

# **Modélisation des aérosols organiques du naphthalène en zone urbaine**

## **CONTEXTE :**

La pollution atmosphérique est le premier facteur de risque environnemental pour la santé humaine avec un bilan considérable sur la morbidité (World Health Organisation, 2021). Une grande partie de ces impacts est attribuée à l'exposition aux particules (PM2.5). La toxicité des particules varie selon les composés des particules et les gaz précurseurs. Les composés organiques peuvent avoir des niveaux de toxicité importants, influençant fortement le potentiel oxydant des particules. Parmi ces composés, les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAPs) sont générés pendant la pyrolyse ou la combustion incomplète de matières organiques. Ces procédés comprennent l'incinération des déchets agricoles, la combustion du bois, du charbon ou des ordures ménagères mais également le fonctionnement des moteurs à essence ou des moteurs diesels.

Pour mieux comprendre le lien entre la pollution et la santé ainsi que de proposer des solutions soutenables et efficaces pour faire face à ces enjeux nous faisons souvent appel à la modélisation. Les modèles de qualité de l'air sont des outils qui réunissent nos connaissances sur le phénomène complexe de la pollution atmosphérique et qui nous permettent d'effectuer des prédictions et/ou des projections futures, simuler des scénarios, évaluer les politiques publiques et enfin comprendre les processus qui pilotent les transformations et la dispersion des polluants dans l'atmosphère.

Afin de mieux caractériser la toxicité des particules, de nouveaux schémas de chimie des aérosols sont construits afin de représenter leurs propriétés chimiques, tout en limitant les temps de calcul. Notamment, l'algorithme GENOA permet de réduire des mécanismes quasi-explicites en préservant les molécules et les voies chimiques clés (Wang et al. 2023). Cette description moléculaire de particules organiques, combinée à une modélisation multi-échelle, permet de cartographier la concentration et les propriétés des polluants, de l'échelle régionale jusqu'au niveau de la rue (Sartelet et al. 2024).

## **OBJECTIF :**

L'objectif du stage proposé ici, est de cartographier les particules organiques formées à partir du naphthalène et leurs propriétés sur la région parisienne, pour pouvoir améliorer notre compréhension des impacts de ces particules sur la santé. Le stage proposé pourra se poursuivre par une thèse sur la modélisation de la toxicité des particules et de leurs impacts sur la santé, dans le cadre du projet URBHEALTH <https://pepr-vdbi.fr/projets/projets-paris-reus-i/urbhealth>.

## **METHODOLOGIE :**

Les schémas quasi-explicites comprenant trop de réactions et d'espèces pour pouvoir être utilisés avec des simulations 3D, le schéma quasi-explicite du naphthalène (Lannuque et Sartelet 2024) sera réduit en utilisant l'algorithme GENOA. Des simulations seront ensuite réalisées sur la région parisienne avec un modèle de chimie transport, et les concentrations de différents composés seront comparées à des mesures.

## **CONTACT :**

Karine Sartelet ([karine.sartelet@enpc.fr](mailto:karine.sartelet@enpc.fr)), Directrice de recherche à l'Ecole des Ponts/CEREA, 6 et 8 Avenue Blaise Pascal, 77 455 Champs sur Marne.

Gaëlle Uzu ([gaëlle.uzu@ird.fr](mailto:gaëlle.uzu@ird.fr)), Directrice de recherche à l'Institut des Géosciences de l'Environnement, Grenoble.

## **LIEU**

Ce stage se déroulera dans les locaux du CEREA sur le site de l'Ecole des Ponts à Champs sur Marne.

## **DUREE**

5 à 6 mois, stage gratifié.

## **COMPETENCES REQUISES**

- Cursus : Ingénieur Grandes Ecoles 3ème année ou Master 2
- Le projet peut convenir à des formations diverses. L'important est d'avoir à la fois un attrait pour des sujets sur la modélisation numérique, la pollution atmosphérique et impact sanitaire, et l'envie de découvrir des méthodologies informatiques et mathématiques permettant de les aborder.
- Vous êtes rigoureux, organisé, autonome, curieux et aimez travailler en équipe

## **REFERENCES :**

- Lannuque, V. and Sartelet, K. (2024) Development of a detailed gaseous oxidation scheme of naphthalene for secondary organic aerosol (SOA) formation and speciation. *Atmos. Chem. Phys.*, 24, 8589-8606, <https://doi.org/10.5194/acp-24-8589-2024>.
- Sartelet K., Wang Z., Lannuque V., Iyer S., Couvidat F. and Sarica T. (2024) Modelling molecular composition of SOA from toluene photo-oxidation at urban and street scales. *Environ. Sci.: Atmos.*, 4, 839-847, <https://doi.org/10.1039/D4EA00049H>.
- Wang, Z., Couvidat, F. and Sartelet, K. (2023), Implementation of a parallel reduction algorithm in the GENERator of reduced Organic Aerosol mechanisms (GENOA v2.0): Application to multiple monoterpene aerosol precursors, *J. Aer. Sci.*, 174, 106248, [doi:10.1016/j.jaerosci.2023.106248](https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2023.106248).
- WHO global air quality guidelines: particulate matter (PM2.5 and PM10), ozone, nitrogen dioxide, sulfur dioxide and carbon monoxide. <https://www.who.int/publications/i/item/9789240034228>