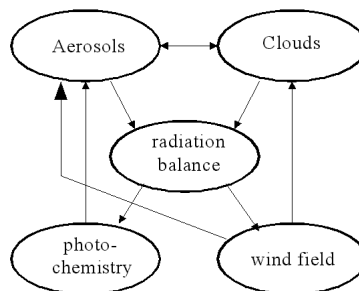


Figure 2 . Schéma simplifié de l'effet des particules sur l'équilibre radiatif (Perego & al. [36])

Cette étude montre de façon claire, l'importance d'inclure, à plus ou moins long terme les modifications chimiques et physiques des particules aux modèles de simulations numériques.

3.2 Principe de fonctionnement

Les critères que nous avons retenus pour le choix d'un outil de simulation numérique dans les réseaux de surveillance sont résumés par les quatre points suivants:

1. convivialité et simplicité d'installation :
 - prise en compte aisée de la météorologie et des émissions,
 - facilité d'exploitation des résultats (affichage et communication),

2. fiabilité de la modélisation,
3. temps de calcul raisonnable,
4. coût d'investissement acceptable.

La définition des critères de choix d'un logiciel de modélisation de dispersion de polluants dans l'atmosphère fait l'objet de divers travaux et a déjà été analysée notamment, par R. El Boustani & al. [7].

La recherche d'un modèle le plus apte à décrire la dispersion de polluants particuliers passe bien entendu par une meilleure connaissance du type de polluant transporté, ainsi que de ses possibles transformations au cours de son trajet dans le milieu dans lequel il transite : l'atmosphère urbaine. La présence de particules solides ou liquides dans l'air est mise en évidence par des phénomènes naturels tels les brouillards et les nuages.

La complexité des mouvements de ces polluants dans l'air, du fait de la nature turbulente des écoulements atmosphériques près du sol, rend la prédiction de leurs déplacements assez complexe et nécessite l'emploi de logiciels spécifiques. La maîtrise de l'action de ces outils fait appel à de nombreuses compétences et est dédiée aux spécialistes.

Ainsi, la prise en compte des conditions aux limites du domaine de calcul et **sur-tout la modélisation physique de la turbulence** joueront un rôle essentiel dans la précision des simulations.

Les paragraphes suivants récapitulent les différents constituants d'un outil de simulations numériques.

3.2.1 Les entrées

La modélisation du processus nécessite la connaissance de nombreuses données. Les facteurs qui interviennent dans la dispersion de polluants dans l'atmosphère sont divisés en trois grandes familles :

1. la météorologie,
2. la topographie du domaine,
3. le type de sources.

3.2.1.1 La météorologie Les paramètres météorologiques caractérisent l'écoulement atmosphérique et ainsi indirectement le transport et la diffusion des polluants. Ces paramètres sont les suivants :

– **Le vent**

Il est aisé de comprendre que la direction et la vitesse du vent porteur sont deux paramètres essentiels dans le processus de dispersion.

– **La stabilité de l'atmosphère**

L'atmosphère est dite stable lors de l'absence de courants verticaux dans certains cas visualisables par la formation de nuages cumuliformes. La cause de ces courants est liée à la valeur du gradient vertical de température dans la couche de

fluide. Lors d'une forte diminution de la température avec l'altitude (gradient thermique inférieur à -1 degré/100 m), le déplacement de particules fluides migrant de bas en haut et inversement est amplifié. En effet, si on suppose le déplacement d'une particule vers le haut, celle-ci se retrouve environnée d'air plus frais (donc plus dense) et a tendance à monter. Le raisonnement est analogue pour un déplacement vers le bas. On a donc un flux d'air chaud vers le haut et un flux d'air froid vers le bas qui se traduit par l'apparition de grandes structures convectives. Cette situation correspond à une atmosphère instable.

Ainsi, la stabilité de l'écoulement du fluide porteur est un paramètre modifiant le caractère turbulent de l'écoulement, la turbulence, nous le rappelons, intervenant pour beaucoup dans le processus de dispersion et de transport.

Certaines villes sont l'objet de phénomènes de pièges à polluant du fait de leur disposition et de la nature des masses d'air les surplombant couramment. Une masse d'air plus chaude que la canopée impose une barrière de dispersion du fait de son effet stabilisateur des courants verticaux (exemple : Los Angeles).

– **L'ensoleillement**

Selon l'intensité du rayonnement solaire reçu par les obstacles terrestres, des mouvements de convection pourront exister. Un exemple de phénomènes intimement liés aux effets de l'ensoleillement est la brise de mer ou de terre. Ainsi, la couverture nuageuse, la nature du revêtement des obstacles éclairés et leurs dispositions sont à prendre en compte lors d'une modélisation à petites échelles. La ville d'Athènes est un exemple bien connu de l'effet amplificateur des nuisances par les processus d'ensoleillement. Le flux et le reflux des brises marines ramènent les composés transformés au point de départ.

Un dénominateur commun à l'importance des paramètres de caractérisation du fluide porteur est l'intensité de la turbulence. Certains logiciels s'attachent à considérer la turbulence produite par les véhicules en circulation.

3.2.1.2 La topographie des lieux L'allure des surfaces en contact direct avec l'écoulement est un facteur important dans le transport de polluants. Certains logiciels peuvent prendre en compte la rugosité moyenne des sols. Cependant dans les villes, la meilleure méthode est de modéliser les obstacles tels qu'ils existent.

La couche limite atmosphérique représentative de la diminution de la vitesse du vent lorsqu'on se rapproche du niveau du sol est de nature radicalement différente selon la hauteur, la disposition et la forme de ces obstacles disposés sur le sol. En zone urbaine, pour une évaluation précise de la dispersion des polluants, il est nécessaire de considérer les obstacles dans le maillage du domaine de calcul [14].

3.2.1.3 Le type de sources polluantes Une première distinction est à faire parmi les différentes sources de polluants :

1. Les sources naturelles : émission par la végétation, les océans, les volcans
2. Les sources anthropiques comme par exemple : NO_x , SO_2 , $COV...$ Elles résultent de l'activité humaine.

En fait, il est quelquefois difficile de distinguer le type de source. D'après [30], seront considérées comme polluantes, les substances présentes en concentration suffisamment élevée pour modifier la qualité de l'air de façon appréciable ou dommageable à la santé.

En terme d'entrées dans un outil de simulations, la géométrie, l'emplacement et les conditions de rejets des sources ainsi que leurs mobilités sont autant de facteurs intervenant dans la modification du processus de dispersion.

3.2.2 Les sorties

Il s'agira ici principalement d'évaluer l'accessibilité aux résultats de calculs et la facilité de mise en forme. L'essentiel est de savoir si le logiciel est intégrable à une architecture conviviale de par son adaptabilité et la normalisation des entrées-sorties.

3.2.3 Modélisation physique

Le premier point caractérisant un modèle de dispersion de polluants est sa méthode de résolution. Ainsi, il existe deux grands types de modélisation.

Boustani & al. [7] proposent une classification suivant deux catégories :

- modèles statistiques,
- modèles déterministes.

Une dénomination plus large de ces deux familles de modèle est également couramment utilisée :

- modèles diagnostiques (NCFD : "No Computational Fluid Dynamics"),
- modèles déterministes (CFD).

1. Les modèles diagnostiques incluent des équations de diagnostic ou des équations empiriques pour résoudre la nature du comportement du vent et de toutes autres grandeurs physiques liées au processus. S'appuyant sur une vaste base de données, ces modèles permettent de calculer statistiquement la solution la plus plausible. Un tel modèle fonctionne très bien pour une situation déjà rencontrée et pour le même domaine d'investigation. Son application pour un autre cas pratique n'est pas possible, ou pour le moins incertaine.
2. Les modèles déterministes sont quant à eux basés sur la physique mis en jeu dans le processus. Plus adaptables, ces modèles sont d'autant plus gourmands en temps de calcul que la précision demandée est grande. Les calculs de concentration sont donnés en un point de l'espace et à un temps t .

Parmi les modèles déterministes, on distingue deux approches :

- Eulérienne,
- Lagrangienne.

Certains modèles héritent des deux modes d'écriture d'équations physiques².

Dans le cas des logiciels de calculs numériques du type CFD, la détermination du comportement de l'écoulement passe par la résolution d'équations de transport telles les équations de Navier-Stokes. La modélisation de la turbulence est alors nécessaire. Dans la majorité des applications une méthode statistique est employée. Ce point est le plus important concernant la qualité des résultats quant à la détermination du comportement du fluide.

C'est ainsi que selon le degré de complexité pris en compte, le modèle sera plus ou moins gourmand en temps de calcul. Il existe ainsi un certain compromis à trouver entre rapidité de calcul et précision.

3.3 Recensement des outils existants

3.3.1 Le type d'outil idéal, les critères de choix et des exemples

Après cette première séparation en deux grandes familles des modèles numériques de simulation de la dispersion de polluants dans l'air, l'indication très importante qui entre en ligne de compte est la taille du domaine de calcul.

Selon la taille du domaine considéré, certains logiciels ne nous concernent pas. Ensuite pour les autres, les détails du domaine peuvent être négligés ou modélisés plus ou moins finement. Ainsi la topographie d'un quartier pourra être modélisée par une rugosité équivalente dans un cas et par une réelle prise en compte des dimensions des immeubles dans l'autre. De ce fait certains facteurs influençant les mécanismes de dispersion ne seront pas négligés. Par exemple, à l'échelle d'une rue ou d'un quartier, les flux d'air verticaux liés aux ensoleillements seront mieux pris en compte, ce qui conduira à une meilleure précision des résultats. Alors que dans le cas d'une simulation sur l'agglomération complète, la condition limite au sol est une rugosité moyenne. Les flux d'air verticaux liés à l'ensoleillement seront pris en compte par un facteur déterminé lors du calage du modèle sur des résultats expérimentaux. Pour modéliser au mieux le comportement de l'écoulement porteur il est nécessaire de réduire au maximum le nombre de paramètres de calage difficilement quantifiables.

Les tailles de domaines peuvent se classer en plusieurs catégories :

- **"street canyon"** : intègre les modélisations de tout obstacle ou du moins l'assimile comme tel. La taille du domaine est celui d'une rue. Par exemple, le modèle CHENSI (Sini & al. [40]) est un modèle CFD pouvant simuler l'écoulement dans une rue en prenant en compte les turbulences générées par le passage des véhicules.

2. Les modèles de Puff-particules.

- "**urban scale**" : ces modèles ont des tailles de domaine de l'ordre d'un quartier d'une grande ville soit de l'ordre de 10 km×10 km. Les obstacles sont toujours pris en compte soit par analogie à une rugosité équivalente soit en adaptant le maillage du domaine sur leurs formes en incluant des approximations. Un exemple est le modèle SUBMESO développé par Guilloteau & al. [17].
- "**mesoscale**" : le domaine peut s'étendre sur une superficie englobant une partie d'un pays tout entier. Les modèles MEMO, MESO-NH en font partie. Nous ne nous intéresserons pas à ce type de modèle. Il est évident de comprendre d'après ce qui vient d'être dit que ce qui se passe à l'intérieur d'une ville peut difficilement être comparable à ce qui se passe en zone rurale du fait de la complexité du relief et des phénomènes supplémentaires qui apparaissent tels les processus de convection naturelle par réchauffement des parois d'un immeuble, du taux de turbulence modifié, des mouvements divers des véhicules, de l'augmentation des temps de résidence...

Un modèle capable de résoudre les problèmes de dispersion de particules en zone rurale est difficilement transposable à des zones urbaines. L'inverse peut se produire plus simplement ce qui est le cas avec le modèle SUBMESO.

Le fait de ne s'intéresser qu'aux modèles sur une échelle inférieure ou égale au type "urban scale" permet déjà l'élimination d'une partie importante de modèles existants, ceux-ci n'entrant pas dans les propos de ce rapport. De plus, nous nous intéresserons plus en détails aux modèles de type déterministes.

La prise en compte des processus typiquement rencontrés dans la déposition et le transport des particules et leurs interactions avec le domaine environnant (chimie, micro-physique) fera l'objet d'une attention particulière et est ébauché dans ce qui suit.

Vignati & al. [48] étudient le phénomène de transformation de la distribution en taille des particules émises dans la canopée urbaine par les moteurs diesels. En effet, divers processus peuvent modifier cette répartition comme par exemple la condensation de la vapeur d'eau contenue dans l'air. Cependant ce phénomène dépend fortement de la nature hygroscopique des particules émises. Il s'avère en outre que les particules mesurées dans l'air sont souvent des particules émises de longue date. Ceci tend à expliquer la tendance des modèles à minimiser significativement la concentration en particules. **Le temps de résidence des particules dans l'air de la canopée devient donc un paramètre important.** Sa nature dépend fortement de la configuration des lieux et des conditions météorologiques.

D'autres phénomènes tels les réactions chimiques avec des particules gazeuses (NO_2 , O_3 ...) sont à l'étude actuellement.

La modélisation de la dispersion de particules repose sur la résolution dynamique des conditions météorologiques. Pour de nombreux outils numériques, cette résolution de la dynamique du champ de vent est réalisée par un logiciel différent. La géométrie des lieux est insuffisante pour connaître réellement l'écoulement au sein de la canopée. En effet, le rayonnement solaire, les sources de chaleurs liées aux sorties de cheminées ainsi que le mouvement de véhicules provoquent de vifs changements à prendre en compte pour une modélisation précise. Ci-dessous une liste non exhaustive de différents modèles d'estimation des conditions d'écoulement en zone urbaine :

- ENVI-met Avec une résolution pouvant atteindre 50 cm, ce modèle permet de prédire le champ de vitesse, de température, d'humidité et la turbulence engendrée en trois dimensions avec un pas de temps de 10 s.
- GOSOL est un modèle qui ne s'intéresse qu'à la modification de l'écoulement du fait de l'existence des radiations solaires
- METDIA

Voici une liste non exhaustive de différents modèles de dispersion de polluants particuliers en zone urbaine :

- LASAT est un modèle de simulation Lagrangienne de transport d'aérosol.
- LPDM est un modèle utilisant le même schéma que LASAT c'est à dire Lagrangien. Ce modèle considère les polluants inertes et néglige les effets de la gravitation et considère une vitesse de déposition constante.

De nombreux modèles intègrent les particules en affichant la dispersion particulaire comme faisant partie de la phase fluide (traité numériquement comme un fluide). Ce type de modélisation, bien que moins contraignante par rapport à celle considérant deux phases distinctes lorsque cela est nécessaire, est limité aux plus petites particules se déplaçant en suspension pure.

3.3.2 Les modèles retenus

Sur la base des critères de choix énoncés au § 3.2 à la page 7, les modèles retenus susceptibles de répondre à la problématique de la modélisation de la dispersion de particules et classés par ordre d'intérêt sont les suivants :

- Drag&Fly Air
- ARIA Regional
- ARIA Local
- SUBMESO
- UAM V
- OPANA
- LADM
- FLEXPART
- FLUIDYN PANACHE
- CALPUFF
- ISCST3
- AEROPOL
- ADMS-URBAN

3.4 Evaluations des modèles retenus

Afin d'expliciter le classement effectué ci-dessus, chacun des modèles retenus est décrit en détail. Tout d'abord, le modèle est présenté par une description comprenant le type de polluants et de sources modélisés ainsi que les différents domaines d'application. Puis, le type de modélisation employée, l'échelle d'application, les échelles spatiale et temporelle ainsi que la méthode numérique sont données. Ensuite, les différentes modélisations intégrées, les paramètres d'entrée et les résultats fournis par le modèle sont précisés. Enfin, une partie consacrée à la validation du modèle et à ses limites est réalisée. Des renseignements pratiques sont également fournis. Le modèle Drag&Fly Air est décrit de manière beaucoup plus exhaustive que les autres modèles de façon à comprendre l'importance de chacune des modélisations.

L'ensemble des descriptions de chaque modèle retenu constitue un guide pour le lecteur. Cependant, les modèles de dispersion connaissent un développement incessant. De plus, ces modèles doivent répondre à des problèmes de plus en plus complexes. C'est pourquoi, il est très aléatoire de faire un choix définitif parmi ce nombre important de codes mis à la disposition des utilisateurs. Ce choix doit se porter sur le modèle qui estimera, par rapport à la complexité météorologique et topographique de la zone concernée et au niveau de précision demandé par l'analyse, les concentrations de polluants le plus précisément possible. Il dépend bien entendu aussi des compétences techniques des personnes désirant entreprendre la simulation ainsi que des renseignements disponibles, des détails et de la précision des bases de données (inventaire d'émissions, données météorologiques et sur la qualité de l'air). Les paragraphes suivants réunissent les principales informations descriptives concernant les modèles retenus.

3.4.1 Le modèle Drag&Fly Air

3.4.1.1 Présentation générale Le modèle Drag&Fly Air est un logiciel de simulation qui permet de répondre à des études d'impact d'émissions de polluants dans l'air et de nuisances acoustiques, liées aux problèmes de trafic.

La création de ce logiciel, issu du modèle SUBMESO, a été motivée par les problèmes de circulation et de congestion du trafic urbain.

Le code effectue une simulation incluant le taux d'émission des véhicules et les conditions atmosphériques (vents, inversion de température). Il permet de coupler la modélisation microscopique du trafic avec la dispersion des polluants dans l'atmosphère et les nuisances sonores de façon à obtenir une simulation en temps réel des différentes nuisances urbaines.

Les domaines d'application du logiciel touchent aussi bien la pollution de l'air, l'acoustique urbaine que l'aménagement urbain et d'infrastructures. L'objectif, en effet, est de mettre à la disposition des collectivités un outil efficace pour mieux comprendre et maîtriser les impacts environnementaux dus, entre autre, au trafic urbain.

Les sources prises en compte sont ponctuelles, linéaires, surfaciques et volumiques, les polluants gazeux et particuliers, légers et lourds.

L'équation de transport d'un polluant dans l'atmosphère est construite en considérant sa conservation dans un élément de fluide. En admettant que les écoulements atmosphériques sont incompressibles et en négligeant la diffusivité moléculaire devant la diffusivité turbulente, l'équation moyenne de transport-diffusion d'une espèce dans l'atmosphère s'écrit en moyenne de Reynolds :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{u'_i c'}}{\partial x_i} + S \quad (1)$$

C est la concentration moyenne de polluant, U_j la vitesse moyenne de l'écoulement, $\overline{u'_i c'}$ est le flux turbulent de polluant dans la direction x_i et S est le terme source/puits de polluant.

L'équation (1) régit la dispersion de polluant dans l'air en incluant le terme source/puits qui permet de prendre en compte les aspects physico-chimiques.

Le terme S est la résultante de plusieurs phénomènes physiques et s'écrit :

$$S = S_{Part.} + S_{DptSec} + S_{DptHumide} + S_{Chimie} + S_{Emission} \quad (2)$$

$S_{Part.}$ est le terme source/puits de flux par saltation, S_{DptSec} est le terme source/puits issu du sol (dépôt sec et remise en suspension dans l'air), $S_{DptHumide}$ est le terme source/puits issu du lessivage par l'eau de pluie et de l'évaporation des gouttes d'eau dans l'air, S_{Chimie} est le terme source/puits dû aux transformations chimiques et $S_{Emission}$ est un terme advectif qui exprime l'entraînement à l'émission : entraînement dû au soufflage de polluant à la sortie de la cheminée et à la différence de température entre la fumée et l'air.

Pour prédire le champ d'écoulement du vent, les équations de Navier-Stokes, de conservation de la masse et de l'énergie sont nécessaires. Une équation pour la pression (incompressible aux échelles micro et urbaine, anélastique aux échelles urbaine et méso), une équation de transport pour la thermique et 6 équations de transport pour la microphysique (vapeur d'eau, gouttelettes d'eau dans les nuages, neige et grêle) sont aussi résolues par le code Drag&Fly Air.

L'équation relative au polluant couplée à celles relatives à l'écoulement permettent de déterminer la concentration de polluants dans l'air.

En résumé, ce code permet la description du phénomène de transport-diffusion avec flottabilité, de la dynamique, de la thermique et de la micro-physique ainsi que du transport-diffusion des polluants pesants ou non de l'atmosphère à l'aide de différentes modélisations décrites ci-après.

3.4.1.2 Type de modélisation eulérienne

L'approche eulérienne a été choisie pour sa facilité de mise en œuvre et la fiabilité des modèles turbulents existants.

3.4.1.3 Echelles d'application méso, urbaine et micro (échelle d'une rue)

Les dimensions du champ urbain prises en compte vont de la ville au quartier (100 km à 1 km) , ou du quartier à la rue (10 km à 10 m) ou de la rue (100 m à 1 m).

3.4.1.4 Résolution spatiale et temporelle Le rapport de la taille du domaine sur la plus petite maille peut atteindre mille. L'échelle temporelle, quant à elle, dépend de la taille de maille minimum, du nombre de mailles, du champ de vent (vitesse) et surtout du nombre de machines utilisées (calcul parallèle).

3.4.1.5 Méthode numérique La méthode numérique d'intégration temporelle est explicite et permet la résolution des instationnarités éventuelles de l'écoulement. La méthode de discrétisation est aux différences finies. Le maillage est cartésien avec raffinement (les mailles sont découpées plus on s'approche des obstacles et du sol). Le maillage n'est pas limité en nombre de mailles, la seule limite étant une limite machine. Le million de noeuds peut être atteint.

3.4.1.6 Modélisations de la chimie locale ou la photochimie à très grande échelle urbaine (méso) Le solveur est basé sur la méthode de Gong et Cho (1993). Gong et Cho (1993) proposent de séparer les substances en substances à réactivité lente et rapide. Seules les espèces rapides sont intégrées implicitement avec un schéma d'intégration de Newton-Raphson, les lentes sont intégrées explicitement. Le temps de réaction dépend des espèces considérées. Du point de vue numérique, si on utilise une méthode simple (un seul pas de temps répété autant de fois qu'il faut), le pas de temps est le pas de temps de la réaction la plus rapide (le plus petit pas de temps). Cette méthode est donc très coûteuse. La méthode de Gong et Cho fait un classement simple des réactions pour les intégrer sur un pas de temps qui permet de faire moins de calcul et d'être donc plus rapide.

3.4.1.7 Modélisation de la micro-physique La micro-physique est simulée suivant deux paramétrisations :

- La paramétrisation dite de la pluie de type Kessler (paramétrisation intervenant sur la température, la vapeur d'eau, les gouttelettes d'eau dans les nuages et l'eau de pluie).
- La paramétrisation dite de la glace de Tao et Simpson (pour la vapeur d'eau, l'eau de pluie, la glace, la neige et la grêle).

Beaucoup d'études ont montré que, durant les événements pluvieux, le lavage par les hydrométéores des polluants réactifs ou solubles peut être de l'ordre d'une dizaine de pourcents par heure (Slinn et al. [43]). Les polluants gazeux sont lessivés par dissolution dans les gouttelettes d'eau ou plus largement dans les hydrométéores. Les polluants particuliers sont lessivés par deux procédés différents le rainout (lavage à l'intérieur des nuages) et le washout (lavage en dessous des nuages).

La plupart des paramétrisations du washout s'appuient sur le taux de lavage des particules par la goutte, qui représente la quantité de polluant éliminée par la pluie par unité de temps. Ce taux de lavage dépend des caractéristiques de polluants (solubilité et réactivité) aussi bien que de la nature des précipitations. Dans le cas des particules, le taux de lavage est fonction du taux de précipitation et de l'efficacité de collision, qui représente le rapport particules absorbées sur particules rencontrées par une goutte.

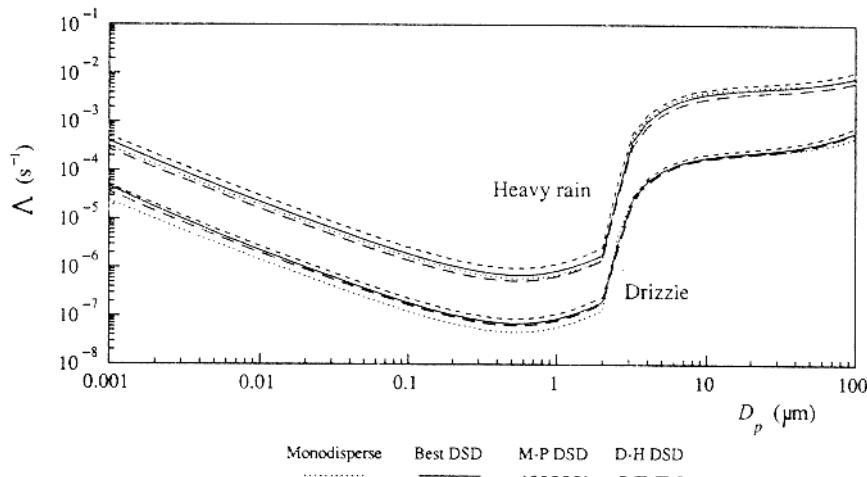


Figure 3 . Taux de lavage en fonction du diamètre des particules pour différents densités numériques de pluie (Garcia et al. [33])

Garcia et al. [33], voir figure 3, ont tracé la variation du taux de lavage en fonction du diamètre des particules pour différentes densités numériques de pluie. La courbe est partagée en trois régions :

- une pour laquelle le diamètre des particules est inférieur à $2 \mu m$ qui correspond au mécanisme d'interception. C'est pour cette région que le taux de lavage est le plus faible, notamment pour les particules de diamètre compris entre 0.1 et $2 \mu m$.
- une deuxième pour laquelle le diamètre des particules est compris entre 2 et $5 \mu m$ qui correspond au mécanisme de diffusion.
- une dernière pour laquelle le diamètre des particules est supérieur à $5 \mu m$ qui correspond au mécanisme d'impact inertiel

D'après le diagramme de Whitby représenté sur la figure 4, il existe deux types de particules : les particules fines et les particules grosses. L'origine, les mécanismes de formation et la composition chimique de ces deux types d'aérosol sont différents.

Le mécanisme de transfert principal pour les particules fines (de diamètre compris entre $0,1$ et $2 \mu m$) est le lavage par la pluie, pour les grosses particules (de diamètre supérieur à $2 \mu m$) c'est le phénomène de sédimentation. Les particules ultrafines (de diamètre inférieur à $0,1 \mu m$) coagulent et forment des particules plus grosses.

Les concentrations de grosses particules dans l'atmosphère varient fortement dans l'espace et dans le temps, de plus, ces particules sont soit d'origine anthropique, soit biogénique.

Les aérosols de taille comprise entre $0,1$ et $2 \mu m$, à cause des faibles flux de transferts (faibles taux de lavage et vitesse de déposition § 3.4.1.9 à la page 20), restent plus longtemps dans l'atmosphère que ceux de taille plus ou moins grande. Les fines particules sont principalement d'origine secondaire (formées dans l'atmosphère à partir des gaz) et leur variation spatio-temporelle de concentration devient sensible à une échelle régionale.

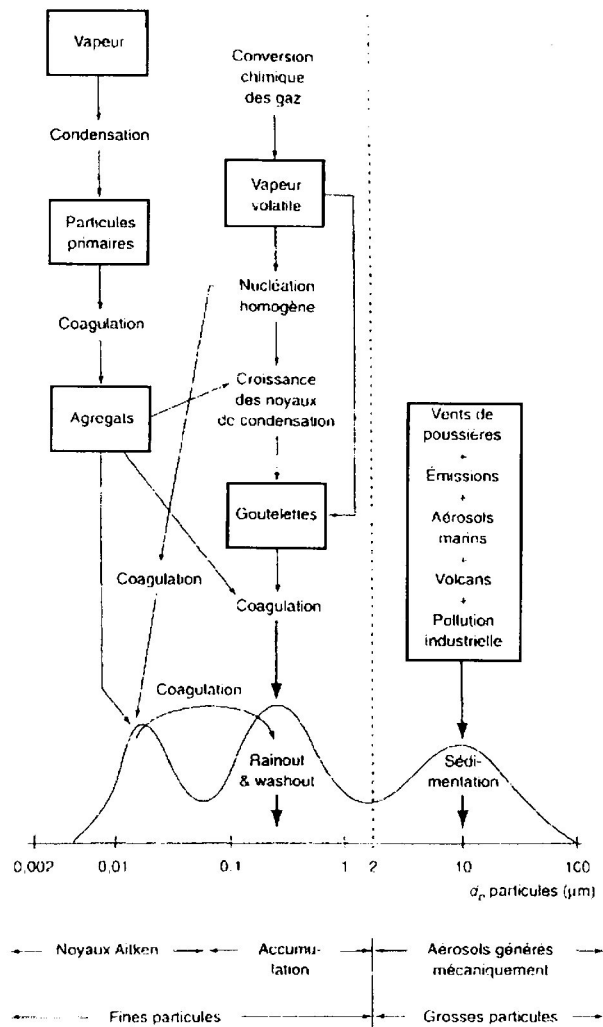


Figure 4. Les trois modes de l'aérosol atmosphérique-Diagramme de Whitby [24]

Une exception importante concerne, pourtant, les zones urbaines industrialisées où les fines particules, d'origine anthropogénique, peuvent se trouver en fortes concentrations. En effet, Laval [24] remarque que les contributions de l'industrie et des transports routiers, principalement des véhicules Diesel sont très importantes. En milieu urbain, la contribution des véhicules automobiles à la concentration ambiante en particules fines est estimée entre 50 et 80 %. Des suies automobiles sont représentées sur la figure 5.

3.4.1.8 Modélisation du flux par saltation Dans l'atmosphère, le déplacement d'un lit de particules posées sur le sol est de trois types :

- *la reptation* : les particules trop lourdes pour être soulevées par le vent roulent ou glissent sur la surface. Le lit de particules est nommé surface rampante. Le déplacement de ces particules est créé par l'impact de particules moins grosses retombant sur la surface.

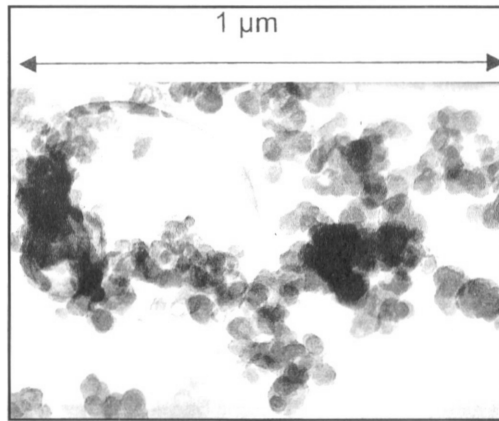


Figure 5 . Suies automobiles à grossissement 72000

- *la saltation* : les particules de diamètre moyen se déplacent par petits bonds successifs et retombent sous l'effet de leur poids (trajectoire typique balistique).
- *la suspension* : les particules légères de petit diamètre restent suspendues dans le fluide porteur car la turbulence est suffisante pour les soutenir et se déplacent souvent sur de longues distances.

Des modes couplés peuvent exister, ainsi les particules peuvent éventuellement être déplacées par *saltation modifiée* [46], qui est un intermédiaire entre saltation et suspension pures.

Le critère séparant les deux comportements de saltation et suspension est issu des observations de Owen et Bagnold cité dans Foucault [13]. Ces observations ont été analysées en fonction du paramètre A_f dont la formulation est la suivante :

$$A_f = \frac{u^*}{\sqrt{\gamma_p D_p}} \quad (3)$$

$$\text{avec } \gamma_p = \frac{g(\rho_p - \rho)}{\rho} \quad (4)$$

$$\text{où } \tau = \rho u^{*2} = \mu \frac{\partial U}{\partial z} \quad (5)$$

La relation (5) est uniquement valable dans la sous-couche laminaire.

D'après les observations de Owen et Nalpanis cités dans Foucault [13], le comportement des particules est la suspension si :

$$A_f \geq 1 \quad (6)$$

Une hypothèse d'équilibre entre la traînée par une fluctuation turbulente $\sqrt{w'^2}$ et le poids donne le critère de Bagnold (figure 6) :

$$A_f^2 \geq \frac{1}{18} \frac{D_p u^*}{\nu} \quad (7)$$

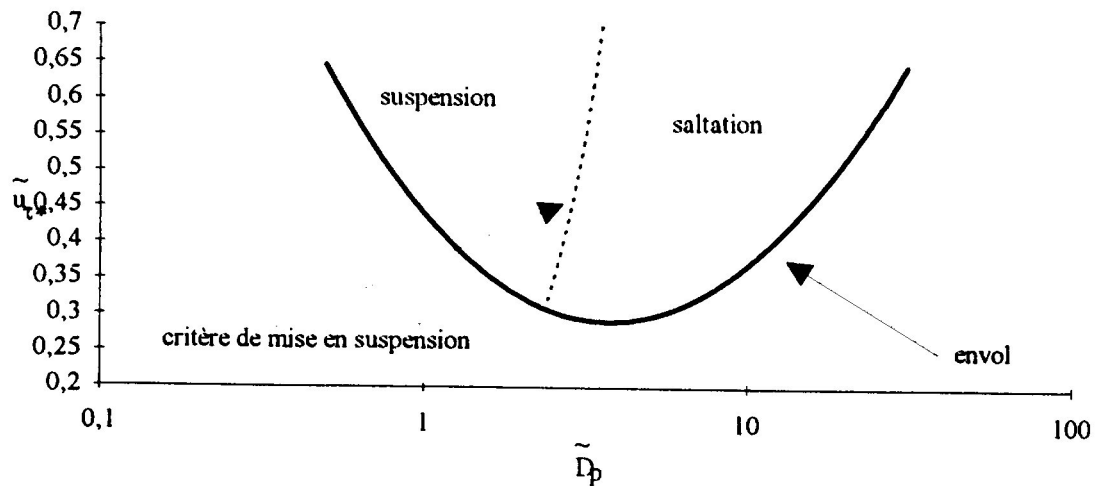


Figure 6 . Critère d'envol et de mise en suspension en représentation normalisée [13]

Le terme source/puits $S_{Part.}$ de flux par saltation est égal à :

$$S_{Part.} = -\frac{\partial F_i}{\partial x_i} \quad (8)$$

$$\text{avec } F_i = -(V_i - U_i)C \quad (9)$$

La vitesse de saltation-traînée (traînée dans les directions horizontales et saltation dans la direction verticale) est définie par :

$$V_{si} = V_i - U_i \quad (10)$$

Pour l'atmosphère, les vitesses horizontales des particules et du fluide sont supposées égales. Dans la direction verticale, si on pose l'équilibre entre le poids et la traînée, on a :

$$V_{si} = -\sqrt{\frac{4}{3}g \frac{\rho_p - \rho}{\rho} \frac{D_p}{C_D} n_i} \quad (11)$$

$$\text{où } n_i = \frac{-g_i}{(g_k)} \quad (12)$$

$$\text{et avec } C_D = \frac{24}{Re} \text{ pour } Re < 10 \quad (13)$$

$$C_D = 0.44 \text{ pour } 100 < Re \quad (14)$$

$$C_D = 0.44 \frac{Re - 10}{90} + \frac{24(100 - Re)}{90Re} \text{ pour } 10 < Re < 100 \quad (15)$$

3.4.1.9 Modélisation du flux au sol de dépôt sec Le modèle de dépôt au sol des particules est basé sur les travaux de Giorgi et Chameides (1985) et Wesely [49].

De nombreux procédés sont impliqués dans le transfert et le dépôt de polluants à la surface de la terre. D'après Sehmel (1980) cité dans Scire et al. [39], le flux de dépôt sec dépend de plusieurs facteurs notamment les propriétés des polluants déposés (la densité, la forme et la taille (figure 7) pour les particules ; la réactivité, la solubilité et la diffusivité pour les gaz), les caractéristiques du sol (rugosité, végétation, état physiologique) ainsi que des variables atmosphériques (intensité de la turbulence et stabilité).

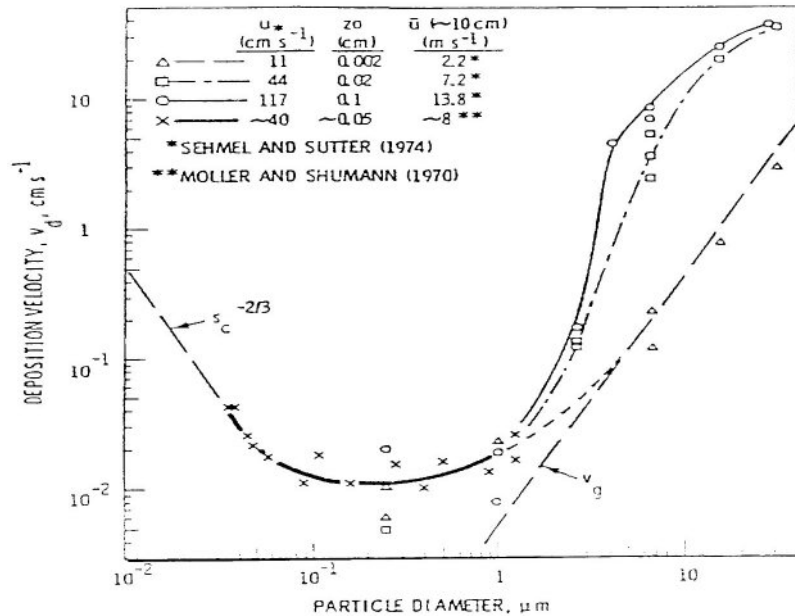


Figure 7. Variation de la vitesse de dépôt en fonction de la taille d'une particule de densité $1,5 \text{ g/cm}^3$ [43]

Hicks (1982), cité dans Scire et al. [39], remarqua les grandes différences entre les processus contrôlant la dépôt des grandes particules (sédimentation, impact inertiel) et ceux contrôlant la dépôt des gaz (turbulence, diffusion moléculaire). La dépôt des petites particules peut, quant à elle, être influencée à la fois par les procédés affectant la dépôt des gaz et ceux affectant les grandes particules.

La grandeur permettant d'exprimer les dépôts secs est la vitesse de dépôt. En effet, le flux au sol de dépôt sec, qui a quasiment la même forme que le flux par saltation, s'écrit :

$$S_{DptSec} = - \frac{\partial F_{Di}}{\partial x_i} \quad (16)$$

$$avec \quad F_{Di} = -V_D(C - C_{sol}) \quad (17)$$

Ce flux de dépôt sec permet de calculer le dépôt massique de polluant au sol.

La vitesse de dépôt est obtenue en effectuant une analogie entre les processus de dépôt sec et les phénomènes électriques en introduisant des résistances.

Le modèle de dépôt sec est basé sur une expression qui définit la vitesse de dépôt comme étant l'inverse d'une somme de résistances plus, dans le cas des

particules, d'un terme de sédimentation. Les résistances représentent l'opposition au transfert de polluants depuis l'atmosphère jusqu'au sol.

Slinn et al. [43] (figure 8) décrivent un modèle de résistance à multi-couches pour les dépôts secs. Pour estimer la valeur des dépôts secs, ils divisent l'atmosphère en quatre couches :

LAYER	RESISTANCE	TYPICAL DEPTH (M)	HEIGHT (M)
(A) Layer Aloft	C_u	*1	10^4
(B) Atmospheric Boundary Layer (Mixed-Layer)	C_m	*2	10^2-10^3
(C) Surface-Layer (Constant-Flux Layer)	r_a	10^1-10^2	z_d
(D) Deposition Layer (Quasi-Laminar Layer)	r_d	v/u^*	0
(E) Vegetation Layer	r_c		

Labels on the left side of the table indicating layer boundaries and resistances: C_s (between B and C), C_d (between C and D), C_o (between D and E), and C_m (at the bottom).

*1 Material in the top layer is not available for deposition at the surface until entrained into the mixed-layer.

*2 Overall mixed-layer resistance included in Equation (2-236).

Figure 8 . Modèle de résistance à multi-couches pour les dépôts secs [43]

- La couche la plus haute située au dessus de la couche d'inversion. Elle contient les polluants directement injectés à partir des cheminées de haute taille ou les polluants dispersés en hauteur lors d'activités turbulentes. A cause du bas taux de mélange turbulent dans cette couche, les polluants ne sont pas soumis à la déposition sèche tant qu'ils ne sont pas entrainés dans la couche d'inversion.
- La couche d'inversion dont la limite supérieure définit l'épaisseur de la couche limite turbulente. Le mélange des polluants se fait essentiellement par des procédés turbulents. Lors de conditions convectives, les polluants se répartissent rapidement de manière uniforme sur la verticale. La résistance au transfert de polluants, dans ces conditions, est très petite comparée à celle des couches suivantes. Cependant, lors de conditions stables, la résistance de la couche limite peut prendre de l'importance (Wesely et Hicks [50]). Alors, la prise en compte

de la résistance de la couche d'inversion est basé sur la diffusivité de la couche limite.

- La couche de surface est une couche peu épaisse (10 m environ) proche du sol qui change rapidement selon les conditions de surface. Cette couche est aussi appelée couche à flux constant parce que les flux verticaux à l'intérieur de cette couche sont presque constants. La résistance atmosphérique est utilisée pour paramétrer le taux de transfert de polluants à l'intérieur de cette couche.
- La couche de déposition. Au dessus de surfaces très lisses, une fine couche non turbulente se développe. Pour des surfaces rugueuses, cette couche change constamment et est turbulente par intermittence. C'est pourquoi, elle est aussi appelée couche quasi-laminaire. Les mécanismes de transfert à travers la couche de déposition laminaire sont la diffusion moléculaire pour les gaz et la diffusion brownienne et l'impact inertiel pour les particules. Cependant, les éléments de rugosité de surface peuvent parfois pénétrer la couche de déposition, fournissant une autre alternative pour le transfert de polluant. Sous des conditions atmosphériques de basse résistance, la résistance de la couche de déposition devient dominante dans la détermination du taux de déposition des particules et de quelques gaz de forte masse moléculaire.
- La couche de végétation. La végétation est un absorbant de grande importance pour de nombreux polluants gazeux ou réactifs. La résistance dans cette couche varie sensiblement en fonction de la période de la journée et de la saison. Il est convenable d'introduire dans cette résistance la résistance de surface air-eau ; en effet, c'est une résistance qui se trouve en dessous de la couche de déposition laminaire. Cependant, même si elles sont captées par la végétation, pour les particules, cette résistance est supposée nulle car les particules ne sont pas consommées par la végétation.

Finalement, la vitesse de déposition est déterminée d'après Seinfeld (1986), cité dans Abart [2], par l'expression :

$$V_D = (R_a + R_b - R_a R_b V_{s3} + R_c)^{-1} \quad (18)$$

La résistance aérodynamique R_a caractérise la résistance du transfert du moment dans l'atmosphère (vers le sol ou l'atmosphère) et est donnée par la relation :

$$R_a = \frac{1}{\kappa u^*} \left[\ln \frac{z}{z_0} + \beta_m \zeta_{MO} \right] \quad (19)$$

$$\text{avec } \beta_m \approx 5 \quad (20)$$

$$\zeta_{MO} = \frac{z}{L_{MO}} \quad (21)$$

$$L_{MO} = \frac{g \theta^*}{\kappa \Theta_r u^{*2}} \quad (22)$$

$$\theta^* = - \frac{\overline{w' \theta'}}{u^*} \quad (23)$$

ζ_{MO} et L_{MO} permettent de tenir compte des effets de la flottabilité sur la diffusivité turbulente des polluants (influence de la stabilité). La longueur de rugosité est déterminée selon le type de sol. Au dessus de l'eau, à cause de l'effet du vent sur la hauteur des vagues, la longueur de rugosité dépend de la vitesse du vent.

La résistance laminaire R_b est définie par l'expression :

$$R_b = \frac{2}{\kappa u^*} \left(\frac{Sc}{Pr} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (24)$$

Il existe trois mécanismes principaux de transport des particules à travers la couche de déposition :

- Les petites particules (de diamètre inférieur à $0,1 \mu m$) sont principalement transportées par diffusion brownienne. Ce procédé devient moins efficace lorsque la taille des particules augmente.
- Les particules de diamètre compris entre 2 et $20 \mu m$ ont tendance à pénétrer dans la couche de déposition par impact inertiel. Le temps de relaxation, défini comme étant le rapport de la vitesse de sédimentation sur l'accélération de la gravité, permet de quantifier cette tendance. L'impact inertiel est le plus efficace pour des particules de diamètre compris entre 2 et $20 \mu m$. Les particules plus grandes sont dominées par les effets de la sédimentation. Le terme dans l'équation (18) contenant la vitesse de sédimentation contribue toujours à l'augmentation de la valeur de la vitesse de déposition.
- Les particules dont le diamètre est compris entre $0,1$ et $2 \mu m$ ont de très petites vitesses de sédimentation et ne sont pas transportées efficacement à travers la couche de déposition que ce soit par diffusion brownienne ou par sédimentation. Par conséquent, ces particules ont les valeurs les plus petites de vitesse de déposition (voir figure 7).

Les vitesses de déposition et de sédimentation sont fortement dépendantes des tailles des particules. Or, les tailles des particules peuvent s'étendre sur un large spectre (aérosol polydisperse) et il n'est donc pas correct de modéliser le problème des particules par un seul diamètre moyen. Différents types de distributions granulométriques peuvent être utilisés.

3.4.1.10 Modélisation du réenvol de particules Le modèle de réenvol est développé sur la base des travaux de Foucault [13] et ceux de Laslandes [23].

La formulation de la vitesse limite d'envol des particules proposée par Foucault est :

$$\widetilde{u_{\tau^*}} = \frac{u_{\tau^*}}{u_{\tau ref}} = 22.71 \widetilde{D_p}^{0.043} + 10.23 \widetilde{D_p}^{-0.118} - 32.5 \quad (25)$$

$$\text{où } u_{ref} = (\gamma_p \nu)^{\frac{1}{3}} \quad (26)$$

$$D_{pref} = \nu^{\frac{2}{3}} \gamma_p^{-\frac{1}{3}} \quad (27)$$

$$\widetilde{D_p} = \frac{D_p}{D_{pref}} \quad (28)$$

La courbe limite (figure 6) définie par cette équation est de type parabolique et montre que les particules de grosses tailles (trop lourdes) et les particules fines (trop

fines pour avoir une portance suffisante) ne s'envolent pas. La vitesse caractéristique prise en compte est celle de la partie de l'écoulement en contact avec les particules, c'est la vitesse de frottement. Les particules s'envolent à une certaine altitude et retombent. En saltation pure, ces particules atteignent une certaine vitesse et retombent. On l'explique de la manière suivante.

L'envol d'une particule est déclenché par le gradient de vitesse de l'écoulement près de la paroi. En effet, en écoulement de couche limite turbulente, le profil de vitesse est très cisailé près de la paroi. La répartition de vitesse dissymétrique engendre une force verticale sur la particule, qui est assimilée à une portance. La traînée de la particule, faible devant la portance, est générée par la condition d'adhérence à la paroi.

La particule s'envole lorsque le taux de cisaillement produit une force de portance capable de la soulever. Une traînée apparaît alors et ralentit, à l'aide de la pesanteur, son envol et son avancée. Puis, la portance devient petite devant les forces de traînée et de pesanteur et la particule retombe jusqu'à la paroi tout en avançant.

Ceci est pris en compte dans le calcul du débit solide (voir [2]) qui permet de s'assurer de l'envol correct des particules.

3.4.1.11 Modélisation de la turbulence Les différents types de modélisation qu'il est possible de choisir dans Drag&Fly Air sont :

- La méthode de simulation des grandes échelles à 0 ou 1 équation.
- La méthode statistique à 1, 2 ou 3 équations avec prise en compte des couplages entre la dynamique, la thermique et la vapeur d'eau.

La méthode statisque et le modèle de turbulence k- ϵ standard sont utilisés pour les applications classiques. Cependant, le modèle k- ϵ - $\overline{\theta'^2}$, explicité dans la thèse de Bruno Abart [1] et cité dans [2] prend mieux en compte les couplages dynamique-thermique.

Plusieurs modèles de turbulence peuvent donc être utilisés pour la fermeture du flux turbulent $\overline{u'_i c'}$. Le modèle linéaire en accord avec le gradient de l'espèce considérée est suffisant pour la plupart des applications et s'écrit :

$$\overline{u'_i c'} = - \frac{\nu_T}{Sc_t} \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad (29)$$

Pour les applications où la thermique est très importante (stratification très stable ou instable), le modèle non linéaire k- ϵ - $\overline{\theta'^2}$ doit être utilisé. Le flux $\overline{u'_i c'}$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \overline{u'_i c'} &= C_{\kappa\theta 1(T)} \tau k \frac{\partial C}{\partial x_i} + C_{\kappa\theta 1(B)} \tau \overline{\theta' c'} \beta_i \\ &\quad + \tau^2 k (C_{\kappa\theta 2(ST)} S_{ik} + C_{\kappa\theta 2(\Omega T)} \Omega_{ik}) \frac{\partial C}{\partial x_k} \\ &\quad + \tau^2 \overline{\theta' c'} (C_{\kappa\theta 2(SB)} S_{ik} + C_{\kappa\theta 2(\Omega B)} \Omega_{ik}) \beta_k \end{aligned} \quad (30)$$

$$\text{où } S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (31)$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \epsilon_{ijk} \omega_k \quad (32)$$

$$\beta_i = -\frac{g_i}{\Theta_r} \quad (33)$$

Tous les coefficients introduits dans ce modèle sont explicités dans la thèse de Bruno Abart [1], qui, au cours de ces travaux à l'Ecole Centrale de Nantes, a réalisé des tests de validation du modèle.

3.4.1.12 Paramètres d'entrée

- Un pré-processeur météorologique capable d'intégrer les sondages verticaux est utilisé (processeur similaire à celui du code SUBMESO).
- La topographie est fournie par la base de données topographiques BD Topo de l'IGN, avec lequel la société SIRIA Technologies a signé un partenariat. C'est la base de données nationale la plus complète et la plus précise. En effet, fin 1998, plus du quart du territoire français est disponible ou en cours de production. Elle est utilisée pour des applications s'étendant du territoire d'une commune à celui d'un département. Elle touche des domaines aussi variés que l'aménagement du territoire, l'urbanisme, la gestion des réseaux, la politique foncière, l'environnement ou la gestion des risques. Issue de la saisie photogrammétrique de photographies aériennes au 1 : 30 000 et de relevés topographiques sur le terrain, elle décrit de manière exhaustive l'environnement : routes, voies ferrées, lignes de transport d'énergie, hydrographie, bâtiments, végétation, limites administratives et relief. Les objets physiques sont saisis en coordonnées tridimensionnelles avec une précision de l'ordre du mètre ce qui permet de produire, outre la carte de base au 1 : 25 000 des plans réguliers au 1 : 10 000 et des plans d'étude au 1 : 5 000. Cependant, SIRIA Technologies doit résoudre des problèmes d'interface entre BD Topo et Drag&Fly Air, c'est pourquoi la BD Topo est préalablement traitée par Drag&Fly Map.
- Description géométrique de la source, débit de polluants en kg/s, débit de fumées en $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, température de la fumée et pour les particules : le type (pesante ou non pesante), les diamètres, la masse volumique.

3.4.1.13 Résultats

- Champs des différentes variables météorologiques (vent, température,...).
- Champs de polluants dans le domaine.

Les post-traitements sont multiples : sorties traditionnelles (isolignes, surface iso, concentration en 3D, ...) ou réalité virtuelle (déplacement dans le site 3D). Les très larges possibilités de post-traitement et de présentation des résultats constituent un atout important de cet outil de modélisation.

3.4.1.14 Validation et limites La gamme de temps traitée est limitée ce qui fait que pour une étude annuelle l'approche eulérienne est utilisée sur un ensemble de cas stationnaires. Cependant, pour les études de très longues périodes (demande de percentile 98 ou de moyennes annuelles), plusieurs possibilités sont offertes, dont l'une est la suivante :

- simulations de 40 à 50 cas avec le modèle eulérien
- constitution d'une base de donnée de résultat
- reconstitution de chacune des situations de l'année considérée (typiquement une situation météo toutes les 3 heures) par interpolations multidimensionnelles, par l'utilisation éventuelle de corrélations avec les résultats d'un modèle gaussien ou par utilisation de la sensibilité

Les descriptions lagrangienne et de type bouffée gaussienne sont en développement. De plus, la modélisation n'est pas valable pour les polluants très lourds ou les particules très grosses. Un modèle de réenvol de particules pesantes est à valider. L'approche diphasique est en cours de développement.

3.4.1.15 Disponibilité Ce logiciel est commercialisé par la société Siria Technologies. Le code est programmé en Fortran, tourne sous environnement Windows et machines UNIX et le niveau d'utilisation va d'ingénieur à expert en mode normal.

Le coût d'acquisition d'une licence est d'environ 300 KF. Pour une utilisation en ligne par Internet, un nombre illimité de simulations effectuées sur le centre de calcul revient à 100 KF pour la mise en place du modèle sur un site donné, plus 25 KF par an, plus 0,25 F par habitant et par an.

3.4.1.16 Contact

- E-mail : t.debuigne@siriatech.com
- Site internet : <http://www.siriatech.com>

3.4.2 Le modèle ARIA Régional

3.4.2.1 Présentation générale Le modèle ARIA Régional a été créé par la société ARIA Technologies pour l'analyse et la prévision de la pollution atmosphérique à l'échelle régionale.

Les espèces suivantes : CO, NO_x, SO₂, COV et PM sont intégrées dans le modèle, elles peuvent provenir des grandes sources ponctuelles industrielles, des sources linéiques (segments de trafic,...) et des sources surfaciques (chauffage domestique, biogéniques,...).

Plusieurs modèles météorologiques sont utilisés : en mode diagnostique le modèle d'assimilation météorologique MINERVE et en mode prognostique les modèles HERMES ou MERCURE.

En mode non réactif, le modèle de dispersion HERMES est employé et, en mode réactif, ce sont les modèles AIRQUAL, UAM ou CAMx qui sont utilisés. Dans les derniers modèles cités, de nombreuses réactions photochimiques permettent la simulation des phénomènes de dispersion des polluants secondaires à l'échelle régionale. Le modèle de prévision CHIMERE est aussi employé.

La démarche suivie par ARIA Régional pour modéliser la dispersion des polluants atmosphériques à échelle régionale tout en considérant les facteurs météorologiques et les différents paramètres de la zone étudiée est décrite sur la figure 9.

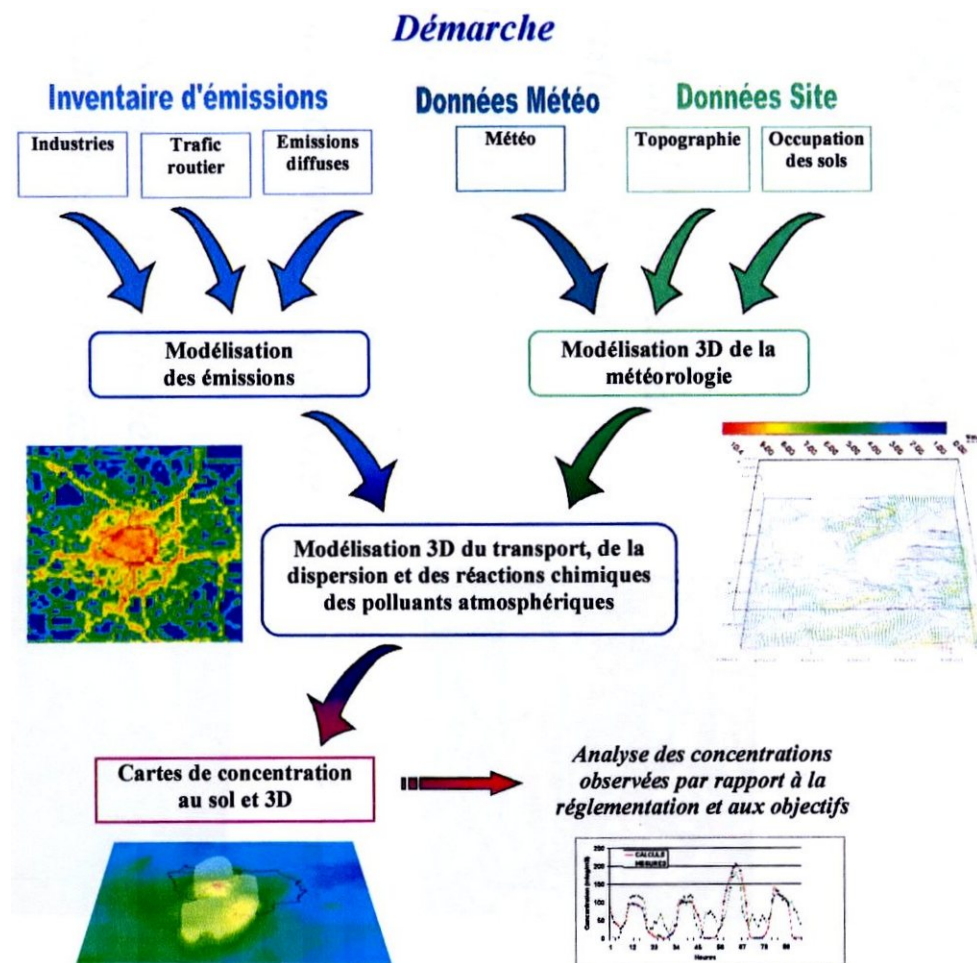


Figure 9 . Schéma synoptique de la modélisation de la dispersion des polluants par ARIA Regional

Les objectifs de ce logiciel sont de :

- Tester et analyser l'impact de mesures destinées à améliorer la qualité de l'air (circulation de l'air, limitation de la vitesse, réduction des émissions industrielles, carburants, ...)
- Comprendre les épisodes de pollution survenus

- Prévoir la pollution atmosphérique à l'échelle régionale

3.4.2.2 Type de modélisation eulérienne

3.4.2.3 Echelle d'application domaines de 30 à 300 km de côté

3.4.2.4 Paramètres d'entrée

- Météorologie : sorties de modèles de grande échelle (ECMWF, ARPEGE), mesures disponibles au sol ou en altitude
- Topographie et occupation des sols
- Emissions pour toutes les espèces normées avec modulations temporelles, mensuelles et horaires pour chaque espèce

3.4.2.5 Résultats

- Cartes de concentration au sol et 3D
- Tracé de graphiques qui permettent l'analyse des concentrations observées par rapport à la réglementation et aux objectifs

3.4.2.6 Contacts

- Personne à contacter : sbouvet@aria.fr
- Site internet : <http://www.aria.fr>

3.4.3 Le modèle ARIA Local

3.4.3.1 Présentation générale Le modèle ARIA Local a été créé par la société ARIA Technologies pour modéliser la dispersion des polluants atmosphériques à petite échelle avec prise en compte des obstacles.

Les gaz légers ou lourds et les poussières sont intégrés dans le modèle, ils peuvent provenir de différents types de sources : surfaciques (chauffage domestique, biogéniques,...), volumiques....

Le modèles MERCURE ou GEDEON sont employés pour la dispersion et la résolution des équations de Navier-Stokes. Les problèmes de jet et de phase liquide ainsi que ceux de sédimentation des poussières sont pris en compte.

En ce qui concerne les paramètres d'émissions, EMITRA peut être utilisé pour le calcul des émissions liés au trafic automobile et ATRCOD pour l'évaluation du terme source dans le cas de rejets accidentels.

La démarche suivie par ARIA Local pour modéliser la dispersion des polluants atmosphériques à échelle locale est décrite sur la figure 10.

Les objectifs de ce logiciel sont :

- La modélisation précise de l'écoulement avec prise en compte des obstacles et de la topographie (étude des effets du vent sur des ouvrages, micrositting pour l'évaluation du potentiel éolien...)

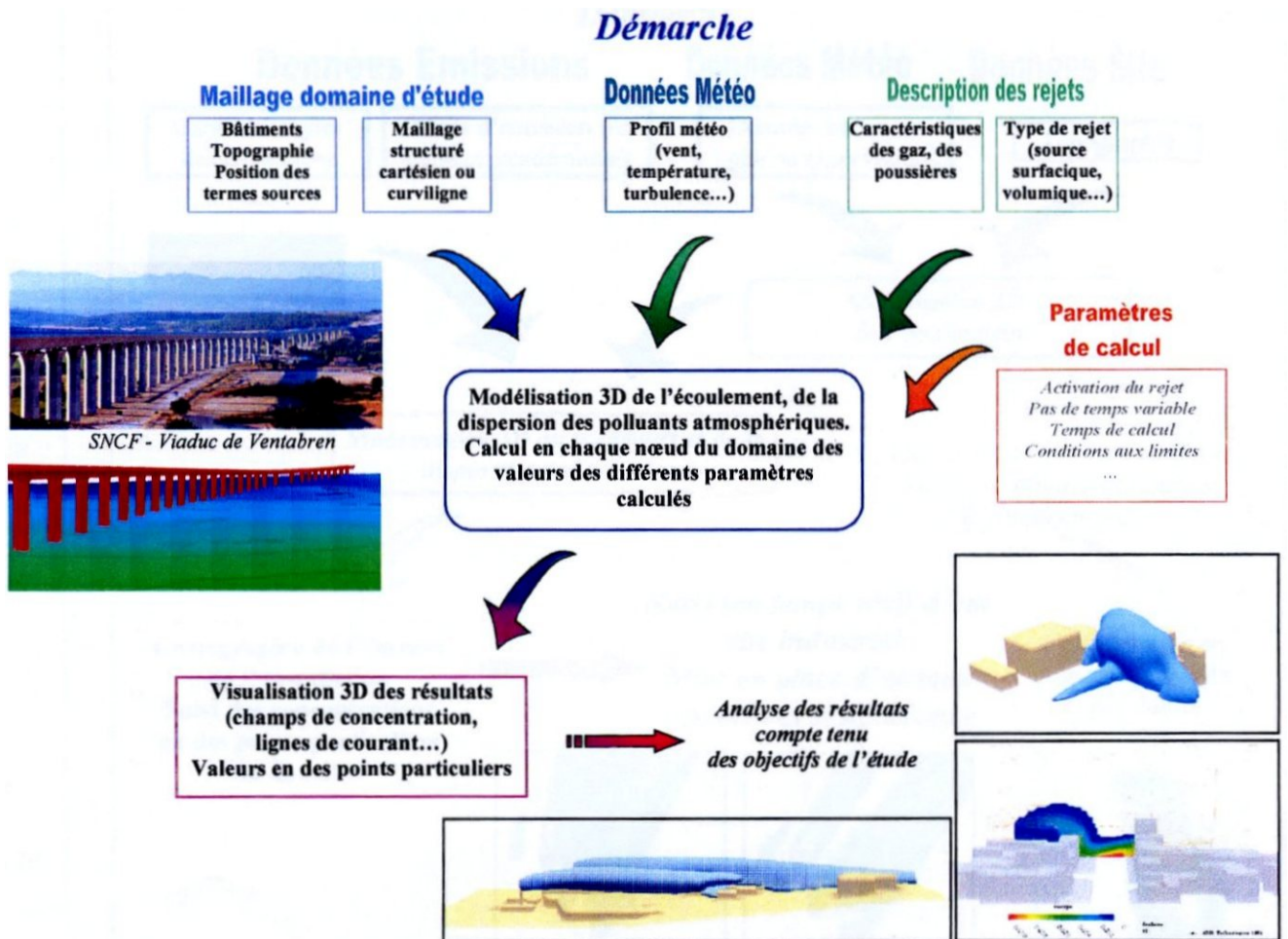


Figure 10 . Schéma synoptique de la modélisation de la dispersion des polluants par ARIA Local

- La modélisation de la dispersion à petite échelle avec prise en compte des obstacles pour tout type de gaz et de rejet (chronique, accidentel, trafic automobile, sources surfacique, volumique...)

3.4.3.2 Type de modélisation eulérienne

3.4.3.3 Echelle d'application domaines de 100 à 5 km de côté

3.4.3.4 Méthode numérique Le maillage, sur lequel une description détaillée des obstacles, de la topographie et de la position des termes sources peut être réalisé, peut être soit structuré cartésien ou curviligne.

Différents paramètres de calcul tels que l'activation du rejet, le pas de temps variable, le temps de calcul ou les conditions aux limites doivent être introduits.

3.4.3.5 Paramètres d'entrée

- Profil météorologique (vent, température, turbulence,...) qui définit un ensemble de cas d'étude
- Topographie, position des bâtiments et des termes sources
- Description détaillée des émissions (débit, vitesses, turbulence, composition, caractéristiques des gaz et poussières, type de rejet,...) en chaque du maillage

3.4.3.6 Résultats

- Champs de concentration, lignes de courant
- Valeurs en des points particuliers

L'analyse des résultats compte tenu des objectifs de l'étude se fait par visualisation 3D.

3.4.3.7 Contacts

- Personne à contacter : sbouvet@aria.fr
- Site internet : <http://www.aria.fr>

3.4.4 Le modèle SUBMESO

3.4.4.1 Présentation générale Le modèle SUBMESO permet de simuler simultanément les écoulements turbulents de la basse couche atmosphérique au dessus de zones urbaines et de terrains complexes et le transport, la diffusion ainsi que les transformations chimiques des polluants urbains (gazeux et particulaires).

La mise en place de ce modèle a été motivée par la nécessité de tenir compte dans une modélisation des processus dynamiques à la fois micro-physiques et chimiques, car ces processus sont fortement couplés dans les problèmes de distribution spatiale des polluants à l'échelle d'une ville. Le modèle permet d'appréhender le champ urbain à l'échelle de fragments urbains ou d'une ville.

Cependant, les capacités informatiques actuelles ne permettent pas de simuler précisément les écoulements au niveau des échelles des obstacles urbains comme les constructions, les arbres, les rues, ..., qui sont connus pour avoir une forte influence sur les structures dynamiques et thermodynamiques de la basse couche atmosphérique. C'est pourquoi, Guilloteau et al. [17] ont modélisé le sol réel par un sol apparent à l'aide du développement de relations paramétriques permettant d'une part, l'expression des conditions limites à la frontière inférieure du domaine de calcul, grâce aux fonctions de mur, dans le cas des équations dynamiques et, d'autre part, l'expression d'un modèle de sol pour les équations thermodynamiques. Ces relations permettent d'exprimer les flux de moment, de chaleur sensible et de chaleur latente comme étant des fonctions des paramètres caractéristiques du sol apparent. De plus, Guilloteau et al. [17] ont introduit un modèle pour l'estimation des flux de polluants des sols urbanisés.

Le modèle SUBMESO a été développé à partir du code ARPS version 3.2 de l'université de Oklahoma, qui au départ a été mis en place pour l'étude des orages et

contient un modèle rural de sol. Le but du groupement SUBMESO est d'adapter ce code aux caractéristiques spécifiques d'une atmosphère urbaine, de ses échelles et de ses procédés physiques et chimiques.

Le modèle est donc organisé autour de deux pôles centraux, le solveur dynamique développé à partir de ARPS et le solveur de chimie-dispersion. Le développement initial de ces deux modules permet de mettre en oeuvre rapidement des simulations indépendantes (off-line) des écoulements du vent et des champs thermodynamiques d'une part, du transport-diffusion et des transformations chimiques d'autre part.

Ses domaines d'application relèvent de la physique urbaine (pollution de l'air, climatologie urbaine, thermique et énergétique urbaine) et des risques (risques naturels et rejets atmosphériques accidentels).

3.4.4.2 Type de modélisation eulérienne

3.4.4.3 Echelles d'application meso, urbaine et micro

3.4.4.4 Résolution spatiale La résolution horizontale va de 50 m à 500 m sur des grands domaines, la résolution verticale est de 10 m près du sol et de 200 m en altitude.

3.4.4.5 Méthode numérique L'environnement numérique du modèle communautaire est assuré par ALPES qui gère la modularité, les interfaces et les procédures de développement des modules du code communautaire. Le code est un modèle sur grille cartésienne déformée par le relief. La discrétisation des équations se fait par différences finies.

Le modèle de sous-maille utilisé étant mal adapté aux écoulements proches d'une paroi, de nouveaux schémas des flux sous-maille turbulents sont développés sur la base d'équations de transport de quantités turbulentes sous maille, énergie et scalaires: modèles dérivés de ceux de Smagorinsky, Métais et al. [34] et Germano et al. [15] ainsi qu'un nouveau modèle sous-maille pour la fluctuation de température.

Le mailleur 3D VLx permet de générer des maillages inhomogènes et le module de maillage de terrain qui permet, par exemple, des resserrements du maillage en proportion des pentes du sol ou autour des sources.

Les conditions aux limites aux frontières latérales et supérieures du calcul sont définies soit par le pré-processeur météorologique, soit à partir des paramétrisations instationnaires, soit par emboîtement dans une simulation à méso-échelle, soit encore à partir de données expérimentales réelles (sondages verticaux, données au sol). Seule l'approche paramétrique a été développée sur la base des relations semi-empiriques classiques (Monin-Obukhov) ou du modèle de couche limite instable de Federovich [12].

3.4.4.6 Modélisation de la chimie-transport Le module TRANSCHIM est basé sur le modèle de chimie atmosphérique MOCA qui est principalement développé sur la base du concept d'opérateurs chimiques et sur l'utilisation systématique d'espèces de remplacement pour le traitement des COV secondaires (Aumont [3]). Le mécanisme

est adapté au traitement des situations rencontrées dans la basse troposphère continentale (des milieux urbains aux milieux ruraux, situations diurnes et nocturnes). Le modèle comprend 169 réactions pour 67 espèces.

3.4.4.7 Modélisation de dépôt sec développée à partir du modèle du LAMP de Edy et al.([11]) basé sur le modèle de résistance de Wesely[49] (en cours de modélisation).

3.4.4.8 Modélisation de la micro-physique Kessler et Berry-Reinardt (1974).

3.4.4.9 Modélisation de la turbulence Il fonctionne en mode stationnaire avec sous-modèle de turbulence ou en mode dynamique pour une simulation aux grandes échelles. Il résout les équations de transport selon un modèle de fermeture en un point. Les modèles de turbulences utilisés pour les simulations atmosphériques à méso-échelle ou à petites échelles sont en cours d'introduction et de test pour les écoulements inhomogènes sub-mesoéchelles.(modèle à une équation ou de type k-L, modèles à deux équations de type k- ϵ améliorés).

3.4.4.10 Le modèle de sol SM2 Le modèle de sol rural SM2 est basé sur le principe du modèle à une couche de végétation et deux couches de sol, la couche supérieure étant d'une épaisseur de quelques centimètres et la couche inférieure de quelques décimètres. L'interface sol-atmosphère est complétée par la végétation et les fines couches de sol sont soumises aux conditions atmosphériques d'une part, et un retour dû à un état d'équilibre avec la couche de sol inférieure, d'autre part. Ce modèle tient compte de l'interception de la précipitation par la végétation, de l'écoulement de la végétation au sol, de l'évaporation à partir du sol dénudé, de la transpiration de la végétation et d'un drainage possible dans la couche de sol inférieure. Ceci permet d'estimer l'humidité et la température de surface. L'urbanisation du modèle de sol (Guilloteau et al. [17]) adopte le même principe pour les sols artificiels (asphalte ou béton) et pour les constructions. Un parallèle entre les sols naturels et artificiels, et entre végétation et constructions est réalisé. De plus, les flux de chaleur latente et sensible anthropogéniques dues aux sources de chaleur provenant des véhicules, des chauffages ainsi que le lien avec les installations sanitaires sont prises en considération. Cependant, à ce jour, le modèle est unidimensionnel car seuls les échanges verticaux sont considérés. La prise en compte des échanges horizontaux est en cours d'intégration.

3.4.4.11 La cartographie des sols et des flux Elle est réalisée par le logiciel ASTUCE, qui a été créé en coopération avec des architectes du CERMA et des informaticiens de l'IRIN au sein de la fédération de recherche nantaise du CNRS Physique et Images de la Ville. En utilisant des bases de données CORINE Land Cover et des bases de données urbaines TRAPU de l'IGN, il permet l'analyse statistique de la structure des constructions de la ville et l'obtention des paramètres de rugosités à partir du modèle de Bottema [5]. Cependant, comme les résultats donnés par ces modèles ne

sont pas facilement comparables aux données expérimentales, le code CHENSI de Sini et al. [40] servant à estimer les paramètres de rugosité au dessus des quartiers réguliers à partir de simulations numériques est développé.

3.4.4.12 Paramètres d'entrée

- Les caractéristiques physiques des sols et de la canopée qui sont issues des modèles d'occupation des sols, des modèles de terrain, rugosités (modèle AS-TUCE).
- L'inventaire spatio-temporel et par espèces des sources de pollution qui est tiré des modèles d'émissions automobiles (taux d'émission, trafic...). Les modes de transport pris en compte dans la modélisation sont les voitures particulières, le transport en commun routier et le transport de marchandises routier.
- La météorologie qui peut être extraite d'un modèle d'échelle régionale au nationale.

Cependant, le préconditionnement météorologique et l'assimilation de données expérimentales restent embryonnaires. En effet, contrairement aux outils développés par Météo-France, le code SUBMESO n'est pas interfacé avec les données du centre européen, donc il n'est pas possible de faire de la prévision. Ceci est un choix car SUBMESO est un outil de recherche, c'est-à-dire d'étude de processus physiques. De plus, l'intégration du modèle de sol urbain n'est pas achevée.

3.4.4.13 Résultats

- Champs de vent et de turbulence.
- Champs d'humidité et de précipitation.
- Champs de concentration de polluants.

Les fichiers de résultats sont traités grâce aux tracés de graphiques, cartographies, images...(utilisation de TECPLOT, SAVI3D...).

3.4.4.14 Validation et limites Une méthodologie d'expériences numériques de validation a été mise au point. Un écoulement de couche de surface atmosphérique est calculé à travers et au-dessus de la canopée urbaine stylisée d'envergure infinie (rues parallèles et identiques), avec le code CHENSI [40], sur des domaines de calcul à conditions périodiques. Le frottement dû à la canopée structure la couche interne, et les paramètres intrinsèques de la canopée sont déduits des profils obtenus dans la sous-couche en équilibre.

Ce modèle a été partiellement validé puisque la plupart des sous-modèles ont été validés avant leur inclusion dans SUBMESO. Des expériences pour la validation du modèle sont menées en soufflerie.

Les limites du code SUBMESO sont qu'il n'intègre pas de modèle de rayonnement. Quant à la canopée urbaine, elle est modélisée mais pas simulée explicitement. Les recherches en cours visent à pallier à ces limites.

De plus, le modèle SUBMESO n'a pour l'instant pas été utilisé pour le transport des particules et n'est pas encore interfacé avec un inventaire de particules. Différents travaux sont mis en œuvre mais ils restent en amont d'applications.

3.4.4.15 Disponibilités SUBMESO est un outil de recherche, il est cependant construit de manière très modulaire et très standard, il peut donc être exécuté sur des plateformes allant du PC au gros ordinateur vectoriel ou parallèle, ceci dépendant du choix des paramétrisations physiques et du nombre de points de résolution. La mise en œuvre du code, programmé en Fortran, se fait donc sous environnement Linux, Unix, Windows 95/98/NT et n'est utilisable uniquement que par des experts en ce domaine, c'est-à-dire des chercheurs ou spécialistes en dynamique des fluides et en chimie de l'atmosphère. Le modèle communautaire SUBMESO est disponible gratuitement pour toute équipe de recherche publique, à la seule condition de devenir membre du GIS SUBMESO, en vue d'opérations de recherche. Une utilisation commerciale est à débattre avec le GIS SUBMESO dans lequel sont représentés non seulement les équipes de recherche mais aussi le CNRS et la société SIRIA Technologies.

3.4.4.16 Contacts

- E-mail : Patrice.Mestayer@ec-nantes.fr
- Site internet : http://www.ec-nantes.fr/F_serveur/Recherche/DEE/index.html

3.4.5 Le modèle UAM-V

3.4.5.1 Présentation générale Le modèle UAM-V (Urban Airshed Model with variable grid), créé en 1991 par la société américaine Systems Applications International, est un modèle tridimensionnel de transport/chimie-photochimie de l'ozone avec des grandeurs météo prédéfinies et imposées (off line). Il permet de calculer la concentration de polluants chimiquement actifs ou inertes. Une version plus poussée du modèle UAM-V, appelée UAM-VPM, est en cours de développement. Comme son nom l'indique, elle permettra de prendre en compte les polluants particuliers.

Le développement du modèle UAM-V a été motivé par la compréhension des relations entre les émissions dues à l'homme (notamment aux voitures) et la pollution de l'air en milieu urbain ainsi que par la compréhension des processus chimiques et photochimiques conduisant aux pics de pollution à l'ozone en période estivale chaude. Il tient compte des sources ponctuelles (modélisation de l'élévation du panache par les relations de Briggs [8]) et diffuses.

Il permet de simuler la chimie et le transport de l'ozone dans l'atmosphère. Cela entraîne la description d'une trentaine d'autres polluants participant à environ 80 réactions chimiques. La concentration en ozone est déduite de la quantité de précurseurs introduits par les émissions et des conditions météorologiques et d'ensoleillement. Le modèle est particulièrement approprié pour des zones urbaines ayant des pics importants de pollution d'ozone.

Ses domaines d'application relèvent de la physique urbaine (climatologie urbaine, pollution de l'air) et des risques toxicologiques. L'application de ce modèle dans le champ urbain peut être d'évaluer l'impact de réduction des émissions automobiles, d'effectuer une comparaison de l'impact des émissions automobiles avec les émissions biogéniques ou encore d'estimer l'impact des émissions par secteur industriel.

3.4.5.2 Type de modélisation eulérienne

3.4.5.3 Echelle d'application méso (système de villes)

3.4.5.4 Résolution spatiale et temporelle Le quadrillage va de 1 km pour le plus fin à 20 km environ.

3.4.5.5 Méthode numérique Il utilise la méthode des différences finies pour la discrétisation de l'équation de diffusion atmosphérique. L'utilisation de l'imbrication de mailles permet de partir d'une grille couvrant tout le domaine et de l'affiner aux endroits intéressants.

3.4.5.6 Modélisation des transformations chimiques module de chimie (mécanisme CB-IV) d'après Gery et al. [16]. Il utilise l'hypothèse de quasi-équilibre pour les espèces chimiques qui apparaissent ou disparaissent très vite et l'algorithme de Newton-Raphson pour les autres espèces.

3.4.5.7 Modélisation des dépôts secs et des dépôts humides Une version UAM-VPM est actuellement en cours, par contre, il ne nous a pas été possible d'obtenir des informations relatives à ces modèles inclus dans cette nouvelle version.

3.4.5.8 Modélisation

3.4.5.9 Modélisation de la turbulence La diffusivité turbulente horizontale est considérée constante et égale à $50\text{m}^2/\text{s}$. Les diffusivités turbulentes verticales pour des conditions neutres et instables sont déterminées en utilisant les relations de Lamb et al. [22]. Pour des conditions stables, la relation de Businger et Arya [10] est employée. La classe de stabilité, la vitesse de frottement et la longueur de Monin-Obukhov sont calculées en utilisant la procédure de Liu et al. [25].

3.4.5.10 Paramètres d'entrée

- L'état météorologique (vapeur d'eau, diffusivités verticales, températures, vents et en option la couverture nuageuse et les précipitations) tiré du modèle SAIMM (dont les entrées sont des données de Météo France ou des analyses du centre européen de prévision à moyen terme).
- Les émissions de polluants primaires (sources diffuses ou ponctuelles) issues du modèle EPS2 (dont les entrées sont les données fournies par le JRC-ISPRA obtenues de CORINAIR 90) .
- La topographie de la région (IGN) et le plan d'occupation des sols (IFEN, CORINNE LAND COVER).
- Les conditions limites de polluants en bordures horizontales et verticales du domaine et les conditions initiales de simulation.

3.4.5.11 Les résultats

- Moyennes temporelles : concentrations d’ozone, de NO et de NO₂ (en ppm), valeurs près de la surface.
- Evolutions temporelles : toutes les espèces en champ 3D, en micromoles/m³.
- Concentration dans les panaches.

Les résultats sont traités par des tracés de graphiques et peuvent être analysés par une visualisation animée par SAVI 3D commercialisé en France par la société ARIA Technologies.

3.4.5.12 Validation et limites Une forte sensibilité aux entrées du modèle en terme d’émissions de NO_x ou de CO₂ a été montrée suite à une étude.

Ce modèle diffusé dans le monde entier, a été partiellement validé. Le modèle est soumis à des limites temporaires pour le niveau de validation mais aussi à des limites permanentes à cause du module chimique. En effet, tous les processus chimiques ne sont pas représentés et notamment la chimie en phase aqueuse ou hétérogène qui est fondamentale pour les aérosols.

De plus, la résolution spatiale limitée ne permet pas une simulation précise des phénomènes en zone urbaine. Différentes estimations ont été faites sur le temps de mise en œuvre : l’acquisition et la préparation des données se fait en plusieurs jours, la résolution en moins d’une journée, le post-traitement et l’analyse des résultats en plusieurs jours.

Des recherches en cours visent à relocaliser et compléter l’inventaire des sources ponctuelles d’émission en entrée du modèle, à étendre le domaine spatial et à intégrer un autre épisode de pollution avec la fabrication d’un nouvel état météorologique.

3.4.5.13 Disponibilités La mise en œuvre du code programmé en Fortran 77 se fait sous environnement Linux ou Unix et est utilisable par toute personne de formation scientifique. Ce logiciel ainsi que sa documentation sont en libre accès sur le site de l’EPA.

3.4.5.14 Contacts

- Personne à contacter : SDouglas@icfconsulting.com
- Sites internet :
 - <http://www.epa.gov/scram001/>
 - <http://uamv.saintl.com/>

3.4.6 Le modèle OPANA

3.4.6.1 Présentation du modèle Le modèle OPANA, qui est la version opérationnelle du modèle ANA (Atmospheric mesoscale Numerical pollution model for urbans and regional areas) a été créé en 1998 à l’université de Madrid. Comme il s’agit d’un modèle opérationnel, il doit être adapté à chaque application de l’utilisateur.

Le modèle OPANA développe un modèle de la qualité de l'air pour les régions métropolitaines. Il peut fournir des prévisions sur la qualité de l'air jusqu'à deux ou quatre jours à l'avance. Il a été créé dans le but de déterminer les effets de l'occupation des sols des zones urbaines sur la prévision de la qualité de l'air.

Le modèle OPANA a été créé à partir d'un projet s'occupant du développement, des tests et de la validation de systèmes télématiques innovants permettant le contrôle et la prévision de la qualité de l'air dans les zones urbaines. Les composantes télématiques contenant des services et des produits multimédias sont très utilisées dans ce projet :

- Travaux spécialisés sur le net.
- Systèmes d'archives multimédias et GIS et grandes définitions des terminaux.

Le modèle OPANA est un système de modélisation qui permet de simuler la dispersion dans l'air de différentes espèces chimiques (primaire et secondaire), mais pour l'instant uniquement de type gazeux.

Le modèle chimique est intégré au modèle de transport météorologique non hydrostatique à méso-échelle, REMEST en mode on-line ce qui signifie que la chimie est résolue et mise à jour en même temps que l'advection et la diffusion sont simulées.

Le modèle d'émissions est conduit, quant à lui, en mode off-line ce qui signifie que lorsqu'une simulation est réalisée, les émissions pour les périodes simulées sont présentées avant que la simulation par le modèle ANA ne commence et elles sont enregistrées sur un fichier qui est ensuite lu par ANA durant la simulation. Le modèle de déposition fonctionne en mode on-line.

3.4.6.2 Type de modélisation eulérienne

3.4.6.3 Echelle d'application urbaine ou méso

3.4.6.4 Résolution temporelle et spatiale La résolution temporelle est de quelques secondes pour une simulation durant 10 à 15 jours. En ce qui concerne la résolution horizontale, la dimension des cellules peut varier de 500 à 10000 m pour une longueur variant de 10 à 500 Km. Pour la résolution verticale, la hauteur des cellules varie de 10 à 500 m pour une hauteur totale de 10 Km.

3.4.6.5 Méthode numérique Le schéma du second ordre de Adams-Bashforth pour la discrétisation temporelle et la méthode de Crank-Nicholson pour le terme de diffusion verticale sont utilisées.

3.4.6.6 Un module chimique, CHEMA Ce module est basé sur l'approche CBM-IV (Gery et al. [16]). Le système de réactions chimiques est résolu par la procédure numérique SMVGEAR (Jacobson et al. [32]). Les réactions considérées dans ce modèle sont des réactions inorganiques et organiques telles que celles avec les formaldéhydes, les aldéhydes de masse moléculaire très élevée, les alcanes, les alcènes, les composés aromatiques et les isopropènes.

3.4.6.7 Un module de déposition sec, DEPO Wesely et al. [49]

3.4.6.8 Modélisation de la turbulence Les flux turbulents sont paramétrés selon la théorie K (les flux turbulents sont proportionnels aux gradients de concentration et la constante de proportionnalité est le tenseur de diffusivité turbulente K).

3.4.6.9 Paramètres d'entrée

- La météorologie (humidité, vent, température et turbulence).
- Les paramètres d'émission (SO_2 , NO_x , O_3 , CO sont analysés) à partir du modèle d'émission, EMINA. Celui-ci a été mis en place à partir des facteurs d'émission donnés par CORINNE (Bouscaren et al. [6]) et l'EPA. Il tient compte des émissions anthropogéniques et biogéniques qui sont données par la classification de l'occupation des sols.
- La topographie et l'occupation des sols par une classification précise de l'occupation des sols (information par satellite).
- Les bases de données sur la qualité de l'air sur réseau.

3.4.6.10 Résultats

- Champs de concentration des polluants
- Variables météorologiques standards

En ce qui concerne les données de sortie, le modèle s'adaptant à l'utilisateur, un large éventail de possibilités lui est offert en ce qui concerne les paramètres de sortie.

3.4.6.11 Validation et limites Le modèle OPANA a déjà été testé à Asturias dans le nord de l'Espagne, à Bilbao dans le pays Basque, à Leicester en Angleterre, à Quito en Amérique du sud et à Madrid. Cependant, le modèle possède des limites. En effet, la condensation et la chimie de l'aérosol ne sont pas modélisés. **Le problème des particules est en cours d'intégration dans le modèle par la prise en compte de la chimie des aérosols.** Cependant, en ce qui concerne la production secondaire de particules polluantes, les inventaires des émissions ne sont pas très nombreux en Europe, c'est pourquoi ce point attire particulièrement l'attention des personnes responsables de ce modèle, qui ont donc mis en place un projet visant au développement des inventaires d'émission pour des domaines allant jusqu'aux échelles méso.

3.4.6.12 Disponibilités La mise en œuvre du code programmé en Fortran et en C se fait sous environnement Linux. C'est un outil de travail compact et d'utilisation très flexible.

3.4.6.13 Contacts

- Personne à contacter : roberto@fi.upm.es
- Site internet : <http://artico.lma.fi.upm.es/>

3.4.7 Le modèle LADM

3.4.7.1 Présentation du modèle Le modèle LADM (Lagrangien Atmospheric dispersion model), créé en 1997 par la division de la recherche atmosphérique de Victoria en Australie, est un modèle de dispersion de la pollution atmosphérique qui simule le transport et la diffusion des polluants particulaires et gazeux sur des distances allant d'une centaine de mètres à quelques centaines de kilomètres.

Les champs d'application de ce modèle sont la météorologie et la qualité de l'air en terrain complexe. Ce modèle tient également compte des brises de mer ou de terre, des phénomènes liés aux effets de l'ensoleillement (la fumigation) et du smog photochimique. Le modèle est plus facilement applicable pour des sources ponctuelles pour lesquelles l'élévation du panache est prise en compte (émissions industrielles de raffineries ou fonderies) mais est aussi valable pour les sources surfaciques.

Ce modèle est constitué de deux parties :

- Un modèle météorologique tridimensionnel à méso-échelle qui calcule les vents et la turbulence,
- Un modèle de dispersion qui utilise les vents et la turbulence donnés par le modèle précédent pour prévoir les trajectoires et les concentrations de particules marquées émises par des sources spécifiques.

Ces deux modèles fonctionnent donc en mode off-line. Dans le modèle lagrangien, les particules émises par les sources et représentant des gaz neutres "flottants" sont advectées et diffusées selon le vent local et la turbulence. Le modèle météorologique intègre les équations de transport, l'équation hydrostatique, la forme compressible de l'équation de continuité, les équations thermodynamiques et d'humidité.

3.4.7.2 Type de modélisation lagrangienne

3.4.7.3 Echelle d'application méso et urbaine

3.4.7.4 Résolution temporelle et spatiale La résolution temporelle est d'environ 1 heure pour une période simulée de 15 min. La période simulée peut durer 2 à 3 jours. La résolution horizontale varie de 20 Km à 1 Km et la résolution verticale commence à partir de 10 m au dessus du sol et est constituée de 8 niveaux jusqu'à 1 Km, puis diminue au dessus de cette hauteur.

3.4.7.5 Méthode numérique La méthode "upwind" est utilisée pour la discrétisation des équations. La frontière inférieure est constituée d'une canopée végétative avec un arrangement de deux couches sol/humidité. En ce qui concerne les conditions aux limites, sur la frontière latérale de la grille extérieure, le gradient du flux est supposé nul. Des grilles de résolution plus fines sont emboîtées. La température de surface est déterminée à partir de l'équation de l'énergie et de simples formules sont utilisées pour prendre en considération l'effet de la couverture nuageuse sur le rayonnement au niveau de la surface. Les conditions initiales sont déterminées par les profils de vent, de température et d'humidité.

3.4.7.6 Modélisation de la photochimie La formation éventuelle d'un smog photochimique est également simulée à l'intérieur du modèle de dispersion lagrangien en utilisant l'approche Integrated Empirical Rate equations (Johnson [20], Johnson et al. [21]).

3.4.7.7 Modélisation de la turbulence Les flux turbulents sont paramétrés par la théorie K. Les composantes turbulentes sont obtenues à partir de l'équation de Langevin dérivée par Thomson. Les concentrations au niveau du sol sont calculées en comptant le nombre de particules contenues dans des petites boîtes au dessus de la région scrutée. La composante de dispersion est calculée suivant 2 modes :

- Un mode proche de la source à environ 5 Km donc en conditions convectives, qui permet de déterminer la concentration maximale au niveau du sol
- Un mode éloigné de la source pour examiner la dispersion à quelques Km de la source

3.4.7.8 Paramètres d'entrée

- La météorologie : vent au niveau de la surface (constant ou variable), niveaux de pression (cartes synoptiques), profils verticaux de température et d'humidité, couverture nuageuse, caractéristiques de la surface et du sol, brise de mer ou de terre
- Les paramètres d'émission (pour n'importe quel type de source : le débit, pour les sources ponctuelles : la hauteur, le diamètre de la cheminée, la vitesse et la température de sortie des fumées)
- La topographie (occupation des sols).

3.4.7.9 Résultats

- Variables météorologiques standards.
- Champs de concentrations moyennés dans le temps (pour des périodes de 15 jours ou plus).
- Distribution des traceurs permettant la visualisation du panache.

La visualisation des résultats peut se faire par graphique à l'aide d'un package qui est, cependant, soumis à une licence.

3.4.7.10 Evaluation du modèle Le modèle est destiné à l'étude des problèmes de dispersion dans des conditions météorologiques. Les équations du modèle ne permettent pas la variation horizontale des variables à travers le domaine étudié. Le modèle ne simule pas les variations de la teneur en eau de l'air, il peut donc uniquement être appliqué en cas de temps non pluvieux. Cependant, l'effet de la couverture nuageuse sur les radiations de courtes et longues longueurs d'onde peut être pris en considération. Les transformations chimiques ne sont pas modélisées.

Pour simuler des périodes très longues et de nombreuses sources, le calcul est trop important.

Différentes applications du modèle LADM peuvent être citées comme par exemple le choix d'implantations de quatre centrales électriques en Australie et aussi à Honk-Kong mais aussi l'utilisation pour la prévision des champs d'écoulement du vent pour l'étude métropolitaine de la qualité de l'air à Sydney. Cependant, à ce jour, aucune étude n'a encore été réalisée pour le cas où les particules marquées du modèle lagrangien sont de type PM10.

3.4.7.11 Disponibilités Le code, qui est soumis à une licence, est écrit en Fortran 90, l'interface graphique est exécutable sous Windows 95 ou NT. Il est préférable que les utilisateurs du modèle aient des connaissances dans les domaines de la météorologie, de la dispersion et de l'expérience en ce qui concerne les modèles numériques. En ce qui concerne le coût, le logiciel est soumis à deux licences :

1. une pour des applications non commerciales, c'est-à-dire, par exemple, comme outil d'enseignement à l'Université. Celle-ci revient à 20,4 KF.
2. une autre, pour les applications commerciales, coûte 32,64 KF.

De plus, la formation est proposée pour un montant de 12,24 KF par personne. Le package de visualisation graphique est commercialisée à un coût de 8,16 KF.

3.4.7.12 Contacts

- Personne à contacter : bill.physik@csiro.dar.au
- Site internet : <http://www.dar.csiro.au/pub/programs/index.html>

3.4.8 Le modèle Flexpart

3.4.8.1 Présentation générale Le modèle Flexpart, créé en 1999 à l'institut de météorologie et de physique de l'université des sciences de l'agriculture à Vienne, est un modèle de dispersion des polluants, gaz et particules, récemment mis au point pour répondre à des situations d'urgence et pour des applications en recherche.

Il simule le transport à longue distance, la diffusion, les dépôts sec et humide et la décroissance radioactive des polluants dans l'air émis à partir de sources ponctuelles, linéiques, surfaciques ou volumiques.

Ce modèle est couplé à un modèle numérique de prévision du temps EMCWF.

3.4.8.2 Type de modélisation lagrangienne

3.4.8.3 Echelle d'application méso

3.4.8.4 Méthode numérique le modèle lagrangien est basé sur la méthode du Kernel. Cette méthode associe une quantité de substances à des particules.

3.4.8.5 Modélisation de la décroissance radioactive La décroissance radioactive est prise en compte en réduisant la masse des particules à chaque pas de temps.

3.4.8.6 Modélisation des dépôts humides Les dépôts humides sont modélisés par une fonction exponentielle décroissante de MacMahon et al. [27] corrigée par les facteurs de correction donnés par Hertel et al. [19] car les précipitations peuvent considérablement varier au dessus d'une zone couverte par une seule grille du maillage.

3.4.8.7 Modélisation des dépôts secs Les dépôts secs sont estimés à partir de la vitesse de déposition. Cette vitesse est calculée à partir de la méthode des résistances de Wesely et al. [50]. Dans le cas des particules, la vitesse dépend en plus de la vitesse de déposition gravitationnelle donnée par Slinn [41].

3.4.8.8 Modélisation de la turbulence Les profils de turbulence sont basés sur la paramétrisation de la couche limite (longueur de Monin-Obukhov). Les fluctuations turbulentes sont calculées par l'équation de Langevin.

3.4.8.9 Modélisation de la division des particules du modèle lagrangien Ce modèle tient compte de la division des particules. En effet, durant leur phase initiale de dispersion, les particules restent relativement proches les unes des autres et forment un nuage compact. Relativement peu de particules sont nécessaires pour simuler cette phase correctement. Cependant, peu de temps après, le nuage s'étend sur une zone beaucoup plus large. Beaucoup de particules sont alors nécessaires pour simuler la dispersion correctement. Pour économiser du temps lors des calculs pour des courts temps de transport mais néanmoins donner des résultats fiables pour des temps de transport longs, Flexpart permet à l'utilisateur de spécifier une constante de temps δT_s . Les particules sont divisées en 2 et chacune des parties pèsent alors la moitié de la masse de la particule initiale après un temps de transport égal à δT_s , et de même avec $2\delta T_s$.

3.4.8.10 Paramètres d'entrée

- La météorologie : Utilisation du pré-processeur météorologique EMCWF.
- La topographie et occupation des sols.
- Emissions : nombre d'espèces émises, caractéristiques de ces espèces, le début et la fin du rejet dans le temps, localisation de la source et son nom, hauteur de la source, le nombre de particules utilisé et la masse totale émise.

3.4.8.11 Résultats

- Champs de concentrations.
- Les champs de déposition bidimensionnels sont calculés sur le même domaine spatial. Déposition sèche et humide aussi bien que la déposition totale sont donnés séparément dans des fichiers de sortie.

3.4.8.12 Validation et limites Une étude de validation du modèle a été réalisée par Stohl et al. [45]. De bons résultats sont obtenus sous des conditions météorologiques perturbées. En effet, dans le cas de régions avec de forts gradients verticaux, Flexpart

donne de très bons résultats. Cependant, la résolution des champs météorologiques est trop faible pour représenter les variations des gradients verticaux à proximité de fronts. De plus, des nuages convectifs derrière des fronts froids peuvent souffler les traceurs en dehors de la couche limite atmosphérique.

L'évaluation du modèle est très sensible au choix de la méthode par laquelle les concentrations sont calculées. Par exemple, la méthode de Kernel avec des épaisseurs de bandes augmentant avec le temps de transport donnent de bons résultats. Par contre, la méthode de Kernel uniforme peut s'avérer moins précise.

3.4.8.13 Disponibilités Le code source de ce modèle, programmé en Fortran, et le manuel technique sont disponibles sur le site internet mentionné ci-dessus.

3.4.8.14 Contacts

- Site internet : <http://www.forst.unimuenchen.de/>

3.4.9 Le modèle Fluidyn Panache

3.4.9.1 Présentation générale Le modèle Fluidyn Panache, créé en 1994 par la société TRANSOFT INTERNATIONAL, est un code de simulation numérique d'écoulements atmosphériques et de dispersion des polluants à petite et moyenne échelle.

Panache est un code industriel qui permet d'étudier la dispersion atmosphérique de polluants gazeux ou particulaires, légers ou lourds, du radon (accumulation naturelle dans les mines et les vallées) mais aussi des odeurs (eaux usées). Ainsi, il peut déterminer les dimensions du panache que peut produire une cheminée, tracer les iso-courbes de taux de pollution des différents composés chimiques présents sur le domaine étudié ainsi que les champs de différentes grandeurs physiques.

Les applications du logiciel sont nombreuses :

- Qualité de l'air urbain.
- Construction des routes (pollution due à la circulation).
- Effets environnementaux dus au développement et/ou à la modification de sites industriels.

A échelle locale, il est possible d'évaluer les concentrations et les dépôts de polluants dus à la pollution atmosphérique d'une installation tout en tenant compte de l'évolution temporelle de l'émission et des conditions météorologiques. Ce modèle prend en considération les phénomènes météorologiques tels que la stratification atmosphérique, les gradients thermiques, la couche d'inversion, les directions du vent et son profil (uniforme, en puissance ou logarithmique), le rayonnement solaire et la couverture nuageuse.

PANACHE est conçu également pour des simulations d'évaluation d'impact, par exemple, dans le cas de feux de forêts ou d'une fuite provenant d'un réservoir contenant des produits dangereux.

Le code considère dans son calcul la dépendance de la dispersion des polluants par rapport à la topographie du lieu, à la nature du sol, aux paramètres météorologiques, aux paramètres définissant les sources de pollution.

Il tient compte de la chaleur et de la turbulence due au mouvement des véhicules. Les émissions sont basées sur l'intensité du trafic et les facteurs d'émission. Panache permet de simuler des sources continues qui émettent un débit permanent de polluants pendant une durée déterminée ou des sources instantanées qui émettent des bouffées de pollution en un point donné.

3.4.9.2 Types de modélisation eulérienne, lagrangienne (polluants particuliers) ou gaussienne (émissions ponctuelles sans obstacles pour un terrain plat avec une atmosphère homogène et une vitesse moyenne de vent constante)

3.4.9.3 Echelle d'application urbaine et méso

3.4.9.4 Méthode numérique Fluidyn Panache résout les équations de conservation de la matière, de la quantité de mouvement, de l'énergie et les équations du coefficient de transport par des approximations en volumes finis. La discrétisation se fait en temps dans un espace tridimensionnel et permet une approche des phénomènes transitoires et permanents.

Le maillage est défini automatiquement moyennant des paramètres qui permettent de resserrer les mailles suivant telle ou telle direction mais aussi autour des obstacles (courbes de niveau, bâtiments, cheminées...)etc. Les termes de convection sont résolus par un schéma implicite. Deux méthodes sont possibles :

- Schéma upwind (schéma centré d'ordre 1) appelé PARDON.
- Schéma de Van Leer d'ordre 2 appelé QSOU (Quasi Second Order Upwind).

Pour les conditions limites d'entrée, le flux diffusif est considéré comme nul. Pour les conditions limites de sortie, le flux diffusif est négligé. Conditions initiales : la contrainte de cisaillement à la paroi et le transfert de chaleur dans la couche limite sont évalués par la loi logarithmique, les vitesses normales et tangentielles sont nulles.

La solution implicite de diffusion et propagation de l'onde de pression est modélisée par la méthode SIMPLE.

3.4.9.5 Modélisation de la chimie et de la photochimie La modélisation de la chimie est réalisée par le module PANACHEM, un module de chimie atmosphérique. Les réactions photochimiques sont utilisées pour les déterminations d'ozone troposphérique.

3.4.9.6 Modélisations des dépôts secs et des dépôts humides de gaz ou de particules Un module pour les gouttes d'eau traversant un panache permet de prendre en considération les effets d'absorption et désorption des polluants par les gouttelettes. L'évaporation et les réactions chimiques avec les gaz sont également prises en compte. Il calcule la vitesse de déposition sèche des particules et le dépôt sec des particules à partir de la fonction densité de probabilité de leurs diamètres.

3.4.9.7 Modélisation de la turbulence Les différents types de modélisation qu'il est possible de choisir sont :

- Le modèle de k-diffusion qui est un modèle de longueur de mélange qui utilise les caractéristiques des échelles de turbulence atmosphérique (longueur de Monin-Obukhov) et qui est recommandé pour les terrains plats .
- Le modèle k- ϵ qui a été modifié pour inclure les effets de flottabilité et la condition de stabilité de l'atmosphère (nombre de Richardson) et qui est recommandé pour les écoulements autour d'obstacles.

3.4.9.8 Modèle de terrain Il permet de tenir compte de l'influence de la végétation car sa présence modifie la force de traînée et le dépôt sec de polluants.

3.4.9.9 Paramètres d'entrée

- La météorologie : vitesse et direction du vent à la hauteur où les mesures ont été effectuées, profil de température et de vitesse du vent (uniforme, logarithmique ou en puissance), couverture nuageuse, inversion thermique, stabilité, humidité et hauteur de mélange.
- Paramètres d'émission : nature des espèces polluantes (choix illimité d'espèces chimiques), définition des sources polluantes (ponctuelles, linéïques, surfaciques ou volumiques ; continues ou instantanées). Pour tous les types de source, la température de sortie et le débit du panache ainsi que la concentration de chaque polluant sont nécessaires. Pour les émissions provenant des routes, une estimation du trafic ainsi que des émissions provenant des véhicules sont nécessaires. Chaleurs spécifiques et masses moléculaires des espèces.
- Prise en compte de la topographie et du plan d'occupation des sols : bâtiments, champs, forêts, points d'eau, zones urbaines (utilisation d'un maillage structuré curviligne), définition de l'orientation, la longitude, l'altitude, le coefficient de rugosité du domaine.

3.4.9.10 Résultats

- Champs de grandeurs physiques (pression, composantes de la vitesse, température)
- Tracé des iso-courbes des taux de pollution des différents composés.

Les résultats peuvent sortir tels quels ou sous forme graphique. Un logiciel aidant à la préparation de rapport ou d'animation vidéo est inclus dans PANACHE.

3.4.9.11 Validation et limites La limite principale de ce code est que la dispersion de la pollution secondaire n'est pas simulée avec une grande précision. Par exemple, l'ozone est estimée avec une erreur de 20

3.4.9.12 Disponibilités L'installation de ce logiciel se fait sous environnement Unix ou encore sous environnement DOS. Le coût d'acquisition d'un tel logiciel peut s'élever entre 150 et 200 KF.

3.4.9.13 Contacts

– Site à contacter : <http://www.Fluidyn.com>

3.4.10 Le modèle CALPUFF

3.4.10.1 Présentation générale Le modèle CALPUFF est un outil de modélisation du transport de polluants, gaz (SO_2 , NO_x , O_3) et particules, dans l'atmosphère. La limite de validité en taille des particules solides est de l'ordre de $30 \mu m$ sans, pour autant, que cela soit une limite absolue.

Le code tient compte des sources ponctuelles (cheminée), surfaciques (zones industrielles), linéiques (voie de circulation) et mobiles. Le modèle CALPUFF permet aussi de simuler des scénarios d'accidents.

Il modélise le building downwash (modèle de Huber-Snyder détaillé dans Scire et al. [39] et modèle de Schulman-Scire détaillé dans Scire et al. [39]).

Le phénomène de building downwash s'explique de la manière suivante : les gaz chauds sortent du sommet des cheminées avec une vitesse verticale de l'ordre de $10 m.s^{-1}$, lorsque la vitesse moyenne du vent est identique. Si le vent est très fort ou la vitesse de sortie des fumées faible (c'est-à-dire si le rapport vitesse de sortie des fumées sur vitesse moyenne du vent est inférieur à 1) ou si l'écoulement du fluide porteur est très irrégulier, les tourbillons dans le sillage de la cheminée entraînent une partie de l'effluent. Un rapide mouvement vertical descendant se produit dans la région d'écoulement qui se situe derrière la cheminée et il peut être communiqué à une région similaire proche, plus étalée, derrière des constructions éventuelles. Ainsi, les effluents sont transportés au niveau du sol à des distances très proches de celles de la cheminée et avec des concentrations très élevées indésirables. Ce phénomène est appelé "aerodynamic downwash".

Il permet la modélisation de l'élévation du panache tout en considérant les effets du building downwash et la contrainte verticale du vent (Scire et Schuman [38]), les effets du stack-tip downwash (Briggs [9]), la pénétration partielle du panache dans une couche d'inversion élevée (Manins [26]).

Les effets de cisaillement de vent sont pris en compte. En effet, ils peuvent augmenter de manière considérable dans certaines conditions la croissance horizontale du panache.

Il peut modéliser la dispersion au dessus de l'eau, à proximité des côtes, le phénomène de fumigation (Hanna et al. [18]), l'odeur (loi de Turner), la visibilité (Scire et al. [39]), les périodes calmes (Scire et al. [39]).

Le système de modélisation CALPUFF permettant la réalisation de ces différentes fonctions est constitué de trois composantes principales :

1. Un logiciel de modélisation météorologique, CALMET.
2. Un modèle de dispersion à bouffée gaussienne, CALPUFF.
3. Un post-processeur, CALPOST, pour les champs de sortie.

3.4.10.2 Type de modélisation lagrangienne à bouffée gaussienne. La dispersion de la concentration est modélisée par une fonction densité de probabilité de type gaussien.

3.4.10.3 Echelle d'application urbaine et méso

3.4.10.4 Modélisations de la chimie et de la photochimie

- Un mécanisme de réaction chimique de pseudo premier ordre pour la conversion de SO_2 en SO_4^{2-} et de $\text{NO}_x(\text{NO}+\text{NO}_2)$ en NO_3^- basé sur le modèle de Scire et al. [39]
- Le schéma de Morris et al. [29] qui traite des procédés de conversion de NO et NO_2 en plus des conversions de NO_2 en NO_3 et de SO_2 en SO_4 avec l'équilibre entre le gaz HNO_3 et les aérosols de nitrate d'ammonium.
- Les taux de transformation pour des cycles de 24 heures. Cette option permet la simulation de comportement diurne, dépendant du temps des taux de transformation. Cependant, avec cette option, les taux de transformation sont uniformes dans l'espace.
- Pas de transformation chimique. Cette option est fournie pour pouvoir bypasser les calculs de transformations chimiques. Ceci réduit les calculs lors de situations où les effets de transformation chimique ne sont pas importants.

3.4.10.5 Modélisation de la déposition sèche pour les gaz Wesely et Hicks [50]

3.4.10.6 Modélisation de la déposition sèche pour les particules Slinn et Slinn [42] et Pleim et al. [37]

3.4.10.7 Modélisation des dépôts humides basée sur la formule de Maul (1980)

3.4.10.8 Modélisation de la turbulence La modélisation de la turbulence est réalisée par le logiciel CALMET. Les coefficients de dispersion gaussiens horizontaux et verticaux sont déterminés à partir de la mesure, à partir de la théorie de la similarité (longueur de Monin-Obukhov), à partir des coefficients de dispersion de Pasquill-Gifford en zone rurale et des coefficients de dispersion de McElroy-Pooler en zone urbaine ou à partir des coefficients de CTDM de manière à ce que les résultats soient le plus précis possible.

3.4.10.9 Simulations en terrain complexe Il prend en considération la conséquence de la complexité du terrain sur les concentrations au niveau du sol (Scire et al. [39]).

3.4.10.10 Paramètres d'entrée

- La météorologie : vent, température et densité de l'air, hauteur de la couche d'inversion, vitesse de frottement, longueur de Monin-Obukhov, taux et type de précipitation, humidité relative, rayonnement, fichiers maritimes, classe de stabilité, taux de turbulence, pression atmosphérique.
- La rugosité équivalente des sols, les courbes de niveau, la nature du profil vertical de vitesse du vent qui constituent la topographie.
- Dans le cas où les émissions sont de nature particulaire, le diamètre, la masse volumique, le nombre de Schmidt, la vitesse de sédimentation et la vitesse terminale de chute des particules solides constituent des données nécessaires.

3.4.10.11 Résultats

- Concentration de polluants.
- Flux sec.
- Flux humide.

Le logiciel CALPOST produit des tableaux qui résume les résultats de la simulation en identifiant, par exemple, la valeur la plus forte et la seconde valeur la plus forte de concentration moyennée sur trois heures. L'analyse des résultats peut se faire par des logiciels de visualisation 3D, tels que ACRPLOT et VISVD, logiciels commercialisés par la société ACRI en France. Cette même société commercialise CALMET, CALPUFF et CALPOST.

3.4.10.12 Validation et limites L'IWAQM a évalué le modèle CALPUFF en utilisant les données de traceurs recueillies lors de CAPTEX (voir [39]). Les résultats de cette évaluation ont montré que les performances de CALPUFF étaient meilleures que celles des modèles plus anciens (comme MESOPUFF par exemple). Le rapport de IWAQM en 1998 recommandaient l'utilisation des modèles CALMET et CALPUFF pour l'estimation de la dispersion des polluants dans le cas de contrôle de la qualité de l'air. L'agence de la protection de l'environnement des Etats-Unis propose le modèle CALPUFF pour des applications régulières impliquant le transport à longue distance et au cas par cas pour des applications à champ proche où les effets non stationnaires peuvent être importants (situation où les facteurs tels que la variation spatiale des champs météorologiques, vents calmes, la fumigation, la recirculation, la stagnation et les effets des terrains et à proximité des côtes) peuvent être importants.

3.4.10.13 Disponibilité En ce concerne le coût du code programmé en Fortran, celui-ci est du domaine public tandis que les packages de visualisation sont soumis à une licence.

3.4.10.14 Contacts

- Personne à contacter : rebours@airpl.org
- Site internet : <http://www.src.com>

Les modèles présentés dans les paragraphes suivants sont gaussiens ou quasi-gaussiens. Ils ont cependant été maintenus car certains éléments présentés peuvent constituer une source d'informations intéressantes vis à vis de l'objectif visé par ce travail.

3.4.11 Le modèle ISCST3

3.4.11.1 Présentation générale Le modèle ISCST3 (Industrial Source Complex Short Term Model) permet de modéliser de nombreux types de sources se trouvant sur les sites industriels, notamment les sources ponctuelles (cheminées) en considérant les effets possibles du downwash dus à de proches constructions, les sources linéaires (tapis roulants, rails), les sources surfaciques d'émissions fugitives (tas de stockage, dépôts), les sources volumiques (bouche d'aération à sorties multiples, building roof monitor) et les sources à puits ouvert (surface des mines de charbon, carrière de pierres).

Il modélise le rejet de polluants primaires, gazeux et particulaires (de toutes tailles).

Il permet la modélisation de l'élévation du panache par la prise en compte des flux "buoyant" et de moment (relations de Briggs citées dans Scire et al. [39]), des effets du building downwash (Scire et Schuman [38]), des effets du stack-tip downwash (Briggs [9]).

Il modélise le building downwash (modèle de Huber-Snyder détaillé dans Scire et al. [39] et modèle de Schulman-Scire détaillé dans Scire et al. [39]), la pénétration partielle du panache dans une couche d'inversion élevée.

Le modèle peut être appliqué en conditions de vents calmes tandis que la composante verticale de la vitesse du vent est supposée nulle.

3.4.11.2 Type de modélisation gaussienne

3.4.11.3 Echelle d'application urbaine et meso

3.4.11.4 Modélisation de la chimie par un terme exponentiel décroissant

3.4.11.5 Modélisation des dépôts humides de gaz et de particules à partir du taux de lavage déterminé par Scire et al. [39]

3.4.11.6 Modélisation des dépôts secs de particules à partir du modèle de résistance et par l'algorithme de déposition sèche de Pleim et al. [37]

3.4.11.7 Modélisation de la turbulence Les coefficients de dispersion gaussiens horizontaux et verticaux sont déterminés à partir des coefficients de dispersion de Pasquill-Gifford en zone rurale et des coefficients de dispersion de McElroy-Pooler en zone urbaine. Pour les sources volumiques, les dimensions initiales latérales et

verticales ainsi que la présence des constructions, qui peut entraîner une augmentation de la croissance initiale des panaches de cheminées, est prise en compte.

3.4.11.8 Modèle de terrain complexe algorithme de terrain complexe (COMPLEXE1)

3.4.11.9 Paramètres d'entrée

- Météorologie : vitesse de frottement, longueur de Monin-Obukhov calculées par le préprocesseur météorologique qui donne la classe de stabilité toutes les heures, la vitesse et direction du vent, la température et la hauteur d'inversion, rugosité de surface, type (liquide ou solide) et taux de précipitation, hauteur d'inversion.
- Topographie : maillage du terrain (en option, utilisé pour déterminer l'élévation du terrain à des distances variées le long du trajet du panache).
- Emissions : localisation, débit, hauteur et diamètre intérieur des cheminées, vitesse et température de sortie des fumées, en option hauteur de la source, dimensions des constructions et diamètre moyen en masse, densité des particules, fraction massique pour chaque catégorie modélisée ainsi que la vitesse de déposition correspondante.

3.4.11.10 Résultats

- Estimation de la concentration ou de la déposition pour chaque combinaison source-récepteur et pour chaque heure où des données météorologiques sont entrées. Calcul des moyennes à court terme pour les temps sélectionnés ou sur la période entière où des données météorologiques ont été entrées.
- Les valeurs de concentration ou de déposition la plus forte et la deuxième plus forte sont regroupées dans des tableaux.
- Pour la déposition, soit le flux sec, soit le flux humide, soit le flux total peuvent être estimés.

3.4.11.11 Validation et limites Le modèle ne tient pas compte du phénomène de recirculation entre deux constructions. Les calculs ne sont pas possible pour des distances source-récepteur inférieures à 1 m ou pour des positions trop proches des constructions. Le phénomène de fumigation n'est pas pris en compte.

3.4.11.12 Disponibilité Ce modèle, programmé en Fortran, est en libre accès sur le site internet mentionné ci-dessous.

3.4.11.13 Contacts

- Site internet : <http://www.search.epa.gov/scram001/index.htm>

3.4.12 Le modèle AEROPOL

3.4.12.1 Présentation générale Le modèle AEROPOL est un modèle de dispersion gaussien qui permet de calculer les concentrations de polluant gazeux (SO_2 , CO, NO_x) ou particulaires ainsi que les flux de déposition sec et humide à échelle locale ou régionale (jusqu'à 100 Km).

La dépendance des paramètres d'émission par rapport à la hauteur est prise en compte. Les calculs pour une distribution climatologique variée sont possibles. Ce modèle décrit assez bien les niveaux de pollution pour des conditions météorologiques variées et pour des conditions variées de trafic.

Ce modèle est utilisé dans le cadre du contrôle de la qualité de l'air urbain, de la recherche scientifique ou de stratégies de développement.

Les sources de polluants considérées sont ponctuelles, linéiques ou surfaciques. L'altitude du lieu et la géographie urbaine sont prises en compte. Les données météo peuvent provenir de n'importe quelle base de données.

3.4.12.2 Type de modélisation gaussienne

3.4.12.3 Résolution spatiale La grille de résolution va en général de 50 à 100 m.

3.4.12.4 Paramètres d'entrée

- La météorologie : vitesse du vent à 10 m, température à 2 m, précipitations, couverture nuageuse, date et période (données qui permettent de définir la classe de stabilité atmosphérique).
- Paramètres d'émission : La position en coordonnées cartésiennes de la source de polluants, la hauteur de la source, le diamètre d'ouverture du conduit expulsant les particules, la température, le débit, la vitesse des gaz, la vitesse de déposition, la densité des particules et leur diamètre.
- Topographie : les données géométriques sur les constructions et autres obstacles proches de la source.

3.4.12.5 Résultats Concentrations et zones de déposition des polluants ou des flux de déposition humide, sec ou total. Le choix se pose entre une présentation des résultats sous forme de fichiers de données ou sous forme d'image de type bitmap.

3.4.12.6 Validation et limites La nature gaussienne du modèle semble constituer une limite importante. Le modèle AEROPOL s'applique au mieux à des villes de taille moyenne. De plus, les réactions chimiques ne sont pas modélisées.

3.4.12.7 Disponibilités Le coût n'est pas précisé car il dépend de l'étude que l'on souhaite mener. Le prix est basé sur le transport, l'installation et la personnalisation du logiciel et la formation des utilisateurs du logiciel.

3.4.12.8 Contacts

- Personne à contacter : marko@apollo.aai.ee
- Site internet : <http://aix.meng.auth.gr/database/>

3.4.13 Le modèle ADMS

3.4.13.1 Présentation générale Le modèle ADMS (Atmospheric Dispersion Modelling System), créé en 1998 par un groupe de recherche de Cambridge, permet d'évaluer et de prévoir la qualité de l'air urbain en tenant compte du trafic routier, des émissions domestiques et industrielles. Il réalise des modélisations de terrains complexes, il tient compte de l'influence des constructions, de la dispersion à proximité des côtes et des problèmes d'odeur. Les polluants modélisés sont NO₂, SO₂, PM10 et COV.

Le système ADMS-Urban a été mis en place pour des applications dans les domaines du transport et des stratégies de développement économique.

ADMS peut calculer les concentrations de 10 polluants simultanément. De plus, jusqu'à 4000 sources peuvent être modélisées en même temps. Les différentes sources prises en compte sont :

- Les routes et les trafics associés ainsi que les catégories de véhicules lourds. (sources linéiques)
- Les grilles de source, provenant de l'inventaire national des émissions atmosphériques (sources surfaciques)
- Les sources industrielles (sources ponctuelles avec prise en compte de l'élévation du panache)

3.4.13.2 Type de modélisation quasi-gaussienne. Les distributions de concentration sont gaussiennes en conditions stables et neutres, mais la distribution verticale est non gaussienne en conditions convectives afin de prendre en considération la structure oblique de la composante verticale de la turbulence.

3.4.13.3 Echelles d'application méso, urbaine et canyon street. Le modèle de canyon street est basé sur le modèle OSPM (Berkowicz et al. [4]) et il concerne les polluants dus au trafic et émis à partir de routes confinées entre des constructions.

3.4.13.4 Résolution spatiale et temporelle Le modèle ADMS a une forte résolution spatiale, il prend en compte les émissions provenant des routes de manière très détaillée. Le modèle est indépendant du temps. Le temps CPU est très court. Il est de quelques secondes pour une ligne de données et de quelques heures pour les moyennes annuelles.

3.4.13.5 Modélisation de la chimie et de la photochimie La modélisation est réalisée par un ensemble de réactions génériques (Venkatram et al. [47]). Ce modèle permet la prévision des smogs photochimiques.

3.4.13.6 Modélisation de la déposition La déposition et le lavage sont basés sur la vitesse de déposition et coefficients de washout.

3.4.13.7 Modélisation de la turbulence Les profils de turbulence sont basés sur la paramétrisation de la couche limite (longueur de Monin-Obukhov).

3.4.13.8 Paramètres d'entrée

- La météorologie : vitesse et direction du vent, date, heure, température et couverture nuageuse ou vitesse du vent, flux de chaleur à la surface et hauteur de la couche limite. Les paramètres de la couche limite sont calculées par le pré-processeur météorologique à partir des données d'entrée.
- Les paramètres d'émission : localisation de la source, débit de l'émission, température des fumées, hauteur et diamètre de la cheminée, facteurs d'émission qui permettent le calcul des émissions provenant du trafic à partir du débit des véhicules.
- Topographie : hauteur et rugosité du terrain, hauteurs des canyon streets, largeur et localisation des routes.

3.4.13.9 Résultats

- Concentrations moyennes des polluants pour des temps moyens allant de 10 min à un an ou plus
- Dépôts sec et humide.
- Variables météorologiques standards

Pour faciliter l'entrée des données et la présentation des résultats, le logiciel comprend le GIS. Ceci permet l'analyse géographique des résultats donnés par le modèle en vue de déterminer l'exposition de la population à la pollution et l'impact environnemental.

3.4.13.10 Validation et limites La validation du modèle n'est pas complète puisqu'il existe des incertitudes inhérentes au modèle ou aux mesures disponibles. Le modèle a des limitations en cas de conditions de vent calme ou de changement de temps trop rapide. Cependant, il a été utilisé pour l'évaluation de la qualité de l'air dans le cas de 10 grands chantiers mis en place en Grande-Bretagne à Londres. Il est également utilisée dans les villes de Birmingham, Budapest et Rome. Ce modèle a également servi à prévoir la qualité de l'air lors de la construction d'un nouveau stade, de complexes commerciaux ou de stations service.

3.4.13.11 Disponibilités Ce modèle, mis en œuvre sous Windows NT, est facile d'utilisation pour une personne ayant l'habitude de travailler sur un PC. Le prix de ce modèle est compétitif, et il semble qu'il soit plus faible que celui d'autres systèmes comparables.

3.4.13.12 Contacts

- Personne à contacter : David.Carruthers@cerc.co.uk
- Site internet : <http://www.cerc.co.uk>

3.5 Comparaisons

Afin de synthétiser l'ensemble des descriptions ci-dessus, un tableau comparatif des différents modèles est mis en forme.

Les points jugés essentiels à une comparaison des différents modèles, c'est-à-dire l'échelle, le type de modélisation et les limites du modèle sont donc regroupés.

Ce tableau permet par une rapide lecture de connaître les caractéristiques essentielles de chaque modèle et de pouvoir choisir celui qui serait le plus susceptible de répondre aux besoins. En effet, les éléments de comparaison sont :

- L'échelle du modèle § 3.3.1 à la page 11. Ce premier critère est essentiel car il permet à l'utilisateur de faire une première sélection définitive selon la taille du domaine qu'il désire étudier.
- Le type de modélisation § 3.2.3 à la page 11
- Les limites du modèle. Cet élément comparatif permet à l'utilisateur de connaître les phénomènes qui ne sont pas modélisés ou les faiblesses de chaque code. Ainsi, en fonction de ses objectifs, il choisira le code le plus adapté.

Tableau 2 . *Tableau comparatif des différents modèles*

NOM	ECHELLE	TYPE	LIMITES
Drag&Fly Air	· meso · urban · street canyon	· E	· <i>particules très grosses</i> · <i>modèle de réenvol de particules pesantes à valider</i> · <i>gamme de temps traitée limitée</i> · <i>approche diphasique en cours de développement</i>
ARIA Regional	· meso	· E	
ARIA Local	· urban	· E	
SUBMESO	· meso · urban	· E	· <i>chimie nocturne non modélisée</i> · <i>rayonnement non modélisée</i> · <i>dépôt sec en cours d'intégration</i>
UAM-V	· meso	· E	· <i>chimie en phase aqueuse et hétérogène fondamentale pour les aérosols non simulées</i>
Suite du tableau page suivante...			

NOM	ECHELLE	TYPE	LIMITES
			<ul style="list-style-type: none"> • résolution spatiale limitée • modélisation des particules en cours d'introduction
OPANA	<ul style="list-style-type: none"> • meso • urban 	• E	<ul style="list-style-type: none"> • chimie de l'aérosol et condensation <i>en cours de modélisation</i> • <i>modélisation des particules en cours d'introduction</i>
LADM	<ul style="list-style-type: none"> • meso • urban 	• L	<ul style="list-style-type: none"> • précipitations <i>non modélisées</i> • chimie non modélisée • aucune étude réalisée avec PM10
FLEXPART	• meso	• L	<ul style="list-style-type: none"> • évaluation sensible au choix de la méthode de calcul des concentrations • moins précis en présence de fronts • les performances du modèle sont moins bonnes pour des périodes supérieures à 117 h. • la variation de la hauteur d'inversion doit être prise en compte.
PANACHE	<ul style="list-style-type: none"> • meso • urban 	• L	• <i>Moins précis pour la pollution secondaire</i>
CALPUFF	<ul style="list-style-type: none"> • meso • urban 	• L B.G.	• moins précis que modèle de type E
ISCST3	<ul style="list-style-type: none"> • meso • urban 	• L	<ul style="list-style-type: none"> • recirculation entre 2 constructions non modélisée • fumigation <i>non modélisée</i> • pour des distances trop proches des constructions : <i>calculs impossibles</i>
AEROPOL	<ul style="list-style-type: none"> • meso • urban 	• G	• moins précis car G
ADMS-urban	<ul style="list-style-type: none"> • meso • urban • street canyon 	• Q.G	<ul style="list-style-type: none"> • <i>résultats incertains en conditions de vent calme</i> • <i>effets d'un changement de temps trop rapide mal captés</i>

4 Conclusion

Ce qui a tout d'abord été constaté dans cette étude est, finalement, l'existence de peu de codes permettant la modélisation correcte de la dispersion des particules en zone urbaine.

Seuls les modèles Drag&Fly Air et ARIA Local ont été créés à cette fin. SUBMESO, lui, est adapté à la modélisation en zone urbaine mais n'est pas encore opérationnel pour des applications avec des particules.

Les codes UAM-V et OPANA sont seulement en train d'intégrer les polluants particulaires dans leur modélisation, de plus, le modèle UAM-V a une résolution spatiale telle qu'elle ne permet pas de modéliser correctement les phénomènes spécifiques aux zones urbaines. Il en est de même pour le modèle Flexpart qui ne réalise des simulations qu'à méso-échelle ou pour le modèle Fluidyn Panache dont la faiblesse est son maillage.

Le modèle LADM n'a, quant à lui, encore jamais été appliqué dans le cas où les polluants sont des particules tandis que le modèle CALPUFF est particulièrement intéressant lorsque les émissions sont de nature industrielle. Les autres modèles de type gaussien simulent bien la dispersion des particules en zone urbaine mais donnent des résultats peu précis.

D'après le classement obtenu et les descriptions des différents codes, une modélisation de type eulérien semble la plus adaptée à notre problème.

En effet, contrairement aux modèles lagrangiens qui s'appuient sur la théorie K pour paramétrer les flux turbulents, elle utilise des modèles de turbulence évolués capables de prendre en compte, de manière plus précise les couplages dynamique-thermique.

Quant à l'approche gaussienne, elle ne considère aucune hétérogénéité que ce soit pour l'écoulement, la turbulence ou le sol. Cependant, même si les résultats donnés par ce type de code sont souvent éloignés des concentrations réelles mesurées, ils ont toujours été très attrayants à cause de leur facilité d'utilisation et de leur faible coût. De plus, de par la rapidité des résultats donnés, ils peuvent fournir des résultats pour une première estimation.

Récemment, des modèles plus avancés que les modèles gaussiens, comme par exemple les modèles dont le type de modélisation est lagrangienne à bouffée gaussienne, ont été développés et fournissent des résultats satisfaisants pour des coûts qui ne sont pas prohibitifs comparés à ce qui aurait pu être dans le passé.

En somme, une combinaison des différents types de modélisations selon le type de résultats et de simulation demandés semble être la meilleure solution pour donner des résultats précis. C'est notamment pour cela que la modélisation lagrangienne à bouffée gaussienne est en cours d'introduction dans le modèle Drag&Fly Air.

Nomenclature

Lettres latines

A_f	Nombre correspondant au rapport d'une force de frottement sur le poids d'une particule	$m.s^{-2}$
C	Concentration moyenne de polluant	$kg.m^{-3}$
C_D	Coefficient de traînée	
C_{sol}	Concentration moyenne de polluant au niveau du sol	$kg.m^{-3}$
D_p	Diamètre des particules	m
D_{pref}	Diamètre de référence	m
\widetilde{D}_p	Diamètre sans dimension	m
F_{Di}	Flux au sol de dépôt sec	$kg.m^{-2}.s^{-1}$
F_i	Flux par saltation	$kg.m^{-2}.s^{-1}$
g	Accélération de la pesanteur	$m.s^{-2}$
L_{MO}	Longueur de Monin-Obukhov qui est utilisée pour déterminer une échelle d'altitude afin que les variations verticales de grandeurs soient mises en forme standard	m
R_a	Résistance aérodynamique	$s.m^{-1}$
R_b	Résistance de la couche de surface laminaire	$s.m^{-1}$
R_c	Résistance de surface	$s.m^{-1}$
S	Terme source/puits de polluants	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
S_{Chimie}	Terme source/puits dû aux transformations chimiques	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
$S_{DptHumide}$	Terme source/puits issu du lessivage par l'eau de pluie	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
S_{DptSec}	Terme source/puits issu du sol (dépôt sec et remise en suspension dans l'air)	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
$S_{Emission}$	Terme source/puits de flux par saltation	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
$S_{Part.}$	Terme advectif qui exprime l'entraînement à l'émission	$kg.m^{-3}.s^{-1}$
Sc_T	Nombre de Schmidt turbulent	
U_j	Vitesse moyenne de l'écoulement	$m.s^{-1}$
u^*	Vitesse de frottement	$m.s^{-1}$
$\overline{u'_i c'}$	Flux turbulent de polluant dans la direction x_i	$kg.m^{-2}.s^{-1}$
u_{τ^*}	Vitesse de frottement à la limite d'envol	$m.s^{-1}$
\widetilde{u}_{τ^*}	Vitesse de frottement à la limite de l'envol sans dimension	$m.s^{-1}$
$u_{\tau ref}$	Vitesse de frottement de référence	$m.s^{-1}$
V_D	Vitesse de déposition	$m.s^{-1}$

V_i	Vitesse moyenne des particules	m.s^{-1}
V_{si}	Vitesse de saltation-traînée	m.s^{-1}
x	Abcisse	m
y	Ordonnée	m
z	Hauteur	m
z_0	Longueur de rugosité	m

Lettres grecques

β_m	Paramètre ≈ 5	
γ_p	Gravité apparente	m.s^{-2}
θ'	Fluctuation de température	degré
θ^*	Echelle caractéristique de température	degré
κ	Constant de von Karman ≈ 0.4	
ζ_{MO}	Paramètre de stabilité	
μ	Viscosité dynamique	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
μ_T	Viscosité dynamique turbulente	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
ρ	Masse volumique du fluide	kg.m^{-3}
ρ_p	Masse volumique des particules	kg.m^{-3}
ν	Viscosité cinématique	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
τ	Taux de cisaillement	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-2}$
Θ_r	Température de référence de l'atmosphère considérée (état adiabatique et hydrostatique de l'atmosphère)	degré

Glossaire

ADSO	Système d'analyse de la dispersion atmosphérique
AIRQUAL	Modèle de type eulérien 3D décrivant les phénomènes de transport par les vents et la diffusion turbulente des espèces dans l'atmosphère, il est associé à un solveur d'équations chimiques du type Gear
ALPES	Atelier Logiciel Prototype Extensible pour Submeso
ASTUCE	Analyse Statistique des Tissus Urbains et Cartographie Environnementale : logiciel permettant de réaliser des cartes de rugosité
CAMx	Système de modélisation de la photochimie et de la dispersion atmosphériques des polluants particulaires
CERMA	Centre de Recherche Méthodologique en Architecture
CHIMERE	Modèle de simulation et de prévision de la pollution photo-oxydante en milieu urbain
CTDM	Complex Terrain Dispersion Model
CORINAIR90	Coordination de l'Information sur l'Environnement dans le domaine de l'Air : inventaire développé pour répondre aux besoins d'information sur l'état des émissions atmosphériques au niveau communautaire. Il concerne 8 polluants (SO ₂ , NO _x , COV hors méthane, CH ₄ , CO, CO ₂ , N ₂ O, NH ₃) et 29 pays. Cet inventaire très détaillé prend en compte plus de 500 types d'émetteur incluant 350 sources étudiées spécifiquement et une résolution géographique correspondant au département.
CORINE Land Cover	Programme géré par l'Agence Européenne de l'Environnement à Copenhague. Il consiste en un inventaire de l'occupation biophysique des sols. Il permet de représenter la diversité et les contrastes de l'occupation des terres.
E	Eulérien
ECMWF	Centre européen pour les prévisions météorologiques à moyenne échelle
G	Gaussien
GIS	Gestion Informatique de Sociétés
HERMES	Code météorologique à moyenne échelle
IGN	Institut Géographique National
IRIN	Institut de Recherche en Informatique de Nantes
ISC	Industrial Source Complex
IWAQM	Interagency Workgroup on Air Quality Modeling. Ce groupe est le représentant de l'agence de la protection de l'environnement, du service de la forêt, du service du parc national, du service de la pêche et de la nature des Etats-Unis.
JRC-ISPRA	Joint Research Center : un des huit laboratoires de recherche scientifique et technique de l'union européenne située à Ispra en Italie
L	Lagrangien
L B.G	Lagrangien à bouffée gaussienne

- MERCURE** Modèle météorologique à moyenne échelle pour déterminer les champs de vents, les coefficients de diffusion turbulente et d'autres paramètres météorologiques. C'est un modèle 3D à échelle régionale qui prend en compte les différentes configurations de sol et les zones de densité urbaine. Il comprend un système complet de paramètres physiques correspondant à des situations de ciel dégagé.
- MINERVE** Modèle 3D de calcul du vent en terrain complexe
- Q.G.** Quasi-Gaussien
- RAMD** Regional Acid Deposition Model
- SATURN** Studying Atmospheric Pollution in Urban Areas
- SAVI3D** Scientific Application, Visualization, and Initialization, logiciel créé par la société Aria Technologies permettant la visualisation et l'analyse de données environnementales.
- TECPLOT** Logiciel orienté mécanique des fluides permettant le tracé de graphique.
- TRAPU** Base de données numériques 3D permettant le calcul des indicateurs de rugosité qui constituent les conditions aux limites du domaine de calcul des écoulements aérodynamiques

Références

- [1] B. Abart. *Modélisation de la turbulence en écoulements stratifiés stables pour la couche limite atmosphérique*. Thèse de Doctorat, Ecole centrale de Nantes et de l'univ. de Nantes, 1999.
- [2] B. Abart. Transport diffusion de particules pesantes dans drag&fly air. Communication privée, Avril 2000.
- [3] B. Aumont. *Modélisation de la chimie de basse troposphère continentale : Développement et tests d'un modèle chimique condensé*. Thèse de Doctorat, Univ. Paris VII, 1994.
- [4] R. Berkowitz, O. Hertel, N.N. Sorensen, et J.A. Michelsen. Modelling air pollution in urban areas. Dans *Proc. IMA Conference on Flow and dispersion Trough Groups of Obstacles*.
- [5] M. Bottema. Parametrization of aerodynamic roughness parameters in relation with air pollutant removal efficiency of streets. *Air Pollution III, Comp. Mechanics*, (2):235–242, 1995.
- [6] R. Bouscaren, C. Veldt, et K.H. Zierock. Corine : Emission inventory project. Rapport d'étude, Final report. Contract 6614-85-02, European Communities, 1986.
- [7] R. Boustani et S. Peltier. Inventaire et domaine d'application des modélisations de dispersion des polluants atmosphériques. Rapport d'étude, Ecole des Mines de Douai, 1990.
- [8] G.A. Briggs. Some recent analyses of plume rise observations. Dans H.M. Englund et W.T. Berry. Academic Press, éditeurs, *Proc. of the Second International Clean Air Congress*.
- [9] G.A Briggs. *ATOL*, (79), 1973.
- [10] J.A. Businger et S.P. Arya. *Height of the Mixed Layer in the Stably Stratified Planetary Boundary Layer. Advances in Geophysics*, volume 18. F.N. Frankiel and R.E. Munn (Eds.), Academic Press.
- [11] J. Edy et S. Cautenet. Paramétrisation des dépôts secs pour des modélisations à méso-échelle. *Note de l'Observatoire de Physique du globe de Clermont-Ferrand*, (133), 1995.
- [12] E. Federovich. *J. applied Meteor.*, (34):1916–1928, 1995.
- [13] J.M. Foucaut. *Etude théorique et expérimentale des phénomènes d'envol et de saltation de particules dans une couche limite turbulente*. Thèse de Doctorat, Univ. des Sciences et Technologies de Lille, 1994.
- [14] J. Gandemer et A. Guyot. *La protection contre le vent*. Centre Scientifique et Technique du Bâtiment, 1981.
- [15] M. Germano, U. Promelli, P. Moin, et W. Cabbot. Parametric study of selective removal of atmospheric aerosol by below cloud scavenging. *Phys.Fluids*, pages 1760–1765, 1991.
- [16] M.W. Gery, G.Z. Whitten, J.P. Killus, et M.C. Dodge. A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modelling. *Journal of Geophysical Research*, pages 12925–12956, 1989.

- [17] E. Guilloteau, P. G. Mestayer, et J.-F. Sini. Simulation of the urban surface boundary layer. Dans *Proceedings ENPC-INRIA: First Air Pollution Modelling And Simulation*, pages 243–251, Octobre 1998.
- [18] S.R. Hanna, L.L. Sculman, R.J. Paine, J.E. Pleim, et M. Baer. Development and evaluation of the offshore and coastal dispersion model. *JAPCA*, (35):1039–1047, 1985.
- [19] O. Hertel, J. Christensen, E.H. Runge, W.A.H. Asman, R. Berkowicz, M.F. Hovmand, et O. Hov. Development and testing of a new variable scale air pollution model - acdep. *Atmos. Environ.*, (29):1267–1290, 1995.
- [20] G.M. Johnson. A simple model for predicting the ozone concentration of ambient air. Dans *Proceedings of 8th International Conference of the Clean Air Society of Australia and New Zealand*, volume 2, pages 715–731, 1984.
- [21] G.M. Johnson et S.M. Quigley. A universal monitor for photochemical smog. Dans *Proceedings of the 82nd Annual Meeting, Air and Waste Management Association, Anaheim, U.S.A*, 1989.
- [22] R.G. Lamb et al. Continued research in mesoscale air pollution simulation modeling-vol vi : Further studies in the modelling of microscale phenomena. Rapport d'étude, Report Number EF77-143. Systems Applications, San Rafael, CA, 1977.
- [23] S. Laslandes. *Transport de particules solides par un écoulement atmosphérique. Approche numérique et expérimentale*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Nantes et CSTB, 1998.
- [24] Laval. Etude des particules en suspension dans l'air sur l'agglomération rouennaise. Rapport d'étude, Report Number EF77-143. Systems Applications, 2000.
- [25] M.K. Liu et al. The chemistry, dispersion, and transport of air pollutants emitted from fossil fuel power plants in california : Data analysis and emission impact model. Rapport d'étude, Systems Applications, San Rafael, CA, 1976.
- [26] P.C. Manins. Chimney plume penetration of the sea-breeze inversion. *Atmospheric Environ.*, (18):2339–2344, 1984.
- [27] T.A. McMahon et P.J. Denison. Empirical atmospheric deposition parameters - a survey. *Atmos. Environ.*, (13):571, 1979.
- [28] D. P. Moon et J. R. Donald. Uk research programme on the characterisation of vehicle particulate emissions. Dans *Harwell, UK: ETSU-R98, ETSU*, volume 156 of 90, 1997.
- [29] R.E. Morris, R.C. Kessler, S.G. Douglas, K.R. Styles, et G.E. Moore. *Rocky Mountain Acid Deposition Model Assessment: Acid Rain Mountain Mesoscale Model (ARM3)*. U.S. Environmental Protection Agency, Atmospheric Sciences Research Laboratory, Research Triangle Park, NC, 1988.
- [30] G. Mouvier. *La pollution atmosphérique*. Flammarion, 1994.
- [31] Collectif Météo-Glénans. *Le temps qu'il fera*. Seuil, 1976.
- [32] Jacobson M.Z. et Turco R.P. Smvgear : A sparse matrix vectorized gear code for atmospheric models. *Atmospheric Environment*, (28):273–284, 1994.
- [33] P.J. Garcia Nieto, B. Arganza, J.M. Fernandez Diaz, et M.A. Rodriguez Brana. Parametric study of selective removal of atmospheric aerosol by below-cloud scavenging. *Atmospheric environment*, 28, 1994.

- [34] O.Métais et M. Lesieur. *J. Fluid. Mech.*, 239:157–194, 1992.
- [35] T. Pakkanen, C. Ojanen, R. Hillamo, P. Aarnio, T. Koskentalo, et W. Maenhaut. Atmospheric particulate matter in urban environments. Rapport d'étude, Studying Atmospheric Pollution in Urban Areas, 1998.
- [36] S. Perego et M. Junier. The influence of heterogeneous processes onto the urban atmosphere. Rapport d'étude, Studying Atmospheric Pollution in Urban Areas, 1998.
- [37] J. Pleim, A. Venkatram, et R.J. Yamartino. *ADOM/TADAP model development program. Volume 4. The dry deposition model*. Ontario Ministry of the Environment, Rexdale, Ontario, Canada, 1984.
- [38] J.S. Scire et L.L. Schulman. Modeling plume rise from low-level buoyant line and point sources. Dans *Proceedings Second Point Conference on Applications of Air Pollution Meteorology*. New Orleans, LA, 133-119, 24-28 Mars 1980.
- [39] J.S. Scire, D.G. Strimaitis, et R.J. Yamartino. *A user's Guide for the CALPUFF Dispersion Model (Version V)*. Earth Tech, Inc., 2000.
- [40] J.-F. Sini et P. G. Mestayer. Traffic-induced urban pollution : A numerical simulation of street dispersion and net production. Dans *Proceedings : Air Pollution Modelling And its application 12, Clermont-Ferrand*, pages 369–377, Juin 1997.
- [41] Slinn. Predictions for particle deposition to vegetative canopies. *Atmos. Environ.*, (16):1785–1794, 1982.
- [42] S.A. Slinn et W.G.N. Slinn. Predictions for particle deposition on natural waters. *Atmospheric Environ.*, (14):1013–1016, 1980.
- [43] W.G.N. Slinn, L. Hasse, B.B. Hicks, A.W. Hogan, D. Lal, P.S. Liss, K.O. Munnich, G.A. Sehmel, et O. Vittori. Some aspects of the transfer of atmospheric trace constituents past the air-sea interface.
- [44] R. S. Sokhi, A. Tremper, L. Luhana, et A. Burton. Measurement of fine particulates in an urban location. Rapport d'étude, Studying Atmospheric Pollution in Urban Areas, 1998.
- [45] A. Stohl, M. Hittenberger, et G. Wotawa. Validation of the lagrangian particle dispersion model flexpart against large scale tracer experiment data. *Atmos. Environ.*, in press, 1998.
- [46] A. Tannièrè. *Etude du comportement de particules solides au sein d'une couche limite turbulente*. Thèse de Doctorat, Univ. de Valenciennes, 1996.
- [47] A. Venkatram, P. Karamchadani, et R. Goldstein. The development and application of simplified ozone modelling system. *Atmos. Environ.*, 28(22):3665–3678, 1994.
- [48] E. Vignati, R. Berkowicz, F. Palmgren, E. Lyck, et P. Hummelshoj. Transformation of size distributions of emitted particles in streets. *The Science of the Total Environment*, 235:37–49, 1999.
- [49] M.L. Wesely. Parametrization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models. *Atmos. Environment*, 23:1293–1304, 1989.
- [50] M.L. Wesely et B.B. Hicks. Some factors that affect the deposition rates of sulfur dioxide and similar gases on vegetation. *J. Air Poll. Contr. Assoc.*, 27:1110–1116, 1977.

[51] D. Zmirou. Les aérosols et particules. *Pollution atmosphérique*, 157:XI–XIII, 1998.

- <http://web.mit.edu/igac/www/> (site de l'IGAC)
- <http://aix.meng.auth.gr/lhtee/saturn.htm> (site SATURN)
- <http://www.gsf.de/eurotrac/>
- http://www.mi.uni-hamburg.de/technische_meteorologie/
- <http://aix.meng.auth.gr/>
- <http://www.epa.gov/>
- <http://www.csir.co.za/>

1 Questionnaire envoyé aux centres de surveillance de la qualité de l'air