HAL
open science

Assimilation de données et couplage d'échelles pour la simulation de la dispersion atmosphérique en milieu urbain

Chi Vuong Nguyen

To cite this version:

Chi Vuong Nguyen. Assimilation de données et couplage d'échelles pour la simulation de la dispersion atmosphérique en milieu urbain. Autre. Université de Lyon, 2017. Français. NNT : 2017LYSEC018 . tel-02611980v2

HAL Id: tel-02611980

https://theses.hal.science/tel-02611980v2

Submitted on 19 May 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

N° d'ordre NNT : 2017LYSEC18

THESE de DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LYON
opérée au sein de l'Ecole centrale de Lyon

Ecole Doctorale N° 162
Mécanique - Energétique - Génie Civil - Acoustique

Spécialité de doctorat : Mécanique des fluides

Soutenue publiquement le 12/05/2017, par :
Chi Vuong NGUYEN

Assimilation de données et couplage d'échelles pour la simulation de la dispersion atmosphérique en milieu urbain

---

Devant le jury composé de :

Vinkovic, Ivana	Professeur	Université Lyon 1	Présidente
Bessagnet, Bertrand	Docteur (HDR)	INERIS	Rapporteur
Clappier, Alain	Professeur	Université de Strasbourg	Rapporteur
Mallet, Vivien	Chargé de recherche	INRIA	Examinateur
Troude, Florence	Docteur	Atmo Auvergne-Rhône-Alpes	Examinatrice
Soulhac, Lionel	Maître de conférences (HDR)	Ecole centrale de Lyon	Directeur de thèse

Tous les modèles sont faux,
mais certains sont utiles.

George Edward Pelham Box

Remerciements

Ce doctorat s'est déroulé au sein de l'Ecole Centrale de Lyon et du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique. Aussi, je souhaite tout d'abord remercier les directeurs du laboratoire qui se sont succédés durant ces années de doctorat, M. Michel Lance et M. Philippe Blanc-Bénon, ainsi que M. Franck Debouck, directeur de l'Ecole Centrale de Lyon, pour leur accueil.

Je tiens sincèrement à remercier mon directeur de thèse, Lionel Soulhac, pour son accompagnement, son soutien et pour la confiance qu'il m'a accordée. Je vous suis particulièrement reconnaissant pour les connaissances que vous m'avez transmises, les précieux conseils que vous m'avez distillés, l'esprit d'analyse que vous m'avez inculqué ... et bien sûr pour avoir couru dans l'aéroport de Budapest afin de retenir l'avion qui nous ramenait à Lyon !

J'aimerais également dire *grazie mille* à Pietro Salizzoni pour son aide à la rédaction des articles ... mais surtout pour m'avoir offert la possibilité de découvrir le sud de l'Italie, avec en bonus une formation accélérée sur le développement durable !

Je souhaite évidemment adresser un grand merci à mes collègues, Guillevic, Horacio, Massimo, Patrick, Perrine, pour leur accueil, pour m'avoir accordé de précieuses minutes de leur temps afin de répondre à mes innombrables questions ainsi que pour tous les échanges enrichissants que nous avons pu avoir.

Je voudrais remercier chaleureusement mes compagnons de route, Nabil, Hervé, Thomas, Hassan, Thierry, Federica, Hajar, Jheyson, Fateh, Matteo, pour tous les bons moments que nous avons partagés.

Je profite de ces remerciements pour adresser un merci tout particulier à François-Xavier qui a pris le temps de m'expliquer, lors de mon arrivée, les bases théoriques et la mise en œuvre du modèle SIRANE.

J'aimerais aussi exprimer ma profonde gratitude aux membres de l'équipe *modélisation* d'Atmo Auvergne-Rhône-Alpes, Harry Dupont, Charles Elie Petitjean, Ariane Provent, Florence Troude, pour leur soutien technique et leur collaboration durant ce projet de recherche.

Je voudrais de même remercier respectueusement les membres du jury, M. Bertrand Bessagnet, M. Alain Clappier, M. Vivien Mallet, Mme. Florence Troude et Mme. Ivana Vinkovic pour avoir accepté de rapporter et d'examiner ce travail de thèse.

Je tiens également à remercier la région Auvergne-Rhône-Alpes ainsi qu'Atmo Auvergne-Rhône-Alpes pour avoir financé ce doctorat.

Enfin, il me reste à remercier toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin au bon déroulement de cette thèse.

Bonne continuation à vous tous !

Résumé

La surveillance de la qualité de l'air est actuellement effectuée avec des mesures de concentration et à partir d'outils de modélisation de la dispersion atmosphérique. Ces modèles numériques évaluent les concentrations des polluants avec une résolution spatio-temporelle plus fine que les mesures. Néanmoins, les estimations fournies par ces modèles sont moins précises que les mesures. Dans ce projet de recherche, nous avons étudié les approches de couplage d'échelles et d'assimilation de données pour améliorer les estimations fournies par le modèle de dispersion atmosphérique SIRANE, dédié à l'échelle urbaine.

L'approche de couplage d'échelles consiste à déterminer les conditions aux limites d'une simulation à partir d'une autre simulation à plus grande échelle. Au cours de ce travail de thèse, nous avons analysé trois méthodes afin de coupler le modèle urbain SIRANE et le modèle à méso-échelle CHIMERE. Cette étude montre que ces méthodes permettent potentiellement d'estimer la qualité de l'air à l'échelle urbaine de manière plus satisfaisante que les modèles à méso-échelle (utilisés seuls). Cependant, elles n'améliorent pas forcément la modélisation des conditions aux limites d'une simulation à l'échelle urbaine et les estimations fournies par celles-ci. Cela est a priori lié au fait que les estimations fournies par le modèle CHIMERE ne sont pas suffisamment satisfaisantes sur notre cas d'étude. Il est néanmoins possible que ces méthodes améliorent les résultats à l'échelle urbaine en utilisant une simulation à l'échelle régionale de meilleure qualité.

L'approche d'assimilation de données consiste à combiner les mesures et les données modélisées afin de déterminer la meilleure estimation de l'état d'un système. Durant cette thèse, nous avons étudié trois méthodes d'assimilation de données : la méthode de débiaisement, la méthode que nous avons nommée *modulation de la contribution des sources* et la méthode *Best Linear Unbiased Estimator*. Cette étude indique que ces méthodes permettent globalement d'améliorer les estimations fournies par le modèle SIRANE. L'étude de sensibilité vis-à-vis du nombre de mesures utilisées lors de l'assimilation de données indique qu'en général, plus ce nombre est élevé plus les résultats sont satisfaisants. Enfin, les résultats montrent que les performances statistiques associées à ces trois méthodes d'assimilation de données sont globalement comparables entre elles sur notre cas d'étude.

Mots clés : qualité de l'air, échelle urbaine, modélisation de la dispersion atmosphérique, modélisation multi-échelles, assimilation de données.

Abstract

Air quality monitoring is currently carried out with concentration measurements and with atmospheric dispersion modeling tools. These numerical models evaluate pollutant concentrations with a finer spatio-temporal resolution than measurements. Nevertheless, the estimates provided by these models are less accurate than measurements. In this research project, we studied multiscale coupling and data assimilation approaches to improve the estimates provided by the SIRANE atmospheric dispersion model, dedicated to the urban scale.

The multiscale coupling approach consists in determining the boundary conditions of a simulation from another simulation on a larger scale. In this thesis work, we analyzed three methods for coupling the SIRANE model with the CHIMERE mesoscale model. This study shows that these methods can potentially estimate the air quality at the urban scale more satisfactorily than the mesoscale models (used alone). However, they do not necessarily improve the modeling of the boundary conditions of a simulation at the urban scale and the estimates provided by them. This is a priori due to the fact that the estimates provided by the CHIMERE model are not sufficiently good on our case study. It is possible, however, that these methods improve the results at the urban scale by using a better simulation at the regional scale.

The data assimilation approach consists of combining the measurements and the modelled data to determine the best estimate of the system state. During this thesis, we studied three data assimilation methods : the unbiased method, the method that we called *source apportionment modulation*, and the Best Linear Unbiased Estimator method. This study indicates that these methods generally improve the estimates provided by the SIRANE model. The sensitivity study on the number of measurements used during the data assimilation indicates that, in general, higher is this number, more satisfactory are the results. Finally, the results show that the statistical performances associated with these three data assimilation methods are globally comparable on our case study.

Keywords : air quality, urban scale, atmospheric dispersion modeling, multiscale modeling, data assimilation.

Table des matières

Remerciements **i**

Résumé **iii**

Abstract **v**

Introduction **1**

I Généralités **3**

1 La pollution atmosphérique **5**

1.1 Définition de la pollution atmosphérique 5
1.2 Sources de pollution 6
1.2.1 Emissions naturelles 6
1.2.2 Emissions relatives au secteur du transport 6
1.2.3 Emissions industrielles 8
1.2.4 Emissions relatives au secteur résidentiel-tertiaire 8
1.2.5 Emissions agricoles 8
1.3 Facteurs influençant la qualité de l'air 8
1.3.1 Caractéristiques des sources d'émissions 9
1.3.2 Conditions météorologiques 9
1.3.3 Caractéristiques du milieu de dispersion 10
1.4 Conséquences de la pollution de l'air 10
1.4.1 Conséquences sur l'environnement 10
1.4.2 Conséquences sur la santé humaine 11
1.4.3 Conséquences économiques 12
1.5 Amélioration de la qualité de l'air 12

1.5.1 Réduction des émissions 12
1.5.2 Objectifs de la qualité de l'air 14
1.6 Conclusion 16

2 Evaluation de la qualité de l'air 17
2.1 Mesures de concentration 17
2.1.1 Typologie des stations 18
2.1.2 Types de surveillance 19
2.1.3 Avantages et limitations des mesures 19
2.2 Modèles de la qualité de l'air 20
2.2.1 Echelles de modélisation 20
2.2.2 Approches de modélisation 22
2.2.3 Choix du modèle 24
2.2.4 Avantages et limites 24
2.3 Assimilation de données 24
2.4 Conclusion 25

3 Présentation générale de l'étude 27
3.1 Contexte 27
3.1.1 Risque sanitaire associé à la pollution de l'air plus important en milieu urbain 27
3.1.2 Besoin d'améliorer la modélisation de la qualité de l'air en milieu urbain . . . 27
3.2 Problématique abordée dans le cadre de ce travail 28
3.2.1 Objectifs 28
3.2.2 Apport de la modélisation multi-échelles ? 29
3.2.3 Apport des méthodes d'assimilation de données ? 29
3.3 Démarche 30
3.3.1 Utilisation du modèle urbain de dispersion atmosphérique SIRANE (partie II) 30
3.3.2 Etude de l'approche de modélisation multi-échelles (partie III) 30
3.3.3 Etude de l'approche d'assimilation de données (partie IV) 31
3.3.4 Conclusion et perspectives 31

II Modèle SIRANE et simulations de référence 35

4 Présentation du modèle SIRANE 37
4.1 Principe général du modèle SIRANE 38
4.2 Modélisation de l'écoulement et de la dispersion dans la canopée urbaine 41
4.2.1 Transport par convection le long de la rue 43
4.2.2 Transfert turbulent à travers l'interface rue-atmosphère extérieure 44
4.2.3 Transport par convection aux intersections des rues 46
4.2.4 Bilan de masse 48

4.3 Modélisation de l'écoulement et de la dispersion au-dessus de la canopée urbaine . . 49
4.3.1 Modélisation de l'écoulement atmosphérique 49
4.3.2 Modélisation de la dispersion dans l'atmosphère extérieure 52
4.4 Modélisation des réactions chimiques 55
4.5 Données d'entrée du modèle SIRANE 56
4.5.1 Géométrie urbaine 56
4.5.2 Météorologie 57
4.5.3 Emissions 57
4.5.4 Concentration de fond 58
4.6 Conclusion 59

5 Simulations SIRANE de référence 61
5.1 Présentation des cas d'étude 61
5.2 Mise en œuvre du modèle SIRANE 63
5.2.1 Géométrie urbaine 63
5.2.2 Emissions 63
5.2.3 Concentration de fond 69
5.2.4 Météorologie 69
5.2.5 Coût des simulations 70
5.3 Critères d'évaluation des résultats 71
5.4 Résultats des simulations SIRANE de référence 73
5.4.1 Estimation des concentrations de PM_{10} et de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise en 2008 73
5.4.2 Estimation des concentrations de PM_{10} et de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise en 2014 76
5.4.3 Comparaison des performances statistiques relatives aux simulations SIRANE de référence 79
5.5 Conclusion 81

6 Evaluation de la contribution des sources 83
6.1 Approches pour l'évaluation de la contribution des sources 84
6.1.1 Analyse des échantillons absorbés par les capteurs 84
6.1.2 Utilisation de modèles récepteurs 84
6.1.3 Utilisation de modèles de dispersion atmosphérique 85
6.2 Prise en compte de la chimie 86
6.2.1 Effets non linéaires associés aux réactions chimiques 86
6.2.2 Signification de l'expression *contribution des sources* en cas de chimie 86
6.3 Description du module *source apportionment* de SIRANE 88
6.3.1 Traitement des espèces chimiquement inertes 89
6.3.2 Traitement des espèces réactives 89

6.4 Application à l'évaluation de la contribution en PM_{10} et en NO_2 des sources sur l'agglomération lyonnaise en 2008 . . . 92
6.4.1 Comparaison des résultats obtenus avec les modèles SA-NO et SA-NOX . . . 92
6.4.2 Exploitation des résultats associés à l'évaluation de la contribution des sources 93
6.5 Conclusion . . . 102

III Modélisation multi-échelles de la qualité de l'air 107

7 Etat de l'art de la modélisation multi-échelles 109
7.1 Méthodes de raffinement de maillage . . . 110
7.1.1 Raffinements de type h et de type r . . . 110
7.1.2 Critère de raffinement . . . 112
7.1.3 Avantages et limitations des méthodes de raffinement de maillage . . . 112
7.2 Méthodes d'imbrication de domaines . . . 112
7.2.1 Approches one-way nested et two-way nested . . . 114
7.2.2 Estimation des conditions aux limites pour la simulation fille . . . 114
7.2.3 Avantages et limitations des méthodes d'imbrication de domaines . . . 115
7.3 Couplage d'un modèle régional et d'un modèle urbain . . . 115
7.4 Conclusion . . . 119

8 Modèle CHIMERE et simulation de référence 121
8.1 Brève description du modèle CHIMERE . . . 121
8.1.1 Modélisation du transport et des processus de transformations . . . 122
8.1.2 Données d'entrée . . . 124
8.2 Simulation CHIMERE de référence . . . 126
8.2.1 Mise en œuvre du modèle CHIMERE . . . 126
8.2.2 Résultats de la simulation CHIMERE de référence pour le cas d'étude 2014 . 127
8.3 Conclusion . . . 132

9 Couplage du modèle à méso-échelle CHIMERE et du modèle urbain SIRANE 133
9.1 Estimation de la concentration de fond (ECF) . . . 134
9.1.1 Description l'approche ECF . . . 134
9.1.2 Analyse de la concentration de fond estimée avec l'approche ECF sur le cas d'étude 2014 . . . 139
9.1.3 Résultats du couplage avec l'approche ECF sur le cas d'étude 2014 . . . 142
9.2 Approche de Stocker . . . 149
9.2.1 Description de l'approche de Stocker . . . 149
9.2.2 Analyse des concentrations en polluants jeunes et anciens sur le cas d'étude 2014 . . . 150

9.2.3 Résultats du couplage avec l'approche de Stocker sur le cas d'étude 2014 . . . 153
9.3 Estimation de la variabilité spatiale des concentrations (EVSC) 159
9.3.1 Description de l'approche EVSC 159
9.3.2 Analyse des variables $c_{\text{régional}}$, c^{moy}_{urbain} et c_{urbain} sur le cas d'étude 2014 160
9.3.3 Résultats du couplage avec l'approche EVSC sur le cas d'étude 2014 163
9.4 Inter-comparaison des performances statistiques associées aux approches de couplage sur le cas d'étude 2014 170
9.5 Conclusion 173

IV Assimilation de données avec un modèle urbain de qualité de l'air 177

10 Etat de l'art des méthodes d'assimilation de données 179
10.1 Types d'assimilation de données et formalisme mathématique 179
10.1.1 Types d'assimilation de données 179
10.1.2 Formalisme mathématique des méthodes d'assimilation de données 180
10.2 Débiaisement 180
10.3 Best Linear Unbiased Estimator (BLUE) 182
10.3.1 Description de la méthode BLUE 182
10.3.2 Estimation des covariances des erreurs d'ébauche et d'observation 183
10.4 Filtre de Kalman 186
10.5 Méthodes variationnelles 187
10.5.1 3D-Var 188
10.5.2 4D-Var 189
10.6 Conclusion 190

11 Assimilation de données avec le modèle SIRANE 191
11.1 Approche utilisée pour évaluer les méthodes d'assimilation de données 192
11.2 Débiaisement 192
11.2.1 Estimation des variables de débiaisement et d'ajustement 192
11.2.2 Influence du nombre et des *types* de capteurs utilisés avec la méthode de débiaisement 193
11.2.3 Résultats de la méthode de débiaisement sur le cas d'étude 2008 196
11.3 Modulation de la contribution des sources (MCS) 200
11.3.1 Description de la méthode MCS 200
11.3.2 Influence du nombre de capteurs et du nombre de groupes de sources utilisés avec la méthode MCS 201
11.3.3 Résultats de la méthode MCS sur le cas d'étude 2008 204
11.4 Best Linear Unbiased Estimator (BLUE) 208
11.4.1 Modélisation des covariances des erreurs d'observation 208
11.4.2 Modélisation des covariances des erreurs d'ébauche 209

11.4.3 Influence du nombre et des *types* de capteurs utilisés avec la méthode BLUE 214
11.4.4 Résultats de la méthode BLUE sur le cas d'étude 2008 216
11.5 Inter-comparaison des méthodes d'assimilation de données sur le cas d'étude 2008 . . 221
11.5.1 Comparaison des performances statistiques associées aux méthodes d'assimilation de données sur le cas d'étude 2008 221
11.5.2 Comparaison qualitative des concentrations modélisées avec les méthodes d'assimilation de données sur le cas d'étude 2008 224
11.5.3 Comparaison de la mise en œuvre des méthodes d'assimilation de données sur le cas d'étude 2008 224
11.6 Conclusion 229

Conclusion et perspectives **233**

Annexe **237**

A Comparaison des critères de qualité **239**

Bibliographie **241**

Introduction

La pollution de l'air est devenue depuis plusieurs années une problématique majeure. L'intérêt de la population et des pouvoirs publics pour cette problématique s'est accru au fur et à mesure que les connaissances sur les effets de la pollution de l'air ont évolué. Ce type de pollution joue notamment un rôle dans l'apparition de maladies respiratoires et cardio-vasculaires (WHO, 2014). Le Centre International de Recherche sur le Cancer (CIRC) indique également qu'elle augmente le risque de développer un cancer du poumon (WHO, 2013). De plus, l'Organisation Mondiale de la Santé (OMS) estime que 7 millions de personnes sont décédées prématurément dans le monde en 2012 à cause de l'exposition à la pollution atmosphérique (WHO, 2014). Les risques sanitaires associés à la pollution de l'air sont plus élevés en milieu urbain car la population et les concentrations de nombreux polluants y sont plus importantes (Guerreiro *et al.*, 2014). Ces dernières années, le nombre de jours de *forte* pollution aux particules fines à Pékin est supérieur à 100 jours par an (Han *et al.*, 2014 ; Gao *et al.*, 2015 ; Feng *et al.*, 2016). Le 7 décembre 2015, la capitale chinoise a également lancé sa première *alerte rouge (niveau maximal)* (Johnson *et al.*, 2017). De même, les niveaux de concentration en particules fines sur Paris ont dépassé les seuils d'alerte français à huit reprises lors de l'année 2015 (source : Airparif).

Pour améliorer la qualité de l'air, il est nécessaire de réduire les émissions de polluants. En France, plusieurs mesures législatives ont été prises afin d'abaisser les émissions des différents secteurs d'activité. Certaines villes ont notamment mis en place un dispositif de restriction de la circulation, dit *circulation alternée*, en cas d'épisode de pollution. Depuis 2016, plusieurs agglomérations françaises (par exemple Paris, Grenoble et Lyon) couplent également celui-ci avec le dispositif appelé *Crit'Air* autorisant uniquement les véhicules les moins polluants à circuler en cas de circulation alternée.

Pour minimiser les effets néfastes de la pollution atmosphérique, notamment en milieu urbain, il est également nécessaire de développer une stratégie efficace de surveillance de la qualité de l'air. En France, cette surveillance est actuellement effectuée à l'aide de stations de mesure et de modèles de dispersion atmosphérique. Les mesures constituent les informations les plus précises pour évaluer la qualité de l'air. Cependant, elles ne permettent pas de représenter de manière satisfaisante la variabilité spatiale des concentrations à l'échelle urbaine en raison de leur résolution spatiale relativement faible. En revanche, les modèles de qualité de l'air à l'échelle urbaine permettent d'évaluer ces concentrations avec une meilleure résolution spatio-temporelle que les stations de mesure. Cependant, les estimations fournies par les modèles sont moins précises que les mesures.

L'objectif de ce travail de thèse est d'améliorer les estimations fournies par les modèles urbains de qualité de l'air. Pour cela, nous étudions deux types d'approche : la *modélisation multi-échelles* et l'*assimilation de données*. L'approche de modélisation multi-échelles consiste à estimer la qualité de l'air en couplant plusieurs modèles à différentes échelles. L'approche d'assimilation de données consiste à combiner les mesures et les données modélisées afin de fournir la meilleure estimation de l'état d'un système. Pour chacune de ces approches, nous étudions plusieurs méthodes et nous évaluons l'amélioration des résultats par rapport à une simulation de référence n'utilisant pas ces approches. Dans ce projet de recherche, nous tentons notamment de répondre aux questions suivantes :

— L'approche de modélisation multi-échelles permet-elle d'améliorer les résultats des modèles de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine ?

— Quelle est la méthode associée à l'approche multi-échelles la plus satisfaisante ?

— L'approche d'assimilation de données permet-elle d'améliorer les estimations des modèles de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine ?

— Quelle est l'influence du nombre et des *types* de mesures utilisées lors de l'assimilation de données ?

— Quelle est la *meilleure* méthode d'assimilation de données à appliquer à l'échelle urbaine ?

Ce rapport de thèse est organisé en quatre parties. Dans la première partie, nous situons le contexte général de la *pollution atmosphérique*, dans lequel s'inscrit ce projet de recherche. De même, nous décrivons les moyens mis en place actuellement pour surveiller la qualité de l'air. Enfin, nous présentons la démarche que nous avons adoptée.

La seconde partie est consacrée au modèle urbain SIRANE que nous avons utilisé au cours de ce travail. Tout d'abord, nous présentons les principes physiques et les hypothèses utilisés dans ce modèle. Ensuite, nous analysons les performances de ce modèle sur deux cas d'étude sur le site de l'agglomération lyonnaise. Dans le dernier chapitre, nous décrivons le module appelé *source apportionment* de SIRANE, développé dans le cadre de cette thèse, qui permet d'évaluer la contribution des sources.

Au cours de la troisième partie, nous abordons l'approche de modélisation multi-échelles. Dans un premier temps, nous effectuons un bref état de l'art des méthodes de modélisation multi-échelles. Dans un second temps, nous présentons le modèle CHIMERE qui est couplé au modèle SIRANE dans le cadre de cette étude. Enfin, nous décrivons les méthodes de couplage appliquées et analysons les estimations obtenues avec celles-ci.

Enfin, dans la quatrième partie, nous abordons l'approche d'assimilation de données. Dans le premier chapitre, nous faisons un état de l'art des méthodes d'assimilation de données. Finalement, nous présentons les méthodes d'assimilation de données appliquées au cours de ce projet de recherche et évaluons les résultats obtenus avec celles-ci.

Ce projet de recherche a été réalisé en collaboration et avec le soutien de l'Association Agréée de Surveillance de la Qualité de l'Air Atmo Auvergne-Rhône-Alpes (Atmo AURA)

Première partie

Généralités

Chapitre 1
La pollution atmosphérique

La pollution atmosphérique est une problématique qui n'est pas nouvelle. En 1661, l'écrivain britannique John Evelyn publie déjà un tract appelé « Fumifugium ; or the inconveniencie of the aer and smoak of London dissipated » (Evelyn, 1661) dans lequel il évoque la pollution au soufre de l'air londonien. Néanmoins, ce n'est que depuis ces dernières décennies que la pollution atmosphérique est devenue une thématique majeure.

L'objectif de ce chapitre est d'introduire cette thématique. Tout d'abord, nous définissons l'expression *pollution atmosphérique* (section 1.1). Ensuite, nous abordons l'origine de la pollution de l'air (section 1.2) et les facteurs qui influencent ce phénomène (section 1.3). Puis, nous présentons les effets de la pollution atmosphérique (section 1.4). Enfin, nous indiquons les mesures prises pour lutter contre cette pollution et la tendance d'évolution de la qualité de l'air au cours des dernières années (section 1.5).

1.1 Définition de la pollution atmosphérique

La pollution atmosphérique, aussi appelée *pollution de l'air*, est un phénomène complexe qui peut en partie se définir comme une perturbation de l'état physico-chimique de l'atmosphère. Cette complexité est notamment illustrée par le nombre important de définitions que l'on peut trouver dans la littérature. Parmi ces définitions, on peut trouver celle de l'Organisation Mondiale de la Santé (OMS) qui définit la pollution de l'air comme « la contamination de l'environnement intérieur ou extérieur par un agent chimique, physique ou biologique qui modifie les caractéristiques naturelles de l'atmosphère ». Dans la législation française, la loi n° 96-1236 portant sur l'air et l'utilisation rationnelle de l'énergie, dite *loi LAURE* ou *loi Lepage*, définit la pollution atmosphérique comme « l'introduction par l'homme, directement ou indirectement, dans l'atmosphère et les espaces clos, de substances ayant des conséquences préjudiciables de nature à mettre en danger la santé humaine, à nuire aux ressources biologiques et aux écosystèmes, à influer sur les changements climatiques, à détériorer les biens matériels, à provoquer des nuisances olfactives excessives ». Ces deux définitions convergent sur le fait que la pollution atmosphérique correspond à l'introduction de substances qui modifient la composition de l'atmosphère. Cependant elles divergent sur l'origine

de la contamination. Certains prennent en compte les émissions liées aux phénomènes naturels et aux activités humaines et d'autres prennent uniquement en compte les émissions anthropiques.

1.2 Sources de pollution

Les émissions de polluants sont à l'origine de la pollution atmosphérique. Ces émissions peuvent être d'origine naturelle ou anthropique. Les émissions anthropiques sont généralement associées à quatre secteurs d'activité humaine : le secteur industriel, les transports, le secteur résidentiel-tertiaire et l'agriculture.

1.2.1 Emissions naturelles

L'effet des émissions naturelles a longtemps été négligé. Cependant, les sources d'émissions naturelles peuvent émettre des quantités importantes de polluants dans l'atmosphère. A l'échelle planétaire, les composés organiques volatils (COV) proviennent en grande majorité de sources naturelles telles que les plantes (Guenther *et al.*, 1995 ; Guenther, 1997). Les végétaux émettent également des espèces toxiques (par exemple du sulfure d'hydrogène (H_2S) et du méthane (CH_4)) ou allergisantes (par exemple les pollens) (Bates *et al.*, 2004 ; Jones et Harrison, 2004 ; Jarosz *et al.*, 2005 ; Laanbroek, 2010 ; Sofiev *et al.*, 2012). Les volcans font partie des plus grandes sources naturelles de pollution, en masse de matière rejetée (Lantzy et Mackenzie, 1979 ; Nriagu, 1989 ; Nho *et al.*, 1996). Lors des éruptions volcaniques, des quantités importantes de dioxyde de carbone (CO_2) et de dioxyde de soufre (SO_2) sont émises dans l'atmosphère (Lambert *et al.*, 1988 ; Schmidt *et al.*, 2015 ; Kern *et al.*, 2016). La quantité totale de SO_2 provenant des sources naturelles est estimée à environ 25 % (Graf *et al.*, 1997). Les volcans émettent aussi des quantités considérables de particules (PM, *particulate matter* en anglais). Celles-ci réfléchissent le rayonnement solaire et peuvent parfois conduire à une réduction de la température moyenne à la surface du globe (Andreae et Gelencsér, 2006 ; Chen et Bond, 2010 ; Bond *et al.*, 2013 ; Li *et al.*, 2016 ; Xing *et al.*, 2016 ; Yang *et al.*, 2016). A titre d'exemple, l'éruption du Pinatubo survenue en juin 1991 a provoqué un refroidissement moyen de 0.5 °C (Self *et al.*, 1993). Les feux de forêt ainsi que l'érosion sont aussi des sources naturelles importantes de PM (Knippertz et Todd, 2012 ; Adetona *et al.*, 2016 ; Chakrabarty *et al.*, 2016). D'autres sources naturelles telles que les océans, la foudre et la fonte des permafrosts peuvent également être à l'origine d'émissions de polluants (par exemple des PM, des NO_x, du CO_2 et du CH_4) dans l'atmosphère (Anisimov, 2007 ; Holloway *et al.*, 2014 ; Schaefer *et al.*, 2014 ; Sandu *et al.*, 2015 ; Schuur *et al.*, 2015).

1.2.2 Emissions relatives au secteur du transport

Le secteur du transport est la plus grande source de pollution dans les milieux urbains (Krzyzanowski *et al.*, 2005). Ce secteur est également le plus grand émetteur d'oxyde d'azote (NO_x) en France (CGDD, 2015). En 2013, les émissions du transport représentaient 60 % des émissions anthropiques de NO_x sur le territoire français (figure 1.1). Il convient de signaler que les NO_x sont

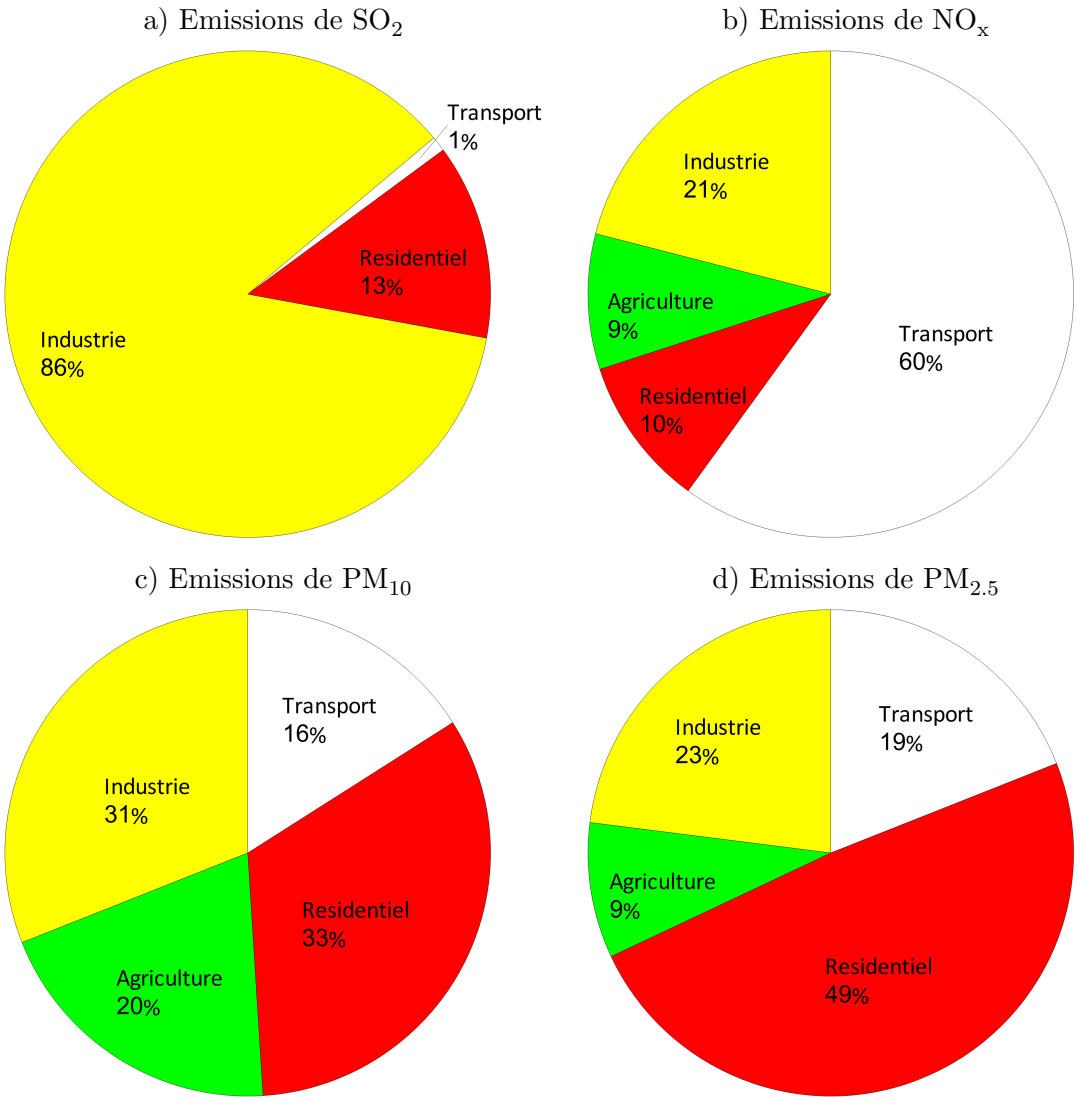


FIGURE 1.1 – Répartition des émissions de SO_2 (a), de NO_x (b), de PM_{10} (c) et de $PM_{2.5}$ (d) en fonction des secteurs d'activité en France en 2013 (source : CITEPA (2015))

des précurseurs de l'ozone (O_3) (Krupa et Manning, 1988 ; Ryerson *et al.*, 2001). Les transports émettent également des composés organiques volatils non méthaniques (COVNM), des particules (PM), du monoxyde de carbone (CO) et du dioxyde de carbone (CO_2) (Stedman, 1989 ; Chan *et al.*, 1991 ; Kristensson *et al.*, 2004 ; McGaughey *et al.*, 2004 ; Pant et Harrison, 2013). En France, ce secteur était notamment à l'origine de 19 % des émissions de COVNM, 16 % des émissions de PM_{10} et 19 % des émissions de $PM_{2.5}$ en 2013 (les PM_{10} et les $PM_{2.5}$ correspondent respectivement aux particules avec un diamètre inférieur à 10 µm et 2.5 µm) (figure 1.1). Les émissions de particules proviennent notamment des véhicules à moteur diesel (Gangwar *et al.*, 2012 ; Dallmann *et al.*, 2014) qui représentent plus de la moitié des véhicules légers en France (Roussel et Charles, 2013 ; Miquel, 2014 ; CCFA, 2015).

1.2.3 Emissions industrielles

Ce secteur émet une grande variété de polluants (SO_2, PM, NO_x, métaux lourds, etc ...) en raison des nombreux produits chimiques utilisés dans les processus industriels (Cheng, 2003 ; Ryerson *et al.*, 2003 ; Querol *et al.*, 2004). Le secteur industriel est notamment la principale source de SO_2 en France (CGDD, 2015). Les émissions de ce secteur représentaient 86 % des émissions de SO_2 en 2013 (figure 1.1). Ce secteur contribuait aussi à une part importante des émissions de COVNM (38 %), de PM_{10} (31 %), de $PM_{2.5}$ (23 %) et de NO_x (21 %) sur le territoire français en 2013 (figure 1.1). Les industries les plus polluantes sont les industries de production et de transformation d'énergie, les industries pétrolières et les industries métallurgiques (Soulhac, 2000). Il convient de signaler que ce secteur est également à l'origine de la plupart des rejets accidentels (Soulhac, 2000).

1.2.4 Emissions relatives au secteur résidentiel-tertiaire

Les émissions du secteur résidentiel-tertiaire proviennent essentiellement des activités de chauffage et sont par conséquent particulièrement importantes durant la période hivernale (Grange *et al.*, 2013 ; Crilley *et al.*, 2015). Les émissions dues au chauffage contaminent l'air extérieur mais également l'air intérieur (Chowdhury *et al.*, 2013 ; Chafe *et al.*, 2014 ; Salthammer *et al.*, 2014). En France, ce secteur est le plus grand émetteur de COVNM et de particules (CGDD, 2015). Les émissions de ce secteur constituaient notamment 40 % des émissions de COVNM, 49 % des émissions de $PM_{2.5}$ et 33 % des émissions de PM_{10} en 2013 (figure 1.1). Les émissions de particules proviennent essentiellement du chauffage au bois (Meyer, 2012 ; Eriksson *et al.*, 2014 ; CGDD, 2015). Ce secteur émet également du CO_2, du CO, du SO_2 et des NO_x (figure 1.1) (Seo et Hwang, 2001 ; Johansson *et al.*, 2004 ; CGDD, 2015).

1.2.5 Emissions agricoles

Les pratiques de l'agriculture induisent une contamination des sols, des eaux mais également de l'air (Erisman *et al.*, 2008 ; Perk, 2013). Le secteur agricole est notamment la source principale d'ammoniac (NH_3) en France (CGDD, 2015). Ce secteur était à l'origine de 97 % des émissions de NH_3 en 2013 (MEEM, 2016). Il convient de signaler que l'ammoniac est un précurseur de particules secondaires (Erisman et Schaap, 2004 ; Sharma *et al.*, 2007). Ce secteur contribuait également à une part significative des émissions françaises de PM_{10} (20 %) en 2013 (figure 1.1). La majorité de ces émissions proviennent des activités d'élevage (MEEM, 2016). Le reste est dû aux activités de culture telles que l'épandage d'engrais (MEEM, 2016).

1.3 Facteurs influençant la qualité de l'air

Les niveaux de concentration dans l'air dépendent de plusieurs facteurs. Ils sont influencés par les sources d'émissions mais également par les conditions météorologiques et les caractéristiques du milieu de dispersion. Cette section (1.3) présente de manière non exhaustive l'influence de ces

facteurs sur la qualité de l'air. Les phénomènes associés à la pollution atmosphérique sont notamment décrits plus en détail dans Sportisse (2008), Hanna et Britter (2010), Gryning et Batchvarova (2012), Vallero (2014) et Seinfeld et Pandis (2016).

1.3.1 Caractéristiques des sources d'émissions

Les niveaux de concentration dans l'atmosphère dépendent des caractéristiques relatives aux sources d'émissions qui sont à l'origine de la pollution atmosphérique. Ils sont notamment influencés par la quantité de matière rejetée par les sources d'émissions et par la fréquence des rejets. Les conditions de rejets telles que la hauteur, la vitesse et la température d'éjection ont également une incidence sur le comportement du panache et les concentrations de polluants (Miller et Hively, 1987 ; Sivacoumar *et al.*, 2001 ; Pregger et Friedrich, 2009 ; Marro *et al.*, 2014 ; Amer et Abbas, 2015). Les émissions induisent notamment des concentrations à proximité du sol plus faibles lorsque les sources sont situées en hauteur et que la vitesse d'éjection est importante (Lamb, 1978 ; Marro *et al.*, 2014).

1.3.2 Conditions météorologiques

Les conditions météorologiques déterminent les caractéristiques de l'écoulement atmosphérique. Cet écoulement atmosphérique représente le vecteur grâce auquel les polluants sont transportés et dispersés dans l'atmosphère. Aussi, les conditions météorologiques jouent un rôle important sur les niveaux de pollution. Par exemple, des conditions de vents faibles dispersent peu les polluants et favorisent des concentrations importantes (Goyal et Rama Krishna, 2002 ; Elminir, 2005 ; Chen *et al.*, 2008). En revanche, des conditions de vents importants augmentent la dispersion des polluants (Fenger, 1999 ; Moreira *et al.*, 2005). Cependant, des vents importants peuvent également entraîner un phénomène d'érosion conduisant à des émissions naturelles de polluants (Alfaro et Gomes, 2001 ; Panebianco *et al.*, 2016). Outre le vent, la température, l'humidité ou bien encore l'ensoleillement peuvent également modifier les niveaux de pollution (Greene *et al.*, 1999 ; Evtyugina *et al.*, 2006 ; Ling *et al.*, 2013). La pollution photo-chimique dépend notamment de ces paramètres (Stelson et Seinfeld, 1982 ; Madronich et Flocke, 1999 ; Seinfeld et Pandis, 2016). Ce type de pollution est la conséquence d'un ensemble de phénomènes complexes qui conduit par exemple à la formation d'ozone (Derwent *et al.*, 2003 ; Ling et Guo, 2014 ; Lyu *et al.*, 2016). L'ozone est un polluant secondaire, c'est-à-dire qu'il n'est pas émis directement par une source, contrairement aux polluants primaires, mais il se forme lorsque des polluants primaires, aussi appelés précurseurs, réagissent dans l'atmosphère. Les précipitations ont aussi un effet sur la qualité de l'air. Celles-ci induisent un phénomène dit de *dépôt humide par précipitation*, aussi appelé *lessivage*, qui se traduit par l'entraînement au sol des polluants, avec une réduction des niveaux de concentration dans l'air (Slinn, 1977 ; Burke *et al.*, 1995 ; Guo *et al.*, 2014). Néanmoins, cela se traduit aussi par une augmentation de la pollution des sols et des eaux (Soriano *et al.*, 2012 ; Perk, 2013).

1.3.3 Caractéristiques du milieu de dispersion

L'environnement géographique dans lequel se dispersent les polluants influence les niveaux de pollution puisqu'il a une incidence sur la dispersion atmosphérique et qu'il peut induire des processus physico-chimiques spécifiques à certaines situations. La topographie du milieu de dispersion (relief, obstacles, etc ...) a notamment une incidence sur les niveaux de concentration dans l'atmosphère car elle influence l'écoulement atmosphérique (Davidson *et al.*, 1996 ; Isnard, 1999 ; Uchida et Ohya, 1999). En milieu urbain, la présence de rues étroites, appelées *rues-canyons*, peut notamment conduire à de fortes concentrations puisqu'elle peut favoriser les phénomènes de confinement et de piégeage des polluants (Oke, 1988 ; Soulhac, 2000). Le type de surface dans le milieu de dispersion (eau, végétation, bâti, sol, etc ...) influence également les niveaux de pollution. Cela est dû au fait que ce paramètre a une incidence sur l'intensité du dépôt sec (qui dépend également du polluant considéré) (Sehmel, 1980 ; Phillips *et al.*, 2004 ; Sportisse, 2007 ; Zhang *et al.*, 2009). Le dépôt sec (ce phénomène est dit *sec* car il ne dépend pas des précipitations) est un phénomène induit par des processus de sédimentation et de diffusion qui entraînent les polluants au sol et réduisent les niveaux de pollution dans l'air (Voldner *et al.*, 1986 ; Hanson et Lindberg, 1991 ; Wesely et Hicks, 2000). La présence de végétation peut aussi influencer la qualité de l'air. En effet, certains végétaux peuvent absorber des espèces chimiques telles que le CO_2 (Long et Hällgren, 1993), le SO_2 (Jensen et Kozlowski, 1975) ou bien encore le NO_2 (Hill, 1971 ; Beckett *et al.*, 2000 ; Nowak *et al.*, 2006 ; Escobedo et Nowak, 2009). Dans ce cas, les végétaux sont à la fois des sources de pollution et des puits de pollution.

1.4 Conséquences de la pollution de l'air

Depuis quelques décennies, la pollution atmosphérique est devenue une préoccupation importante pour la population et les pouvoirs publics. L'intérêt pour cette problématique complexe n'a fait que croître au fur et à mesure que la connaissance sur les effets de la pollution atmosphérique a évolué. Cette pollution a des effets néfastes sur l'environnement et sur la santé humaine, ce qui se traduit également en termes de coûts économiques.

1.4.1 Conséquences sur l'environnement

Les effets de la pollution atmosphérique sur l'environnement sont divers et variés. Les polluants atmosphériques dégradent notamment les matériaux et les bâtis. La dégradation se traduit par exemple par le noircissement et par la corrosion des matériaux (Feliu et Morcillo, 1993 ; Brimblecombe et Grossi, 2007 ; Grossi et Brimblecombe, 2007 ; Maguregui *et al.*, 2011). La pollution de l'air a aussi des effets négatifs sur les écosystèmes. Celle-ci perturbe notamment la croissance de certains végétaux en ralentissant par exemple le processus de photosynthèse (Reich et Amundson, 1985 ; Giri *et al.*, 2013 ; Yendrek *et al.*, 2013). De même, l'ozone provoque le développement de nécroses sur certains végétaux et réduit la production agricole de certaines cultures (Wilkinson *et al.*, 2012 ; Vainonen et Kangasjärvi, 2015). Certains polluants comme les NO_x et le SO_2 conduisent

aussi à l'acidification des sols et des eaux, c'est-à-dire une réduction du pH associé au milieu (Doney *et al.*, 2007 ; Vedula *et al.*, 2015). Cette acidification modifie les équilibres biologiques et chimiques et affecte les écosystèmes (Shaw *et al.*, 2012 ; Zeng *et al.*, 2015). De plus, des polluants tels que le chlorofluorocarbure (CFC) et l'acide nitrique (HNO_3) peuvent détruire la couche d'ozone (dans la stratosphère) (Crutzen et Arnold, 1986 ; Solomon, 1999). La destruction de la couche d'ozone réduit l'absorption du rayonnement ultraviolet. Cela entraîne notamment une modification des écosystèmes terrestres et aquatiques (Bornman *et al.*, 2015 ; Häder *et al.*, 2015). A plus long terme, la pollution atmosphérique peut avoir des effets sur le climat. L'émission des gaz à effet de serre (GES) accroît notamment l'effet de serre qui engendre l'augmentation de la température globale terrestre (Allen *et al.*, 2009 ; Meinshausen *et al.*, 2009 ; Fankhauser, 2013). Cette augmentation de la température a des conséquences importantes comme l'élévation des niveaux des mers ou bien encore la modification des écosystèmes (Hoegh-Guldberg et Bruno, 2010 ; Nicholls *et al.*, 2014).

1.4.2 Conséquences sur la santé humaine

La pollution atmosphérique est un enjeu majeur car elle a notamment des effets sur la santé humaine. Il existe trois voies de contamination chez l'Homme. La première est la voie respiratoire (Brook *et al.*, 2002 ; de Nazelle *et al.*, 2013). Celle-ci représente la voie principale de contamination par les polluants atmosphériques (Kampa et Castanas, 2008). La seconde est la voie digestive par laquelle l'Homme ingère des produits contaminés par la pollution atmosphérique (De Brouwere *et al.*, 2012 ; Khan *et al.*, 2015). La dernière est la voie cutanée (Järup, 2003 ; Protano *et al.*, 2009). La contamination par cette voie est notamment associée aux espèces chimiques contenues dans les pesticides (Garrod *et al.*, 1998 ; Machera *et al.*, 2003). Les particules fines ($PM_{2.5}$ et PM_{10}), le monoxyde de carbone (CO), l'ozone (O_3), le dioxyde d'azote (NO_2) et le dioxyde de soufre (SO_2) figurent parmi les polluants les plus nocifs pour l'Homme à cause de leur effet néfaste sur la santé humaine et de leur concentration relativement importante dans l'atmosphère (Bernstein *et al.*, 2004 ; Turner *et al.*, 2011 ; Fann *et al.*, 2012). Ces polluants sont des gaz ou des particules irritants et agressifs qui peuvent entraîner des effets nocifs à court et long terme (Brunekreef et Holgate, 2002 ; Kampa et Castanas, 2008). A court terme, les polluants atmosphériques causent notamment des problèmes cardio-vasculaires, des problèmes respiratoires et des décès prématurés (Bernstein *et al.*, 2004 ; Kampa et Castanas, 2008 ; Giles et Koehle, 2013 ; Shang *et al.*, 2013). Un décès prématuré est un décès qui intervient avant un certain âge, 65 ans en France (Aouba *et al.*, 2011). L'Organisation Mondiale de la Santé (OMS) estime notamment que 7 millions de personnes sont décédées prématurément en 2012 dans le monde à cause d'une exposition à la pollution atmosphérique (WHO, 2014). De même, l'Agence Européenne pour l'Environnement (AEE) estime à près de 43400 le nombre de décès prématurés en France au cours de l'année 2012 liés à l'exposition chronique aux $PM_{2.5}$ (EEA, 2015). Le projet européen Aphekom coordonné par l'Institut de Veille Sanitaire (InVS) indique également que le dépassement de la valeur seuil recommandée par l'OMS pour les $PM_{2.5}$ dans 25 grandes villes européennes cause 19000 décès prématurés par an (Pascal *et al.*, 2013). A long terme, l'exposition à la pollution atmosphérique augmente notamment le risque de développer un cancer

du poumon ou une maladie cardio-pulmonaire (Pope *et al.*, 2004 ; Beelen *et al.*, 2008 ; WHO, 2013). Le Centre International de Recherche sur le Cancer (CIRC) classe notamment la pollution de l'air extérieure comme cancérigène avéré pour l'Homme dans le cas du cancer du poumon (Hamra *et al.*, 2014). Le CIRC classe également les particules fines et certains polluants tels que le benzène et le formaldéhyde comme cancérigènes (IARC, 2006 ; Straif *et al.*, 2013).

1.4.3 Conséquences économiques

Les effets de la pollution atmosphérique ont également un coût économique. L'OMS estime à 1600 milliards de dollars US le coût des dommages sanitaires induits par la pollution atmosphérique en Europe (WHO, 2015). En Europe, le coût de la pollution de l'air induite par l'industrie était évalué par l'Agence Européenne pour l'Environnement (AEE) entre 59 et 189 milliards d'euros en 2012 (EEA, 2014). De même, l'AEE estime que le coût de la pollution atmosphérique causée par les transports routiers s'élève à 100 milliards d'euros par an en Europe, dont près de la moitié est due aux seules émissions des poids lourds (EEA, 2013). Le projet européen Aphekom a aussi abordé ce sujet. Les études réalisées dans le cadre de ce projet indiquent notamment que le dépassement de la valeur seuil recommandée par l'OMS pour les $PM_{2.5}$ dans 25 grandes villes européennes a un coût de santé qui s'élève à 31 milliards d'euros chaque année (Pascal *et al.*, 2013). Le rapport sénatorial de L. Aïchi indique que le coût total de la pollution atmosphérique s'établit entre 68 et 97 milliards d'euros par an en France (Aïchi, 2015). Ce rapport indique également que le coût non sanitaire est a minima de 4.3 milliards d'euros par an.

1.5 Amélioration de la qualité de l'air

L'amélioration de la qualité de l'air est un enjeu majeur sur le plan sanitaire, environnemental et économique. Aussi, les réglementations fixent des niveaux d'émission et de concentration à respecter afin de minimiser les effets néfastes de la pollution atmosphérique.

1.5.1 Réduction des émissions

Le levier principal pour améliorer la qualité de l'air est la diminution des émissions anthropiques. Au niveau législatif, plusieurs mesures sont mises en place pour réduire les émissions de polluants des différents secteurs d'activité (par exemple la directive n° 2001/81/CE, le règlement (UE) n° 167/2013 et la circulaire du 18 novembre 2011). Ainsi, les constructeurs automobiles doivent respecter les normes européennes d'émission, dites *normes Euro*, qui fixent les limites maximales des rejets de polluants pour les véhicules routiers. La première norme pour les véhicules légers est apparue en 1991. Depuis, la succession des normes Euro (1 à 6) a de plus en plus durci les plafonds d'émission (voir par exemple le règlement (CE) n° 715/2007). En France, des plans d'action à l'échelle nationale (plan particules, Plan d'Urgence pour la Qualité de l'Air (PUQA), Plan national de Réduction des Emissions de Polluants Atmosphériques (PREPA)), à l'échelle régionale (Schéma

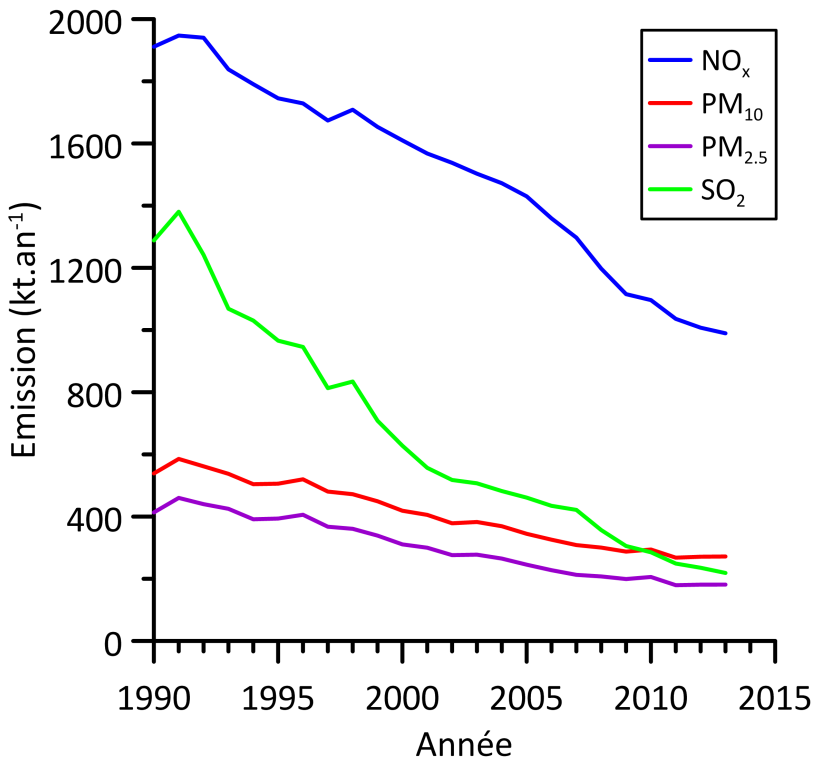


FIGURE 1.2 – Evolution des émissions annuelles de NO_x, de PM_{10}, de $PM_{2.5}$ et de SO_2 en France (tous secteurs confondus) de 1990 à 2014 (source : CITEPA (2015))

Régional du Climat, de l'Air et de l'Energie (SRCAE)) et à l'échelle locale (Plans pour la Protection de l'Atmosphère (PPA)) ont été, sont ou seront déployés pour améliorer la qualité de l'air. Les mesures associées à ces plans visent par exemple à réguler le flux de véhicules dans les zones particulièrement affectées par la pollution atmosphérique, à promouvoir fiscalement des appareils de chauffage au bois plus respectueux de l'environnement et à encourager l'utilisation de technologies moins polluantes dans le secteur agricole et industriel (voir par exemple le PPA de l'agglomération lyonnaise).

Grâce à ces différentes mesures, les émissions de NO_x, de PM_{10}, de $PM_{2.5}$ et de SO_2 ont diminué en France sur la période 1990-2014 (figure 1.2) (EEA, 2016). Les émissions de SO_2 ont notamment fortement diminué avec une réduction des émissions de 86 % entre 1990 et 2014. Cette réduction significative est due à la baisse de la consommation d'énergies fossiles induite par les dispositions réglementaires (voir par exemple la directive n° 93/12/CEE du Conseil, la directive 98/70/CE et la directive 2001/81/CE), les actions d'économie d'énergie (voir par exemple la loi n° 96-1236, la loi n° 2005-781 et la loi n° 2009-967) et le développement de la production d'électricité par les centrales nucléaires (CGDD, 2015). Cette évolution s'explique également par la limitation de la teneur en soufre dans les carburants et les combustibles (voir par exemple l'arrêté du 11 août 1999 et la directive 2001/81/CE). Les émissions de NO_x ont aussi diminué sur cette période (figure 1.2) (EEA, 2016). Celles-ci ont baissé de 48 % entre 1990 et 2014. Cette baisse est notamment la conséquence

des normes Euro qui ont durci progressivement les limites des émissions des véhicules roulants (voir par exemple le règlement (CE) n° 715/2007)). Ces normes ont notamment conduit les constructeurs automobiles à intégrer des pots catalytiques qui réduisent les rejets de NO_x (voir par exemple la directive n° 93-59). De 1990 à 2014, les émissions de particules fines ont également diminué (figure 1.2) (EEA, 2016). Cette diminution est respectivement de 50 % et de 56 % pour les PM_{10} et les $PM_{2.5}$. Ces baisses sont associées à la diminution globale des émissions dans les quatre secteurs d'activité (CGDD, 2015).

En Europe les émissions associées à de nombreux polluants (par exemple les NO_x, les COV, le SO_2, le CO, le Pb et le C_6H_6) ont aussi globalement diminué (Wilson *et al.*, 2012 ; Guerreiro *et al.*, 2014 ; EEA, 2016). Cependant, les émissions augmentent dans certains pays comme la Chine et l'Inde (Streets et Waldhoff, 2000 ; Garg *et al.*, 2006 ; Zhao *et al.*, 2013 ; Wang *et al.*, 2014). Aussi, à l'échelle mondiale, les émissions de SO_2 ont diminué, les émissions de NO_x sont stables et les émissions de certains polluants (NH_3, PM) ont légèrement augmenté depuis 1990 (Amann *et al.*, 2013).

1.5.2 Objectifs de la qualité de l'air

Afin de minimiser les effets néfastes de la pollution atmosphérique, il est nécessaire de réduire la pollution à des niveaux acceptables. Sur le plan international, l'OMS a émis en 2000 et en 2005 des recommandations en terme de qualité de l'air, en indiquant des concentrations en dessous desquelles l'exposition ne représente pas un risque important pour la santé humaine et la végétation (WHO, 2000, 2006). En Europe, l'Union Européenne a adopté la directive n° 2004/107/CE et la directive n° 2008/50/CE qui fixent des valeurs cibles de concentration à atteindre dans la mesure du possible et des valeurs limites de concentration à ne pas dépasser afin d'éviter, de prévenir ou de réduire les effets nocifs sur la santé humaine. En France, les valeurs limites, les valeurs cibles et les objectifs de qualité de l'air sont fixés par le décret n° 2010-1250 du 21 octobre 2010 (tableau 1.1) qui est la transposition de la directive européenne 2008/50/CE. Ce décret fixe également des seuils d'information et de recommandation et des seuils d'alerte qui correspondent à des niveaux au-delà desquels une exposition de courte durée présente un risque pour une partie (seuils d'information et

	Valeur limite			Objectif de qualité	
Polluant \ Durée d'exposition	1 h	24 h	1 an	8 h	1 an
NO_2	200 (18 h/an)		40		40
O_3				120	
SO_2	350 (24 h/an)	125 (3 jr/an)			50
PM_{10}		50 (35 jr/an)	40		30
$PM_{2.5}$			25		10

TABLE 1.1 – Valeurs limites et objectifs de qualité de concentration dans l'air en $\mu g.m^{-3}$ associés aux principaux polluants pour la protection de la santé humaine indiqués dans la réglementation française (les valeurs entre parenthèses indiquent le nombre d'occurrences à ne pas dépasser)

de recommandation) ou l'ensemble de la population (seuils d'alerte). Lorsque les seuils sont atteints, des informations et des recommandations sont émises à destination de la population et des mesures d'urgence sont mises en place pour les seuils d'alerte.

Les actions menées en faveur d'une amélioration de la qualité de l'air ont permis de réduire les niveaux de pollution en France. A l'échelle nationale, les concentrations moyennes annuelles de SO_2 ont baissé sur la période 2000-2014 notamment à proximité des industries qui sont les plus

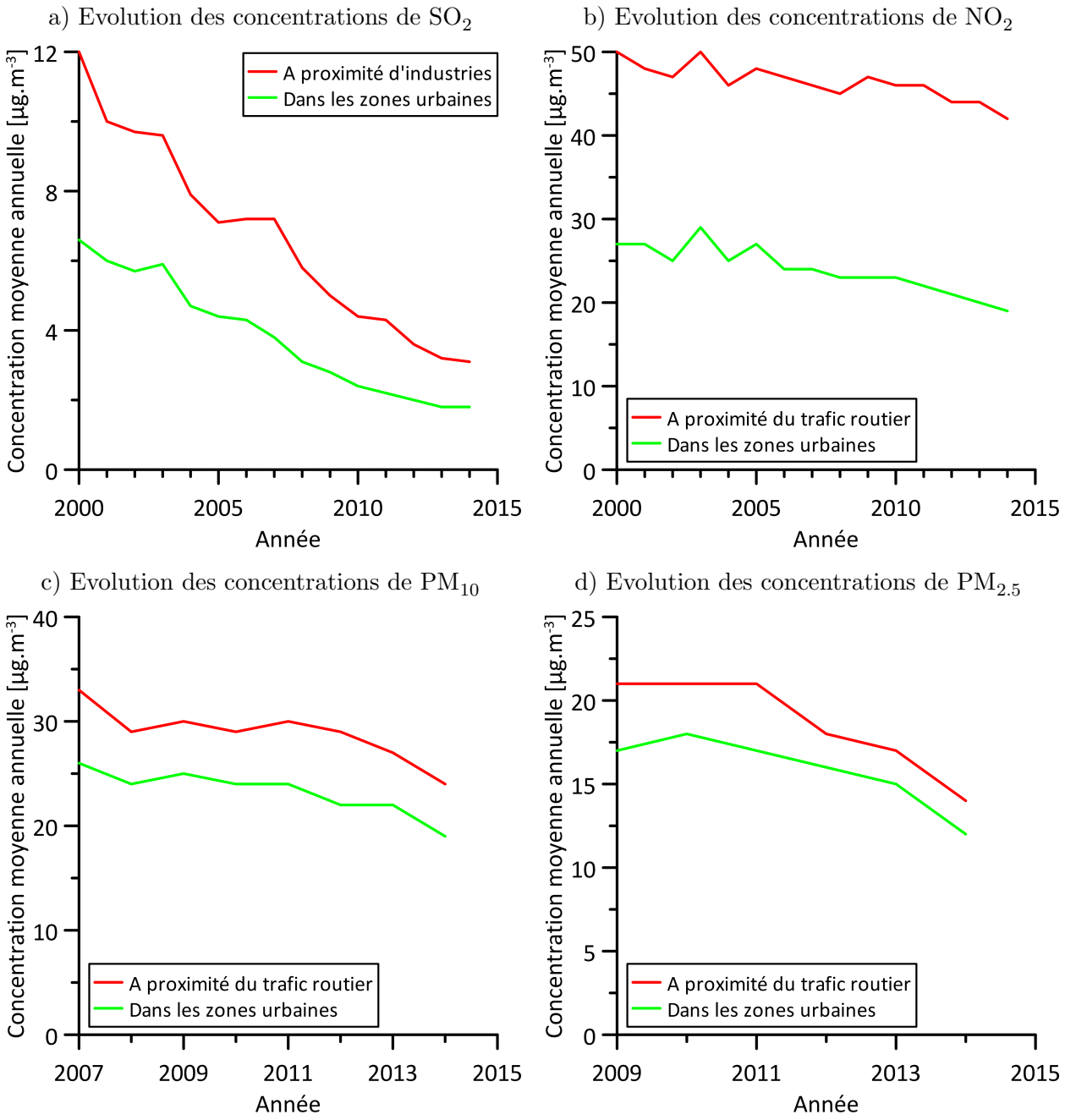


FIGURE 1.3 – Evolution des concentrations de SO_2 (a), de NO_2 (b), de PM_{10} (c) et de $PM_{2.5}$ (d) en France (source : CGDD (2015))

grands émetteurs de ce polluant (figure 1.3). En 2014, la concentration moyenne annuelle de SO_2 à proximité des industries et dans les zones urbaines est respectivement de 3.1 $\mu g.m^{-3}$ et 1.8 $\mu g.m^{-3}$. Ces valeurs sont très inférieures à l'objectif de qualité de 50 $\mu g.m^{-3}$ en moyenne annuelle. De même, les concentrations de SO_2 en 2014 n'ont pas dépassé les valeurs limites associées à ce polluant (CGDD, 2015). De 2000 à 2014, les concentrations moyennes annuelles de NO_2 en France ont également diminué y compris à proximité du trafic routier qui est un grand émetteur de NO_x (figure 1.3). Néanmoins, les concentrations moyennes annuelles de NO_2 en 2014 dépassent l'objectif de qualité de 40 $\mu g.m^{-3}$ en moyenne annuelle pour 36 stations de mesures situées pour la plupart à proximité du trafic routier et dans les zones urbaines (CGDD, 2015). De même, la valeur limite horaire de 200 $\mu g.m^{-3}$ est dépassée pour une station de mesure sur toute la France, cette station étant située à proximité du trafic dans l'agglomération lyonnaise (CGDD, 2015). En France, les concentrations moyennes de PM_{10} à proximité du trafic routier et dans les zones urbaines ont aussi baissé entre 2007 et 2014 (figure 1.3). Cependant, la valeur limite journalière associée à ce polluant est dépassée pour cinq stations de mesure, sur l'ensemble de la France, situées majoritairement à proximité du trafic routier (CGDD, 2015). De même, la concentration moyenne annuelle est supérieure à la valeur limite annuelle de 40 $\mu g.m^{-3}$ pour un site de mesure (CGDD, 2015). A l'instar des PM_{10}, les concentrations moyennes annuelles de $PM_{2.5}$ à proximité du trafic routier et dans les zones urbaines ont également diminué sur la période 2009-2014 en France (figure 1.3). Toutefois, la valeur limite annuelle de 25 $\mu g.m^{-3}$ (en vigueur depuis le 1er janvier 2015) est dépassée pour une station de mesure sur l'ensemble du territoire (CGDD, 2015).

1.6 Conclusion

La pollution atmosphérique constitue un enjeu majeur car elle a des effets néfastes sur l'environnement et sur la santé humaine. Elle augmente notamment le risque de développer un cancer du poumon chez l'Homme. Afin d'améliorer la qualité de l'air, des mesures législatives aux niveaux européen et national ont été prises pour réduire les émissions de polluants. Ces différentes mesures ont notamment permis d'améliorer la qualité de l'air en France au cours de ces quinze dernières années. Néanmoins, les niveaux de concentration dans certaines zones dépassent encore les valeurs limites de concentration ou les objectifs de qualité fixés par la réglementation.

Réduire la pollution atmosphérique passe également par une stratégie efficace de surveillance de la qualité de l'air. Les moyens mis en œuvre pour évaluer les niveaux de concentration sont discutés dans le prochain chapitre.

Chapitre 2
Evaluation de la qualité de l'air

En France, les Associations Agréées de Surveillance de la Qualité de l'Air (AASQA) assurent la gestion et la surveillance de la pollution atmosphérique. Les principaux polluants réglementés et surveillés par les AASQA sont les particules fines (PM_{10} et $PM_{2.5}$), les oxydes d'azote (NO et NO_2), le dioxyde de soufre (SO_2), l'ozone (O_3), le monoxyde de carbone (CO), les métaux lourds (l'arsenic (As), le cadmium (Cd), le nickel (Ni), le plomb (Pb), le mercure (Hg)) et les composés organiques volatils (par exemple le benzène). La surveillance de la qualité de l'air a plusieurs objectifs. Elle permet d'estimer l'exposition à la pollution atmosphérique et d'identifier les zones les plus polluées. La surveillance est aussi effectuée pour veiller au respect des valeurs limites de concentration fixées par la réglementation et pour informer la population sur la qualité de l'air. Elle permet également de comprendre les phénomènes de la pollution atmosphérique et d'évaluer l'efficacité des mesures prises dans le cadre des plans d'action menés pour réduire les niveaux de pollution. Pour évaluer la qualité de l'air, les AASQA s'appuient sur des mesures de concentration réalisées sur le terrain. En complément, elles utilisent aussi des modèles de dispersion atmosphérique.

Les mesures de concentration et la modélisation de la qualité de l'air font l'objet des deux prochaines sections (sections 2.1 et 2.2). La troisième section de ce chapitre porte sur les techniques qui combinent ces deux approches (section 2.3).

2.1 Mesures de concentration

Les AASQA mettent en œuvre des analyseurs automatiques, des préleveurs ou bien encore des tubes à diffusion passive pour évaluer les niveaux de concentration des polluants. Au-delà des mesures effectuées par les AASQA, notons qu'il existe aussi d'autres moyens de mesure tels que les satellites (Noel *et al.*, 1999 ; Evans *et al.*, 2013 ; Van Donkelaar *et al.*, 2015), les ballons-sondes (Pisano *et al.*, 1997 ; Kesselmeier *et al.*, 2000 ; Ojha *et al.*, 2014 ; Renard *et al.*, 2015) ou bien encore les LIDARs (*LIght Detection And Ranging*) (Prata et Prata, 2012 ; Balis *et al.*, 2013). Les analyseurs automatiques et les préleveurs sont généralement situés sur des stations fixes de mesure. L'emplacement de ces stations répond notamment à une préoccupation de santé publique et à la réglementation. La grande majorité des stations sont implantées dans les agglomérations car les

niveaux de concentration pour un certains nombre de polluants (par exemple les PM et les NO_x) sont généralement plus élevés dans ces zones en raison d'émissions plus importantes (Guerreiro *et al.*, 2014 ; Holman *et al.*, 2015). De même, cette implantation géographique est justifiée par le fait que le risque sanitaire dans les environnements urbains est plus important à cause de la plus grande densité de population (Fenger, 1999).

2.1.1 Typologie des stations

Les informations relatives à cette section proviennent du rapport du LCSQA (2015).

La typologie d'une station est définie en fonction de deux paramètres (tableau 2.1). Le premier porte sur l'environnement d'implantation. Trois catégories sont utilisées pour définir l'environnement d'implantation : urbaine, périurbaine et rurale. Cette dernière catégorie est elle-même divisée en trois sous-catégories : proche d'une zone urbaine, régionale et nationale. La détermination de l'environnement d'implantation est notamment réalisée en fonction de deux critères liés à la densité des bâtiments et à la densité de population. Une station ne peut être classée que dans une seule catégorie d'environnement d'implantation. Le deuxième paramètre qui caractérise une station est le type d'influence prédominante. Trois catégories sont utilisées pour définir le type d'influence auquel est soumis une station : industrielle, trafic et fond. Les deux premières catégories correspondent aux stations situées à proximité des industries et celles situées à proximité d'axes routiers majeurs. Pour ces types de station, la pollution est due principalement aux émissions des industries ou celles du trafic. La catégorie fond regroupe les stations pour lesquelles la pollution n'est pas majoritairement liée à un seul type de source. La catégorie du type d'influence dépend du polluant surveillé. Aussi, une station peut être classée dans plusieurs catégories distinctes selon les polluants mesurés. Finalement, la typologie d'une station est déterminée en couplant les deux paramètres. Ainsi, une station peut être par exemple une station de fond urbaine, une station de fond périurbaine ou bien encore une station trafic urbaine. Il convient de noter que certaines combinaisons ne sont pas compatibles avec la réglementation européenne (par exemple une station rurale nationale sous l'influence du trafic). Pour ces cas de figure, l'appellation *observation spécifique* est utilisée.

		Environnement d'implantation				
		Urbaine	Périurbaine	Rurale		
				Proche d'une zone urbaine	Régionale	Nationale
Type d'influence	Fond	U-F	PU-F	RP-F	RR-F	RN-F
	Trafic	U-T	PU-T	RP-T	OS	OS
	Industrielle	U-I	PU-I	RP-I	OS	OS

Table 2.1 – Typologie des stations de mesure (U : Urbain, PU : Périurbain, RP : Rural Proche de zone urbaine, RR : Rural Régional, RN : Rural National, F : Fond, T : Trafic, I : Industrielle, OS : Observation Spécifique) (source : LCSQA (2015))

2.1.2 Types de surveillance

Les analyseurs automatiques des stations fixes fournissent des données quart-horaires et permettent de surveiller continuellement la qualité de l'air (LCSQA, 2016). Ces données permettent notamment de définir un indice journalier de la qualité de l'air dit *indice ATMO* ou *IQA* (Indice de Qualité de l'Air). Cet indice varie entre 1 (très bon) et 10 (très mauvais) et correspond au maximum d'un ensemble de quatre sous-indices. Ces quatre sous-indices varient également entre 1 et 10 et sont respectivement déterminés en fonction des concentrations de SO_2, de NO_x, de O_3 et de PM (arrêté du 22 juillet 2004). En complément, des campagnes de mesures sont parfois effectuées. Celles-ci sont réalisées sur une période temporelle plus courte et sur une zone limitée avec davantage de moyens de mesure (par exemple les tubes à diffusion passive et les laboratoires mobiles). Ces campagnes de mesures permettent d'évaluer plus précisément les niveaux de pollution dans une certaine zone. De même, elles peuvent permettre d'évaluer l'effet d'une infrastructure ou les concentrations de certains polluants qui ne sont pas réglementés mais qui suscitent d'importantes interrogations (par exemple les dioxines et les pesticides).

2.1.3 Avantages et limitations des mesures

Les mesures de concentration constituent les données les plus fiables pour évaluer la qualité de l'air puisqu'elles sont des observations de la *réalité* (Horálek *et al.*, 2007). Néanmoins, elles sont associées à des incertitudes. La directive 2008/50/CE indique que l'incertitude de mesure ne doit pas dépasser 15 % pour l'ozone et le NO_2 et 25 % pour les particules fines (PM_{10} et $PM_{2.5}$). En

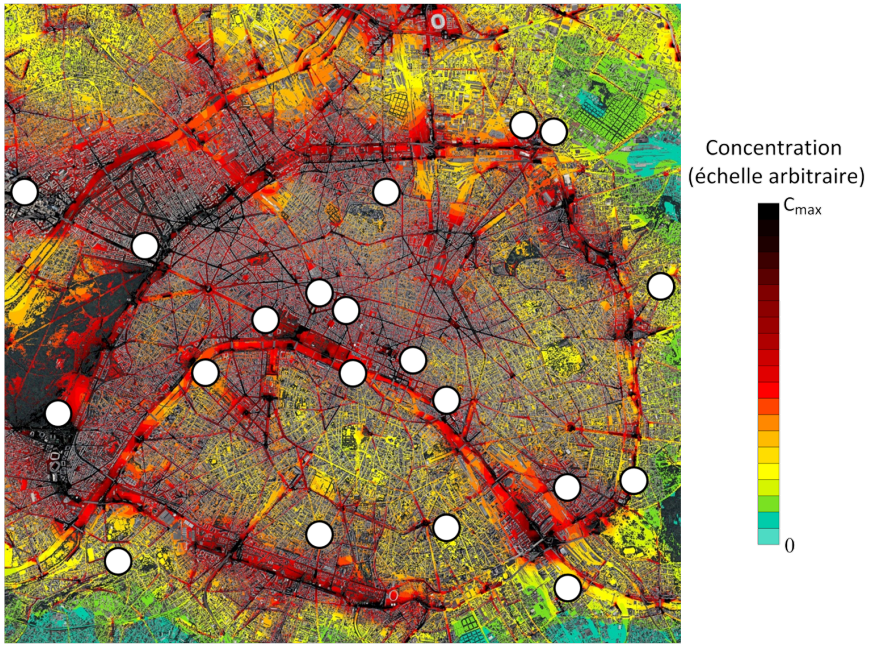


FIGURE 2.1 – Représentation d'un champ de concentration modélisé avec le modèle SIRANE et du réseau de capteurs (points blancs) sur Paris

France, la qualité des mesures effectuées par les AASQA est garantie par une procédure d'assurance qualité qui intègre une chaîne nationale d'étalonnage constituée de trois niveaux d'étalonnage (niveau 1 : LCSQA-LNE, niveau 2 : laboratoires inter-régionaux, niveau 3 : les stations de mesure). La procédure d'assurance qualité intègre également des comparaisons interlaboratoires effectuées périodiquement à tous les niveaux de la chaîne nationale d'étalonnage. L'évaluation de la qualité de l'air avec les mesures au sol est néanmoins limitée par le fait qu'elles sont uniquement représentatives de l'endroit où elles ont été faites et que la distribution spatio-temporelle des stations de mesure est hétérogène. La figure 2.1 représente un champ de concentration sur Paris, modélisé avec le modèle SIRANE. Ce champ de concentration indique que la variabilité spatiale des concentrations est relativement importante. Cependant, les mesures effectuées par la vingtaine de capteurs situés sur l'agglomération parisienne ne permettent pas d'illustrer cette variabilité spatiale. Le nombre limité de stations de mesure est notamment lié à une question de coût économique. Pour les mêmes raisons, les mesures de concentrations sont associées à un nombre limité de polluants.

2.2 Modèles de la qualité de l'air

Les AASQA utilisent également des modèles de dispersion atmosphérique pour cartographier le plus précisément possible les niveaux de concentration dans l'espace et dans le temps. Les modèles de dispersion atmosphérique représentent le transport et la diffusion des polluants au moyen d'équations mathématiques, telles que les équations de Navier-Stokes, qui reposent sur la théorie de la mécanique des fluides. Le champ de concentration d'un polluant est notamment déterminé en résolvant l'équation d'advection-diffusion définie par l'expression 2.1 :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla c = \nabla.(D\nabla c) + S \tag{2.1}$$

où c est la concentration d'un polluant, $\mathbf{u}$ correspond à la vitesse ($\mathbf{u}$ est un vecteur), D est le coefficient de diffusion associé à l'espèce considérée et S représente les termes sources (apports, pertes, réactions chimiques). Pour modéliser la dispersion atmosphérique des polluants, les modèles nécessitent des données d'entrée telles que les caractéristiques des sources d'émissions et les conditions météorologiques. A partir de ces données d'entrée, les modèles déterminent la dispersion atmosphérique des polluants et calculent les niveaux de concentration dans l'air en résolvant les équations de dispersion et de chimie sur un maillage qui correspond à une certaine discrétisation de l'espace.

2.2.1 Echelles de modélisation

La qualité de l'air est influencée par des phénomènes de dispersion atmosphérique et des réactions physico-chimiques qui se déroulent sur une large gamme d'échelles spatio-temporelles (Odman et Russell, 1991). Cependant, il n'existe aucun modèle de dispersion atmosphérique qui représente l'ensemble de ces échelles (Soulhac *et al.*, 2003). Cela s'explique en partie par la limitation de la puissance de calcul des machines actuelles (Soulhac, 2000). Chaque modèle est adapté à une échelle

spatio-temporelle particulière (Brandt *et al.*, 2001). Ainsi, un modèle représente les phénomènes de dispersion atmosphérique et les processus de transformation les plus importants à l'échelle étudiée (Stocker *et al.*, 2012). Globalement, les modèles de qualité de l'air peuvent être classés selon les échelles dans trois grandes catégories : les modèles à l'échelle globale, les modèles à méso-échelle et les modèles à l'échelle locale.

Echelle globale

Les modèles de dispersion atmosphérique à l'échelle globale déterminent l'évolution des niveaux de pollution dans toute l'atmosphère terrestre. Aussi, ce type de modèle résout les équations sur un maillage 3D qui recouvre l'ensemble des couches de l'atmosphère (troposphère, stratosphère, mésosphère et thermosphère) sur tout le globe. Le maillage a généralement une résolution horizontale de quelques degrés de longitude et de latitude. Les modèles à l'échelle globale sont notamment mis en œuvre pour étudier les effets du changement climatique et pour suivre l'évolution des nuages de cendres volcaniques. Parmi les modèles à l'échelle globale, on peut citer les modèles LMDz-INCA (Hauglustaine *et al.*, 2004 ; Hourdin *et al.*, 2006), GEOS-CHEM (Bey *et al.*, 2001), MOZART (Brasseur *et al.*, 1998 ; Emmons *et al.*, 2010) et GOCART (Chin *et al.*, 2000 ; Ginoux *et al.*, 2001 ; Chin *et al.*, 2002).

Méso-échelle

Les modèles à méso-échelle regroupent globalement les modèles à l'échelle continentale et régionale. Ceux-ci décrivent l'évolution des concentrations de polluants dans les basses couches de l'atmosphère sur des domaines allant du continent (par exemple l'Europe) à la région (par exemple la région Auvergne-Rhône-Alpes). Pour ce type de modèles, la résolution spatiale sur le plan horizontal est de quelques dizaines de kilomètres à quelques kilomètres. Ces modèles sont par exemple appliqués pour prévoir la qualité de l'air quotidienne et pour étudier les processus de formation de l'ozone troposphérique. Les modèles CHIMERE (Menut *et al.*, 2013), MOCAGE (Dufour *et al.*, 2005 ; Bousserez *et al.*, 2007), CAMx (ENVIRON, 2008) et CMAQ (Byun et Schere, 2006) font notamment partie de cette catégorie.

Echelle locale

Les modèles à l'échelle locale tels que les modèles à l'échelle urbaine, les modèles à l'échelle du quartier ou bien encore les modèles à l'échelle de la rue évaluent la qualité de l'air dans la couche limite atmosphérique (CLA) sur des domaines allant de quelques dizaines de kilomètres à quelques dizaines de mètres. La CLA est la partie basse de la troposphère soumise à l'influence de la surface terrestre (continentale ou océanique) (Garratt, 1994). L'épaisseur de cette couche varie globalement entre 100 et 3000 m en fonction des conditions météorologiques (Stull, 1988). Les autres parties de l'atmosphère sont aussi influencées par la surface terrestre mais elles réagissent avec des temps plus longs (Stull, 1988). Les modèles à l'échelle locale résolvent généralement les équations

sur un maillage qui a une résolution horizontale de l'ordre du mètre voire de quelques centimètres. Les modèles à l'échelle locale sont notamment utilisés pour évaluer la qualité de l'air à l'échelle urbaine et pour étudier la dispersion atmosphérique de rejets industriels, en situation chronique ou accidentelle. Cette catégorie de modèles inclut notamment les modèles SIRANE (Soulhac *et al.*, 2011), SIRANERISK (Cierco *et al.*, 2010 ; Lamaison *et al.*, 2011 ; Soulhac *et al.*, 2016), ADMS-Urban (Carruthers *et al.*, 1998), OSPM (Berkowicz, 2000a), QUIC (Gowardhan *et al.*, 2006), Micro-Swift-Spray (Tinarelli *et al.*, 2007) et les modèles de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) tels que FLUENT (Fluent, 2009) et Code Saturne (R&D, 2008).

Multi-échelles

Les trois catégories de modèles citées précédemment sont destinées à évaluer des phénomènes qui se déroulent sur des échelles spatio-temporelles distinctes. Plus l'échelle spatio-temporelle est fine, plus la résolution spatio-temporelle des modèles est importante. La résolution spatio-temporelle associée à ces différentes échelles est un compromis entre une minimisation du coût en temps de calcul et une bonne représentativité des phénomènes étudiés. En plus de ces trois catégories, il existe une approche complémentaire. Celle-ci consiste à réaliser une modélisation multi-échelles de la qualité de l'air afin de prendre en compte les phénomènes prépondérants à plusieurs échelles (Odman *et al.*, 1997 ; Garcia-Menendez et Odman, 2011). Cette approche se traduit par la modélisation de la dispersion atmosphérique sur l'ensemble du globe avec une succession de raffinement de la résolution spatio-temporelle sur les zones d'intérêt (Frohn *et al.*, 2002 ; Brandt *et al.*, 2003 ; Constantinescu *et al.*, 2008).

2.2.2 Approches de modélisation

Les modèles de qualité de l'air se distinguent également par la manière de résoudre les équations de la dispersion atmosphérique. Les trois grandes familles de modèles sont les modèles gaussiens, les modèles eulériens et les modèles lagrangiens.

Approche gaussienne

L'approche gaussienne regroupe les modèles de panache gaussien et les modèles à bouffées gaussiennes. Cette approche résout analytiquement l'équation d'advection-diffusion (équation 2.1). La solution analytique indique que la distribution de concentration dans le plan perpendiculaire au vent est gaussienne. Cette solution est déterminée en supposant notamment que les conditions météorologiques sont uniformes spatialement et que les émissions sont stationnaires. De plus, l'approche considère que la diffusion moléculaire est négligeable par rapport à la diffusion turbulente et que la diffusivité turbulente est uniforme. Les approximations des modèles gaussiens ne permettent pas de modéliser la dispersion atmosphérique dans un écoulement complexe (présence d'obstacle, relief, etc ...). Ils sont globalement adaptés à la modélisation de la dispersion des polluants à proximité des sources sur un terrain homogène et plat avec des vitesses de vent supérieures à $1\,\mathrm{m.s^{-1}}$. Ce

type de modèle est donc appliqué uniquement à l'échelle locale. Les modèles gaussiens présentent l'avantage d'avoir un coût en temps de calcul relativement faible. Aussi, ils sont bien adaptés aux études opérationnelles. Parmi les modèles gaussiens, on peut citer les modèles ADMS (Carruthers *et al.*, 1994), AERMOD (Cimorelli *et al.*, 2005), CALPUFF (Scire *et al.*, 2000) et CALINE (Benson, 1992a).

Approche eulérienne

L'équation 2.1 n'a pas de solution analytique excepté dans des cas très simples (par exemple la solution gaussienne). Aussi, il est nécessaire de déterminer une solution numérique. Les équations de transport et de diffusion sont alors discrétisées dans l'espace et dans le temps. Ces équations sont résolues de manière déterministe sur un maillage (2D ou 3D) en considérant que les variables (température, vitesse, concentration, etc ...) sont uniformes dans chaque maille. Dans le cas de l'approche eulérienne, le domaine modélisé est fixé dans l'espace et les échanges de matière (advection, diffusion) sont considérés via les parois des mailles. Plus les mailles sont fines plus la représentation des phénomènes de dispersion est précise. Néanmoins, le coût en temps de calcul devient plus important. Aussi, le nombre de mailles maximum est limité par la puissance de calcul des machines utilisées. Le coût en temps de calcul relativement important constitue un inconvénient pour ce type de modèle. De même, les modèles eulériens soufrent de problèmes relatifs à la modélisation de la turbulence ainsi que de problèmes de diffusion numérique associés aux schémas numériques utilisés. Les avantages de ce type de modèles sont notamment la résolution complète des équations et la possibilité de traiter des cas complexes (relief, bâtiments, etc ...). De plus, l'approche eulérienne peut être utilisée aux différentes échelles (globale, méso-échelle ou locale). Aussi, cette approche est très répandue pour étudier et prévoir la qualité de l'air. Elle est notamment utilisée avec les modèles de qualité de l'air CHIMERE (Menut *et al.*, 2013), CAMx (ENVIRON, 2008), CMAQ (Byun et Schere, 2006), LOTOS-EURO (Schaap *et al.*, 2008), CALGRID (Yamartino *et al.*, 1992) et WRF-Chem (Grell *et al.*, 2005).

Approche lagrangienne

L'approche lagrangienne est une approche stochastique qui consiste à déterminer les trajectoires d'un grand nombre de particules représentant les polluants et à calculer leurs densités de probabilité de présence. Cela permet de déduire des moyennes statistiques telles que la concentration moyenne. Les trajectoires sont déterminées à partir d'informations statistiques telles que les écarts-types de fluctuation de vitesse et les temps caractéristiques d'autocorrélation. Les modèles lagrangiens sont généralement couplés à un modèle eulérien qui détermine l'écoulement dans lequel se dispersent les particules. Le coût en temps de calcul pour les modèles lagrangiens est relativement important notamment lorsque le nombre de sources est élevé. A l'instar de l'approche eulérienne, l'approche lagrangienne présente l'avantage de résoudre complètement les équations. De même, cette approche permet de traiter des cas complexes (relief, bâtiments, etc ...). Globalement, les modèles lagrangiens sont plutôt utilisés pour des études d'impact de rejets accidentels ou de rejets ponctuels (nombre de

sources limité) tels que les éruptions volcaniques. Les modèles de dispersion atmosphérique SLAM (Vendel, 2011 ; Marro *et al.*, 2014), HYSPLIT (Draxler et Hess, 1997), FLEXPART (Stohl *et al.*, 2005) et NAME (Maryon *et al.*, 1991) utilisent notamment une approche lagrangienne.

2.2.3 Choix du modèle

Le modèle de dispersion atmosphérique à utiliser dépend du cas d'étude. Le choix du modèle est notamment associé à l'échelle spatio-temporelle des phénomènes étudiés. De même, la complexité du domaine d'étude est un aspect à prendre en compte lors de la sélection du modèle. Cet aspect permet entre autre d'estimer si les hypothèses d'un modèle sont adaptées au cas d'étude. Enfin, le choix est également guidé par un aspect pratique qui concerne le coût en temps de calcul. Ce dernier critère est essentiel pour les applications telles que la prévision de la qualité de l'air qui nécessitent des modèles opérationnels.

2.2.4 Avantages et limites

Aucun modèle n'est parfait et ne peut prédire exactement les niveaux de concentration réels. Cela est notamment dû à la complexité des phénomènes atmosphériques qui sont difficiles à modéliser. De même, il n'est pas possible de fournir des données d'entrée qui soient parfaitement représentatives des situations réelles. Les estimations des niveaux de pollution fournies par les simulations numériques sont considérées comme moins précises que les mesures. Cependant, les simulations numériques permettent de cartographier les niveaux de pollution sur les zones d'intérêt avec une meilleure résolution spatio-temporelle que les observations fixes au sol (figure 2.1). De plus, les modèles de dispersion atmosphérique permettent de réaliser des études de scénario. Celles-ci sont par exemple effectuées pour prévoir les conséquences associées à l'implantation de nouveaux axes routiers, à la mise en œuvre des nouvelles politiques sur le transport ou bien encore à la réalisation d'un projet d'urbanisme. De même, les outils numériques permettent d'évaluer la contribution des sources sur les niveaux de pollution. Enfin, les modèles de dispersion atmosphérique présentent également l'avantage de pouvoir réaliser des prévisions de la qualité de l'air à courte échéance (qualité de l'air urbaine) ou à long terme (changement climatique).

2.3 Assimilation de données

Du fait de leurs avantages respectifs, la mesure et la modélisation sont deux approches indispensables et complémentaires pour évaluer la qualité de l'air. En effet, les mesures de concentration représentent des données de référence auxquelles se comparer pour évaluer les modèles de dispersion atmosphérique. De même, les modélisations de la qualité de l'air permettent de vérifier la pertinence de l'emplacement des capteurs et d'optimiser le réseau de mesures. Pendant longtemps, ces deux approches ont été utilisées de manière distincte pour évaluer la qualité de l'air. Néanmoins, la qualité de l'air est évaluée depuis quelques années en combinant les données mesurées par les capteurs

et les estimations fournies par les modélisations. Cette démarche est appliquée en utilisant des méthodes d'assimilation de données (AD). Celles-ci sont généralement définies comme des méthodes statistiques combinant des données mesurées et modélisées. Néanmoins, la définition du terme *assimilation de données* diffère selon les auteurs. La définition la plus générique est celle de (Talagrand, 1997) qui définit l'assimilation de données comme l'utilisation de plusieurs sources d'informations pour déterminer le plus précisément possible l'état d'un système. Rabier (1993), Kalnay (2003), Swinbank *et al.* (2003) et(Denby *et al.*, 2005) précisent cette définition et désignent l'assimilation de données comme la combinaison de modèles et de mesures permettant d'améliorer l'estimation de l'état d'un système. Dans la littérature, l'expression *fusion de données* est aussi parfois utilisée. Denby et Spang (2010) et Zhang *et al.* (2012) font une distinction entre les méthodes de fusion de données et les méthodes d'assimilation de données. Denby et Spang (2010) indiquent que les méthodes de fusion de données combinent plusieurs types de données, avec une approche statistique ou géométrique, pour estimer de la manière la plus satisfaisante possible l'état d'un système. La principale différence avec l'assimilation de données réside dans le fait que la fusion de données ne prend pas en compte les lois physiques à l'origine des phénomènes étudiés. Par la suite, cette distinction n'est pas prise en compte et le terme *assimilation de données* fait référence à la combinaison de données mesurées et modélisées, avec une approche statistique ou géométrique, permettant d'estimer le meilleur état possible d'un système. Les méthodes d'assimilation de données sont utilisées depuis plusieurs décennies dans le domaine de la physique atmosphérique, notamment en météorologie (Morel et Talagrand, 1974 ; McPherson, 1975 ; Miyakoda *et al.*, 1976, 1978 ; McPherson *et al.*, 1979). Cependant, elles sont appliquées au domaine de la qualité de l'air uniquement depuis la fin des années 1990 (Elbern *et al.*, 1997 ; Elbern et Schmidt, 1999 ; Elbern *et al.*, 2000 ; Segers *et al.*, 2000 ; van Loon *et al.*, 2000). Les méthodes d'assimilation de données sont couramment utilisées avec les modèles à méso-échelle mais encore peu appliquées avec les modèles à l'échelle locale. L'utilisation de ces méthodes à l'échelle locale fait l'objet du chapitre 10.

2.4 Conclusion

Les mesures de concentration et la modélisation de la dispersion atmosphérique sont deux approches utilisées pour évaluer la qualité de l'air. Les mesures reflètent la réalité et constituent les données les plus fiables pour évaluer la qualité de l'air. Néanmoins, la distribution spatio-temporelle des mesures est hétérogène et ne permet pas d'évaluer les niveaux de concentration sur tout un domaine. Les modèles de dispersion atmosphérique permettent d'estimer la qualité de l'air avec une résolution spatio-temporelle plus fine sur toute une zone d'étude. Cependant, les estimations fournies par les simulations numériques sont considérées comme moins précises que les mesures. Depuis quelques années, l'évaluation de la qualité de l'air est également effectuée en combinant les mesures et les estimations associées aux simulations numériques avec des méthodes d'assimilation de données. Ces méthodes sont jusqu'à aujourd'hui surtout utilisées pour évaluer la qualité de l'air à méso-échelle.

Chapitre 3
Présentation générale de l'étude

Les deux premiers chapitres ont permis d'introduire la thématique générale de notre projet de recherche : la pollution atmosphérique et l'évaluation de la qualité de l'air.

Dans ce troisième chapitre, nous expliquons les motivations (section 3.1) et les objectifs (section 3.2) de ce projet de recherche. De même, nous exposons la démarche appliquée au cours de ce travail de thèse (section 3.3).

3.1 Contexte

3.1.1 Risque sanitaire associé à la pollution de l'air plus important en milieu urbain

Depuis plusieurs décennies, l'exode rural augmente (Fenger, 1999). D'après les Nations Unies, la proportion de la population mondiale vivant en zone urbaine est passée de 30 % en 1950 à 54 % en 2014 (UN, 2014). Cette proportion devrait atteindre 66 % d'ici 2050. La base de données de l'OMS (WHO, 2016) indique que les concentrations moyennes annuelles de PM_{10} en 2014 excèdent les valeurs recommandées par l'OMS dans 522 villes dans le monde (données sur 1143 villes en 2014). C'est également le cas pour les concentrations de $PM_{2.5}$ dans 728 villes. Les niveaux de pollution dans les milieux urbains sont globalement plus élevés notamment en raison d'émissions plus importantes (Guerreiro *et al.*, 2014 ; Holman *et al.*, 2015). Les fortes concentrations de polluants en milieu urbain conjuguées à l'accroissement de l'urbanisation augmente a fortiori le risque d'effets sanitaires importants dus à la pollution atmosphérique. Aussi, la qualité de l'air en milieu urbain constitue une problématique majeure.

3.1.2 Besoin d'améliorer la modélisation de la qualité de l'air en milieu urbain

Pour améliorer la qualité de l'air, il est important de réduire les émissions. De plus, il est nécessaire de pouvoir évaluer le plus précisément possible les niveaux de concentration pour lutter efficacement contre les effets de la pollution atmosphérique. Pour estimer les niveaux de concentration dans les zones urbaines, il est nécessaire d'évaluer la qualité de l'air à l'échelle de la rue. Cette

échelle correspond globalement à l'échelle caractéristique de la variabilité spatiale des concentrations en milieu urbain (Kousa *et al.*, 2002). Elle correspond également à une échelle pertinente pour évaluer les effets sanitaires dans les zones urbaines (Nyberg *et al.*, 2000 ; Bellander *et al.*, 2001 ; Borrego *et al.*, 2006).

En utilisant uniquement des appareils de mesures (et sans effectuer des traitements statistiques), il faudrait disposer de plusieurs dizaines de milliers de capteurs pour évaluer la qualité de l'air à l'échelle d'une agglomération avec une telle résolution spatiale. Aussi, cette démarche n'est actuellement pas envisageable d'un point de vue économique. A titre de comparaison, le réseau de mesures des AASQA en France est composé d'environ 1600 capteurs répartis sur près de 650 stations sur tout le territoire national (CGDD, 2015).

Les modèles urbains de qualité de l'air permettent de cartographier les niveaux de concentration avec une résolution spatiale de quelques dizaines de mètres voire quelques mètres. Néanmoins, les estimations fournies par les simulations numériques à l'échelle urbaine (mais également aux autres échelles) sont globalement moins fiables que les mesures. Cela est dû à diverses raisons. Bien que les connaissances sur les phénomènes de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine ont évolué, les modèles urbains restent imparfaits. De plus, les modèles urbains doivent répondre à des contraintes opérationnelles comme permettre d'estimer la qualité de l'air avec un temps de simulation relativement court afin de pouvoir prendre des mesures et mettre en place des actions le plus rapidement possible en cas de besoin. Aussi, les modèles urbains opérationnels s'appuient sur un certain nombre d'hypothèses simplificatrices pour réduire le coût en temps de calcul. Cela constitue une autre source d'incertitude sur les estimations fournies par ce type de modèle. De même, l'estimation des données d'entrée des modèles est une étape complexe et est à l'origine d'une grande partie des incertitudes associées aux estimations (Soulhac *et al.*, 2012). Plusieurs études ont comparé les estimations des modèles urbains à des mesures de concentration effectuées en zone urbaines (Kukkonen *et al.*, 2003 ; Chan et Leach, 2007 ; Hendricks *et al.*, 2007 ; Hanna et Chang, 2012 ; Soulhac *et al.*, 2012 ; Tilloy *et al.*, 2013). Dans les études de Kukkonen *et al.* (2003), Soulhac *et al.* (2012) et Tilloy *et al.* (2013) le coefficient de corrélation entre les estimations fournies par le modèle urbain utilisé et les mesures de concentration de NO_2 varie entre 0.59 et 0.81 (cet indice statistique illustre la corrélation entre deux variables et varie entre -1 et 1, 1 étant la valeur optimale). De même, les résultats de ces trois études indiquent que les concentrations moyennes modélisées de NO_2 sont entachées d'une erreur qui oscille entre 1 % et 33 %. Ce constat indique qu'il est nécessaire de travailler à la réduction des incertitudes associées aux simulations numériques à l'échelle urbaine.

3.2 Problématique abordée dans le cadre de ce travail

3.2.1 Objectifs

Le but principal de ce projet de recherche est de réduire les incertitudes associées aux estimations des modèles de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine tout en gardant une approche opérationnelle. Pour cela, trois approches principales sont possibles. La première consiste à amé-

liorer les modèles urbains de qualité de l'air et leur implémentation. La seconde repose sur une meilleure estimation des données d'entrée des modèles. La troisième consiste à combiner les modèles de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine avec des données complémentaires. Dans ce travail de thèse, seules les deux dernières approches sont étudiées. Celles-ci sont respectivement abordées en utilisant une approche de modélisation multi-échelles et en appliquant des méthodes d'assimilation de données.

3.2.2 Apport de la modélisation multi-échelles ?

Dans ce travail de thèse, nous utilisons l'approche de modélisation multi-échelles pour estimer les conditions aux limites (à fournir en données d'entrée) d'un modèle urbain à partir d'un modèle à méso-échelle. Cette démarche a déjà fait l'objet de plusieurs études (Brandt *et al.*, 2003 ; Soulhac *et al.*, 2003 ; Beevers *et al.*, 2012 ; Stocker *et al.*, 2012). Beevers *et al.* (2012) ont utilisé une approche de modélisation multi-échelles pour estimer la qualité de l'air sur Londres et indiquent que les estimations sont relativement bonnes. Cependant, cette étude n'évalue pas l'apport de la modélisation multi-échelles par rapport au cas où seul le modèle à méso-échelle ou le modèle urbain est utilisé. En revanche, Brandt *et al.* (2003), Soulhac *et al.* (2003) et Stocker *et al.* (2012) comparent les résultats obtenus en utilisant uniquement le modèle à méso-échelle et ceux associés à la modélisation multi-échelles. Ils montrent notamment que les résultats sont plus satisfaisants avec le système de modélisation multi-échelles. Seuls Stocker *et al.* (2012) évaluent également l'apport de la modélisation multi-échelles par rapport au cas où seul le modèle urbain est utilisé. Ils indiquent que les résultats sont relativement similaires. Ce constat conduit à deux interrogations. La modélisation multi-échelles permet-elle d'améliorer l'estimation des conditions aux limites pour les modèles urbains et les résultats fournis par ce type de modèle ? Si tel est le cas, quelle est l'approche la plus efficace ? Ce travail de thèse tente notamment de répondre à ces questions.

3.2.3 Apport des méthodes d'assimilation de données ?

Dans ce projet de recherche, nous appliquons des méthodes d'assimilation de données pour combiner un modèle de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine avec des mesures de concentration. Cette approche est jusqu'à aujourd'hui essentiellement appliquée avec des modèles à méso-échelle (Casado *et al.*, 1994 ; Tarrasón *et al.*, 1998 ; Blond *et al.*, 2003 ; McKeen *et al.*, 2005 ; Wilczak *et al.*, 2006 ; Candiani *et al.*, 2013). Tilloy *et al.* (2013) ont utilisé cette approche avec un modèle urbain de qualité de l'air. Cette étude indique que les résultats à l'issue de l'assimilation sont globalement plus satisfaisants que ceux obtenus en utilisant uniquement le modèle urbain. Dans cette étude, seule la méthode BLUE a été utilisée. A notre connaissance, cette étude constitue la seule étude qui porte sur l'assimilation de données avec un modèle urbain de qualité de l'air. Ce bilan conduit à deux interrogations auxquelles ce travail de thèse tente de répondre. Les méthodes d'assimilations permettent-elles d'améliorer la modélisation de la qualité de l'air à l'échelle urbaine (l'étude de Tilloy *et al.* (2013) indique que c'est le cas mais cela ne concerne qu'un seul cas d'étude) ? Si c'est le cas, quelle est la méthode d'assimilation la plus performante ?

3.3 Démarche

3.3.1 Utilisation du modèle urbain de dispersion atmosphérique SIRANE (partie II)

Les études associées à ce projet de recherche sont réalisées avec le modèle SIRANE qui est présenté au chapitre 4. Le choix de ce modèle s'explique pour plusieurs raisons. Le modèle SIRANE, qui est développé au sein du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique (où se déroule ce projet de recherche) depuis plus de 15 ans (Soulhac, 2000 ; Soulhac *et al.*, 2001 ; Garbero *et al.*, 2006 ; Garbero, 2008 ; Salizzoni *et al.*, 2008 ; Soulhac *et al.*, 2008 ; Salizzoni *et al.*, 2009a,b ; Soulhac *et al.*, 2009 ; Garbero *et al.*, 2010 ; Soulhac et Salizzoni, 2010 ; Salizzoni *et al.*, 2011 ; Soulhac *et al.*, 2011, 2012, 2013 ; Salem *et al.*, 2015), est un des rares modèles de qualité de l'air dédié à l'échelle urbaine qui permette d'évaluer les niveaux de concentration avec une résolution spatiale relativement fine de l'ordre de la dizaine de mètres. De plus, ce modèle a des spécificités qui lui sont propres et qui sont pertinentes pour l'évaluation de la qualité de l'air dans les zones urbaines. Ce modèle a déjà fait l'objet de plusieurs études de validation en soufflerie (Soulhac, 2000 ; Carpentieri *et al.*, 2012 ; Salem *et al.*, 2015) et d'une étude de validation vis-à-vis de mesures de terrain (Soulhac *et al.*, 2012). De même, SIRANE est utilisé en France par plusieurs AASQA afin d'estimer la qualité de l'air de manière opérationnelle dans les zones urbaines et par plusieurs équipes de recherche dans des études épidémiologiques pour évaluer les effets sanitaires de la pollution atmosphérique (Jacquemin *et al.*, 2013 ; Morelli *et al.*, 2016). SIRANE a également été utilisé dans des études pilotes sur la qualité de l'air à Turin (Castagnetti *et al.*, 2008 ; Garbero *et al.*, 2011), à Florence (Giambini *et al.*, 2011) et à Milan (Biemmi *et al.*, 2010).

L'apport des approches de modélisation multi-échelles et d'assimilation de données est analysé sur deux cas d'étude qui sont présentés dans le chapitre 5. Ce chapitre présente également les performances du modèle SIRANE sur ces deux cas d'étude. Les résultats associés à ces simulations SIRANE constituent les résultats de référence auxquels se comparer pour évaluer l'apport des approches étudiées.

3.3.2 Etude de l'approche de modélisation multi-échelles (partie III)

L'étude associée à l'approche de modélisation multi-échelles a trois objectifs. Le premier objectif est de déterminer si les méthodes associées à l'approche de modélisation multi-échelles et proposées dans la littérature permettent d'améliorer l'estimation des conditions aux limites relatives aux modèles urbains de qualité de l'air et par conséquent d'améliorer les résultats obtenus avec ces modèles. Le second objectif est de proposer d'autres méthodes ou d'autres approches pour réaliser un système de modélisation multi-échelles et de les évaluer. Le troisième objectif est de comparer les résultats obtenus avec les différentes méthodes exploitées au cours de ce travail de thèse.

Dans la partie III, nous procédons tout d'abord à une brève revue des méthodes associées à l'approche de modélisation multi-échelles décrites dans la littérature, notamment celles utilisées pour évaluer la qualité de l'air à l'échelle urbaine (chapitre 7). Cette étape permet d'identifier les

méthodes applicables dans notre projet de recherche. Ensuite, nous décrivons dans le chapitre 8 le modèle à méso-échelle utilisé au cours de ce travail de thèse pour réaliser un système de modélisation multi-échelles. Nous présentons également dans le chapitre 8 les résultats obtenus avec ce modèle sur le cas d'étude utilisé pour analyser l'apport de la modélisation multi-échelles. Par la suite, nous décrivons les méthodes utilisées dans ce projet de recherche et analysons les résultats obtenus avec celles-ci (chapitre 9). L'analyse des résultats permet notamment d'évaluer l'apport de ces méthodes vis-à-vis des modèles à méso-échelle et des modèles urbains. De même, nous étudions l'influence des différents termes qui interviennent dans les méthodes utilisées. Enfin, nous effectuons une inter-comparaison des résultats obtenus avec les différentes méthodes.

3.3.3 Etude de l'approche d'assimilation de données (partie IV)

L'objectif associé à l'étude des méthodes d'assimilation de données est multiple. Le premier objectif est de déterminer si les méthodes d'assimilation de données décrites dans la littérature permettent d'améliorer les estimations fournies par des modèles urbains de qualité de l'air. Le second objectif est de proposer d'autres méthodes ou d'autres approches pour assimiler les données. Le dernier objectif est de comparer les résultats obtenus avec les différentes méthodes d'assimilation de données utilisées dans ce projet de recherche.

Dans la partie IV, nous faisons dans un premier temps un bref état de l'art des méthodes d'assimilation de données décrites dans la littérature (chapitre 10). Cette étape permet d'identifier les méthodes d'assimilation de données qui sont adaptées à notre projet de recherche. Ensuite, nous décrivons les méthodes d'assimilation de données utilisées au cours de ce travail de thèse et examinons les résultats obtenus à l'aide de ces méthodes (chapitre 11). L'analyse des résultats permet notamment d'évaluer l'apport de ces méthodes par rapport aux modèles urbains. De plus, nous réalisons une étude de sensibilité pour chaque méthode afin d'estimer l'influence de certains paramètres sur les résultats issus de l'assimilation de données. Enfin, nous effectuons une inter-comparaison des résultats obtenus avec les différentes méthodes d'assimilation utilisées au cours de ce travail de thèse.

3.3.4 Conclusion et perspectives

Pour conclure, nous dressons un bilan des études relatives aux approches de modélisation multi-échelles et d'assimilation de données effectuées dans ce projet de recherche. De même, nous indiquons des perspectives et des pistes à approfondir.

Conclusion de la première partie

La pollution atmosphérique est un problème majeur sur le plan environnemental, sanitaire et économique. Le risque sanitaire est notamment plus important dans les milieux urbains car les niveaux de concentration et la densité de population sont relativement plus élevés dans ce type d'environnement. Pour améliorer la qualité de l'air dans les environnements urbains, il est nécessaire de réduire les émissions. Il est également nécessaire de pouvoir évaluer les niveaux de concentration pour lutter contre les effets de la pollution de l'air. Actuellement, la mise en œuvre de modèles urbains de qualité de l'air est le seul moyen d'évaluer les concentrations de polluants dans les zones urbaines avec une résolution spatiale suffisante. Cependant, les incertitudes relatives aux estimations fournies par ce type de modèles sont plus importantes que celles associées aux mesures. Aussi, l'objectif de ce projet de recherche est de réduire ces incertitudes afin d'améliorer l'évaluation de la qualité de l'air à l'échelle urbaine. Pour cela, nous étudions deux approches : la modélisation multi-échelles et les méthodes d'assimilation de données.

Le modèle urbain utilisé dans le cadre de ce projet de recherche est le modèle SIRANE. La prochaine partie décrit ce modèle et les résultats obtenus avec celui-ci sur les cas d'études de référence analysés dans ce travail de thèse.

Deuxième partie

Modèle SIRANE et simulations de référence

Chapitre 4
Présentation du modèle SIRANE

SIRANE est un modèle opérationnel de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine. A cette échelle, il existe actuellement trois grandes familles d'approches pour modéliser la dispersion atmosphérique de manière opérationnelle : les modèles de rue-canyon, les modèles de réseau de rues et les modèles *de bâtis résolus*. Les modèles de CFD ne sont pas évoqués car ils ne constituent pas une solution opérationnelle, à cause de leur coût important en temps de calcul, sauf sur des domaines très réduits (par exemple quelques rues). Les trois approches citées précédemment diffèrent dans la complexité associée à la représentation de la géométrie urbaine et de fait par le coût en temps de calcul. Les modèles de rue-canyon tels que SBLINE (Namdeo et Colls, 1996), CALINE (Benson, 1992b), CPMB (Yamartino et Wiegand, 1986), OSPM (Hertel et Berkowicz, 1989) et ADMS-Urban (McHugh *et al.*, 1997 ; Carruthers *et al.*, 2000) sont généralement des modèles de boîtes ou des modèles gaussiens modifiés qui résolvent l'écoulement atmosphérique sans tenir compte explicitement de l'influence des bâtiments. Ce type de modèle prend indirectement en compte les effets du bâti grâce à des relations paramétriques qui simulent le phénomène de piégeage dans les rues-canyons (Hertel et Berkowicz, 1989). En revanche, les modèles de bâtis résolus comme QUICURB (Röckle, 1990 ; Brown *et al.*, 2009, 2013) et Micro Swift Spray (Moussafir *et al.*, 2004 ; Tinarelli *et al.*, 2007) résolvent de manière détaillée l'écoulement atmosphérique dans la canopée urbaine à l'aide de modèles pronostiques (Gowardhan *et al.*, 2011) et diagnostiques (Duchenne *et al.*, 2011). La dispersion atmosphérique est ensuite déterminée avec une approche lagrangienne (Moussafir *et al.*, 2004) ou eulérienne (Gowardhan *et al.*, 2011). L'approche de réseau de rues (Soulhac, 2000 ; Hamlyn *et al.*, 2007 ; Soulhac *et al.*, 2011) introduite initialement par Soulhac (2000) peut être considérée comme un compromis entre les deux approches précédentes. Cette approche est basée sur une représentation simplifiée de la géométrie urbaine et sur une paramétrisation des principaux phénomènes d'écoulement dans les zones urbaines. A notre connaissance, SIRANE (Soulhac *et al.*, 2011, 2012) est le seul modèle opérationnel actuellement utilisé dans les études de la qualité de l'air qui soit basé sur l'approche de réseau de rues. Ce modèle est notamment utilisé par plusieurs AASQA afin d'évaluer la qualité de l'air dans les environnements urbains.

Ce chapitre a pour but de décrire plus en détail le modèle SIRANE. Dans un premier temps, nous exposons le principe général du modèle (section 4.1). Ensuite, nous décrivons la paramétrisation

adoptée par le modèle SIRANE pour modéliser les phénomènes de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine (sections 4.2, 4.3 et 4.4). Enfin, nous présentons les données d'entrée du modèle (section 4.5).

4.1 Principe général du modèle SIRANE

L'écoulement dans la canopée urbaine est généré par l'écoulement de couche limite atmosphérique qui se développe au-dessus de la canopée urbaine (Britter et Hanna, 2003 ; Vardoulakis *et al.*, 2003 ; Dobre *et al.*, 2005 ; Soulhac *et al.*, 2008 ; Garbero *et al.*, 2010 ; Soulhac et Salizzoni, 2010). L'écoulement dans la canopée est notamment caractérisé par des régions de recirculation qui piègent les polluants et par du confinement entre les bâtiments qui limite leur dispersion (DePaul et Sheih, 1985 ; Oke, 1988 ; Dabberdt et Hoydysh, 1991 ; Oke, 2002 ; Britter et Hanna, 2003 ; Belcher, 2005 ; Dobre *et al.*, 2005 ; Soulhac *et al.*, 2008 ; Soulhac et Salizzoni, 2010 ; Salizzoni *et al.*, 2011 ; Soulhac *et al.*, 2011, 2013). Pour modéliser la dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine, le modèle SIRANE divise le domaine d'étude en deux sous-domaines : la canopée urbaine et l'atmosphère extérieure. L'interface fictive entre ces deux sous-domaines se situe approximativement au niveau des toits (figure 4.1b).

Dans l'atmosphère extérieure, la dispersion atmosphérique est déterminée à l'aide de modèles gaussiens en supposant que l'écoulement est un écoulement de couche limite sur une surface rugueuse (figure 4.1c). La sous-couche de rugosité juste au-dessus de la canopée urbaine (Rotach, 1995) est négligée. Dans la canopée urbaine, la dispersion atmosphérique est estimée avec un modèle de

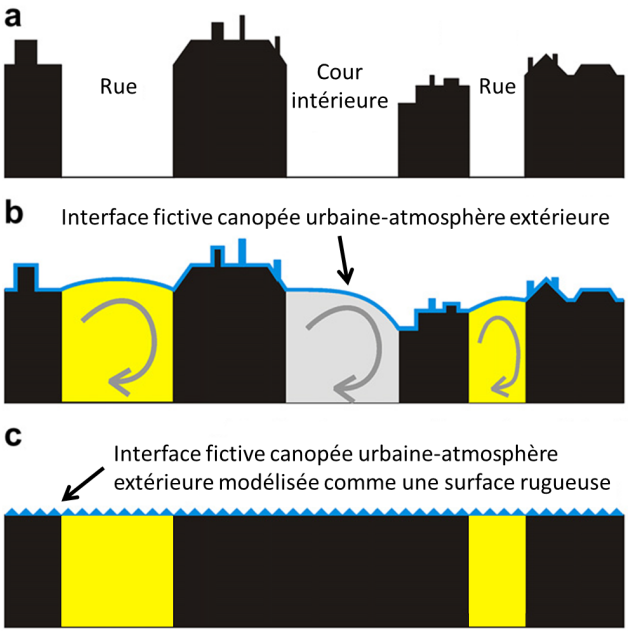


FIGURE 4.1 – Représentation de la géométrie urbaine réelle (a,b) et modélisée (c). Les zones jaunes sont associées aux rues-canyons modélisées dans la canopée urbaine alors que les zones grises ne le sont pas. La ligne bleue représente l'interface fictive canopée urbaine-atmosphère extérieure.

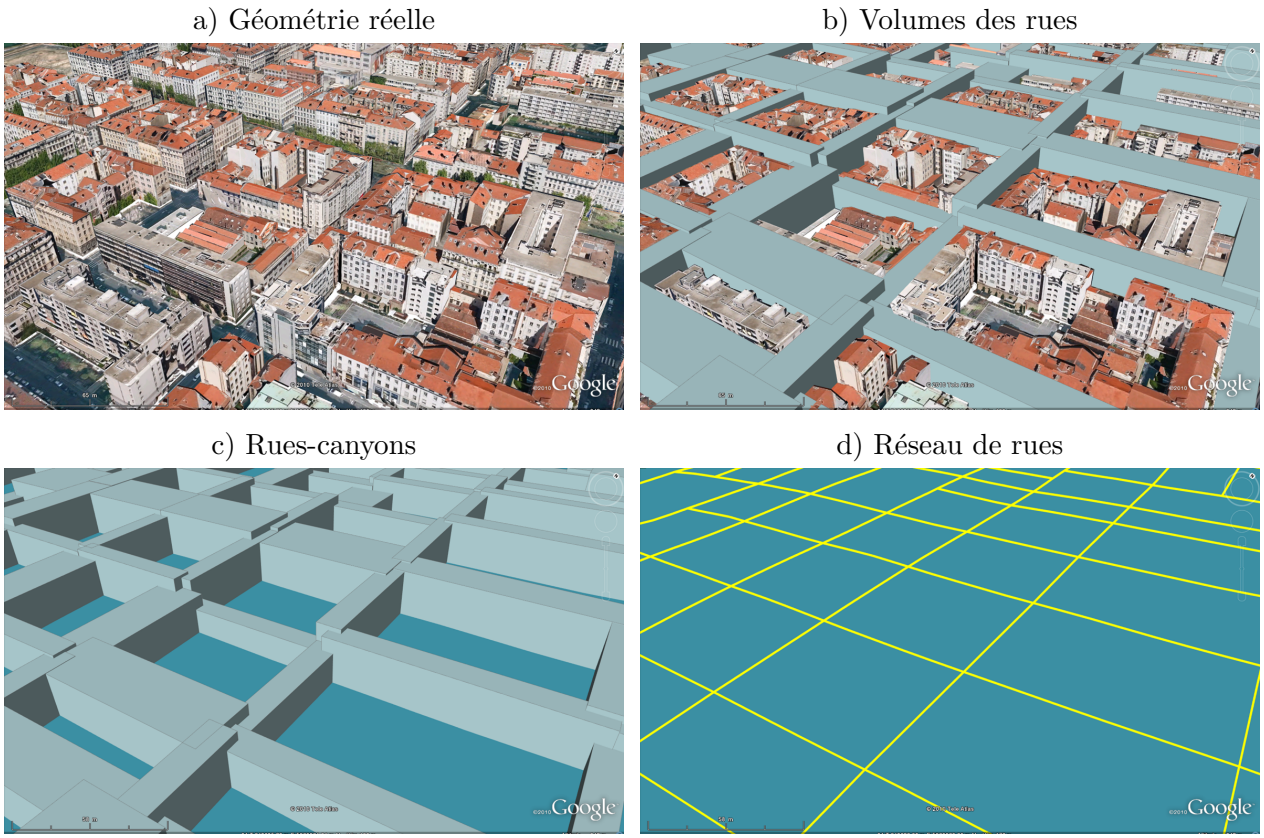


FIGURE 4.2 – Représentation de la géométrie urbaine dans le modèle SIRANE : géométrie réelle (a), volumes des rues (b), rues-canyons (c) et réseau de rues (d)

réseau de rues. Avec ce modèle, la géométrie urbaine est simplifiée et est décrite par une série de rues (ou tronçons de rue), représentées par des segments, connectées les unes aux autres par des intersections, représentées par des nœuds (figure 4.2). Chaque segment représente le volume d'une rue qui est modélisé comme une boîte parallélépipédique de largeur W, de hauteur H et de longueur L. Cette représentation suppose que la hauteur des bâtiments de chaque côté est similaire. Dans chaque rue, la concentration est supposée homogène. Celle-ci est estimée en réalisant un bilan de masse qui prend en compte des phénomènes de transport de polluants modélisés à l'aide de relations paramétriques.

Le modèle de réseau de rues est appliqué uniquement pour les rues-canyons. Les rues-canyons sont des rues relativement étroites bordées de chaque côté par des bâtiments (Nicholson, 1975). Cette géométrie de rue est notamment la plus défavorable à la dispersion des polluants émis à l'intérieur de la rue car elle favorise le phénomène de recirculation (Oke, 1988 ; Soulhac, 2000). Oke (1988) indique qu'il existe trois régimes d'écoulement dans une rue-canyon symétrique (bâtiments avec une hauteur relativement similaire de chaque côté) : *isolated roughness* ; *wake interference* ; et *skimming flow* (figure 4.3). Le régime d'écoulement dépend notamment du rapport d'aspect W/H. Dans le cas de l'écoulement *isolated roughness* ($5 < W/H$), l'éloignement entre les bâtiments est suffisant pour que la zone de recirculation en aval du premier bâtiment n'interagisse pas avec

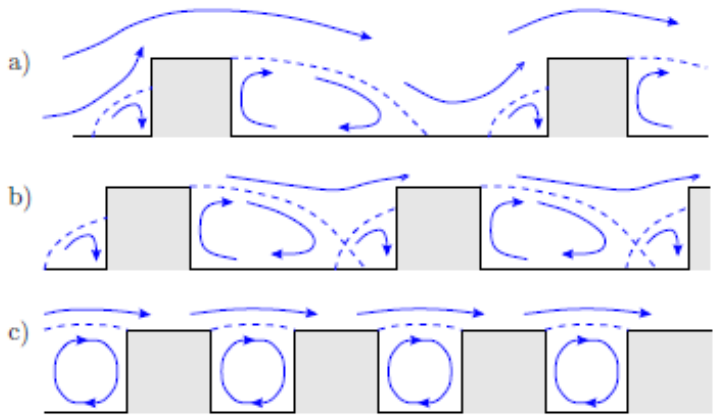


FIGURE 4.3 – Régimes d'écoulement dans une rue-canyon bidimensionnelle : (a) *isolated roughness*, (b) *wake interference*, (c) *skimming flow* (d'après Oke (1988)).

celle en amont du bâtiment suivant. Dans ce cas, l'écoulement atmosphérique pénètre dans la rue et évacue les polluants. Dans le cas de l'écoulement *wake interference* ($1.5 < W/H < 5$), les bâtiments sont suffisamment proches pour que la zone de recirculation en aval du premier bâtiment interagisse avec celle en amont du second bâtiment. Dans ce régime, l'écoulement pénètre encore légèrement dans la rue. Dans le cas du régime *skimming flow* ($W/H < 1.5$), la distance entre les deux bâtiments est encore plus faible et une seule zone de recirculation est présente. Dans cette dernière configuration, l'écoulement atmosphérique extérieur est peu influencé par la présence de la cavité et ne pénètre quasiment pas dans la rue. D'autres études montrent que deux zones de recirculation contre-rotatives sont présentes lorsque la rue est très étroite ($2/3 \leq W/H$) ou lorsque la rue n'est pas symétrique, c'est-à-dire lorsque la rue est bordée par des bâtiments avec une hauteur différente de chaque côté (Hoydysh et Dabberdt, 1988 ; Pavageau, 1996 ; Rafailidis, 1997 ; Hassan et Crowther, 1998 ; Soulhac, 2000 ; Britter et Hanna, 2003). Le modèle SIRANE considère que l'écoulement extérieur ne pénètre (quasiment) pas dans la canopée urbaine puisqu'il est modélisé comme un écoulement de couche limite sur une surface rugueuse correspondant à l'interface canopée urbaine-atmosphère extérieure. Ce type d'écoulement correspond globalement aux régimes d'écoulement *wake interference* et *skimming flow*. Aussi, SIRANE considère qu'une rue est une rue-canyon si $W/H \leq 3$ (3 correspond globalement à la valeur intermédiaire de la gamme caractéristique des rapports d'aspect relatifs au régime *wake interference*). Dans le cas contraire, le modèle considère que c'est une *rue-ouverte*. Dans ce cas, le modèle suppose qu'elle fait partie de l'atmosphère extérieure et la dispersion dans la rue est modélisée en considérant un écoulement de couche limite sur une surface rugueuse. Cette démarche est également appliquée pour les rues bordées de bâtiments d'un seul côté, pour les places, les parcs et les cours intérieures qui sont considérées comme des terrains ouverts (figure 4.1). Le modèle de réseau de rues est adapté pour les zones avec une forte densité de bâtiments telles que les centres-villes. Ce modèle est moins bien adapté dans les zones périurbaines où la présence de rues-canyons est relativement faible. De même, la représentation du volume d'une rue sous la forme d'un parallélépipède, adoptée dans le

modèle de réseau de rues, est une autre approximation de la réalité. Néanmoins, on peut noter que Soulhac *et al.* (2012) comparent les estimations du modèle SIRANE à des mesures de concentration et indiquent que les résultats sont relativement satisfaisants.

SIRANE est un modèle quasi-statique qui adopte un pas de temps horaire. Cela signifie qu'il considère que les conditions météorologiques et les émissions sont stationnaires à chaque pas de temps. Cela est notamment dû au fait que pour un temps de l'ordre de l'heure, correspondant au temps caractéristique des phénomènes dans la couche limite atmosphérique, les variations météorologiques peuvent être considérées comme suffisamment lentes pour être supposées constantes (Van der Hoven, 1957 ; Soulhac, 2000). Ce pas de temps est également assez court pour prendre en compte la variabilité temporelle des conditions météorologiques et des émissions au cours de la journée. De même, pour une vitesse de vent de l'ordre de $2-3\,\mathrm{m.s^{-1}}$, les polluants parcourent une distance d'environ 10 km en une heure. Aussi, ce pas temps horaire est considéré comme suffisamment long pour évaluer un état stationnaire de la dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine.

Les données d'entrée du modèle SIRANE sont la géométrie urbaine, la météorologie, les émissions et la concentration de fond. Hormis la géométrie urbaine, ces données doivent être fournies à chaque pas de temps. Ces données d'entrée sont décrites plus en détail dans la section 4.5.

4.2 Modélisation de l'écoulement et de la dispersion dans la canopée urbaine

Dans une rue-canyon, l'écoulement est tourbillonnaire ou hélicoïdal lorsque le vent extérieur n'est pas parallèle à l'axe de la rue (DePaul et Sheih, 1985 ; Yamartino et Wiegand, 1986 ; Soulhac, 2000 ;

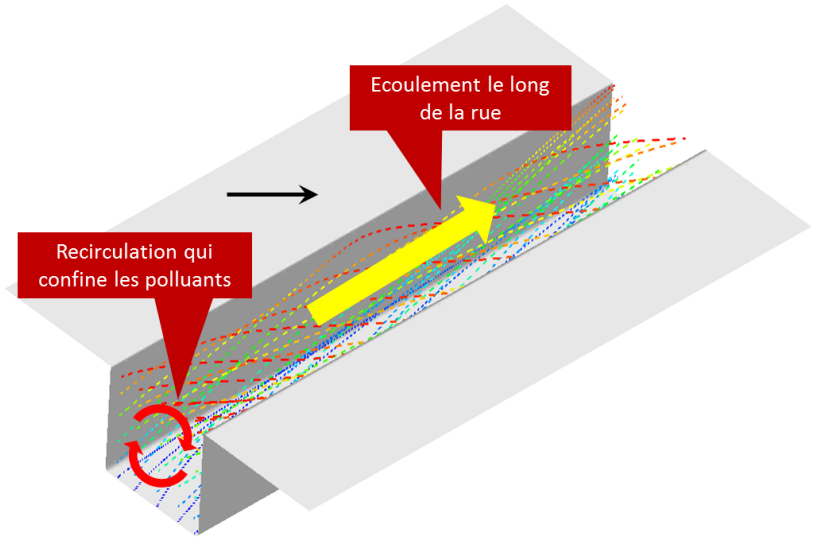


FIGURE 4.4 – Représentation de l'écoulement dans une rue-canyon. L'écoulement hélicoïdal résulte de la combinaison de la recirculation et de la convection le long de la rue. La flèche noire indique la direction du vent au-dessus de la rue.

Dobre *et al.*, 2005 ; Soulhac *et al.*, 2008). Cet écoulement résulte de la combinaison du phénomène de recirculation dans la section transversale à l'axe de la rue et de la convection le long de la rue (figure 4.4). La recirculation et la convection sont respectivement générées par la composante perpendiculaire et la composante parallèle à l'axe de la rue de l'écoulement atmosphérique extérieur au-dessus de la canopée urbaine (DePaul et Sheih, 1985 ; Yamartino et Wiegand, 1986 ; Soulhac, 2000 ; Dobre *et al.*, 2005 ; Soulhac *et al.*, 2008). Cependant, l'écoulement dans les intersections de rues n'est a priori pas tourbillonnaire (Soulhac, 2000). Les mesures du champ de vitesse dans une intersection, réalisées par Kastner-Klein et Plate (1999) en soufflerie, montrent que l'écoulement est orienté dans la direction du vent extérieur sans déviation avec l'altitude. Dans la canopée urbaine, les concentrations sont inhomogènes (DePaul et Sheih, 1985 ; Qin et Kot, 1993 ; Soulhac *et al.*, 2009 ; Garbero *et al.*, 2010 ; Soulhac et Salizzoni, 2010). Soulhac *et al.* (2009) montrent que les concentrations varient le long de la rue ainsi que sur la section de la rue. De même, Hoydysh et Dabberdt (1994) et Dabberdt *et al.* (1995) montrent que les concentrations varient fortement dans les intersections de rues et qu'elles sont généralement plus importantes dans les coins des bâtiments.

SIRANE suppose que l'écoulement tourbillonnaire dans une rue-canyon mélange suffisamment les polluants (Soulhac, 2000) sur un temps équivalent à une heure, temps durant lequel les conditions météorologiques et les émissions sont supposées stationnaires, pour considérer que la concentration est uniforme dans chaque rue-canyon. Cette hypothèse est également utilisée par Hamlyn *et al.* (2007). SIRANE simplifie également la représentation de l'écoulement atmosphérique dans la canopée urbaine et considère que la dispersion des polluants est induite par le transport par convection le long de l'axe de la rue, le transfert turbulent à travers l'interface rue-atmosphère extérieure et le transfert par convection aux intersections des rues (figure 4.5). Ces trois processus de transport sont modélisés avec les paramètres U_{rue}, u_d et σ_ϕ qui correspondent respectivement à la vitesse de convection le long de l'axe de la rue, la vitesse d'échange à l'interface rue-atmosphère extérieure et l'écart type de la direction du vent. Le phénomène de recirculation dans la rue n'est pas modélisé. Cependant, son effet est négligeable vis-à-vis de la concentration moyenne sur le volume d'une rue. De plus, cette recirculation renforce l'homogénéisation de la concentration dans la rue et par

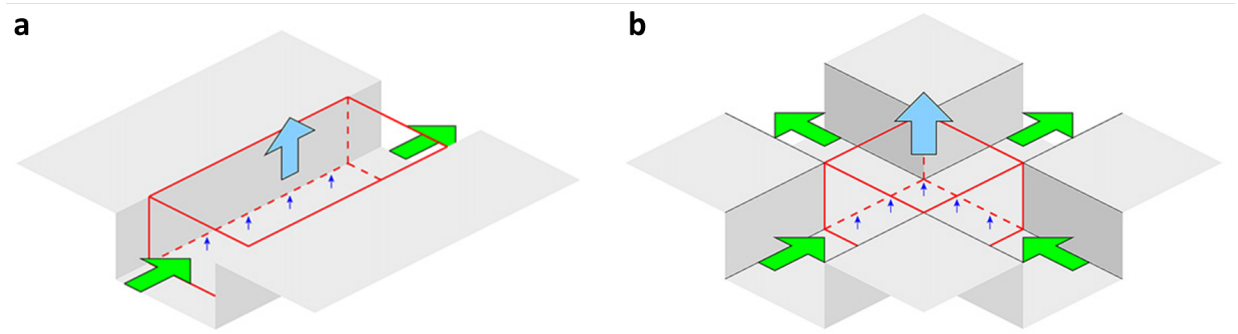


FIGURE 4.5 – Représentation des processus de transport dans la canopée urbaine : transport par convection le long de la rue et transfert turbulent à l'interface rue-atmosphère extérieure (a) ; transport par convection aux intersections des rues

conséquent l'hypothèse, adoptée par le modèle SIRANE, d'une concentration uniforme dans chaque rue-canyon. A partir de la paramétrisation des phénomènes de transport, le modèle SIRANE détermine la concentration moyenne dans une rue-canyon en réalisant un bilan de flux de masse. Les trois processus de transports cités précédemment sont détaillés dans les sections suivantes.

4.2.1 Transport par convection le long de la rue

La convection le long de la rue est caractérisée par la vitesse longitudinale du vent, parallèle à l'axe de la rue. Cette vitesse est inhomogène dans la rue. La vitesse moyenne longitudinale varie notamment en fonction de la distance au sol et de la distance à la paroi la plus proche (figure 4.6) (Soulhac *et al.*, 2008 ; Soulhac et Salizzoni, 2010). La dynamique de cet écoulement est influencée par la géométrie de la rue (DePaul et Sheih, 1985 ; Oke, 1988 ; Pavageau, 1996 ; Soulhac, 2000 ; Chauvet *et al.*, 2001 ; Kastner-Klein *et al.*, 2001 ; Kovar-Panskus *et al.*, 2001 ; Leitl *et al.*, 2001 ; Oke, 2002 ; Soulhac *et al.*, 2008), par la rugosité des bâtiments (Soulhac *et al.*, 2008), par la présence d'éléments urbains (arbres, balcons, portes, etc ...) (Hoydysh et Dabberdt, 1994 ; Theurer, 1999 ; Salizzoni *et al.*, 2008, 2009b ; Buccolieri *et al.*, 2011 ; Vos *et al.*, 2013 ; Abhijith et Gokhale, 2015), par les effets thermiques induits par les échanges de chaleur au niveau des murs et/ou du sol (Kovar-Panskus *et al.*, 2001 ; Louka *et al.*, 2002), par le mouvement des véhicules (Kastner-Klein *et al.*, 2000, 2001 ; Vachon *et al.*, 2002 ; Di Sabatino *et al.*, 2003) et par la différence de pression en amont et en aval de la rue (Soulhac *et al.*, 2011).

Le modèle SIRANE simplifie la représentation de l'écoulement et l'assimile à un écoulement uniforme. Cet écoulement est modélisé à l'aide d'une vitesse moyenne le long de la rue, notée U_{rue}. Le modèle SIRANE considère que cette vitesse moyenne U_{rue} résulte d'un équilibre entre l'entraînement

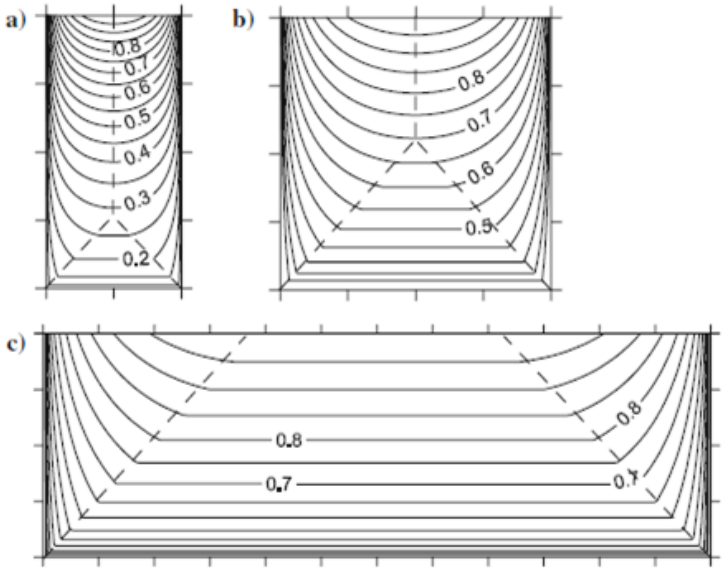


FIGURE 4.6 – Contour de la vitesse longitudinale moyenne, adimensionnée par la vitesse au niveau des toits, pour trois configurations différentes de rue-canyon : a) $W/H = 1/2$, b) $W/H = 1$, c) $W/H = 3$ (d'après Soulhac *et al.* (2008))

turbulent au niveau des toits (Britter et Hanna, 2003) et les frottements sur les murs qui bordent la rue (Soulhac *et al.*, 2011). Aussi, les autres paramètres (mouvements des véhicules, présence d'obstacles, etc ...) sont négligés. Ainsi, la vitesse moyenne U_{rue} est déterminée avec l'équation 4.1 :

$$U_{rue} = U_H \cos(\phi) \frac{\delta_i^2}{HW} \left[\frac{2\sqrt{2}}{C} (1-\beta) \left(1 - \frac{C^2}{3} + \frac{C^4}{45} \right) + \beta \frac{2\alpha - 3}{\alpha} + \left(\frac{W}{\delta_i} - 2 \right) \frac{\alpha - 1}{\alpha} \right]$$

$$\text{avec} \begin{cases} \alpha = \ln\left(\dfrac{\delta_i}{z_0}\right) \\ \beta = \exp\left[\dfrac{C}{\sqrt{2}}\left(1 - \dfrac{H}{\delta_i}\right)\right] \\ U_H = u_* \sqrt{\dfrac{\pi}{\sqrt{2}\kappa^2 C}\left[Y_0(C) - \dfrac{J_0(C)Y_1(C)}{J_1(C)}\right]} \\ C \text{ solution de } \dfrac{z_0}{\delta_i} = \dfrac{2}{C}\exp\left[\dfrac{\pi}{2}\dfrac{Y_1(C)}{J_1(C)} - \gamma\right] \\ \delta_i = \min(H; W/2) \end{cases} \tag{4.1}$$

où J_0, J_1, Y_0 et Y_1 sont les fonctions de Bessel, u_* est la vitesse de frottement relative à l'écoulement atmosphérique extérieur, ϕ est l'angle entre la direction du vent dans l'atmosphère extérieure et l'axe de la rue, H et W sont respectivement la hauteur et la largeur de la rue et z_0 est la rugosité aérodynamique des murs bordant la rue.

Hamlyn *et al.* (2007) adoptent une approche très similaire. Ils supposent que la concentration à l'intérieur d'une rue-canyon est homogène. De même, ils considèrent que l'écoulement dans la rue-canyon est un écoulement de convection le long de la rue. La vitesse moyenne U_{rue} est soit fournie en donnée d'entrée par l'utilisateur, soit calculée avec l'expression $U_{rue} = U_0 \cos(\phi)$ où U_0 correspond à la vitesse dans la rue-canyon lorsque $\phi = 0$. Dans ce cas, U_0 est également fournie en donnée d'entrée.

4.2.2 Transfert turbulent à travers l'interface rue-atmosphère extérieure

L'interface rue-atmosphère extérieure est une zone caractérisée par un fort cisaillement (figure 4.7) (Louka *et al.*, 2000 ; Salizzoni *et al.*, 2009a, 2011). Les instabilités aérodynamiques à cette interface conduisent à un mouvement de battement de la couche de cisaillement qui induit des flux entrants de structures turbulentes dans la rue-canyon (Salizzoni *et al.*, 2011). Ceci induit un transfert de masse instable et fortement intermittent entre la rue-canyon et l'atmosphère extérieure (Salizzoni *et al.*, 2009a).

SIRANE modélise ce transfert turbulent à l'aide d'une vitesse d'échange notée u_d. Des études ont porté sur la dépendance de la vitesse d'échange u_d vis-à-vis de la dynamique de l'écoulement extérieur (Kim et Baik, 2003 ; Salizzoni *et al.*, 2009a), de la direction du vent (Soulhac, 2000)

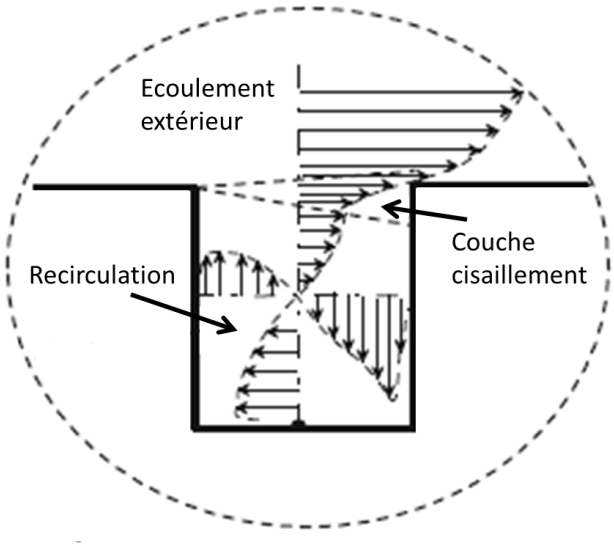


FIGURE 4.7 – Couche de cisaillement à l'interface rue-atmosphère extérieure

et de la géométrie de la rue-canyon (Hoydysh et Dabberdt, 1988 ; Salizzoni, 2006). De même, plusieurs études ont tenté de déterminer l'influence des flux thermiques au niveau des murs de la rue-canyon (Sini *et al.*, 1996 ; Offerle *et al.*, 2007) et des arbres dans la rue-canyon (Buccolieri *et al.*, 2009) vis-à-vis de u_d. Ces études ont montré que la vitesse d'échange u_d dépend de la vitesse de l'écoulement dans l'atmosphère extérieure ainsi que du niveau de turbulence et de la structure de l'écoulement atmosphérique (Salizzoni *et al.*, 2009a). Elles indiquent également que la vitesse de transfert est fortement dépendante du rapport d'aspect W/H (Hoydysh et Dabberdt, 1988), de la forme de la rue-canyon et de la direction du vent (Soulhac, 2000). Salizzoni (2006) montre également que des éléments géométriques de petites tailles placés sur les toits des bâtiments peuvent influencer significativement l'échange vertical de polluants. La complexité de ce processus de transfert implique l'utilisation d'hypothèses simplificatrices pour modéliser la vitesse d'échange u_d. Le modèle SIRANE suppose que la vitesse d'échange u_d dépend uniquement de l'écoulement dans l'atmosphère extérieure et qu'elle est, par conséquent, indépendante de la géométrie de la rue. SIRANE détermine cette vitesse d'échange u_d en utilisant l'expression proposée par Soulhac (2000) et Salizzoni *et al.* (2009a) qui est définie par l'équation 4.2 :

$$u_d = \frac{\sigma_w}{\sqrt{2}\pi} \tag{4.2}$$

où σ_w est l'écart type des fluctuations de la vitesse verticale au niveau du toit. A partir de cette vitesse de transfert u_d, le modèle SIRANE détermine le flux de polluants $Q_{H,turb}$ échangés par transfert turbulent à l'interface rue-atmosphère extérieure avec l'expression 4.3 :

$$Q_{H,turb} = u_d W L \left(c_{rue} - c_{rue,ext}\right) \tag{4.3}$$

où c_{rue} et $c_{rue,ext}$ sont respectivement la concentration à l'intérieur et au-dessus de la rue et où L et W représentent la longueur et la largeur de la rue.

Hamlyn *et al.* (2007) modélisent également l'échange turbulent à l'interface rue-atmosphère extérieure avec une expression similaire. Cependant la vitesse d'échange u_d est fournie en donnée d'entrée par l'utilisateur.

4.2.3 Transport par convection aux intersections des rues

L'écoulement dans une intersection de rues dépend fortement des dimensions et de l'orientation des bâtiments qui forment l'intersection (Scaperdas et Colvile, 1999 ; Soulhac, 2000). Il est notamment possible de distinguer deux types d'écoulement. Dans les intersections larges, l'écoulement extérieur pénètre dans la canopée urbaine (Soulhac *et al.*, 2011). En revanche, l'écoulement dans une intersection étroite interagit peu avec l'écoulement extérieur (Soulhac *et al.*, 2011).

Pour distinguer ces deux types d'intersections, le modèle SIRANE s'appuie également sur les régimes d'écoulement définis dans Oke (1988) et adopte un critère analogue à celui utilisé pour distinguer les rues-canyons des rues-ouvertes. Aussi, lorsque $D/H > 3$ (D est le diamètre de l'intersection et H est la hauteur des bâtiments qui forment l'intersection), le modèle associe l'intersection à une intersection large. SIRANE traite ce type d'intersections comme un terrain ouvert, c'est-à-dire que les polluants qui arrivent dans ce type d'intersections sortent de la canopée urbaine et ne sont pas canalisés vers les autres rues de l'intersection. A l'inverse, l'intersection est considérée comme étroite lorsque $D/H \leq 3$. Dans ce cas, l'intersection fait partie de la canopée urbaine. La modélisation de l'écoulement dans ce type d'intersections a pour but de déterminer la répartition des flux d'air dans les différentes rues connectées à l'intersection. Soulhac *et al.* (2009) ont montré que l'écoulement dans une intersection peut être modélisé en prenant en compte deux processus principaux. Le premier processus est le flux d'air dans le plan horizontal entre les rues en amont (flux entrant) et en aval (flux sortant) de l'intersection. Pour estimer ce flux d'air horizontal, il est

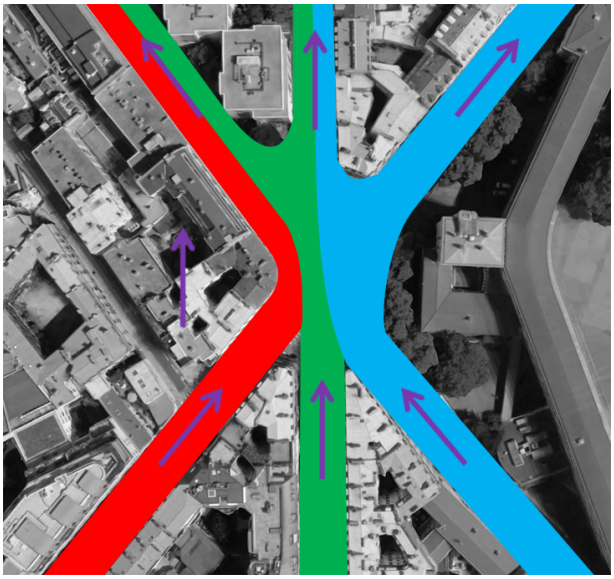


FIGURE 4.8 – Représentation de l'écoulement dans une intersection

d'abord nécessaire de déterminer le flux d'air relatif à chaque rue connectée à l'intersection. Dans SIRANE, le flux d'air $P_{rue,i}$ provenant de la rue d'index i connectée à une intersection est estimé avec l'équation 4.4 :

$$P_{rue,i} = \xi HWU_{rue,i} \tag{4.4}$$

où $\xi = 1$ pour les rues en amont, $\xi = -1$ pour celles en aval et $U_{rue,i}$ est la vitesse moyenne le long de la rue d'index i, estimée avec l'équation 4.1. Pour calculer le flux d'air horizontal, le modèle fait l'hypothèse que l'écoulement est bidimensionnel, c'est-à-dire qu'il est invariant sur la verticale. Cette hypothèse se base sur l'étude de Soulhac *et al.* (2009) qui indique que les courants dans une intersection se croisent très rarement. Ainsi, le flux d'air $P_{i,j}$ entre les rues d'index i et j dans une intersection est déterminé en estimant les flux entrant et sortant de l'intersection et en supposant que les flux ne se croisent pas (figure 4.8). Il convient de noter que le flux de polluants $P_{i,j}$ prend en compte la topologie des lignes de courant moyennes dans l'intersection mais qu'il ne tient pas compte du mélange turbulent. En supposant que le mélange turbulent est dû à des fluctuations à grande échelle, ses effets peuvent être pris en compte en modélisant les fluctuations de la direction du vent. Aussi, le flux d'air moyen $\hat{P}$ entre les rues d'index i et j dans une intersection peut s'exprimer sous la forme de l'équation 4.5 :

$$\begin{aligned} \hat{P}_{i,j}(\phi_0) &= \int f(\phi - \phi_0) P_{i,j}(\phi) d\phi \\ \text{avec } f(\phi - \phi_0) &= \frac{1}{\sigma_\phi \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\phi - \phi_0}{\sigma_\phi} \right)^2 \right] \end{aligned} \tag{4.5}$$

où ϕ_0 est la direction moyenne du vent et σ_ϕ est l'écart type de la direction du vent. D'après Soulhac *et al.* (2009), le deuxième processus à prendre en compte pour modéliser l'écoulement dans une intersection est le flux d'air vertical entre la canopée urbaine et l'atmosphère extérieure. Ce flux d'air est estimé en réalisant un bilan des flux d'air entrant et sortant de l'intersection (équation 4.6). Ainsi le flux d'air se dirige vers l'atmosphère extérieure si $P_{vert} > 0$ ($\sum$ flux entrant $>$ $\sum$ flux sortant) et vers l'intersection si $P_{vert} < 0$ ($\sum$ flux entrant $<$ $\sum$ flux sortant). Cependant, il convient de noter qu'un flux d'air vertical est présent uniquement si la somme des flux d'air en amont est différente de la somme des flux d'air en aval.

$$P_{vert} = \sum_{i \in intersection} P_{rue,i} \tag{4.6}$$

A partir de l'estimation des flux d'air dans l'intersection et des concentrations dans les rues en amont de celle-ci, il est possible de déterminer le flux de polluants $Q_{I,j}$ quittant l'intersection par la rue d'index j. Ce flux de polluants $Q_{I,j}$ est déterminé avec l'équation 4.7 :

$$Q_{I,j} = \sum_i \hat{P}_{i,j}(\phi_0) c_{rue,i} + P_{ext \to j} c_{I,ext} \tag{4.7}$$

où $c_{I,ext}$ est la concentration au-dessus de l'intersection, dans l'atmosphère extérieure, et $P_{ext \to j}$ est

la partie du flux vertical qui entre dans l'intersection et qui se dirige vers la rue d'index j. Le flux vertical est pris en compte uniquement lorsque l'écoulement provient de l'atmosphère extérieure et entre dans l'intersection ($P_{vert} < 0$). Lorsque que c'est le cas, $P_{ext \to j}$ est calculé en supposant que le flux vertical est proportionnellement réparti dans les rues situées en aval de l'intersection (équation 4.8).

$$P_{ext \to j} = max(-P_{vert}; 0) \frac{P_{rue,j}}{\sum_{\text{rues en aval de l'intersection}} P_{rue,i}} \tag{4.8}$$

Hamlyn *et al.* (2007) modélisent également le transfert de polluants aux intersections. Dans ce cas, ils représentent l'intersection comme une boîte dans laquelle la concentration est supposée homogène (Yamartino et Wiegand, 1986) et modélisent les flux de polluants sortant de l'intersection en fonction de la concentration dans l'intersection et d'une vitesse de transfert pour représenter les échanges par diffusion et advection. Il convient de signaler que l'hypothèse de concentration homogène dans une intersection est cependant en désaccord avec la variabilité spatiale de concentration observée par Hoydysh et Dabberdt (1994).

4.2.4 Bilan de masse

La concentration moyenne c_{rue} dans chaque rue-canyon dépend des concentrations dans les autres rues de la canopée urbaine. Aussi, les concentrations dans la canopée urbaine sont déterminées en résolvant un système d'équations linéaires dont les inconnues sont les concentrations dans les rues-canyons. Dans chaque rue-canyon, la concentration moyenne résulte d'un équilibre entre les flux entrants et sortants (figure 4.9). Cette concentration est évaluée en réalisant un bilan de masse qui s'exprime sous la forme de l'équation 4.9 :

$$\underbrace{Q_S + Q_I}_{\text{Flux entrants}} = \underbrace{Q_{H,turb} + HWU_{rue}c_{rue}}_{\text{Flux sortants}} \tag{4.9}$$

où Q_S est le taux d'émission de polluants dans la rue, Q_I représente le flux de polluants entrant provenant des intersections en amont, $HWU_{rue}c_{rue}$ représente le flux de polluants transporté par

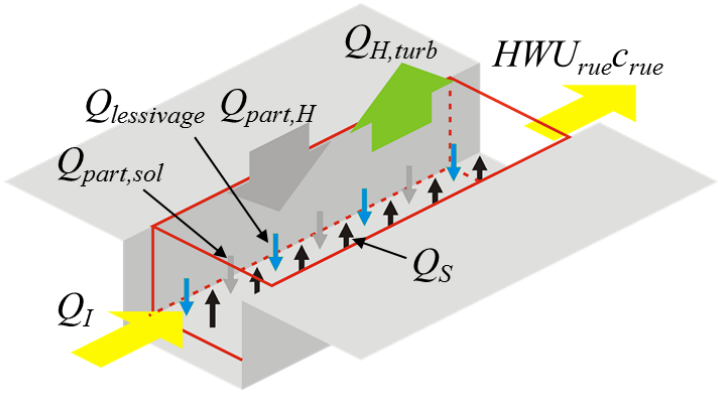


FIGURE 4.9 – Représentation des flux de polluants dans une rue-canyon

l'écoulement moyen le long de la rue et sortant de la rue et $Q_{H,turb}$ est le flux de polluants transférés à l'interface rue-atmosphère par transfert turbulent. L'ensemble des relations paramétriques utilisées pour déterminer les termes de l'équation 4.9 sont détaillées dans les sous-sections 4.2.1, 4.2.2 et 4.2.3. Il convient de signaler que Soulhac *et al.* (2011) intègrent également au bilan de masse les termes $Q_{part,H}$, $Q_{part,sol}$ et $Q_{lessivage}$ (figure 4.9) qui correspondent respectivement au flux de sédimentation des particules solides entrant dans la rue via l'interface rue-atmosphère extérieure, au flux de déposition de particules solides sur le sol et au flux de déposition humide induit par le processus de lessivage. Cependant, ces processus ne sont pas pris en compte lors de ce projet de recherche.

4.3 Modélisation de l'écoulement et de la dispersion au-dessus de la canopée urbaine

4.3.1 Modélisation de l'écoulement atmosphérique

La modélisation de l'écoulement au-dessus de la canopée urbaine a pour objectif de déterminer la dispersion des polluants dans l'atmosphère extérieure. Elle permet également d'estimer certains paramètres nécessaires à la modélisation des phénomènes de transport de polluants dans la canopée urbaine. Cet écoulement atmosphérique est modélisé avec la théorie de similitude de Monin-Obukhov comme un écoulement de couche limite sur une surface rugueuse. La sous-couche de rugosité au-dessus de la canopée urbaine est négligée. Cette représentation est globalement adaptée pour les environnements où la surface est relativement plane et homogène. Il convient de noter que la densité de bâtiments varie dans les environnements urbains. De même, plusieurs types de surface sont présents dans les milieux urbains (bâtis, végétation, cours d'eau, etc ...). De plus, les environnements urbains peuvent également être caractérisés par la présence de relief (par exemple une colline). Aussi, la modélisation de l'écoulement dans l'atmosphère extérieure constitue une simplification de la réalité et est essentiellement adaptée aux environnements urbains plats avec une densité de bâtiments relativement importante et uniforme. Le modèle SIRANE suppose également que cet écoulement est uniforme horizontalement. Cette hypothèse constitue une autre approximation et limite l'application du modèle à des domaines qui s'étendent sur un quartier ou une agglomération de quelques dizaines de kilomètres de côté. En considérant l'écoulement horizontalement uniforme, tous les paramètres dynamiques de l'écoulement dépendent uniquement de la coordonnée z relative à l'altitude. La vitesse moyenne du vent est notamment déterminée avec l'équation 4.10 (Garratt *et al.*, 1992) :

$$u(z) = \frac{u_*}{\kappa}\left[\ln\left(\frac{z - d_{canopee} + z_{0,canopee}}{z_{0,canopee}}\right) + \psi_m\left(\frac{z_{0,canopee}}{L_{MO}}\right) - \psi_m\left(\frac{z - d_{canopee} + z_{0,canopee}}{L_{MO}}\right)\right] \tag{4.10}$$

où $z_{0,canopee}$ et $d_{canopee}$ correspondent respectivement à la rugosité aérodynamique moyenne et à la hauteur de déplacement moyenne associées à la canopée urbaine, κ est la constante de Karman et u_* est la vitesse de frottement. L_{MO} est la longueur de Monin-Obukhov définie par la relation 4.11 :

$$L_{MO} = -\frac{\rho c_p \theta u_*^3}{kgH_0} \tag{4.11}$$

où ρ est la densité de l'air, c_p est la chaleur massique à pression constante, g est l'accélération de la pesanteur, H_0 est le flux de chaleur sensible et θ est la température potentielle. La fonction ψ_m est une fonction universelle de la théorie de similitude qui dépend de l'état de stabilité de l'atmosphère (stable, neutre ou instable). Businger *et al.* (1971) et Dyer (1974) ont proposé une expression empirique de ψ_m issue d'observations de terrain (équation 4.12).

$$\begin{cases} \psi_m(\zeta) = 2\ln\left[(1+x)/2\right] + \ln\left[(1+x^2)/2\right] - 2\arctan(x) + \pi/2 & \text{si } L_{MO} < 0 \text{ (instable)} \\ \text{avec } x = (1-16\zeta)^{1/4} & \\ \psi_m(\zeta) = 0 & \text{si } L_{MO} \to \infty \text{ (neutre)} \\ \psi_m(\zeta) = -5\zeta & \text{si } L_{MO} > 0 \text{ (stable)} \end{cases} \tag{4.12}$$

La température potentielle varie aussi avec la coordonnée z. Elle est estimée avec l'équation 4.13 (Garratt *et al.*, 1992) :

$$\theta(z) = \theta_0 + \frac{\theta*}{k}\left[\ln\left(\frac{z+z_T}{z_T}\right) - \left(\psi_h\left(\frac{z+z_T}{L_{MO}}\right) - \psi_m\left(\frac{z_T}{L_{MO}}\right)\right)\right] \tag{4.13}$$

où θ_0 est la température potentielle au niveau du sol. La variable z_T correspond à la rugosité thermique de la canopée urbaine. Elle est déterminée avec l'équation 4.14 (Garratt *et al.*, 1992) :

$$\begin{aligned} z_T &= z_0 \exp\left[-\kappa\left(6.2Re_s^{1/4} - 5\right)\right] \\ \text{avec } Re_s &= \frac{u_* z_0}{\nu_a} \end{aligned} \tag{4.14}$$

où ν_a est la viscosité cinématique de l'air. A l'instar de la fonction ψ_m, la formulation de la fonction ψ_h dépend de l'état de stabilité de l'atmosphère. Cette fonction s'exprime sous la forme de l'équation 4.15.

$$\begin{cases} \psi_h(\zeta) = 2\ln\left[(1+x')/2\right] & \text{si } L_{MO} < 0 \text{ (instable)} \\ \text{avec } x' = \sqrt{1-16\zeta} & \\ \psi_h(\zeta) = 0 & \text{si } L_{MO} \to \infty \text{ (neutre)} \\ \psi_h(\zeta) = -5\zeta & \text{si } L_{MO} > 0 \text{ (stable)} \end{cases} \tag{4.15}$$

En plus de ces variables, il est aussi nécessaire de quantifier la turbulence dans l'atmosphère extérieure. Cette turbulence peut notamment être caractérisée par les écarts types des trois composantes de la vitesse de vent, σ_u, σ_v et σ_w. Ces paramètres sont déterminés avec les équations 4.16 et 4.17

(Hunt *et al.*, 1988 ; CERC, 2001) :

$$\begin{cases} \sigma_v = \sqrt{0.3w_*^2 + [2u_*(1-0.8z/h_{CLA})]^2} & \text{si } L_{MO} < 0 \text{ (instable)} \\ \sigma_v = 2u_*(1-0.8z/h_{CLA}) & \text{si } L_{MO} \to \infty \text{ (neutre)} \\ \sigma_v = 2u_*(1-0.5z/h_{CLA})^{3/4} & \text{si } L_{MO} > 0 \text{ (stable)} \end{cases} \tag{4.16}$$

$$\begin{cases} \sigma_w = \sqrt{\sigma_{wc}^2 + \sigma_{wn}^2} & \text{si } L_{MO} < 0 \text{ (instable)} \\ \quad \text{avec} \begin{cases} \sigma_{wc} = \sqrt{0.4}w_*2.1(z/h_{CLA})^{1/3}(1-0.8z/h_{CLA}) \\ \sigma_{wn} = 1.3u_*(1-0.8z/h_{CLA}) \end{cases} & \\ \sigma_w = 1.3u_*(1-0.8z/h_{CLA}) & \text{si } L_{MO} \to \infty \text{ (neutre)} \\ \sigma_w = 1.8u_*(1-0.5z/h_{CLA})^{3/4} & \text{si } L_{MO} > 0 \text{ (stable)} \end{cases} \tag{4.17}$$

où h_{CLA} est la hauteur de la couche limite et w_* est l'échelle de vitesse convective définie par la relation 4.18.

$$w_* = u_* \left(\frac{h_{CLA}}{\kappa L_{MO}} \right)^{1/3} \tag{4.18}$$

Dans le cas d'une atmosphère stable et d'une atmosphère neutre, h_{CLA} est estimée respectivement avec l'équation 4.19 (Nieuwstadt et Tennekes, 1981) et l'équation 4.20 :

$$h_{CLA} = \frac{L_{MO}}{3.8} \left(-1 + \sqrt{1 + 2.28 \frac{u_*}{f L_{MO}}} \right) \quad \text{si } L_{MO} > 0 \text{ (stable)} \tag{4.19}$$

$$h_{CLA} = 0.3 \frac{u_*}{f} \quad \text{si } L_{MO} \to \infty \text{ (neutre)} \tag{4.20}$$

où f est le paramètre de Coriolis. Pour ces deux cas, la hauteur h_{CLA} est considérée comme indépendante du temps et est déterminée uniquement à partir des conditions météorologiques au pas de temps courant. Cependant dans le cas d'une atmosphère instable, la hauteur h_{CLA} est davantage influencée par les conditions météorologiques antérieures (Batchvarova et Gryning, 1991). Dans ce cas, la variable h_{CLA} est déterminée avec l'équation 4.21 (Batchvarova et Gryning, 1991) :

$$\frac{dh_{CLA}}{dt} = \frac{1.4w_*^3 + 5u_*^3}{\frac{g}{T_0}\gamma_\theta^{ext} h_{CLA}^2} \tag{4.21}$$

où $\gamma_\theta^{ext} = \partial\theta/\partial z$ est le gradient vertical de la température potentielle et T_0 est la température au niveau du sol. En supposant que ces deux paramètres sont indépendants du temps, l'équation

différentielle 4.21 a une solution analytique implicite qui s'exprime sous la forme de la relation 4.22 :

$$t_2 - t_1 = \frac{\chi^2}{2a_1}\left[\left(\frac{h_{CLA}(t_2)}{\chi} - 1\right)^2 - \left(\frac{h_{CLA}(t_1)}{\chi} - 1\right)^2 + 2\ln\left(\frac{h_{CLA}(t_2)+\chi}{h_{CLA}(t_1)+\chi}\right)\right]$$
$$\text{avec} \begin{cases} \chi = \dfrac{a_2}{a_1} \\ a_1 = \dfrac{1.4H_0}{\rho_a C_p \gamma_\theta^{ext}} \\ a_2 = \dfrac{5u_*^3 T_0}{g\gamma_\theta^{ext}} \end{cases} \tag{4.22}$$

où $h_{CLA}(t_1)$ et $h_{CLA}(t_2)$ correspondent respectivement à la hauteur de la couche limite aux pas de temps t_1 et t_2. L'estimation de la hauteur h_{CLA} avec la relation 4.22 est effectuée par paliers horaires, en initialisant le calcul au moment du lever du soleil. Pendant la nuit, l'atmosphère est supposée stable. Aussi, la hauteur h_{CLA} au lever du soleil est déterminée avec la relation 4.19 associée à une atmosphère stable.

4.3.2 Modélisation de la dispersion dans l'atmosphère extérieure

La dispersion des polluants dans l'atmosphère extérieure est déterminée avec des modèles de type gaussien. Le modèle SIRANE utilise notamment un modèle de panache gaussien. Ce modèle gaussien prend en compte la réflexion des panaches au niveau des toits avec la technique de sources images. Avec ce modèle, le champ de concentration induit par les émissions d'une source ponctuelle placée au point (x_S,y_S) est estimée avec l'équation 4.23 :

$$c(x,y,z) = \frac{Q_S}{\sqrt{2\pi}U_m\sigma_y}\exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(y-y_S)^2}{\sigma_y^2}\right]\left[\text{pdfz}\left(z - H_{s,\text{eff}}\right) + \right.$$
$$\left.\text{pdfz}\left(z - 2H_{canopee} + H_{S,\text{eff}}\right) + \text{pdfz}\left(z - 2h_{CLA} + H_{S,\text{eff}}\right)\right] \tag{4.23}$$

où Q_S est le flux de masse émis par la source, σ_y est l'écart type transversal du panache, $H_{canopee}$ est la hauteur moyenne de la canopée urbaine et $H_{S,\text{eff}}$ est la hauteur effective de la source qui correspond à la somme de la hauteur réelle de la source H_S et de la surélévation du panache ΔH, estimée avec le modèle de Briggs (1984). La variable U_m qui intervient dans l'équation 4.23 correspond à la vitesse d'advection du panache. Celle-ci est déterminée avec l'équation 4.24.

$$U_m = \frac{\int_{H_{canopee}}^{h_{CLA}} u(z)c(x,y,z)dz}{\int_{H_{canopee}}^{h_{CLA}} c(x,y,z)dz} \tag{4.24}$$

La relation 4.23 fait aussi intervenir la fonction pdfz qui représente la distribution verticale de la concentration. Dans le cas d'une atmosphère neutre ou stable, cette distribution est gaussienne et

s'exprime sous la forme de l'équation 4.25 :

$$\text{pdfz}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\frac{z^2}{\sigma_z^2}\right] \tag{4.25}$$

où σ_z est l'écart type vertical du panache. Lorsque l'atmosphère est instable, les courants thermiques convectifs ascendants induisent une distribution asymétrique de la concentration moyenne (Luhar et Britter, 1989). Dans ce cas, la fonction pdfz est modélisée comme une distribution bi-gaussienne avec l'expression 4.26 :

$$\text{pdfz}(z) = \frac{a_+ H(z-\hat{w}t)}{\sqrt{2\pi}\sigma_{z+}} \exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(z-\hat{w}t)^2}{\sigma_{z+}^2}\right] + \frac{a_-[1-H(z-\hat{w}t)]}{\sqrt{2\pi}\sigma_{z-}} \exp\left[-\frac{1}{2}\frac{(z-\hat{w}t)^2}{\sigma_{z-}^2}\right]$$

$$\text{avec} \begin{cases} \hat{w} = -\dfrac{\sigma_{wc}}{2} \\ \sigma_{z+} = \dfrac{\sigma_{w+}t}{\sqrt{1+t/2T_L}} & \sigma_{z-} = \dfrac{\sigma_{w-}t}{\sqrt{1+t/2T_L}} \\ \sigma_{w+} = \dfrac{\sigma_w}{k+\sqrt{\dfrac{\pi}{32}}\sigma_{wc}} & \sigma_{w-} = \dfrac{\sigma_w}{k-\sqrt{\dfrac{\pi}{32}}\sigma_{wc}} \\ a_+ = k\dfrac{\sigma_{w+}}{\sigma_w} & a_- = k\dfrac{\sigma_{w-}}{\sigma_w} \\ k = \left[1+\left(\dfrac{1}{4}-\dfrac{3\pi}{32}\right)\left(\dfrac{\sigma_{wc}}{\sigma_w}\right)^2\right]^{-1/2} \end{cases} \tag{4.26}$$

où σ_{wc} est la composante convective de la fluctuation de la vitesse verticale et H est la fonction échelon de Heaviside. Le paramètre T_L correspond à l'échelle intégrale de temps lagrangien. Ce paramètre est déterminé avec l'expression 4.27 (Hunt *et al.*, 1988 ; CERC, 2001) :

$$\begin{cases} T_L = \dfrac{1}{1.3\sigma_w}\left[\dfrac{2.5}{z+z_{0,canopee}} + \dfrac{N}{\sigma_w} + \dfrac{4}{h_{CLA}} + \dfrac{1}{z_u}\right]^{-1} & \text{stable} \\ T_L = \dfrac{|h_{CLA}/L_{MO}|+1/1.3}{|h_{CLA}/L_{MO}|+1} \dfrac{\left[\dfrac{0.6}{z+z_{0,canopee}} + \dfrac{\partial u/\partial z}{\sigma_w} + \dfrac{2}{h_{CLA}} + \dfrac{1}{z_u}\right]^{-1}}{\sigma_w} & \text{instable} \\ \text{avec } z_u = max\left(h_{CLA}-z; \dfrac{\sigma_w}{N}\right) \end{cases} \tag{4.27}$$

où $N = \sqrt{\dfrac{g}{T_0}\dfrac{\partial\theta}{\partial z}}$ est la fréquence de flottabilité de Brunt-Vaïsälä et T_0 est la température au niveau du sol. Pour déterminer le champ de concentration $c(x,y,z)$, il est nécessaire d'estimer les écarts types σ_y et σ_z qui interviennent dans les équations 4.23 et 4.25. Ces paramètres dépendent de la

distance à la source x et de la turbulence atmosphérique contrôlée principalement par la stratification thermique de l'atmosphère. Le modèle SIRANE adopte une paramétrisation de ces termes basée sur les approches proposées par Weil (1985), Venkatram (1992) et CERC (2001). Les écarts types sont alors déterminés avec les équations 4.28 et 4.29.

$$\sigma_y = \sqrt{\sigma_{y,s}^2 + \left(\sigma_\phi \frac{\pi}{180} x\right)^2}$$

$$\text{avec} \begin{cases} \sigma_{y,s} = \sqrt{\sigma_{y,c}^2 + \sigma_{y,n}^2} & \text{si } L_{MO} < 0 \text{ instable} \\ \text{avec} \begin{cases} \sigma_{y,c} = \sqrt{0.3} \dfrac{w_* t}{\sqrt{1 + 0.75^{1/3} \dfrac{w_* t}{h_{CLA}}}} \\ \sigma_{y,n} = 2\left(1 - 0.8 \dfrac{z}{h_{CLA}}\right) \dfrac{u_* t}{\sqrt{1 + 2.5 \dfrac{u_* t}{h_{CLA}}}} \end{cases} \\ \sigma_{y,s} = \dfrac{\sigma_v t}{\sqrt{1 + 2.5 \dfrac{u_* t}{h_{CLA}}}} & \text{si } L_{MO} \to \infty \text{ neutre} \\ \sigma_{y,s} = \dfrac{\sigma_v t}{\sqrt{1 + 2.5 \dfrac{u_* t L_{MO}}{h_{CLA}^2}}} & \text{si } L_{MO} > 0 \text{ stable} \end{cases} \tag{4.28}$$

$$\begin{cases} \sigma_z = \dfrac{\sigma_w t}{\sqrt{1 + \dfrac{t}{2T_L}}} & \text{si } L_{MO} < 0 \text{ instable} \\ \sigma_z = 0.4 \sigma_w t & \text{si } L_{MO} \to \infty \text{ neutre} \\ \sigma_z = \dfrac{\sigma_w t}{\sqrt{6.25 + \dfrac{N^2 t^2}{1 + 2Nt}}} & \text{si } L_{MO} > 0 \text{ stable} \end{cases} \tag{4.29}$$

Pour déterminer ces écarts types, les paramètres σ_v, σ_w, σ_ϕ, N et T_L sont évalués à la hauteur moyenne du panache z_m, qui s'exprime sous la forme de l'équation 4.30.

$$z_m = \frac{\int_{H_{canopee}}^{h_{CLA}} z\, c(x,y,z) dz}{\int_{H_{canopee}}^{h_{CLA}} c(x,y,z) dz} \tag{4.30}$$

Le modèle de panache gaussien est appliqué pour évaluer la dispersion sur le pas de temps courant des *émissions* émanant des rues et sortant au niveau des toits (relatives au terme $Q_{H,turb}$ de l'équation 4.9) qui sont traitées comme si elles provenaient d'une série de sources ponctuelles. Ce modèle est aussi utilisé pour estimer la dispersion des polluants émis dans les rues-ouvertes.

Une agglomération peut être composée de plusieurs dizaines de milliers de rues. Cela représente alors plusieurs centaines de milliers de sources à modéliser lorsque les émissions provenant d'une rue sont représentées avec une série de dix sources ponctuelles. De même, modéliser la qualité de l'air sur une agglomération avec une résolution spatiale de l'ordre de la dizaine de mètres implique l'utilisation d'un maillage composé de plusieurs millions de mailles. Pour ce type de configuration, il est alors nécessaire d'appliquer l'équation 4.23 plusieurs billions de fois afin d'estimer les concentrations, induites par les émissions provenant des rues, dans une agglomération. Cela représente un coût en temps de calcul trop important pour les applications opérationnelles. Aussi, pour estimer en un point p l'effet des émissions émanant des rues, le modèle SIRANE agrège les émissions, sur des cellules, lorsque celles-ci se situent au-delà d'une certaine distance vis-à-vis du point p. Cette approche, moins coûteuse en temps de calcul, consiste à évaluer les effets d'un groupe de sources *éloignées* au lieu d'évaluer les effets de chaque source *éloignée*. Dans le modèle SIRANE, la dispersion des polluants provenant de ces émissions *agrégées* est modélisée avec un modèle à bouffées gaussiennes. Ce type de modèle discrétise le rejet de polluants comme une succession de rejets instantanés. Chacun de ces rejets est modélisé par une bouffée gaussienne qui évolue au cours du temps. Cette approche permet de prendre en compte l'instationnarité des conditions météorologiques sur des pas de temps successifs et d'estimer le champ de concentration induit par les polluants émis au pas de temps courant mais également par ceux émis aux pas de temps antérieurs. Dans le modèle SIRANE, le modèle à bouffées gaussiennes est également utilisé pour estimer la dispersion des polluants provenant de sources modélisées comme des sources ponctuelles, telles que les industries. Dans ce cas, l'application du modèle à bouffées gaussiennes permet de prendre en compte les effets de surhauteur (Briggs, 1984) et d'évaluer la dispersion des polluants émis par ces sources ponctuelles au pas de temps courant mais également à des pas de temps antérieurs. Le modèle à bouffées gaussiennes est aussi utilisé dans le modèle SIRANE pour estimer les effets des polluants émis à des pas de temps antérieurs par des sources autres que les sources ponctuelles. Dans ce cas, les émissions sont également agrégées pour réduire le coût en temps de calcul.

4.4 Modélisation des réactions chimiques

Les émissions de NO_x (majoritairement du NO et du NO_2) proviennent essentiellement des processus de combustion de combustibles fossiles. Avec ces processus, les émissions sont majoritairement des émissions de NO (Vardoulakis *et al.*, 2003). Ce polluant se transforme chimiquement en NO_2 qui est une espèce plus toxique (Last *et al.*, 1994 ; Omasa *et al.*, 2012 ; Manahan, 2013). Les processus de transformation relatifs aux NO_x se déroulent sur une échelle de temps très inférieure au pas de temps horaire utilisé par le modèle SIRANE (Seinfeld, 1986 ; Palmgren *et al.*, 1996). Aussi, il est important de modéliser ces réactions afin de prendre en compte les modifications des concentrations de polluants qu'elles induisent. Celles-ci sont implémentées dans le modèle SIRANE après la dispersion des polluants et sont actuellement modélisées avec le cycle de Chapman représenté par

le système d'équations 4.31 :

$$\begin{cases} NO_2 + h\nu \xrightarrow{k_1} NO + O^\bullet \\ O^\bullet + O_2 \xrightarrow{k_2} O_3 \\ NO + O_3 \xrightarrow{k_3} NO_2 + O_2 \end{cases} \tag{4.31}$$

où k_1, k_2 et k_3 sont les constantes cinétiques de réaction. Le radical $O^\bullet$ étant très réactif, le temps caractéristique de la seconde réaction, conduisant à la production d'ozone, est négligeable vis-à-vis des deux autres. Ces réactions chimiques sont modélisées dans le modèle SIRANE en considérant un équilibre photo-stationnaire, c'est-à-dire un équilibre entre la consommation (première réaction du système 4.31) et la production (troisième réaction du système 4.31) de NO_2. Cet équilibre s'exprime sous la forme de la relation 4.32 :

$$\frac{k_1}{k_3\,[O_3]} = \frac{[NO]}{[NO_2]} \tag{4.32}$$

où $[NO]$, $[NO_2]$ et $[O_3]$ représentent respectivement les concentrations molaires de NO, de NO_2 et de O_3. Pour déterminer les concentrations de NO, de NO_2 et de O_3, il est donc nécessaire de déterminer les constantes k_1 et k_3 qui varient au cours du temps. La constante k_1, qui est le taux de photolyse de NO_2, dépend de l'intensité des radiations solaires alors que la constante k_3 dépend de la température (Kasten et Czeplak, 1980 ; Seinfeld, 1986). Ces deux constantes sont modélisées dans SIRANE avec le système 4.33 (Kasten et Czeplak, 1980 ; Seinfeld, 1986) :

$$\begin{cases} k_1 = \dfrac{1}{60}\left(0.5699 - \left[9.056e^{-3}(90-\chi)\right]^{2.546}\right)\left(1 - 0.75\left[\dfrac{\text{Cld}}{8}\right]^{3.4}\right)\,[\text{s}^{-1}] \\ k_3 = 1.325e^6 \exp\left(-\dfrac{1430}{T}\right)\,[\text{m}^3\text{mole}^{-1}\text{s}^{-1}] \end{cases} \tag{4.33}$$

où χ représente l'élévation solaire, Cld correspond à la nébulosité et T est la température. Il existe également d'autres modèles plus sophistiqués pour évaluer la constante k_1 mais ils ne sont généralement pas applicables avec des modèles opérationnels (Seinfeld, 1986).

4.5 Données d'entrée du modèle SIRANE

4.5.1 Géométrie urbaine

Le modèle SIRANE a besoin de connaître la géométrie urbaine, plus précisément la géométrie du réseau de rues, pour estimer la qualité de l'air dans la canopée urbaine. Il est possible de s'appuyer sur plusieurs types de représentations numériques des villes pour déterminer la géométrie du réseau de rues. Ceux-ci diffèrent selon le niveau de détail (*Level Of Detail*, LOD) des bâtiments. Il existe cinq niveaux de détail pour modéliser la géométrie urbaine allant du LOD0 au LOD4 (figure 4.10). Le LOD0 correspond au niveau de détail le plus faible et permet d'obtenir une représentation numérique du terrain. Le LOD4 est au contraire le niveau de détail le plus élevé. Celui-ci représente la texture et la toiture des bâtiments avec une haute résolution. Il modélise également l'intérieur des bâtiments. SIRANE simplifie la représentation des rues et modélise le volume de chaque rue par une boîte

FIGURE 4.10 – Niveaux de détail de la description des géométries urbaines (d'après Biljecki *et al.* (2016))

parallélépipédique. Aussi, le LOD1 qui représente les bâtiments par des blocs est une représentation suffisante pour déterminer la géométrie du réseau de rues. A partir d'une représentation de la ville de type LOD1, la démarche consiste donc à définir la géométrie du *négatif* des bâtiments qui correspond au réseau de rues. Soulhac *et al.* (2011) décrivent plus en détail la démarche pour définir les paramètres W, H, et L associés à chaque rue du réseau. Cette représentation géométrique n'intègre pas explicitement les détails architecturaux tels que les portes ou les balcons. Ces éléments peuvent néanmoins avoir des effets importants sur l'écoulement local (Salizzoni *et al.*, 2008, 2009b). Puisque la concentration est supposée homogène et que l'écoulement est considéré comme uniforme dans une rue, SIRANE modélise les effets de ces éléments comme un effet global sur l'écoulement moyen dans la rue, en considérant que les bâtiments qui bordent la rue ont une rugosité z_0 qui est uniformément distribuée.

4.5.2 Météorologie

Les données d'entrée associées à la météorologie sont utilisées par le modèle SIRANE pour déterminer la dynamique de l'écoulement extérieur, supposé uniforme dans le plan horizontal. Ces données météorologiques sont relatives à un point du domaine d'étude et correspondent à la vitesse et la direction du vent, à la température, à la nébulosité et à la pluviométrie. Ces données sont soit déterminées à l'aide d'un modèle de météorologie (par exemple avec les modèles WRF, MM5, ARPEGE, GFS, etc ...), soit fournies par une station météorologique. A partir de ces données, le modèle calcule notamment le profil de vent $u(z)$, le profil de température potentielle $\theta(z)$, la longueur de Monin-Obukhov L_{MO}, la hauteur de la couche atmosphérique h_{CLA} et les écarts types σ_v et σ_w relatifs aux composantes v et w de la vitesse du vent. La modélisation de ces variables est décrite plus en détail dans la partie 4.3.

4.5.3 Emissions

La modélisation des émissions est une étape primordiale pour simuler correctement la qualité de l'air. Cette modélisation implique l'évaluation des débits d'émissions. La géométrie des sources d'émissions, plus précisément la géométrie de l'orifice par lequel sont rejetés les polluants, est éga-

lement un paramètre important à prendre en compte pour modéliser la pollution atmosphérique. Chaque source a une géométrie intrinsèque. Néanmoins, la modélisation de la géométrie des sources ne correspond pas nécessairement à la géométrie intrinsèque de la source. De même, toutes les sources d'émissions ne sont pas forcément modélisées individuellement. Elles sont parfois regroupées et représentées par une seule source. Généralement, les émissions sont modélisées comme des sources ponctuelles, linéiques, surfaciques ou volumiques. Plus la représentation géométrique est fine et représentative de la géométrie réelle plus la variabilité spatiale des concentrations à proximité de la source est correctement modélisée. Cependant, cela peut conduire à modéliser un nombre de sources important qui augmente le coût en temps de calcul. Aussi, les sources sont parfois regroupées et représentées de manière plus grossière. Le choix de la représentation géométrique d'une source dépend de la géométrie réelle de la source, de l'échelle spatiale caractéristique des phénomènes étudiés, des modèles de dispersion atmosphérique utilisés, des données disponibles et de contraintes particulières telles que le coût en temps de calcul.

Pour modéliser la qualité de l'air à l'échelle urbaine, SIRANE considère trois types de sources : ponctuelles, linéiques et surfaciques. Les sources linéiques sont utilisées pour représenter les émissions liées au trafic. Bien que les émissions du trafic proviennent de sources mobiles *ponctuelles*, la représentation de ces émissions sous la forme d'émissions linéiques (figées) est relativement acceptable étant donné que les émissions sont supposées stationnaires à chaque pas de temps. Pour évaluer la qualité de l'air à l'échelle urbaine, il est important de bien modéliser les émissions du trafic qui sont généralement élevées pour certains polluants comme les NO_x. La modélisation de ces émissions peut être effectuée avec un modèle de trafic (par exemple le modèle DAVISUM, (Broquereau, 1999)) couplé à des facteurs d'émissions (par exemple les facteurs estimés par le modèle COPERT, (Gkatzoflias *et al.*, 2007)). Les sources ponctuelles permettent de modéliser les rejets provenant des industries. Ce sont les seules sources qui peuvent être placées en hauteur. Les émissions industrielles sont généralement évaluées à partir d'un recensement des sources. Enfin, les sources surfaciques simulent les émissions diffuses telles que les émissions du secteur résidentiel-tertiaire. Cette représentation est notamment due à la résolution des bases de données relatives à ce type d'émissions. Celles-ci fournissent des données sous la forme d'un cadastre (grille régulière horizontale) qui a généralement une résolution de l'ordre du kilomètre.

4.5.4 Concentration de fond

SIRANE est un modèle à aire limitée, c'est-à-dire qu'il modélise la dispersion des polluants sur une zone restreinte qui ne recouvre pas l'ensemble du globe. Aussi, il ne modélise pas la dispersion des polluants provenant de l'extérieur du domaine d'étude. Cependant, la pollution atmosphérique à l'échelle urbaine peut aussi être influencée par ces polluants. Aussi, le modèle SIRANE prend en compte l'effet de ces polluants en intégrant une concentration dite *concentration de fond* qui est fournie en donnée d'entrée. Elle est généralement déterminée à partir de mesures de concentration ou à l'aide d'un modèle de qualité de l'air à plus grande échelle. Cette concentration de fond est actuellement supposée uniforme et est simplement ajoutée aux concentrations induites par les

émissions localisées dans le domaine. L'évaluation de la concentration de fond est un sujet traité dans la partie III relative à l'approche de modélisation multi-échelles.

4.6 Conclusion

SIRANE est un modèle opérationnel dédié à l'étude de la qualité de l'air dans les environnements urbains. Il combine une approche de réseau de rues et des modèles gaussiens pour évaluer la dispersion des polluants respectivement dans la canopée urbaine et dans l'atmosphère extérieure. Pour déterminer la dispersion dans la canopée urbaine, le modèle SIRANE prend en compte trois processus de transport : le transport par convection le long de la rue induit par le vent moyen dans l'axe de la rue ; le transfert turbulent à travers l'interface rue-atmosphère extérieure ; et le transfert par convection aux intersections des rues. Ces trois processus sont modélisés avec des relations paramétriques. Les données d'entrée du modèle sont la géométrie urbaine, la météorologie, les émissions et la concentration de fond. Ce modèle est utilisé au cours de ce projet de recherche pour étudier l'approche de modélisation multi-échelles et les méthodes d'assimilation de données à l'échelle urbaine. Pour évaluer l'apport de ces approches, il est tout d'abord nécessaire de définir les résultats de référence auxquels se comparer. Ceci fait l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 5
Simulations SIRANE de référence

Lors de ce projet de recherche, les approches de modélisation multi-échelles et d'assimilation de données à l'échelle urbaine ont été appliquées sur deux cas d'étude distincts. Pour estimer l'apport de ces deux approches, une simulation SIRANE est réalisée pour chaque cas d'étude. Les résultats associés à ces simulations constituent les résultats de référence auxquels se comparer pour évaluer l'apport des approches étudiées.

L'objectif de ce chapitre est de présenter les cas d'étude (5.1), de décrire la mise en œuvre du modèle SIRANE pour ces cas d'étude (section 5.2), de définir les critères statistiques utilisés pour évaluer la qualité des estimations (section 5.3) et de présenter les résultats associés aux simulations SIRANE de référence (section 5.4).

5.1 Présentation des cas d'étude

L'objectif de chaque cas d'étude est d'estimer les concentrations moyennes horaires de NO_2 et de PM_{10} sur l'agglomération lyonnaise. Les deux cas d'étude portent sur l'agglomération lyonnaise car l'équipe de recherche AIR (Atmosphere, Impact & Risk), au sein de laquelle le projet de recherche est mené, et l'AASQA Atmo Auvergne-Rhône-Alpes (partenaire du projet de recherche) ont acquis une expérience importante avec le modèle SIRANE sur cette agglomération. Le modèle SIRANE a notamment fait l'objet d'une étude de validation sur cette agglomération (Soulhac *et al.*, 2012). De même, Atmo Auvergne-Rhône-Alpes réalise des simulations avec le modèle SIRANE sur cette zone depuis 2003. Chaque cas d'étude porte sur le NO_2 et les PM_{10} car ces polluants sont réglementés par les législations française et européenne (directive 2008/50/CE) et surveillés par les AASQA. De plus, les concentrations de PM_{10} et de NO_2 sont relativement élevées dans les environnements urbains (Guerreiro *et al.*, 2014 ; Holman *et al.*, 2015). De même, la variabilité spatiale des concentrations associées à ces polluants est particulièrement élevée dans les environnements urbains. Aussi, l'évaluation des concentrations de NO_2 et de PM_{10} à l'échelle urbaine est une problématique relativement complexe. L'analyse des méthodes d'assimilation de données à l'échelle urbaine est réalisée sur le cas d'étude associé à l'année 2008. Cela est notamment lié au fait que l'équipe AIR dispose des données nécessaires pour réaliser une simulation SIRANE sur cette année. De plus, l'année 2008

Type	Nom	Abréviation	2008		2014	
			PM_{10}	NO_2	PM_{10}	NO_2
Trafic	A7 sud lyonnais	A7	✓	✓	✓	✓
	Berthelot	BER	✓	✓		
	Garibaldi	GAR		✓		
	Grandclément	GC	✓	✓	✓	✓
	Lyon périphérique	LP	✓	✓	✓	✓
	Tunnel Croix-Rousse	TCR			✓	✓
	Vaise	VAI		✓		
Urbain	Gerland	GER		✓		✓
	Lyon centre	LC	✓	✓	✓	✓
	Saint-Just	STJ		✓		✓
	Vaulx-en-Velin	VeV	✓	✓	✓	✓
Industrie	Feyzin	FEY	✓	✓	✓	✓
	Saint-Fons	STF	✓	✓	✓	✓
Fond	Cotière de l'Ain	COT	✓	✓	✓	✓
	Genas	GEN	✓	✓	✓	✓
	Saint-Exupéry	STE	✓	✓	✓	✓
	Ternay	TER	✓	✓	✓	✓

TABLE 5.1 – Liste des stations fixes fournissant des mesures de concentration pour les cas d'étude

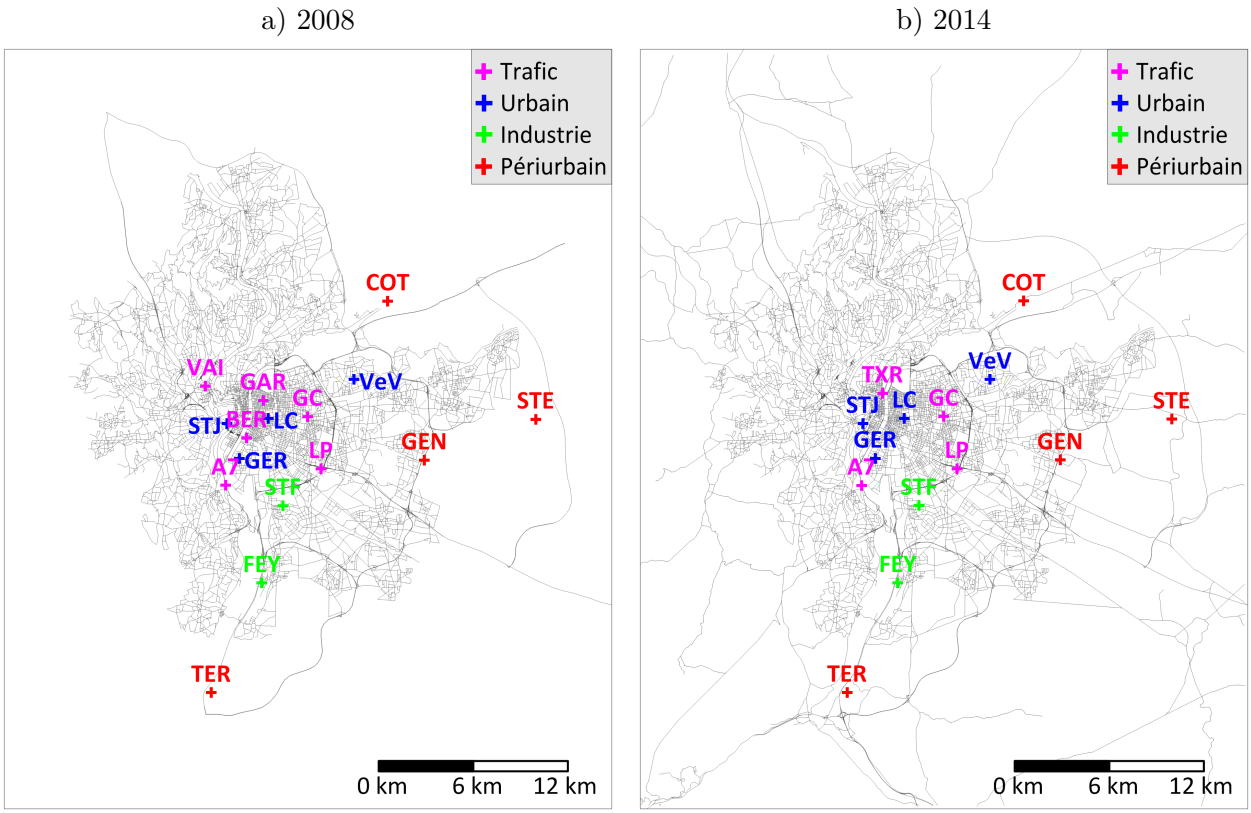


FIGURE 5.1 – Position des stations fixes de mesure sur l'agglomération lyonnaise en 2008 (a) et en 2014 (b)

a déjà fait l'objet d'une validation du modèle SIRANE (Soulhac *et al.*, 2012). L'analyse de l'approche de modélisation multi-échelles est effectuée sur le cas d'étude relatif à l'année 2014 car Atmo Auvergne-Rhône-Alpes dispose des données nécessaires à la modélisation multi-échelles uniquement pour l'année 2014.

Pour évaluer la qualité des modélisations sur ces deux cas d'étude, les estimations sont comparées aux mesures de concentration effectuées par Atmo Auvergne-Rhône-Alpes au moyen de stations fixes (tableau 5.1 et figure 5.1). Atmo Auvergne-Rhône-Alpes indique que ces stations sont de type trafic urbain (Berthelot, Garibaldi, Grandclément, Lyon périphérique, Tunnel Croix-Rousse), trafic périurbain (A7 sud lyonnais), fond urbain (Gerland, Lyon centre, Saint-Just, Vaulx-en-Velin), industriel périurbain (Feyzin, Saint-Fons) et fond périurbain (Cotière de l'Ain, Genas, Saint-Exupéry, Ternay). Pour simplifier la notation, les stations seront dites de type trafic (trafic urbain, trafic périurbain), urbain (fond urbain), industriel (industriel périurbain) et fond (fond périurbain) dans la suite du rapport. En 2008, le taux de données manquantes par station est inférieur à 10 % et le taux de données manquantes global est de 3 % pour les deux polluants. En 2014, le taux de données manquantes par station est inférieur à 20 % pour le NO_2 et à 15 % pour les PM_{10}. Le taux de données manquantes global est de 5 % pour le NO_2 et de 10 % pour les PM_{10}.

5.2 Mise en œuvre du modèle SIRANE

Pour les deux cas d'étude, les données d'entrée du modèle SIRANE sont préparées à partir des données fournies par Atmo Auvergne-Rhône-Alpes.

5.2.1 Géométrie urbaine

La modélisation du réseau de rues sur l'agglomération lyonnaise en 2008 comprend 21922 brins de rues/routes (figure 5.2). Le réseau de rues modélisé pour le cas d'étude 2014 est plus fourni et est constitué de 28330 brins de rues/routes. Dans les deux cas, la longueur cumulée des rues-canyons représentent approximativement 15 % du réseau total. Les rues-canyons sont essentiellement localisées dans la ville de Lyon.

5.2.2 Emissions

Les émissions du trafic associées au réseau de rues sont modélisées comme des sources linéiques. Ces émissions sont estimées à l'aide du modèle de trafic DAVISUM (Broquereau, 1999) et des facteurs d'émissions fournis par le modèle COPERT IV (Gkatzoflias *et al.*, 2007). Les émissions moyennes annuelles du trafic les plus élevées sont généralement associées aux autoroutes et au périphérique lyonnais (figures 5.3 et 5.4). En 2008, 79 % du nombre total de rues (ou 73 % de la longueur totale) est associé à un débit d'émission moyen inférieur à $10\,\mu g.m^{-1}.s^{-1}$ pour les PM_{10}. Pour le NO_2, cette proportion est de 66 % (ou 61 % de la longueur totale). En 2014, cette proportion est de 77 % (82 %) pour les PM_{10} et de 54 % (54 %) pour le NO_2. Il convient de signaler que 40 % du nombre totale de rues/routes (et de la longueur totale) est associé à un débit d'émission nul en

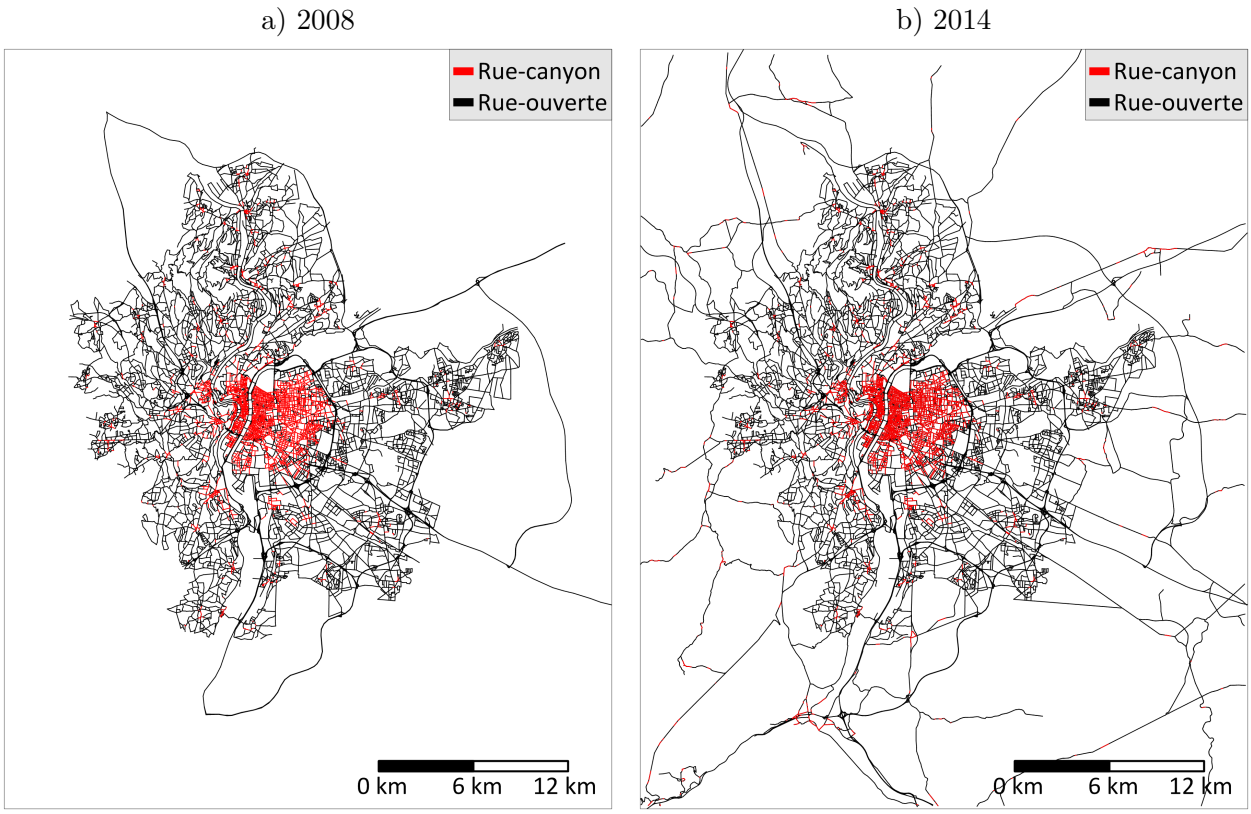


FIGURE 5.2 – Représentation des réseaux de rues utilisés pour les simulations SIRANE associées aux cas d'étude 2008 (a) et 2014 (b). Les rues en rouge représentent les rues-canyons.

2014 pour les deux polluants. Néanmoins, ces rues/routes sont prises en compte dans les simulations SIRANE car elles influencent la dispersion.

Pour le cas d'étude 2008, les émissions associées à 63 sources industrielles et 28 cheminées de tunnels routiers sont modélisées par des sources ponctuelles (figure 5.5). L'ensemble des sources industrielles émet en moyenne annuelle moins de $0.05\,\mathrm{g.s^{-1}}$ de NO_2. C'est également le cas pour 19 cheminées de tunnels routiers. En 2008, toutes les cheminées de tunnels routiers émettent des PM_{10}. Cependant, seule une industrie émet des PM_{10}. Parmi les sources ponctuelles émettant des PM_{10} (29), 18 ont un débit moyen annuel de PM_{10} inférieur à $0.02\,\mathrm{g.s^{-1}}$. En 2014, les émissions de 21 sources ponctuelles sont modélisées (figure 5.6). Celles-ci correspondent uniquement à des cheminées de tunnels routiers (pour des raisons de confidentialité, Atmo Auvergne-Rhône-Alpes ne nous a pas communiqué les informations relatives aux sources industrielles (émissions, localisation, etc ...), néanmoins les émissions associées à ces sources sont prises en compte dans les émissions des sources surfaciques en 2014). Le débit moyen annuel est inférieur à $0.02\,\mathrm{g.s^{-1}}$ de PM_{10} et inférieur à $0.05\,\mathrm{g.s^{-1}}$ de NO_2 pour 11 des 21 sources ponctuelles. Pour les deux années, les débits d'émission moyens annuels des cheminées de tunnels routiers sont globalement du même ordre de grandeur.

En 2008, les autres émissions anthropiques liées notamment au secteur résidentiel-tertiaire sont représentées par des sources surfaciques. La résolution de l'inventaire associé à ces sources est de 1 km

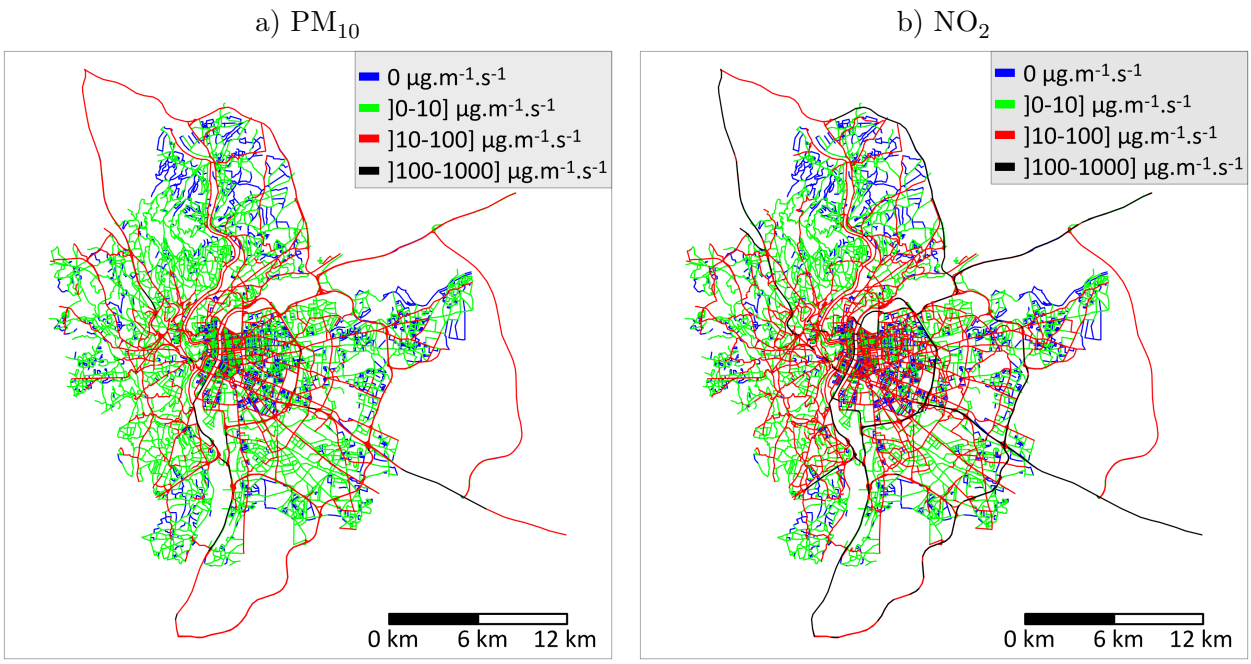


FIGURE 5.3 – Emissions moyennes annuelles de PM_{10} (a) et NO_2 (b) en $\mu g.m^{-1}.s^{-1}$ associées au trafic sur l'agglomération lyonnaise en 2008

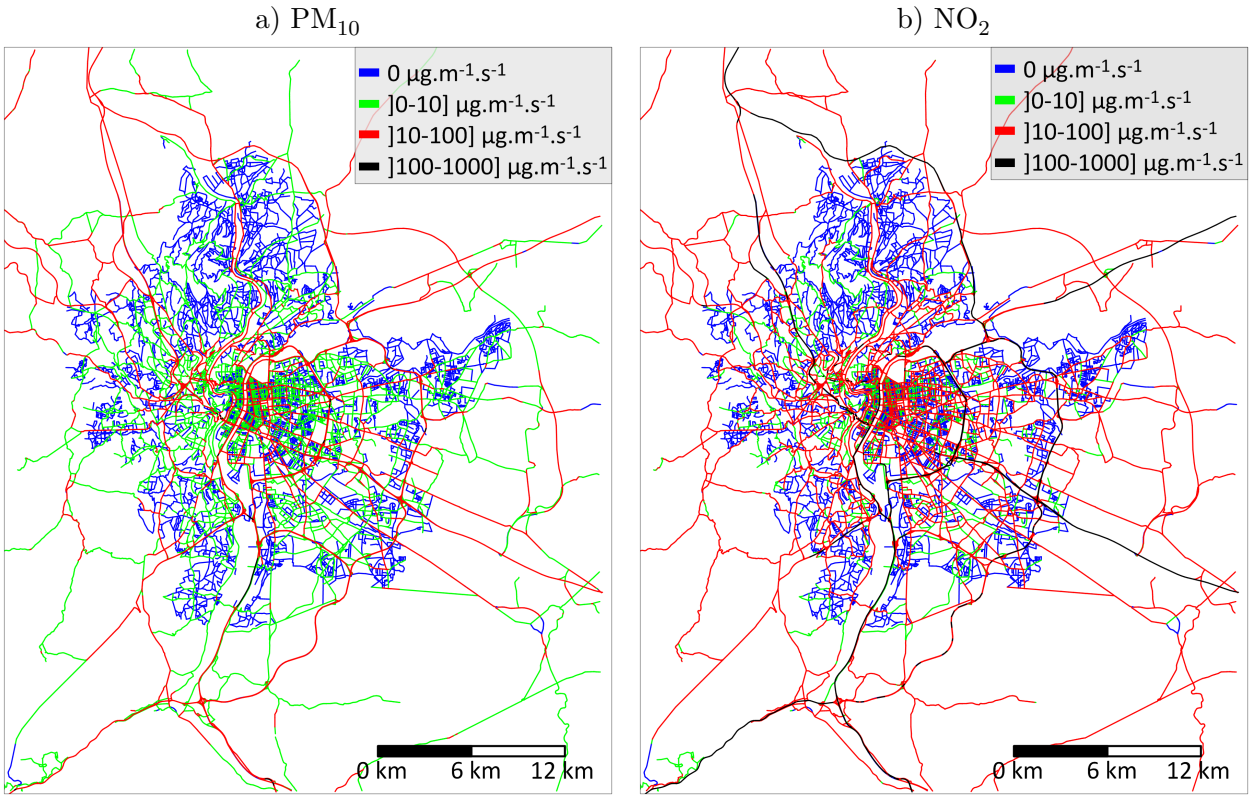


FIGURE 5.4 – Emissions moyennes annuelles de PM_{10} (a) et NO_2 (b) en $\mu g.m^{-1}.s^{-1}$ associées au trafic sur l'agglomération lyonnaise en 2014

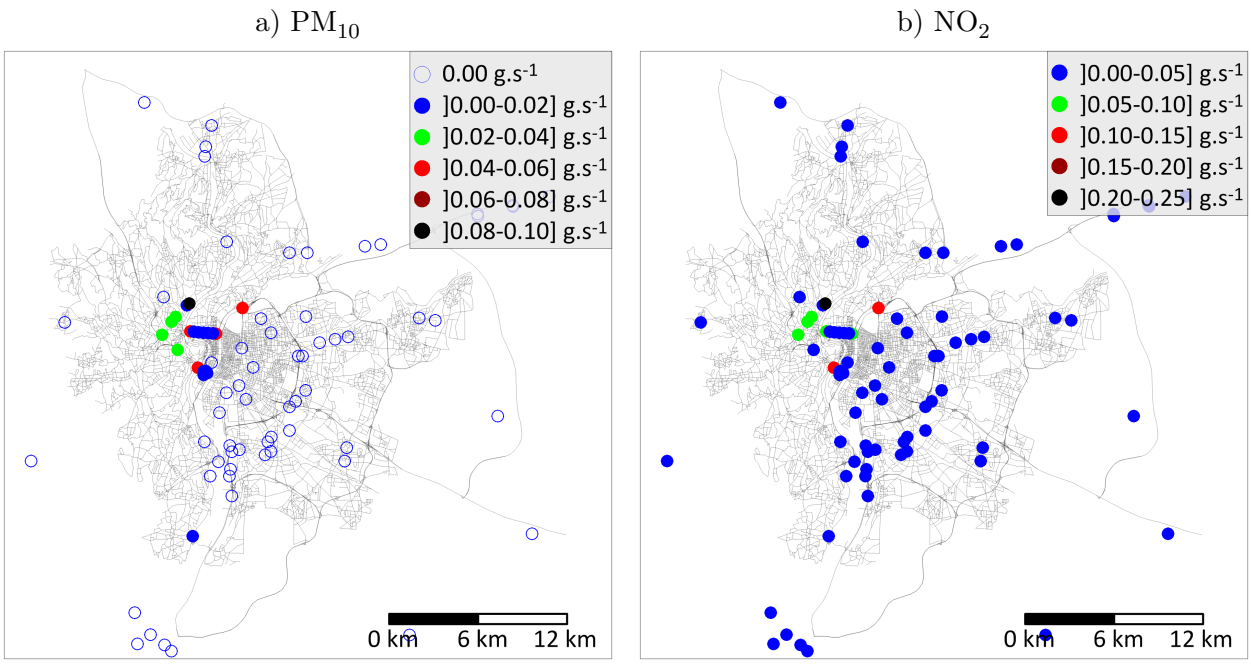


FIGURE 5.5 – Emissions moyennes annuelles de PM_{10} (a) et NO_2 (b) en g..s^{-1} associées aux sources ponctuelles sur l'agglomération lyonnaise en 2008

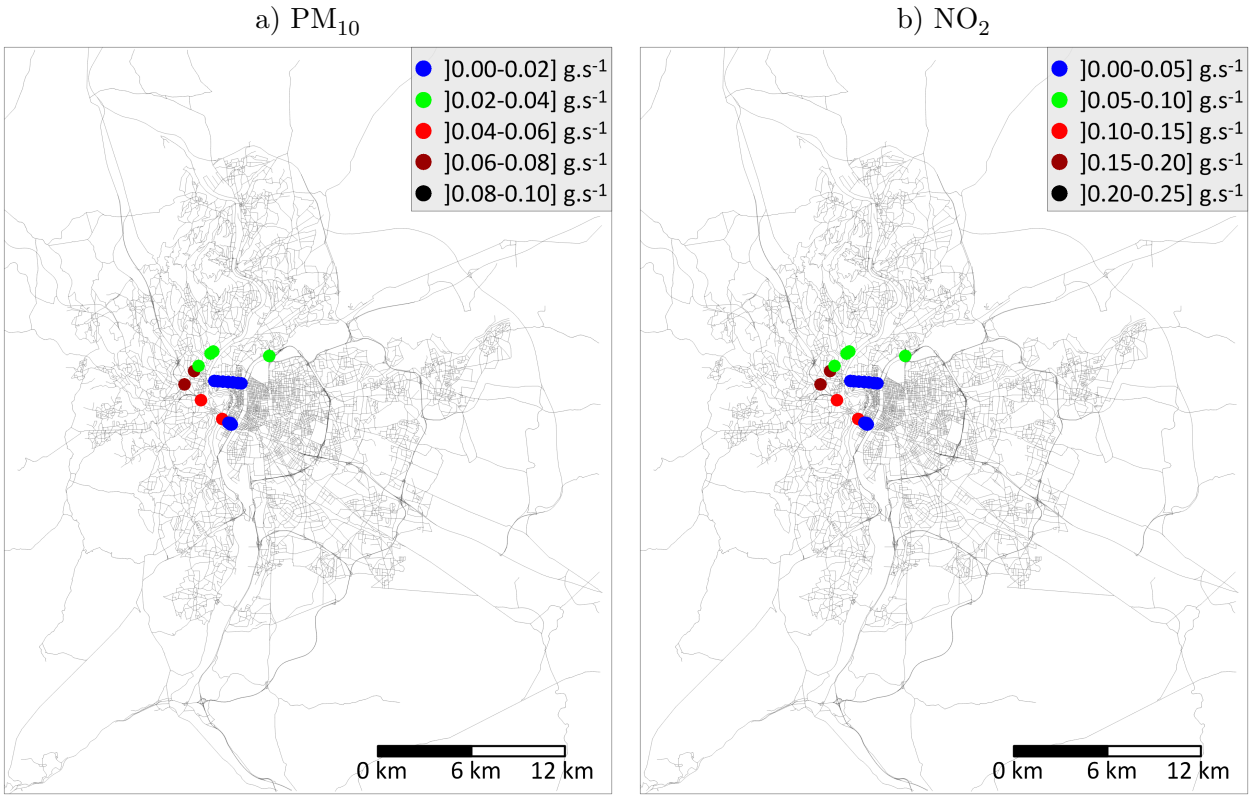


FIGURE 5.6 – Emissions moyennes annuelles de PM_{10} (a) et NO_2 (b) en g.s^{-1} associées aux sources ponctuelles sur l'agglomération lyonnaise en 2014

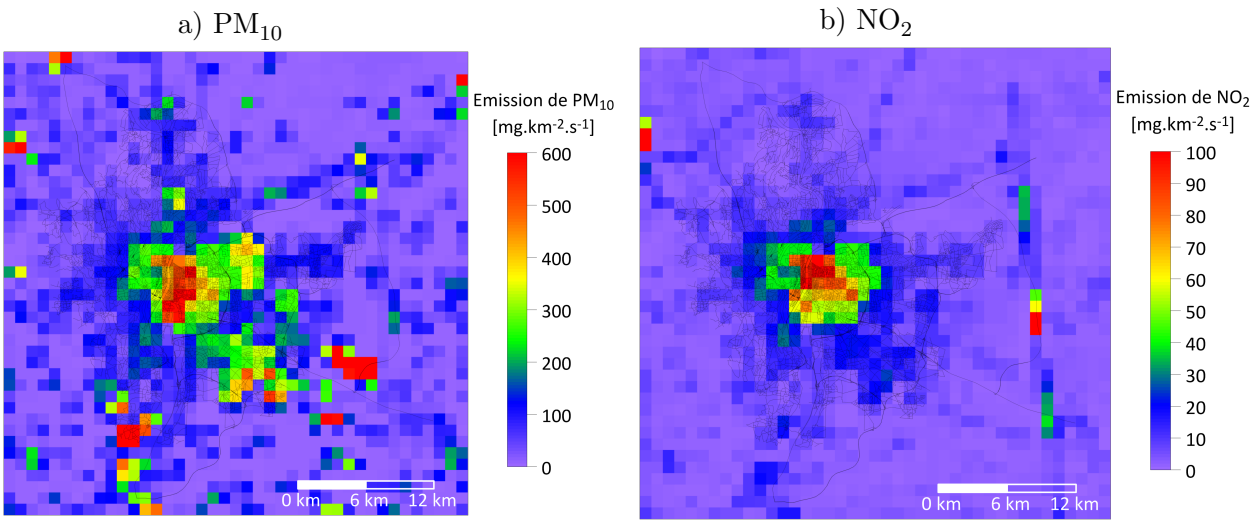


FIGURE 5.7 – Emissions moyennes annuelles de PM_{10} (a) et NO_2 (b) associées aux sources surfaciques sur l'agglomération lyonnaise en 2008

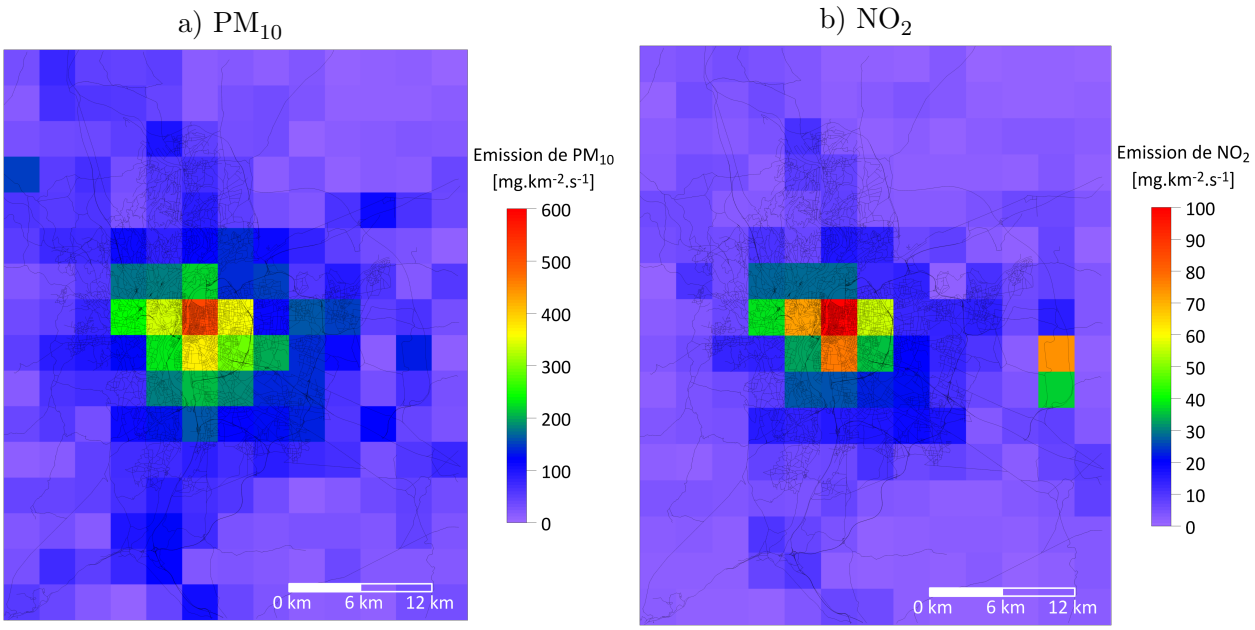


FIGURE 5.8 – Emissions moyennes annuelles de PM_{10} (a) et NO_2 (b) associées aux sources surfaciques sur l'agglomération lyonnaise en 2014

(figure 5.7). Pour ces sources, les débits d'émission moyens annuels de PM_{10} sont généralement plus élevés au centre de l'agglomération, sur la ville de Lyon, bien qu'ils soient parfois plus importants sur certaines zones en périphérie. Ils dépassent $200\,mg.km^{-2}.s^{-1}$ sur quasiment la totalité du centre de l'agglomération alors qu'ils sont en général inférieurs à $150\,mg.km^{-2}.s^{-1}$ en périphérie. De même, ces sources émettent globalement plus de NO_2 sur la ville de Lyon. Dans cette zone, les débits d'émission moyens annuels de NO_2 sont en grande majorité supérieurs à $40\,mg.km^{-2}.s^{-1}$. En périphérie de la

ville de Lyon, ils sont généralement inférieurs à 30 mg.km^{-2}.s^{-1} bien qu'ils soient parfois plus élevés sur certaines zones. En 2014, les sources d'émissions autres que le trafic et les cheminées de tunnels routiers sont modélisées par des sources surfaciques. La résolution de l'inventaire relatif à ces sources est de 3 km (figure 5.8). A l'instar de l'année 2008, ces sources émettent globalement plus de PM_{10} et de NO_2 sur le centre de l'agglomération lyonnaise en 2014. Les débits d'émission moyens annuels de PM_{10} sont en général supérieurs à 180 mg.km^{-2}.s^{-1} sur la ville de Lyon alors qu'ils n'excèdent pas 150 mg.km^{-2}.s^{-1} en périphérie. Dans le cas du NO_2, ces sources émettent globalement plus de 25 mg.km^{-2}.s^{-1} sur le centre de l'agglomération lyonnaise. Cependant, les débits d'émissions moyens annuels de NO_2 sont généralement inférieurs à 20 mg.km^{-2}.s^{-1} en périphérie bien qu'ils soient parfois plus importants dans certaines zones. Globalement, les débits d'émissions moyens annuels pour les deux polluants sont du même ordre de grandeur en 2008 et en 2014 mis à part en périphérie de la ville de Lyon où les débits d'émission moyens annuels de PM_{10} sont parfois plus faibles en 2014. Les données d'émissions relatives aux industries et au secteur résidentiel-tertiaire proviennent d'un inventaire des sources d'émissions effectué par Atmo Auvergne-Rhône-Alpes.

Pour l'ensemble des types de sources (linéiques, ponctuelles, surfaciques), les émissions sont modulées à chaque pas de temps afin de reproduire la variation temporelle des émissions. A titre d'exemple, les coefficients de modulation moyens horaires appliqués aux émissions du trafic sont représentés sur la figure 5.9. Ces coefficients sont en moyenne plus importants au cours de la journée, entre 6 h et 18 h. Ils sont notamment importants vers 7 h et 17 h (*heures de pointe*) en raison du fort trafic lié aux déplacements domicile-travail.

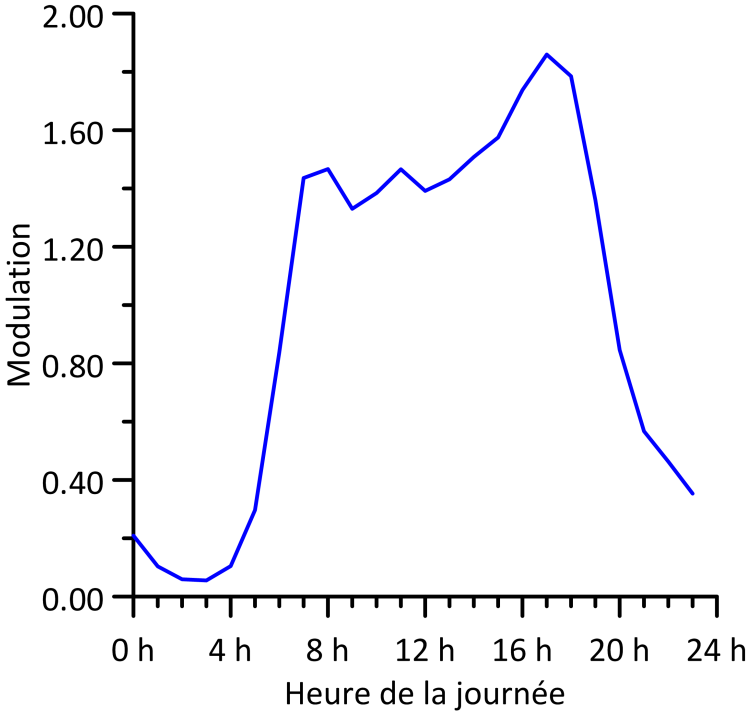


FIGURE 5.9 – Modulation horaire moyenne appliquée aux émissions du trafic au cours d'une journée

5.2.3 Concentration de fond

L'estimation de la concentration de fond est une problématique récurrente avec les modèles de dispersion atmosphérique (Tchepel *et al.*, 2010). Cette concentration permet de prendre en compte la contribution des polluants provenant de l'extérieur du domaine d'étude. Celle-ci est soit estimée par l'utilisateur (Righi *et al.*, 2009), soit déterminée à partir de mesures de concentration (Giambini *et al.*, 2010 ; Tchepel *et al.*, 2010 ; Dědelě et Miškinytė, 2015) ou soit évaluée à l'aide d'un modèle de dispersion à plus grande échelle (Soulhac *et al.*, 2003 ; Rojas et Venegas, 2013 ; Silver *et al.*, 2013b). Dans les deux cas d'étude (2008 et 2014), les concentrations mesurées à la station Saint-Exupéry, située à environ 30 km à l'est du centre de Lyon au bord du domaine d'étude (figure 5.1), sont utilisées comme concentration de fond. La concentration de fond est supposée homogène sur l'ensemble du domaine. Celle-ci est ajoutée aux concentrations induites par les sources situées dans le domaine d'étude avant l'application du modèle chimique. L'estimation de la concentration de fond sera de nouveau discutée par la suite dans le chapitre 8.

5.2.4 Météorologie

La démarche employée pour déterminer les données d'entrée météorologiques est différente dans les deux cas d'étude. Pour le cas 2008, les données météorologiques proviennent d'une station météorologique de Météo-France (Bron). Pour le cas 2014, les données sont déterminées avec le modèle météorologique WRF. Les données correspondent aux résultats d'une simulation WRF en un point

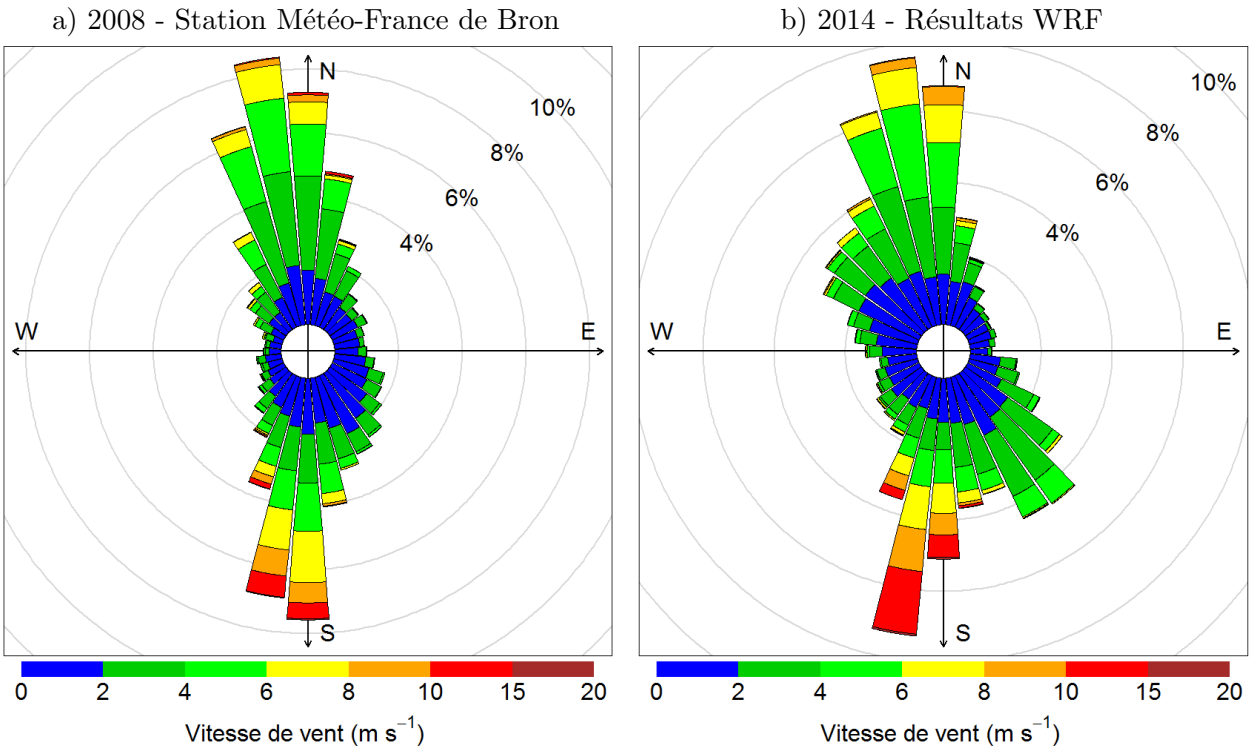


FIGURE 5.10 – Rose des vents en 2008 (a) et en 2014 (b)

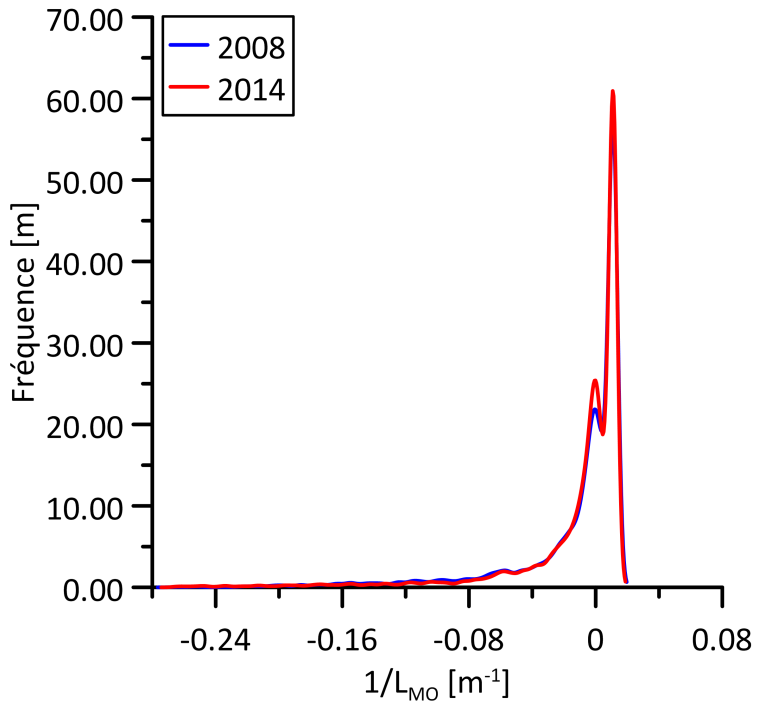


FIGURE 5.11 – Distribution de la longueur de Monin-Obukhov en 2008 (courbe bleue) et en 2014 (courbe rouge)

du domaine d'étude. Pour ces deux années, le vent est majoritairement dans l'axe nord-sud avec des vitesses généralement égales ou inférieures à 6 m.s^{-1} (figure 5.10). Les distributions de la longueur de Monin-Obukhov (figure 5.11) estimées par le préprocesseur météorologique de SIRANE pour les années 2008 et 2014 sont sensiblement similaires. Elles indiquent globalement un équilibre entre les conditions atmosphériques stables ($L_{MO} > 0$) et instables ($L_{MO} < 0$). Le nombre d'occurrence de $1/L_{MO}$ est important pour la valeur 0.01 m^{-1} car une valeur seuil minimum est imposée à la variable L_{MO} pour éviter des situations stables avec de fortes stratifications qui arrivent rarement dans les zones urbaines puisque les flux anthropiques et le cisaillement généré par la turbulence sont importants (de Haan, 1999).

5.2.5 Coût des simulations

Pour les deux cas d'étude, les champs de concentration sont évalués sur une grille de sortie 2D qui a une résolution de 10 m. Le domaine d'étude s'étend sur une zone de 36 km x 40 km (14.40 millions de points) en 2008 et une zone de 39 km x 48 km (18.72 millions de points) en 2014. Les concentrations horaires sont également déterminées à l'emplacement des stations fixes d'Atmo Auvergne-Rhône-Alpes qui fournissent des mesures de concentration. Les temps de calcul pour les simulations 2008 et 2014 sont respectivement de 2280 heures.CPU et de 3780 heures.CPU avec un processeur Xeon X5660 (« Westmere ») à 2.8 GHz, 6 cœurs, 12 threads (soit 16 h et 26 h de calcul en simulant 12 mois en parallèle). La mémoire maximum allouée est d'environ 7 Go pour le cas d'étude

2008 et 9 Go pour le cas d'étude 2014. L'espace disque nécessaire pour les résultats est d'environ 550 Mo pour le cas 2008 et 715 Mo pour le cas 2014. Il convient de signaler que ces simulations prennent également en compte les polluants NO et O_3 qui interviennent dans le cycle de Chapman.

5.3 Critères d'évaluation des résultats

L'approche pour évaluer la qualité des simulations consiste à comparer les estimations des simulations aux mesures de concentration. Cette comparaison peut être effectuée à l'aide d'un graphique qui montre les valeurs modélisées en fonction des valeurs mesurées (figure 5.12). Lorsque les estimations sont parfaites, les points sont situés sur l'axe 1:1 sur ce type de graphique (trait rouge en pointillés sur le graphique 5.12).

Pour quantifier la qualité des résultats, il est nécessaire d'utiliser des indices statistiques. Il existe une multitude d'indices statistiques pour évaluer la qualité des estimations (biais, erreur relative, écart type, erreur type, coefficient de corrélation, etc ...). Pour ce projet de recherche, nous avons choisi d'utiliser le biais (Bias), l'erreur type (RMSE, *Root Mean Square Error* en anglais) et le coefficient de corrélation (r) qui sont largement utilisés dans le domaine de la qualité de l'air (Blond *et al.*, 2003 ; Blond et Vautard, 2004 ; Wu *et al.*, 2008 ; Zhang *et al.*, 2012 ; Tilloy *et al.*, 2013). Ces indices sont définis dans le tableau 5.2 où c_m et c_p correspondent respectivement aux concentrations mesurées et aux concentrations prédites par le modèle ($^{-}$ représente la moyenne sur l'ensemble des

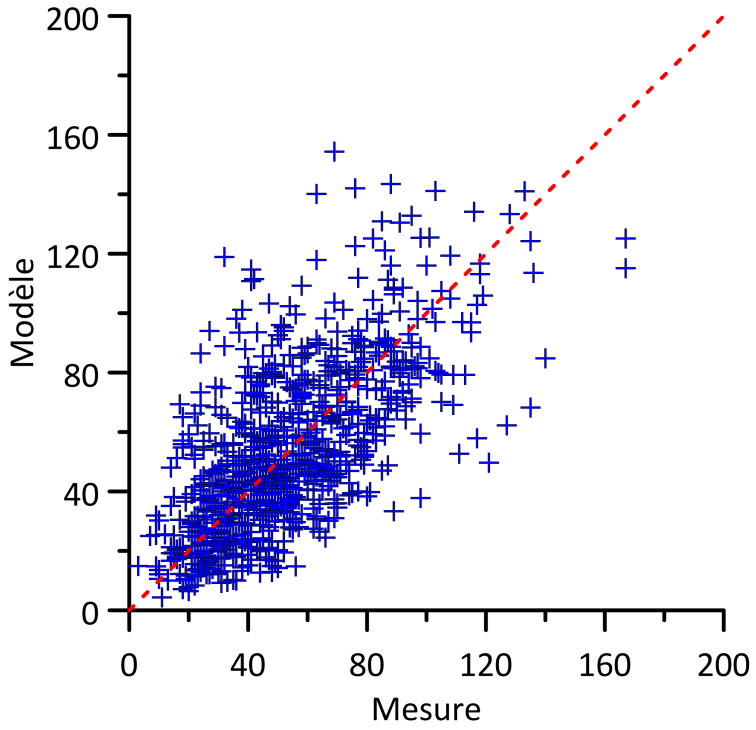


FIGURE 5.12 – Exemple de comparaison modèle-mesure (le trait rouge en pointillés correspond à l'axe 1:1)

Bias	RMSE	r
$\overline{c_m - c_p}$	$\sqrt{\overline{(c_m - c_p)^2}}$	$\dfrac{\overline{(c_m - \overline{c_m})(c_p - \overline{c_p})}}{\sqrt{\overline{(c_m - \overline{c_m})^2}\,\overline{(c_p - \overline{c_p})^2}}}$
FB	**NMSE**	**FAC2**
$\dfrac{2(\overline{c_m} - \overline{c_p})}{\overline{c_m} + \overline{c_p}}$	$\dfrac{\overline{(c_m - c_p)^2}}{\overline{c_m}\,\overline{c_p}}$	Proportion des estimations qui vérifient $0.5 \leq c_m/c_p \leq 2$

TABLE 5.2 – Indices statistiques utilisés pour évaluer la qualité des résultats

données utilisées). Ces trois indices sont utilisés car ils sont globalement complémentaires. Le biais quantifie l'écart entre les moyennes de deux variables et permet d'évaluer une erreur globale. Sur la figure 5.12, ce biais correspond à la distance entre le barycentre du nuage de points et l'axe 1:1. La valeur optimale de cet indice est 0. L'erreur type quantifie (la racine carrée de) l'erreur quadratique des estimations qui peut être assimilée à une erreur locale. Sur la figure 5.12, l'erreur type correspond à la diffusion moyenne des points vis-à-vis de l'axe 1:1. La valeur optimale pour cet indice est également 0. Le coefficient de corrélation est un indice statistique qui permet d'évaluer la corrélation entre les variations de deux variables. La valeur du coefficient de corrélation varie entre -1 et 1. La valeur optimale correspondant à des variables parfaitement corrélées est 1. Chang et Hanna (2004) et Hanna et Chang (2012) proposent également d'utiliser le biais fractionnel (FB), l'erreur quadratique normalisée (NMSE, *normalized mean-square error* en anglais) et le facteur 2 (FAC2) qui sont définis dans le tableau 5.2. Le biais fractionnel correspond à un biais normalisé. Les valeurs optimales pour le FB, le NMSE et le FAC2 sont respectivement 0, 0 et 1. Ces indices statistiques, aussi largement utilisés dans le domaine de la pollution atmosphérique (Chang *et al.*, 2005 ; Milliez et Carissimo, 2007 ; Soulhac *et al.*, 2012 ; Moonen *et al.*, 2013 ; Hülsmann *et al.*, 2014 ; Wang *et al.*, 2016), sont également calculés dans ce travail de thèse pour évaluer la qualité des estimations. Chang et Hanna (2004) et Hanna et Chang (2012) proposent aussi d'utiliser la moyenne géométrique (MG), la variance géométrique (VG) ainsi que la différence absolue normalisée (NMD). Cependant, ils ne sont pas utilisés dans ce projet de recherche. La comparaison modèle-mesure, qui consiste à calculer les indices statistiques, est réalisée pour chaque capteur. Pour évaluer la qualité globale de la simulation, ces indices sont également moyennés sur l'ensemble des capteurs afin de déterminer le biais moyen, le FB moyen, le RMSE moyen, le NMSE moyen, le coefficient de corrélation moyen et le FAC2 moyen.

Aucun modèle n'est parfait et ne peut prédire exactement les concentrations mesurées par les capteurs. Aussi, les valeurs des indices statistiques ne sont jamais toutes égales aux valeurs optimales associées. Néanmoins, Hanna et Chang (2012) proposent des critères de qualité associés aux indices FB, NMSE et FAC2 pour évaluer les simulations de dispersion atmosphérique en milieu urbain

Bias	FB	RMSE	NMSE	r	FAC2
$\lvert\text{Bias}\rvert \leq 0.33\,\overline{c_m}$	$\lvert\text{FB}\rvert \leq 0.67$	$\text{RMSE} \leq \overline{c_m}$	$\text{NMSE} \leq 6$	$\text{r} \geq 0.60$	$\text{FAC2} \geq 0.30$

TABLE 5.3 – Critères de qualité associés aux indices statistiques. Ceux associés au FB, au NMSE et au FAC2 sont proposés par Hanna et Chang (2012) pour évaluer les estimations en milieu urbain. Les estimations sont considérées comme satisfaisantes lorsque les critères sont vérifiés.

(tableau 5.3). De même, nous proposons des critères associés au biais et au RMSE (tableau 5.3). Il convient de signaler que les critères que nous proposons pour le biais et le RMSE sont plus sévères que ceux proposés par Hanna et Chang (2012) pour le FB et le NMSE lorsque $\overline{c_p}$ est du même ordre de grandeur que $\overline{c_m}$ (annexe A). Hanna et Chang (2012) ne proposent pas de critère pour le coefficient de corrélation (ou un équivalent). Néanmoins, nous proposons également un critère de qualité pour cet indice ($\text{r} \geq 0.60$). Lorsque les critères de qualité sont validés, les résultats sont considérés comme satisfaisants.

5.4 Résultats des simulations SIRANE de référence

5.4.1 Estimation des concentrations de PM_{10} et de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise en 2008

Les estimations des concentrations moyennes de PM_{10} et de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise en 2008 sont représentées sur la figure 5.13. Cette figure illustre la variabilité spatiale des concentrations sur l'agglomération lyonnaise. Cette variabilité est sensiblement liée à la variabilité spatiale des émissions (sous-section 5.2.2). La variabilité spatiale des concentrations de NO_2 est plus importante que celle associée aux concentrations de PM_{10}. Cela est dû au fait que les concentrations de NO_2 sont fortement influencées par les émissions du trafic qui sont caractérisées par une forte variabilité spatiale. Les concentrations de PM_{10} et de de NO_2 sont généralement plus importantes sur la ville de Lyon et le long des axes routiers principaux que sur le reste de l'agglomération lyonnaise. Dans ces zones, les concentrations de PM_{10} et de NO_2 sont généralement supérieures à la valeur limite annuelle de 40 $\mu g.m^{-3}$ fixée dans la réglementation française (sous-section 1.5.2). Les zones associées aux niveaux de pollution les plus élevés correspondent globalement à celles où se situent les émissions les plus importantes (sous-section 5.2.2).

Les performances statistiques de la simulation SIRANE sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 5.4. Le biais est négatif pour tous les capteurs et est a priori également négatif sur une grande partie du domaine d'étude. Cela signifie que la simulation surestime généralement les concentrations de PM_{10}. Cette surestimation globale peut être due à diverses raisons : 1) les émissions de PM_{10} sont surestimées, 2) la concentration de fond en PM_{10} est surestimée ou/et 3) l'écoulement et de la dispersion atmosphérique ne sont pas correctement modélisés. Les meilleures performances statistiques sont globalement associées aux stations de type fond. A l'inverse, les plus

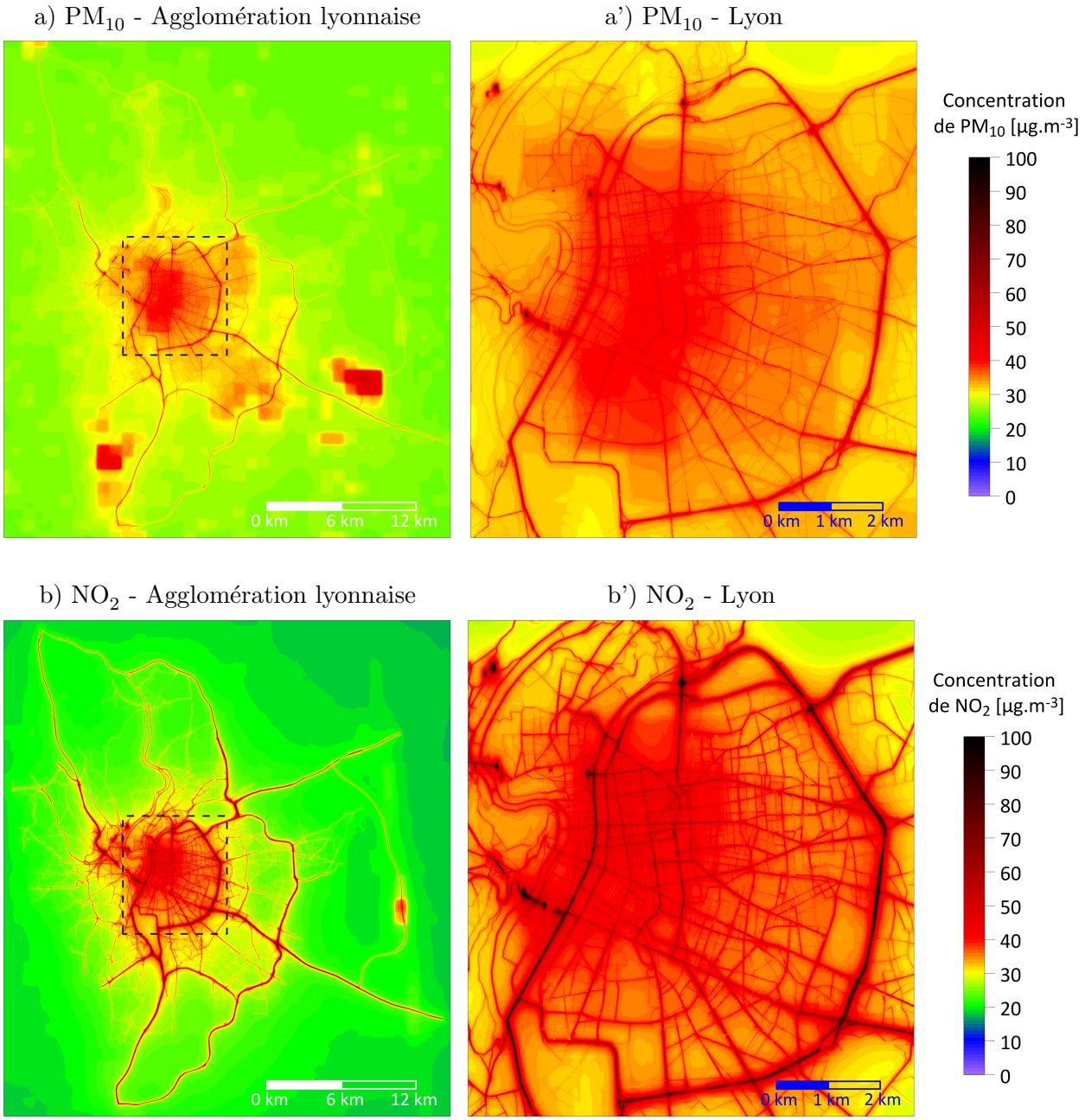


FIGURE 5.13 – Concentrations moyennes de PM_{10} (a et a') et de NO_2 (b et b') en µg.m^{-3} sur l'agglomération lyonnaise pour l'année 2008, estimées avec le modèle SIRANE (le cadre noir en pointillés sur les cartes a et b représente la zone couverte par les cartes a' et b')

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	42.34	42.37	-0.03	0.00	22.59	0.28	0.65	0.90
	BER	30.10	42.77	-12.67	-0.35	21.58	0.36	0.75	0.82
	GC	36.19	36.79	-0.60	-0.02	18.19	0.25	0.80	0.79
	LP	35.83	36.22	-0.40	-0.01	15.36	0.18	0.78	0.89
Urbain	LC	28.42	40.39	-11.96	-0.35	19.37	0.33	0.78	0.81
	VeV	27.03	33.44	-6.41	-0.21	12.34	0.17	0.87	0.90
Industrie	FEY	28.86	29.75	-0.88	-0.03	11.97	0.17	0.82	0.93
	STF	27.51	32.38	-4.87	-0.16	12.83	0.18	0.82	0.91
Fond	COT	23.77	26.79	-3.02	-0.12	8.09	0.10	0.91	0.96
	GEN	25.02	31.10	-6.08	-0.22	10.67	0.15	0.90	0.93
	STE	23.50	26.19	-2.69	-0.11	3.36	0.02	0.99	1.00
	TER	26.61	29.30	-2.70	-0.10	11.08	0.16	0.85	0.93
Moyenne		29.60	33.96	-4.36	-0.14	13.95	0.20	0.83	0.90

TABLE 5.4 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation SIRANE ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

mauvais résultats sont relatifs aux stations de type trafic. Cela est lié au fait qu'elles sont situées sur des zones caractérisées par une forte variabilité spatiale des concentrations (figures 5.1 et 5.13) où il est plus difficile d'estimer les niveaux de pollution. Néanmoins, les résultats sont satisfaisants pour tous les capteurs sauf pour les stations Berthelot (BER) et Lyon centre (LC) où le critère de qualité associé au biais n'est pas vérifié. De même, les résultats globaux de la simulation sont satisfaisants car le biais moyen, le FB moyen, le RMSE moyen, le NMSE moyen, le coefficient de corrélation moyen et le FAC2 moyen vérifient les critères de qualité.

Les performances statistiques de la simulation SIRANE sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2 sont indiquées dans le tableau 5.5. Dans l'ensemble, les résultats globaux (biais moyen, FB moyen, etc ...) pour le NO_2 sont moins bons que ceux associés aux PM_{10}. Cela peut être dû à plusieurs raisons : 1) les émissions de NO_2 sont moins bien modélisées que celles relatives aux PM_{10}, 2) la variabilité spatiale des concentrations de NO_2 est plus élevée et plus complexe à estimer que celle des PM_{10} ou/et 3) les réactions chimiques ainsi que les concentrations de NO et de O_3 qui impactent les concentrations de NO_2 ne sont pas correctement modélisées. Pour le NO_2, les meilleurs résultats sont aussi obtenus pour les stations de type fond. De même, les plus mauvais résultats sont associés aux stations de type trafic. Encore une fois, cela est dû au fait que ces stations sont situées sur des zones caractérisées par une forte variabilité spatiale des concentrations (figures 5.1 et 5.13) où il est plus complexe d'évaluer la qualité de l'air. Néanmoins, les résultats sont satisfaisants pour l'ensemble des capteurs excepté pour la station Feyzin (FEY) où le critère de qualité associé au coefficient de corrélation n'est pas vérifié. De même, les résultats globaux sont satisfaisants.

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	79.05	67.67	11.39	0.16	40.43	0.31	0.60	0.78
	BER	52.50	53.02	-0.52	-0.01	22.44	0.18	0.64	0.87
	GAR	74.06	57.06	16.99	0.26	33.42	0.26	0.70	0.86
	GC	47.06	40.16	6.90	0.16	24.82	0.33	0.65	0.79
	LP	50.67	50.05	0.62	0.01	25.79	0.26	0.63	0.81
	VAI	59.10	40.36	18.74	0.38	29.80	0.37	0.66	0.73
Urbain	GER	38.08	36.25	1.83	0.05	18.69	0.25	0.67	0.83
	LC	37.95	43.29	-5.34	-0.13	20.03	0.24	0.65	0.80
	STJ	36.78	40.18	-3.39	-0.09	19.77	0.26	0.67	0.80
	VeV	26.67	28.11	-1.45	-0.05	13.98	0.26	0.74	0.76
Industrie	FEY	33.84	31.84	2.00	0.06	17.97	0.30	0.59	0.76
	STF	35.35	33.24	2.10	0.06	18.68	0.30	0.71	0.82
Fond	COT	23.26	22.23	1.03	0.05	11.44	0.25	0.79	0.83
	GEN	33.36	32.04	1.32	0.04	15.55	0.23	0.71	0.81
	STE	17.78	19.99	-2.21	-0.12	4.62	0.06	0.96	0.90
	TER	29.41	25.13	4.27	0.16	15.81	0.34	0.64	0.75
Moyenne		42.18	38.79	3.39	0.06	20.83	0.26	0.69	0.81

TABLE 5.5 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2, associées à la simulation SIRANE ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

5.4.2 Estimation des concentrations de PM_{10} et de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise en 2014

Les estimations relatives aux concentrations moyennes de PM_{10} et de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise en 2014 sont indiquées sur la figure 5.14. Cette figure montre la variabilité spatiale des concentrations de PM_{10} et de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise et notamment sur la ville de Lyon. Cette variabilité spatiale est plus élevée sur la ville de Lyon que sur le reste de la zone étudiée. Hors de la ville de Lyon, la variabilité spatiale des concentrations de PM_{10} est relativement faible. Globalement, la variabilité spatiale des concentrations de PM_{10} est plus faible en 2014 qu'en 2008. Ceci est lié au fait que la variabilité spatiale des émissions de PM_{10} est plus faible en 2014 (sous-section 5.2.2). La variabilité spatiale est plus importante pour le NO_2 que les PM_{10} parce que les concentrations de NO_2 sont fortement influencées par les émissions du trafic qui sont caractérisées par une forte variabilité spatiale (sous-section 5.2.2). Les concentrations les plus élevées sur l'agglomération lyonnaise sont situées sur la ville de Lyon et le long des axes routiers principaux pour les deux polluants. Ces zones correspondent globalement aux zones où se situent les émissions les plus importantes (sous-section 5.2.2). Globalement, les concentrations en 2014 sont sensiblement plus faibles qu'en 2008. Néanmoins, les concentrations de PM_{10} et de NO_2 en 2014 sont (encore) supé-

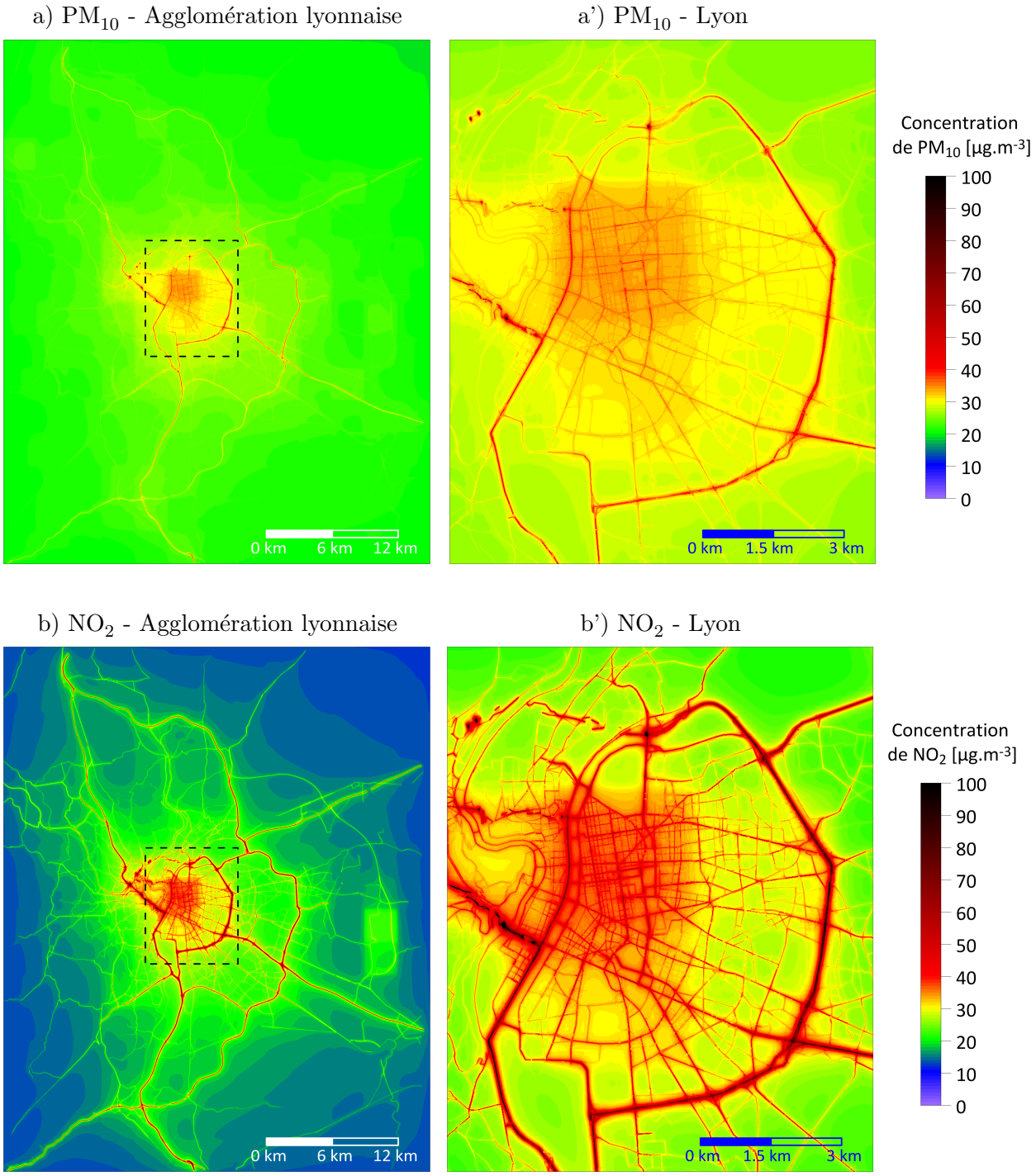


FIGURE 5.14 – Concentrations moyennes de PM_{10} (a et a') et de NO_2 (b et b') en $\mu g.m^{-3}$ sur l'agglomération lyonnaise pour l'année 2014, estimées avec le modèle SIRANE (le cadre noir en pointillés sur les cartes a et b représente la zone couverte par les cartes a' et b')

rieures à la valeur limite annuelle de 40 $\mu g.m^{-3}$ fixée dans la réglementation française (sous-section 1.5.2) sur les zones les plus polluées.

Les performances statistiques de la simulation SIRANE sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} sont indiquées sur le tableau 5.6. Comme pour le cas d'étude 2008, le biais est également négatif pour chaque capteur en 2014. Cela indique que la simulation surestime généralement les concentrations de PM_{10}. Les raisons possibles de cette surestimation sont les mêmes que celles évoquées pour le cas 2008. Globalement, les meilleurs et les plus mauvais résultats sont respectivement associés aux stations de type fond et aux stations de type trafic comme pour le cas 2008. Les estimations sont satisfaisantes pour tous les capteurs hormis pour les stations Grandclément (GC) et Lyon centre (LC), où le critère de qualité associé au biais n'est pas validé. Les résultats globaux de la simulation sont également satisfaisants.

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [$\mu g.m^{-3}$]	$\overline{c_p}$ [$\mu g.m^{-3}$]	Bias [$\mu g.m^{-3}$]	FB	RMSE [$\mu g.m^{-3}$]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	29.66	32.11	-2.45	-0.08	12.89	0.17	0.75	0.88
	GC	22.11	34.48	-12.38	-0.44	18.62	0.45	0.66	0.66
	LP	25.66	32.78	-7.12	-0.24	13.71	0.22	0.77	0.82
	TCR	26.12	34.16	-8.04	-0.27	16.93	0.32	0.67	0.78
Urbain	GER	23.28	29.44	-6.17	-0.23	12.16	0.22	0.78	0.86
	LC	20.84	34.85	-14.02	-0.50	18.77	0.49	0.74	0.66
	VeV	20.66	25.77	-5.11	-0.22	9.49	0.17	0.85	0.90
Industrie	FEY	22.70	25.37	-2.67	-0.11	9.36	0.15	0.81	0.92
	STF	22.49	28.71	-6.22	-0.24	11.54	0.21	0.80	0.86
Fond	COT	19.77	23.21	-3.44	-0.16	7.39	0.12	0.88	0.94
	GEN	20.98	26.53	-5.55	-0.23	9.50	0.16	0.87	0.90
	STE	19.71	22.28	-2.57	-0.12	3.61	0.03	0.98	0.99
	TER	21.25	24.51	-3.25	-0.14	8.63	0.14	0.84	0.92
Moyenne		22.71	28.78	-6.08	-0.23	11.74	0.22	0.80	0.85

TABLE 5.6 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation SIRANE ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Les performances statistiques de la simulation SIRANE sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2 sont indiquées sur le tableau 5.7. A l'instar du cas d'étude 2008, les résultats globaux relatifs au NO_2 sont moins bons que ceux associés aux PM_{10}. Les raisons possibles de la différence de qualité des résultats entre les deux polluants sont les mêmes que celles évoquées pour le cas 2008. Dans l'ensemble, les meilleurs et les plus mauvais résultats sont respectivement associés aux stations de type fond et aux stations de type trafic comme pour les résultats précédents. Les résultats montrent que les estimations sont satisfaisantes pour tous les capteurs mis à part pour les stations A7 sud lyonnais (A7), Tunnel Croix-Rousse (TCR), Lyon centre (LC) et Feyzin (FEY), où le critère de

qualité associé au biais ou/et au coefficient de corrélation n'est pas vérifié. De même, les résultats globaux sont satisfaisants.

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	71.81	47.78	24.03	0.40	45.16	0.59	0.50	0.60
	GC	42.59	44.99	-2.39	-0.05	22.80	0.27	0.66	0.77
	LP	53.53	43.73	9.81	0.20	29.54	0.37	0.63	0.76
	TCR	62.50	40.85	21.65	0.42	42.42	0.70	0.41	0.70
Urbain	GER	35.81	29.48	6.34	0.19	18.48	0.32	0.62	0.77
	LC	29.52	40.07	-10.55	-0.30	22.01	0.41	0.60	0.66
	STJ	29.57	36.21	-6.63	-0.20	19.21	0.34	0.64	0.74
	VeV	24.68	22.21	2.47	0.11	14.78	0.40	0.72	0.75
Industrie	FEY	25.25	24.33	0.91	0.04	16.24	0.43	0.55	0.67
	STF	29.72	29.84	-0.13	0.00	16.26	0.30	0.65	0.79
Fond	COT	18.24	17.65	0.59	0.03	10.15	0.32	0.78	0.77
	GEN	29.45	27.66	1.79	0.06	15.44	0.29	0.66	0.78
	STE	13.71	17.82	-4.11	-0.26	6.87	0.19	0.92	0.75
	TER	22.87	20.51	2.36	0.11	14.11	0.42	0.65	0.70
Moyenne		34.95	31.65	3.29	0.05	20.96	0.38	0.64	0.73

TABLE 5.7 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, associées à la simulation SIRANE ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

5.4.3 Comparaison des performances statistiques relatives aux simulations SIRANE de référence

L'objectif de cette sous-section est de comparer les performances statistiques des simulations SIRANE sur les cas d'étude 2008 et 2014. Cette comparaison porte uniquement sur les capteurs communs aux deux cas d'étude. Les concentrations moyennes mesurées étant différentes pour les deux cas d'étude, la comparaison est effectuée uniquement avec des indices statistiques adimensionnés : le biais fractionnel (FB), l'erreur quadratique normalisée (NMSE) et le coefficient de corrélation (r). Le facteur 2 n'est pas utilisé afin d'alléger la comparaison.

Les performances statistiques pour les cas d'étude 2008 et 2014 relatifs aux PM_{10} sont indiquées sur le tableau 5.8. Les biais fractionnels sont négatifs (ou nuls) pour l'ensemble des capteurs pour les deux années. Ils sont relativement du même ordre de grandeur pour les deux années hormis pour les stations Grandclément (GC) et Lyon périphérique (LP). De même, les NMSE et les coefficients de corrélation sont globalement comparables pour les deux cas d'étude. Pour les deux années, les meilleurs résultats sont associés aux stations de type fond. De même, les plus mauvais résultats sont obtenus pour les stations de type trafic.

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]		$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]		FB		NMSE		r	
		2008	2014	2008	2014	2008	2014	2008	2014	2008	2014
Trafic	A7	42.34	29.66	42.37	32.11	0.00	-0.08	0.28	0.17	0.65	0.75
	GC	36.19	22.11	36.79	34.48	-0.02	-0.44	0.25	0.45	0.80	0.66
	LP	35.83	25.66	36.22	32.78	-0.01	-0.24	0.18	0.22	0.78	0.77
Urbain	LC	28.42	20.84	40.39	34.85	-0.35	-0.50	0.33	0.49	0.78	0.74
	VeV	27.03	20.66	33.44	25.77	-0.21	-0.22	0.17	0.17	0.87	0.85
Industrie	FEY	28.86	22.70	29.75	25.37	-0.03	-0.11	0.17	0.15	0.82	0.81
	STF	27.51	22.49	32.38	28.71	-0.16	-0.24	0.18	0.21	0.82	0.80
Fond	COT	23.77	19.77	26.79	23.21	-0.12	-0.16	0.10	0.12	0.91	0.88
	GEN	25.02	20.98	31.10	26.53	-0.22	-0.23	0.15	0.16	0.90	0.87
	STE	23.5	19.71	26.19	22.28	-0.11	-0.12	0.02	0.03	0.99	0.98
	TER	26.61	21.25	29.3	24.51	-0.10	-0.14	0.16	0.14	0.85	0.84
Moyenne		29.55	22.35	33.16	28.24	-0.12	-0.23	0.18	0.21	0.83	0.81

TABLE 5.8 – Performances statistiques associées aux simulations SIRANE sur les cas d'étude 2008 et 2014 relatifs aux PM_{10} ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, FB : biais fractionnel, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]		$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]		FB		NMSE		r	
		2008	2014	2008	2014	2008	2014	2008	2014	2008	2014
Trafic	A7	79.05	71.81	67.67	47.78	0.16	0.40	0.31	0.59	0.60	0.50
	GC	47.06	42.59	40.16	44.99	0.16	-0.05	0.33	0.27	0.65	0.66
	LP	50.67	53.53	50.05	43.73	0.01	0.20	0.26	0.37	0.63	0.63
Urbain	GER	38.08	35.81	36.25	29.48	0.05	0.19	0.25	0.32	0.67	0.62
	LC	37.95	29.52	43.29	40.07	-0.13	-0.30	0.24	0.41	0.65	0.60
	STJ	36.78	29.57	40.18	36.21	-0.09	-0.20	0.26	0.34	0.67	0.64
	VeV	26.67	24.68	28.11	22.21	-0.05	0.11	0.26	0.40	0.74	0.72
Industrie	FEY	33.84	25.25	31.84	24.33	0.06	0.04	0.30	0.43	0.59	0.55
	STF	35.35	29.72	33.24	29.84	0.06	0.00	0.30	0.30	0.71	0.65
Fond	COT	23.26	18.24	22.23	17.65	0.05	0.03	0.25	0.32	0.79	0.78
	GEN	33.36	29.45	32.04	27.66	0.04	0.06	0.23	0.29	0.71	0.66
	STE	17.78	13.71	19.99	17.82	-0.12	-0.26	0.06	0.19	0.96	0.92
	TER	29.41	22.87	25.13	20.51	0.16	0.11	0.34	0.42	0.64	0.65
Moyenne		37.64	32.83	36.17	30.94	0.03	0.02	0.26	0.36	0.69	0.66

TABLE 5.9 – Performances statistiques associées aux simulations SIRANE sur les cas d'étude 2008 et 2014 relatifs au NO_2 ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, FB : biais fractionnel, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Les performances statistiques pour les cas d'étude 2008 et 2014 relatifs au NO_2 sont indiquées sur le tableau 5.9. Les biais fractionnels sont relativement du même ordre de grandeur pour les deux années excepté pour les stations A7 sud lyonnais (A7), Lyon périphérique (LP) et Lyon centre (LC). Les NMSE et les coefficients de corrélation sont aussi globalement comparables pour les deux cas d'étude. A l'instar des PM_{10}, les meilleurs résultats et les plus mauvais résultats pour les deux années sont respectivement associés aux stations de type fond et aux stations de type trafic.

5.5 Conclusion

Deux cas d'étude distincts sont utilisés pour analyser les approches de modélisation multi-échelles et d'assimilation de données à l'échelle urbaine. Les deux cas d'étude consistent à estimer les concentrations moyennes horaires de PM_{10} et de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise. Le cas d'étude associé à l'analyse des méthodes d'assimilation de données est relatif à l'année 2008. Celui associé à l'étude de la modélisation multi-échelles est relatif à l'année 2014. Une simulation SIRANE a été réalisée pour chaque cas d'étude. Les comparaisons modèle-mesure indiquent que les performances statistiques des simulations sont globalement comparables pour les deux cas d'étude. Pour les deux cas d'étude, les résultats relatifs au NO_2 sont moins bons que ceux associés aux PM_{10}. De même, les meilleurs résultats sont associés aux stations de type fond. A l'inverse les plus mauvais résultats sont relatifs aux stations de type trafic. Globalement, les résultats sont satisfaisants pour la grande majorité des capteurs. Les résultats de ces simulations constituent les résultats de référence pour les deux cas d'étude. L'apport des différentes approches étudiées dans ce projet de recherche sera évalué par rapport à ces résultats de référence.

Chapitre 6
Evaluation de la contribution des sources

Pour développer des stratégies efficaces d'amélioration de la qualité de l'air, il est important de pouvoir évaluer la contribution à la pollution atmosphérique des sources d'émissions. L'évaluation peut par exemple porter sur la contribution des différents types de source (par exemple les émissions du trafic, de l'industrie, de l'agriculture ou du résidentiel-tertiaire) (Wagstrom *et al.*, 2008 ; Yim *et al.*, 2010 ; Cho *et al.*, 2012 ; Grewe *et al.*, 2012 ; Kwok *et al.*, 2013), sur la contribution des sources situées dans différentes zones géographiques (par exemple les émissions des différentes régions de France) (Ying et Kleeman, 2006 ; Yarwood *et al.*, 2007 ; Wang *et al.*, 2009 ; Cho *et al.*, 2012) ou bien encore sur la contribution des émissions qui se produisent à différentes périodes temporelles (par exemple la contribution des émissions associées aux mois d'hiver vis-à-vis de la moyenne annuelle des concentrations). Connaître la contribution des sources permet notamment de déterminer les plus grands contributeurs à la pollution atmosphérique. Ce type d'information est utile pour définir les actions les plus pertinentes à mener pour réduire les niveaux de pollution dans l'air. L'évaluation de la contribution des sources peut également être utile dans une démarche d'amélioration des résultats fournis par les modèles de qualité de l'air (chapitre 11).

Dans ce chapitre, nous exposons les approches actuellement utilisées pour estimer la contribution des sources (section 6.1). Nous abordons également la problématique associée à l'estimation de la contribution des sources pour des espèces réactives (section 6.2). De même, nous décrivons le module *source apportionment* dédié à l'évaluation de la contribution des sources et développé pour le modèle SIRANE dans le cadre de cette thèse (section 6.3). Enfin, nous présentons une application effectuée avec ce module (section 6.4).

6.1 Approches pour l'évaluation de la contribution des sources

6.1.1 Analyse des échantillons absorbés par les capteurs

Les particules sont composées de divers éléments chimiques qui sont parfois caractéristiques de certaines sources (Pio *et al.*, 2001 ; Putaud *et al.*, 2004). Le carbone suie (*black carbon* en anglais) est par exemple émis par des processus de combustion (Putaud *et al.*, 2004). De même, l'acide déhydroabiétique est émis par des conifères (Gijzen *et al.*, 1993 ; Pio *et al.*, 2001). Aussi, il est parfois possible de déterminer le type de source à l'origine de la pollution aux particules en analysant la composition chimique des échantillons absorbés par les capteurs (Querol *et al.*, 2001 ; Putaud *et al.*, 2004).

Néanmoins, cette approche permet d'évaluer la contribution des sources seulement aux endroits où sont localisées les stations de mesure. De plus, il convient de noter que cette approche est applicable uniquement aux particules.

6.1.2 Utilisation de modèles récepteurs

La contribution des sources à la pollution atmosphérique peut être estimée avec des modèles dits *modèles récepteurs* (Watson, 1984 ; Viana *et al.*, 2008). Ces modèles, de nature statistique, supposent une conservation de la masse et des éléments chimiques (Viana *et al.*, 2008). Ils cherchent généralement à résoudre l'équation 6.1 (Watson, 1984) :

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{G} E_{ik} D_{jk} \tag{6.1}$$

où c_{ij} est la concentration de l'espèce i au point j, E_{ik} est la quantité d'espèce i émise par la source k, D_{kj} est le facteur de dispersion de la source k au point j et G est le nombre de sources (ou groupes de sources). Les données d'entrée communes aux modèles récepteurs sont les concentrations c_{ij}. La différence entre les divers modèles récepteurs repose notamment sur le degré de connaissance requis sur les sources d'émissions (Schauer *et al.*, 2006). Les deux extrêmes sont les modèles CMB (*Chemical Mass Balance*) et les modèles multivariés. Les modèles CMB (Held *et al.*, 2005 ; Subramanian *et al.*, 2006 ; Rizzo et Scheff, 2007 ; Subramanian *et al.*, 2007 ; Duvall *et al.*, 2012) reposent sur une connaissance complète des quantités émises par toutes les sources (terme E_{ik} de l'équation 6.1). En revanche, les modèles multivariés tels que l'analyse en composantes principales (Guo *et al.*, 2004 ; Almeida *et al.*, 2006 ; Song *et al.*, 2006 ; Shi *et al.*, 2009) ou PMF (*Positive Matrix Factorisation*) (Rizzo et Scheff, 2007 ; Escrig *et al.*, 2009 ; Duvall *et al.*, 2012) se basent uniquement sur les concentrations c_{ij} (E_{ik} et D_{jk} ne sont pas connus) et déterminent la contribution des sources en analysant les corrélations entres les concentrations. Il existe également des modèles hybrides entre ces deux approches tels que les modèles d'analyse de facteurs confirmatoires (*confirmatory factor analysis models* en anglais) ou les méthodes multilinéaires (*multilinear engine* en anglais).

Les modèles récepteurs sont couramment utilisés pour évaluer la contribution des sources à la pollution aux particules (Rizzo et Scheff, 2007 ; Viana *et al.*, 2008 ; Escrig *et al.*, 2009 ; Minguillón *et al.*, 2012). Cependant, il est aussi possible de les appliquer avec d'autres espèces (Alier *et al.*, 2009, 2011).

6.1.3 Utilisation de modèles de dispersion atmosphérique

Les modèles de dispersion atmosphérique permettent d'estimer la qualité de l'air et peuvent aussi être utilisés pour évaluer la contribution des sources. Contrairement à l'analyse des échantillons et aux modèles récepteurs, cette approche ne s'appuie pas sur des mesures de concentration. Il est cependant nécessaire de connaître les émissions relatives aux différentes sources étudiées. Avec cette approche, une des méthodes les plus simples pour évaluer les effets d'une source est celle appelée *méthode brute force* (MBF) (Koo *et al.*, 2009 ; Cho *et al.*, 2012 ; Hendriks *et al.*, 2013). Cette méthode se déroule en deux étapes. La première étape consiste à effectuer une *simulation de référence* en tenant compte de toutes les sources étudiées. La seconde étape consiste à réaliser une autre simulation en ne prenant pas en compte les émissions de la source dont on cherche la contribution. La différence entre les résultats des deux simulations correspond à la contribution ou à l'effet de la source étudiée. Cette méthode est néanmoins relativement coûteuse en temps de calcul car il est nécessaire de réaliser la seconde étape pour chaque source étudiée. Une alternative à la méthode MBF consiste à réaliser une seule simulation avec des *espèces tatouées* (*tagged species* en anglais) (Grewe, 2004 ; Held *et al.*, 2004 ; Wagstrom *et al.*, 2008 ; Koo *et al.*, 2009 ; Wang *et al.*, 2009 ; Grewe *et al.*, 2010 ; Butler *et al.*, 2011 ; Emmons *et al.*, 2012 ; Grewe *et al.*, 2012 ; Kranenburg *et al.*, 2013 ; Kwok *et al.*, 2013). Le fait de tatouer les espèces émises permet de les *suivre* au cours de leur dispersion, d'identifier leur origine et par conséquent d'évaluer la contribution des sources. Prenons l'exemple d'une simulation réalisée pour évaluer les concentrations de CO induites par les émissions de deux sources S_R et S_B. Dans ce cas, les sources S_R et S_B émettent respectivement les espèces tatouées CO^R et CO^B. Ainsi, la simulation fournit des champs de concentration de CO^R et de CO^B qui correspondent à la contribution des sources S_R et S_B.

A l'instar des modèles récepteurs, les modèles de dispersion atmosphériques sont fréquemment utilisés pour évaluer la contribution des sources vis-à-vis des concentrations de PM (Yarwood *et al.*, 2007 ; Wagstrom *et al.*, 2008 ; Koo *et al.*, 2009 ; Wang *et al.*, 2009 ; Kranenburg *et al.*, 2013 ; Kwok *et al.*, 2013). D'autres études ont également utilisé cette approche pour estimer les contributions en ozone (Wang *et al.*, 2009 ; Grewe *et al.*, 2010 ; Butler *et al.*, 2011 ; Emmons *et al.*, 2012), en CO (Granier *et al.*, 1999, 2000 ; Lamarque et Hess, 2003 ; Pfister *et al.*, 2004) et en SO_2 (Yim *et al.*, 2010 ; Huang *et al.*, 2012) de différentes sources. L'ensemble de ces études a été réalisé avec un modèle de dispersion atmosphérique à méso-échelle. A notre connaissance, aucun modèle de qualité de l'air à l'échelle urbaine n'a été utilisé pour étudier la contribution des sources. Cependant, l'évaluation de la contribution des sources avec un modèle à l'échelle urbaine ne présente a priori pas plus de difficultés qu'avec un modèle à méso-échelle.

6.2 Prise en compte de la chimie

6.2.1 Effets non linéaires associés aux réactions chimiques

En l'absence de réactions chimiques, l'équation d'advection-diffusion (équation 2.1) est linéaire pour la concentration. Par conséquent, les contributions des sources sont linéaires pour les espèces chimiquement inertes. Autrement dit, la contribution absolue d'une source ne dépend pas des émissions des autres sources. Cela signifie notamment que les contributions peuvent être évaluées en traitant de manière distincte les émissions de chaque source (par exemple la méthode MBF). Il convient de noter que la méthode MBF permet d'évaluer la contribution des sources uniquement pour les espèces inertes.

En revanche, les réactions chimiques induisent des effets non linéaires. Dans ce cas, il est nécessaire de prendre en compte les émissions de toutes les sources afin d'évaluer leur contribution. Cette évaluation est relativement complexe lorsque des réactions chimiques sont à prendre en compte. Koo *et al.* (2009) indiquent notamment que la contribution des sources peut être évaluée de plusieurs manières différentes mais qu'il n'existe pas une méthode de référence à laquelle se comparer lorsque des réactions chimiques non linéaires interviennent. Lorsque la méthode MBF est utilisée pour des espèces réactives, la différence entre les résultats des deux simulations (simulations de référence et simulation sans les émissions de la source étudiée) correspond à la sensibilité des concentrations vis-à-vis de ces émissions (et non pas à la contribution des sources).

6.2.2 Signification de l'expression *contribution des sources* en cas de chimie

L'interprétation de l'expression *contribution des sources* est relativement simple dans le cas d'espèces chimiquement inertes : la contribution d'une source correspond à la quantité de polluants provenant de celle-ci. Prenons l'exemple de deux sources S_R et S_B qui émettent le polluant inerte

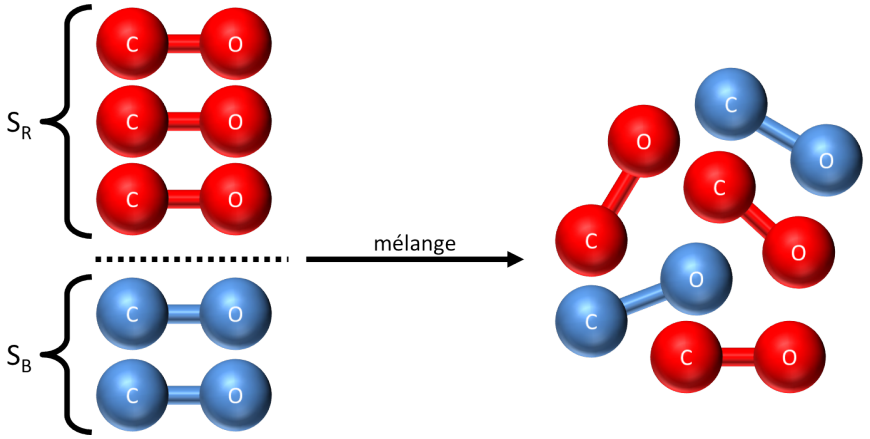


FIGURE 6.1 – Contribution des sources pour des espèces inertes. Les sources S_R et S_B émettent des molécules inertes de CO. Après dispersion, la contribution des sources dans un volume d'air est déterminée en fonction de l'origine des molécules, identifiable ici par la couleur.

CO (figure 6.1). Supposons que les molécules de CO sont colorées en rouge lorsqu'elles proviennent de S_R et en bleu lorsqu'elles proviennent de S_B. Dans ce cas, la contribution en CO de la source S_R (S_B) dans un volume d'air correspond à la quantité de molécules rouges (bleues) présentes dans ce même volume. Autrement dit, la contribution des sources est déterminée en fonction de l'origine des molécules.

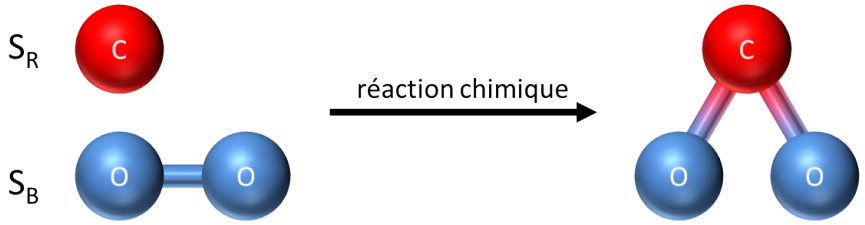


FIGURE 6.2 – Contribution des sources pour des espèces réactives. Les sources S_R et S_B émettent respectivement un atome de carbone (C) et une molécule de dioxygène (O_2). Après dispersion, ces deux éléments réagissent et forment une molécule de CO_2. Dans ce cas, la contribution des sources vis-à-vis de la concentration en CO_2 peut être interprétée de plusieurs manières différentes.

Lorsque les espèces sont chimiquement réactives, la signification de l'expression *contribution des sources* est moins triviale. Imaginons que les deux sources S_R et S_B émettent respectivement un atome de carbone (C) et une molécule de dioxygène (O_2) (figure 6.2). Supposons que durant la dispersion ces deux éléments réagissent et forment une molécule de CO_2. Dans cette situation, la contribution en CO_2 de chaque source dans le volume d'air contenant la molécule peut être interprétée de plusieurs manières différentes. La contribution des sources peut être associée au nombre d'atomes issus de chaque source. Dans ce cas, les sources S_R et S_B contribuent respectivement pour 1/3 et 2/3 de la concentration totale. La contribution des sources peut également être assimilée à la quantité de masse provenant de chaque source. Dans ce cas, les sources S_R et S_B contribuent respectivement pour 12/44 et 2x16/44 de la concentration totale (la masse molaire du carbone et de l'oxygène sont respectivement de $12\,\mathrm{g.mol^{-1}}$ et $16\,\mathrm{g.mol^{-1}}$).

Prenons un autre exemple où les sources S_R et S_B émettent respectivement trois atomes de carbone (C) et deux molécules de dioxygène (O_2) (figure 6.3). Considérons que les éléments réagissent durant la dispersion et que deux molécules de CO_2 et un atome de carbone sont présents dans un volume d'air. Dans cette situation, la contribution des sources peut également être estimée de plusieurs façons différentes. Nous allons illustrer cela en nous intéressant à la concentration en atomes de carbone seuls à l'issue de la réaction. La contribution des sources peut être associée à l'origine des atomes. Dans ce cas, la contribution des sources S_R et S_B est respectivement de 100 % et 0 %, c'est-à-dire que 100 % des atomes de carbone seuls, à l'issue de la réaction, proviennent de la source S_R. Il est aussi possible d'assimiler la contribution d'une source comme l'effet de production ou de destruction d'une espèce dû à ses émissions. Dans notre exemple, l'effet de la source S_R sur la concentration finale en atomes de carbone seuls est de +300 % car S_R a produit trois atomes de carbone seuls tandis que l'effet de la source S_B est de −200 % car les émissions de la source S_B contribue à la destruction de deux atomes de carbone seuls.

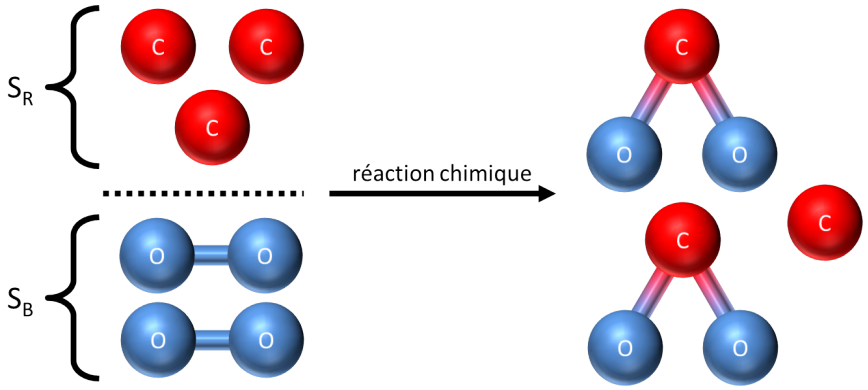


FIGURE 6.3 – Contribution des sources pour des espèces réactives. Les sources S_R et S_B émettent respectivement trois atomes de carbone (C) et deux molécules de dioxygène (O_2). Après dispersion, ces éléments réagissent et forment deux molécules de CO_2. A l'issue des réactions chimiques, un atome de carbone est également présent. Dans ce cas, la contribution des sources vis-à-vis de la concentration en carbone (atome de carbone seul) peut être interprétée de plusieurs manières différentes.

Cette liste non exhaustive du sens de l'expression *contribution des sources* indique que l'estimation de la contribution des sources dépend de l'interprétation de la personne qui effectue l'étude.

6.3 Description du module *source apportionment* de SIRANE

Au cours de ces travaux de thèse, un module destiné à l'évaluation de la contribution des sources a été développé pour le modèle SIRANE. Ce module, appelé *source apportionment* (SA), utilise l'approche des espèces tatouées. En activant ce module, les sources émettent à la fois des espèces *classiques* (par exemple le NO) et des espèces *tatouées* (par exemple le NO^g pour la source g). Il convient de rappeler que SIRANE modélise les émissions et la dispersion des polluants dans un premier temps (les polluants sont traités comme des espèces inertes au cours de cette étape) et les réactions chimiques dans un second temps (figure 6.4). Pour chaque étape (émission & dispersion et

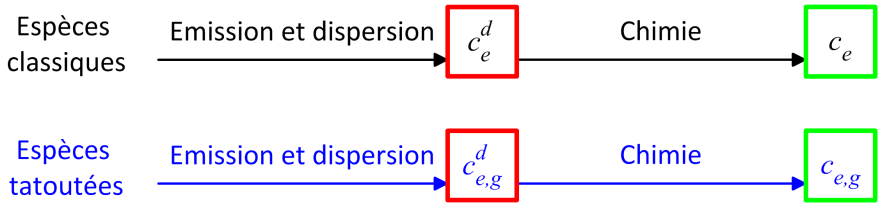


FIGURE 6.4 – Fonctionnement schématique du modèle SIRANE. La première étape consiste à modéliser les émissions et la dispersion des polluants. Lors de cette première étape, les polluants sont traités comme des espèces inertes. La deuxième étape consiste à modéliser les réactions chimiques. c_e^d et c_e font respectivement référence à la concentration de l'espèce e classique à l'issue de la dispersion et à l'issue des réactions chimiques. $c_{e,g}^d$ et $c_{e,g}$ correspondent respectivement à la concentration de l'espèce e tatouée provenant de la source g à l'issue de la dispersion et à l'issue des réactions chimiques.

réactions chimiques) le modèle traite d'abord les espèces classiques et ensuite les espèces tatouées. En activant le module source apportionment, SIRANE fournit des champs de concentration pour les espèces tatouées (mais également pour les espèces classiques) qui permettent d'évaluer la contribution des sources. Dans la suite de ce chapitre, la concentration de l'espèce e classique est notée c_e^d à l'issue de la dispersion et c_e à l'issue des réactions chimiques. De même, la concentration de l'espèce e tatouée provenant de la source g est notée $c_{e,g}^d$ à l'issue de la dispersion et $c_{e,g}$ à l'issue des réactions chimiques.

6.3.1 Traitement des espèces chimiquement inertes

L'évaluation de la contribution des sources avec le modèle SIRANE est relativement triviale lorsque les espèces sont chimiquement inertes du fait de la linéarité de l'équation d'advection-diffusion (équation 2.1) en l'absence de chimie. Sans le module source apportionment de SIRANE, il est possible d'estimer la contribution d'une source pour des espèces inertes en effectuant une simulation qui intègre uniquement les émissions de la source étudiée. Les champs de concentration déterminés à l'issue de cette simulation correspondent alors aux contributions absolues de la source en question. Cependant, cette démarche est coûteuse en temps de préparation et en temps de calcul puisqu'il est nécessaire d'effectuer une simulation pour chaque source étudiée. Le module source apportionment de SIRANE reprend cette démarche mais la simplifie. Ce module active l'émission d'espèces tatouées par les sources. SIRANE traite chaque espèce tatouée (par exemple le CO^{trafic} et le $CO^{industrie}$) comme une espèce différente. Ainsi, au lieu de réaliser G simulations distinctes pour évaluer la contribution de G sources (ou groupes de sources) vis-à-vis de n espèces, une seule simulation est réalisée en prenant en compte $G \times n$ espèces. Cette approche permet de réduire le coût en temps de calcul car certaines phases de la simulation sont communes à l'ensemble des espèces.

6.3.2 Traitement des espèces réactives

Avec le module source apportionment, l'évaluation de la contribution des sources pour les espèces réactives s'effectue en deux étapes. La première étape consiste à déterminer la contribution des sources à l'issue de la modélisation des émissions et de la dispersion. La démarche est identique à celle utilisée pour les espèces inertes car tous les polluants sont traités comme des espèces inertes durant ces processus. La deuxième étape consiste à évaluer la contribution des sources à l'issue des réactions chimiques. Cette seconde étape concerne les espèces NO, NO_2 et O_3 qui sont affectées par des réactions non linéaires associées au cycle de Chapman (système d'équations 4.31). Rappelons que les concentrations de NO, de NO_2 et d'ozone sont à l'équilibre photo-stationnaire (équation 4.32) à l'issue de ce cycle dans le modèle SIRANE. Le module source apportionment intègre deux modèles pour traiter la seconde étape. Ces deux modèles, nommés SA-NO et SA-NOX, garantissent la conservation de masse qui s'exprime sous la forme de l'équation 6.2 :

$$c_e = \sum_{g}^{G} c_e^g \tag{6.2}$$

où G est le nombre de sources (ou groupes de sources). De même, ces deux méthodes supposent que les molécules d'une même espèce ont la même probabilité de réagir, quelle que soit leur origine. Cette hypothèse est également utilisée par Wagstrom *et al.* (2008).

Modèle SA-NO

La concentration de l'espèce e (ici e = NO, NO_2 ou O_3) après les réactions chimiques peut se définir avec l'équation 6.3 :

$$c_e = c_e^d + \delta c_e \tag{6.3}$$

où δc_e correspond à la variation de concentration de l'espèce e induite par les réactions chimiques. De même, la contribution de la source g pour l'espèce e après les réactions chimiques peut s'exprimer sous la forme de l'équation 6.4 :

$$c_{e,g} = c_{e,g}^d + \delta c_{e,g} \tag{6.4}$$

où $\delta c_{e,g}$ représente la contribution de la source g à la variation de concentration de l'espèce e due aux réactions chimiques. L'objectif de la méthode SA-NO est de déterminer les termes $\delta c_{e,g}$. Les émissions de NO_x étant majoritairement des émissions de NO (Vardoulakis *et al.*, 2003), la méthode SA-NO suppose que les ratios $[c_{\mathrm{NO}}^d]/[c_{\mathrm{NO_2}}^d]$ après la modélisation de la dispersion (avant la modélisation des réactions chimiques) sont supérieurs aux ratios $[c_{\mathrm{NO}}]/[c_{\mathrm{NO_2}}]$ à l'équilibre photo-stationnaire, après les réactions chimiques (les crochets [ ] indiquent que ce sont des concentrations molaires). Aussi, des molécules de NO doivent être consommées et des molécules de NO_2 doivent être produites pour atteindre l'équilibre photo-stationnaire. Par conséquent, la méthode SA-NO considère que la réaction principale du cycle de Chapman (système d'équations 4.31) est la troisième réaction du cycle (réaction 6.5).

$$\mathrm{NO} + \mathrm{O_3} \xrightarrow{k_3} \mathrm{NO_2} + \mathrm{O_2} \tag{6.5}$$

Puisque les molécules de NO ont la même probabilité de réagir quelle que soit leur origine (hypothèse), la contribution relative des sources à la variation de concentration en NO est similaire à leur contribution relative en NO à l'issue de la dispersion (équation 6.6).

$$\frac{c_{\mathrm{NO},g}^d}{c_{\mathrm{NO}}^d} = \frac{\delta c_{\mathrm{NO},g}}{\delta c_{\mathrm{NO}}} \tag{6.6}$$

Etant donné que la variation du nombre de moles d'ozone et de NO_2 induite par la réaction 6.5 est directement liée à la variation du nombre de moles de NO, la méthode SA-NO considère que la contribution relative des sources à la variation de concentration d'ozone et de NO_2 est également similaire à leur contribution relative en NO à l'issue de la dispersion (équation 6.7).

$$\frac{c_{\mathrm{NO},g}^d}{c_{\mathrm{NO}}^d} = \frac{\delta c_{\mathrm{NO_2},g}}{\delta c_{\mathrm{NO_2}}} = \frac{\delta c_{\mathrm{O_3},g}}{\delta c_{\mathrm{O_3}}} \tag{6.7}$$

Ainsi, la méthode SA-NO évalue la contribution des sources avec l'équation 6.8 :

$$c_{e,g} = c^d_{e,g} + \left(c_e - c^d_e\right) \frac{c^d_{\mathrm{NO},g}}{c^d_{\mathrm{NO}}} \tag{6.8}$$

Avec la méthode SA-NO, la contribution d'une source peut être négative. Cela est dû aux effets non linéaires induits par le cycle de Chapman qui peuvent conduire à des variations de concentration négatives ($c_e - c^d_e < 0$). De plus, l'équation 6.8 indique qu'une source contribue aux concentrations de NO uniquement si elle émet du NO. Or le cycle de Chapman (système d'équations 4.31) indique qu'en rejetant du NO_2 ou qu'en *émettant* de l'ozone, une source peut contribuer aux concentrations de NO. Ceci constitue une limite de la méthode SA-NO.

Modèle SA-NOX

Le radical $O^\bullet$ étant très réactif, la méthode SA-NOX considère que le cycle de Chapman (système d'équations 4.31) peut se simplifier sous la forme d'un équilibre dynamique représenté par la réaction 6.9.

$$\mathrm{NO} + \mathrm{O_3} \rightleftharpoons \mathrm{NO_2} + \mathrm{O_2} \tag{6.9}$$

Cette réaction indique que le nombre total d'atomes d'azote (N) est constant. Aussi, le modèle SA-NOX considère que la contribution relative en NO_x ($NO + NO_2$) d'une source est similaire avant et après les réactions chimiques (équation 6.10).

$$\frac{[c^d_{\mathrm{NO},g}] + [c^d_{\mathrm{NO_2},g}]}{[c^d_{\mathrm{NO}}] + [c^d_{\mathrm{NO_2}}]} = \frac{[c_{\mathrm{NO},g}] + [c_{\mathrm{NO_2},g}]}{[c_{\mathrm{NO}}] + [c_{\mathrm{NO_2}}]} \tag{6.10}$$

De plus, ce modèle suppose qu'à l'issue du cycle de Chapman la contribution relative en NO et en NO_2 d'une source est similaire à sa contribution relative en NO_x (équation 6.11).

$$\frac{[c_{\mathrm{NO},g}]}{[c_{\mathrm{NO}}]} = \frac{[c_{\mathrm{NO_2},g}]}{[c_{\mathrm{NO_2}}]} = \frac{[c_{\mathrm{NO},g}] + [c_{\mathrm{NO_2},g}]}{[c_{\mathrm{NO}}] + [c_{\mathrm{NO_2}}]} \tag{6.11}$$

Physiquement, la méthode SA-NOX évalue la contribution d'une source en NO et en NO_2 par sa contribution aux atomes d'azote présents dans ces molécules. Ainsi, le modèle SA-NOX estime la contribution des sources avec l'équation 6.12.

$$[c_{e,g}] = [c_e] \frac{[c^d_{\mathrm{NO},g}] + [c^d_{\mathrm{NO_2},g}]}{[c^d_{\mathrm{NO}}] + [c^d_{\mathrm{NO_2}}]} \tag{6.12}$$

Contrairement au modèle SA-NO, l'équation 6.12 garantit la positivité des contributions. De plus, une source peut contribuer aux concentrations de NO, de NO_2 et d'ozone en émettant uniquement du NO ou du NO_2.

6.4 Application à l'évaluation de la contribution en PM_{10} et en NO_2 des sources sur l'agglomération lyonnaise en 2008

Il est impossible de valider un modèle qui estime la contribution des sources lorsque des réactions chimiques non linéaires, telles que les réactions du cycle de Chapman, interviennent (Kranenburg *et al.*, 2013). Il existe toutefois des données sur la composition chimique des particules absorbées par des capteurs qui pourraient potentiellement permettre de valider le module source apportionment pour les particules. Cependant, nous ne disposons pas de ce type de données. Aussi, nous ne pouvons pas réaliser une validation du module source apportionment.

Dans cette section, nous présentons une application du module source apportionment qui consiste à évaluer la contribution en PM_{10} et en NO_2 du trafic, des sources industrielles, du secteur résidentiel-tertiaire et de la concentration de fond sur l'agglomération lyonnaise en 2008. Cette application permet notamment de comparer les contributions en NO_2 déterminées avec les modèles SA-NO et SA-NOX (les PM_{10} sont traitées comme des espèces inertes dans le modèle SIRANE). De même, elle permet de présenter différentes manières d'exploiter les résultats associés à l'évaluation de la contribution des sources.

6.4.1 Comparaison des résultats obtenus avec les modèles SA-NO et SA-NOX

Les estimations des modèles SA-NO et SA-NOX relatives à la contribution moyenne annuelle en NO_2 du trafic, des sources industrielles, du secteur résidentiel-tertiaire et de la concentration de fond à l'emplacement des stations de mesure (figure 5.1) et sur l'agglomération lyonnaise sont indiquées sur les figures 6.5, 6.6 et 6.7. Une différence notable entre les résultats des deux modèles est la présence de contributions négatives pour l'industrie et le secteur résidentiel-tertiaire avec le modèle SA-NO (figures 6.6 et 6.7). Ces contributions négatives sont liées à la non-linéarité des réactions chimiques et à la formulation de l'expression 6.8 utilisée pour évaluer la contribution des sources avec le modèle SA-NO. Celles-ci indiquent que les émissions de l'industrie et du secteur résidentiel-tertiaire ont contribué à la consommation de molécules de NO_2. A l'exception des zones où les contributions sont négatives avec le modèle SA-NO, la contribution de l'industrie est relativement similaire avec les deux modèles. L'écart moyen entre les résultats fournis par les deux modèles est de $0.00\,\mu g.m^{-3}$ sur l'agglomération lyonnaise et de $0.05\,\mu g.m^{-3}$ à l'emplacement des stations de mesure. La contribution du trafic et du secteur résidentiel-tertiaire est légèrement plus élevée avec le modèle SA-NOX. Sur l'agglomération lyonnaise, l'écart moyen avec les estimations fournies par le modèle SA-NO est de $0.59\,\mu g.m^{-3}$ pour le secteur résidentiel-tertiaire et de $0.49\,\mu g.m^{-3}$ pour le trafic. A l'emplacement des stations de mesure, l'écart moyen est légèrement plus important et est de $1.90\,\mu g.m^{-3}$ pour le secteur résidentiel-tertiaire et de $2.01\,\mu g.m^{-3}$ pour le trafic. En revanche, la contribution de la concentration de fond est légèrement plus élevée avec le modèle SA-NO. L'écart moyen avec les estimations fournies par le modèle SA-NOX est de $1.07\,\mu g.m^{-3}$ sur l'agglomération lyonnaise et de $3.96\,\mu g.m^{-3}$ à l'emplacement des stations de mesure. Globalement, les résultats obtenus avec les modèles SA-NO et SA-NOX sont du même ordre de grandeur. Aussi, nous avons

choisi d'exploiter par la suite les résultats d'un seul modèle pour alléger l'analyse, ceux associés au modèle SA-NOX qui garantit la positivité des contributions.

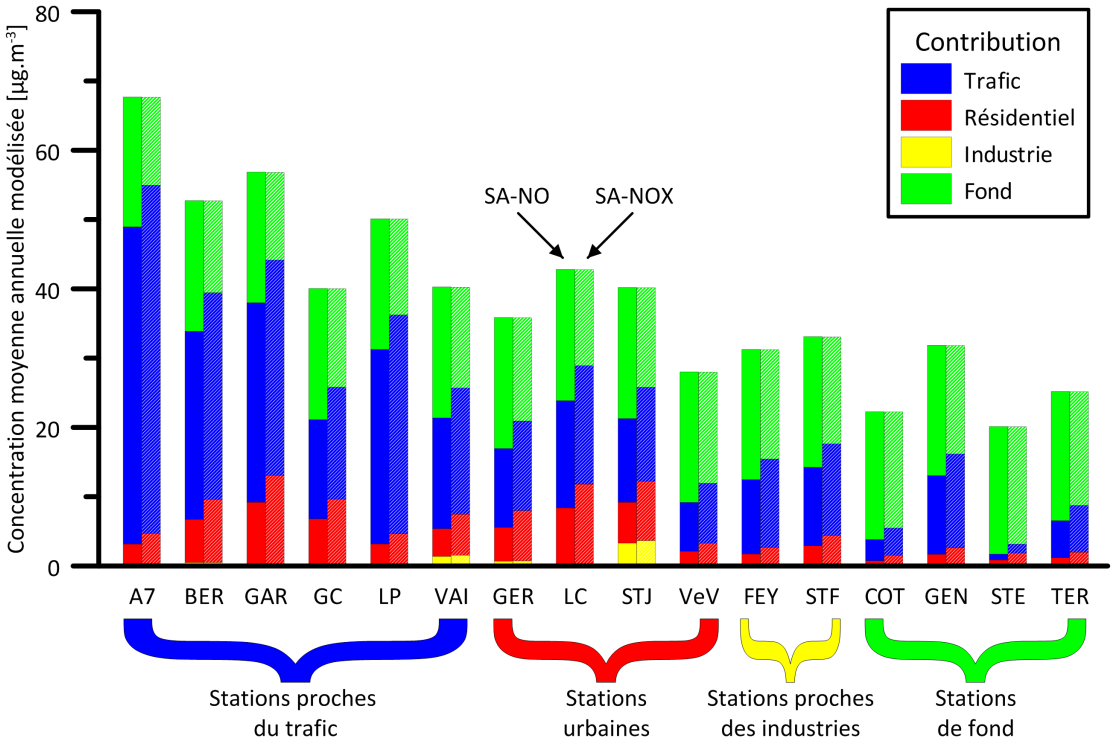


FIGURE 6.5 – Contributions moyennes en NO_2 [$\mu g.m^{-3}$] du trafic, du secteur résidentiel-tertiaire, de l'industrie et de la concentration de fond à l'emplacement des stations de mesure en 2008 estimées avec la méthode SA-NO (barres pleines à gauche) et la méthode SA-NOX (barres rayées à droite)

6.4.2 Exploitation des résultats associés à l'évaluation de la contribution des sources

L'évaluation de la contribution des sources indique que les contributions moyennes en NO_2 et en PM_{10} des sources industrielles sont faibles, voire nulles, sur l'agglomération lyonnaise en 2008 (figures 6.5, 6.7, 6.8 et 6.9). Celles du secteur résidentiel-tertiaire sont généralement plus importantes sur la ville de Lyon (en moyenne 6.42 $\mu g.m^{-3}$ pour le NO_2 et 8.29 $\mu g.m^{-3}$ pour les PM_{10}, la zone associée à la ville de Lyon est définie sur la figure 5.13) bien qu'elles soient parfois plus importantes en périphérie (figures 6.6 et 6.9). Les résultats montrent aussi que les contributions moyennes du trafic sont généralement plus élevées à proximité des axes routiers et sur la ville de Lyon (figures 6.6 et 6.9). Il convient de noter que la contribution en NO_2 du trafic est parfois supérieure à la valeur seuil de concentration moyenne annuelle fixée par la directive européenne n° 2008/50/CE (40 $\mu g.m^{-3}$). A l'inverse, la contribution moyenne en NO_2 de la concentration de fond est plus faible sur la ville de Lyon et à proximité des axes routiers (en moyenne 17.43 $\mu g.m^{-3}$). La contribution en PM_{10} de la concentration de fond est cependant spatialement uniforme (figures 6.8 et 6.9) (23.60 $\mu g.m^{-3}$).

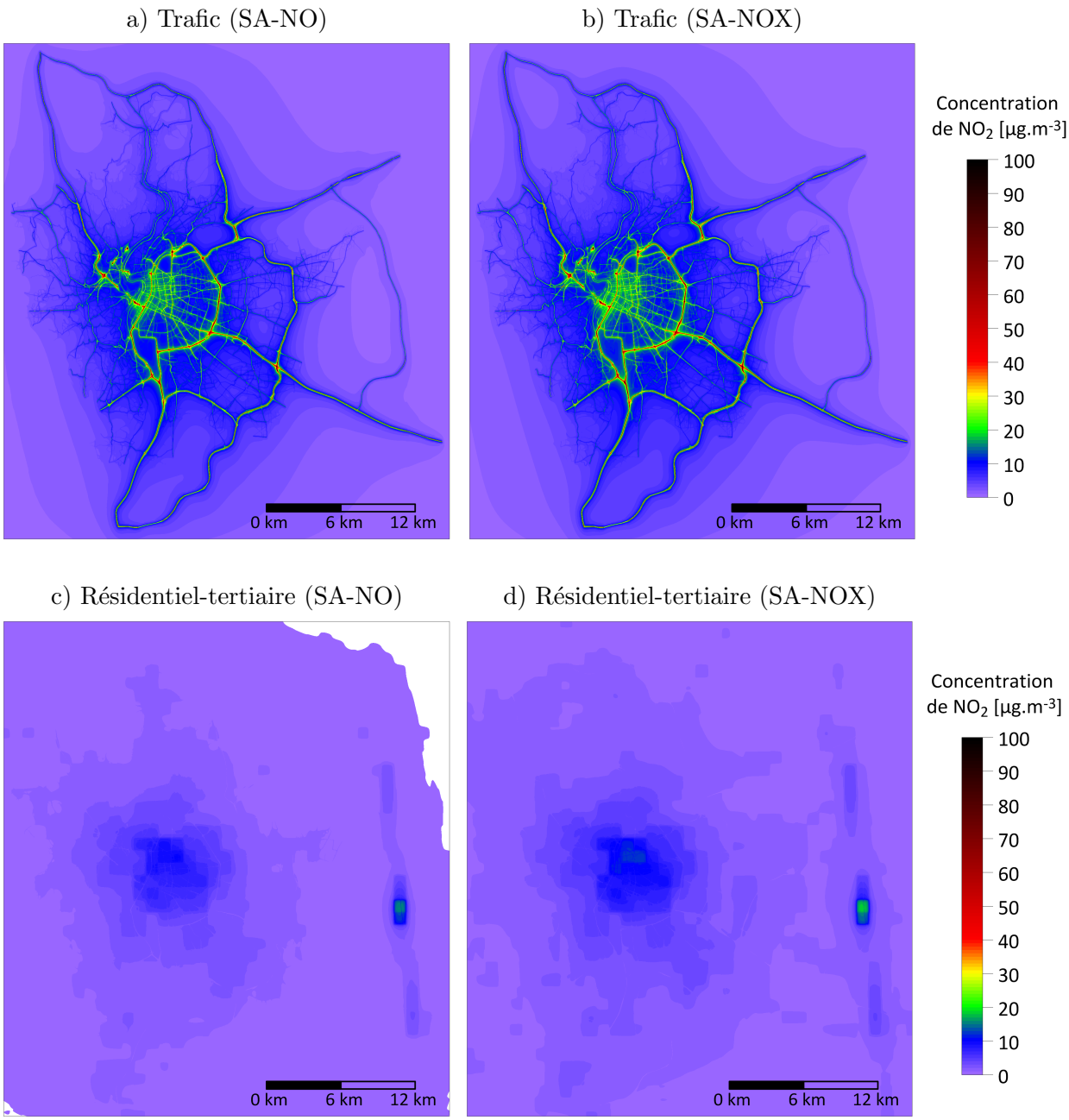


FIGURE 6.6 – Contributions moyennes en NO_2 [$\mu g.m^{-3}$] du trafic et du secteur résidentiel-tertiaire sur l'agglomération lyonnaise en 2008 estimées avec les modèles SA-NO (a et c) et SA-NOX (b et d) (les zones blanches correspondent aux contributions négatives)

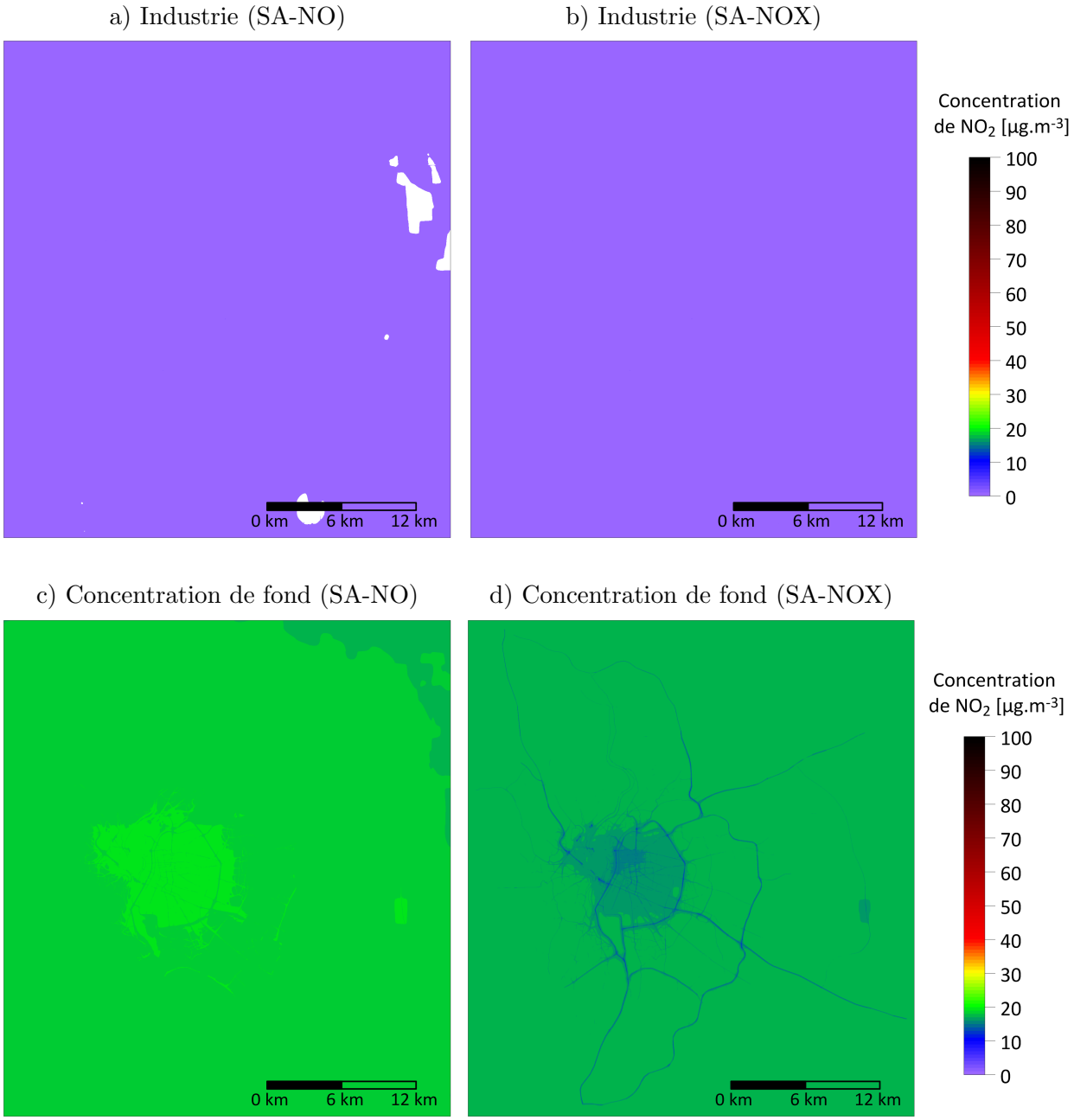


FIGURE 6.7 – Contributions moyennes en NO_2 [$\mu g.m^{-3}$] de l'industrie et de la concentration de fond sur l'agglomération lyonnaise en 2008 estimées avec les modèles SA-NO (a et c) et SA-NOX (b et d) (les zones blanches correspondent aux contributions négatives)

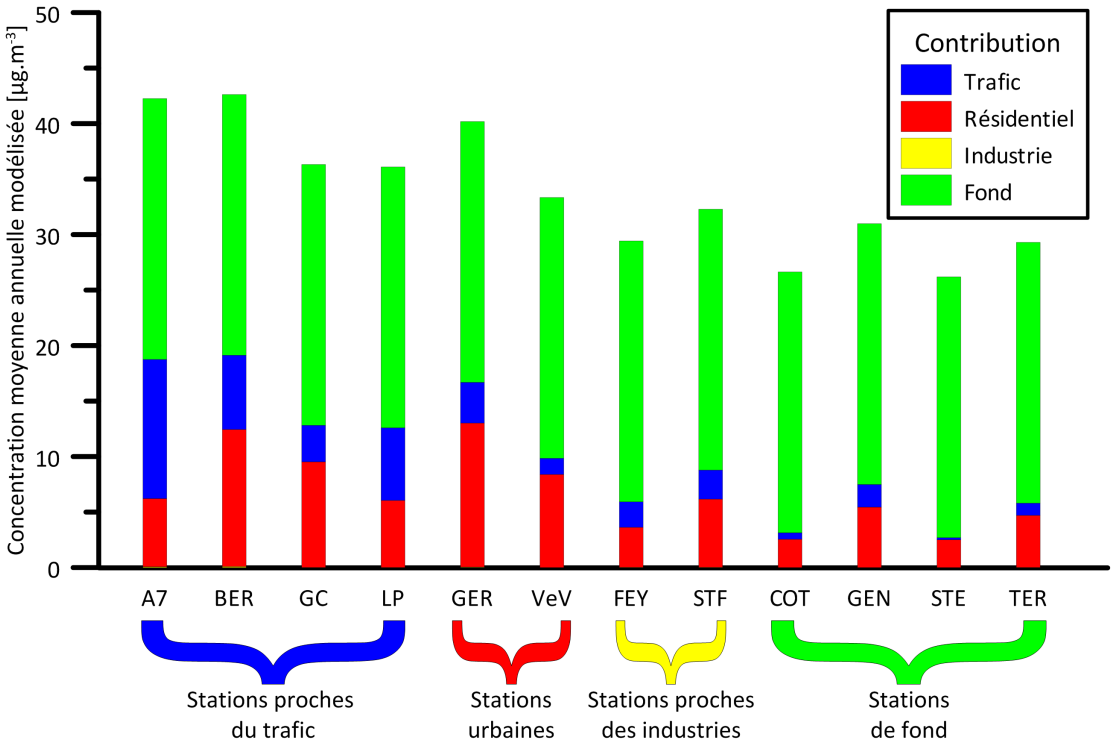


FIGURE 6.8 – Contribution moyenne en PM_{10} [µg.m^{-3}] du trafic, du secteur résidentiel-tertiaire, de l'industrie et de la concentration de fond à l'emplacement des stations de mesure en 2008

Cela est dû au fait que le modèle SIRANE considère la concentration de fond comme spatialement uniforme et les PM_{10} comme des espèces inertes.

La variabilité spatiale des contributions absolues, en µg.m^{-3}, et des contributions relatives, en pourcent (figures 6.10 et 6.11), est différente. La contribution relative de la concentration de fond est globalement moins importante à proximité des axes routiers. Elle est toutefois supérieure à 50 % sur la quasi totalité de l'agglomération lyonnaise pour les PM_{10}. Elle est également supérieure à 50 % pour le NO_2 hormis à proximité de certains axes routiers. En revanche, la contribution relative du trafic est globalement plus importante à proximité des axes routiers. Dans ces zones, elle est généralement supérieure à 50 % pour le NO_2. Elle est cependant moins élevée pour les PM_{10}. Pour le secteur du résidentiel-tertiaire, la contribution relative est généralement plus importante sur la ville de Lyon. Elle est néanmoins également importante pour certaines zones situées en périphérie. A l'instar de la contribution absolue, la contribution relative de l'industrie est spatialement homogène et relativement faible pour les deux polluants. Globalement, la concentration de fond est le plus grand contributeur en PM_{10} sur la quasi totalité de l'agglomération lyonnaise (figure 6.12). Pour le NO_2, les deux plus grands contributeurs sont le trafic, à proximité des axes routiers, et la concentration de fond, sur le reste de l'agglomération lyonnaise (figure 6.12).

Sur la figure 6.5 relative à la contribution en NO_2 des sources à l'emplacement des stations de mesure, trois profils de contribution se distinguent. Le premier est le profil relatif aux stations de

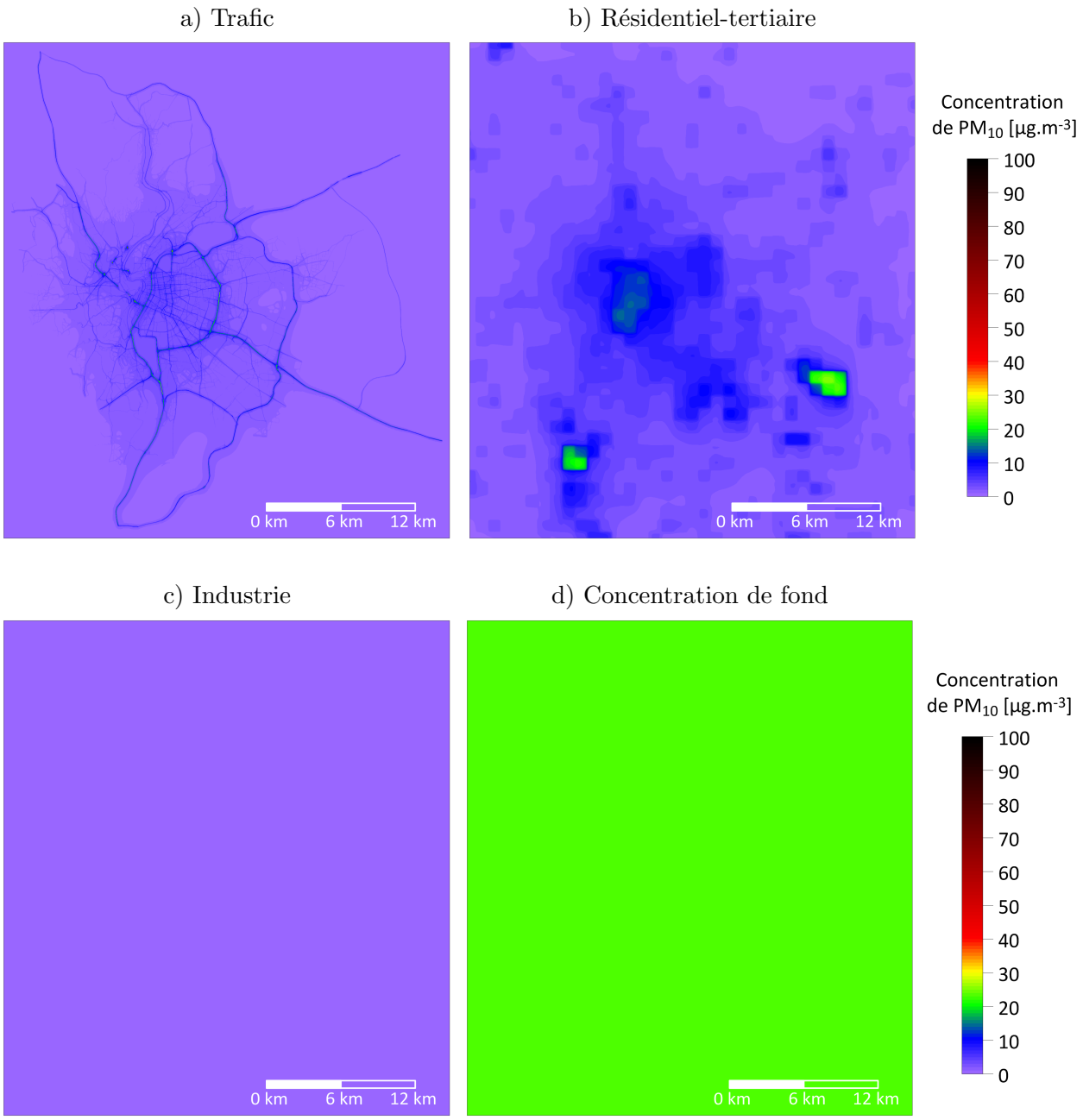


FIGURE 6.9 – Contributions moyennes en PM_{10} [$\mu g.m^{-3}$] du trafic (a), du secteur résidentiel-tertiaire (b), de l'industrie (c) et de la concentration fond (d) sur l'agglomération lyonnaise en 2008

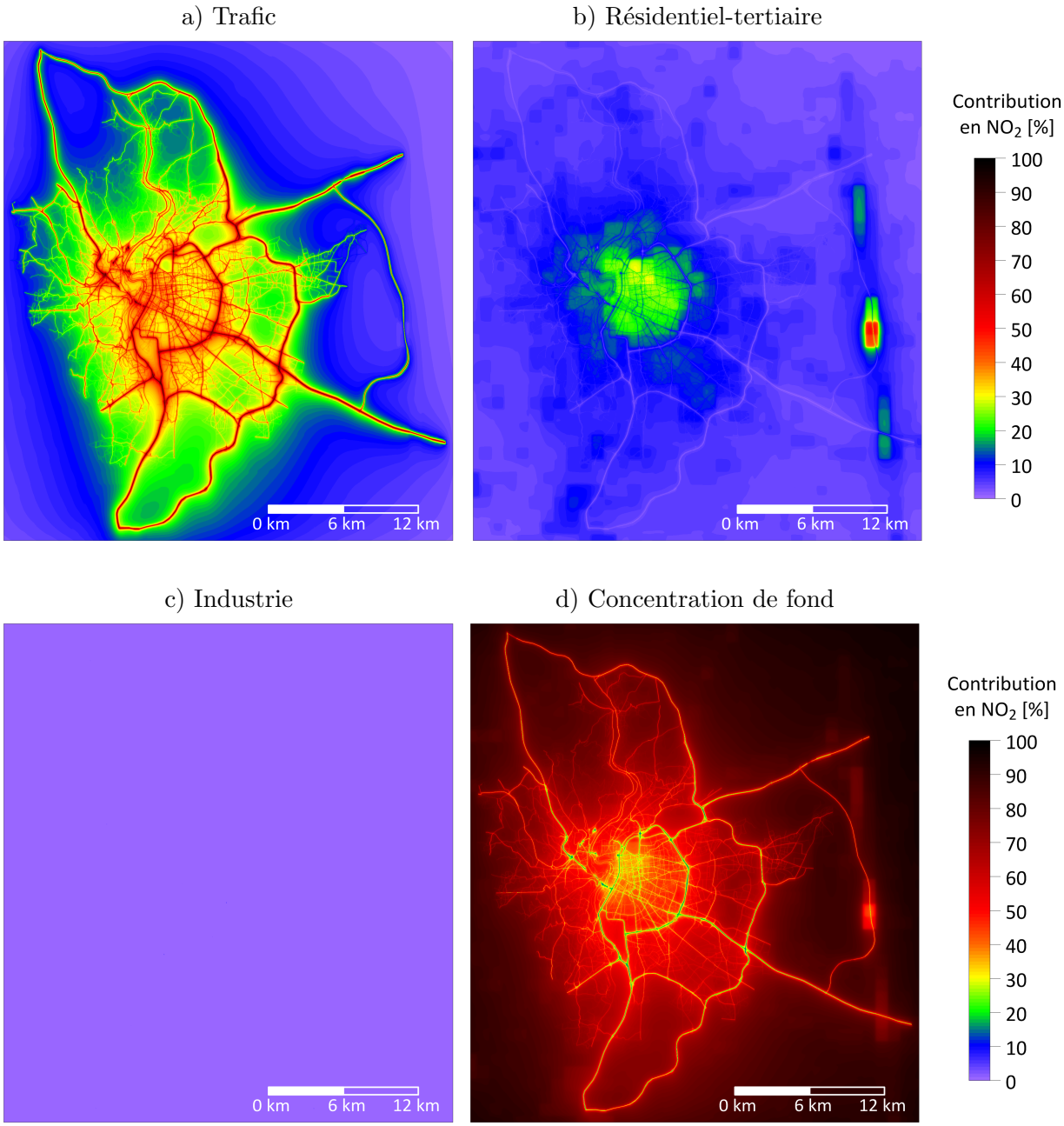


FIGURE 6.10 – Contributions moyennes relatives en NO_2 [%] du trafic (a), du secteur résidentiel-tertiaire (b), de l'industrie (c) et de la concentration de fond (d) sur l'agglomération lyonnaise en 2008 estimées avec le modèle SA-NOX

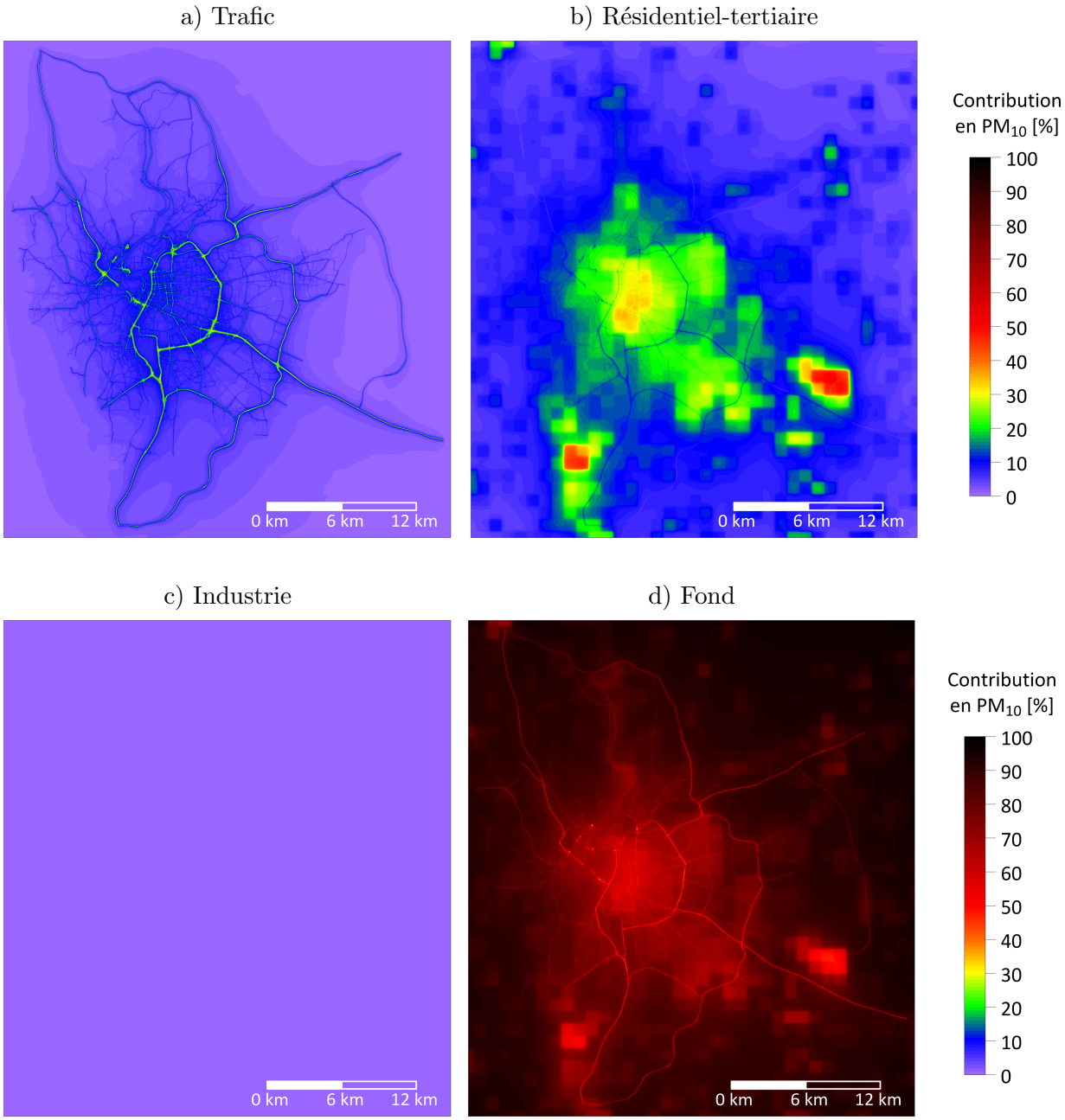


FIGURE 6.11 – Contributions moyennes relatives en PM_{10} [%] du trafic (a), du secteur résidentiel-tertiaire (b), de l'industrie (c) et de la concentration de fond (d) sur l'agglomération lyonnaise en 2008

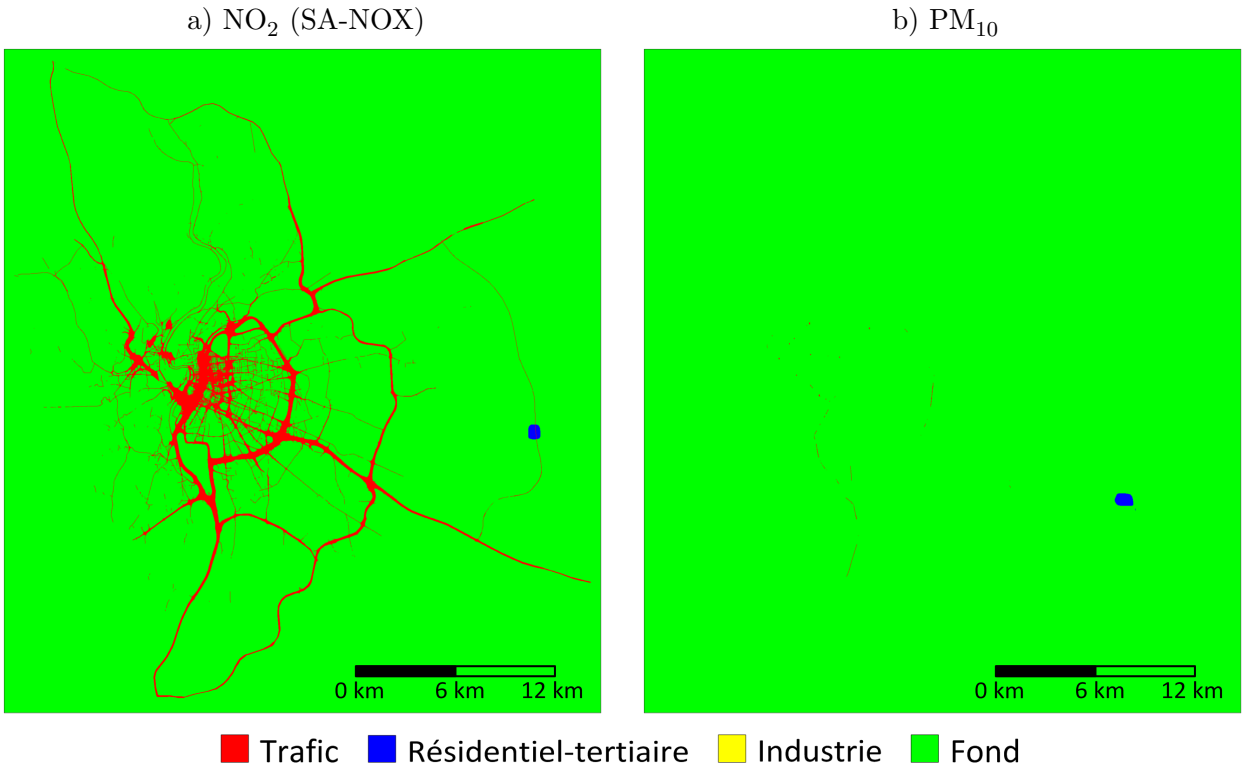


FIGURE 6.12 – Cartographie des contributeurs les plus importants en NO_2 (a) et en PM_{10} (b) sur l'agglomération lyonnaise en 2008

type trafic (hormis les stations Grandclément (GC) et Vaise (VAI)) où la contribution relative du trafic est supérieure à 50 %. Le deuxième profil est celui des stations de type fond (excepté la station Genas (GEN)) et des stations Feyzin (FEY) et Vaulx-en-Velin (VeV) où la contribution relative de la concentration de fond est supérieure à 50 %. Enfin, le dernier profil est celui associé aux stations Grandclément (GC), Vaise (VAI), Gerland (GER), Lyon centre (LC), Saint-Just (STJ) et Saint-Fons (STF) où aucune contribution n'est supérieure à 50 %. Dans le cas des PM_{10}, la contribution de la concentration de fond est supérieure à 50 % pour l'ensemble des stations de mesure (figure 6.8). Le tableau 6.1 indique le contributeur majoritaire (>50 %) en NO_2 pour l'année 2008, déterminé avec le module source apportionment, et le type d'influence, indiqué par Atmo Auvergne-Rhône-Alpes, des stations de mesure. Il convient de rappeler que les stations que nous qualifions dans ce rapport de type urbain (Gerland (GER), Lyon centre (LC), Saint-Just (STJ), Vaulx-en-Velin (VeV)) et de type fond (Cotière de l'Ain (COT), Genas (GEN), Saint-Exupéry (STE), Ternay (TER)) sont respectivement des stations de type fond urbain et des stations de type fond périurbain d'après Atmo Auvergne-Rhône-Alpes. Ces stations sont sous l'influence du fond, c'est-à-dire que l'influence du trafic local ou des sources industrielles locales n'est pas prédominante. De même, il convient de signaler que le type d'influence pour une station de mesure est supposé identique (dans ce rapport) pour le NO_2 et les PM_{10} bien qu'il puisse varier en fonction du polluant mesuré. La contribution majoritaire en NO_2 déterminée avec le module source apportionment est cohérente avec le type

		Type d'influence		
		Trafic	Industrie	Fond
Contributeur majoritaire	Trafic	A7, BER, GAR, LP		
	Industrie			
	Résidentiel-tertiaire, concentration de fond ou aucun	GC, VAI	FEY, STF	GER, LC, STJ, VeV, COT, GEN, STE, TER

TABLE 6.1 – Contributeur majoritaire en NO_2 (>50 %) pour l'année 2008, déterminé avec le module source apportionment, et type d'influence, indiqué par Atmo Auvergne-Rhône-Alpes, des stations de mesure

d'influence indiqué par Atmo Auvergne-Rhône-Alpes pour les stations sous l'influence du fond et les stations sous l'influence du trafic A7 sud lyonnais (A7), Berthelot (BER), Garibaldi (GAR) et Lyon périphérique (LP). En revanche, les résultats ne sont pas cohérents pour les stations sous l'influence du trafic Grandclément (GC) et Vaise (VAI), pour lesquelles la contribution majoritaire ne vient pas du trafic, et pour les stations sous l'influence des industries Feyzin (FEY) et Saint-Fons (STF), pour lesquelles la contribution majoritaire ne vient pas des sources industrielles. Dans le cas des PM_{10}, la contribution majoritaire déterminée avec le module source apportionment est cohérente avec le type d'influence indiquée par Atmo Auvergne-Rhône-Alpes uniquement pour les stations sous l'influence du fond (tableau 6.2).

		Type d'influence		
		Trafic	Industrie	Fond
Contributeur majoritaire	Trafic			
	Industrie			
	Résidentiel-tertiaire, concentration de fond ou aucun	A7, BER, GC, LP	FEY, STF	GER, VeV, COT, GEN, STE, TER

TABLE 6.2 – Contributeur majoritaire en PM_{10} (>50 %) pour l'année 2008, déterminé avec le module source apportionment, et type d'influence, indiquée par Atmo Auvergne-Rhône-Alpes, des stations de mesure

La figure 5.13 montre que les concentrations moyennes de NO_2 et de PM_{10} sur l'agglomération lyonnaise en 2008 sont parfois supérieures à la valeur seuil de concentration moyenne annuelle fixée par la directive européenne n° 2008/50/CE (40 $\mu g.m^{-3}$). L'estimation de la contribution des sources peut potentiellement permettre d'identifier les sources pour lesquelles prendre des mesures prioritaires afin de respecter les valeurs seuils de concentration imposées par la réglementation. La figure 6.13 indique la(les) contribution(s) à réduire ou à supprimer pour abaisser les concentrations à des niveaux inférieurs aux valeurs seuils de concentrations annuelles réglementaires. Les contributions à réduire ou à supprimer sont déterminées (pour chaque zone de l'agglomération lyonnaise) en suppri-

mant successivement les contributions, de la plus importante à la plus faible, jusqu'à atteindre une concentration inférieure à la valeur seuil. Les sources à l'origine des contributions supprimées sont alors identifiées comme les sources principales sur lesquelles agir. Les résultats de cette analyse suggèrent que les actions prioritaires à mener afin de respecter la valeur seuil de concentration annuelle de NO_2 consistent à réduire les effets du trafic et, dans une moindre mesure, des sources situées à l'extérieur de l'agglomération lyonnaise, en partie à l'origine de la pollution de fond. Dans le cas des PM_{10}, il est a priori surtout pertinent de réduire les émissions des sources situées à l'extérieur de l'agglomération lyonnaise.

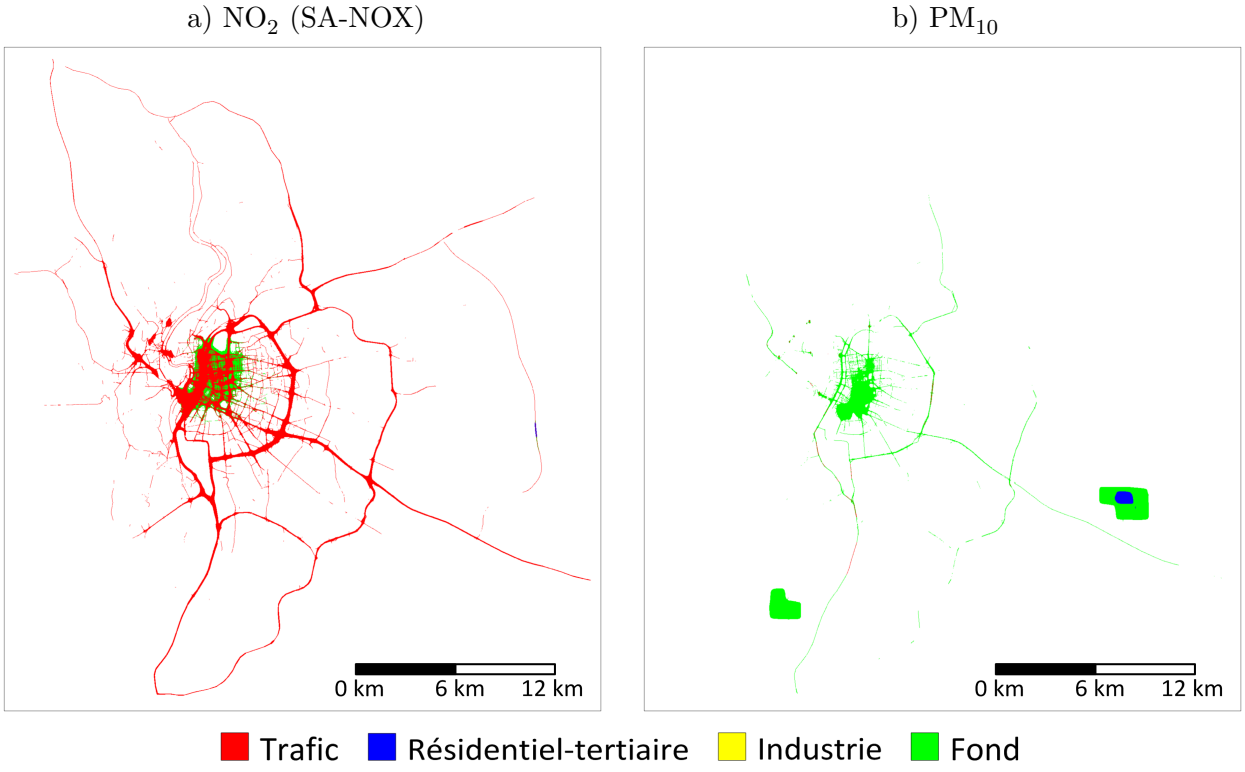


FIGURE 6.13 – Contributions en NO_2 (a) et en PM_{10} (b) à réduire ou à supprimer afin de respecter la valeur seuil de concentration annuelle réglementaire sur l'agglomération lyonnaise en 2008. La concentration est (déjà) inférieure à la valeur seuil de concentration annuelle réglementaire sur les zones blanches

6.5 Conclusion

Un module appelé *source apportionment* a été développé pour le modèle SIRANE afin d'estimer la contribution à la pollution atmosphérique des sources. Il est basé sur l'approche des espèces tatouées. Ce module inclut notamment deux modèles, nommée SA-NO et SA-NOX, pour évaluer la contribution en NO, en NO_2 et en O_3 des sources. Ce module a été appliqué pour évaluer la contribution en NO_2 et en PM_{10} du trafic, du secteur résidentiel-tertiaire, des sources industrielles et de la concentration de fond sur l'agglomération lyonnaise en 2008. Globalement, les contributions

en NO_2 évaluées avec les modèles SA-NO et SA-NOX sont comparables. Le module source apportionment permet potentiellement d'identifier les contributeurs les plus importants et de déterminer les actions prioritaires à mener pour respecter les valeurs seuils de concentration fixées par la réglementation. Il peut aussi potentiellement être utilisé pour définir le type d'influence des stations de mesure. De plus, l'évaluation de la contribution des sources peut également permettre d'améliorer les résultats fournis par les simulations SIRANE, dans le cadre d'une approche d'assimilation de données (chapitre 11)

Conclusion de la deuxième partie

SIRANE est un modèle dédié à l'étude de la qualité de l'air dans les environnements urbains. Il modélise la dispersion des polluants avec des modèles gaussiens et un modèle de boîte qui prend en compte trois processus de transport spécifiques à la canopée urbaine : le transport par convection le long de la rue ; le transfert turbulent à travers l'interface entre la rue et l'atmosphère extérieure ; et le transfert par convection aux intersections des rues. Les performances du modèle ont été évaluées sur deux cas d'étude qui consistent à estimer les concentrations horaires de PM_{10} et de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise en 2008 et en 2014. Globalement, les performances sont comparables pour les deux cas d'études. Les estimations du modèle pour ces deux cas d'études sont relativement satisfaisantes. Elles sont notamment plus satisfaisantes pour les PM_{10}. De même, les résultats sont relativement moins satisfaisants pour les stations proches du trafic. Ces simulations constituent les simulations SIRANE de référence pour ces deux cas d'étude qui sont par la suite utilisés pour évaluer les performances des approches de modélisation multi-échelles et des méthodes d'assimilation de données à l'échelle urbaine.

Un module nommé *source apportionment* a été intégré au modèle SIRANE pour évaluer la contribution des sources. Il intègre notamment deux modèles pour évaluer la contribution en NO, en NO_2 et en O_3 des sources. Ces deux modèles fournissent globalement des résultats comparables pour les contributions en NO_2. Ce module permet potentiellement d'identifier les contributeurs à la pollution atmosphérique les plus importants, de définir les mesures prioritaires à prendre pour respecter les valeurs seuils de concentration fixées par la réglementation et d'évaluer le type d'influence des stations de mesure. Il peut également être utilisé pour améliorer les estimations du modèle SIRANE dans une approche d'assimilation de données (chapitre 11)

Troisième partie

Modélisation multi-échelles de la qualité de l'air

Chapitre 7
Etat de l'art de la modélisation multi-échelles

La qualité de l'air est influencée par des phénomènes de transport atmosphérique et des réactions physico-chimiques qui se déroulent sur une large gamme d'échelles spatio-temporelles (Odman et Russell, 1991 ; Soulhac *et al.*, 2003 ; Garcia-Menendez et Odman, 2011). L'échelle spatiale minimum qu'un modèle de dispersion atmosphérique est capable de traiter explicitement correspond approximativement à la résolution du maillage sur lequel il effectue les calculs (Garcia-Menendez et Odman, 2011). Aussi, simuler la dispersion atmosphérique des polluants sur l'ensemble du globe avec une résolution spatiale de quelques millimètres permettrait de prendre en compte toutes les échelles. Cela impliquerait alors de réaliser une simulation sur plusieurs centaines de milliards de milliards de mailles. La puissance des machines actuelles ne permet pas d'effectuer ce type de simulation. En général, un modèle de dispersion atmosphérique est dédié à une seule échelle spatio-temporelle et seuls les processus prépondérants à cette échelle sont modélisés. De même, les dimensions et la résolution d'un maillage sont adaptées aux ressources de calcul disponibles. Pour prendre en compte les différentes échelles de dispersion atmosphérique, il est possible d'utiliser l'approche de modélisation multi-échelles. Cette approche a d'abord été appliquée avec les modèles de météorologie (Jones, 1977 ; Phillips, 1979 ; Berger et Oliger, 1984 ; Clark et Farley, 1984 ; Koch et Mcqueen, 1987 ; Dietachmayer et Droegemeier, 1992) et est actuellement couramment utilisée dans le domaine de la qualité de l'air (Wang *et al.*, 2001 ; Frohn *et al.*, 2002 ; Soulhac *et al.*, 2003 ; Tang *et al.*, 2007 ; Lagzi *et al.*, 2009 ; Rouil *et al.*, 2009 ; Tombrou *et al.*, 2009 ; Garcia–Menendez *et al.*, 2010 ; Beevers *et al.*, 2012 ; Stocker *et al.*, 2012). Les méthodes associées à l'approche de modélisation multi-échelles sont les méthodes de raffinement de maillage et les méthodes d'imbrication de domaines.

L'objectif de ce chapitre est de présenter ces méthodes (sections 7.1 et 7.2). De plus, des techniques utilisées pour coupler des modèles à l'échelle régionale et à l'échelle urbaine sont décrites plus en détail dans la troisième section de ce chapitre (section 7.3).

7.1 Méthodes de raffinement de maillage

Les modèles de qualité de l'air effectuent des calculs sur un maillage correspondant à une certaine discrétisation de l'atmosphère. Les méthodes de raffinement de maillage consistent à augmenter la résolution d'un maillage uniforme seulement dans les zones impactées par des processus à petite échelle afin d'améliorer la précision des calculs tout en conservant un coût en temps de calcul adapté aux ressources disponibles (Garcia-Menendez et Odman, 2011).

Il convient de signaler que les méthodes de raffinement de maillage sont limitées aux modèles eulériens. Ainsi, elles ne sont pas applicables avec des modèles qui utilisent uniquement des relations paramétriques telles que les modèles gaussiens ou les modèles de boîtes car dans ce type d'approches, les résultats en un point du maillage ne dépendent ni de la résolution, ni des résultats sur les autres points du maillage.

Avec une approche de raffinement de maillage, un seul modèle de dispersion atmosphérique est mis en œuvre pour effectuer les calculs. Aussi, les mêmes processus physiques et les mêmes équations sont traités sur l'ensemble du maillage, quelle que soit la résolution des différentes parties du maillage. Le raffinement de maillage peut être stationnaire ou dynamique (Dietachmayer et Droegemeier, 1992). Dans ce dernier cas, la résolution du maillage évolue et s'adapte au cours de la simulation. De même, on distingue deux types de raffinement (de type h ou de type r), décrits dans la section suivante (Garcia-Menendez et Odman, 2011).

7.1.1 Raffinements de type h et de type r

Les informations relatives à cette section proviennent notamment de Garcia-Menendez et Odman (2011).

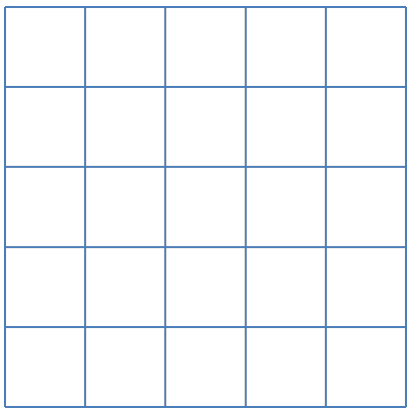
Le raffinement de type h, aussi appelé *enrichissement de mailles* ou *raffinement local*, consiste à restructurer un maillage en augmentant le nombre de mailles dans les zones fortement sensibles à la résolution. Ce raffinement est réalisé en intégrant des sous mailles ayant généralement une structure similaire à celle des mailles initiales (figures 7.1.b et 7.1.d). Ce processus de raffinement peut être répété plusieurs fois afin d'intégrer plusieurs niveaux de raffinement (figure 7.1.d). Généralement, le saut de résolution est de 2, c'est-à-dire qu'une maille initiale est divisée en 2^d (d est le nombre de dimensions : 1, 2 ou 3) sous mailles, comme sur les figures 7.1.b et 7.1.d (Tomlin *et al.*, 1997, 2000 ; Lagzi *et al.*, 2004 ; Constantinescu *et al.*, 2008 ; Lagzi *et al.*, 2009). Il convient de signaler que le raffinement de type h peut conduire à un maillage *non conforme*, c'est-à-dire que la face d'une maille peut *communiquer* avec plusieurs mailles.

Le raffinement de type r, également appelé *déplacement de mailles* ou *raffinement global* consiste à modifier la position des nœuds d'un maillage afin d'augmenter la résolution dans les zones où la précision du calcul est plus faible (figures 7.1.c et 7.1.e). Il convient de noter que ce processus de raffinement se traduit aussi par une dégradation de la résolution dans certaines zones.

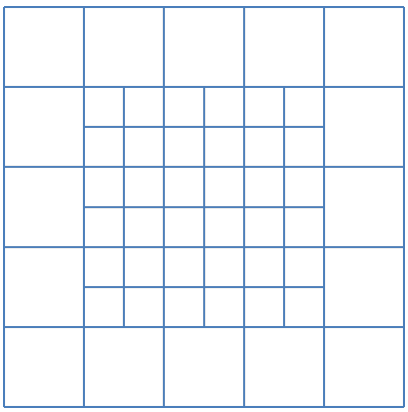
Il est difficile de considérer qu'un des deux types de raffinement est meilleur que l'autre. Chacun présente des avantages et des inconvénients. Précisons qu'il est d'ailleurs possible de combiner ces

deux types de raffinement (Zheng *et al.*, 2015). Le raffinement de type r induit des transitions plus douces que le raffinement de type h entre les mailles de dimensions différentes. De plus, le nombre de mailles est constant avec un raffinement dynamique de type r alors qu'il est variable avec un raffinement dynamique de type h. Cela simplifie les algorithmes à implémenter et facilite la mise en œuvre d'une structure de calcul parallèle. Cependant, c'est aussi l'inconvénient principal du raffinement dynamique de type r car l'amélioration de la précision du calcul est limité par le nombre de mailles initiales qu'il est nécessaire de définir a priori. Si le nombre est trop petit, la précision sera faible, si le nombre est trop grand, le calcul ne sera pas efficient en termes de temps de calcul. Le nombre de mailles optimal est relativement complexe à déterminer notamment pour une simulation avec plusieurs zones d'intérêt. En revanche, la précision du calcul n'est pas limitée par le nombre de mailles initiales avec un raffinement dynamique de type h puisque plusieurs niveaux de sous mailles peuvent être ajoutés. De plus, un certain niveau de précision peut être garanti avec ce type de raffinement en définissant une résolution minimale du maillage initial.

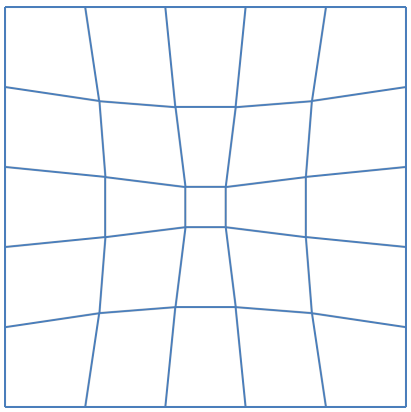
a) Maillage uniforme



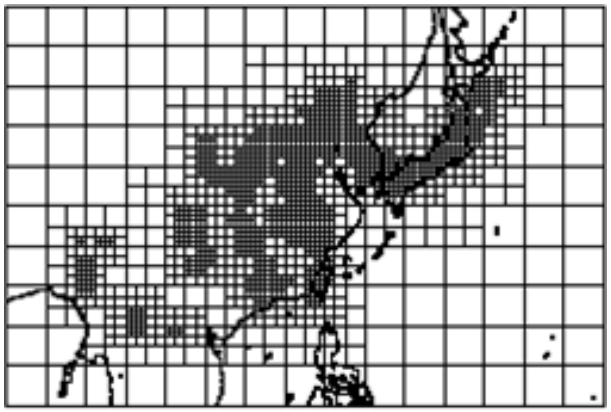
b) Raffinement de type h



c) Raffinement de type r



d) Raffinement de type h utilisée par Constantinescu et al. (2008)



e) Raffinement de type r utilisée par Odman et al. (2002)

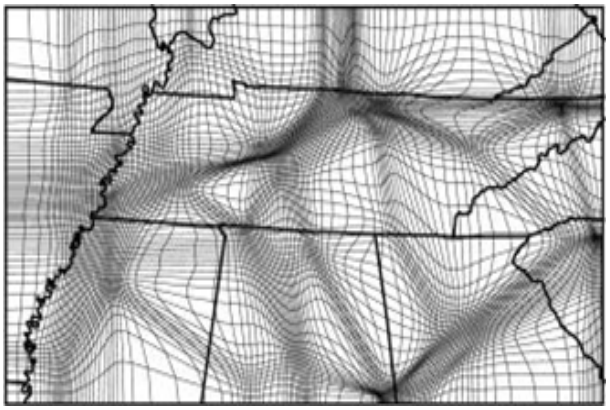


FIGURE 7.1 – Représentation des types de raffinement : raffinements de type h (b) et de type r (c) appliqués à un maillage uniforme (a), raffinement de type h utilisé par Constantinescu *et al.* (2008) (d) et raffinement de type r utilisé par Odman *et al.* (2002) (e)

7.1.2 Critère de raffinement

Pour déterminer les zones où il est pertinent d'augmenter la résolution d'un maillage, il est nécessaire d'adopter un critère de raffinement. Dans le domaine de la qualité de l'air, ce critère est généralement évalué à partir des champs de concentration (Garcia-Menendez et Odman, 2011). Le critère de raffinement repose parfois sur un indicateur d'erreur. Srivastava *et al.* (2000) utilisent cette démarche en évaluant une erreur d'interpolation définie comme l'écart entre la valeur associée à une maille et la valeur estimée pour la même maille en interpolant les valeurs relatives aux mailles voisines. Suite à l'estimation de ces erreurs, les nœuds sont déplacés et regroupés autour des zones avec des erreurs élevées. Ce processus est réalisé de manière itérative jusqu'à ce qu'un critère de convergence soit atteint. Srivastava *et al.* (2000) définissent le critère de convergence comme un nombre limite de déplacement de nœuds. Tomlin *et al.* (1997) utilisent également un indicateur d'erreur en estimant la différence entre les résultats issus d'une méthode de résolution de première ordre et ceux provenant d'une méthode de résolution de second ordre. Dans cette étude le processus est limité en fixant un nombre maximum de niveaux de raffinement. La connaissance des processus physiques peut également permettre d'identifier les zones où la précision du calcul est plus sensible à la résolution. Dans le domaine de la qualité de l'air, les gradients de concentration importants ou les courbures élevées du champ de concentration peuvent notamment permettre de localiser les zones à raffiner (Ghorai *et al.*, 2000 ; Constantinescu *et al.*, 2008).

7.1.3 Avantages et limitations des méthodes de raffinement de maillage

Plusieurs études indiquent que les méthodes de raffinement de maillage améliorent les résultats des simulations (Tomlin *et al.*, 1997 ; Lagzi *et al.*, 2004 ; Constantinescu *et al.*, 2008 ; Lagzi *et al.*, 2009 ; Siour *et al.*, 2013). Tomlin *et al.* (1997), Garcia–Menendez *et al.* (2010) et Srivastava *et al.* (2001) montrent notamment que le raffinement de maillage permet de modéliser plus précisément les concentrations à proximité des sources mais aussi celles plus en aval. Garcia–Menendez *et al.* (2010) et Srivastava *et al.* (2001) ajoutent également que le raffinement de maillage réduit la diffusion des panaches. De plus, Srivastava *et al.* (2000) et Srivastava *et al.* (2001) indiquent que les résultats associées à des espèces réactives sont plus satisfaisants en raffinant le maillage. Cela est dû au fait que les résultats pour ce type d'espèce sont plus sensibles à la résolution du maillage (Tomlin *et al.*, 1997). Néanmoins, le raffinement de maillage augmente significativement le coût en temps de calcul notamment lorsqu'il est appliqué de manière dynamique (Garcia-Menendez et Odman, 2011). De même, il convient de rappeler que ces méthodes peuvent être utilisées uniquement avec un modèle eulérien. Aussi, ces méthodes ne sont pas utilisées dans notre projet de recherche car nous utilisons le modèle urbain SIRANE qui combine un modèle de boîtes et des modèles gaussiens.

7.2 Méthodes d'imbrication de domaines

Les maillages utilisés avec les modèles à méso-échelle et les modèles à l'échelle locale sont limités dans l'espace, c'est-à-dire qu'ils ne recouvrent pas la totalité de l'atmosphère. Il est alors nécessaire

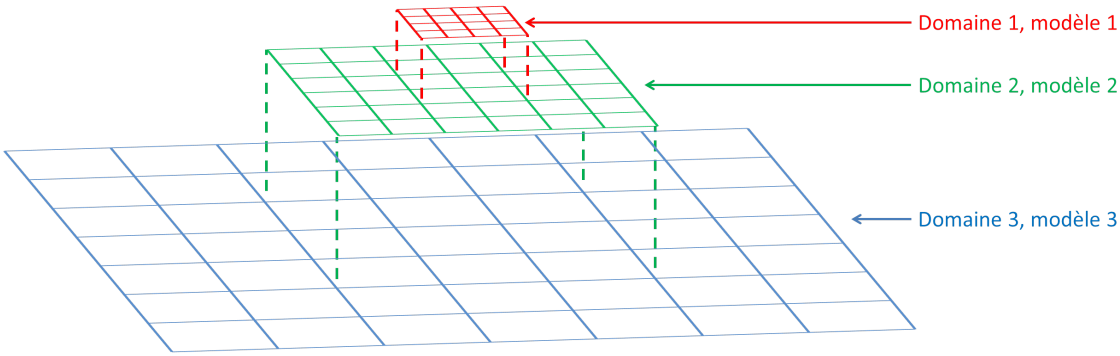


FIGURE 7.2 – Imbrication de maillages 2D

de fournir des conditions aux limites à ces modèles pour prendre en compte les processus de transport à plus grande échelle et l'import de polluants provenant de l'extérieur du domaine d'étude. Il est difficile d'évaluer des conditions aux limites à partir de mesures pour un nombre important d'espèces avec une résolution temporelle satisfaisante. Les méthodes d'imbrication de domaines constituent une alternative pour évaluer les conditions aux limites d'une simulation (Tang *et al.*, 2007 ; Tchepel *et al.*, 2010). Ces méthodes consistent à coupler des simulations réalisées sur des maillages distincts imbriqués les uns dans les autres avec une résolution de plus en plus fine (figure 7.2) en évaluant les conditions aux limites d'une simulation à partir de la simulation à l'échelle supérieure (Odman *et al.*, 1997 ; Debreu et Blayo, 2008 ; Garcia-Menendez et Odman, 2011). Les différentes simulations peuvent être réalisées en utilisant le même modèle de qualité de l'air (Jakobs *et al.*, 1995 ; Wang *et al.*, 2001 ; Frohn *et al.*, 2002 ; Syrakov *et al.*, 2013), des modèles différents mais de même famille (par exemple des modèles eulériens) (Jonson *et al.*, 2001 ; Rouil *et al.*, 2009 ; Tombrou *et al.*, 2009) ou des modèles de familles différentes (Brandt *et al.*, 2001 ; Soulhac *et al.*, 2003 ; Beevers *et al.*, 2012 ; Stocker *et al.*, 2012). Dans ce dernier cas, nous parlerons de *couplage hétérogène*. Pour distinguer deux simulations à deux échelles successives, nous utilisons par la suite les expressions *simulation mère* et *simulation fille* pour désigner respectivement la simulation à grande échelle et celle à fine échelle. Avec les méthodes d'imbrication de domaines, les dimensions et la résolution des maillages sont stationnaires et définies en amont des simulations (Odman *et al.*, 1997 ; Garcia-Menendez et Odman, 2011). Généralement, le ratio d'imbrication est de trois, c'est-à-dire que les dimensions des mailles associées à la simulation fille sont trois fois inférieures à celles de la simulation mère (Jakobs *et al.*, 1995 ; Wang *et al.*, 2001 ; Frohn *et al.*, 2002 ; Tombrou *et al.*, 2009 ; Beevers *et al.*, 2012 ; Syrakov *et al.*, 2013). Néanmoins, d'autres études utilisent également un ratio d'imbrication de deux, comme sur la figure 7.2 (Elsberry et Ley, 1976 ; Jones, 1977 ; Phillips, 1979 ; Kurihara et Bender, 1980). Les méthodes d'imbrication de domaines peuvent être appliquées avec une approche *one-way nested* ou une approche *two-way nested* (Odman *et al.*, 1997 ; Garcia-Menendez et Odman, 2011). Ces deux approches diffèrent dans la manière de coupler la simulation mère et la simulation fille.

7.2.1 Approches one-way nested et two-way nested

L'approche one-way nested consiste uniquement à estimer les conditions aux limites de la simulation fille à partir de la simulation mère (Garcia-Menendez et Odman, 2011). Avec cette approche, seule la simulation fille est impactée par le couplage des échelles. Cette approche considère que les phénomènes résolus à petite échelle avec la simulation fille n'influencent pas significativement la simulation mère (Lozef et Bornstein, 1970 ; Elsberry et Ley, 1976 ; Koch et Mcqueen, 1987). Avec l'approche one-way nested, la simulation mère et la simulation fille n'ont pas besoin d'être synchronisées. Ainsi, la simulation mère peut être effectuée de manière autonome puisqu'elle ne repose pas sur des données issues de la simulation fille. Cependant, la simulation fille doit être lancée en même temps ou après la simulation mère.

L'approche two-way nested consiste également à évaluer les conditions aux limites de la simulation fille à partir de la simulation mère mais aussi à *mettre à jour* la simulation mère à partir de la simulation fille (Odman *et al.*, 1997). Avec cette approche, le coulage des échelles impacte les deux simulations. Le processus général de cette approche consiste à renouveler les quatre étapes suivantes : 1) lancer la simulation mère pour un pas de temps, 2) estimer les conditions aux limites de la simulation fille à partir de la simulation mère, 3) lancer la simulation fille jusqu'à atteindre la même échéance temporelle que la simulation mère (les deux simulations n'ont pas nécessairement la même résolution temporelle) et 4) mettre à jour la simulation mère à partir de la simulation fille (Odman *et al.*, 1997 ; Garcia-Menendez et Odman, 2011). Cette dernière étape est parfois appelée *rétroaction* (Garcia-Menendez et Odman, 2011). Cette rétroaction peut par exemple consister à remplacer la valeur relative à une maille de la simulation mère par la valeur moyenne associée aux mailles de la simulation fille recouvertes par la maille en question (Kurihara *et al.*, 1979 ; Clark et Farley, 1984 ; Frohn *et al.*, 2002). Avec l'approche two-way nested, la simulation mère et la simulation fille doivent être effectuées de manière parallèle.

L'approche one-way nested est plus simple au niveau de l'implémentation et moins coûteuse en temps de calcul que l'approche two-way nested parce qu'il n'est pas nécessaire de synchroniser les simulations et qu'il n'y a pas d'étape de rétroaction (Koch et Mcqueen, 1987). L'approche two way nested est cependant plus attrayante car le couplage des échelles est plus réaliste du fait qu'il influence les deux simulations (Koch et Mcqueen, 1987). Néanmoins, les études de Lozef et Bornstein (1970) et Soriano *et al.* (2004) indiquent que l'approche two-way nested ne conduit pas nécessairement à des résultats plus satisfaisants que ceux obtenus avec l'approche one-way nested.

7.2.2 Estimation des conditions aux limites pour la simulation fille

L'estimation des conditions aux limites pour la simulation fille est l'étape la plus importante des méthodes d'imbrication de domaines (Jakobs *et al.*, 1995). La difficulté de cette étape réside dans le fait que la simulation mère et la simulation fille n'ont pas la même résolution spatiale (et parfois temporelle). Aussi, il est nécessaire d'interpoler les valeurs de la simulation mère pour déterminer le plus précisément possible les conditions aux limites de la simulation fille. Jakobs *et al.* (1995) déterminent les conditions aux limites avec l'approche de Pleim *et al.* (1991) qui consiste à

interpoler linéairement les résultats associés aux mailles situées aux frontières de la simulation fille. Ce type d'approche est également appliqué par Kurihara *et al.* (1979). Alapaty *et al.* (1998) étudient quatre autres méthodes d'interpolation pour définir les conditions aux limites avec notamment deux schémas géométriques, l'interpolation à l'ordre zéro et l'interpolation quadratique, et deux schémas d'advection, l'interpolation linéaire d'advection équivalent en amont (*upwind advection-equivalent* en anglais) (Smolarkiewicz et Grell, 1992) et l'interpolation d'advection équivalent de Bott (Bott, 1989). Les auteurs comparent ces quatre méthodes sur un cas d'étude relatif au transport d'une distribution de concentration conique et indiquent que l'estimation de la position du maximum est plus satisfaisante avec le schéma de Bott. D'autres études utilisent également une interpolation quadratique (Odman et Russell, 1991), un schéma d'interpolation de 1er ordre (Miyakoda et Rosati, 1977), une interpolation de Lagrange et une interpolation de type spline cubique (Zhang *et al.*, 1986). Toutes les études citées ici sont relatives à un couplage des échelles de modèles eulériens. D'autres approches pour coupler un modèle régional eulérien et un modèle local sont décrites dans la section 7.3.

7.2.3 Avantages et limitations des méthodes d'imbrication de domaines

Les études montrent généralement que les résultats obtenus en utilisant des méthodes d'imbrication de domaines sont satisfaisants (Jakobs *et al.*, 1995 ; Wang *et al.*, 2001 ; Rouil *et al.*, 2009 ; Tombrou *et al.*, 2009). Wang *et al.* (2001) indiquent notamment que la corrélation entre les concentrations de NO_x estimées avec le système de modélisation multi-échelles NAQPMS et les mesures est relativement bonne. Jakobs *et al.* (1995) indiquent également que les concentrations de SO_2, de NO_x et de O_3 évaluées avec la version multi-échelles du modèle EURAD (Hass *et al.*, 1990) sont plus satisfaisantes dans les domaines imbriqués. De plus, Tombrou *et al.* (2009) montrent que les concentrations de CO déterminées avec le modèle UAM-V (Gerry *et al.*, 1989) sont meilleures en déterminant les conditions aux limites avec une méthode d'imbrication de domaines qu'en les estimant à partir de mesures. Les méthodes d'imbrication de domaines présentent l'avantage de pouvoir combiner des modèles de qualité de l'air qui sont adaptés aux différentes échelles. Ainsi, les phénomènes de transport et les réactions physico-chimiques prépondérants à chaque échelle sont a priori plus correctement modélisés (Soulhac *et al.*, 2003). Néanmoins les méthodes d'imbrication de domaines sont coûteuses en temps de calcul car il est nécessaire de réaliser plusieurs simulations.

7.3 Couplage d'un modèle régional et d'un modèle urbain

Le couplage d'un modèle régional et d'un modèle urbain est généralement un couplage hétérogène (Brandt *et al.*, 2001 ; Soulhac *et al.*, 2003 ; Beevers *et al.*, 2012 ; Stocker *et al.*, 2012). La difficulté dans ce type de couplage réside dans le fait que les modèles couplés ne résolvent pas l'équation d'advection-diffusion (équation 2.1) de la même manière et qu'ils n'utilisent pas nécessairement des données de même nature (par exemple les modèles eulériens nécessitent des conditions aux limites aux frontières du domaine alors que les modèles gaussiens nécessitent une concentration de fond

volumique sur le domaine) (Soulhac *et al.*, 2003). Le couplage d'un modèle régional et d'un modèle urbain a fait l'objet de plusieurs études qui sont décrites dans la suite de cette section.

L'institut danois NERI (*National Environmental Research Institute*) a développé un système de modélisation multi-échelles avec une approche one-way nested, appelé DMU-ATMI THOR (Brandt *et al.*, 2001). DMU-ATMI THOR est un système opérationnel de prévision de qualité de l'air qui intègre un modèle de prévision météorologique et trois modèles de dispersion atmosphérique allant de l'échelle régionale à l'échelle de la rue (figure 7.3). Les conditions aux limites du modèle météorologique ETA (Kallos *et al.*, 1997) proviennent des simulations réalisées avec un modèle de circulation globale au NCEP (*National Center for Environmental Protection, USA*). La simulation ETA permet de déterminer les données d'entrée météorologiques pour la simulation DEOM. Le modèle eulérien DEOM est utilisé pour estimer les concentrations à l'échelle régionale avec une résolution horizontale de 25 km. Le champ de concentration fourni par la simulation DEOM est ensuite utilisé comme champ de *concentration de fond régional* par le modèle BUM (Berkowicz, 2000b). Ce modèle est mis en œuvre pour estimer le champ de *concentration de fond urbain* avec une résolution horizontale de 50 m. Les résultats de la simulation BUM sont finalement utilisés en tant que concentration de fond par le modèle OSPM (Berkowicz, 2000a) pour estimer les concentrations à l'échelle de la rue. Brandt *et al.* (2001) et Brandt *et al.* (2003) évaluent les résultats de DMU-ATMI THOR en les comparant à des mesures de NO_x et de CO et indiquent qu'ils sont satisfaisants.

Soulhac *et al.* (2003) ont aussi développé un système de modélisation multi-échelles avec une approche one-way nested. Ce système est composé du modèle de météorologie SAIMM (Kessler et Douglas, 1992) et de quatre modèles de qualité de l'air (figure 7.4). Le modèle SAIMM est utilisé pour définir les données d'entrée météorologiques du modèle eulérien UAM-V (Gerry *et al.*, 1989). Le modèle UAM-V, appliqué à l'échelle régionale avec une résolution horizontale de 4 km, permet d'évaluer les conditions aux limites de la simulation à l'échelle urbaine. Cette simulation est effectuée avec le modèle eulérien MERCURE (Carissimo *et al.*, 1997) avec une résolution horizontale de 500 m. A proximité des industries, les niveaux de concentration sont déterminés en sommant le

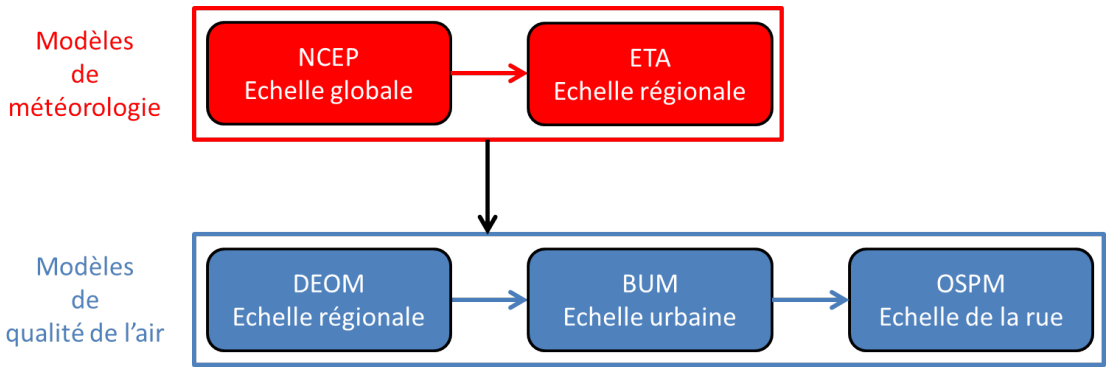


FIGURE 7.3 – Système de modélisation multi-échelles DMU-ATMI-THOR : le modèle de météorologie utilisé au NCEP permet d'estimer les conditions aux limites de la simulation ETA. Celle-ci fournit les données d'entrée météorologiques pour la simulation DEOM qui est couplée avec la simulation BUM, elle-même couplée avec la simulation OSPM.

champ de concentration induit par les émissions industrielles, déterminé avec le modèle gaussien AMDS 3 (CERC, 2000), et le champ de concentration de fond, évalué avec le modèle MERCURE. Dans les zones urbaines, les niveaux de concentration sont estimés en sommant le champ de concentration déterminé avec le modèle urbain SIRANE (Soulhac *et al.*, 2011), sans prendre en compte de concentration de fond, et le champ de concentration de fond, estimé avec le modèle MERCURE. L'étude de Soulhac *et al.* (2003) indique que les modèles ADMS 3 et SIRANE couplés aux modèles MERCURE+UAM-V estiment les concentrations de NO_x de manière plus satisfaisante que les modèles MERCURE+UAM-V seuls.

Beevers *et al.* (2012) proposent un autre système de modélisation multi-échelles appelé CMAQ-urban. Celui-ci combine le modèle eulérien CMAQ (Byun *et al.*, 1999 ; Byun et Schere, 2006) et le modèle gaussien ADMS roads (CERC, 2006) avec une approche one-way nested. Le modèle WRF (Skamarock *et al.*, 2005) est aussi utilisé pour déterminer les données d'entrée météorologiques pour la simulation CMAQ. CMAQ est appliqué à l'échelle régionale avec une approche one-way nested sur quatre maillages imbriqués qui ont respectivement une résolution horizontale de 81 km, 27 km, 9 km et 3 km. Un champ de concentration de fond est ensuite estimé en interpolant les concentrations de la dernière simulation (avec une résolution de 3 km) sur un maillage ayant une résolution horizontale de 20 m. Ce maillage est identique à celui utilisé pour la simulation à l'échelle urbaine effectuée avec ADMS roads. Avec le système de modélisation de Beevers *et al.* (2012), ADMS roads est configuré pour évaluer les concentrations induites par les émissions du trafic uniquement dans un rayon de 225 m autour des axes routiers. A partir de ces résultats, le système CMAQ-urban évalue les niveaux

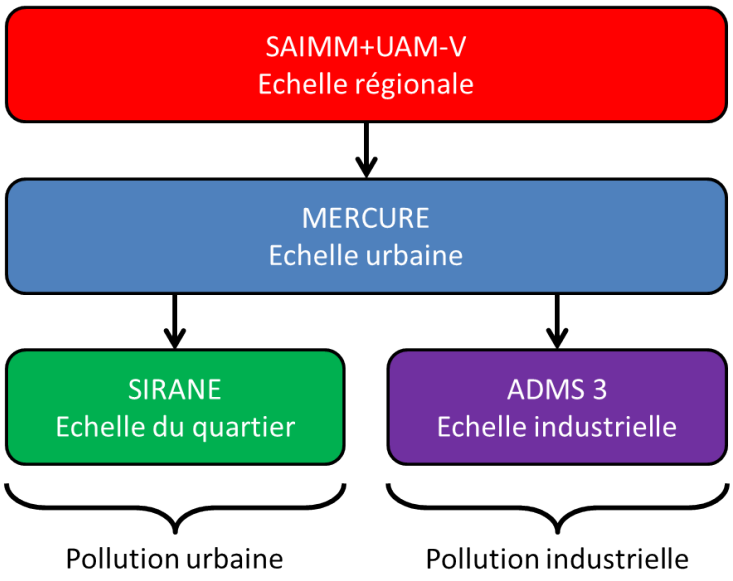


FIGURE 7.4 – Système de modélisation multi-échelles de Soulhac *et al.* (2003) : le modèle de météorologie SAIMM fournit les données d'entrée météorologiques pour la simulation UAM-V. Les résultats du modèles UAM-V sont ensuite utilisés comme concentration de fond pour la simulation MERCURE. Les estimations de MERCURE sont finalement utilisées par la simulation SIRANE ou ADMS 3 comme un champ de concentration de fond

de concentration en sommant le champ de concentration déterminé avec le modèle ADMS roads et le champ de concentration de fond. Pour les espèces réactives, les réactions chimiques adéquates sont appliquées après avoir sommé ces deux champs de concentration. Beevers *et al.* (2012) comparent des estimations fournies par le système CMAQ-urban à des mesures de NO_2 et de O_3 et indiquent que les performances du système de modélisation sont relativement bonnes. Il est important de souligner que les émissions liées au trafic sont comptées deux fois avec cette approche puisqu'elles sont prises en compte dans la dernière simulation CMAQ et dans la simulation ADMS roads. Ce double comptage des émissions est un inconvénient. Cependant, les auteurs indiquent que l'erreur induite par le double comptage est relativement faible.

Stocker *et al.* (2012) proposent également un système de modélisation multi-échelles qui intègre le modèle CMAQ. Dans ce système de modélisation, CMAQ est couplé avec le modèle gaussien ADMS-Urban (CERC, 2010) en utilisant une approche one-way nested. Stocker *et al.* (2012) couplent ces deux modèles en tenant compte de l'âge des polluants. L'âge des polluants est défini en fonction du temps écoulé depuis l'émission. Le système de modélisation distingue les polluants dont l'âge est inférieur ou supérieur à un temps t_c. Dans ce rapport, les polluants âgés au plus de t_c sont dits *jeunes* et ceux dont l'âge est supérieur à t_c sont dits *anciens*. Le temps t_c peut être interprété comme la durée nécessaire pour que les polluants aient diffusé sur une distance l_c, suffisamment grande par rapport à la résolution du modèle à méso-échelle, pour être correctement modélisés à cette échelle (figure 7.5). Dans l'étude de Stocker *et al.* (2012), où la résolution horizontale de la simulation CMAQ est de 3 km, le temps t_c est égal à 2 h. La démarche de couplage de Stocker *et al.* (2012) consiste à utiliser ADMS-Urban à l'échelle urbaine pour simuler la dispersion des polluants jeunes et CMAQ à l'échelle régionale pour modéliser la dispersion des polluants anciens. Il convient de signaler que le modèle ADMS-Urban est configuré pour prendre en compte uniquement les polluants âgés

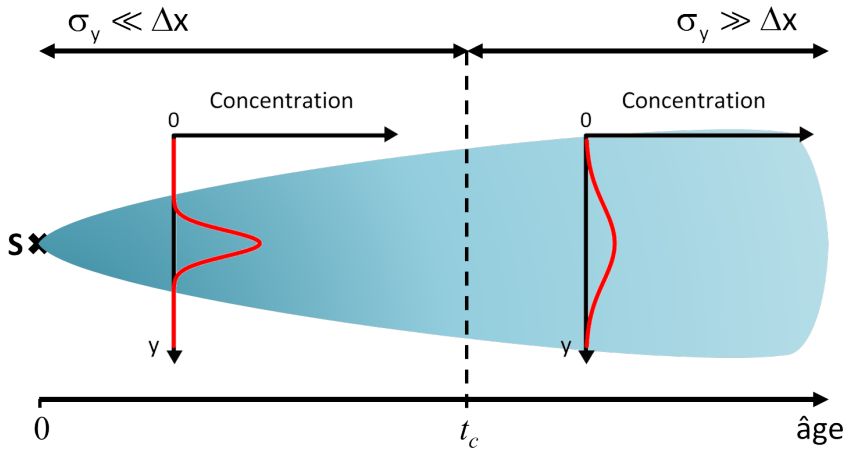


FIGURE 7.5 – Schématisation d'un profil de concentration de polluants jeunes (âgés au plus de t_c) et de polluants anciens (âgés de plus de t_c) : l'écart type du profil de concentration (distance caractéristique de diffusion), σ_y, est inférieur à la résolution spatiale du modèle à méso-échelle, Δx, pour des polluants jeunes mais il est supérieur pour des polluants anciens

au plus de 2 h dans le système de modélisation de Stocker *et al.* (2012). Dans la simulation CMAQ, les polluants jeunes sont aussi pris en compte. Il est alors nécessaire de supprimer la contribution des polluants jeunes dans la simulation CMAQ afin d'éviter un double comptage de ces polluants. Pour estimer la contribution de ces polluants dans la simulation CMAQ, une seconde simulation ADMS-Urban est effectuée. Dans cette seconde simulation, les émissions sont agrégées et modélisées par des sources surfaciques, comme dans la simulation CMAQ. Ainsi, le système de modélisation détermine les niveaux de concentration avec l'équation 7.1 :

$$\begin{aligned} & c = c_{\text{jeune}} + c_{\text{ancien}} \\ & \text{avec} \begin{cases} c_{\text{jeune}} = c_{\text{ADMS}} \\ c_{\text{ancien}} = c_{\text{CMAQ}} - c_{\text{ADMS,surf}} \end{cases} \end{aligned} \tag{7.1}$$

où c est le niveau de concentration, c_{ADMS} est la concentration déterminée avec la simulation ADMS-Urban qui modélise les émissions sous forme de sources ponctuelles, linéiques et surfaciques, c_{CMAQ} est la concentration estimée avec la simulation CMAQ et $c_{\text{ADMS,surf}}$ est la concentration évaluée avec la simulation ADMS-Urban qui modélise les émissions comme des sources surfaciques. Stocker *et al.* (2012) comparent les estimations fournies par le modèle CMAQ, le modèle ADMS-Urban et le système de modélisation multi-échelles à des mesures de NO_x, de NO_2 et de O_3. Les résultats indiquent que le modèle ADMS-Urban couplé à CMAQ fournit des estimations plus satisfaisantes que celles associées au modèle CMAQ seul mais qui sont du même ordre de grandeur que celles du modèle ADMS-Urban seul. Ces résultats montrent que l'utilisation d'un modèle régional ne permet pas forcément d'améliorer significativement l'estimation des conditions aux limites d'un modèle urbain.

7.4 Conclusion

Les méthodes de raffinement de maillage et les méthodes d'imbrication de domaines permettent de prendre en compte les différentes échelles du transport atmosphérique des polluants. Les méthodes de raffinement de maillage consistent à augmenter la résolution d'un maillage uniforme seulement dans les zones impactées par des processus à petite échelle. Ces méthodes sont applicables uniquement avec un modèle eulérien. Les méthodes d'imbrication de domaines consistent à déterminer les conditions aux limites d'une simulation à partir d'une simulation effectuée à plus grande échelle. Ces méthodes permettent d'utiliser des modèles adaptés aux différentes échelles. Aussi, les phénomènes de transport et les réactions physico-chimiques prépondérants à chaque échelle sont a priori modélisés de manière plus satisfaisante. Les méthodes d'imbrication de domaines peuvent notamment permettre d'évaluer les conditions aux limites pour les modèles urbains.

Dans la suite de ces travaux de thèse, nous utilisons ces méthodes pour coupler le modèle urbain SIRANE avec le modèle à méso-échelle CHIMERE. Le prochain chapitre porte sur le modèle CHIMERE et les estimations fournies par ce modèle seul pour le cas d'étude 2014.

Chapitre 8
Modèle CHIMERE et simulation de référence

Dans le cadre de ce projet de thèse, nous étudions l'apport des méthodes d'imbrication de domaines pour estimer les concentrations de polluants à l'échelle urbaine. Pour cette étude, nous avons choisi de coupler le modèle à méso-échelle CHIMERE et le modèle urbain SIRANE. Le choix d'utiliser le modèle CHIMERE est motivé par le fait qu'il est couramment utilisé par les AASQA françaises et notamment par l'AASQA Atmo Auvergne-Rhône-Alpes qui collabore à ce travail de thèse.

Dans ce chapitre, nous décrivons brièvement le modèle CHIMERE (section 8.1). De même, nous présentons les résultats fournis par le modèle CHIMERE utilisé seul pour le cas d'étude 2014 (section 8.2).

8.1 Brève description du modèle CHIMERE

Les informations relatives à cette section proviennent notamment de Menut et al. (2013).

CHIMERE (Schmidt *et al.*, 2001 ; Bessagnet *et al.*, 2004) est un modèle eulérien 3D de dispersion atmosphérique à méso-échelle développé en collaboration par les chercheurs du LMD (Laboratoire de Météorologie Dynamique), de l'INERIS (Institut National de l'Environnement industriel et des RISques) et du LISA (Laboratoire Inter-universitaire des Systèmes Atmosphériques). Ce modèle calcule de manière déterministe les concentrations horaires des espèces gazeuses (par exemple NO, NO_2 et O_3) et particulaires (par exemple PM_{10} et $PM_{2.5}$) dans la troposphère jusqu'à environ 10 km d'altitude (Menut *et al.*, 2011). Ce modèle permet d'analyser et de prévoir la pollution atmosphérique sur des domaines allant du continent, avec une résolution horizontale d'environ un degré (approximativement 100 km), à la région, avec une résolution horizontale de l'ordre du kilomètre (Rouil *et al.*, 2009). Verticalement, la résolution est plus fine proche du sol, avec une première couche de 20 m, et décroît avec l'altitude (Menut *et al.*, 2011). Pour déterminer le devenir des polluants, CHIMERE modélise les mécanismes d'advection, de diffusion turbulente, de réactions chimiques et de dépôt. Les données d'entrée du modèle CHIMERE sont l'occupation des sols, la météorologie, les

émissions de polluants, les conditions aux limites et les conditions initiales. L'occupation des sols est supposée constante et n'est donc fournie qu'une seule fois par simulation. De même, les conditions initiales sont nécessaires uniquement pour initialiser une simulation. Les autres données d'entrée doivent être fournies de manière horaire. Le modèle CHIMERE a fait l'objet de plusieurs études de validation à l'échelle régionale (Schaap *et al.*, 2007 ; van Loon *et al.*, 2007 ; Vautard *et al.*, 2007) et à l'échelle continentale (Solazzo *et al.*, 2012 ; Zyryanov *et al.*, 2012) qui portent essentiellement sur les espèces O_3 et PM_{10}.

8.1.1 Modélisation du transport et des processus de transformations

Transport et mélange turbulent

Pour estimer la concentration c d'une espèce chimique, le modèle CHIMERE résout numériquement l'équation de conservation représentée par la relation 8.1 :

$$\partial_t(\rho c) + \partial_i \mathbf{F}^i = 0 \tag{8.1}$$

où ρ est la densité de l'air et $\mathbf{F} = \rho c \mathbf{v}$ ($\mathbf{v}$ est la vitesse) correspond au flux de masse (les variables en gras sont des vecteurs). Dans le modèle CHIMERE, cette équation est résolue sur une grille structurée (la face d'une maille *communique* uniquement avec une autre maille) composée de mailles quasiment parallélépipédiques. Ainsi, l'équation 8.1 peut être discrétisée et résolue pour les trois directions orthogonales (zonale, méridionale et verticale). Cette démarche est connue sous le nom de séparateur d'opérateur (*operator splitting* en anglais). Dans le modèle CHIMERE, les variables sont associées au centre des mailles. Néanmoins pour résoudre cette équation en garantissant la conservation de la masse, il est aussi nécessaire de déterminer les flux de masse aux interfaces des mailles. Ces flux de masse peuvent être évalués avec plusieurs schémas de transport dans le modèle CHIMERE. Dans le plan horizontal, où les dimensions des mailles sont relativement constantes, le modèle évalue la vitesse du vent à une interface en interpolant linéairement les vitesses relatives au centre des deux mailles adjacentes à l'interface. Dans le modèle, cette méthode est appliquée quel que soit le schéma numérique de transport utilisé. Aussi, la distinction entre les schémas numériques de transport proposés dans CHIMERE repose uniquement sur la manière d'estimer les concentrations aux interfaces. Dans le plan horizontal, le modèle CHIMERE propose trois schémas de transport : le schéma *upwind*, le schéma de Van Leer et le schéma PPM (*Parabolic Piecewise Method*). Le schéma *upwind* (Courant *et al.*, 1952) est un schéma de 1^{ier} ordre. Avec ce schéma, la concentration est supposée uniforme dans chaque maille. Dans ce cas, la concentration à l'interface est considérée égale à la concentration de la maille en amont (par rapport à la direction du vent). Néanmoins, ce schéma induit une grande diffusivité. Le schéma de Van Leer (van Leer, 1979) est un schéma de 2nd ordre. Ce schéma considère que la concentration varie linéairement entre les interfaces. En météorologie, ce schéma est reconnu pour sa bonne précision numérique. De plus, il entraîne une diffusivité plus faible que le schéma *upwind*. Cependant le coût en temps de calcul est légèrement plus élevé. Le schéma PPM (Colella et Woodward, 1984) est un schéma de 3 ^{ème} ordre. Dans CHIMERE, ce schéma est

appliqué en imposant des conditions qui limitent la variation des concentrations et qui préservent leur monotonie. Ce dernier schéma induit une diffusivité plus faible que le schéma de Van Leer avec cependant un coût en temps de calcul plus important.

Dans le plan vertical, la hauteur des mailles n'est pas constante et croît avec l'altitude. Ainsi, il n'est pas possible d'utiliser la même démarche que dans le plan horizontal pour déterminer les flux aux interfaces. Dans ce cas, les flux verticaux aux interfaces sont déterminés en réalisant un bilan de flux de masse. Ce bilan de flux de masse consiste à équilibrer les flux de masse entrants et sortants d'une maille. Ainsi, le flux de masse sur la face supérieure d'une maille est déterminée de manière à compenser la différence entre les flux de masse entrants et sortants par la face inférieure et les faces latérales (flux aux interfaces dans le plan horizontal). Ce bilan est réalisé de manière successive pour chaque maille d'une colonne de bas en haut. Pour la première maille, le flux sur la face inférieure est supposé nul. Dans le plan vertical, CHIMERE modélise aussi le mélange turbulent. Aussi, le modèle calcule la vitesse de turbulence verticale (*turbulent vertical velocity* en anglais) w_k aux interfaces entre les couches k et $k+1$ avec l'équation 8.2 :

$$w_k = \frac{K_z}{\frac{1}{2}\left(h_k + h_{k+1}\right)} \tag{8.2}$$

où K_z correspond à la diffusivité turbulente verticale et h_k représente la hauteur de la couche k. A partir de cette vitesse de turbulence verticale, CHIMERE estime le flux F_m qui correspond au flux de masse net, entrant par la face supérieure d'une maille, induit par le mélange turbulent. Ce flux F_m est calculé pour une maille de la couche k avec l'expression 8.3 :

$$F_m = \frac{w_k \left(c_{k+1} \frac{\rho_k}{\rho_{k+1}} - c_k \right)}{h_k} \tag{8.3}$$

où ρ_k et c_k sont respectivement la densité de l'air et la concentration associées à la maille située dans la couche k.

Processus de transformation

CHIMERE modélise la dispersion de polluants qui peuvent être chimiquement inertes ou réactifs. Pour modéliser les processus de transformation des espèces gazeuses, CHIMERE propose le choix entre trois schémas chimiques. Le premier, nommé MELCHIOR I, est celui proposé par Lattuati (1997). Il contient plus de 300 réactions pour 80 espèces gazeuses. Le deuxième, appelé MELCHIOR II (Derognat *et al.*, 2003), modélise environ 120 réactions relatives à un peu plus de 40 espèces. MELCHIOR II est un schéma chimique réduit qui permet notamment de réduire le coût en temps de calcul. Enfin, le troisième est le schéma chimique SAPRC07 (Carter, 2010) qui représente plus de 275 réactions chimiques pour 80 espèces. CHIMERE dispose aussi d'un module dédié aux aérosols. Ce module modélise notamment les processus physiques relatifs aux aérosols tels que la coagulation (Gelbard et Seinfeld, 1980), l'absorption (Nenes *et al.*, 1998) et la nucléation (Kulmala *et al.*, 1998).

8.1.2 Données d'entrée

Occupation des sols

Le modèle CHIMERE simule la dispersion des polluants en tenant compte de l'occupation des sols du domaine d'étude. Cette donnée est nécessaire pour modéliser les processus de dépôt, les émissions biogéniques, la quantité de mouvement proche du sol et les transferts de chaleur au sol. Actuellement, neuf catégories sont utilisées pour classifier l'occupation des sols dans le modèle (tableau 8.1). L'occupation des sols peut être déterminée à partir des bases de données Global Land Cover Facility (GLCF) ou GlobCover Land Cover (LC). Ces deux bases de données sont obtenues à partir de données satellitaires. GLCF repose sur les analyses des satellites dotés de la technologie AVHRR (*Advanced Very High Resolution Radiometer*). Cette base de données est déterminée avec la méthode de Hansen et Reed (2000) et fournit des informations sur l'occupation des sols avec une résolution de 1 km x 1 km. GlobCover LC s'appuie sur les données fournies par le spectromètre imageur MERIS (*Medium Resolution Imaging Spectrometer*) embarqué sur le satellite ENVISAT. Cette base de données a une résolution de 10 seconde d'arc (environ 300 m) et utilise la classification définie par le Land Cover Classification System (Bicheron *et al.*, 2011).

1	Terres agricoles & cultures
2	Prairies
3	Terres arides & sols nus
4	Zones humides
5	Zones urbaines
6	Arbustes & buissons
7	Forêt de conifères
8	Forêt feuillue
9	Océans

Table 8.1 – Catégories d'occupation des sols du modèle CHIMERE

Météorologie

La météorologie est utilisée par CHIMERE pour modéliser les phénomènes de transport (advection, diffusion turbulente) et les processus de transformations chimiques dans la troposphère. Les variables météorologiques sont généralement déterminées avec un modèle météorologique global ou régional tel que MM5 (G. A. Grell, 1994) ou WRF (Skamarock *et al.*, 2005). Deux cas de figure sont possibles. Si toutes les variables nécessaires sont fournies par le modèle météorologique, le préprocesseur météorologique de CHIMERE interpole uniquement les variables sur le maillage 3D utilisé pour la simulation. Dans le cas où seules les variables principales telles que la vitesse du vent, la température, l'humidité et la pression sont fournies, le préprocesseur météorologique détermine aussi les autres variables météorologiques. Ces autres variables sont notamment la vitesse de frottement u_*, la vitesse de convection verticale w_*, la hauteur de la couche limite h_{CLA}, la longueur de Monin Obukhov L_{MO}, le flux de chaleur sensible Q_0, le nombre de Richardson R_{iB} et le

profil de diffusivité turbulente verticale K_z. Les données sur les précipitations sont aussi nécessaires pour prendre en compte les effets de lessivage. La modélisation de ces variables météorologiques est notamment décrite dans Menut *et al.* (2013). Les simulations CHIMERE sont très sensibles aux champs météorologiques. Aussi, il est nécessaire de bien modéliser ces champs météorologiques pour simuler correctement la dispersion de polluants.

Emissions

Les résultats du modèle CHIMERE sont fortement dépendants des données d'émissions. Le modèle tient compte des émissions anthropiques mais aussi des émissions naturelles. Les émissions sont modélisées comme des sources surfaciques (par exemple les émissions du trafic et les émissions biogéniques) ou bien comme des sources distribuées verticalement (par exemple les émissions des industries et les feux de biomasse). L'estimation des émissions anthropiques repose sur des bases de données. Celles-ci diffèrent selon l'échelle spatiale étudiée. Pour l'échelle continentale, il est notamment possible d'utiliser la base de données EMEP (*European Monitoring and Evaluation Programme*) pour l'Europe (Menut *et al.*, 2012) ou celle de l'US EPA (*United States Environmental Protection Agency*) pour les Etats-Unis (Solazzo *et al.*, 2012). Pour l'échelle régionale, la modélisation des émissions anthropiques s'appuie généralement sur des bases de données réalisées par des organismes locaux tels que les AASQA. Pour les émissions naturelles, CHIMERE distingue les émissions biogéniques, les émissions d'aérosols et les émissions naturelles intermittentes. Les émissions biogéniques représentent les flux de COV (Composé Organique Volatil) et de NO émis par la végétation. Celles-ci sont estimées avec le modèle MEGAN (Guenther, 2006). Dans la nature, les émissions d'aérosols minéraux proviennent notamment des déserts et des océans. Ces émissions sont modélisées avec des relations paramétriques en fonction du type de sol et de surface. Dans CHIMERE, il convient de préciser que les émissions biogéniques et les émissions d'aérosols minéraux dépendent aussi de la météorologie. Les émissions naturelles intermittentes concernent les émissions telles que les feux de forêt ou les éruptions volcaniques. Celles-ci sont estimées à partir d'observations satellitaires qui permettent par exemple d'évaluer la surface de forêt brulée.

conditions aux limites et conditions initiales

Les conditions aux limites correspondent aux quantités de polluants importés aux frontières du domaine. L'impact de ces conditions est plus ou moins important selon les dimensions du domaine d'étude. Szopa *et al.* (2009) indiquent qu'il est important d'utiliser un domaine suffisamment grand pour réduire les effets de bords et prendre en compte les processus de recirculation. Pour les simulations CHIMERE à l'échelle continentale, ces conditions sont généralement évaluées à partir d'un modèle global tel que LMDz-INCA (Folberth *et al.*, 2006), MOZART (Brasseur *et al.*, 1998) ou bien encore GOCART (Chin *et al.*, 2000). Pour les simulations à plus petite échelle, les conditions aux limites sont généralement déterminées avec une approche d'imbrication de domaines en réalisant plusieurs simulations à des échelles supérieures (Menut *et al.*, 2011).

Les conditions initiales définissent le point de départ des simulations. Ces conditions correspondent à un champ 3D de concentration qui coïncide avec le maillage utilisé pour la simulation CHIMERE. Celles-ci peuvent également être estimées avec un modèle global ou par une approche d'imbrication de domaines. Il est également possible de réaliser des simulations avec des conditions initiales nulles. Dans ce cas, il est nécessaire d'ajuster le *temps de transition* de simulation pour prendre en compte le transport à longue distance et les phénomènes de recirculation.

8.2 Simulation CHIMERE de référence

8.2.1 Mise en œuvre du modèle CHIMERE

Une simulation CHIMERE a été effectuée par Atmo Auvergne-Rhône-Alpes pour évaluer la qualité de l'air en 2014 sur l'ancienne région Rhône-Alpes. Cette simulation constitue la simulation CHIMERE de référence utilisée dans ces travaux de thèse pour le cas d'étude 2014. Cette simulation a été réalisée sur un maillage constituée de $149 \times 114 \times 8$ (ouest-est ; sud-nord ; hauteur) mailles avec une résolution horizontale de 3 km (figure 8.1) en utilisant le schéma d'advection *upwind* et le schéma chimique MELCHIOR II. Pour cette simulation, l'occupation des sols a été déterminée avec la base de données IGN BD TOPO®. Les données météorologiques ont été estimées à partir d'une simulation réalisée avec le modèle de météorologie WRF. Cette simulation météorologique a aussi été effectuée avec une résolution horizontale de 3 km. Les émissions biogéniques et les émissions anthropiques ont été respectivement modélisées avec le modèle MEGAN et à l'aide d'un inventaire des sources d'émissions réalisé par Atmo Auvergne-Rhône-Alpes (les émissions anthropiques sont identiques à celles utilisées pour la simulation SIRANE de référence sur le cas d'étude 2014). Aucune émission naturelle intermittente n'a été prise en compte pour cette simulation. Enfin, les conditions aux limites et les conditions initiales ont été évaluées avec une approche d'imbrication de type one-

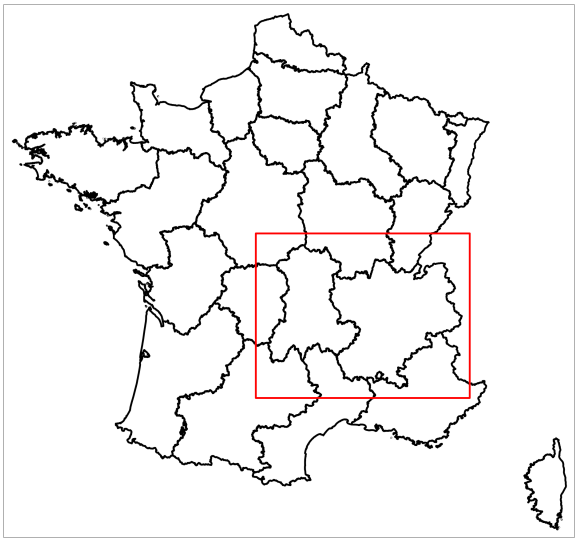


FIGURE 8.1 – Zone d'étude (cadre rouge) associée à la simulation CHIMERE

way nested en utilisant les résultats fournis par une simulation CHIMERE effectuée sur la France et une partie de l'Europe.

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous avons analysé les estimations fournies par cette simulation CHIMERE de référence et nous les avons comparés aux mesures de concentration. Cette analyse et cette comparaison font l'objet de la prochaine section.

8.2.2 Résultats de la simulation CHIMERE de référence pour le cas d'étude 2014

Pour analyser les résultats de la simulation CHIMERE, seuls les champs de concentration relatifs à la première couche du maillage (hauteur de 20 m) sont utilisés. Les cartes des concentrations moyennes de PM_{10} et de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise en 2014, modélisées avec la simulation CHIMERE, sont représentées sur la figure 8.2. A l'instar des cartes associées aux simulations SIRANE, ces deux cartes montrent que la ville de Lyon (au centre l'agglomération lyonnaise) est caractérisée par des concentrations relativement importantes par rapport aux autres zones de l'agglomération lyonnaise.

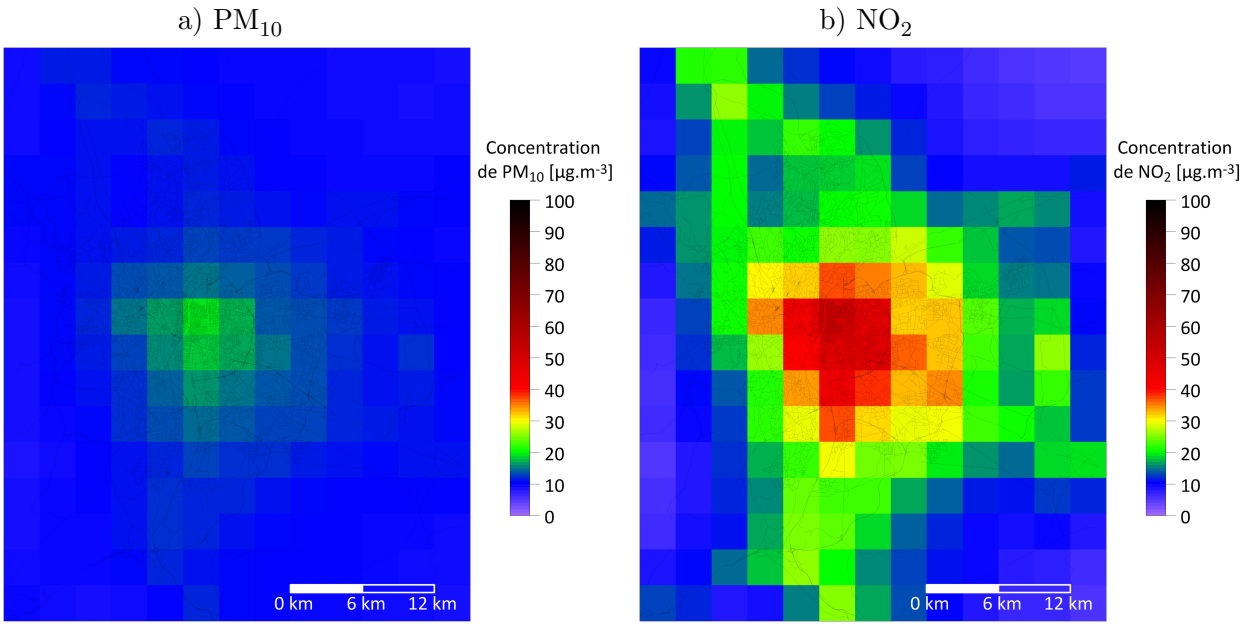


FIGURE 8.2 – Concentrations moyennes de PM_{10} (a) et de NO_2 (b) en $\mu g.m^{-3}$ sur l'agglomération lyonnaise pour l'année 2014, déterminées avec la simulation CHIMERE

La qualité de la simulation CHIMERE est évaluée en comparant ces résultats aux concentrations mesurées de PM_{10} et de NO_2. Il convient de rappeler que la simulation CHIMERE est réalisée avec une résolution de 3 km. Cette résolution ne permet pas de modéliser correctement les concentrations dans les zones proches du trafic routier, dans les zones urbaines ou dans les zones proches des industries où la variabilité spatiale des concentrations est relativement importante, de l'ordre de la dizaine de mètres. A titre d'illustration, la figure 8.3 représente un profil spatial horizontal de la

concentration dans une agglomération, avec toute sa variabilité, et les concentrations moyennées sur des mailles de 3 km, telles que fournies par CHIMERE. Aussi, bien que nous comparions également les estimations fournies par la simulation CHIMERE aux concentrations mesurées par les stations de type trafic, urbain et industrie, nous ne nous attendons pas à ce que les résultats soient satisfaisants pour ces stations. En revanche, la comparaison est a priori pertinente pour les stations de type fond qui sont en principe situées dans des zones où la variabilité spatiale des concentrations est relativement faible et de l'ordre de plusieurs kilomètres.

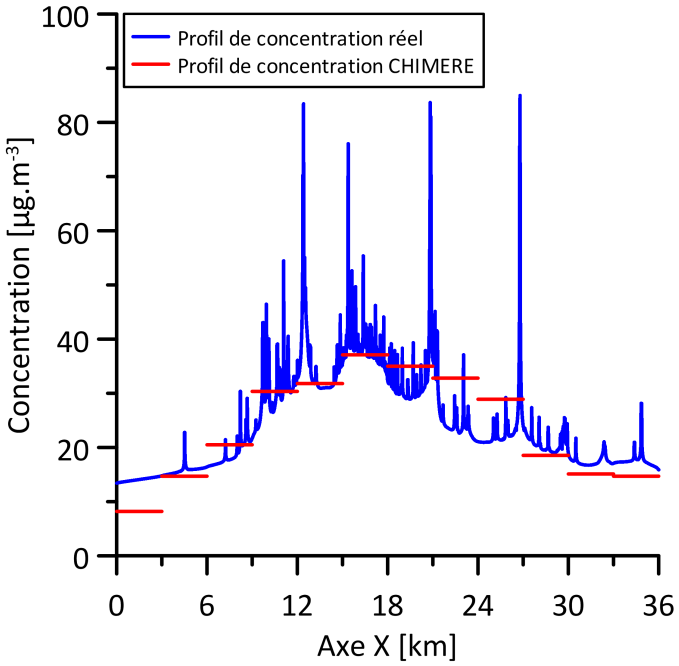


FIGURE 8.3 – Schématisation d'un profil de concentration réel en milieu urbain (ligne bleue) et d'un profil de concentration fourni par la simulation CHIMERE avec une résolution de 3 km (ligne rouge)

Les performances statistiques de la simulation CHIMERE sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 8.2. Le biais est important et positif pour toutes les stations de type fond. Ceci explique vraisemblablement le fait que le biais soit également positif pour les autres types de station. Cela signifie que la simulation CHIMERE sous-estime généralement les concentrations mesurées de PM_{10}. Cela peut être dû à plusieurs raisons : 1) les émissions de PM_{10} sont sous-estimées ou/et 2) les processus de transformation, l'écoulement et la dispersion atmosphérique ne sont pas correctement modélisés. De même, le coefficient de corrélation (r) est inférieur à 0.50 pour l'ensemble des stations. Ceci indique que la simulation CHIMERE ne reproduit pas de manière satisfaisante les valeurs horaires des concentrations mesurées de PM_{10}. Localement, les performances statistiques ne sont pas entièrement satisfaisantes car l'ensemble des critères de qualité associés aux indices statistiques n'est vérifié pour aucun des capteurs. Il convient de noter que la qualité des résultats associés aux stations de type trafic, urbain et industrie est comparable à celle des résultats relatifs aux stations de type fond malgré le fait que la simulation CHIMERE soit plus adaptée pour évaluer les concentrations mesurées par ce dernier type de stations en raison de la

résolution horizontale du maillage utilisé (3 km). De même, les performances globales, obtenues par une moyenne sur l'ensemble des capteurs, ne sont pas totalement satisfaisantes car le biais moyen, de 8.01 $\mu g.m^{-3}$, et le coefficient de corrélation moyen, de 0.44, ne vérifient pas les critères de qualité associés à ces indices statistiques.

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [$\mu g.m^{-3}$]	$\overline{c_p}$ [$\mu g.m^{-3}$]	Bias [$\mu g.m^{-3}$]	FB	RMSE [$\mu g.m^{-3}$]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	29.66	14.09	15.58	0.71	22.65	1.23	0.43	0.44
	GC	22.11	17.02	5.08	0.26	15.21	0.61	0.41	0.70
	LP	25.66	16.89	8.78	0.41	17.72	0.72	0.47	0.64
	TCR	26.12	19.03	7.09	0.31	19.58	0.77	0.36	0.63
Urbain	GER	23.28	15.64	7.64	0.39	16.03	0.71	0.45	0.65
	LC	20.84	19.11	1.72	0.09	14.98	0.56	0.41	0.74
	VeV	20.66	13.32	7.33	0.43	14.52	0.77	0.47	0.68
Industrie	FEY	22.70	12.86	9.84	0.55	16.66	0.95	0.43	0.59
	STF	22.49	15.80	6.68	0.35	15.46	0.67	0.43	0.69
Fond	COT	19.77	11.53	8.24	0.53	13.89	0.85	0.47	0.63
	GEN	20.98	12.75	8.23	0.49	15.02	0.84	0.46	0.67
	STE	19.71	11.04	8.67	0.56	14.48	0.96	0.45	0.61
	TER	21.25	11.98	9.27	0.56	15.41	0.93	0.45	0.60
Moyenne		22.71	14.70	8.01	0.43	16.28	0.81	0.44	0.64

TABLE 8.2 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation CHIMERE ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Les performances statistiques de la simulation CHIMERE sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2 sont indiquées dans le tableau 8.3. Le biais est négatif pour la plupart des stations. Cela signifie que la simulation CHIMERE surestime globalement les concentrations de NO_2 mesurées à ces stations. Cette surestimation est relativement élevée pour les stations Lyon centre, Saint-Just et Saint-Fons. Ceci peut sembler surprenant étant donné que les émissions sont relativement *diluées* dans la simulation CHIMERE en raison des dimensions assez importantes des mailles (3 km x 3 km sur le plan horizontal). Aussi, les concentrations mesurées à ces trois stations, qui sont situées à proximité de sources d'émissions relativement importantes, devraient en principe être sous-estimées. Cette surestimation peut être due à différentes raisons : 1) la modélisation des émissions est entaché d'erreurs ou/et 2) les réactions chimiques, l'écoulement et la dispersion atmosphérique ne sont pas correctement modélisés. De plus, le coefficient de corrélation (r) est inférieur à 0.60 pour tous les capteurs. Cela montre que la simulation CHIMERE ne modélise pas non plus de manière satisfaisante la variabilité temporelle des concentrations mesurées pour le NO_2. Localement, les performances statistiques ne sont pas totalement satisfaisantes car l'ensemble des critères de qualité relatifs aux indices statistiques n'est vérifié pour aucune des stations. Dans le cas du NO_2, la qualité

des résultats relatifs aux stations de type trafic, urbain et industrie est également comparable à celle des résultats associés aux stations de type fond alors que la simulation CHIMERE est plus adaptée pour estimer les concentrations mesurées par les stations de type fond en raison de la résolution horizontale du maillage utilisé (3 km). De même, les résultats globaux ne sont pas complètement satisfaisants car le coefficient de corrélation moyen, 0.48, ne vérifie pas le critère de qualité relatif à cet indice statistique.

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	71.81	34.02	37.79	0.71	58.86	1.42	0.24	0.38
	GC	42.59	45.47	-2.88	-0.07	29.35	0.44	0.54	0.68
	LP	53.53	47.27	6.27	0.12	34.28	0.46	0.51	0.66
	TCR	62.50	49.13	13.37	0.24	45.77	0.68	0.25	0.60
Urbain	GER	35.81	40.32	-4.51	-0.12	26.32	0.48	0.54	0.69
	LC	29.52	49.71	-20.19	-0.51	33.57	0.77	0.54	0.58
	STJ	29.57	42.61	-13.04	-0.36	28.49	0.64	0.59	0.64
	VeV	24.68	32.89	-8.21	-0.29	24.55	0.74	0.53	0.59
Industrie	FEY	25.25	29.67	-4.42	-0.16	25.24	0.85	0.38	0.55
	STF	29.72	43.68	-13.96	-0.38	28.99	0.65	0.57	0.66
Fond	COT	18.24	22.01	-3.77	-0.19	18.66	0.87	0.53	0.58
	GEN	29.45	32.16	-2.72	-0.09	22.61	0.54	0.50	0.63
	STE	13.71	18.84	-5.13	-0.32	15.98	0.99	0.53	0.56
	TER	22.87	25.00	-2.13	-0.09	20.48	0.73	0.52	0.60
Moyenne		34.95	36.63	-1.68	-0.11	29.51	0.73	0.48	0.60

TABLE 8.3 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, associées à la simulation CHIMERE ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Les performances statistiques de la simulation CHIMERE sur le cas d'étude 2014 sont aussi comparées à celles de la simulation SIRANE (figure 8.4). Cette comparaison porte uniquement sur les performances statistiques associées aux stations de type fond car la simulation CHIMERE n'est pas adaptée pour évaluer les concentrations mesurées par les stations de type trafic, urbain et industrie en raison de la résolution horizontale du maillage utilisé (3 km). Pour alléger l'analyse, cette comparaison est effectuée seulement pour le biais, l'erreur type et le coefficient de corrélation. Sur la figure 8.4, lorsque les points sont situées dans la zone verte (rouge), cela signifie que la simulation CHIMERE est meilleure (plus mauvaise) que la simulation SIRANE. De plus, lorsque les points sont situés sur les lignes vertes (rouges) en pointillés, cela signifie que la simulation CHIMERE est meilleure (plus mauvaise) que la simulation SIRANE de 20 %.

Pour les deux polluants, les biais associés aux stations de type fond sont sensiblement plus mauvais avec la simulation CHIMERE, excepté pour une station dans le cas du NO_2. Dans le cas des

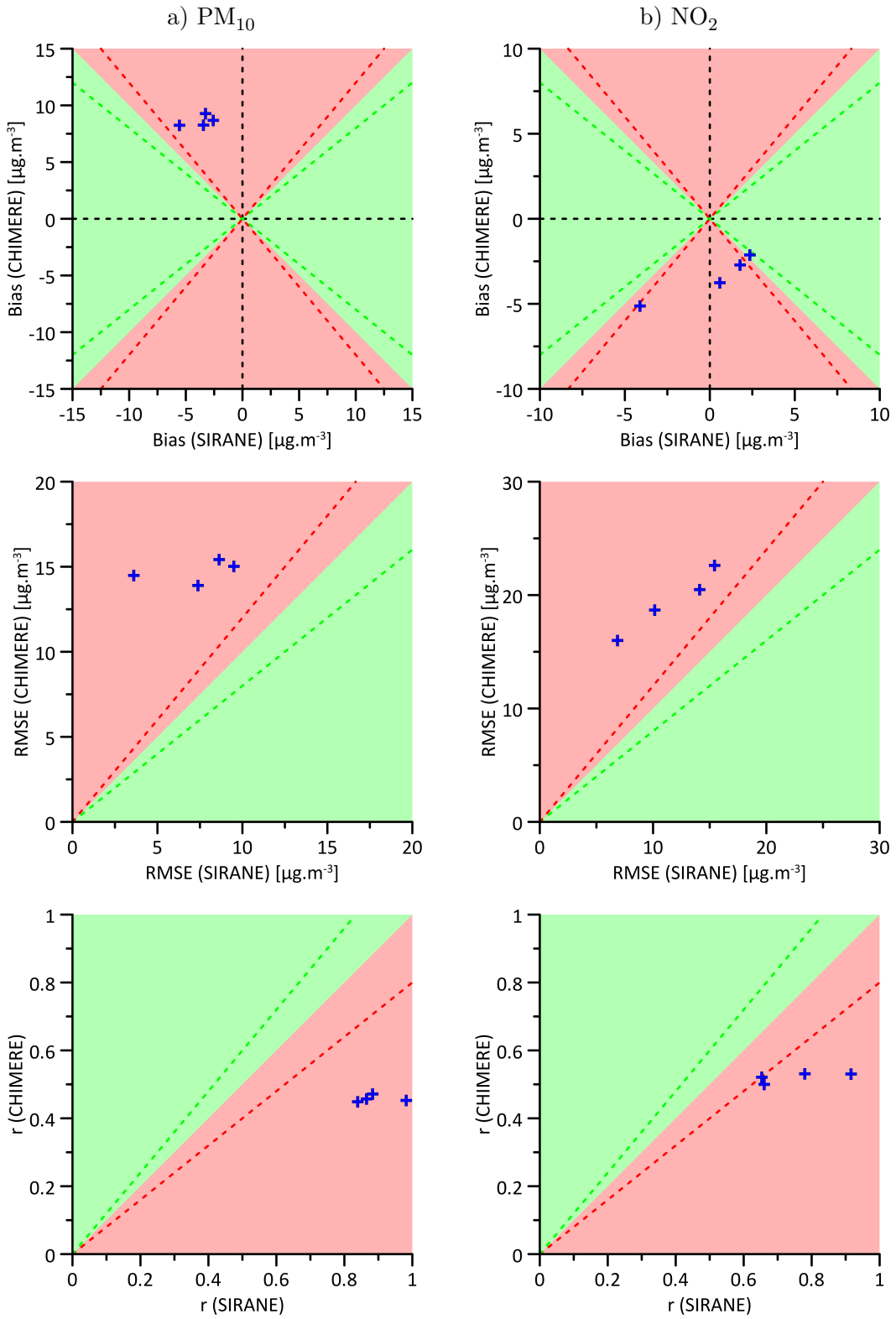


FIGURE 8.4 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés aux simulations CHIMERE et SIRANE pour les stations de type fond (zone verte (rouge) : CHIMERE est meilleur (plus mauvais) que SIRANE, ligne verte (rouge) en pointillés : CHIMERE est meilleur (plus mauvais) que SIRANE de 20 %)

PM_{10}, les biais montrent clairement que la simulation SIRANE a plutôt tendance à surestimer (biais négatifs) les concentrations mesurées par les stations de type fond alors que la simulation CHIMERE a plutôt tendance à les sous-estimer (biais positifs). De même, les erreurs types sont significativement plus élevées (plus mauvaises) avec la simulation CHIMERE dans les deux cas. Les coefficients de corrélation sont également beaucoup plus faibles (plus mauvais) avec la simulation CHIMERE pour les deux espèces. Globalement, cette comparaison montre que la simulation CHIMERE est moins satisfaisante que la simulation SIRANE pour le cas d'étude 2014. Il convient cependant de préciser que les résultats associés à la simulation SIRANE pour les stations de type fond sont particulièrement bons car cette simulation est *forcée* avec une concentration de fond qui correspond à la concentration mesurée à la station Saint-Exupéry de type fond.

8.3 Conclusion

CHIMERE est un modèle eulérien 3D qui simule la dispersion de polluants à méso-échelle. Les données d'entrée du modèle sont l'occupation des sols, la météorologie, les émissions, les conditions aux limites et les conditions initiales. Une simulation a été effectuée avec le modèle CHIMERE par l'AASQA Atmo Auvergne-Rhône-Alpes pour estimer la qualité de l'air en 2014 sur l'ancienne région Rhône-Alpes. Cette simulation constitue la simulation CHIMERE de référence pour le cas d'étude 2014. La comparaison des concentrations modélisées et mesurées montrent que les performances statistiques de la simulation CHIMERE ne sont pas satisfaisantes pour le cas d'étude 2014. Les résultats indiquent notamment que le coefficient de corrélation entre les concentrations horaires modélisées et mesurées est relativement faible. Cela signifie que la simulation ne reproduit pas de manière satisfaisante la variabilité temporelle des concentrations. De même, l'analyse des performances statistiques indique que les estimations pour les stations de type fond de la simulation CHIMERE sont moins satisfaisantes que celles de la simulation SIRANE (la comparaison entre les performances statistiques des deux modèles a été réalisée uniquement pour ce type de stations). Il convient néanmoins de signaler que la simulation SIRANE de référence est particulièrement bonne pour les stations de type fond car elle utilise une concentration de fond qui correspond à la concentration mesurée à l'une des stations de type fond.

Le modèle CHIMERE est utilisé dans le cadre de ce projet de recherche afin d'évaluer l'apport des méthodes d'imbrication de domaines pour estimer la qualité de l'air à l'échelle urbaine. Les méthodes utilisées pour coupler le modèle CHIMERE et le modèle SIRANE font l'objet du prochain chapitre.

Chapitre 9

Couplage du modèle à méso-échelle CHIMERE et du modèle urbain SIRANE

Les méthodes d'imbrication de domaines permettent d'évaluer la qualité de l'air en prenant en compte plusieurs échelles de dispersion atmosphérique. Dans le cadre de ce projet de recherche, ces méthodes sont appliquées pour coupler deux modèles de dispersion atmosphérique, un à méso-échelle et un à l'échelle urbaine, afin d'estimer les concentrations de polluants en milieu urbain. Le couplage consiste à déterminer les conditions aux limites d'une simulation à l'échelle urbaine à partir d'une simulation à l'échelle régionale. Trois approches de type one-way nested sont étudiées pour réaliser ce couplage. La première approche consiste à déterminer la concentration de fond pour une simulation à l'échelle urbaine à partir d'une simulation à l'échelle régionale. Cette approche est globalement identique à celle de Brandt *et al.* (2001), Soulhac *et al.* (2003) et Beevers *et al.* (2012). Par la suite, cette approche est nommée *estimation de la concentration de fond* (ECF). La seconde approche est celle proposée par Stocker *et al.* (2012) qui consiste à utiliser un modèle urbain et un modèle à méso-échelle pour estimer respectivement le champ de concentration des polluants jeunes et celui des polluants anciens. Cette seconde approche est ultérieurement surnommée *approche de Stocker*. La troisième approche suppose qu'en milieu urbain, la variabilité spatiale des concentrations est mieux représentée par le modèle urbain mais que les concentrations moyennes spatiales à l'échelle kilométrique sont déterminées de manière plus satisfaisante avec le modèle à méso-échelle. Cette dernière approche est ensuite appelée *estimation de la variabilité spatiale des concentrations* (EVSC). Dans ce travail de thèse, ces trois approches sont évaluées sur le cas d'étude 2014 en couplant le modèle à méso-échelle CHIMERE et le modèle urbain SIRANE.

Les trois premières sections de ce chapitre (sections 9.1, 9.2 et 9.3) consistent à décrire les trois approches de couplage, à étudier les termes qui interviennent dans ces approches et à analyser les résultats obtenus avec celles-ci sur le cas d'étude 2014. De plus, les résultats obtenus avec les trois approches de couplage sont comparés entre elles dans la quatrième section (section 9.4).

9.1 Estimation de la concentration de fond (ECF)

9.1.1 Description l'approche ECF

L'approche ECF consiste à estimer la concentration de fond (c_{F}), pour une simulation à l'échelle urbaine, à partir d'une simulation à l'échelle régionale. La concentration de fond correspond à la concentration dans le domaine d'étude (domaine associé à la simulation à l'échelle urbaine dans notre cas) induite par :

— les polluants émis à l'extérieur du domaine d'étude

— les polluants émis dans le domaine d'étude, qui sont sortis puis revenus dans celui-ci

Autrement dit, c_{F} correspond à la concentration dans le domaine d'étude induite par les polluants provenant de l'extérieur de ce domaine. La concentration de fond n'est pas homogène, horizontalement et verticalement, dans le domaine d'étude. Néanmoins, elle est parfois supposée uniforme (0D), notamment avec le modèle SIRANE, ou bidimensionnelle (2D) (Brandt *et al.*, 2001 ; Soulhac *et al.*, 2003 ; Beevers *et al.*, 2012 ; Stocker *et al.*, 2012). Dans certain cas, c_{F} est estimée à partir de mesures de concentration (Giambini *et al.*, 2010 ; Tchepel *et al.*, 2010 ; Dědelě et Miškinytė, 2015), effectuées sur des zones éloignées des sources d'émissions, qui sont *supposées* être représentatives de la concentration de fond (pour les simulations SIRANE de référence de ce projet de recherche, c_{F} est notamment évaluée avec cette approche). De même, c_{F} est parfois évaluée à l'aide d'une simulation à plus grande échelle (Brandt *et al.*, 2001 ; Soulhac *et al.*, 2003 ; Beevers *et al.*, 2012). Avec les modèles eulériens, la concentration de fond est simulée en imposant des conditions aux limites aux frontières du domaine d'étude, évaluées à partir de la simulation à plus grande échelle, afin de modéliser la dispersion (dans le domaine d'étude) des polluants entrant par celles-ci (Rouil *et al.*, 2009 ; Tombrou *et al.*, 2009 ; Menut *et al.*, 2013). En revanche, pour les modèles gaussiens ou les modèles de réseau de rues comme SIRANE, c_{F} n'est pas modélisée à partir des concentrations aux frontières du domaine d'étude. Dans ce cas, elle doit être explicitement fournie en donnée d'entrée. Ainsi, ces modèles déterminent la concentration *finale* au point p à l'instant t, $c(p,t)$, avec l'expression 9.1 :

$$c(p,t) = c_{\mathrm{F}}(p,t) + c_{\mathrm{D}}(p,t) \tag{9.1}$$

où $c_{\mathrm{D}}(p,t)$ est la concentration induite par les polluants émis dans le domaine d'étude, qui ne sont pas sortis de celui-ci. Pour ces modèles, l'estimation de c_{F} à partir d'une simulation à plus grande échelle est complexe car il est compliqué de distinguer la contribution des polluants provenant de l'extérieur du domaine urbain, c_{F}, de la contribution des polluants provenant du domaine urbain, c_{D} (qui ne sont pas sortis de celui-ci).

Dans cette étude, nous utilisons plusieurs méthodes pour évaluer une concentration de fond 0D ou 2D, pour une simulation à l'échelle urbaine, à partir d'une simulation à l'échelle régionale. La mise en œuvre de ces méthodes est relativement simple. De plus, elles ont un coût en temps de calcul relativement faible puisqu'il est nécessaire de ne réaliser qu'une seule simulation pour chaque échelle. Ces méthodes sont décrites dans la suite de cette section. Par la suite, D fait référence à l'ensemble

des mailles de la simulation à l'échelle régionale appartenant au *domaine urbain* (domaine associé à la simulation à l'échelle urbaine) (figure 9.1). De même, B correspond à l'ensemble des mailles de la simulation à l'échelle régionale adjacentes au domaine urbain (figure 9.1). La zone recouverte par B est appelée *zone adjacente*.

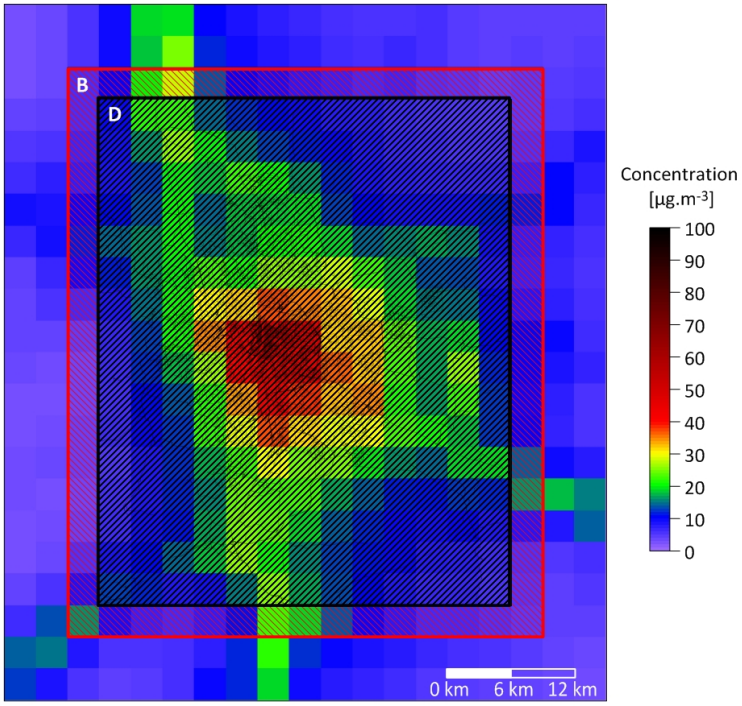


FIGURE 9.1 – Schématisation de D et B : D correspond à l'ensemble des mailles, du modèle régional, appartenant au domaine urbain (cadre noir) ; B correspond à l'ensemble des mailles, du modèle régional, adjacentes au domaine urbain (mailles situées entre le cadre noir et le cadre rouge)

Concentration de fond 0D

La concentration de fond est parfois supposée uniforme (0D) dans les modèles urbains. C'est notamment le cas dans le modèle SIRANE. Il est difficile de déterminer une concentration de fond uniforme à partir d'une simulation à l'échelle régionale car celle-ci fournit des concentrations qui varient horizontalement (figure 9.2) et verticalement. Dans le cadre de ce travail de thèse, nous appliquons cinq méthodes pour évaluer une concentration de fond 0D à partir d'une simulation à l'échelle régionale :

— **Méthode 0D-Min** : en associant c_{F} à l'une des concentrations dans le domaine urbain, il est probable que le champ de concentration *final*, déterminé à l'issue du couplage, soit entaché d'une erreur relative à un double comptage de certaines émissions. En effet, les concentrations associées aux mailles de D sont également influencées par les polluants qui ont été émis dans le domaine urbain et qui ne sont pas sortis de celui-ci. Or, ces polluants sont pris en compte dans la simulation à l'échelle urbaine et ne contribuent donc pas à c_{F}. L'effet de double comptage

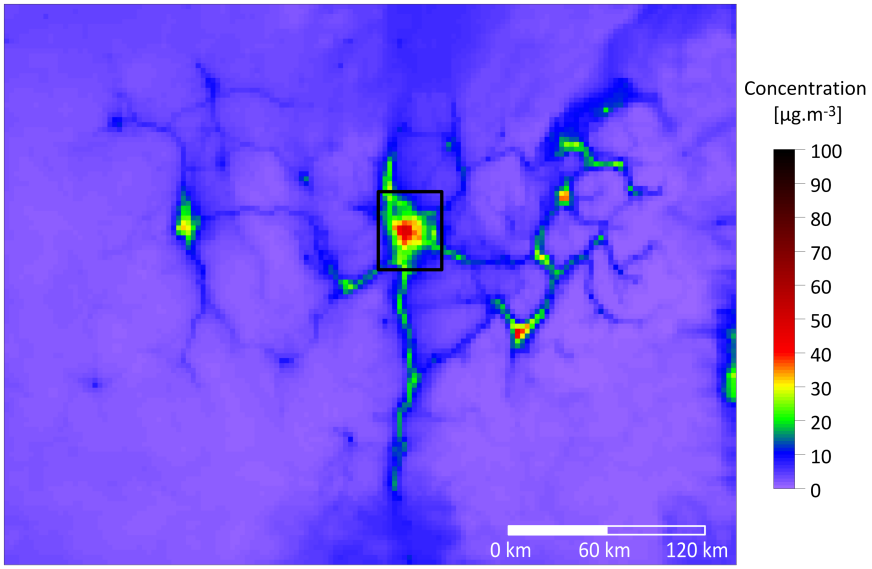


FIGURE 9.2 – Représentation d'un champ de concentration au sol (première couche du maillage) fourni par la simulation CHIMERE sur l'ancienne région Rhône-Alpes (le cadre noir correspond au domaine d'étude de la simulation SIRANE pour le cas d'étude 2014)

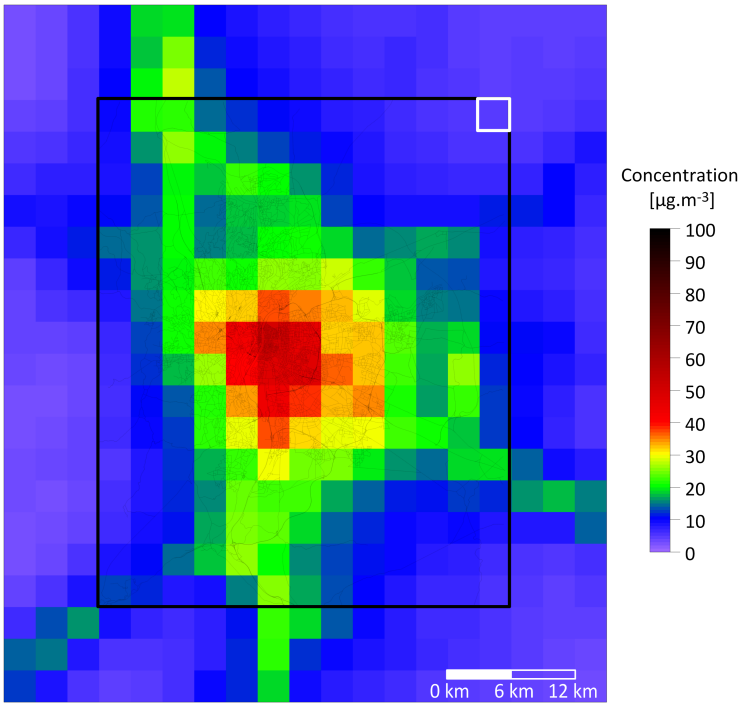


FIGURE 9.3 – Principe de la méthode 0D-Min : la concentration de fond correspond à la concentration minimum (carré blanc) dans le domaine urbain (cadre noir)

est notamment présent dans l'étude de Beevers *et al.* (2012). Pour minimiser l'effet de double comptage, la méthode 0D-Min suppose que c_{F} est égale à la concentration minimum dans le domaine urbain (figure 9.3). Aussi, la concentration de fond à l'instant t, $c_{\mathrm{F}}(t)$, est déterminée avec l'expression 9.2 :

$$c_{\mathrm{F}}(t) = \min_{M_{\mathrm{D}} \in \mathrm{D}} (c_{\text{régional}}(M_{\mathrm{D}}, t)) \tag{9.2}$$

où $c_{\text{régional}}(M_{\mathrm{D}}, t)$ est la concentration, fournie par le modèle régional, qui est associée à la maille M_{D} (appartenant à D) à l'instant t.

— **Méthode 0D-Périph-Min** : il est possible d'éviter l'effet de double comptage en utilisant uniquement les concentrations modélisées à la frontière du domaine urbain. Pour éviter cet effet, la méthode 0D-Périph-Min considère que c_{F} est égale à la concentration minimum dans la zone adjacente. Dans ce cas, $c_{\mathrm{F}}(t)$ est estimée avec l'équation 9.3.

$$c_{\mathrm{F}}(t) = \min_{M_{\mathrm{B}} \in \mathrm{B}} (c_{\text{régional}}(M_{\mathrm{B}}, t)) \tag{9.3}$$

où $c_{\text{régional}}(M_{\mathrm{B}}, t)$ est la concentration, estimée avec le modèle régional, qui est relative à la maille M_{B} (appartenant à B) à l'instant t.

— **Méthode 0D-Périph-Moy** : la concentration de fond est potentiellement importée depuis plusieurs parties de la zone adjacente. Aussi, la méthode 0D-Périph-Moy assimile c_{F} à la moyenne des concentrations sur la zone adjacente. Avec cette méthode, $c_{\mathrm{F}}(t)$ est évaluée avec l'équation 9.4 :

$$c_{\mathrm{F}}(t) = \frac{1}{\dim(\mathrm{B})} \sum_{M_{\mathrm{B}} \in \mathrm{B}} c_{\text{régional}}(M_{\mathrm{B}}, t) \tag{9.4}$$

où dim(B) correspond au nombre de mailles qui composent B.

— **Méthode 0D-Amont-Centre** : une autre démarche consiste à rechercher la quantité de polluant importée aux frontières du domaine urbain. La méthode 0D-Amont-Centre utilise cette démarche et associe c_{F} à la concentration, dans la zone adjacente, qui est située en amont du centre du domaine urbain (figure 9.4). Aussi, $c_{\mathrm{F}}(t)$ est évaluée avec la formule 9.5 :

$$c_{\mathrm{F}}(t) = c_{\text{régional}}(M_A(\mathrm{B}), t) \tag{9.5}$$

où M_A est la maille de B située en amont du centre du domaine urbain.

— **Méthode 0D-Amont-Moy** : étant donné que la concentration de fond est potentiellement importée depuis plusieurs parties de la zone adjacente, la méthode 0D-Amont-Moy suppose que c_{F} est égale à la moyenne des concentrations, dans la zone adjacente, situées en amont de chaque maille de D. Avec cette alternative, $c_{\mathrm{F}}(t)$ est évaluée avec l'équation 9.6 :

$$c_{\mathrm{F}}(t) = \frac{1}{\dim(\mathrm{D})} \sum_{M_{\mathrm{D}} \in \mathrm{D}} c_{\text{régional}}(M_{\mathrm{B}}(M_{\mathrm{D}}), t) \tag{9.6}$$

où dim(D) est le nombre de mailles de D et $c_{\text{régional}}(M_{\mathrm{B}}(M_{\mathrm{D}}), t)$ correspond à la concentration

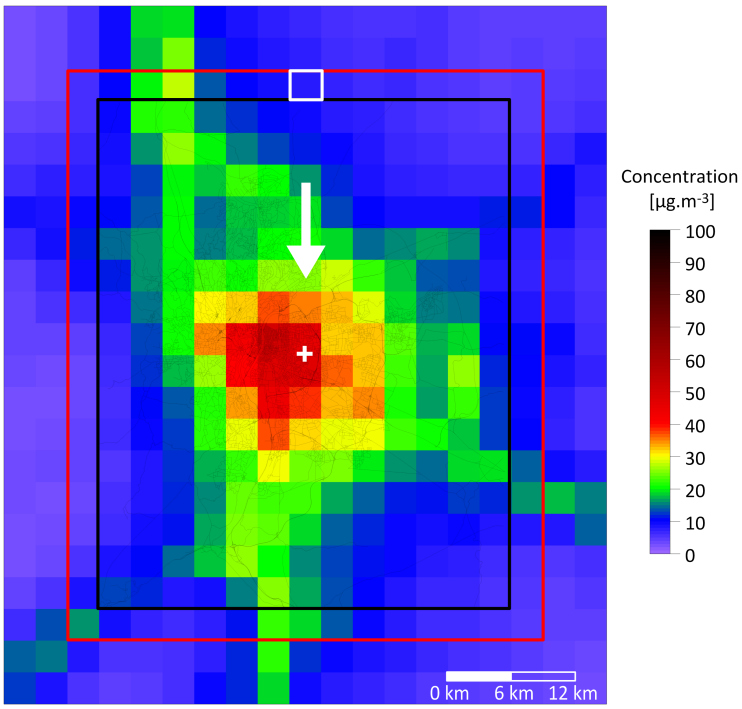


FIGURE 9.4 – Principe de la méthode 0D-Amont-Centre : la concentration de fond (carré blanc) correspond à la concentration, dans la zone adjacente au domaine urbain (zone entre le cadre rouge et le cadre noir qui représente le domaine urbain), qui est située en amont (la flèche blanche représente la direction du vent) du centre du domaine urbain (croix blanche)

associée à la maille de B située en amont de la maille M_{D} (appartenant à D) à l'instant t.

Avec les deux dernières méthodes, la direction *amont* est déterminée en utilisant le champ de vent utilisé par la simulation à l'échelle régionale. L'approche consiste à définir la direction amont en fonction de la direction du vent moyen. Celle-ci est évaluée en calculant la moyenne des composantes u (composante ouest-est) et v (composante sud-nord) des vitesses de vent dans le domaine urbain.

Concentration de fond 2D

Il est plus réaliste de considérer que la concentration de fond varie spatialement. Avec l'approche ECF, nous utilisons deux méthodes pour estimer une concentration de fond 2D :

— **Méthode 2D-Urbain** : cette méthode suppose que c_{F} est égale aux concentrations dans le domaine urbain estimées par le modèle régional (équation 9.7).

$$c_{\mathrm{F}}(M_{\mathrm{D}}, t) = c_{\text{régional}}(M_{\mathrm{D}}, t) \tag{9.7}$$

Avec cette méthode, le champ de concentration *final*, déterminé à l'issue du couplage, comptabilise deux fois la contribution de certaines émissions (comme pour la méthode 0D-Min). Etant donné que les émissions sont relativement diluées dans les simulations à l'échelle régionale, en raison des dimensions assez importantes des mailles, l'effet de double comptage est supposé

négligeable avec la méthode 2D-Urbain.

— **Méthode 2D-Amont** : pour éviter l'effet de double comptage, la méthode 2D-Amont considère que la concentration de fond dans la maille M_{D} (appartenant à D) à l'instant t, $c_{\mathrm{F}}(M_{\mathrm{D}}, t)$, est égale à la concentration dans la maille située en amont de M_{D}, appartenant à B, au même instant (équation 9.8).

$$c_{\mathrm{F}}(M_{\mathrm{D}}, t) = c_{\text{régional}}(M_{\mathrm{B}}(M_{\mathrm{D}}), t) \tag{9.8}$$

La méthode 2D-Urbain est globalement une variante 2D de la méthode 0D-Amont-Centre. La direction amont est déterminée, comme pour les méthodes 0D-Amont-Centre et 0D-Amont-Moy, à partir de la direction du vent moyen.

9.1.2 Analyse de la concentration de fond estimée avec l'approche ECF sur le cas d'étude 2014

En 2008, la contribution moyenne annuelle en PM_{10} de la concentration de fond est estimée, avec le module source apportionment de SIRANE, à 88 % pour la station Cotière de l'Ain (COT) et à 90 % pour la station Saint-Exupéry (STE) (6.4). Dans le cas du NO_2, elle est respectivement évaluée, avec la méthode SA-NOX, à 75 % et à 84 %. De plus, le coefficient de corrélation entre les mesures fournies par ces stations en 2014 est de 0.90 dans le cas des PM_{10} et de 0.75 dans le cas du NO_2. Ces résultats montrent que les concentrations mesurées à ces stations sont représentatives de la concentration de fond. Les concentrations moyennes mesurées à ces stations sont légèrement différentes (PM_{10} : 19.77 μg.m^{-3} (COT) et 19.71 μg.m^{-3} (STE) ; NO_2 : 18.24 μg.m^{-3} (COT) et 13.71 μg.m^{-3} (STE)). Ceci confirme que la concentration de fond n'est pas homogène spatialement.

L'objectif de cette sous-section est de comparer les concentrations de fond évaluées, avec l'approche ECF à partir de la simulation CHIMERE de référence, et les concentrations mesurées aux stations Cotière de l'Ain (COT) et Saint-Exupéry (STE), qui sont a priori représentatives de la concentration de fond, pour le cas d'étude 2014. Les concentrations de fond modélisées doivent être relativement corrélées avec les mesures fournies par les stations COT et STE. De plus, pour les polluants inertes, c_{F} doit être relativement similaire aux concentrations mesurées à ces stations. De même, c_{F} ne doit pas être supérieure aux mesures. Le modèle SIRANE, qui sera couplé au modèle CHIMERE, considère notamment les PM_{10} comme des polluants inertes. Cependant, les concentrations de NO_2 sont influencées, dans le modèle SIRANE, par les réactions chimiques associées au cycle de Chapman. Dans ce cycle, les NO_x ($NO+NO_2$) sont néanmoins considérés comme des polluants inertes. Aussi, cette comparaison porte sur les concentrations de fond en PM_{10} et en NO_x. Les distributions des écarts entre les concentrations de fond, déterminées avec les méthodes de l'approche ECF, et les mesures aux stations COT et STE sont représentées sur la figure 9.5 ($\delta c = c_{\mathrm{F}} - c_{\text{mesure}}$). Dans le cas des PM_{10}, les distributions des écarts δc sont comparables. Globalement, ces distributions indiquent que les concentrations de fond estimées avec l'approche ECF sont fréquemment inférieures aux mesures des stations COT et STE. De plus, le nombre d'occurrences où δc est inférieure à $-20.00\,\mu$g.m^{-3} n'est pas négligeable. Aussi, il est possible que ces concen-

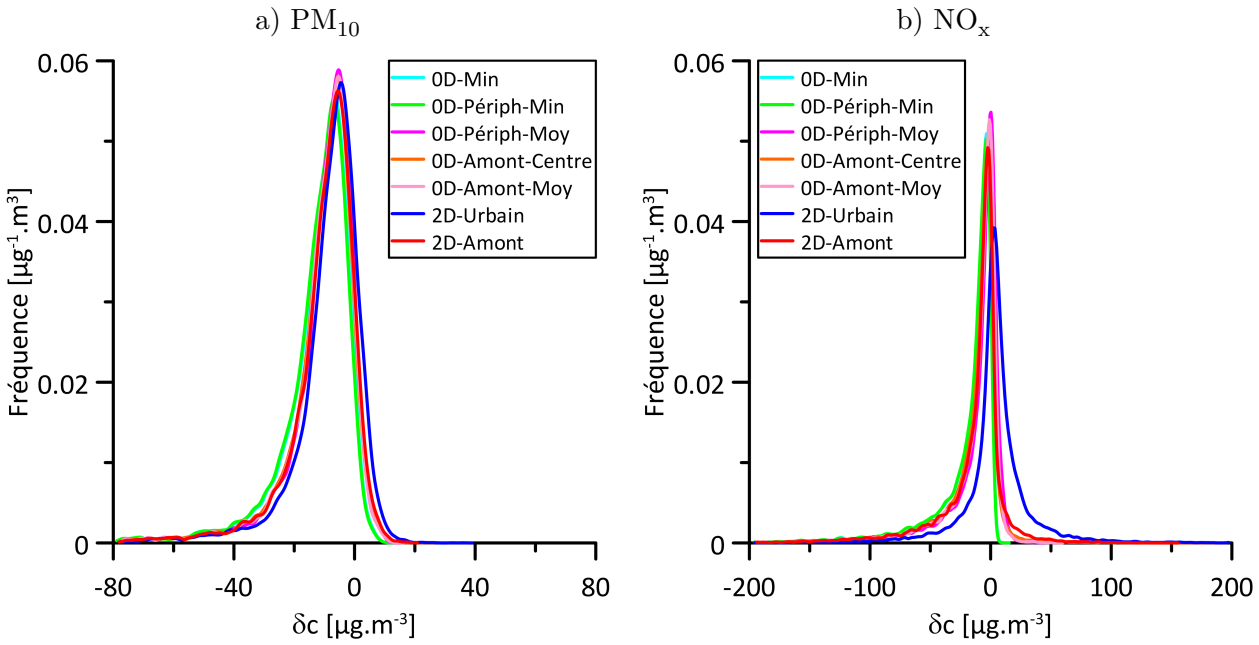


FIGURE 9.5 – Distribution des écarts concentration de fond-mesure ($\delta c = c_{\text{fond}} - c_{\text{mesure}}$) aux stations Cotière de l'Ain et Saint-Exupéry pour les PM_{10} (a) et les NO_x (b)

trations de fond sous-estiment la concentration de fond réelle en PM_{10}. Cela peut être dû au fait que la simulation CHIMERE de référence, à partir de laquelle les concentrations de fond sont estimées, sous-estime globalement les mesures de PM_{10} (sous-section 8.2.2). Il convient de noter que les concentrations de fond surestiment (δc positif) parfois les concentrations mesurées à ces deux stations. Dans le cas des NO_x, la distribution des écarts δc associée à la méthode 2D-Urbain est plus *étalée* que celles associées aux autres méthodes. Cette distribution montre que la concentration de fond excède souvent les mesures de ces deux stations. Aussi, il est probable que cette concentration de fond surestime fréquemment la concentration de fond réelle en NO_x. Les distributions des écarts δc relatives aux autres méthodes sont relativement similaires. Celles-ci montrent que les concentrations de fond sous-estiment fréquemment les mesures de NO_x à ces deux stations. De même, ces distributions indiquent que le nombre d'occurrences où δc est inférieure à $-30.00\,\mu g.m^{-3}$ n'est pas négligeable. Cette première analyse indique que la concentration de fond en NO_x déterminée avec la méthode 2D-Urbain n'est probablement pas représentative de la concentration de fond réelle en NO_x sur l'agglomération lyonnaise pour l'année 2014.

Les indices statistiques relatifs à la comparaison des concentrations de fond modélisées et des mesures fournies par les stations COT et STE sont indiquées sur les tableaux 9.1 et 9.2. Pour les deux polluants, les indices statistiques indiquent que l'écart global et les écarts locaux entre les concentrations de fond modélisées et les concentrations mesurées à ces deux stations sont relativement importants, notamment dans le cas des NO_x. De même, les coefficients de corrélation montrent que les concentrations de fond modélisées ne sont pas significativement corrélées avec les mesures fournies par les stations COT et STE. Ceci signifie a priori que les concentrations de fond modéli-

sées ne reproduisent pas de manière satisfaisante la variabilité temporelle des concentrations de fond réelles. Cela est probablement dû au fait que ces concentrations de fond sont modélisées à partir des résultats de la simulation CHIMERE de référence qui sont relativement peu corrélés avec les mesures. Cette seconde analyse indique que les concentrations de fond modélisées avec l'approche ECF ne sont vraisemblablement pas représentatives des concentrations de fond réelles en PM_{10} et en NO_x sur l'agglomération lyonnaise pour l'année 2014.

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
0D-Min	19.74	7.16	12.58	0.93	17.45	2.15	0.36	0.34
0D-Périph-Min		6.85	12.89	0.97	17.73	2.33	0.34	0.31
0D-Périph-Moy		9.35	10.39	0.71	15.44	1.29	0.49	0.51
0D-Amont-Centre		8.86	10.88	0.76	15.95	1.45	0.42	0.46
0D-Amont-Moy		7.96	11.78	0.85	16.75	1.79	0.38	0.39
2D-Urbain		11.28	8.46	0.55	14.19	0.90	0.46	0.62
2D-Amont		9.06	10.68	0.74	15.79	1.39	0.43	0.47

TABLE 9.1 – Comparaison des mesures et des concentrations de fond en PM_{10}, évaluées avec l'approche ECF, aux stations Cotière de l'Ain et Saint-Exupéry sur le cas d'étude 2014 ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2 ; les indices statistiques sont obtenus par une moyenne sur les deux capteurs)

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
0D-Min	23.37	2.56	20.81	1.61	37.86	23.97	0.44	0.11
0D-Périph-Min		2.17	21.20	1.66	38.26	28.82	0.39	0.09
0D-Périph-Moy		10.12	13.25	0.79	31.82	4.28	0.53	0.48
0D-Amont-Centre		7.43	15.94	1.03	34.95	7.03	0.30	0.28
0D-Amont-Moy		5.32	18.05	1.26	35.15	9.94	0.42	0.23
2D-Urbain		27.53	-4.16	-0.16	32.99	1.69	0.52	0.51
2D-Amont		5.94	17.43	1.19	34.98	8.82	0.36	0.26

TABLE 9.2 – Comparaison des mesures et des concentrations de fond en NO_x, évaluées avec l'approche ECF, aux stations Cotière de l'Ain et Saint-Exupéry sur le cas d'étude 2014 ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2 ; les indices statistiques sont obtenus par une moyenne sur les deux capteurs)

9.1.3 Résultats du couplage avec l'approche ECF sur le cas d'étude 2014

L'apport de l'approche ECF est étudié sur le cas d'étude 2014 en couplant le modèle CHIMERE et le modèle SIRANE. Ce couplage est réalisé en effectuant une simulation SIRANE avec les mêmes données d'entrée, à l'exception des concentrations de fond, que la simulation SIRANE de référence en 2014. Pour ce couplage, le modèle SIRANE utilise les concentrations de fond estimées à partir de la simulation CHIMERE de référence avec les méthodes de l'approche ECF. Il convient de signaler que les concentrations de fond modélisées avec l'approche ECF peuvent être *meilleures* (plus représentatives des concentrations de fond réelles) que celles utilisées pour la simulation SIRANE de référence mais qu'elles peuvent conduire à une erreur globale (quantifiée par les indices Bias et FB) plus importante. C'est notamment le cas si les erreurs associées aux concentrations de fond (utilisées pour la simulation SIRANE de référence) compensent d'autres erreurs (par exemple les erreurs de modélisation des émissions). Néanmoins, si les concentrations de fond modélisées avec l'approche ECF sont meilleures, les erreurs locales relatives aux estimations obtenues avec l'approche de couplage ECF devraient vraisemblablement être plus faibles que celles de la simulation SIRANE de référence. Aussi, nous nous focaliserons essentiellement sur les indices statistiques RMSE (ou NMSE) et r pour comparer les résultats associés à l'approche de couplage ECF et ceux de la simulation SIRANE de référence.

Les performances statistiques globales (obtenues par une moyenne sur l'ensemble des capteurs) associées à l'approche de couplage ECF sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 9.3. Le biais moyen (Bias moyen) est toujours positif avec l'approche ECF (excepté avec la méthode 2D-Urbain). Cela signifie que les simulations effectuées avec l'approche de couplage

Méthode		$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
CHIMERE		22.71	14.70	8.01	0.43	16.28	0.81	0.44	0.64
SIRANE			28.78	-6.08	-0.23	11.74	0.22	0.80	0.85
ECF	0D-Min		16.24	6.47	0.36	16.36	0.79	0.33	0.66
	0D-Périph-Min		15.92	6.79	0.38	16.53	0.83	0.32	0.65
	0D-Périph-Moy		18.42	4.29	0.23	15.27	0.58	0.40	0.73
	0D-Amont-Centre		17.93	4.78	0.26	15.55	0.63	0.38	0.71
	0D-Amont-Moy		18.13	4.58	0.24	15.44	0.61	0.39	0.72
	2D-Urbain		23.81	-1.10	-0.01	17.06	0.55	0.41	0.72
	2D-Amont		18.10	4.61	0.24	15.48	0.61	0.38	0.72

TABLE 9.3 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation CHIMERE de référence, à la simulation SIRANE de référence et à l'approche de couplage ECF ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

ECF sous-estiment généralement les mesures de PM_{10}. Cela peut être dû à une sous-estimation de la concentration de fond réelle en PM_{10}. Cette hypothèse est relativement cohérente avec les distributions des écarts δc associées aux concentrations de fond estimées avec les méthodes de l'approche ECF (figure 9.5). Le coefficient de corrélation moyen (r moyen) est relativement faible avec l'approche ECF. Cette faible corrélation est peut-être liée au fait que la variabilité temporelle de la concentration de fond réelle en PM_{10} n'est pas correctement reproduite. Ceci est relativement cohérent avec les coefficients de corrélation, relativement faibles, entre les concentrations de fond, évaluées avec l'approche ECF, et les mesures de PM_{10} associées aux stations COT et STE (tableau 9.1). Aussi, les performances statistiques globales relatives à l'approche ECF ne sont pas totalement satisfaisantes pour les PM_{10} car le critère de qualité associé au coefficient de corrélation n'est vérifié pour aucune des méthodes. Les performances globales associées aux différentes méthodes de l'approche ECF sont du même ordre de grandeur. De même, elles sont comparables à celles de la simulation CHIMERE de référence. Cependant, elles sont moins satisfaisantes que celles de la simulation SIRANE de référence, avec notamment un NMSE moyen plus élevé (plus mauvais) et un coefficient de corrélation moyen sensiblement plus faible (plus mauvais). La différence significative entre les performances globales de la simulation SIRANE de référence et celles de l'approche ECF pour les PM_{10} souligne l'importance de la contribution associée à la concentration de fond en PM_{10}. Pour rappel, la contribution en PM_{10} de la concentration de fond, estimée avec le module source apportionment de SIRANE, est supérieure à 50 % pour l'ensemble des stations sur le cas d'étude 2008.

Les performances statistiques globales associées à l'approche de couplage ECF sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2 sont indiquées dans le tableau 9.4. Comme pour les PM_{10}, les simulations ef-

Méthode		$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
CHIMERE		34.95	36.63	-1.68	-0.11	29.51	0.73	0.48	0.60
SIRANE			31.65	3.29	0.05	20.96	0.38	0.64	0.73
ECF	0D-Min		17.16	17.79	0.70	30.24	1.86	0.22	0.43
	0D-Périph-Min		21.01	13.94	0.52	28.04	1.35	0.30	0.50
	0D-Périph-Moy		32.86	2.09	0.04	23.85	0.54	0.52	0.66
	0D-Amont-Centre		30.65	4.30	0.13	24.72	0.67	0.48	0.62
	0D-Amont-Moy		31.57	3.38	0.09	24.26	0.59	0.50	0.64
	2D-Urbain		54.48	-19.53	-0.47	34.53	0.74	0.54	0.54
	2D-Amont		31.28	3.67	0.10	24.69	0.64	0.48	0.62

TABLE 9.4 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, associées à la simulation CHIMERE de référence, à la simulation SIRANE de référence et à l'approche de couplage ECF ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

fectuées avec l'approche ECF sous-estiment (Bias moyen positif) globalement les mesures de NO_2, hormis avec la méthode 2D-Urbain. La raison qui explique cette sous-estimation est potentiellement la même que celle évoquée dans le cas des PM_{10}. Néanmoins, il convient de signaler que les concentrations de NO_2 sont influencées par les réactions chimiques associées au cycle de Chapman. Aussi, il est possible que les erreurs relatives aux concentrations modélisées de NO_2 avec l'approche ECF soient en partie dues à des erreurs associées à la modélisation des concentrations de NO et/ou de O_3. Dans le cas du NO_2, le coefficient de corrélation moyen est aussi relativement faible avec l'approche ECF. Cela est potentiellement dû à la même raison que dans le cas des PM_{10}. Aussi, les performances statistiques globales associées à l'approche ECF ne sont pas entièrement satisfaisantes pour le NO_2 puisque l'ensemble des critères de qualité relatifs aux indices statistiques n'est vérifié pour aucune des méthodes. Les performances statistiques globales associées aux méthodes 0D-Périph-Moy, 0D-Amont-Centre, 0D-Amont-Moy et 2D-Amont sont relativement du même ordre de grandeur dans le cas du NO_2. Celles-ci sont légèrement meilleures que celles de la simulation CHIMERE de référence car les erreurs types moyennes (RMSE moyen) sont sensiblement plus faibles (meilleures) avec ces méthodes (les autres indices statistiques sont néanmoins comparables). Les performances statistiques globales associées aux autres méthodes de l'approche ECF sont comparables ou légèrement plus mauvaises que celles de la simulation CHIMERE de référence. De même, quelle que soit la méthode, les performances statistiques associées à l'approche ECF sont globalement moins satisfaisantes que celles de la simulation SIRANE de référence, avec notamment un RMSE moyen et un coefficient de corrélation moyen sensiblement plus mauvais.

Pour les deux polluants, le meilleur RMSE moyen, avec l'approche ECF, est obtenu avec la méthode 0D-Périph-Moy. Par la suite, la simulation associée à l'approche de couplage ECF appliquée avec la méthode 0D-Périph-Moy est appelée *simulation ECF-0D-Périph-Moy*. Les performances statistiques de cette simulation sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 9.5. Le coefficient de corrélation (r) est inférieur ou égal à 0.50 pour toutes les stations. Cela signifie que les estimations ne représentent pas correctement la variabilité temporelle des mesures. Ceci est potentiellement dû au fait que la concentration de fond en PM_{10}, déterminée avec la méthode 0D-Périph-Moy, ne reproduit pas de manière satisfaisante, a priori, les variations temporelles de la concentration de fond réelle (sous-section 9.1.2). Les performances statistiques sont relativement du même ordre de grandeur pour tous les types de stations. Localement, elles ne sont pas totalement satisfaisantes car l'ensemble des critères de qualité relatifs aux indices statistiques n'est vérifié pour aucun des capteurs.

Les performances statistiques associées à la simulation ECF-0D-Périph-Moy sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2 sont indiquées dans le tableau 9.6. Le coefficient de corrélation est inférieur à 0.60 pour toutes les stations, hormis pour les stations Grandclément (GC) et Saint-Just (STJ). Ces résultats montrent que la variabilité temporelle des mesures de NO_2 n'est pas correctement modélisée avec la simulation ECF-0D-Périph-Moy. Cela suggère que les concentrations de fond en NO_2, en NO et en O_3 déterminées avec la méthode 0D-Périph-Moy ne représentent peut-être pas de manière satisfaisante les variations temporelles des concentrations de fond réelles. Les performances

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	29.66	21.80	7.86	0.31	17.83	0.49	0.50	0.73
	GC	22.11	24.10	-1.99	-0.09	15.93	0.48	0.31	0.71
	LP	25.66	22.42	3.25	0.14	16.19	0.46	0.43	0.76
	TCR	26.12	23.97	2.14	0.09	17.39	0.48	0.40	0.75
Urbain	GER	23.28	18.92	4.35	0.21	14.95	0.51	0.39	0.75
	LC	20.84	24.40	-3.57	-0.16	15.61	0.48	0.34	0.74
	VeV	20.66	15.42	5.23	0.29	14.04	0.62	0.40	0.75
Industrie	FEY	22.70	15.05	7.65	0.41	15.86	0.74	0.37	0.68
	STF	22.49	18.36	4.12	0.20	14.78	0.53	0.37	0.75
Fond	COT	19.77	12.87	6.90	0.42	13.37	0.70	0.43	0.71
	GEN	20.98	16.05	4.92	0.27	14.30	0.61	0.37	0.75
	STE	19.71	11.95	7.76	0.49	14.05	0.84	0.43	0.68
	TER	21.25	14.11	7.14	0.40	14.25	0.68	0.44	0.70
Moyenne		22.71	18.42	4.29	0.23	15.27	0.58	0.40	0.73

TABLE 9.5 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation ECF-0D-Périph-Moy ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

statistiques sont globalement comparables pour tous les types de stations. Localement, les performances statistiques sont satisfaisantes uniquement pour les stations Grandclément et Saint-Just puisque l'ensemble des critères de qualité associés aux indices statistiques est vérifié pour ces deux stations. Pour les autres capteurs, le critère de qualité relatif au coefficient de corrélation n'est pas vérifié. De même, le critère de qualité associé au biais n'est pas vérifié à la station Lyon centre (LC).

Les biais (Bias), les erreurs types (RMSE) et les coefficients de corrélation (r) de la simulation ECF-0D-Périph-Moy sur le cas d'étude 2014 sont comparés à ceux de la simulation CHIMERE de référence sur la figure 9.6. Pour les deux polluants, les biais relatifs à la simulation ECF-0D-Périph-Moy sont généralement meilleurs que ceux de la simulation CHIMERE de référence. Pour les PM_{10}, les erreurs types des deux simulations sont relativement comparables. Pour le NO_2, les erreurs types relatives à la simulation ECF-0D-Périph-Moy sont cependant sensiblement meilleures que celles de la simulation CHIMERE de référence. Dans le cas des PM_{10}, les coefficients de corrélation de la simulation ECF-0D-Périph-Moy sont légèrement plus mauvais que ceux de la simulation CHIMERE de référence pour la majorité des capteurs. Dans le cas du NO_2, les coefficients de corrélation des deux simulations sont globalement du même ordre de grandeur.

Les biais, les erreurs types et les coefficients de corrélation de la simulation ECF-0D-Périph-Moy sur le cas d'étude 2014 sont également comparés à ceux de la simulation SIRANE de référence (figure 9.7). Dans le cas des PM_{10}, les biais associés à la simulation ECF-0D-Périph-Moy sont meilleurs que ceux de la simulation SIRANE de référence pour la majorité des stations. L'écart entre les biais

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	71.81	51.79	20.02	0.32	44.72	0.54	0.49	0.60
	GC	42.59	48.84	-6.25	-0.14	25.99	0.32	0.61	0.72
	LP	53.53	47.25	6.28	0.12	30.67	0.37	0.58	0.73
	TCR	62.50	45.46	17.04	0.32	41.60	0.61	0.39	0.71
Urbain	GER	35.81	30.39	5.42	0.16	20.91	0.40	0.53	0.72
	LC	29.52	44.34	-14.82	-0.40	26.63	0.54	0.56	0.60
	STJ	29.57	38.93	-9.36	-0.27	22.43	0.44	0.60	0.69
	VeV	24.68	20.98	3.70	0.16	19.13	0.71	0.49	0.63
Industrie	FEY	25.25	23.30	1.94	0.08	19.67	0.66	0.37	0.57
	STF	29.72	30.55	-0.83	-0.03	19.33	0.41	0.54	0.73
Fond	COT	18.24	15.4	2.84	0.17	13.63	0.66	0.57	0.63
	GEN	29.45	28.60	0.84	0.03	19.91	0.47	0.49	0.67
	STE	13.71	15.62	-1.91	-0.13	12.21	0.70	0.53	0.57
	TER	22.87	18.59	4.28	0.21	17.07	0.69	0.48	0.61
Moyenne		34.95	32.86	2.09	0.04	23.85	0.54	0.52	0.66

TABLE 9.6 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, associées à la simulation ECF-0D-Périph-Moy ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

de la simulation ECF-0D-Périph-Moy et ceux de la simulation SIRANE de référence est constant. Ceci est dû au fait que la concentration de fond en PM_{10} pour ces deux simulations est uniforme spatialement et que le modèle SIRANE considère les PM_{10} comme des polluants inertes. Dans le cas du NO_2, les biais de la simulation SIRANE de référence sont cependant meilleurs que ceux de la simulation ECF-0D-Périph-Moy pour une grande partie des capteurs. Pour les deux polluants, les erreurs types de la simulation ECF-0D-Périph-Moy sont généralement plus mauvaises que celles de la simulation SIRANE de référence, notamment pour les stations de type fond. De plus, les coefficients de corrélation de la simulation ECF-0D-Périph-Moy sont tous moins satisfaisants que ceux de la simulation SIRANE de référence pour les deux polluants. Ils sont notamment sensiblement plus mauvais pour les stations de type fond. De même, ils sont particulièrement moins bons dans le cas des PM_{10}.

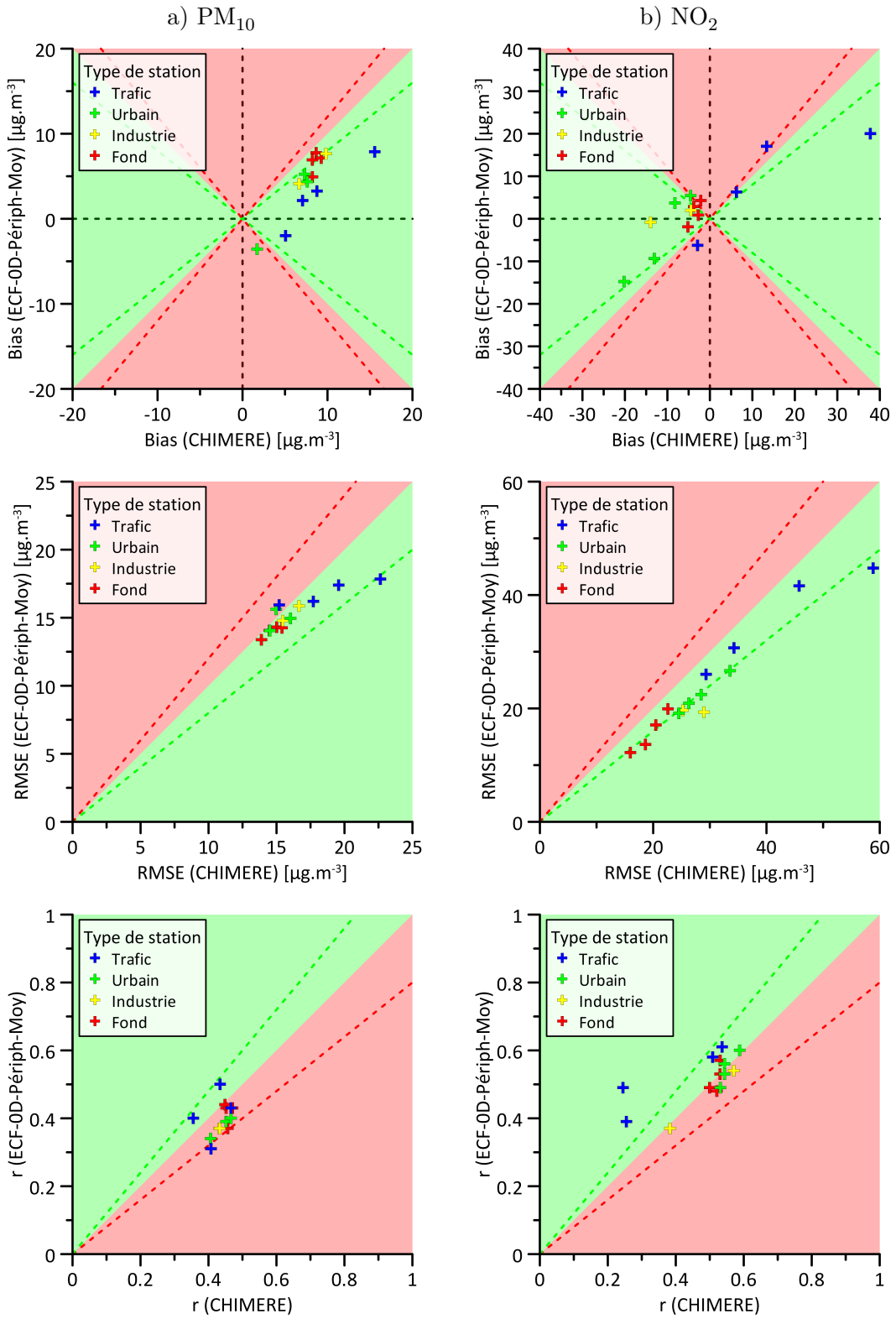


FIGURE 9.6 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés aux simulations ECF-0D-Périph-Moy et CHIMERE de référence (zone verte (rouge) : ECF-0D-Périph-Moy est meilleur (plus mauvais) que CHIMERE, ligne verte (rouge) en pointillés : ECF-0D-Périph-Moy est meilleur (plus mauvais) que CHIMERE de 20 %)

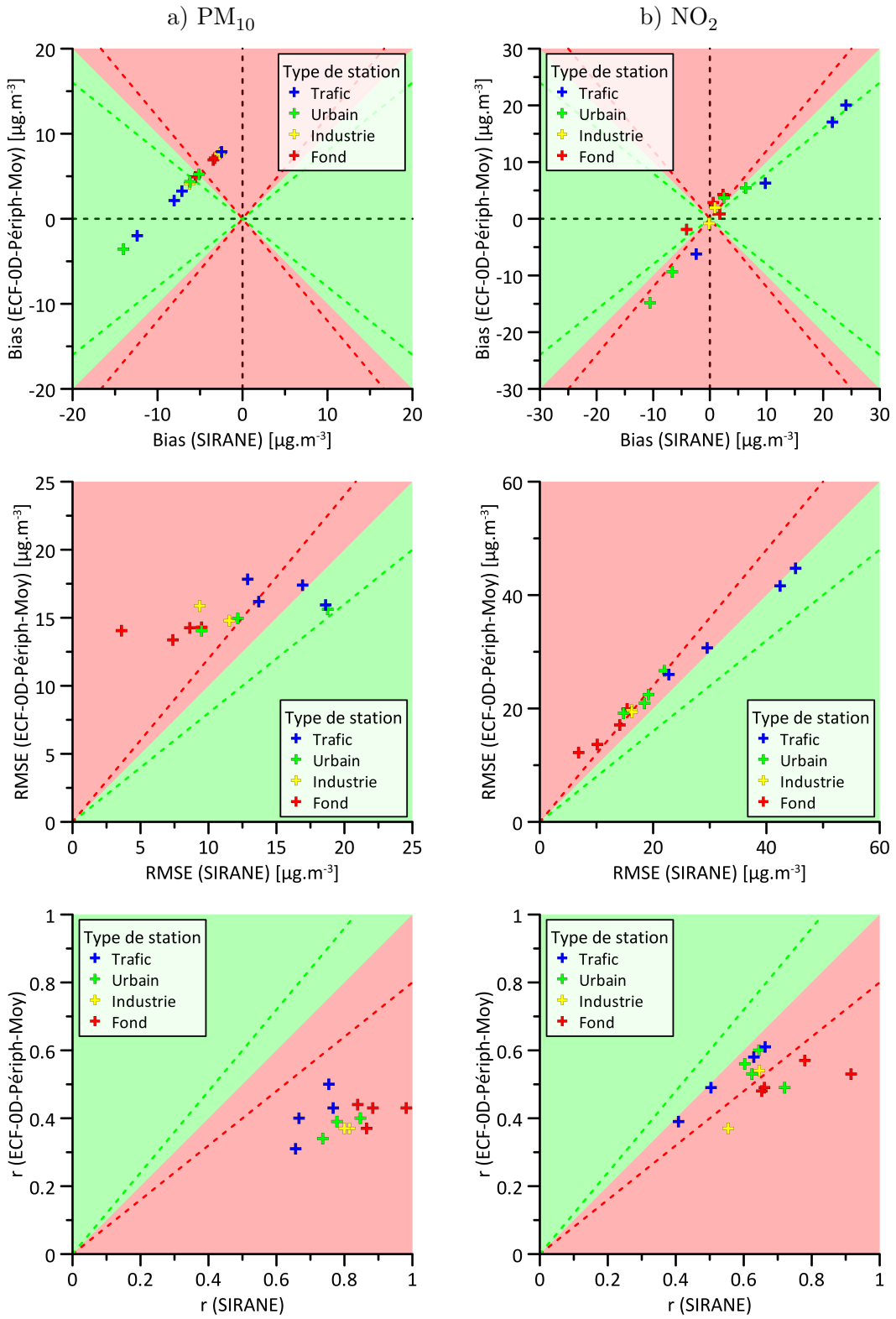


FIGURE 9.7 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés aux simulations ECF-0D-Périph-Moy et SIRANE de référence (zone verte (rouge) : ECF-0D-Périph-Moy est meilleur (plus mauvais) que SIRANE, ligne verte (rouge) en pointillés : ECF-0D-Périph-Moy est meilleur (plus mauvais) que SIRANE de 20 %)

9.2 Approche de Stocker

9.2.1 Description de l'approche de Stocker

Cette méthode est celle initialement proposée par Stocker *et al.* (2012). Cette approche est décrite dans la section 7.3. Pour rappel, cette approche couple un modèle à méso-échelle et un modèle urbain en tenant compte de l'âge des polluants. L'âge des polluants correspond au temps écoulé depuis leur émission. L'approche de Stocker distingue les polluants jeunes et anciens, c'est-à-dire les polluants dont l'âge est inférieur et supérieur à un temps t_c. Ce temps t_c peut être interprété comme la durée nécessaire afin que les polluants aient diffusé sur une distance caractéristiques l_c suffisamment grande par rapport à la résolution du modèle à méso-échelle pour être correctement modélisés à cette échelle. Dans l'étude de Stocker *et al.* (2012), la résolution horizontale de la simulation à l'échelle régionale est de 3 km et le temps t_c est égal à 2 h. L'approche de Stocker consiste à utiliser le modèle urbain et le modèle à méso-échelle pour estimer respectivement le champ de concentration des polluants jeunes et anciens. Avec cette approche, la simulation à l'échelle urbaine doit être configurée pour prendre en compte uniquement les polluants jeunes. En revanche, la simulation à l'échelle régionale prend en compte les polluants jeunes et anciens. Afin de connaître la contribution des polluants anciens sur le domaine *urbain* (domaine associé à la simulation à l'échelle urbaine), il est nécessaire de supprimer la contribution des polluants jeunes (sur le domaine urbain) dans la simulation à l'échelle régionale. Pour estimer la contribution des polluants jeunes dans la simulation à l'échelle régionale, une seconde simulation à l'échelle urbaine est effectuée. Dans cette seconde simulation, les émissions sont agrégées (sur des mailles semblables à celles de la simulation à l'échelle régionale) et modélisées avec des sources surfaciques, comme dans la simulation à l'échelle régionale. Ainsi, la concentration *finale* (à l'issue du couplage) en un point p à l'instant t est déterminée pour les polluants inertes avec l'équation 9.9 :

$$\begin{aligned} & c\left(p,t\right) = c_{\text{jeune}}\left(p,t\right) + c_{\text{ancien}}\left(p,t\right) \\ & \text{avec} \begin{cases} c_{\text{jeune}}\left(p,t\right) = c_{\text{urbain}}\left(p,t\right) \\ c_{\text{ancien}}\left(p,t\right) = c_{\text{régional}}\left(p,t\right) - c_{\text{urbain,surf}}\left(p,t\right) \end{cases} \end{aligned} \tag{9.9}$$

où c_{urbain} est la concentration déterminée avec le modèle urbain en modélisant les émissions sous forme de sources ponctuelles, linéiques et surfaciques, $c_{\text{régional}}$ est la concentration estimée avec le modèle à méso-échelle et $c_{\text{urbain,surf}}$ est la concentration évaluée avec le modèle urbain en modélisant les émissions comme des sources surfaciques. Dans notre étude, nous modélisons les réactions chimiques associées au cycle de Chapman pour les espèces NO, NO_2 et O_3 après avoir appliqué l'équation 9.9. Aussi, les simulations à l'échelle urbaine sont effectuées en considérant que les polluants sont inertes. De même, elles sont réalisées en utilisant une concentration de fond nulle. Théoriquement, le terme c_{ancien} doit être positif ou nul. Aussi, lorsqu'il est négatif, nous le fixons à zéro. Avec l'approche de Stocker, il est nécessaire de réaliser deux simulations à l'échelle urbaine. Le coût en temps de calcul relatif à l'approche de Stocker est donc plus important que celui associé à l'approche ECF.

9.2.2 Analyse des concentrations en polluants jeunes et anciens sur le cas d'étude 2014

L'objectif de cette sous-section est d'évaluer l'ordre de grandeur des contributions associées aux concentrations en polluants jeunes et anciens estimées avec l'approche de Stocker sur le cas d'étude 2014. Pour les espèces inertes, les contributions des polluants jeunes et anciens, vis-à-vis de la concentration finale, sont associées aux termes c_{jeune} et c_{ancien} de l'équation 9.9. Ce n'est pas le cas pour les espèces réactives (NO, NO_2 et O_3) car les réactions chimiques relatives au cycle de Chapman sont modélisées après avoir appliqué l'équation 9.9. Aussi, l'analyse porte sur les concentrations en PM_{10} et en NO_x (les NO_x sont considérés comme des polluants inertes dans le cycle de Chapman). Pour le cas d'étude 2014, la concentration $c_{\text{régional}}$ est estimée avec les résultats fournis par la simulation CHIMERE de référence. Pour déterminer la concentration c_{jeune}, une simulation SIRANE est effectuée avec les mêmes données d'entrée que la simulation SIRANE de référence en 2014 en utilisant cependant une concentration de fond nulle. La concentration $c_{\text{jeune,surf}}$ est déterminée avec une seconde simulation SIRANE. Pour cette simulation, les émissions sont agrégées et modélisées avec des sources surfaciques de 3 km x 3 km, comparables à celles utilisées pour la simulation CHIMERE de référence. Les autres données d'entrée sont identiques à celles de la première simulation SIRANE. Pour ces deux simulations, le modèle SIRANE a été configuré pour simuler uniquement la dispersion des polluants jeunes. Etant donné que le maillage de la simulation CHIMERE a une résolution horizontale de 3 km, comme dans Stocker *et al.* (2012), nous considérons aussi que le temps t_c est égal à 2 h. Il convient de rappeler que les deux simulations SIRANE sont réalisées en considérant que les polluants sont inertes.

Les contributions moyennes en PM_{10} des polluants jeunes et anciens sur la cas d'étude 2014, pour chaque heure de la journée et pour les différents types de stations, sont indiquées sur la figure 9.8. La contribution des polluants anciens, c_{ancien}, est généralement plus importante pendant la nuit (18 h - 6 h) que durant le jour (6 h - 18 h) pour les stations de type trafic, urbain et industrie. Cependant, elle est relativement stable durant toute la journée pour les stations de type fond. En revanche, la contribution des polluants jeunes, c_{jeune}, est plus importante durant le jour que pendant la nuit pour tous les types de stations. Pour les stations de type trafic, cette contribution est notamment plus élevée vers 7 h et 17 h en raison du trafic important relatif aux trajets domicile-travail aux heures de pointe. Cette tendance est également observable pour les autres types de stations bien qu'elle soit moins prononcée. Pour les stations de type trafic, urbain, et industrie, la contribution des polluants jeunes est plus importante que celle des polluants anciens durant le jour et généralement plus faible pendant la nuit. Pour les stations de type fond, la contribution des polluants anciens est plus importante que celle des polluants jeunes durant toute la journée. Ces résultats montrent que la contribution en PM_{10} des polluants anciens, déterminée avec l'approche de Stocker, est relativement significative sur le cas d'étude 2014.

Les contributions moyennes en NO_x des polluants jeunes et anciens sur la cas d'étude 2014, pour chaque heure de la journée et pour les différents types de stations, sont indiquées sur la figure 9.9. La contribution des polluants jeunes, c_{jeune}, est globalement plus élevée durant le jour que pendant la

nuit pour tous les types de stations. Dans le cas des NO_x, cette contribution est aussi plus importante vers 7 h et 17 h, notamment pour les stations de type trafic, a priori à cause de l'augmentation du trafic liée aux déplacements domicile-travail. La contribution des polluants anciens, c_{ancien}, oscille

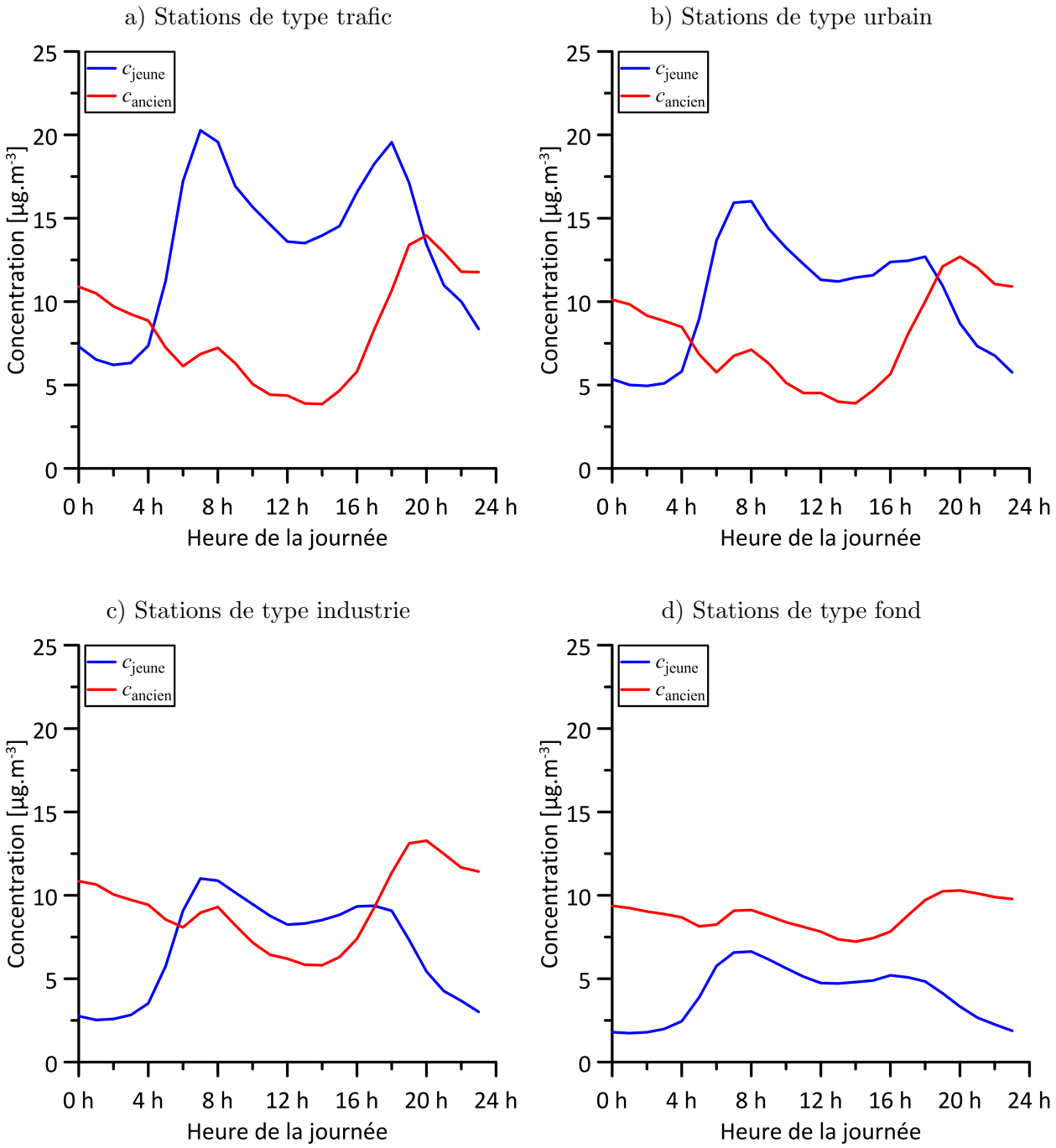


FIGURE 9.8 – Contributions moyennes en PM_{10} des polluants jeunes (courbe bleue) et anciens (courbe rouge) relative à chaque heure de la journée pour les stations de type trafic (a), urbain (b), industrie (c) et fond (d) sur le cas d'étude 2014 et les rapports $r_{a/j}$ (courbe bleue) associés ($r_{a/j}$ correspond au rapport $c_{\text{ancien}}/c_{\text{jeune}}$)

au cours de la journée et est généralement minimale vers 14 h et maximale vers 18 h pour tous les types de stations. Pour les stations de type trafic et urbain, la contribution des polluants jeunes est globalement plus élevée que celle des polluants anciens durant le jour et plus faible pendant la nuit. Pour les autres types de stations, la contribution des polluants jeunes est plus importante que

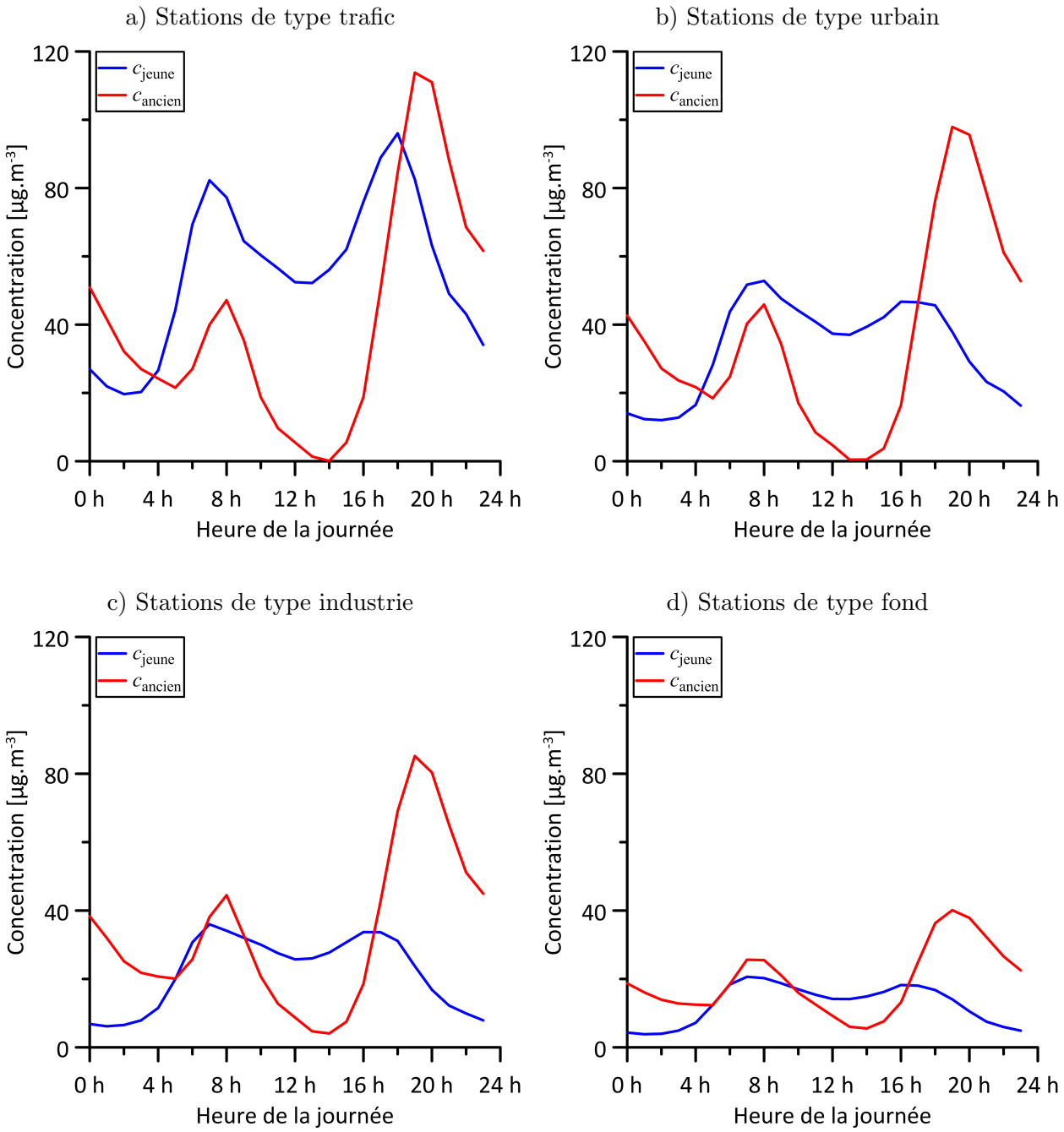


FIGURE 9.9 – Contributions moyennes en NO_x des polluants jeunes (courbe bleue) et anciens (courbe rouge) relative à chaque heure de la journée pour les stations de type trafic (a), urbain (b), industrie (c) et fond (d) sur le cas d'étude 2014 et les rapports $r_{a/j}$ (courbe bleue) associés ($r_{a/j}$ correspond au rapport $c_{\text{ancien}}/c_{\text{jeune}}$)

celle des polluants anciens uniquement entre 9 h et 16 h. Bien qu'elle soit parfois faible, ces résultats montrent que la contribution en NO_x des polluants anciens est relativement significative sur le cas d'étude 2014, notamment pendant la nuit.

9.2.3 Résultats du couplage avec l'approche de Stocker sur le cas d'étude 2014

L'apport de l'approche de Stocker est évalué sur le cas d'étude 2014 en couplant les modèles CHIMERE et SIRANE. La mise en œuvre de ce couplage est décrite dans la sous-section précédente (sous-section 9.2.2).

Les performances statistiques globales (obtenues par une moyenne sur l'ensemble des capteurs) associées à l'approche de Stocker sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 9.7. Le biais moyen (Bias moyen) est positif avec l'approche de Stocker. Cela signifie que les résultats sous-estiment généralement les mesures. De plus, le coefficient de corrélation moyen (r moyen) est inférieur à 0.50. Cette faible corrélation indique que les concentrations modélisées ne reproduisent pas de manière satisfaisante la variabilité temporelle des mesures. Cette sous-estimation et cette faible corrélation sont peut-être liées au fait que la contribution en PM_{10} des polluants

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
CHIMERE	22.71	14.70	8.01	0.43	16.28	0.81	0.44	0.64
SIRANE		28.78	-6.08	-0.23	11.74	0.22	0.80	0.85
Stocker		17.15	5.56	0.30	15.54	0.65	0.44	0.70

TABLE 9.7 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation CHIMERE de référence, à la simulation SIRANE de référence et à l'approche de Stocker ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
CHIMERE	34.95	36.63	-1.68	-0.11	29.51	0.73	0.48	0.60
SIRANE		31.65	3.29	0.05	20.96	0.38	0.64	0.73
Stocker		40.08	-5.14	-0.17	28.01	0.62	0.54	0.65

TABLE 9.8 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, associées à la simulation CHIMERE de référence, à la simulation SIRANE de référence et à l'approche de Stocker ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

anciens, qui est relativement significative sur le cas d'étude 2014, est en partie évaluée avec la simulation CHIMERE de référence, qui sous-estime également les mesures et qui est aussi faiblement corrélée avec celles-ci. Les performances statistiques globales correspondant à l'approche de Stocker ne sont pas totalement satisfaisantes sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} car le coefficient de corrélation moyen ne vérifie pas le critère de qualité associé à cet indice statistique. Elles sont relativement du même ordre de grandeur que celles de la simulation CHIMERE de référence. Cependant, elles sont globalement moins bonnes que celles de la simulation SIRANE de référence.

Les performances statistiques globales associées à l'approche de Stocker sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2 sont indiquées dans le tableau 9.8. Le biais moyen relatif à l'approche de Stocker est négatif. Cela signifie que les estimations fournies par cette approche surestiment généralement les mesures de NO_2. De plus, le coefficient de corrélation moyen est égal à 0.54. Ceci montre que les résultats obtenus avec l'approche de Stocker ne représentent pas correctement la variabilité temporelle des mesures de NO_2. Cette faible corrélation est potentiellement due au fait que la contribution en NO_2 (mais aussi celles en NO et en O_3) des polluants anciens est déterminée en partie à partir de la simulation CHIMERE de référence, qui est peu corrélée avec les mesures. Les performances statistiques globales de l'approche de Stocker ne sont pas entièrement satisfaisantes pour le NO_2 car le coefficient de corrélation moyen ne vérifie pas le critère de qualité associé à cet indice statistique. Globalement, elles sont comparables à celles de la simulation CHIMERE de référence. Néanmoins, elles sont moins bonnes que celles de la simulation SIRANE de référence.

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	29.66	20.15	9.51	0.38	19.02	0.61	0.48	0.66
	GC	22.11	22.00	0.11	0.00	15.26	0.48	0.39	0.73
	LP	25.66	21.66	4.01	0.17	16.06	0.46	0.49	0.77
	TCR	26.12	22.36	3.76	0.16	18.91	0.61	0.37	0.70
Urbain	GER	23.28	17.22	6.05	0.30	15.37	0.59	0.46	0.72
	LC	20.84	21.72	-0.89	-0.04	15.45	0.53	0.41	0.75
	VeV	20.66	14.27	6.39	0.37	14.09	0.67	0.47	0.73
Industrie	FEY	22.70	14.36	8.34	0.45	15.97	0.78	0.42	0.66
	STF	22.49	17.84	4.64	0.23	14.92	0.56	0.43	0.74
Fond	COT	19.77	11.99	7.78	0.49	13.63	0.78	0.47	0.66
	GEN	20.98	15.15	5.83	0.32	14.17	0.63	0.42	0.74
	STE	19.71	11.27	8.44	0.54	14.34	0.93	0.45	0.63
	TER	21.25	12.93	8.32	0.49	14.88	0.81	0.45	0.65
Moyenne		22.71	17.15	5.56	0.30	15.54	0.65	0.44	0.70

TABLE 9.9 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, associées à l'approche de Stocker ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Les performances statistiques locales (associées à chaque station) correspondant à l'approche de Stocker sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 9.9. Le biais (Bias) est positif pour la majorité des capteurs. Cela montre que les estimations associées à l'approche de Stocker sous-estiment globalement les mesures de PM_{10}. De plus, le coefficient de corrélation (r) est inférieur à 0.50 pour tous les capteurs. Cette faible corrélation indique que la variabilité temporelle des mesures n'est pas correctement modélisée. Encore une fois, cette sous-estimation et cette faible corrélation sont peut-être associées au fait que la contribution en PM_{10} des polluants anciens est notamment évaluée avec la simulation CHIMERE de référence, qui sous-estime les mesures et qui est peu corrélée avec celles-ci. Globalement, les plus mauvaises performances statistiques sont associées aux stations de type fond, pour lesquelles le biais fractionnel (FB) et l'erreur quadratique normalisée (NMSE) sont notamment plus importants, en moyenne, que pour les autres stations. Les performances statistiques associées aux autres types de stations sont relativement comparables. Localement, les performances statistiques ne sont pas satisfaisantes car l'ensemble des critères de qualité associés aux indices statistiques n'est vérifié pour aucun des capteurs.

Les performances statistiques locales correspondant à l'approche de Stocker sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2 sont indiquées dans le tableau 9.10. Le biais est négatif pour l'ensemble des capteurs. Ceci signifie que les résultats obtenus avec l'approche de Stocker surestiment généralement les mesures de NO_2. De même, le coefficient de corrélation est inférieur 0.60 pour la majorité des

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	71.81	54.75	17.06	0.27	48.81	0.61	0.37	0.55
	GC	42.59	56.44	-13.85	-0.28	31.20	0.40	0.61	0.69
	LP	53.53	57.75	-4.22	-0.08	31.90	0.33	0.61	0.75
	TCR	62.50	54.89	7.61	0.13	44.30	0.57	0.29	0.67
Urbain	GER	35.81	38.67	-2.86	-0.08	24.78	0.44	0.57	0.72
	LC	29.52	51.90	-22.38	-0.55	34.73	0.79	0.60	0.57
	STJ	29.57	45.10	-15.53	-0.42	29.46	0.65	0.64	0.65
	VeV	24.68	30.33	-5.65	-0.21	22.06	0.65	0.56	0.65
Industrie	FEY	25.25	30.04	-4.79	-0.17	23.90	0.75	0.44	0.59
	STF	29.72	43.07	-13.35	-0.37	27.56	0.59	0.61	0.69
Fond	COT	18.24	19.72	-1.48	-0.08	16.85	0.79	0.56	0.60
	GEN	29.45	36.74	-7.29	-0.22	22.88	0.48	0.57	0.70
	STE	13.71	17.84	-4.13	-0.26	14.94	0.91	0.54	0.57
	TER	22.87	23.95	-1.08	-0.05	18.82	0.65	0.56	0.64
Moyenne		34.95	40.08	-5.14	-0.17	28.01	0.62	0.54	0.65

TABLE 9.10 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, associées à l'approche de Stocker ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

stations. Cela montre que la variabilité temporelle des mesures n'est pas modélisée de manière satisfaisante pour la plupart des stations. Une nouvelle fois, cette faible corrélation est potentiellement due au fait que la contribution en NO_2 (mais aussi celles en NO et en O_3) des polluants anciens est estimée à partir de la simulation CHIMERE de référence qui est peu corrélée avec les mesures. Globalement, les performances statistiques sont comparables pour tous les types de stations. Localement, les performances statistiques sont satisfaisantes uniquement pour les stations Grandclément (GC) et Lyon périphérique (LP), où tous les critères de qualité associés aux indices statistiques sont vérifiés.

Les biais (Bias), les erreurs types (RMSE) et les coefficients de corrélation (r) correspondant à l'approche de Stocker sur le cas d'étude 2014 sont comparés à ceux de la simulation CHIMERE de référence sur la figure 9.10. Pour les deux polluants, les biais correspondant à l'approche de Stocker sont plus faibles (meilleurs) que ceux relatifs à la simulation CHIMERE de référence pour la majorité des capteurs. De plus, les erreurs types associées à l'approche de Stocker et à la simulation CHIMERE de référence sont relativement du même ordre de grandeur. De même, les coefficients de corrélation correspondant à l'approche de Stocker sont globalement comparables à ceux de la simulation CHIMERE dans le cas des PM_{10}. Cependant, ils sont globalement meilleurs que ceux de la simulation CHIMERE dans le cas du NO_2.

Les biais, les erreurs types et les coefficients de corrélation correspondant à l'approche de Stocker sur le cas d'étude 2014 sont aussi comparés à ceux de la simulation SIRANE référence (figure 9.11). Pour les deux polluants, les biais de la simulation SIRANE de référence sont meilleurs que ceux correspondant à l'approche de Stocker pour la majorité des stations. Dans le cas du NO_2, les erreurs types relatives à l'approche de Stocker sont plus mauvaises que celles associées à la simulation SIRANE de référence pour tous les capteurs. De même, elles sont moins bonnes pour la plupart des stations dans le cas des PM_{10}. Pour les deux polluants, les coefficients de corrélation de la simulation SIRANE de référence sont sensiblement meilleurs que ceux relatifs à l'approche de Stocker, notamment pour les stations de type fond. Ils sont aussi sensiblement plus élevés dans le cas des PM_{10}.

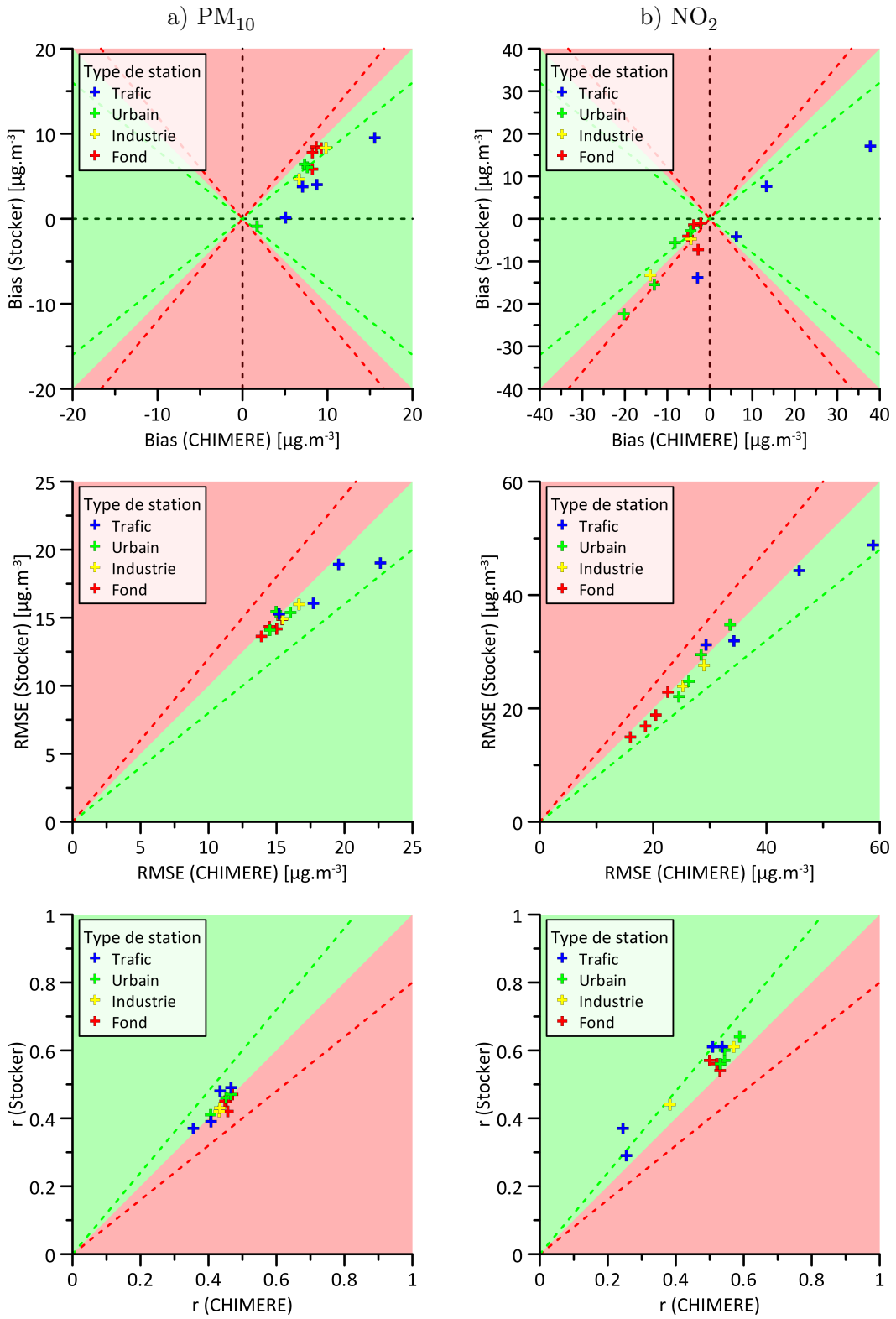


FIGURE 9.10 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés à l'approche de Stocker et à la simulation CHIMERE de référence (zone verte (rouge) : Stocker est meilleur (plus mauvais) que CHIMERE, ligne verte (rouge) en pointillés : Stocker est meilleur (plus mauvais) que CHIMERE de 20 %)

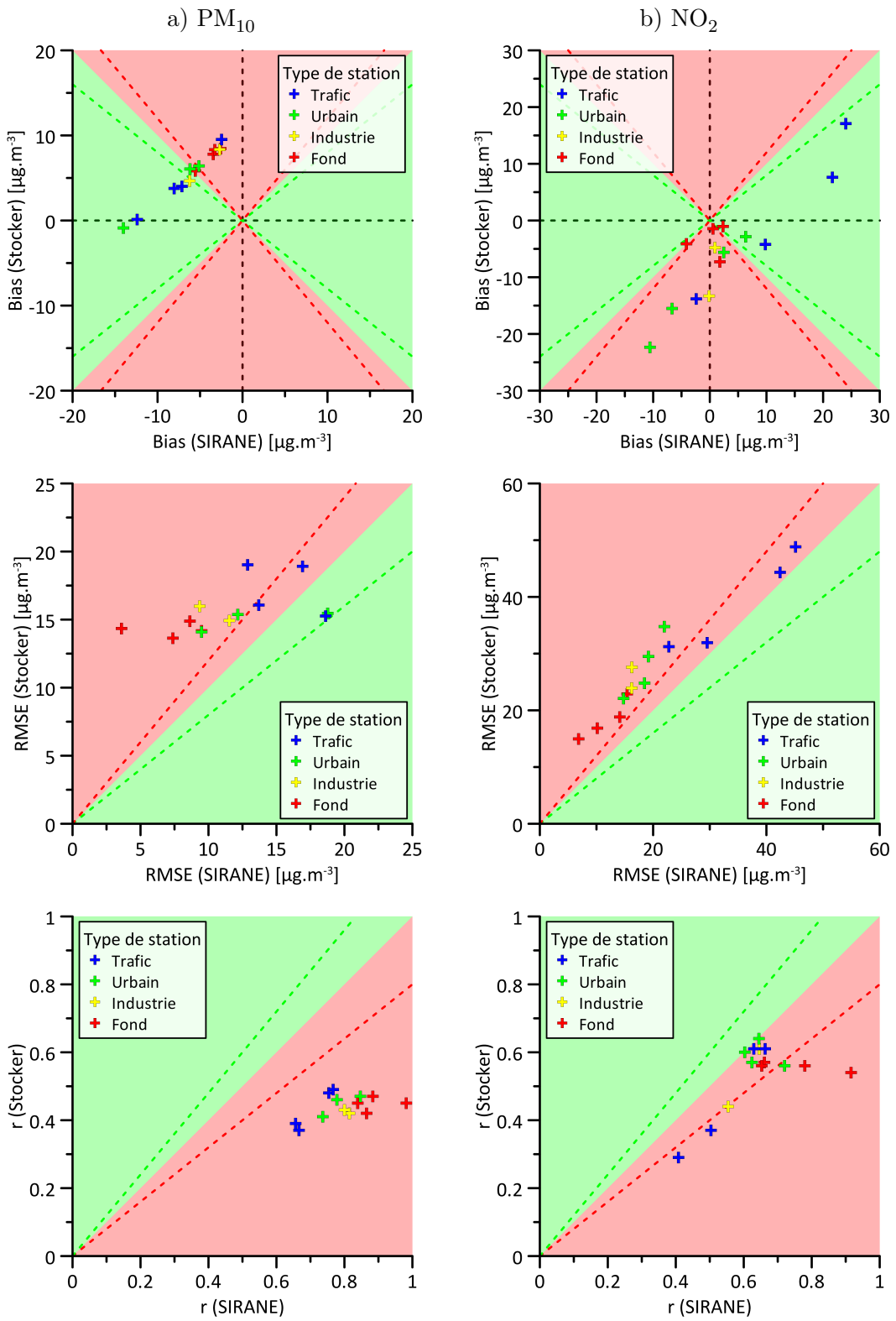


FIGURE 9.11 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés à l'approche de Stocker et à la simulation SIRANE de référence (zone verte (rouge) : Stocker est meilleur (plus mauvais) que SIRANE, ligne verte (rouge) en pointillés : Stocker est meilleur (plus mauvais) que SIRANE de 20 %)

9.3 Estimation de la variabilité spatiale des concentrations (EVSC)

9.3.1 Description de l'approche EVSC

Une simulation de la qualité de l'air à l'échelle régionale ne permet pas d'estimer de manière satisfaisante les concentrations à l'échelle urbaine, caractérisées par une importante variabilité spatiale, en raison de la résolution horizontale du maillage utilisé qui est de l'ordre du kilomètre. Cela est notamment confirmé par les performances statistiques de la simulation CHIMERE de référence sur le cas d'étude 2014 (section 8.2.2). Néanmoins, l'estimation relative à une maille (de la simulation à l'échelle régionale) est a priori représentative de la concentration moyenne sur la zone couverte par cette même maille. Aussi, l'approche de couplage EVSC consiste à coupler un modèle à méso-échelle et un modèle à l'échelle urbaine en considérant que les concentrations moyennes spatiales à l'échelle kilométrique (quelques kilomètres) sont modélisées de manière plus satisfaisante avec le modèle à méso-échelle mais que la variabilité spatiale des concentrations (vis-à-vis des concentrations moyennes à l'échelle kilométrique) en milieu urbain est mieux représentée avec celui à l'échelle urbaine. Pour déterminer cette variabilité, les concentrations moyennes spatiales à l'échelle kilométrique (CMSEK) doivent aussi être évaluées à partir des estimations fournies par la simulation à l'échelle urbaine. Celles-ci sont estimées sur des mailles 2D qui ont une position et des dimensions, sur le plan horizontal, comparables à celles (de la première de couche) du maillage utilisé pour la simulation à l'échelle régionale (figure 9.12). A partir de ces CMSEK, la variabilité spatiale des concentrations à l'échelle urbaine est évaluée avec deux méthodes différentes dans notre étude.

La première méthode, nommée *M-Diff*, définit la variabilité spatiale comme la différence entre les estimations fournies par la simulation à l'échelle urbaine et les CMSEK estimées à partir de celles-ci.

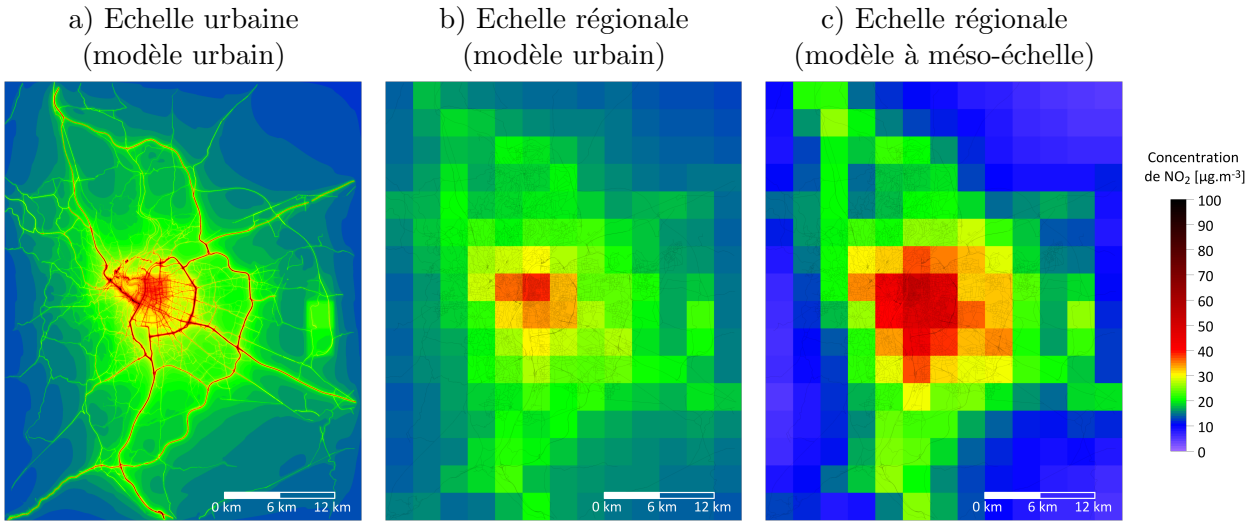


FIGURE 9.12 – Schématisation d'un champ de concentration à l'échelle urbaine fourni par un modèle urbain (a), d'un champ de concentration à l'échelle régionale estimé à partir du champ de concentration à l'échelle urbaine (b) et d'un champ de concentration à l'échelle régionale fourni par un modèle à méso-échelle (c)

Avec cette méthode, la concentration *finale* (à l'issue du couplage) en un point p à l'instant t est estimée avec l'expression 9.10 :

$$c(p,t) = c_{moy}(p,t) + v_d(p,t) \quad \text{avec} \begin{cases} c_{moy}(p,t) = c_{\text{régional}}(p,t) \\ v_d(p,t) = c_{\text{urbain}}(p,t) - c^{moy}_{\text{urbain}}(p,t) \end{cases} \tag{9.10}$$

où $c_{\text{régional}}$ est la CMSEK modélisée avec la simulation à l'échelle régionale (elle correspond simplement au résultat de la simulation), c_{urbain} correspond à la concentration modélisée avec la simulation à l'échelle urbaine et c^{moy}_{urbain} représente la CMSEK évaluée à partir des estimations à l'échelle urbaine.

La seconde méthode, appelée *M-Rap*, définit la variabilité spatiale comme le rapport entre les estimations de la simulation à l'échelle urbaine et les CMSEK évaluées à partir de celles-ci. Dans ce cas, la concentration *finale* en un point p à l'instant t est estimée avec l'expression 9.11.

$$c(p,t) = c_{moy}(p,t)\, v_r(p,t) \quad \text{avec} \begin{cases} c_{moy}(p,t) = c_{\text{régional}}(p,t) \\ v_r(p,t) = \dfrac{c_{\text{urbain}}(p,t)}{c^{moy}_{\text{urbain}}(p,t)} \end{cases} \tag{9.11}$$

La méthode M-Rap présente l'avantage de garantir la positivité des concentrations obtenues. Dans notre étude, les concentrations modélisées avec l'équation 9.10 sont seuillées à zéro (valeur minimale). Avec l'approche EVSC, la simulation à l'échelle urbaine est effectuée de manière *classique* (modélisation des réactions chimiques, prise en compte de concentrations de fond non nulles, etc ...). Il convient de signaler que les concentrations finales, $c(p,t)$, sont égales aux concentrations fournies par la simulation à l'échelle urbaine, $c_{\text{urbain}}(p,t)$, lorsque les CMSEK évaluées à partir de celles-ci, $c^{moy}_{\text{urbain}}(p,t)$, sont identiques à celles estimées avec la simulation à l'échelle régionale, $c_{\text{régional}}(p,t)$. De même, lorsque v_d (v_r) vaut 0 (1), la concentration finale est égale à la CMSEK déterminée avec la simulation à l'échelle régionale, $c_{\text{régional}}(p,t)$.

9.3.2 Analyse des variables $c_{\text{régional}}$, c^{moy}_{urbain} et c_{urbain} sur le cas d'étude 2014

L'objectif de cette sous-section est d'évaluer l'ordre de grandeur des termes $c_{\text{régional}}$, c^{moy}_{urbain} et c_{urbain}, qui interviennent dans les équations 9.10 et 9.11, sur le cas d'étude 2014. Dans cette analyse, $c_{\text{régional}}$ et c_{urbain} sont respectivement associées aux estimations fournies par la simulation CHIMERE de référence et la simulation SIRANE de référence en 2014. De même, c^{moy}_{urbain} est évaluée à partir des résultats de la simulation SIRANE de référence en 2014.

La moyenne des variables $c_{\text{régional}}$, c^{moy}_{urbain} et c_{urbain}, pour chaque heure de la journée et pour les quatre types de stations sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, sont indiquées sur la figure 9.13. Le profil de $c_{\text{régional}}$ est globalement similaire pour les quatre types de stations. Cette variable est plus élevée vers 7 h et 17 h a priori en raison du trafic important associé aux déplacements domicile-travail. Le profil de c^{moy}_{urbain} est aussi relativement similaire pour les différents types de stations. c^{moy}_{urbain}

est généralement plus importante durant le jour (6 h - 18 h) que pendant la nuit (18 h - 6 h). De plus, c^{moy}_{urbain} est également plus importante vers 7 h et 17 h, vraisemblablement pour la même raison que celle évoquée pour la variable $c_{\text{régional}}$. Quel que le soit le type de stations, c^{moy}_{urbain} est sensiblement

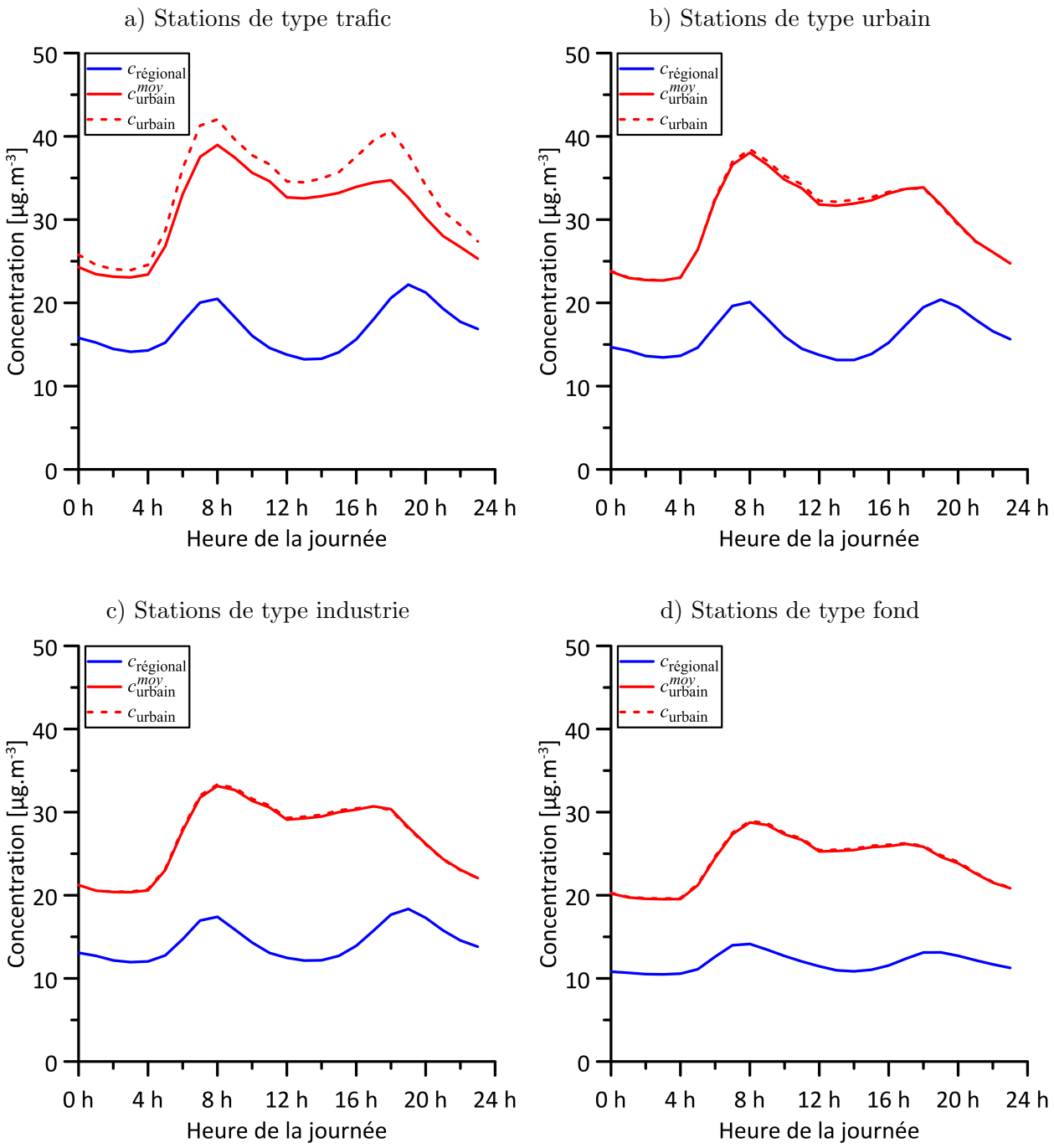


FIGURE 9.13 – Valeurs moyennes, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, des variables $c_{\text{régional}}$ (courbe bleue), c^{moy}_{urbain} (courbe rouge pleine) et c_{urbain} (courbe rouge en pointillés) pour les stations de type trafic (a), urbain (b), industrie (c) et fond (d) (ces valeurs correspondent à des valeurs moyennes pour chaque heure de la journée et pour les différents types de stations)

plus élevée que $c_{\text{régional}}$. Pour les stations de type urbain, industrie et fond, c_{urbain} est comparable à c^{moy}_{urbain}. Ceci signifie que les concentrations en PM_{10} modélisées avec l'approche EVSC pour ces types de stations sont relativement comparables à celles fournies par la simulation CHIMERE de

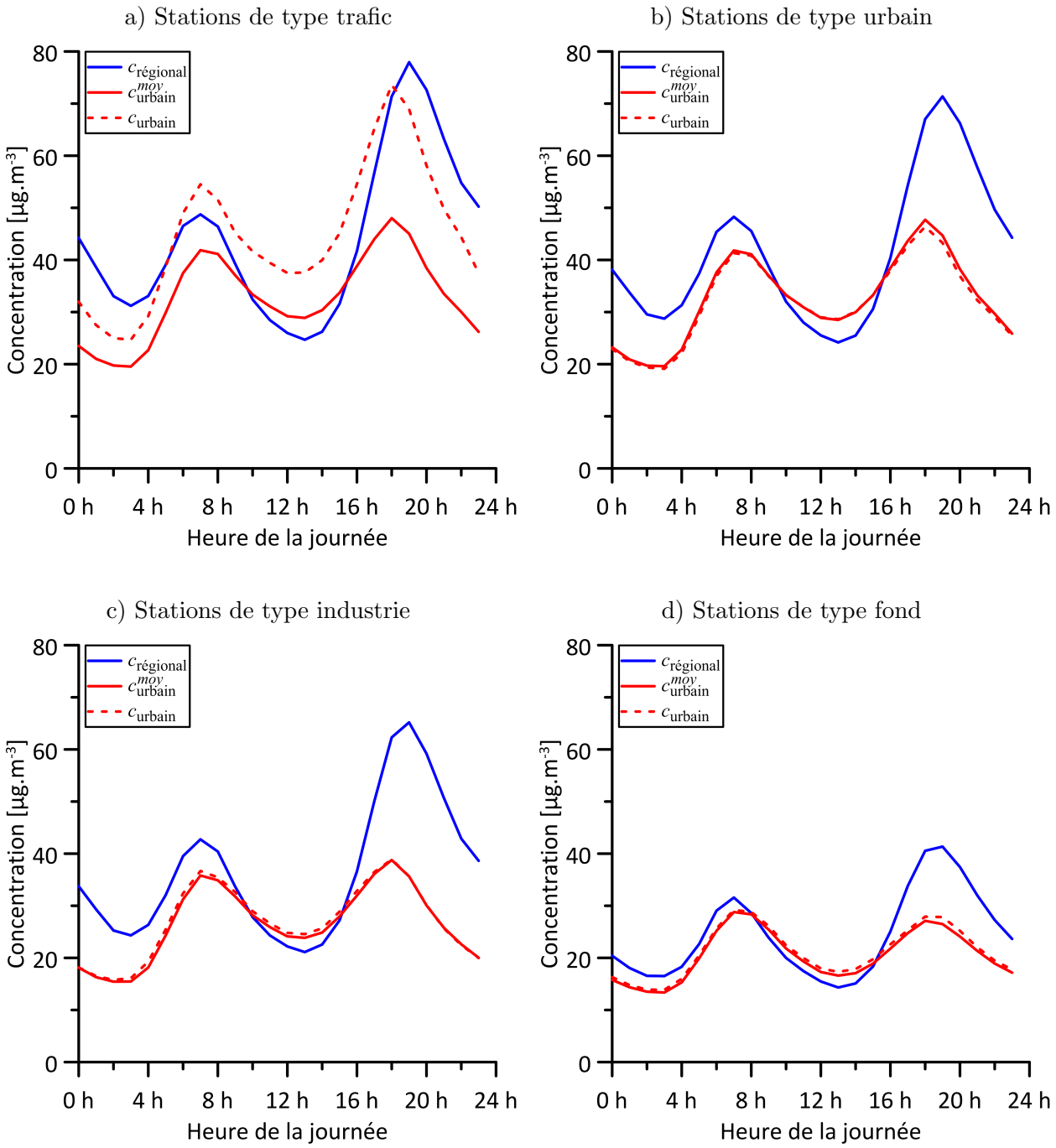


FIGURE 9.14 – Valeurs moyennes, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, des variables $c_{\text{régional}}$ (courbe bleue), c^{moy}_{urbain} (courbe rouge pleine) et c_{urbain} (courbe rouge en pointillés) pour les stations de type trafic (a), urbain (b), industrie (c) et fond (d) (ces valeurs correspondent à des valeurs moyennes pour chaque heure de la journée et pour les différents types de stations)

référence, $c_{\text{régional}}$. Pour les stations de type trafic, le profil de c_{urbain} est comparable à celui de c^{moy}_{urbain}. Cependant, c_{urbain} est généralement plus importante que c^{moy}_{urbain}.

La moyenne des variables $c_{\text{régional}}$, c^{moy}_{urbain} et c_{urbain}, pour chaque heure de la journée et pour les quatre types de stations sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, sont représentées sur la figure 9.14. A l'instar des PM_{10}, le profil de $c_{\text{régional}}$ dans le cas du NO_2 est aussi relativement similaire pour les quatre types de stations. Ce profil indique que $c_{\text{régional}}$ est plus importante vers 7 h et 17 h. A priori, cela est encore dû au trafic plus important lié aux déplacements domicile-travail à ces moments de la journée. Le profil de c^{moy}_{urbain} est aussi globalement similaire pour tous les types de stations. Ce profil montre que la variable c^{moy}_{urbain} est généralement plus importante durant le jour (6 h - 18 h) que pendant la nuit (18 h - 6 h) et qu'elle est notamment plus importante vers 7 h et 17 h, probablement pour la même raison que dans le cas de la variable $c_{\text{régional}}$. Pour tous les types de stations, $c_{\text{régional}}$ est plus élevée que c^{moy}_{urbain}, excepté entre 8 h et 15 h. Comme pour les PM_{10}, c_{urbain} est comparable à c^{moy}_{urbain} pour les stations de type urbain, industrie et fond. Aussi, ceci indique que les concentrations en NO_2 évaluées avec l'approche EVSC pour ces types de stations sont relativement similaires à celles fournies par la simulation CHIMERE de référence, $c_{\text{régional}}$. Pour les stations de type trafic, la variabilité temporelle de c_{urbain} est également comparable à celle de c^{moy}_{urbain}. Néanmoins, c_{urbain} est plus importante que c^{moy}_{urbain}.

9.3.3 Résultats du couplage avec l'approche EVSC sur le cas d'étude 2014

L'apport de l'approche EVSC, appliquée avec les méthodes M-Diff et M-Rap, est évalué sur le cas d'étude 2014 en couplant les simulations CHIMERE de référence et SIRANE de référence. La mise en œuvre de ce couplage est décrite dans la sous-section précédente (sous-section 9.3.2).

Les performances statistiques globales (obtenues par une moyenne sur l'ensemble des capteurs) associées à l'approche EVSC sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 9.11. Le biais moyen (Bias moyen) est positif avec l'approche EVSC. Cela signifie que les concentrations modélisées avec cette approche sous-estiment généralement les mesures de PM_{10}. De plus, le coefficient de corrélation moyen (r moyen) est inférieur à 0.50, quelle que soit la méthode appliquée pour déterminer la variabilité spatiale (M-Diff et M-Rap). Cette faible corrélation indique que la variabilité temporelle des mesures n'est pas reproduite de manière satisfaisante avec l'approche EVSC sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}. Ceci est probablement dû au fait que la variable $c_{\text{régional}}$, qui joue un rôle prépondérant dans l'estimation des concentrations avec l'approche EVSC, est associée aux concentrations modélisées par la simulation CHIMERE de référence, qui sont peu corrélées avec les mesures de PM_{10}. Les performances statistiques globales associées à la méthode M-Diff ou M-Rap sont relativement du même ordre de grandeur. Celles-ci ne sont pas complètement satisfaisantes car le coefficient de corrélation moyen ne vérifie pas le critère de qualité associé à cet indice statistique. De plus, elles sont globalement comparables à celles associées à la simulation CHIMERE de référence. Cela s'explique en partie par le fait que, généralement, les variables c^{moy}_{urbain} et c_{urbain} sont relativement similaires pour les stations de type urbain, industrie et fond sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (sous-section 9.3.2). En revanche, les performances statistiques

Méthode		$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
CHIMERE		22.71	14.70	8.01	0.43	16.28	0.81	0.44	0.64
SIRANE			28.78	-6.08	-0.23	11.74	0.22	0.80	0.85
EVSC	M-Diff		15.61	7.10	0.38	15.99	0.75	0.44	0.66
	M-Rap		15.23	7.48	0.40	16.24	0.78	0.43	0.65

TABLE 9.11 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation CHIMERE de référence, à la simulation SIRANE de référence et à l'approche EVSC ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

relatives à l'approche EVSC sont globalement moins bonnes que celles associées à la simulation SIRANE de référence.

Les performances statistiques globales correspondant à l'approche EVSC sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2 sont indiquées dans le tableau 9.12. Le biais moyen est négatif avec l'approche EVSC. Ceci indique que les estimations relatives à l'approche EVSC surestiment globalement les mesures de NO_2. De même, le coefficient de corrélation moyen est inférieur à 0.50, avec les deux méthodes (M-Diff et M-Rap). Aussi, les concentrations modélisées avec l'approche EVSC ne reproduisent pas de manière satisfaisante la variabilité temporelle des concentrations mesurées de NO_2. Une nouvelle fois, cela est a priori lié au fait que la variable $c_{\text{régional}}$, qui a une influence prépondérante dans l'évaluation des concentrations avec l'approche EVSC, correspond aux estimations de la simulation CHIMERE de référence, qui sont peu corrélées avec les mesures de NO_2. Pour les deux méthodes utilisées afin d'évaluer la variabilité spatiale des concentrations à l'échelle urbaine, les performances statistiques globales sont relativement comparables. Celles-ci ne sont pas satisfaisantes car le coefficient de

Méthode		$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
CHIMERE		34.95	36.63	-1.68	-0.11	29.51	0.73	0.48	0.60
SIRANE			31.65	3.29	0.05	20.96	0.38	0.64	0.73
EVSC	M-Diff		40.14	-5.19	-0.17	29.54	0.68	0.49	0.61
	M-Rap		42.00	-7.05	-0.20	33.50	0.78	0.46	0.60

TABLE 9.12 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, associées à la simulation CHIMERE de référence, à la simulation SIRANE de référence et à l'approche EVSC ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

corrélation moyen ne vérifie pas le critère de qualité associé à cet indice statistique. Globalement, elles sont du même ordre de grandeur que celles associées à la simulation CHIMERE de référence. A l'instar du cas relatif aux PM_{10}, cela est partiellement dû au fait que, globalement, les variables c_{urbain}^{moy} et c_{urbain} sont relativement comparables pour les stations de type urbain, industrie et fond sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2 (sous-section 9.3.2). Cependant, les performances statistiques globales relatives à l'approche EVSC sont moins bonnes que celles associées à la simulation SIRANE de référence.

Pour les deux polluants, le meilleur RMSE moyen, associé à l'approche EVSC, est obtenu avec la méthode M-Diff. Par la suite, l'expression *EVSC-Diff* fait référence à l'approche EVSC appliquée avec la méthode M-Diff. Les performances statistiques locales (associées à chaque station) correspondant à l'approche EVSC-Diff sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 9.13. Le biais (Bias) est positif pour tous les capteurs. Cela confirme le fait que les concentrations modélisées avec l'approche EVSC-Diff sous-estiment globalement les mesures de PM_{10}. De même, le coefficient de corrélation (r) est inférieur à 0.50 pour l'ensemble des stations. Ceci signifie que les estimations associées à l'approche EVSC-Diff ne représentent pas de manière satisfaisante la variabilité temporelle des concentrations mesurées. Cette sous-estimation et cette faible corrélation sont a priori dues au fait que la variable $c_{\text{régional}}$, qui a une influence prépondérante dans l'évaluation des concentrations avec l'approche EVSC-Diff, correspond aux estimations de la simu-

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	29.66	19.02	10.65	0.44	19.65	0.68	0.47	0.63
	GC	22.11	20.32	1.79	0.08	15.00	0.50	0.40	0.73
	LP	25.66	18.82	6.85	0.31	16.91	0.59	0.48	0.70
	TCR	26.12	19.46	6.66	0.29	19.72	0.77	0.35	0.63
Urbain	GER	23.28	15.71	7.56	0.39	16.00	0.70	0.45	0.66
	LC	20.84	19.91	0.92	0.05	15.03	0.54	0.40	0.74
	VeV	20.66	13.03	7.62	0.45	14.69	0.80	0.46	0.67
Industrie	FEY	22.70	13.25	9.45	0.53	16.50	0.91	0.42	0.61
	STF	22.49	15.60	6.89	0.36	15.61	0.70	0.43	0.68
Fond	COT	19.77	11.38	8.39	0.54	13.98	0.87	0.47	0.62
	GEN	20.98	13.49	7.48	0.43	14.84	0.78	0.43	0.69
	STE	19.71	11.16	8.55	0.55	14.41	0.94	0.45	0.62
	TER	21.25	11.82	9.43	0.57	15.51	0.96	0.45	0.59
Moyenne		22.71	15.61	7.10	0.38	15.99	0.75	0.44	0.66

TABLE 9.13 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, associées à l'approche EVSC appliquée avec la méthode M-Diff ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

lation CHIMERE de référence, qui sous-estiment les mesures de PM_{10} et qui sont peu corrélées avec celles-ci. Globalement, les plus mauvaises performances statistiques sont associées aux stations de type industrie et fond, pour lesquelles le biais fractionnel (FB) et l'erreur quadratique normalisée (NMSE) sont notamment plus élevés, en moyenne, que pour les autres types de stations. Les performances statistiques relatives aux stations de type trafic et urbain sont globalement comparables. Localement, les performances statistiques ne sont pas satisfaisantes car l'ensemble des critères de qualité associés aux indices statistiques n'est vérifié pour aucun des capteurs.

Les performances statistiques locales associées à l'approche EVSC-Diff sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2 sont indiquées dans le tableau 9.13. Le biais est négatif pour la majorité des capteurs. Ceci indique que les estimations associées à l'approche EVSC-Diff surestiment généralement les mesures de NO_2. De plus, le coefficient de corrélation est inférieur à 0.60 pour toutes les stations. Cela signifie que la variabilité temporelle des mesures n'est pas correctement modélisée avec les estimations relatives à l'approche EVSC-Diff. A l'instar du cas associé aux PM_{10}, cette faible corrélation est probablement liée au fait que la variable $c_{\text{régional}}$, qui joue un rôle prépondérant dans l'évaluation des concentrations avec l'approche EVSC-Diff, est associée aux estimations de la simulation CHIMERE de référence, qui sont peu corrélées avec les mesures de NO_2. Les performances statistiques pour les différents types de stations sont relativement comparables. Localement, les performances

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	71.81	55.17	16.64	0.26	50.55	0.64	0.34	0.53
	GC	42.59	58.01	-15.42	-0.31	34.06	0.47	0.56	0.67
	LP	53.53	57.59	-4.06	-0.07	34.90	0.40	0.55	0.71
	TCR	62.50	52.95	9.55	0.17	46.12	0.64	0.25	0.62
Urbain	GER	35.81	38.80	-2.98	-0.08	25.66	0.47	0.53	0.68
	LC	29.52	51.33	-21.81	-0.54	34.81	0.80	0.55	0.56
	STJ	29.57	43.00	-13.43	-0.37	28.94	0.66	0.59	0.63
	VeV	24.68	30.43	-5.75	-0.21	23.62	0.74	0.53	0.59
Industrie	FEY	25.25	31.25	-6.00	-0.21	25.95	0.85	0.39	0.54
	STF	29.72	43.15	-13.43	-0.37	28.72	0.64	0.57	0.66
Fond	COT	18.24	20.61	-2.36	-0.12	18.52	0.91	0.53	0.54
	GEN	29.45	36.95	-7.51	-0.23	25.23	0.59	0.49	0.63
	STE	13.71	18.71	-5.00	-0.31	16.01	1.00	0.53	0.55
	TER	22.87	23.99	-1.12	-0.05	20.46	0.76	0.51	0.58
Moyenne		34.95	40.14	-5.19	-0.17	29.54	0.68	0.49	0.61

TABLE 9.14 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, associées à l'approche EVSC appliquée avec la méthode M-Diff ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

ne sont pas satisfaisantes car l'ensemble des critères de qualité associés aux indices statistiques n'est vérifié pour aucune des stations.

Les biais (Bias), les erreurs types (RMSE) et les coefficients de corrélation (r) associés à l'approche EVSC-Diff sur le cas d'étude 2014 sont comparés à ceux de la simulation CHIMERE de référence sur la figure 9.15. Pour les deux polluants, les biais associés à l'approche EVSC-Diff et à la simulation CHIMERE de référence sont relativement comparables pour les stations de type urbain, industrie et fond. Pour les stations de type trafic, ils sont généralement meilleurs avec l'approche EVSC-Diff. De même, les erreur types et les coefficients de corrélation correspondant à l'approche EVSC-Diff sont globalement du même ordre de grandeur que ceux de la simulation CHIMERE de référence pour les deux polluants. Encore une fois, les performances statistiques associées à l'approche EVSC-Diff sont relativement similaires à celles de la simulation CHIMERE de référence pour les stations de type urbain, industrie et fond car les variables c^{moy}_{urbain} et c_{urbain} sont relativement similaires pour ces stations sur le cas d'étude 2014 (sous-section 9.3.2).

Les biais, les erreurs types et les coefficients de corrélation associés à l'approche EVSC-Diff sur le cas d'étude 2014 sont également comparés à ceux de la simulation SIRANE de référence (figure 9.16). Pour les deux polluants, les biais correspondant à l'approche EVSC-Diff sont moins bons que ceux de la simulation SIRANE pour la majorité des capteurs. De même, les erreurs types associées à l'approche EVSC-Diff sont plus élevées (plus mauvaises) que celles de la simulation SIRANE de référence pour la plupart des stations. De plus, les coefficients de corrélation relatifs à l'approche EVSC-Diff sont moins satisfaisants que ceux de la simulation SIRANE de référence, notamment pour les stations de type fond. Ils sont également sensiblement plus faibles dans le cas des PM_{10}.

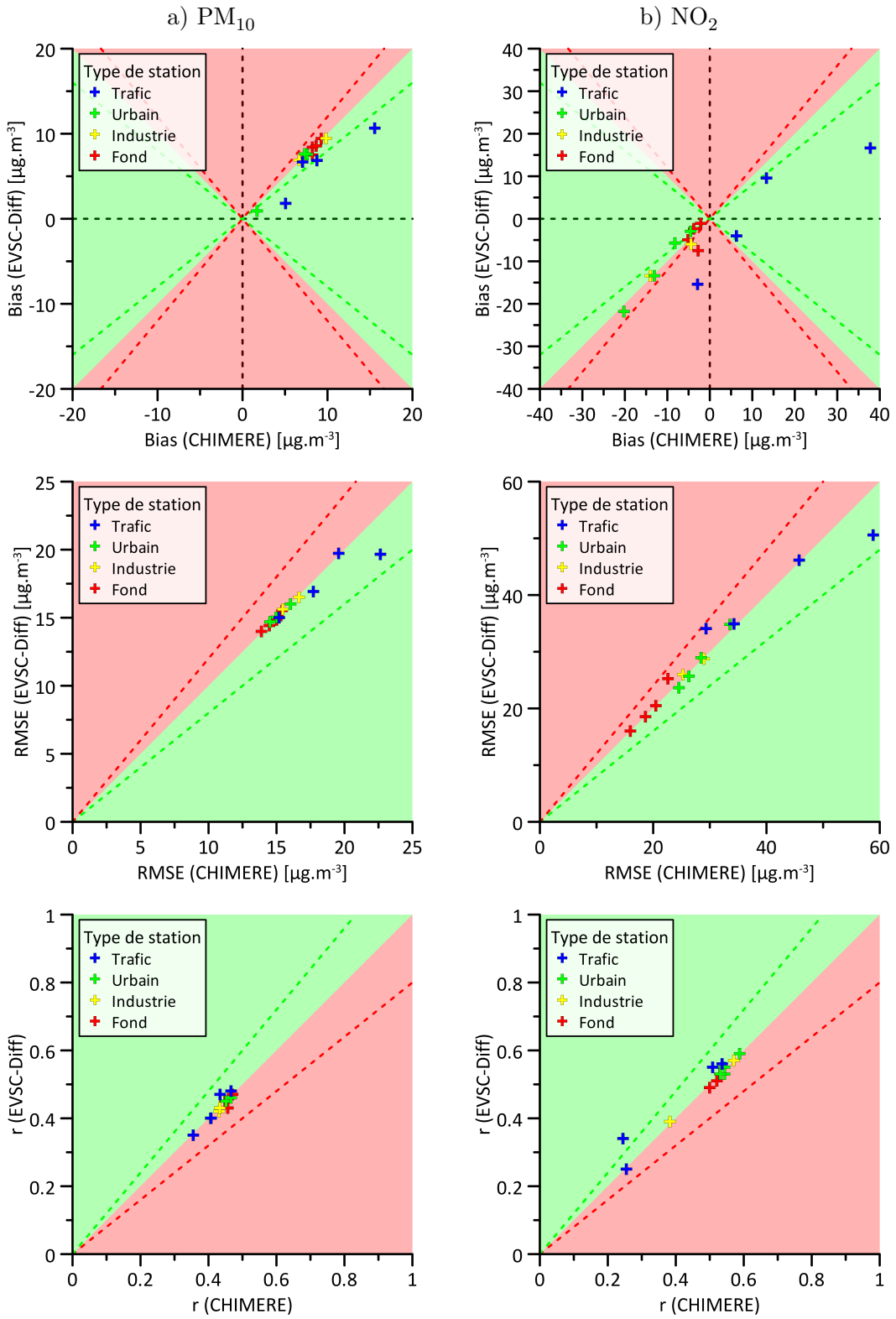


FIGURE 9.15 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés à l'approche EVSC appliquée avec la méthode M-Diff et à la simulation CHIMERE de référence (zone verte (rouge) : EVSC est meilleur (plus mauvais) que CHIMERE, ligne verte (rouge) en pointillés : EVSC est meilleur (plus mauvais) que CHIMERE de 20 %)

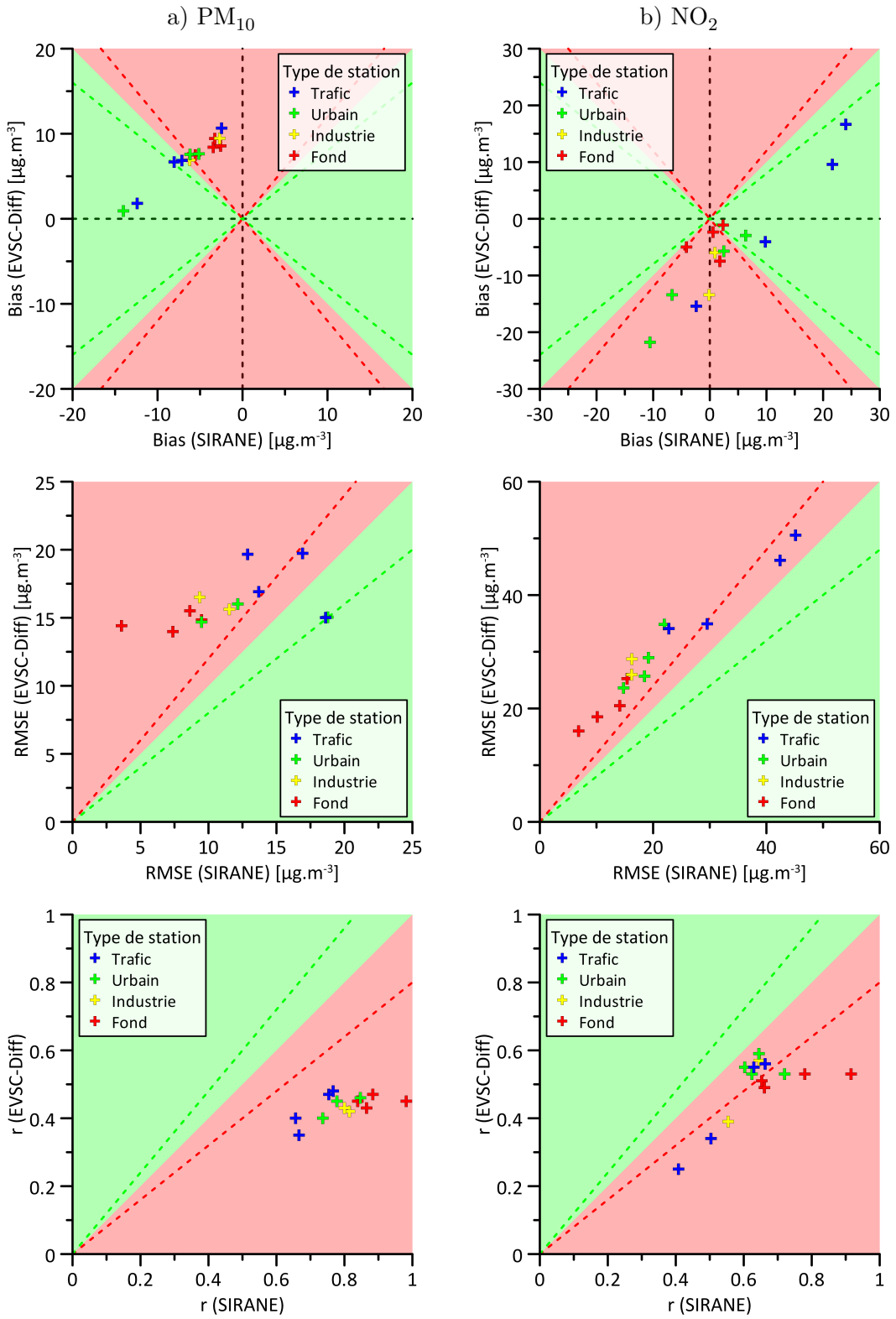


FIGURE 9.16 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés à l'approche EVSC appliquée avec la méthode M-Diff et à la simulation SIRANE de référence (zone verte (rouge) : Stocker est meilleur (plus mauvais) que SIRANE, ligne verte (rouge) en pointillés : Stocker est meilleur (plus mauvais) que SIRANE de 20 %)

9.4 Inter-comparaison des performances statistiques associées aux approches de couplage sur le cas d'étude 2014

Les performances statistiques relatives à l'approche de Stocker et aux approches ECF et EVSC sur le cas d'étude 2014 ont été analysées de manière indépendante dans les trois sections précédentes (sections 9.1, 9.2 et 9.3). L'objectif de cette section est de comparer ces performances statistiques. Pour les approches ECF et EVSC, seuls les résultats associés à la méthode conduisant au meilleur RMSE moyen sont utilisés dans cette analyse. Aussi, cette comparaison porte sur les performances statistiques relatives à l'approche ECF, mise en œuvre avec la méthode 0D-Périph-Min, à l'approche de Stocker et à l'approche EVSC, appliquée avec la méthode M-Diff. Dans la suite de cette section, *approche ECF* et *approche EVSC* font respectivement référence à l'approche ECF appliquée avec la méthode 0D-Périph-Moy et à l'approche EVSC utilisée avec la méthode M-Diff.

Les performances statistiques globales associées aux trois approches de couplage sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 9.15. Le biais moyen (Bias moyen) avec les trois approches de couplage est positif. Cela signifie que les estimations relatives à ces trois approches sous-estiment généralement les mesures de PM_{10}. De même, le coefficient de corrélation moyen (r moyen) est inférieur à 0.50 quelle que soit l'approche de couplage. Ceci montre que les concentrations modélisées avec les trois approches de couplage ne reproduisent pas de manière satisfaisante la variabilité temporelle des mesures. Les performances statistiques globales correspondant aux trois approches de couplage sont du même ordre de grandeur. Celles-ci ne sont pas totalement satisfaisantes car le coefficient de corrélation moyen ne vérifie pas le critère de qualité associé à cet indice statistique. De plus, ces performances statistiques sont globalement comparables à celles de la simulation CHIMERE de référence. Ceci s'explique en partie par le fait que l'estimation des concentrations en PM_{10} avec les méthodes de couplage sur le cas d'étude 2014 est significativement

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
CHIMERE	22.71	14.70	8.01	0.43	16.28	0.81	0.44	0.64
SIRANE		28.78	-6.08	-0.23	11.74	0.22	0.80	0.85
ECF		18.42	4.29	0.23	15.27	0.58	0.40	0.73
Stocker		17.15	5.56	0.30	15.54	0.65	0.44	0.70
EVSC		15.61	7.10	0.38	15.99	0.75	0.44	0.66

Table 9.15 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation CHIMERE de référence, à la simulation SIRANE de référence, à l'approche ECF, à l'approche de Stocker et à l'approche EVSC ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

influencée par les termes évalués à partir de la simulation CHIMERE de référence (sous-sections 9.1.3, 9.2.2 et 9.3.2). Cependant les performances statistiques relatives aux approches de couplage sont globalement moins satisfaisantes que celles associées à la simulation SIRANE de référence sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}.

Les performances statistiques globales correspondant aux trois approches de couplage sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2 sont indiquées dans le tableau 9.16. Le coefficient de corrélation moyen est inférieur à 0.60, quelle que soit l'approche de couplage. Cela indique que la variabilité temporelle des mesures de NO_2 n'est pas représentée de manière satisfaisante par les concentrations modélisées avec les approches de couplage. Les meilleures performances statistiques globales (pour les approches de couplage) sont associées à l'approche ECF. Le RMSE moyen relatif à cette approche est sensiblement plus faible (meilleur) que celui associé aux deux autres approches. Les autres indices statistiques sont cependant du même ordre de grandeur pour les trois approches. Les performances statistiques globales relatives aux approches de couplage ne sont pas complètement satisfaisantes car le coefficient de corrélation moyen ne vérifie pas le critère de qualité associé à cet indice statistique. Celles associées à l'approche de Stocker et à l'approche EVSC sont globalement comparables à celles de la simulation CHIMERE de référence. Encore une fois, cela s'explique en partie par le fait que l'estimation des concentrations en NO_2 avec ces méthodes de couplage sur le cas d'étude 2014 est significativement influencée par les termes évalués à partir de la simulation CHIMERE de référence (9.2.2 et 9.3.2). Les performances statistiques globales relatives à l'approche ECF sont néanmoins (légèrement) meilleures que celles de la simulation CHIMERE de référence, en raison d'un RMSE moyen sensiblement plus faible (les autres indices statistiques sont comparables). En revanche, les performances statistiques correspondant aux trois approches de couplage sont globalement moins satisfaisantes que celles de la simulation SIRANE de référence sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2.

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
CHIMERE	34.95	36.63	-1.68	-0.11	29.51	0.73	0.48	0.60
SIRANE		31.65	3.29	0.05	20.96	0.38	0.64	0.73
ECF		32.86	2.09	0.04	23.85	0.54	0.52	0.66
Stocker		40.08	-5.14	-0.17	28.01	0.62	0.54	0.65
EVSC		40.14	-5.19	-0.17	29.54	0.68	0.49	0.61

TABLE 9.16 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, associées à la simulation CHIMERE de référence, à la simulation SIRANE de référence, à l'approche ECF, à l'approche de Stocker et à l'approche EVSC ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

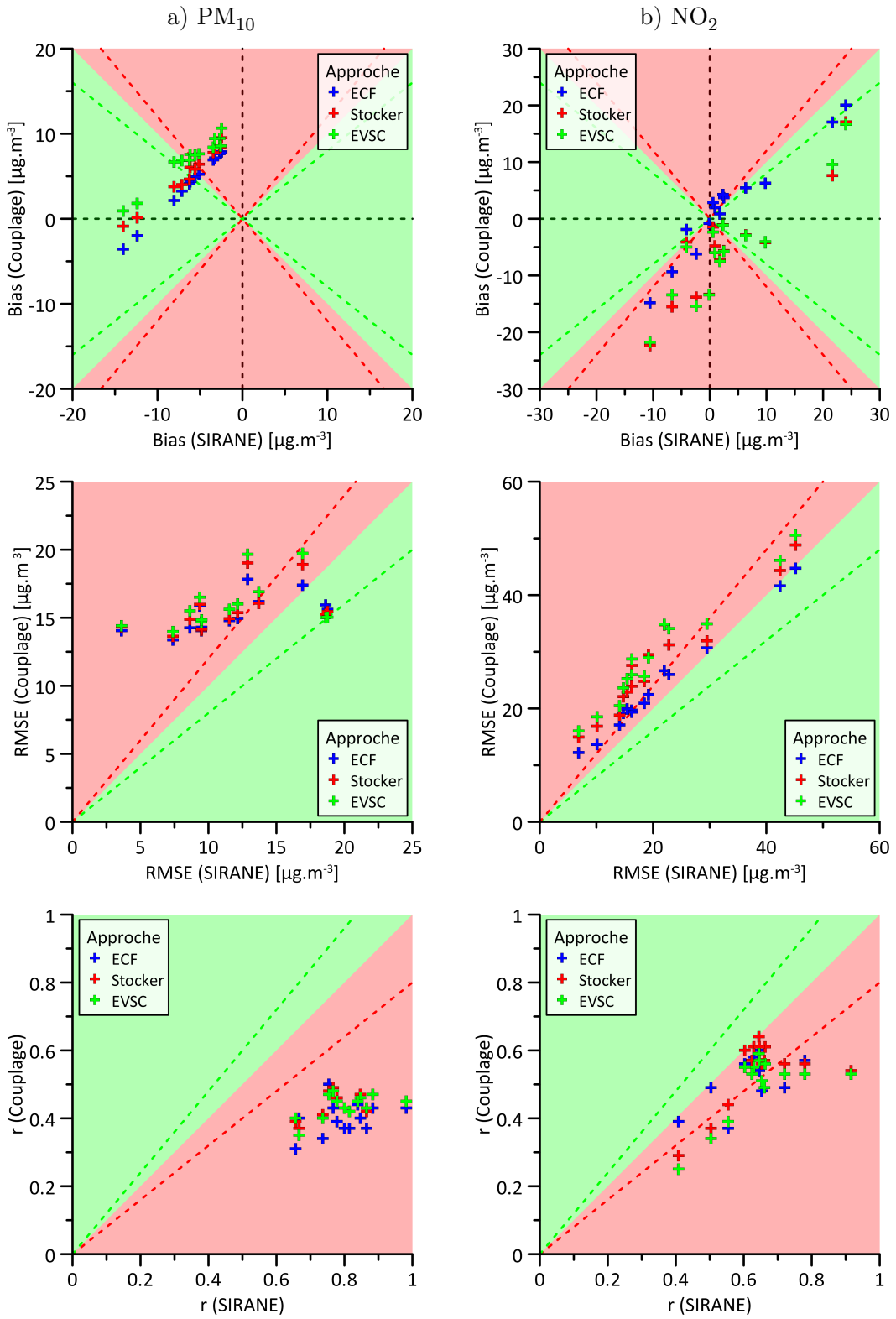


FIGURE 9.17 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés à l'approche ECF, à l'approche de Stocker et à l'approche EVSC à ceux de la simulation SIRANE de référence (zone verte (rouge) : l'approche de couplage est meilleure (plus mauvaise) que SIRANE, ligne verte (rouge) en pointillés : l'approche de couplage est meilleure (plus mauvaise) que SIRANE de 20 %)

Les performances statistiques locales (pour chaque capteur) associées aux trois approches de couplage sur le cas d'étude 2014 sont aussi comparées (sur la base des résultats associés à la simulation SIRANE de référence) sur la figure 9.17. Pour les PM_{10}, les biais relatifs à l'approche ECF sont légèrement meilleurs que ceux associés aux deux autres approches de couplage. Ils sont également meilleurs que ceux de la simulation SIRANE pour la majorité des capteurs. Pour le NO_2, les biais relatifs à l'approche de ECF sont aussi globalement meilleurs que ceux associés à l'approche de Stocker et à l'approche EVSC, qui sont relativement du même ordre de grandeur. De plus, les biais associés à l'approche ECF sont globalement similaires à ceux de la simulation SIRANE de référence. Dans le cas des PM_{10}, les erreurs types associées aux trois approches de couplage sont relativement comparables. De même, elles sont globalement plus mauvaises que celles de la simulation SIRANE de référence. Dans le cas du NO_2, elles sont également du même ordre de grandeur pour l'approche de Stocker et l'approche EVSC. Elles sont cependant légèrement plus élevées (plus mauvaises) que celles associées à l'approche ECF. Néanmoins, les erreurs types correspondant aux approches de couplage sont globalement plus mauvaises que celles de la simulation SIRANE de référence. Sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, les coefficients de corrélation associés à l'approche de Stocker et à l'approche EVSC sont relativement similaires. De plus, ils sont globalement légèrement plus élevés (meilleurs) que ceux relatifs à l'approche ECF. Les coefficients de corrélation correspondant aux approches de couplage sont cependant plus faibles (plus mauvais) que ceux de la simulation SIRANE de référence. Sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, les coefficients de corrélation associés aux trois approches de couplage sont du même ordre de grandeur. De plus, ils sont plus faibles que ceux de la simulation SIRANE de référence. Globalement les performances statistiques des trois approches de couplage sont comparables sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}. En revanche, les performances statistiques de l'approche ECF sont légèrement meilleures que celles associées aux deux autres approches de couplage sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2. Néanmoins, les performances statistiques correspondant aux trois approches de couplages sont globalement moins satisfaisantes que celles de la simulation SIRANE de référence pour les deux polluants.

9.5 Conclusion

Trois approches, classables dans la famille des méthodes d'imbrication de domaines de type one-way nested, ont été étudiées pour coupler un modèle à méso-échelle et un modèle à l'échelle urbaine. La première approche, nommée *approche ECF*, consiste à évaluer la concentration de fond pour la simulation à l'échelle urbaine à partir des résultats fournis par la simulation à l'échelle régionale. La seconde approche, appelée *approche de Stocker*, est celle proposée par Stocker *et al.* (2012). Celle-ci consiste notamment à estimer la contribution des polluants jeunes avec le modèle urbain et celles des polluants anciens avec le modèle à méso-échelle. La troisième approche, surnommée *approche EVSC*, considère que la variabilité spatiale des concentrations en milieu urbain est modélisée de manière plus satisfaisante avec la simulation à l'échelle urbaine mais que les concentrations moyennes spatiales à l'échelle kilométrique sont mieux représentées avec la simulation à l'échelle régionale.

Ces trois approches ont été appliquées sur le cas d'étude 2014 en couplant les modèles CHIMERE et SIRANE. Globalement, les performances statistiques associées à ces trois approches de couplage sont du même ordre de grandeur que celles de la simulation CHIMERE de référence, sauf dans le cas du NO_2, où celles associées à l'approche ECF sont légèrement plus satisfaisantes. Cependant, les résultats obtenus avec les trois approches de couplage sont moins bons que ceux de la simulation SIRANE de référence sur le cas d'étude 2014. Cela s'explique par le fait que les estimations fournies par la simulation CHIMERE de référence ne sont pas satisfaisantes sur ce cas d'étude. Néanmoins, il est possible que ces approches de couplage puissent améliorer l'estimation de la qualité de l'air à l'échelle urbaine en utilisant une simulation à l'échelle régionale plus satisfaisante. Pour cela, il pourrait notamment être intéressant d'appliquer une méthode d'assimilation de données sur la simulation à l'échelle régionale, avant d'effectuer le couplage avec un modèle à l'échelle urbaine.

Ces résultats montrent que ces trois approches de couplage permettent potentiellement d'évaluer la qualité de l'air en milieu urbain de manière plus satisfaisante qu'un modèle à méso-échelle seul. Néanmoins, elles ne permettent pas forcément d'améliorer l'évaluation des conditions aux limites d'un modèle urbain et les résultats fournis par celui-ci. Cette conclusion rejoint celle de l'article de Stocker et al. (2012).

Conclusion de la troisième partie

Pour modéliser la qualité de l'air en prenant en compte les différentes échelles de dispersion atmosphérique, il est notamment possible d'utiliser des méthodes d'imbrication de domaines. Ces méthodes consistent à évaluer les conditions aux limites d'une simulation à partir d'une simulation réalisée à plus grande échelle. Celles-ci permettent d'utiliser des modèles adaptés aux différentes échelles. Aussi, les phénomènes de transport et les réactions physico-chimiques prépondérants à chaque échelle sont a priori modélisés de manière plus satisfaisante.

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous avons étudié trois approches de ce type pour coupler un modèle à méso-échelle et un modèle urbain : l'*approche ECF*, l'*approche de Stocker* et l'*approche EVSC*. Nous avons évaluées ces trois approches sur le cas d'étude 2014 en couplant les modèles CHIMERE et SIRANE. Globalement, les performances statistiques correspondant à ces trois approches de couplage sont du même ordre de grandeur que celles de la simulation CHIMERE de référence, à part dans le cas du NO_2, où celles associées à l'approche ECF sont légèrement meilleures. La similarité avec les résultats de la simulation CHIMERE, dans la plupart des cas, est due au fait que l'estimation des concentrations avec ces approches, sur le cas d'étude 2014, est significativement influencée par les termes évalués à partir de la simulation CHIMERE de référence. Néanmoins, les performances statistiques relatives à ces trois approches de couplage sont moins satisfaisantes que celles associées à la simulation SIRANE de référence sur le cas d'étude 2014 car la simulation CHIMERE de référence n'est pas satisfaisante sur ce cas d'étude. Il est cependant possible que ces approches de couplage améliorent les résultats à l'échelle urbaine en utilisant une modélisation à l'échelle régionale plus satisfaisante. Celle-ci pourrait notamment être améliorée en utilisant des méthodes d'assimilation de données.

Ces résultats indiquent que ces trois approches de couplage permettent potentiellement d'évaluer les concentrations de polluants en milieu urbain de manière plus satisfaisante qu'un modèle à méso-échelle seul. Néanmoins, elles ne permettent pas forcément d'améliorer l'estimation des conditions aux limites d'un modèle urbain et les résultats fournis par celui-ci.

Quatrième partie

Assimilation de données avec un modèle urbain de qualité de l'air

Chapitre 10
Etat de l'art des méthodes d'assimilation de données

Les méthodes d'assimilation de données (AD) consistent à combiner des données mesurées et modélisées, avec une approche statistique ou géométrique, afin de fournir la meilleure estimation possible de l'état d'un système. L'approche d'AD est apparue en même temps que la méthode aux moindres carrés (ou les méthodes similaires) entre le XVIIIe et le XIXe siècle. Le premier domaine d'application des techniques d'AD a été l'astronomie. K. F. Gauss a notamment déterminé l'orbite de la planète Ceres en utilisant la méthode aux moindres carrés (Gauss, 1809). De nos jours, les méthodes d'AD sont aussi couramment utilisées dans les domaines des sciences de la terre, de la biologie, du traitement d'images, du traitement des signaux ou bien encore des finances.

L'objectif de ce chapitre est de présenter les différents types d'AD et le formalisme mathématique utilisé dans cette partie (section 10.1). De plus, les méthodes d'AD appelées *débiaisement*, *Best Linear Unbiased Estimator*, *filtre de Kalman*, *3D-Var* et *4D-Var* sont décrites dans les sections 10.2 à 10.5. Le lecteur est invité à consulter les ouvrages de Cressie (1993), Daley (1993), Talagrand (1997) et Kalnay (2003) pour une description plus détaillée des méthodes d'AD.

10.1 Types d'assimilation de données et formalisme mathématique

10.1.1 Types d'assimilation de données

Les méthodes d'assimilation de données peuvent être classées dans deux catégories : les méthodes séquentielles et les méthodes variationnelles, aussi appelées méthodes rétrospectives (Bouttier et Courtier, 2002). Les méthodes séquentielles exploitent principalement les observations associées à l'instant t de l'assimilation. Pour ce type de méthode, l'assimilation est réalisée pour les instants où des observations sont disponibles. Ces méthodes sont particulièrement bien adaptées pour l'assimilation de données en temps réel. Dans le cas des méthodes variationnelles, les observations relatives à des périodes ultérieures à l'instant t de l'assimilation peuvent également être utilisées. Ces méthodes sont alors plus appropriées pour effectuer des réanalyses. Il existe aussi une autre distinction entre

les méthodes d'AD : les méthodes intermittentes et les méthodes continues (Daget, 2007). Pour les méthodes intermittentes, l'analyse est réalisée sur des fenêtres temporelles relativement petites. Cela facilite notamment l'implémentation de ces méthodes. Pour les méthodes continues, l'analyse est effectuée sur des fenêtres temporelles plus grandes. Cela permet de fournir une analyse plus lisse et plus cohérente avec la dynamique du système.

10.1.2 Formalisme mathématique des méthodes d'assimilation de données

L'objectif des méthodes d'assimilation de données est de déterminer l'état réel d'un système qui est par définition inconnu. Celui-ci est représenté par le vecteur d'état $\mathbf{x^t}$ (t pour *true*) appelé *état réel*. Pour estimer cet état réel, les méthodes d'AD s'appuient sur des données modélisées et des observations. Les données modélisées constituent l'estimation a priori de l'état du système. Ces données sont représentées par le vecteur d'état $\mathbf{x^b}$ (b pour *background*) appelé *ébauche*. Ces deux vecteurs d'état, $\mathbf{x^t}$ et $\mathbf{x^b}$, sont de taille n. De même, les observations sont représentées par le vecteur $\mathbf{y}$ appelé *vecteur d'observation*. Ce vecteur est de taille m. Généralement, m est très inférieur à n (Daget, 2007). La variable observée ne correspond pas forcément à la variable étudiée (celle associée aux vecteurs d'état). Par exemple, les observations peuvent être associées aux radiances mesurées par un satellite alors que l'ébauche peut être relative à des températures. Les observations ne font pas non plus nécessairement référence aux mêmes points de l'espace que les données associées aux vecteurs d'état. De plus, l'ébauche et les observations ne correspondent pas obligatoirement au même *type* d'information. Les observations peuvent par exemple correspondre à des concentrations moyennes alors que l'ébauche peut faire référence à des concentrations instationnaires. Pour comparer le vecteur d'observation et les vecteurs d'état, il est alors nécessaire de définir une fonction qui permette de passer de l'espace du système (espace relatif aux vecteurs d'état) à celui des observations. Cette fonction, appelée *opérateur d'observation*, est représentée par la matrice $\mathbf{H}$ de taille $m \times n$ (par la suite, cet opérateur est supposé linéaire). Aussi, les équivalents de l'état réel et de l'ébauche dans l'espace des observations sont respectivement $\mathbf{Hx^t}$ et $\mathbf{Hx^b}$. En combinant les observations et l'ébauche, les techniques d'AD fournissent *en un certain sens* la meilleure estimation possible de l'état du système. Celle-ci est représentée par le vecteur d'état $\mathbf{x^a}$ appelé *analyse*. Ce vecteur d'état est également de taille n. De même, l'équivalent de l'analyse dans l'espace des observations est $\mathbf{Hx^a}$.

10.2 Débiaisement

La méthode de débiaisement est une méthode relativement simple qui consiste à estimer les biais de l'ébauche (par rapport à l'état réel) et à les supprimer afin de déterminer une analyse qui ne soit pas biaisée vis-à-vis de l'état réel (équation 10.1).

$$\overline{\mathbf{x^t} - \mathbf{x^a}} = 0 \tag{10.1}$$

Dans le cadre de cette méthode, les observations sont supposées non biaisées vis-à-vis de l'état réel ($\overline{\mathbf{y} - \mathbf{Hx^t}} = 0$). Aussi, la méthode de débiaisement cherche à estimer une analyse qui vérifie

également l'équation 10.2.

$$\overline{\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}^{\mathbf{a}}} = 0 \tag{10.2}$$

Le débiaisement peut être effectué avec deux approches différentes. La première approche consiste à supprimer les biais relatifs à chaque terme de l'ébauche en ajoutant une variable de débiaisement. Dans ce cas, l'analyse est estimée avec l'équation 10.3 :

$$\mathbf{x}^{\mathbf{a}} = \mathbf{x}^{\mathbf{b}} + \epsilon \tag{10.3}$$

où ϵ est un vecteur de taille n associé à la variable de débiaisement. Celle-ci dépend de l'ébauche et des observations. Cette approche est notamment utilisée par McKeen *et al.* (2005), Wilczak *et al.* (2006), Kang *et al.* (2008) et Monteiro *et al.* (2013). Dans ces études, la variable de débiaisement en un point p_i, ϵ_i, est estimée uniquement à partir des observations et des valeurs de l'ébauche relatives à ce même point. Il convient de préciser que l'ébauche et les observations portent sur la même variable, à savoir les concentrations de polluants. McKeen *et al.* (2005) associent ϵ_i à l'écart moyen (biais) entre les mesures et les concentrations modélisées sur toute la période d'étude. En revanche, Wilczak *et al.* (2006) évaluent ϵ_i uniquement à partir des données relatives aux sept derniers jours (par rapport à l'instant t de l'assimilation). De même, Kang *et al.* (2008) et Monteiro *et al.* (2013) estiment ϵ_i en exploitant seulement les données relatives à des instants antérieurs à l'assimilation. Cependant, ils utilisent uniquement celles qui sont associées au même moment de la journée (c'est-à-dire à la même heure h) que l'instant de l'assimilation.

La seconde approche consiste à supprimer les biais en multipliant les valeurs de l'ébauche par une variable d'ajustement. Dans ce cas, l'analyse est déterminée avec l'équation 10.4 :

$$\mathbf{x}^{\mathbf{a}} = \mathbf{x}^{\mathbf{b}}\,\eta \tag{10.4}$$

où η est un vecteur de taille n relatif à la variable d'ajustement. A l'instar de la variable de débiaisement, celle-ci dépend également de l'ébauche et des observations. Cette approche est aussi utilisée par McKeen *et al.* (2005) et Monteiro *et al.* (2013). Dans ces deux études, la variable d'ajustement en un point p_i, η_i, est évaluée en exploitant les mêmes données que celles utilisées pour estimer la variable de débiaisement ϵ_i. Cependant, η_i est définie comme le rapport entre la moyenne des concentrations mesurées et la moyenne des concentrations modélisées. McKeen *et al.* (2005) indiquent notamment que cette approche fournit des résultats légèrement plus satisfaisants que la première approche. Borrego *et al.* (2011) appliquent aussi cette seconde approche avec une démarche comparable à celle de Monteiro *et al.* (2013). Néanmoins, ils évaluent η_i en utilisant seulement les données relatives aux quatre derniers jours.

10.3 Best Linear Unbiased Estimator (BLUE)

10.3.1 Description de la méthode BLUE

La méthode Best Linear Unbiased Estimator (BLUE) est une méthode d'interpolation statistique qui détermine l'analyse en fonction des erreurs d'ébauche et d'observation. Celles-ci sont respectivement représentées par le *vecteur des erreurs d'ébauche* $\mathbf{e^b}$ et le *vecteur des erreurs d'observation* $\mathbf{e^o}$. Les erreurs d'observations correspondent à la somme des erreurs faites par l'instrument de mesure, des erreurs de représentativité des observations et celles liées à la modélisation de l'opérateur $\mathbf{H}$. Cette méthode suppose que l'ébauche et les observations ne sont pas biaisées vis-à-vis de l'état réel (équations 10.5 et 10.6).

$$\overline{\mathbf{e^b}} = \overline{\mathbf{x^b} - \mathbf{x^t}} = 0 \tag{10.5}$$

$$\overline{\mathbf{e^o}} = \overline{\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x^t}} = 0 \tag{10.6}$$

Celles-ci n'étant pas biaisées (hypothèse), la méthode BLUE cherche à fournir une analyse qui ne soit pas non plus biaisée. Aussi, les erreurs d'analyse, représentées par le vecteur $\mathbf{e^a}$ appelée *vecteur des erreurs d'analyse*, doivent vérifier la relation 10.7.

$$\overline{\mathbf{e^a}} = \overline{\mathbf{x^a} - \mathbf{x^t}} = 0 \tag{10.7}$$

De plus, la méthode BLUE définit l'analyse comme une combinaison linéaire de l'ébauche et des observations. Aussi, en tenant compte des deux hypothèses précédentes (équations 10.5 et 10.6) et de la contrainte représentée par l'expression 10.7, l'analyse peut s'exprimer sous la forme de la relation 10.8.

$$\mathbf{x^a} = \mathbf{x^b} + \mathbf{K}\left(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x^b}\right) \tag{10.8}$$

Cette équation indique que l'analyse est une correction de l'ébauche avec le terme $\mathbf{K}\left(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x^b}\right)$. Les termes $\mathbf{K}$ et $\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x^b}$ sont respectivement appelés *gain de Kalman* et *innovation*. L'innovation est également représentée par le vecteur $\mathbf{z}$. La méthode BLUE suppose également que les erreurs d'ébauche ($\mathbf{e^b}$) et les erreurs d'observation ($\mathbf{e^o}$) ne sont pas corrélées (équation 10.9, ^{T} indique la transposée du vecteur). Cette hypothèse est a priori valable puisque les données modélisées et mesurées proviennent d'outils différents.

$$\overline{\mathbf{e^b}(\mathbf{e^o})^{\mathrm{T}}} = 0 \tag{10.9}$$

La méthode BLUE considère que la *meilleure estimation* (analyse) est celle qui minimise la variance des erreurs d'analyse. Cette variance correspond à la trace de la matrice $\mathbf{A}$, appelée *matrice de covariance des erreurs d'analyse*. Cette matrice est définie par l'expression 10.10.

$$\mathbf{A} = \overline{\mathbf{e^a}(\mathbf{e^a})^{\mathrm{T}}} \tag{10.10}$$

En tenant compte des hypothèses et des contraintes citées précédemment, le gain de Kalman optimal qui conduit à la meilleure estimation est défini par l'expression 10.11 :

$$\mathbf{K} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R})^{-1} \tag{10.11}$$

où $\mathbf{B}$ et $\mathbf{R}$ sont respectivement la *matrice de covariance des erreurs d'ébauche* (équation 10.12) et la *matrice de covariance des erreurs d'observation* (équation 10.13).

$$\mathbf{B} = \overline{\mathbf{e^b}(\mathbf{e^b})^{\mathrm{T}}} \tag{10.12}$$

$$\mathbf{R} = \overline{\mathbf{e^o}(\mathbf{e^o})^{\mathrm{T}}} \tag{10.13}$$

Le rôle de la matrice $\mathbf{K}$ est de pondérer la correction apportée à l'ébauche en fonction de la corrélation des erreurs d'ébauche et de la confiance associée aux observations et aux données modélisées (ébauche). Cette confiance est quantifiée par les variances des erreurs d'ébauche et d'observation. Celles-ci correspondent respectivement aux valeurs situées sur la diagonale des matrices $\mathbf{B}$ et $\mathbf{R}$. La modélisation de ces matrices, notamment la matrice $\mathbf{B}$, constitue l'étape critique de la méthode BLUE. Celle-ci est décrite dans la prochaine sous-section.

La méthode BLUE est souvent appliquée avec des modèles de qualité de l'air à méso-échelle (Blond *et al.*, 2003 ; Wu *et al.*, 2008 ; Frydendall *et al.*, 2009 ; Tombette *et al.*, 2009 ; Candiani *et al.*, 2010 ; Messina *et al.*, 2011 ; Wang *et al.*, 2011 ; Kumar *et al.*, 2012 ; Zhang *et al.*, 2012 ; Candiani *et al.*, 2013 ; Silver *et al.*, 2013a). A notre connaissance, seuls Tilloy *et al.* (2013) ont appliqué cette méthode avec un modèle de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine. Cette étude montre que la méthode BLUE permet d'améliorer les estimations fournies par le modèle de qualité de l'air.

10.3.2 Estimation des covariances des erreurs d'ébauche et d'observation

Les matrices $\mathbf{B}$ et $\mathbf{R}$ permettent d'évaluer la correction à apporter (à l'ébauche) pour déterminer la meilleure estimation. La matrice $\mathbf{B}$ a notamment un rôle primordial puisqu'elle permet de diffuser la correction sur les points de l'espace où il n'y pas d'observations. Le but de cette sous-section est de présenter plusieurs approches utilisées pour modéliser les covariances des erreurs d'ébauche et d'observation.

Les erreurs d'observation en deux points distincts p_i et $p_{j\neq i}$ sont parfois considérées comme décorrélées (équation 10.14) (Blond *et al.*, 2003 ; Tombette *et al.*, 2009 ; Messina *et al.*, 2011 ; Wang *et al.*, 2011 ; Kumar *et al.*, 2012 ; Candiani *et al.*, 2013 ; Silver *et al.*, 2013a ; Tilloy *et al.*, 2013). Cette hypothèse est parfois justifiée par le fait que les mesures en deux points distincts sont effectuées par deux installations différentes. Cependant elle peut ne pas être valable lorsque les mesures proviennent d'un même appareil (par exemple les mesures par satellite ou les mesures mobiles).

$$\overline{\mathrm{e}_i^{\mathrm{o}}\mathrm{e}_{j\neq i}^{\mathrm{o}}} = 0 \tag{10.14}$$

Lorsqu'elles sont décorrélées, la matrice $\mathbf{R}$ est diagonale. Il est alors nécessaire d'évaluer uniquement

les variances des erreurs d'observation dans le cas de la matrice $\mathbf{R}$. Ces variances peuvent être estimées à partir des connaissances associées aux techniques de mesures (Daget, 2007 ; Tilloy *et al.*, 2013). Elles peuvent également être évaluées avec la *méthode observationnelle* (Hollingsworth et Lönnberg, 1986). Cette méthode, qui est couramment utilisée pour modéliser les matrices $\mathbf{B}$ et $\mathbf{R}$ (Blond *et al.*, 2003 ; Chai *et al.*, 2007 ; Bannister, 2008 ; Frydendall *et al.*, 2009 ; Kumar *et al.*, 2012), s'appuie sur les statistiques de l'innovation $\mathbf{z}$ ($\mathbf{z} = \mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x^b}$). D'après les équations 10.9 et 10.14 (hypothèses), la covariance des innovations aux points p_i et $p_{j\neq i}$, $cov(\mathrm{z}_i, \mathrm{z}_j)$, correspond à la covariance des erreurs d'ébauche relatives à ces deux mêmes points (équation 10.15 ; $\mathbf{H}_i$ est la i^{ème} ligne de la matrice $\mathbf{H}$ qui permet de trouver l'équivalent d'un vecteur d'état dans l'espace des observations au point p_i). Cependant, lorsque p_i est équivalent à $p_{j=i}$, la covariance $cov(\mathrm{z}_i, \mathrm{z}_j)$ (qui est aussi la variance d'une des composantes de l'innovation) correspond à la somme de la variance de l'erreur d'ébauche $(\sigma_i^{\mathrm{b}})^2$ et de la variance de l'erreur d'observation $(\sigma_i^{\mathrm{o}})^2$ au point p_i.

$$\begin{aligned}
cov(\mathrm{z}_i, \mathrm{z}_j) &= \overline{(\mathrm{y}_i - \mathbf{H}_i\mathbf{x^b})\left(\mathrm{y}_j - \mathbf{H}_j\mathbf{x^b}\right)^{\mathrm{T}}} \\
&= \overline{(\mathrm{y}_i - \mathbf{H}_i\mathbf{x^t} + \mathbf{H}_i\mathbf{x^t} - \mathbf{H}_i\mathbf{x^b})\left(\mathrm{y}_j - \mathbf{H}_j\mathbf{x^t} + \mathbf{H}_j\mathbf{x^t} - \mathbf{H}_j\mathbf{x^b}\right)^{\mathrm{T}}} \\
&= \overline{(\mathrm{y}_i - \mathbf{H}_i\mathbf{x^t})\left(\mathrm{y}_j - \mathbf{H}_j\mathbf{x^t}\right)^{\mathrm{T}}} + \mathbf{H}_i\overline{(\mathbf{x^t} - \mathbf{x^b})(\mathbf{x^t} - \mathbf{x^b})^{\mathrm{T}}}\mathbf{H}_j^{\mathrm{T}} \\
&\quad + \overline{(\mathrm{y}_i - \mathbf{H}_i\mathbf{x^t})(\mathbf{x^t} - \mathbf{x^b})^{\mathrm{T}}}\mathbf{H}_j^{\mathrm{T}} + \mathbf{H}_i\overline{(\mathbf{x^t} - \mathbf{x^b})\left(\mathrm{y}_j - \mathbf{H}_j\mathbf{x^t}\right)^{\mathrm{T}}} \\
&= \mathbf{R}_{ij} + \mathbf{H}_i\mathbf{B}\mathbf{H}_j^{\mathrm{T}} + 0 + 0
\end{aligned} \tag{10.15}$$

Aussi, la méthode observationnelle consiste à chercher une fonction f qui modélise les covariances des innovations $cov(\mathrm{z}_i, \mathrm{z}_{j\neq i})$ en fonction d'une (ou plusieurs) variable de séparation l, par exemple la distance euclidienne qui sépare les points p_i et p_j (figure 10.1). D'après l'équation 10.15, la fonction f constitue également une représentation des covariances des erreurs d'ébauche en fonction de la variable de séparation l. De même, la valeur de f pour une distance nulle ($l = 0$) correspond à la variance des erreurs d'ébauche $(\sigma^{\mathrm{b}})^2$. La variance $\sigma^{2,\mathrm{b}}$ et la variance de l'innovation permettent finalement de déterminer la variance des erreurs d'observation $(\sigma^{\mathrm{o}})^2$. Il convient de signaler que les variances $(\sigma^{\mathrm{b}})^2$ et $(\sigma^{\mathrm{o}})^2$ évaluées avec la méthode observationnelle sont supposées homogènes dans l'espace. De même, les matrices $\mathbf{B}$ et $\mathbf{R}$ modélisées avec cette approche sont supposées stationnaires (constantes dans le temps).

La matrice $\mathbf{B}$ est aussi couramment évaluée avec la méthode d'ensemble (Evensen, 2003 ; Oke *et al.*, 2005, 2008, 2010 ; Counillon *et al.*, 2009 ; Counillon et Bertino, 2009 ; Song *et al.*, 2010 ; Xie et Zhu, 2010 ; Srinivasan *et al.*, 2011 ; Ratheesh *et al.*, 2014). Celle-ci a été introduite par Evensen (1994) dans le cadre de la méthode appelée *Ensemble Kalman Filter* (EnFK). Cette méthode peut également être utilisée avec la méthode BLUE. Dans ce cas, la méthode BLUE est appelée *Ensemble Optimal Interpolation* (EnOI). La méthode d'ensemble consiste à créer un ensemble composé de N ébauches perturbées, pour la méthode EnKF, ou de N ébauches échantillonnées sur une longue

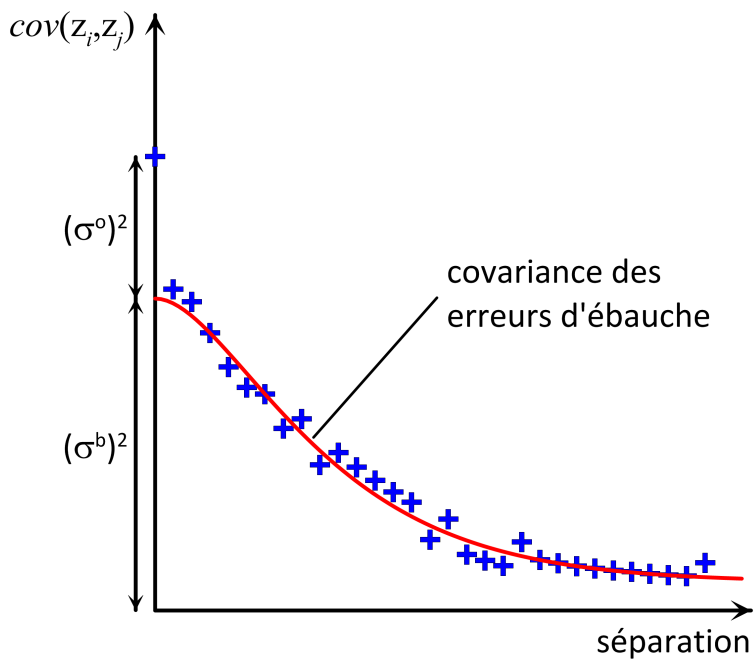


FIGURE 10.1 – Représentation schématique de la méthode observationnelle (les croix bleues sont les covariances des innovations, $cov(\mathrm{z}_i, \mathrm{z}_j)$, et $(\sigma^{\mathrm{b}})^2$ et $(\sigma^{\mathrm{o}})^2$ correspondent respectivement à la variance des erreurs d'ébauche et la variance des erreurs d'observation)

période, pour la méthode EnOI. Cet ensemble est représenté par une matrice de taille $n \times N$ dans laquelle chaque colonne correspond à une ébauche $\mathbf{x}_{\mathrm{e}}^{\mathbf{b}}$ perturbée ou échantillonnée (e=1,2,...,N). A partir de cet ensemble, une ébauche moyenne $\overline{\mathbf{g}^{\mathbf{b}}}$ est déterminée (équation 10.16).

$$\overline{\mathbf{g}^{\mathbf{b}}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathrm{e}}^{N} \mathbf{x}_{\mathrm{e}}^{\mathbf{b}} \tag{10.16}$$

Ensuite, la matrice $\mathbf{B}$ est déterminée en fonction des erreurs de l'ensemble vis-à-vis de l'ébauche moyenne avec l'expression 10.17.

$$\mathbf{B} \simeq \frac{\alpha}{N-1} \sum_{\mathrm{e}}^{N} (\mathbf{x}_{\mathbf{e}}^{\mathbf{b}} - \overline{\mathbf{g}^{\mathbf{b}}})(\mathbf{x}_{\mathbf{e}}^{\mathbf{b}} - \overline{\mathbf{g}^{\mathbf{b}}})^{\mathrm{T}} \tag{10.17}$$

Dans le cas où l'ensemble est composé d'un large échantillon d'ébauches (EnOI), les covariances des erreurs d'ébauche peuvent être relativement élevées car les ébauches qui constituent l'ensemble sont associées à une grande fenêtre temporelle. Les covariances des erreurs d'ébauche ne sont alors pas forcément représentatives de celles associées à l'instant d'analyse. Aussi, le paramètre α ($\alpha \in (0;1]$) dans l'équation 10.17 permet de pondérer les covariances des erreurs d'ébauche pour les différents pas de temps lors de l'assimilation de données. Dans le cas de la méthode EnKF, le paramètre α est égal à 1. Il convient de signaler que la matrice $\mathbf{R}$ peut également être modélisée avec la méthode d'ensemble. Cette méthode est décrite plus en détail dans Evensen (2003).

La cohérence entre les covariances des erreurs (d'ébauche et d'observation) et les innovations peut être vérifiée avec le diagnostic du χ^2 (Ménard et Chang, 2000 ; Tombette *et al.*, 2009 ; Tilloy *et al.*, 2013). Celui-ci consiste à calculer à chaque pas de temps t la valeur de χ_t^2 qui est définie avec l'expression 10.18 :

$$\chi_t^2 = \left(\mathbf{y}_t - \mathbf{H}_t\mathbf{x}_t^{\mathbf{b}}\right)^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{H}_t\mathbf{B}_t\mathbf{H}_t^{\mathrm{T}} + \mathbf{R}_t\right)^{-1} \left(\mathbf{y}_t - \mathbf{H}_t\mathbf{x}_t^{\mathbf{b}}\right) \tag{10.18}$$

où $\mathbf{y}_t$, $\mathbf{x}_t^{\mathbf{b}}$, $\mathbf{H}_t$, $\mathbf{B}_t$ et $\mathbf{R}_t$ représentent respectivement le vecteur d'observation, l'ébauche, l'opérateur d'observation, la matrice $\mathbf{B}$ et la matrice $\mathbf{R}$ associés au temps t. En moyenne, χ_t^2 doit être égal au nombre de capteurs au temps t, m_t. Aussi, les matrices $\mathbf{B}_t$ et $\mathbf{R}_t$ doivent conduire à une valeur de V_χ proche de 1 (équation 10.19 ; T est le nombre de pas de temps total) :

$$V_\chi = \frac{1}{T}\sum_t^T \frac{\chi_t^2}{m_t} \tag{10.19}$$

10.4 Filtre de Kalman

Le filtre de Kalman est décrit par R. E. Kalman et R. S. Bucy au début des années 1960 (Kalman, 1960 ; Kalman et Bucy, 1961). Cette méthode peut être considérée comme une extension de la méthode BLUE avec une dimension temporelle. En plus de l'étape d'analyse, identique à la méthode BLUE, le filtre de Kalman tient compte de la dynamique du système en incluant un modèle d'évolution M entre le temps d'indice t et le temps d'indice $t+1$. Ce modèle d'évolution, considéré linéaire par la suite, est représenté par la matrice $\mathbf{M}_{t\to t+1}$ appelée *matrice de transfert* (ou *matrice de transition*). Aussi, il est nécessaire de prendre en compte les erreurs liées au modèle d'évolution. Ces erreurs, appelées *erreurs modèle*, sont représentées au temps d'indice t par le vecteur $\mathbf{e}_t^{\mathbf{M}}$ défini par l'expression 10.20. Le filtre de Kalman suppose qu'elles sont non biaisées et non corrélées avec les erreurs d'analyse.

$$\mathbf{e}_t^{\mathbf{M}} = \mathbf{M}_{t\to t+1}\mathbf{x}_t^{\mathbf{t}} - \mathbf{x}_{t+1}^{\mathbf{t}} \tag{10.20}$$

La première étape du filtre de Kalman, appelée *étape d'analyse*, consiste à déterminer le gain de Kalman (équation 10.21), l'analyse (équation 10.22) et la matrice de covariance des erreurs d'analyse A (équation 10.23 ; $\mathbf{I}_n$ est la matrice identité de dimension n) au temps d'indice t.

$$\mathbf{K}_t = \mathbf{B}_t\mathbf{H}_t^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{H}_t\mathbf{B}_t\mathbf{H}_t^{\mathrm{T}} + \mathbf{R}_t\right)^{-1} \tag{10.21}$$

$$\mathbf{x}_t^{\mathbf{a}} = \mathbf{x}_t^{\mathbf{b}} + \mathbf{K}_t\left(\mathbf{y}_t - \mathbf{H}_t\mathbf{x}_t^{\mathbf{b}}\right) \tag{10.22}$$

$$\mathbf{A}_t = \left(\mathbf{I}_n - \mathbf{K}_t\mathbf{H}_t\right)\mathbf{B}_t \tag{10.23}$$

La seconde étape, appelée *étape de prévision*, consiste à propager l'analyse et la matrice $\mathbf{A}$ au temps d'indice $t+1$ à l'aide du modèle d'évolution (équations 10.24 et 10.25). Cette étape permet de définir l'ébauche et la matrice $\mathbf{B}$ au temps d'indice $t+1$. Lors de cette étape, la matrice $\mathbf{A}$ est propagée

au temps d'indice $t+1$ en tenant compte de la matrice de covariance des erreurs modèle, notée $\mathbf{Q}$, relative à l'instant t (équation 10.25).

$$\mathbf{x}^{\mathbf{b}}_{t+1} = M_{t\to t+1}\mathbf{x}^{\mathbf{a}}_{t} \tag{10.24}$$

$$\mathbf{B}_{t+1} = \mathbf{M}_{t\to t+1}\mathbf{A}_t\mathbf{M}^{\mathrm{T}}_{t\to t+1} + \mathbf{Q}_t \tag{10.25}$$

Ces deux étapes sont ensuite répétées pour les pas de temps suivants. Dans l'approche du filtre de Kalman, il est nécessaire de définir la matrice $\mathbf{B}$ uniquement pour le premier pas de temps. Pour les pas de temps suivants, elle est mise à jour avec l'expression 10.25. Aussi, le filtre de Kalman est une méthode couramment appliquée, dans une version réduite, avec les modèles dynamiques, notamment avec des modèles de prévision de la qualité de l'air à méso-échelle (Delle Monache *et al.*, 2006 ; Wilczak *et al.*, 2006 ; Delle Monache *et al.*, 2008 ; van Velzen et Segers, 2010 ; Borrego *et al.*, 2011 ; De Ridder *et al.*, 2012 ; Sicardi *et al.*, 2012 ; Zhang *et al.*, 2012).

Cette méthode a également plusieurs variantes. Le *filtre de Kalman étendu* est une variante qui permet d'utiliser un modèle d'évolution et un opérateur d'observation non linéaires (Van Loon et Heemink, 1997). Le coût en temps de calcul étant parfois prohibitif pour des systèmes de grandes dimensions, des filtres réduits tels que le filtre RRSQRT (*Reduced Rank SQuare RooT filter*) (Segers *et al.*, 2000 ; Hanea *et al.*, 2004 ; van Velzen et Segers, 2010), le filtre SEEK (*Singular Evolutive Extended Kalman filter*) (Tuan Pham *et al.*, 1998) ou bien encore le filtre SEIK (*Singular Evolutive Interpolated Kalman filter*) (Pham, 2001) sont aussi appliqués. Le *filtre de Kalman d'ensemble* est également une alternative qui permet de réduire le coût en temps de calcul pour les systèmes importants non linéaires. Cette méthode est proposée pour la première fois par Evensen (1994) et est corrigée par la suite par Burgers *et al.* (1998). Avec cette variante, une méthode de Monte Carlo est appliquée pour créer un ensemble d'ébauches et un ensemble de vecteurs d'observation. C'est à partir de ces ensembles que la matrice $\mathbf{B}$ est estimée (Evensen, 2003, 2004). Cette variante est couramment appliquée puisque sa mise en œuvre est relativement simple (van Loon *et al.*, 2000 ; Houtekamer et Mitchell, 2001 ; Hanea *et al.*, 2004 ; Eben *et al.*, 2005 ; Houtekamer *et al.*, 2005 ; Denby *et al.*, 2008 ; Wu *et al.*, 2008 ; Zubrow *et al.*, 2008 ; van Velzen et Segers, 2010 ; Sandu et Chai, 2011 ; Coman *et al.*, 2012 ; Zhang *et al.*, 2012 ; Candiani *et al.*, 2013 ; Gaubert *et al.*, 2014).

10.5 Méthodes variationnelles

Les méthodes variationnelles ont été introduites par Y. K. Sasaki pendant les années 1950 (Sasaki, 1958). Bien que les matrices $\mathbf{B}$ et $\mathbf{R}$ interviennent toujours dans la formulation variationnelle du problème, ces méthodes sont basées sur la théorie de l'optimisation. Au lieu de chercher à déterminer la matrice $\mathbf{K}$, comme c'est le cas dans la méthode BLUE ou le filtre de Kalman, ces méthodes recherchent une solution optimale vis-à-vis d'une fonction de coût J. Cette fonction de coût représente des quantités à minimiser. De manière générale, les quantités à minimiser sont les écarts aux observations et les écarts à l'ébauche.

10.5.1 3D-Var

La méthode 3D-Var traite les problèmes qui font intervenir uniquement les dimensions spatiales. Cette méthode consiste à rechercher la solution la plus probable vis-à-vis des erreurs d'ébauche et d'observation. La solution recherchée minimise, au sens des moindres carrés, les écarts à l'ébauche et aux observations. Ainsi, la solution optimale minimise la fonction de coût J définie par l'expression 10.26 :

$$\begin{aligned} J(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2}\left(\mathbf{x}-\mathbf{x^b}\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}\left(\mathbf{x}-\mathbf{x^b}\right)+\frac{1}{2}\left(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x}\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}\left(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x}\right) \\ &= J^{\mathrm{b}}(\mathbf{x})+J^{\mathrm{o}}(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{10.26}$$

où $\mathbf{x}$ est un vecteur d'état. Cette fonction de coût peut être exprimée comme une somme d'une fonction J^{b}, relative aux écarts avec l'ébauche, et d'une fonction J^{o}, associée aux écarts avec les observations. La fonction J pondère les écarts en fonction de la confiance portée aux différentes données, quantifiée par les termes $\mathbf{B}^{-1}$ et $\mathbf{R}^{-1}$. La solution qui minimise J est recherchée de manière itérative en calculant son gradient (équation 10.27).

$$\Delta J(\mathbf{x}) = \mathbf{B}^{-1}\left(\mathbf{x}-\mathbf{x^b}\right)-\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\mathbf{R}^{-1}\left(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x}\right) \tag{10.27}$$

Dans la pratique, la solution est recherchée avec un nombre limité d'itérations. Généralement, le nombre d'itérations est limité soit de manière artificielle, soit à l'aide d'un critère relatif à la décroissance de la norme du gradient $\Delta J(\mathbf{x})$. Aussi, la solution déterminée est généralement une approximation de la solution optimale. Lorsque l'opérateur d'observation $\mathbf{H}$ est linéaire, les solutions optimales pour la méthode BLUE et la méthode 3D-Var sont équivalentes (Bouttier et Courtier, 2002). Dans le cas de la méthode 3D-Var, la solution optimale $\mathbf{x^a}$ est déterminée en recherchant la solution qui vérifie l'égalité $\Delta J(\mathbf{x^a}) = 0$. L'avantage de cette méthode par rapport à la méthode BLUE est la possibilité de prendre en compte un opérateur d'observation non linéaire en introduisant l'opérateur tangent-linéaire de $\mathbf{H}$.

Cette méthode a plusieurs variantes telles que les méthodes *3D-Var classique*, *3D-Var FGAT* (*First Guest at Appropriate Time*) ou bien encore *3D-Var incrémental*. Ces méthodes diffèrent notamment dans l'utilisation des observations. La méthode 3D-Var FGAT (Massart *et al.*, 2005 ; Buehner *et al.*, 2010 ; Massart *et al.*, 2010) cherche la solution optimale à tous les pas de temps où des mesures sont disponibles. En revanche, la méthode 3D-Var classique (Lewis et Derber, 1985 ; Talagrand, 1997 ; Buehner *et al.*, 2010 ; Zhang *et al.*, 2012) détermine une seule fois la solution optimale sur une fenêtre temporelle qui regroupe plusieurs pas de temps. Cela permet de réduire le coût en temps de calcul. Pour ces méthodes, la solution optimale est recherchée pour la variable $\mathbf{x}$. Dans le cas de la méthode 3D-Var incrémental (Gauthier *et al.*, 1999 ; Federico, 2013), la solution optimale est cependant recherchée pour la variable $\delta\mathbf{x} = \mathbf{x}-\mathbf{x^b}$. L'approche incrémentale est surtout motivée par la réduction du coût en temps de calcul qu'elle permet dans le cadre de la méthode 4D-Var (Daget, 2007).

10.5.2 4D-Var

La méthode 4D-Var est la généralisation de la méthode 3D-Var avec la dimension temporelle. Cette méthode recherche les solutions optimales sur l'ensemble des pas de temps d'une fenêtre temporelle. L'ensemble de ces solutions est appelé *trajectoire*. Ainsi, cette méthode exploite les observations réparties sur l'espace et sur le temps. La méthode 4D-Var prend notamment en compte la dynamique du système à l'aide d'un modèle d'évolution, représenté par la matrice $\mathbf{M}_{0\to i}$, qui permet de propager l'état du système d'un temps t_0 à un temps t_i (équation 10.28, bien qu'il soit généralement non linéaire, le modèle d'évolution est ici considéré linéaire pour simplifier). Aussi, la solution optimale est physiquement plus cohérente et sa trajectoire est plus lisse et plus proche de l'ensemble des observations (Daget, 2007).

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{M}_{0\to i}\mathbf{x} \tag{10.28}$$

La variante de la méthode 4D-Var appelée *4D-Var classique* suppose que le modèle d'évolution $\mathbf{M}_{0\to i}$ est parfait. Pour cette variante, la fonction de coût J peut s'exprimer comme la somme d'une fonction J^{b} relative à l'ébauche et d'une fonction J^{o} associée aux observations. Comme avec la méthode 3D-Var, la fonction J^{b} est définie avec l'expression 10.29.

$$J^{\mathrm{b}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x^b})^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{x^b}) \tag{10.29}$$

Cependant, la fonction J^{o} s'exprime en fonction des vecteurs d'observation $\mathbf{y_i}$ et des matrices de covariance des erreurs d'observation $\mathbf{R_i}$ relatifs aux différents instants t_i (i=0,1,2,...,T) (équation 10.30).

$$\begin{aligned} J^{\mathrm{o}}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{T}(\mathbf{y}_i-\mathbf{H}_i\mathbf{x}_i)^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_i^{-1}(\mathbf{y}_i-\mathbf{H}_i\mathbf{x}_i) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{T}(\mathbf{y}_i-\mathbf{H}_i\mathbf{M}_{0\to i}\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_i^{-1}(\mathbf{y}_i-\mathbf{H}_i\mathbf{M}_{0\to i}\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{10.30}$$

Aussi, minimiser la fonction de coût J revient à chercher la solution optimale $\mathbf{x^a}$ à l'instant t_0 qui conduit le modèle d'évolution à fournir une trajectoire optimale au sens des moindres carrés sur l'ensemble des pas de temps d'une fenêtre temporelle. Cette solution optimale est obtenue en recherchant le vecteur d'état pour lequel le gradient $\Delta J(\mathbf{x})$ (équation 10.31) est nul.

$$\Delta J(\mathbf{x}) = \mathbf{B}^{-1}\left(\mathbf{x}-\mathbf{x^b}\right) - \sum_{i=0}^{T}\mathbf{M}_{0\to i}^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_i^{-1}\left(\mathbf{y}_i-\mathbf{H}_i\mathbf{M}_{0\to i}\mathbf{x}\right) \tag{10.31}$$

Dans le cas de la méthode 4D-Var classique, la recherche de la solution optimale n'est pas directe et est plus complexe que dans le cas de la méthode 3D-Var car le modèle d'évolution intervient dans l'expression de J^{o}. Cette recherche peut être réalisée en utilisant une méthode de descente itérative. De même, le gradient $\Delta J(\mathbf{x})$ est couramment recherché avec un modèle adjoint (Elbern

et Schmidt, 1999 ; Elbern *et al.*, 2000 ; Elbern et Schmidt, 2001 ; Hoelzemann *et al.*, 2001 ; Wu *et al.*, 2008 ; Bocquet, 2012). Bien que la détermination du modèle adjoint soit plus complexe, cette approche est plus efficace pour évaluer le gradient de la fonction J (Daget, 2007). Lorsque l'opérateur d'observation $\mathbf{H}$ et le modèle d'évolution $\mathbf{M}_{0\to i}$ sont linéaires, la solution optimale de la méthode 4D-Var classique pour le dernier pas de temps de la fenêtre temporelle (sur laquelle l'assimilation est effectuée) est équivalente à la solution optimale du filtre de Kalman (Bouttier et Courtier, 2002).

Il existe également d'autres variantes de la méthode 4D-Var. La méthode *4D-Var à contrainte faible* (Derber, 1989 ; Bennett *et al.*, 1998 ; Lee et Marotzke, 1998 ; Vidard, 2001) considère que le modèle d'évolution n'est pas parfait. Ainsi, la fonction de coût J prend également en compte les erreurs relatives au modèle d'évolution $\mathbf{M}_{0\to i}$. De même, il existe la formulation incrémentale de la méthode 4D-Var (Courtier *et al.*, 1998 ; Rabier *et al.*, 2000 ; Daget, 2007) qui permet de réduire le coût en temps de calcul du gradient de J. Dans ce cas, la fonction J est minimisée par rapport à la variable $\delta\mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^{\mathbf{b}}$.

10.6 Conclusion

Les méthodes d'assimilation de données combinent des données modélisées et des observations afin de déterminer la meilleure estimation possible de l'état d'un système. Celles-ci diffèrent notamment dans la complexité de la théorie, dans la difficulté de l'implémentation et dans le coût en temps de calcul. Ces méthodes se différencient également dans la manière de définir la notion de *meilleure estimation*. La méthode de débiaisement considère que la meilleure estimation est celle qui est associée à un biais nul vis-à-vis de l'état réel. Cependant, la méthode BLUE, le filtre de Kalman et les méthodes variationnelles cherchent globalement une estimation qui minimise l'erreur quadratique vis-à-vis de l'état réel. De même, certaines méthodes prennent uniquement en compte les dimensions spatiales du problème (débiaisement, BLUE, 3D-Var) alors que d'autres tiennent également compte de la dimension temporelle (filtre de Kalman et 4D-Var).

Dans le cadre de ce projet de recherche, nous appliquons l'approche d'assimilation de données pour évaluer la qualité de l'air à l'échelle urbaine. Ceci fait l'objet du prochain chapitre.

Chapitre 11
Assimilation de données avec le modèle SIRANE

Les premières applications des méthodes d'assimilation de données (AD) dans le domaine de la qualité de l'air sont apparues à la fin des années 1990 (Elbern *et al.*, 1997 ; Elbern et Schmidt, 1999 ; Elbern *et al.*, 2000 ; Segers *et al.*, 2000 ; van Loon *et al.*, 2000). Ces méthodes sont couramment appliquées avec des modèles de qualité de l'air à méso-échelle (Blond *et al.*, 2003 ; McKeen *et al.*, 2005 ; Wilczak *et al.*, 2006 ; Denby *et al.*, 2008 ; Kang *et al.*, 2008 ; Wu *et al.*, 2008 ; Frydendall *et al.*, 2009 ; Tombette *et al.*, 2009 ; Candiani *et al.*, 2010 ; Borrego *et al.*, 2011 ; Messina *et al.*, 2011 ; Wang *et al.*, 2011 ; Kumar *et al.*, 2012 ; Zhang *et al.*, 2012 ; Candiani *et al.*, 2013 ; Monteiro *et al.*, 2013 ; Silver *et al.*, 2013a) mais elles le sont encore peu avec des modèles à l'échelle urbaine (Tilloy *et al.*, 2013). Dans ce travail de thèse, trois méthodes d'AD sont appliquées avec le modèle SIRANE afin d'évaluer la qualité de l'air à l'échelle urbaine. SIRANE est un modèle quasi-statique, c'est-à-dire que les estimations relatives à un instant t n'ont (quasiment) pas d'influence sur les résultats associés au pas de temps suivant $t+1$. Aussi, il n'est pas nécessaire d'utiliser des méthodes d'AD qui prennent en compte un modèle d'évolution. La première méthode utilisée est la méthode de débiaisement. La deuxième méthode consiste à moduler la contribution des sources pour réduire les écarts entre les estimations du modèle et les mesures. Cette méthode est par la suite appelée *modulation de la contribution des sources* (MCS). La troisième méthode est la méthode BLUE. Celle-ci est la seule qui a déjà été appliquée avec un modèle urbain de qualité de l'air (Tilloy *et al.*, 2013). La méthode 3D-Var n'est pas utilisée dans ce projet de recherche car la solution optimale avec cette méthode est identique à celle de la méthode BLUE, lorsque l'opérateur d'observation $\mathbf{H}$ est linéaire (Bouttier et Courtier, 2002).

Dans ce chapitre, nous commençons par présenter l'approche utilisée pour évaluer les méthodes d'AD (section 11.1). Ensuite, nous décrivons les trois méthodes d'AD et analysons les résultats obtenus avec celles-ci sur le cas d'étude 2008 (sections 11.2, 11.3 et 11.4). Dans les sections 11.2 à 11.4, nous étudions également l'influence du nombre et des *types* de mesures utilisées lors de l'assimilation. Enfin, nous comparons les différentes méthodes d'AD (section 11.5).

11.1 Approche utilisée pour évaluer les méthodes d'assimilation de données

Il existe trois approches principales pour évaluer les méthodes d'assimilation de données (Carnevale *et al.*, 2015). Ces trois approches ont pour objectif d'évaluer les performances des méthodes d'AD sur les points de l'espace où il n'y a pas d'observations. L'approche dite *approche de groupes* consiste à séparer l'ensemble des capteurs en deux groupes distincts et à utiliser les mesures fournies par le premier groupe de capteurs pour l'AD. Ensuite la méthode d'AD est évaluée en comparant les estimations (obtenues à l'issue de l'AD) aux mesures associées au second groupe de capteurs. Avec cette approche, l'évaluation de la méthode d'AD dépend néanmoins des deux groupes de capteurs définis. Carnevale *et al.* (2015) proposent une extension de cette approche. L'approche de Carnevale *et al.* (2015) consiste à répéter l'approche de groupes N_v fois en sélectionnant à chaque fois de manière aléatoire N_c capteurs à utiliser pour la comparaison. Finalement, les résultats conduisant au plus mauvais RMSE (pour chaque station) lors de la comparaison sont considérés comme les résultats représentatifs de l'AD. Il existe également l'approche appelée *validation croisée*. Cette approche consiste à effectuer l'AD en utilisant les mesures associées à $m-1$ capteurs (m est le nombre de capteurs disponibles) et à comparer les résultats et les mesures relatives à la dernière station. Ce processus est répété pour chaque station. Dans ce projet de thèse, les méthodes d'AD sont évaluées avec cette approche de validation croisée, qui est couramment utilisée dans le domaine de la qualité de l'air (Lefohn *et al.*, 1988 ; Atkins et Lee, 1995 ; Van Leeuwen *et al.*, 1996 ; Blond *et al.*, 2003 ; Horálek *et al.*, 2006 ; Tilloy *et al.*, 2013).

Les méthodes d'AD sont évaluées sur le cas d'étude 2008. Pour cette étude, les mesures de concentration et les estimations associées à la simulation SIRANE de référence (à chaque pas de temps t) constituent respectivement le vecteur d'observation et l'ébauche. Il convient de signaler que la matrice $\mathbf{H}$, permettant de trouver l'équivalent de l'ébauche dans l'espace des observations, est composée uniquement de 0 et de 1 car la simulation SIRANE de référence fournit des estimations à l'emplacement des stations de mesure.

11.2 Débiaisement

11.2.1 Estimation des variables de débiaisement et d'ajustement

La méthode de débiaisement consiste à supprimer le biais de l'ébauche, vis-à-vis des mesures, afin de fournir une analyse qui ne soit pas biaisée. Pour appliquer cette méthode, il est nécessaire de déterminer soit la variable de débiaisement ϵ (équation 10.3), soit la variable d'ajustement η (équation 10.4). Dans ce travail de thèse, les deux approches sont appliquées. Pour chaque alternative, le biais est supposé uniforme spatialement. La première alternative que nous utilisons associe la variable de débiaisement à l'écart moyen (biais) entre les concentrations mesurées et les concentrations modélisées équivalentes (relatives aux mêmes points de l'espace que les mesures). Avec cette alternative, appelée *Déb-Diff* par la suite, l'analyse est déterminée à chaque pas de temps t avec

l'équation 11.1 :

$$\mathbf{x}_t^{\mathbf{a}} = \mathbf{x}_t^{\mathbf{b}} + \mathbf{E}_{m_t}\left(\mathbf{y}_t - \mathbf{H}_t\mathbf{x}_t^{\mathbf{b}}\right) \tag{11.1}$$

où $\mathbf{E}_{m_t}$ est une matrice de taille $n \times m_t$ avec tous les éléments égaux à $1/m_t$ (m_t est le nombre d'observations au temps t). La seconde alternative que nous appliquons définit la variable d'ajustement comme le rapport entre la concentration moyenne mesurée et la concentration moyenne modélisée (moyenne sur les concentrations modélisées aux points de mesure). Aussi, cette alternative, nommée *Déb-Rap* dans ce rapport, détermine l'analyse à chaque instant t avec la relation 11.2.

$$\mathbf{x}_t^{\mathbf{a}} = \mathbf{x}_t^{\mathbf{b}} \frac{\overline{\mathbf{y}_t}}{\overline{\mathbf{H}_t\mathbf{x}_t^{\mathbf{b}}}} \tag{11.2}$$

Contrairement à la première alternative, celle-ci garantit la positivité des résultats. Avec la méthode Déb-Diff, les résultats sont seuillés à zéro (valeur minimale).

11.2.2 Influence du nombre et des *types* de capteurs utilisés avec la méthode de débiaisement

L'objectif de cette sous-section est d'analyser l'influence du nombre et des *types* de mesures utilisées lors de l'AD avec la méthode de débiaisement. Cette étude est effectuée sur le cas d'étude 2008. La première analyse consiste à étudier la variation de l'erreur type, associée aux résultats de

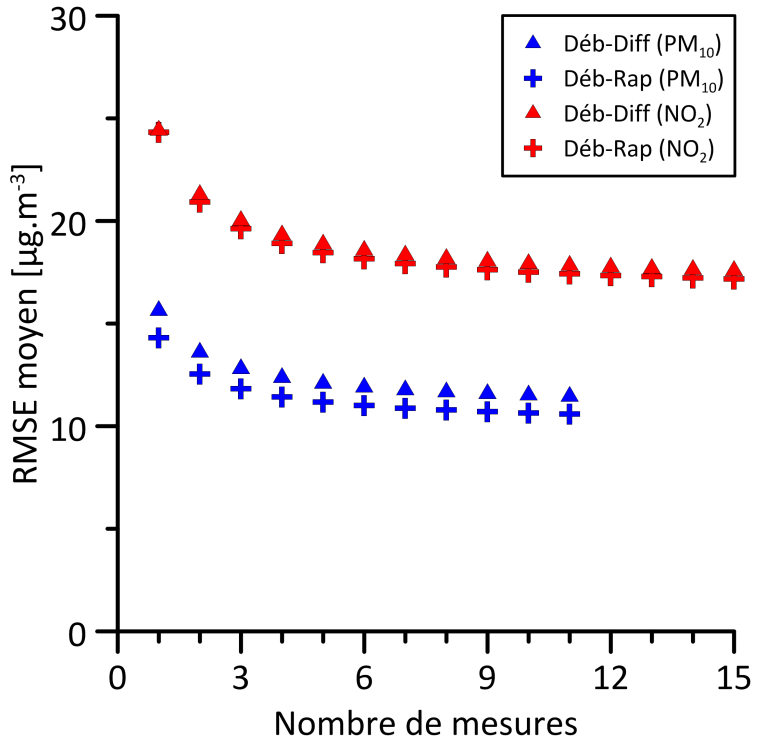


FIGURE 11.1 – Erreur type moyenne (RMSE moyen) en fonction du nombre de mesures utilisées avec la méthode de débiaisement sur le cas d'étude 2008

l'AD, en fonction du nombre de mesures utilisées (lors de l'AD). Pour chaque station, les concentrations sont évaluées avec la méthode de débiaisement en utilisant les mesures de N_a capteurs, qui sont identiques à tous les pas de temps ($N_a = 1, 2, ..., m-1$). Ceci est effectué pour toutes les combinaisons possibles de N_a capteurs (il existe $\frac{(m-1)!}{N_a!(m-1-N_a)!}$ combinaisons de N_a capteurs). Il convient de préciser que cette analyse est effectuée uniquement pour les pas de temps où toutes les stations fournissent des mesures. Le RMSE moyen en fonction du nombre de mesures utilisées lors de l'AD avec les méthodes Déb-Diff et Déb-Rap est indiqué sur la figure 11.1 (pour chaque valeur de N_a, la moyenne est effectuée sur tous les RMSE, quelle que soit la station, associés à l'utilisation de N_a mesures lors de l'AD). Pour les deux polluants, la variation du RMSE moyen en fonction de N_a est similaire avec les deux méthodes. Globalement, plus N_a est élevé plus le RMSE moyen est faible (bon). Pour les PM_{10}, le RMSE moyen diminue de $3.70\,\mu g.m^{-3}$ entre $N_a = 1$ et $N_a = 11$. De même, il diminue de $7.10\,\mu g.m^{-3}$ entre $N_a = 1$ et $N_a = 15$ dans le cas du NO_2. Néanmoins, il convient de noter que le RMSE moyen est relativement constant à partir d'un certain de nombre de capteurs N_{seuil}. Aussi, la diminution du RMSE moyen est significative jusqu'à $N_{seuil} = 6$ pour les PM_{10} et jusqu'à $N_{seuil} = 9$ pour le NO_2.

Le RMSE associé à la station Lyon centre en fonction du nombre de mesures utilisées (pour toutes les combinaisons) avec la méthode Déb-Rap est indiqué sur la figure 11.2. On note que plus N_a est important plus le $RMSE_{max,N_a}$ est faible ($RMSE_{max,N_a}$ correspond au RMSE le plus élevé en utilisant N_a mesures). On constate néanmoins que le RMSE relatif à $N_a = m-1$ est plus important que certains RMSE qui sont associés à des valeurs de N_a plus faibles. Le RMSE le plus faible est notamment associé à $N_a = 2$ pour les PM_{10} et à $N_a = 5$ pour le NO_2. Aussi, bien qu'il soit

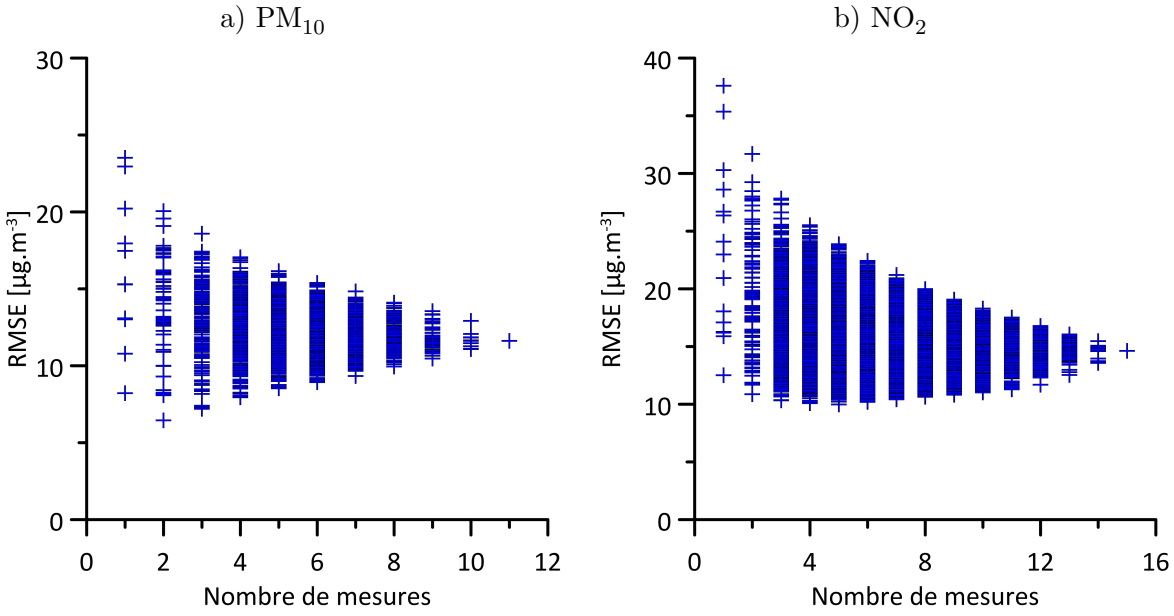


FIGURE 11.2 – Erreur type (RMSE) associée à la station Lyon centre en fonction du nombre de mesures utilisées avec la méthode Déb-Rap sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b)

globalement préférable d'utiliser un nombre important de mesures lors de l'AD, le RMSE peut être localement plus satisfaisant en utilisant uniquement certains capteurs avec la méthode Déb-Rap (le constat est similaire pour les autres stations et pour la méthode Déb-Diff mais les résultats ne sont pas indiqués dans le rapport).

Ce constat suggère qu'il existe des combinaisons de capteurs, à utiliser lors de l'AD, plus pertinentes que d'autres en fonction de l'endroit où l'on souhaite estimer les concentrations. Aussi, la deuxième analyse consiste à étudier l'influence des types de capteurs utilisés lors de l'AD. Pour cette analyse, la méthode de débiaisement est appliquée avec trois *filtres de capteurs* différents. Avec le premier filtre, nommé *F-Type*, la concentration à une certaine station est estimée en utilisant uniquement les mesures fournies par les stations qui ont la même typologie (trafic, urbain, industrie, fond). Avec le second filtre, appelé *F-Dist*, elle est évaluée en utilisant seulement les observations des stations qui se situent à une distance inférieure à une distance caractéristique l_c. La valeur l_c est égale à 7.7 km dans notre étude. Cette valeur est relativement grande afin de pouvoir effectuer une AD pour chaque station. Avec le troisième filtre, nommée *F-Corr*, la concentration à une certaine station est déterminée en utilisant uniquement les mesures des stations pour lesquelles les concentrations modélisées sont fortement corrélées avec celles associées à cette même station. Ainsi, les stations utilisées sont celles qui ont un coefficient de corrélation (avec la station *analysée*) supérieur à un coefficient de corrélation caractéristique ρ_c. Dans notre étude, ρ_c est égal à 0.94 dans le cas des PM_{10} et à 0.90 dans le cas du NO_2. Ces valeurs sont également définies de façon à pouvoir appliquer la méthode de débiaisement pour chaque capteur. A l'instar de la première analyse, celle-ci est effectuée uniquement pour les instants où tous les capteurs fournissent une mesure. Le RMSE moyen (obtenu par une moyenne sur l'ensemble des capteurs) à l'issue de l'AD en fonction des trois filtres de capteurs est indiqué dans le tableau 11.1. Pour les deux polluants, les RMSE moyens associés à l'utilisation d'un filtre de capteurs sont globalement comparables à celui obtenu en utilisant l'ensemble des capteurs disponibles lors de l'AD (aucun filtre n'est utilisé mais l'approche de validation

Méthode	Filtre	RMSE moyen [$\mu g.m^{-3}$]	
		PM_{10}	NO_2
Déb-Diff	aucun	10.59	17.17
	F-Type	11.28	17.22
	F-Dist	10.81	17.45
	F-Corr	10.50	17.95
Déb-Rap	aucun	11.46	17.58
	F-Type	11.93	17.34
	F-Dist	11.43	17.87
	F-Corr	10.86	17.77

Table 11.1 – Erreur type moyenne (RMSE moyen) en fonction des filtres de capteurs appliqués avec les méthodes Déb-Diff et Déb-Rap sur le cas d'étude 2008

croisée est appliquée). Ceci signifie a priori que ces trois filtres de capteurs ne sont pas pertinents. Néanmoins, ces résultats montrent encore une fois que l'utilisation d'un nombre limité de mesures lors de l'AD peut potentiellement conduire à des résultats comparables à ceux obtenus en utilisant le nombre maximal de capteurs disponibles.

11.2.3 Résultats de la méthode de débiaisement sur le cas d'étude 2008

La méthode de débiaisement est évaluée sur le cas d'étude 2008 en effectuant une validation croisée sur tous les pas de temps. Il convient de rappeler que la méthode Déb-Diff ne garantit pas la positivité des concentrations. Pour le cas d'étude 2008, la proportion des concentrations *initialement* négatives (remplacées par zéro par la suite) à l'issue de l'assimilation de données est approximativement de 1 % pour les deux polluants. Les performances statistiques globales associées à la méthode de débiaisement sur le cas d'étude 2008 sont indiquées dans les tableaux 11.2 et 11.3. Pour les deux polluants, les performances statistiques globales des méthodes Déf-Diff et Déf-Rap sont relativement similaires. Le biais moyen (Bias moyen) et le biais fractionnel moyen (FB moyen) sont notamment relativement proches de zéro (valeur optimale pour ces indices statistiques). Cela

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
SIRANE	29.60	33.96	-4.36	-0.14	13.95	0.20	0.83	0.90
Déb-Diff		29.59	0.00	0.00	11.28	0.15	0.88	0.92
Déb-Rap		29.60	0.00	0.00	10.48	0.12	0.90	0.95

Table 11.2 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation SIRANE de référence et à la méthode de débiaisement ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
SIRANE	42.18	38.79	3.39	0.06	20.83	0.26	0.69	0.81
Déb-Diff		42.27	-0.09	-0.04	17.55	0.19	0.80	0.84
Déb-Rap		42.13	0.05	-0.03	17.13	0.17	0.81	0.87

Table 11.3 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2, associées à la simulation SIRANE de référence et à la méthode de débiaisement ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

est cohérent avec le fait que ces méthodes cherchent à fournir des estimations non biaisées vis-à-vis des mesures. Les performances statistiques globales de ces méthodes sont satisfaisantes pour les deux espèces puisque l'ensemble des critères de qualité relatifs aux indices statistiques est vérifié. De même, elles sont plus satisfaisantes que celles associées à la simulation SIRANE de référence. Dans le cas des PM_{10}, le RMSE moyen et le coefficient de corrélation moyen sont respectivement améliorés (par rapport à la simulation SIRANE de référence) de 19 % et 6 % avec la méthode Déb-Diff et de 25 % et 8 % avec la méthode Déb-Rap. Dans le cas du NO_2, ils sont améliorés de 16 % avec la méthode Déb-Diff et de 18 % et 17 % avec la méthode Déb-Rap.

Pour les deux polluants, le meilleur RMSE moyen avec la méthode de débiaisement est obtenu avec la méthode Déb-Rap. Les performances statistiques associées à cette méthode sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} sont indiquées sur le tableau 11.4. Bien qu'il soit nul en moyenne, localement le biais est parfois sensiblement moins satisfaisant, notamment pour les stations de type trafic et urbain. Rappelons que le biais de l'ébauche, vis-à-vis des mesures, est supposé uniforme spatialement avec cette méthode d'AD. Or, les résultats associés à la simulation SIRANE de référence, qui constituent l'ébauche pour le cas d'étude 2008, indiquent que ce n'est pas le cas (section 5.4.1). Ceci explique le fait que les estimations à l'issue de l'AD soient (encore) biaisées, malgré le fait que cette méthode a pour but de fournir des estimations qui ne le soient pas. Globalement, les meilleures performances statistiques sont associées aux stations de type fond et industrie. En revanche, les plus mauvaises sont généralement associées aux stations de type trafic. Localement, les performances statistiques sont néanmoins satisfaisantes pour tous les capteurs car l'ensemble des critères de qualité

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [$\mu g.m^{-3}$]	$\overline{c_p}$ [$\mu g.m^{-3}$]	Bias [$\mu g.m^{-3}$]	FB	RMSE [$\mu g.m^{-3}$]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	42.34	35.91	6.43	0.16	20.33	0.27	0.72	0.92
	BER	30.10	37.70	-7.60	-0.22	12.82	0.14	0.91	0.95
	GC	36.19	31.58	4.61	0.14	15.76	0.22	0.90	0.87
	LP	35.83	31.10	4.73	0.14	12.18	0.13	0.88	0.94
Urbain	LC	28.42	35.74	-7.31	-0.23	11.42	0.13	0.92	0.95
	VeV	27.03	29.44	-2.41	-0.09	7.72	0.07	0.93	0.97
Industrie	FEY	28.86	25.80	3.07	0.11	8.96	0.11	0.90	0.96
	STF	27.51	28.22	-0.71	-0.03	7.31	0.07	0.92	0.98
Fond	COT	23.77	23.74	0.03	0.00	6.46	0.07	0.93	0.97
	GEN	25.02	27.30	-2.28	-0.09	7.24	0.08	0.93	0.96
	STE	23.50	23.17	0.33	0.01	7.00	0.09	0.92	0.98
	TER	26.61	25.51	1.10	0.04	8.54	0.11	0.90	0.96
Moyenne		29.60	29.60	0.00	0.00	10.48	0.12	0.90	0.95

TABLE 11.4 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10}, associées à la méthode Déb-Rap ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

associés aux indices statistiques est vérifié.

Les performances statistiques associées à la méthode Déb-Rap sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2 sont indiquées sur le tableau 11.5. Encore une fois, bien que le biais moyen est relativement proche de zéro (0.05), localement il est généralement moins satisfaisant. La raison pour laquelle les résultats obtenus avec cette méthode de débiaisement sont (encore) biaisés est similaire à celle évoquée dans le cas des PM_{10}. Globalement, les meilleures et les plus mauvaises performances statistiques sont respectivement associées aux stations de type urbain et aux stations de type trafic. Localement, les performances statistiques sont cependant satisfaisantes pour l'ensemble des stations sauf pour la station A7 sud lyonnais (A7). Pour cette station, elles ne sont pas totalement satisfaisantes car le coefficient de corrélation (r) ne vérifie pas le critère de qualité associé à cet indice statistique.

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	79.05	71.75	7.30	0.10	41.37	0.30	0.56	0.78
	BER	52.50	57.58	-5.08	-0.09	16.42	0.09	0.83	0.94
	GAR	74.06	60.78	13.28	0.20	27.89	0.17	0.80	0.94
	GC	47.06	43.31	3.75	0.08	19.83	0.19	0.79	0.90
	LP	50.67	54.47	-3.80	-0.07	18.68	0.13	0.81	0.93
	VAI	59.10	42.77	16.33	0.32	25.60	0.26	0.76	0.84
Urbain	GER	38.08	39.20	-1.12	-0.03	10.77	0.08	0.90	0.95
	LC	37.95	47.79	-9.84	-0.23	14.78	0.12	0.89	0.87
	STJ	36.78	44.77	-7.98	-0.20	15.69	0.15	0.85	0.86
	VeV	26.67	31.24	-4.57	-0.16	11.56	0.16	0.86	0.80
Industrie	FEY	33.84	34.35	-0.50	-0.01	13.60	0.16	0.77	0.87
	STF	35.35	35.76	-0.42	-0.01	12.98	0.13	0.88	0.90
Fond	COT	23.26	25.34	-2.08	-0.09	10.50	0.19	0.84	0.86
	GEN	33.36	34.84	-1.47	-0.04	13.69	0.16	0.78	0.84
	STE	17.78	22.72	-4.94	-0.24	8.27	0.17	0.91	0.82
	TER	29.41	27.50	1.91	0.07	12.50	0.19	0.78	0.86
Moyenne		42.18	42.13	0.05	-0.03	17.13	0.17	0.81	0.87

TABLE 11.5 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2, associées à la méthode Déf-Rap ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Les biais (Bias), les erreurs types (RMSE) et les coefficients de corrélation (r) associés à la méthode Déb-Rap sur le cas d'étude 2008 sont comparés à ceux de la simulation SIRANE de référence sur la figure 11.3. Dans le cas des PM_{10}, les biais associés à la méthode Déb-Rap sont meilleurs que ceux de la simulation SIRANE de référence pour la majorité des stations. Dans le cas du NO_2, ils sont plus satisfaisants uniquement pour la moitié des capteurs. De même, la valeur absolue du biais le moins satisfaisant est significativement plus faible (meilleure) après l'AD pour

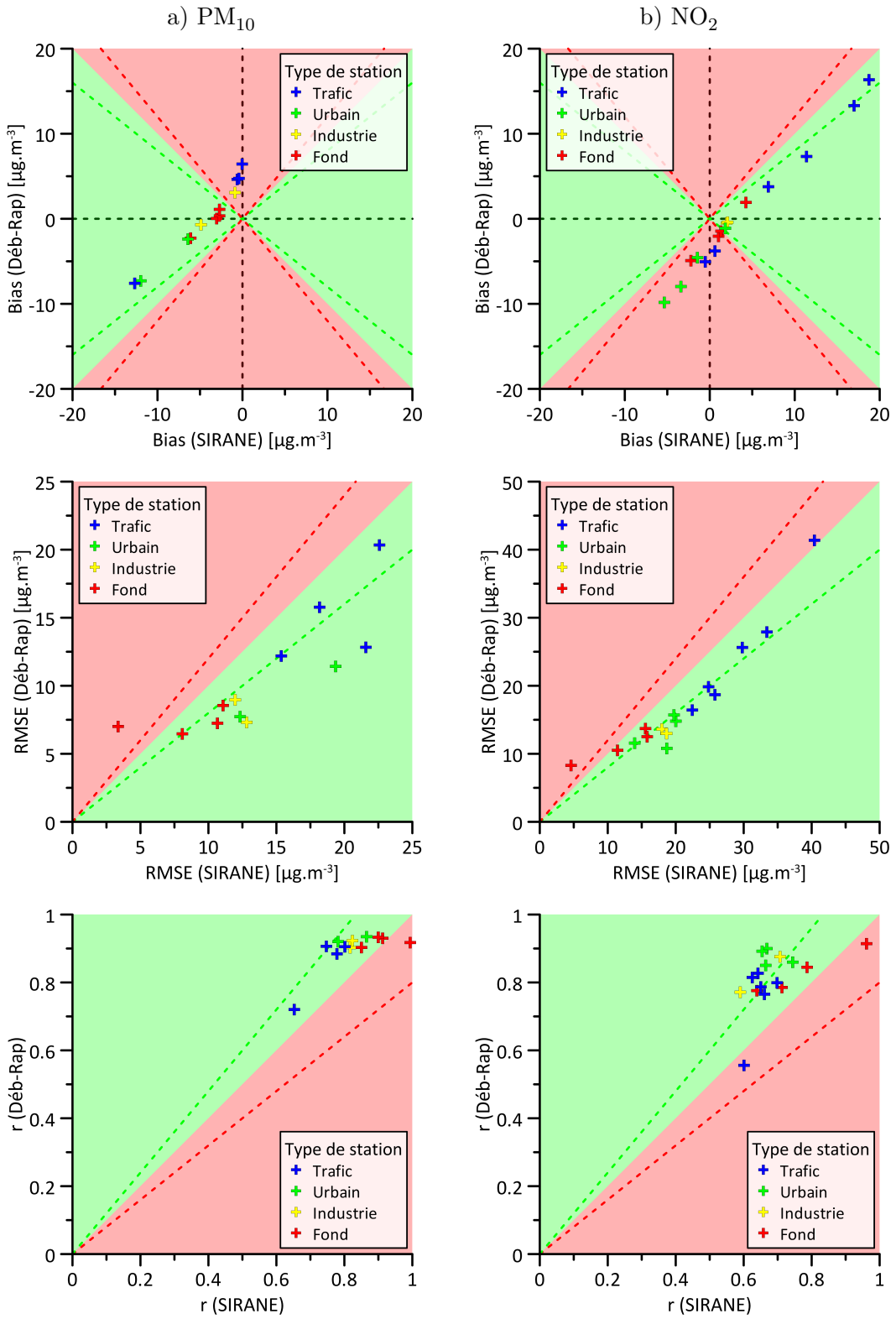


FIGURE 11.3 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés à la méthode Déb-Rap et à la simulation SIRANE de référence (zone verte (rouge) : Déb-Rap est meilleur (plus mauvais) que SIRANE, ligne verte (rouge) en pointillés : Déb-Rap est meilleur (plus mauvais) que SIRANE de 20 %)

les PM_{10} alors qu'elle est relativement comparable avant et après l'AD pour le NO_2. A l'issue de l'AD, les biais sont supérieurs à ceux de la simulation SIRANE dans le cas des PM_{10} mais ils sont inférieurs dans le cas du NO_2. Cela s'explique par le fait que la méthode Déb-Rap considère le biais comme spatialement uniforme et qu'elle a été utilisée pour débiaiser la simulation SIRANE de référence (ébauche) qui est associée à un biais moyen négatif (surestimation) pour les PM_{10} et positif (sous-estimation) pour le NO_2. Aussi, les résultats de la simulation SIRANE qui présentent un biais négatif sont forcément associés à un biais moins satisfaisant après l'AD dans le cas du NO_2. Pour les deux polluants, les erreurs types relatives à la méthode Déb-Rap sont sensiblement plus faibles (meilleures) que celles de la simulation SIRANE pour la quasi totalité des stations. De même, le RMSE maximum est légèrement plus faible (meilleur) après l'AD dans le cas des PM_{10}. Il est cependant relativement similaire avant et après l'AD dans le cas du NO_2. Les coefficients de corrélation relatifs à la méthode Déb-Rap sont également plus satisfaisants que ceux de la simulation SIRANE de référence pour la majorité des capteurs. Le coefficient de corrélation minimum est plus élevé (meilleur) après l'AD pour les PM_{10} mais il est plus faible dans le cas du NO_2.

11.3 Modulation de la contribution des sources (MCS)

11.3.1 Description de la méthode MCS

La méthode appelée *modulation de la contribution des sources* (MCS) suppose que les incertitudes associées aux estimations des modèles de qualité de l'air sont essentiellement dues à une mauvaise modélisation des données d'émission. Aussi, la méthode MCS consiste à corriger (indirectement) les données d'émission afin d'améliorer les résultats des modèles de qualité de l'air. Cette correction est effectuée en modulant, de manière optimale, la contribution des sources. Dans le cadre de cette méthode, l'ébauche au temps t peut s'exprimer sous la forme de l'équation 11.3 :

$$\mathbf{x}_t^{\mathbf{b}} = \sum_{g}^{G} \mathbf{x}_{g,t}^{\mathbf{b}} \tag{11.3}$$

où G est le nombre de groupes de sources et $\mathbf{x}_{g,t}^{\mathbf{b}}$ représente l'ébauche associée à la contribution du groupes de sources g. De même, la méthode MCS associe l'analyse à une combinaison linéaire des contributions des sources. Ainsi, l'analyse au temps t est définie avec l'expression 11.4 :

$$\mathbf{x}_t^{\mathbf{a}} = \sum_{g}^{G} \alpha_{g,t} \mathbf{x}_{g,t}^{\mathbf{b}} \tag{11.4}$$

où $\alpha_{g,t}$ représente le coefficient de modulation relatif au groupe de sources g au pas de temps t. Pour cette méthode d'AD, la meilleure estimation correspond à celle qui minimise l'erreur quadratique vis-à-vis des observations, qui sont supposées parfaites ($\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x}^{\mathbf{t}}$). Aussi, les coefficients $\alpha_{g,t}$ sont

évalués à chaque pas de temps t en minimisant la fonction de coût J définie par la relation 11.5 :

$$J(\alpha_{1,t}, \alpha_{2,t}, ..., \alpha_{G,t}) = \frac{1}{m_t} \left(\mathbf{y}_t - \sum_g^G \alpha_{g,t} \mathbf{H}_t \mathbf{x}_{g,t}^{\mathbf{b}} \right)^{\mathrm{T}} \left(\mathbf{y}_t - \sum_g^G \alpha_{g,t} \mathbf{H}_t \mathbf{x}_{g,t}^{\mathbf{b}} \right) \tag{11.5}$$

où m_t correspond au nombre de mesures disponibles à l'instant t. Ces coefficients $\alpha_{g,t}$ sont alors déterminés en résolvant le système d'équations 11.6.

$$\begin{pmatrix} (\mathbf{H}_t \mathbf{x}_{1,t}^{\mathbf{b}})^{\mathrm{T}} (\mathbf{H}_t \mathbf{x}_{1,t}^{\mathbf{b}}) & \dots & (\mathbf{H}_t \mathbf{x}_{1,t}^{\mathbf{b}})^{\mathrm{T}} (\mathbf{H}_t \mathbf{x}_{G,t}^{\mathbf{b}}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\mathbf{H}_t \mathbf{x}_{G,t}^{\mathbf{b}})^{\mathrm{T}} (\mathbf{H}_t \mathbf{x}_{1,t}^{\mathbf{b}}) & \dots & (\mathbf{H}_t \mathbf{x}_{G,t}^{\mathbf{b}})^{\mathrm{T}} (\mathbf{H}_t \mathbf{x}_{G,t}^{\mathbf{b}}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1,t} \\ \vdots \\ \alpha_{G,t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\mathbf{y}_t)^{\mathrm{T}} (\mathbf{H}_t \mathbf{x}_{1,t}^{\mathbf{b}}) \\ \vdots \\ (\mathbf{y}_t)^{\mathrm{T}} (\mathbf{H}_t \mathbf{x}_{G,t}^{\mathbf{b}}) \end{pmatrix} \tag{11.6}$$

Lorsque le nombre d'observations m_t est supérieur au nombre de groupes G, la détermination des coefficients $\alpha_{g,t}$ est un problème de moindres carrés. La méthode MCS est appliquée uniquement dans le cas où $m_t \geq G$. Nous considérons que la contribution d'un groupe de sources doit être positive ou nulle. Aussi, la résolution du système 11.6 est effectuée avec la méthode de Lawson et Hanson (1974) qui garantit la positivité des coefficients $\alpha_{g,t}$.

Le choix des groupes de sources est un paramètre critique de la méthode MCS. Les groupes de sources peuvent par exemple être définis en fonction du secteur d'activité associé aux émissions (transport, industrie, tertiaire, agriculture) ou bien encore en fonction de la localisation géographique des sources. De même, le nombre de groupes de sources G est un paramètre important de la méthode MCS. Si G est relativement faible, la correction de l'ébauche sera associée un effet global. En revanche, si G est relativement élevé, la correction sera surtout *locale*, vis-à-vis des capteurs utilisés durant l'assimilation de données.

11.3.2 Influence du nombre de capteurs et du nombre de groupes de sources utilisés avec la méthode MCS

L'objectif de cette sous-section est d'analyser l'influence du nombre de capteurs et du nombre de groupes de sources utilisés avec la méthode MCS. La première analyse consiste à étudier la variation du RMSE en fonction du nombre de mesures utilisées (N_a) lors de l'assimilation de données. Cette analyse est similaire à celle qui est décrite dans la sous-section 11.2.2. Pour cette analyse, la méthode MCS est appliquée en considérant trois groupes de sources. Un groupe est relatif aux émissions du trafic, un deuxième regroupe les émissions surfaciques (tertiaire, chauffage) et un troisième est associé à la concentration de fond et aux émissions ponctuelles. La méthode MCS est alors appliquée en utilisant au minimum trois mesures lors de l'AD afin de garantir que $m_t \geq G$. Il convient de noter que la contribution des groupes de sources est évaluée en activant le module *source apportionment* de SIRANE (section 6.3). La contribution en NO_2 est notamment estimée avec le modèle SA-NOX de ce module (sous-section 6.3.2). Le RMSE moyen en fonction du nombre de mesures utilisées avec la méthode MCS sur le cas d'étude 2008 est indiqué sur la figure 11.4. La variation du RMSE moyen est relativement comparable pour les deux polluants. Globalement, plus N_a est élevé plus le RMSE

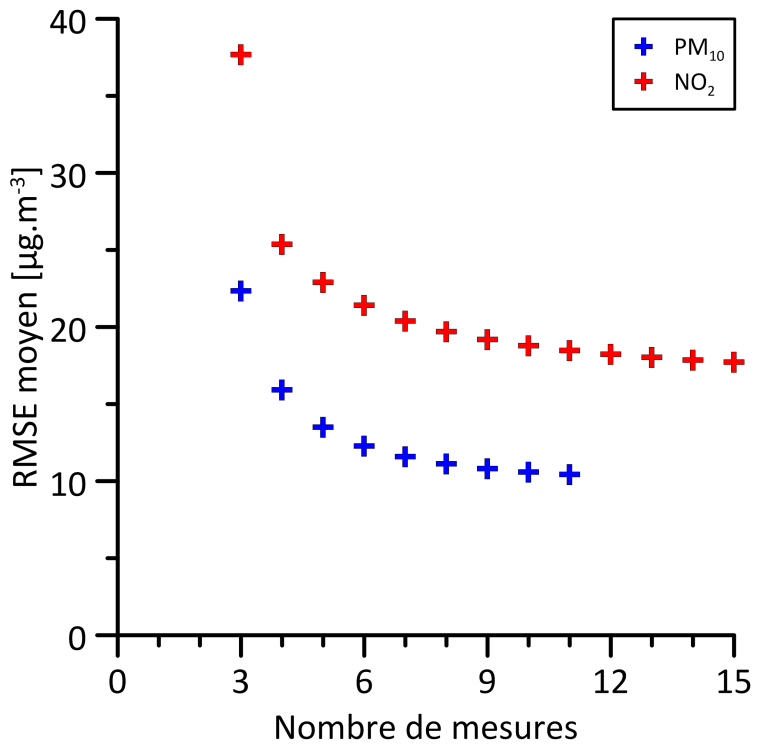


FIGURE 11.4 – Erreur type moyenne (RMSE moyen) en fonction du nombre de mesures utilisées avec la méthode MCS sur le cas d'étude 2008

moyen est bon. Le RMSE moyen diminue de $11.90\,\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ entre $N_a = 3$ et $N_a = 11$ pour les PM_{10} et de $20.00\,\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ entre $N_a = 3$ et $N_a = 15$ pour le NO_2. A l'instar de la méthode de débiaisement, le RMSE moyen est néanmoins relativement stable à partir d'un certain nombre de mesures N_{seuil}. Dans le cas des PM_{10}, le RMSE moyen diminue significativement jusqu'à $N_{seuil} = 9$. Dans le cas du NO_2, il réduit sensiblement jusqu'à $N_{seuil} = 13$.

La seconde analyse consiste à évaluer la variation du RMSE moyen (obtenu par une moyenne sur l'ensemble des capteurs) en fonction du nombre de groupes de sources utilisés (G) avec la méthode MCS. Pour effectuer cette analyse, sept groupes de sources sont définies, notamment en fonction des trois zones schématisées sur la figure 11.5. Un groupe inclut la concentration de fond et l'ensemble des sources ponctuelles (sur l'ensemble du domaine). Trois autres groupes sont associés aux émissions du trafic. De même, trois autres groupes sont relatifs aux sources surfaciques. Chacun d'entre eux correspond aux émissions (trafic ou surfacique) dans l'une des trois zones. A partir de ces sept groupes *initiaux*, il est possible de former G groupes de sources en les recombinant ($G = 1, 2, ..., 7$). Pour $G = 1$ et $G = 7$, il existe une seule combinaison pour former un seul groupe de sources (combiner l'ensemble des groupes initiaux) ou sept groupes de sources (considérer chacun des groupes de sources initiaux). En revanche, il existe plusieurs combinaisons pour former G groupes de sources pour G allant de 2 à 6. L'ensemble de ces combinaisons est considéré pour cette analyse. Il convient de signaler que la méthode MCS est appliquée, dans le cadre de cette analyse, en effectuant une validation croisée ($m - 1$ mesures sont utilisées lors de l'AD). De même, la validation croisée

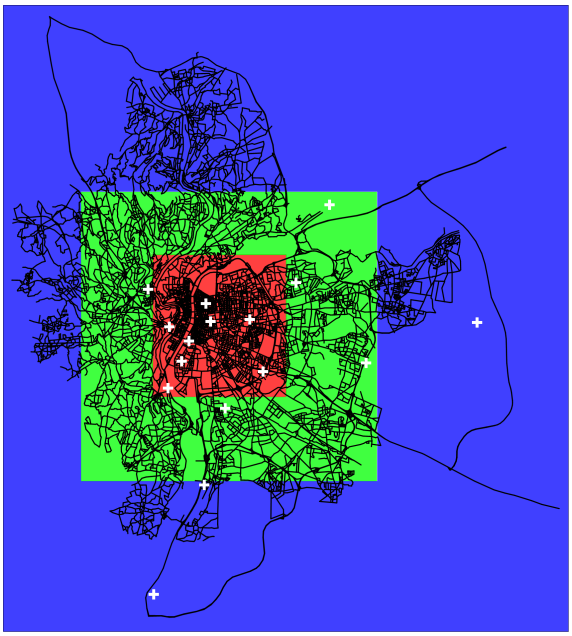


FIGURE 11.5 – Représentation des trois zones utilisées (rouge, verte et bleue) pour définir les sept groupes de sources (les croix blanches indiquent les emplacements des capteurs)

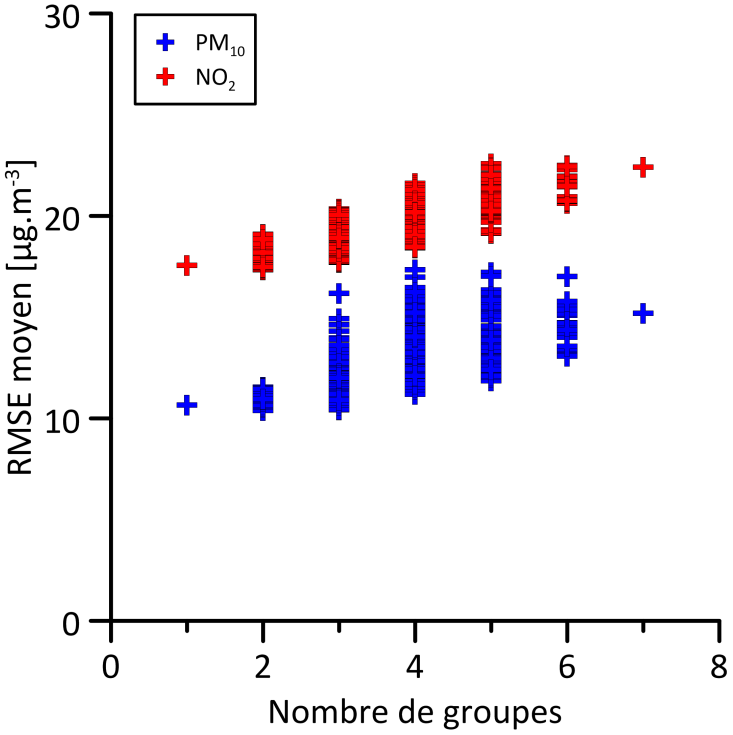


FIGURE 11.6 – Erreur type moyenne (RMSE moyen) en fonction du nombre de groupes de sources utilisés avec la méthode MCS sur le cas d'étude 2008

est réalisée uniquement pour les pas de temps où tous les capteurs fournissent des observations. Le RMSE moyen en fonction du nombre de groupes de sources utilisés avec la méthode MCS sur le cas d'étude 2008 est indiqué sur la figure 11.6. Globalement, plus G est important moins le RMSE moyen est bon. Rappelons que le RMSE moyen est estimé après avoir effectué une validation croisée. Par conséquent, les coefficients $\alpha_{g,t}$ de l'équation 11.4 sont estimés uniquement en fonction des données (mesurées et modélisées) associées aux *autres* stations (sans prendre en compte celles relatives à la station analysée). Aussi, les résultats indiquent qu'en moyenne les estimations associées à la station analysée sont moins bonnes lorsque G est important bien que celles relatives aux stations utilisées lors de l'AD soient plus satisfaisantes. Bien évidemment les résultats obtenus avec cette méthode, sur le cas d'étude 2008, dépendent aussi des groupes de sources définis pour l'AD. Cependant, cet aspect n'est pas étudié dans ce travail de thèse.

11.3.3 Résultats de la méthode MCS sur le cas d'étude 2008

La méthode MCS est évaluée sur le cas d'étude 2008 en effectuant une validation croisée sur tous les pas de temps. Cette méthode est appliquée en utilisant trois groupes de sources : 1) émissions du trafic, 2) émissions surfaciques et 3) concentration de fond et sources ponctuelles. Les performances statistiques globales associées à la méthode MCS sont indiquées dans les tableaux 11.6 et 11.7. Dans

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
SIRANE	29.60	33.96	-4.36	-0.14	13.95	0.20	0.83	0.90
MCS		29.58	0.02	-0.01	10.27	0.12	0.90	0.96

Table 11.6 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation SIRANE de référence et à la méthode MCS ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
SIRANE	42.18	38.79	3.39	0.06	20.83	0.26	0.69	0.81
MCS		42.44	-0.26	-0.03	17.79	0.19	0.80	0.85

Table 11.7 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2, associées à la simulation SIRANE de référence et à la méthode MCS ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

les deux cas (PM_{10} et NO_2), le biais moyen (Bias moyen) et le biais fractionnel moyen (FB moyen) sont relativement proches de zéro (valeur optimale pour ces deux indices statistiques). De même, les performances statistiques globales associées à la méthode MCS sont satisfaisantes pour les deux polluants car l'ensemble des critères de qualité relatifs aux indices statistiques est vérifié. De plus, elles sont meilleures que celles associées à la simulation SIRANE de référence. Le RMSE moyen et le coefficient de corrélation moyen sont respectivement améliorés (vis-à-vis de la simulation SIRANE) de 26 % et de 8 % dans le cas des PM_{10}. Dans le cas du NO_2 ils sont respectivement améliorés de 15 % et de 16 %.

Les performances statistiques locales (pour chaque station) associées à la méthode MCS sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 11.8. Bien qu'il soit relativement proche de zéro en moyenne, localement le biais est parfois sensiblement plus mauvais, notamment aux stations de type trafic. Dans le cas des PM_{10}, les plus mauvaises performances statistiques sont généralement associées aux stations de type trafic. Celles associées aux autres types de stations sont relativement comparables. Localement, les performances statistiques sont satisfaisantes pour tous les capteurs car tous les critères de qualité relatifs aux indices statistiques sont vérifiés. Les performances statistiques locales associées à la méthode MCS sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2 sont indiquées dans le tableau 11.9. Encore une fois, les biais sont généralement moins satisfaisants que le biais moyen, qui est relativement proche de zéro, notamment pour les stations de type trafic et urbain. Globalement, les performances statistiques sont comparables pour tous les types de stations. Localement, les performances statistiques sont satisfaisantes pour l'ensemble des capteurs, excepté

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	42.34	38.22	4.12	0.10	21.53	0.29	0.67	0.91
	BER	30.10	36.62	-6.52	-0.20	12.08	0.13	0.91	0.97
	GC	36.19	29.10	7.09	0.22	17.08	0.28	0.90	0.86
	LP	35.83	32.18	3.65	0.11	12.08	0.13	0.88	0.95
Urbain	LC	28.42	32.82	-4.40	-0.14	9.89	0.10	0.92	0.97
	VeV	27.03	27.74	-0.71	-0.03	7.16	0.07	0.94	0.98
Industrie	FEY	28.86	27.22	1.64	0.06	8.34	0.09	0.91	0.97
	STF	27.51	28.13	-0.61	-0.02	7.17	0.07	0.93	0.98
Fond	COT	23.77	25.38	-1.61	-0.07	6.37	0.07	0.94	0.97
	GEN	25.02	27.46	-2.44	-0.09	6.63	0.06	0.95	0.97
	STE	23.50	24.45	-0.95	-0.04	7.50	0.10	0.91	0.97
	TER	26.61	25.62	0.99	0.04	7.43	0.08	0.93	0.97
Moyenne		29.60	29.58	0.02	-0.01	10.27	0.12	0.90	0.96

TABLE 11.8 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10}, associées à la méthode MCS ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, $\text{RMSE} \leq \overline{c_m}$, $\text{NMSE} \leq 6$, $\text{r} \geq 0.60$, $\text{FAC2} \geq 0.30$)

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	79.05	72.39	6.66	0.09	40.33	0.28	0.56	0.79
	BER	52.50	60.14	-7.64	-0.14	18.77	0.11	0.81	0.92
	GAR	74.06	61.78	12.28	0.18	26.80	0.16	0.81	0.95
	GC	47.06	43.41	3.65	0.08	19.39	0.18	0.79	0.90
	LP	50.67	54.26	-3.59	-0.07	23.04	0.19	0.70	0.87
	VAI	59.10	42.63	16.47	0.32	25.60	0.26	0.77	0.82
Urbain	GER	38.08	39.47	-1.39	-0.04	9.95	0.07	0.91	0.96
	LC	37.95	50.87	-12.92	-0.29	17.82	0.16	0.90	0.87
	STJ	36.78	45.27	-8.48	-0.21	17.88	0.19	0.83	0.89
	VeV	26.67	31.39	-4.72	-0.16	10.61	0.13	0.89	0.82
Industrie	FEY	33.84	34.23	-0.39	-0.01	12.94	0.14	0.80	0.89
	STF	35.35	35.59	-0.24	-0.01	12.50	0.12	0.88	0.93
Fond	COT	23.26	24.59	-1.33	-0.06	11.98	0.25	0.80	0.73
	GEN	33.36	34.73	-1.37	-0.04	13.22	0.15	0.80	0.86
	STE	17.78	22.04	-4.26	-0.21	12.21	0.38	0.79	0.64
	TER	29.41	26.27	3.14	0.11	11.57	0.17	0.82	0.83
Moyenne		42.18	42.44	-0.26	-0.03	17.79	0.19	0.80	0.85

TABLE 11.9 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2, associées à la méthode MCS ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

pour les stations A7 sud lyonnais (A7) et Lyon centre (LC). Pour ces deux stations le coefficient de corrélation ou le biais ne vérifie pas le critère de qualité associé à l'indice statistique.

Les biais (Bias), les erreurs types (RMSE) et les coefficients de corrélation (r) relatifs à la méthode MCS sur le cas d'étude 2008 sont comparés à ceux de la simulation SIRANE de référence sur la figure 11.7. Dans le cas des PM_{10}, les biais relatifs à la méthode MCS sont meilleurs que ceux associés à la simulation SIRANE de référence pour la majorité des capteurs. Dans le cas du NO_2, ils sont plus satisfaisants uniquement pour la moitié des capteurs. De plus, la valeur absolue du biais le moins satisfaisant est sensiblement plus faible (meilleure) après l'AD pour les PM_{10} mais elle est relativement similaire avant et après l'AD pour le NO_2. Pour les deux polluants, les erreurs types relatives à la méthode MCS sont généralement plus satisfaisants que celles de la simulation SIRANE de référence. Dans les deux cas (PM_{10} et NO_2), le RMSE maximum est néanmoins globalement du même ordre de grandeur avant et après l'AD. De même, les coefficients de corrélation associés à la méthode MCS sont plus satisfaisants que ceux de la simulation SIRANE de référence pour la majorité des stations, quel que soit le polluant. Cependant, le coefficient de corrélation minimum est relativement similaire avant et après l'application de la méthode MCS pour les deux espèces.

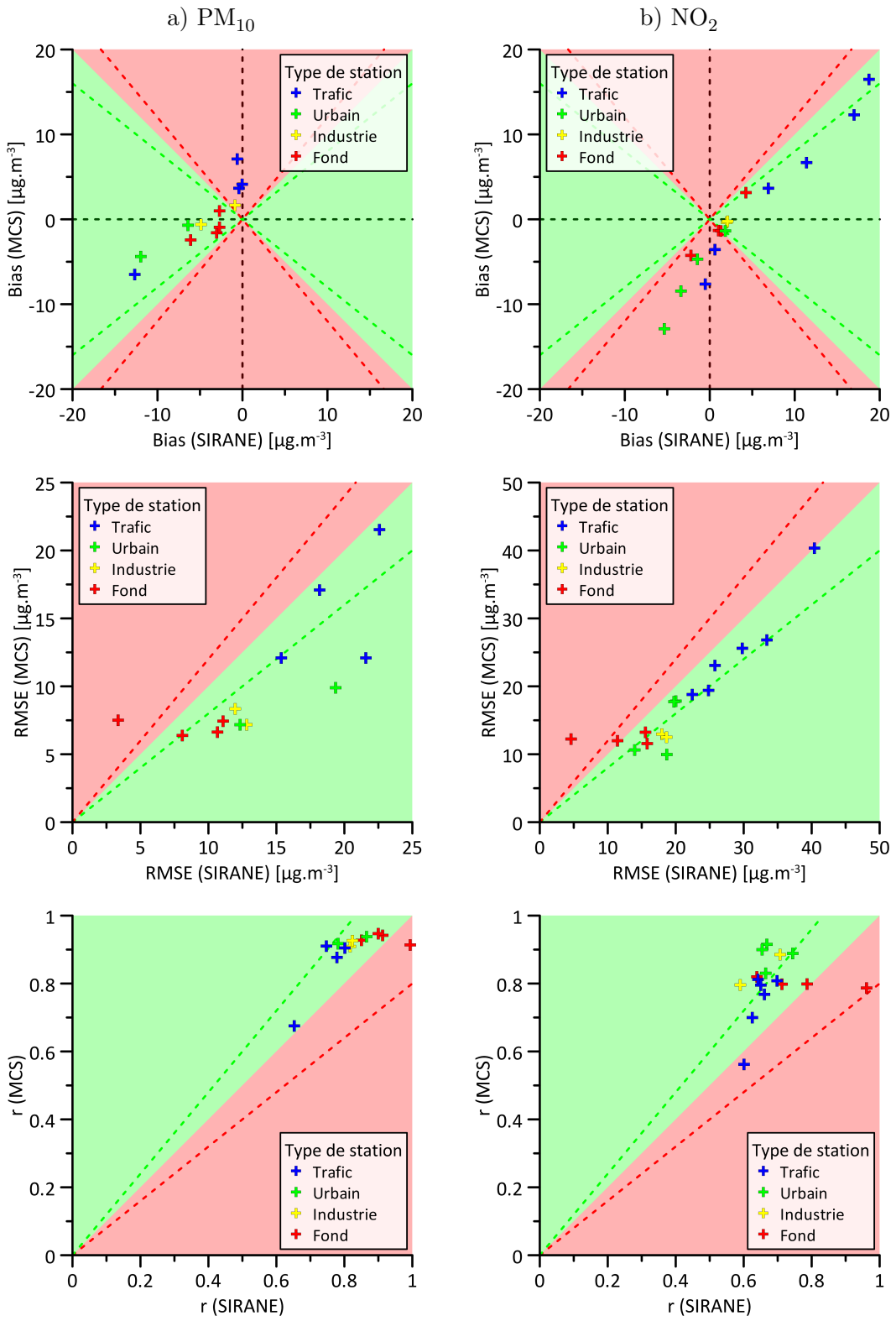


FIGURE 11.7 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés à la méthode MCS et à la simulation SIRANE de référence (zone verte (rouge) : MCS est meilleur (plus mauvais) que SIRANE, ligne verte (rouge) en pointillés : MCS est meilleur (plus mauvais) que SIRANE de 20 %)

11.4 Best Linear Unbiased Estimator (BLUE)

La méthode BLUE détermine la meilleure estimation de l'état d'un système en fonction des erreurs d'ébauche et d'observation (équations 11.7 et 11.8).

$$\mathbf{x^a} = \mathbf{x^b} + \mathbf{K}\left(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x^b}\right) \tag{11.7}$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R})^{-1} \tag{11.8}$$

Pour appliquer cette méthode, il est nécessaire de modéliser les matrices **B** et **R** associées respectivement aux covariances des erreurs d'ébauche et d'observation. Par la suite, ces matrices sont supposées stationnaires.

11.4.1 Modélisation des covariances des erreurs d'observation

Dans notre étude, nous considérons que les erreurs d'observations relatives à deux points distincts p_i et $p_{j\neq i}$ ne sont pas corrélées car les observations sont fournies par des appareils de mesure différents. Aussi, la covariance des innovations associées à deux points p_i et $p_{j\neq i}$ correspond à la covariance des erreurs d'ébauche relatives à ces deux mêmes points. De même, il est uniquement nécessaire de déterminer les variances des erreurs d'observation. Généralement, ces variances sont considérées uniformes pour toutes les stations de mesures (Blond *et al.*, 2003 ; Frydendall *et al.*, 2009 ; Tombette *et al.*, 2009 ; Wang *et al.*, 2011 ; Kumar *et al.*, 2012 ; Tilloy *et al.*, 2013). Cependant les erreurs de mesures dépendent des concentrations mesurées (Thunis *et al.*, 2013 ; Tilloy *et al.*, 2013). Aussi, les variances des erreurs d'observation ne sont a priori pas uniformes pour les différentes stations de mesures. La directive 2008/50/CE stipule que les données utilisées pour évaluer la qualité de l'air doivent répondre à un certain seuil de qualité. Dans le cas des mesures fixes, l'incertitude doit être au maximum de 15 % pour le NO_2 et de 25% pour les PM_{10}. Dans ce travail de thèse, nous faisons l'hypothèse que la distribution de probabilité des erreurs d'observation (les observations utilisées dans notre étude proviennent de stations fixes) est gaussienne et que 95 % de ces erreurs est inférieur à 15 % de la concentration moyenne mesurée. Aussi, nous modélisons la matrice **R** avec l'équation 11.9 :

$$\begin{aligned} &\mathbf{R} = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, ..., \sigma_m^2) \\ &\text{avec } 1.96\sigma_{\mathbf{i}} = \frac{0.15}{T}\sum_t^T \mathbf{y}_{\mathbf{i},t} \end{aligned} \tag{11.9}$$

où $\mathbf{y}_{\mathbf{i},t}$ correspond à concentration mesurée par le i^{ème} capteur au temps t et T est le nombre de pas de temps (dans une distribution gaussienne centrée sur μ et d'écart type σ, 95 % des valeurs sont situées entre $\mu - 1.96\sigma$ et $\mu + 1.96\sigma$).

11.4.2 Modélisation des covariances des erreurs d'ébauche

Dans notre étude, la matrice **B** est évaluée avec six modèles différents. Ces modèles évaluent la covariance B_{ij} des erreurs d'ébauche, relative aux points p_i et p_j, en fonction de la distance qui sépare les points p_i et p_j, de la corrélation de l'ébauche entre ces deux points, des variances de l'ébauche aux points p_i et p_j ou/et en fonction de la différence entre les concentrations moyennes modélisées (ébauche) en ces deux points. L'estimation des paramètres qui interviennent dans ces modèles est décrite à la fin de cette sous-section.

Modèle B(l)

La covariance B_{ij} des erreurs d'ébauche est parfois modélisée en considérant qu'elles sont plus corrélées lorsque les points p_i et p_j sont plus proches (Frydendall *et al.*, 2009 ; Tombette *et al.*, 2009 ; Kumar *et al.*, 2012). Dans ce cas, la covariance B_{ij} est évaluée en fonction de la distance la plus courte l_{ij} qui sépare les points p_i et p_j. La variation de la covariance des innovations en fonction de la distance l_{ij} pour le cas d'étude 2008 est indiquée sur la figure 11.8 (chaque point correspond à un couple de capteurs ; il y a respectivement 105 et 136 couples de capteurs pour les PM_{10} et le NO_2). Rappelons que $cov(\mathbf{z}_i, \mathbf{z}_j)$ correspond également à la covariance des erreurs d'ébauche B_{ij} lorsque $\mathbf{z}_i$ et $\mathbf{z}_j$ sont relatifs à deux points distincts p_i et $p_{j\neq i}$. Dans notre étude, la première approche, nommée B(l), consiste modéliser la covariance des erreurs d'ébauche B_{ij} en fonction de la distance l_{ij} avec l'équation 11.10 :

$$\mathrm{B}_{ij} = \nu_0 \exp\left(-\frac{l_{ij}}{L_l}\right) \tag{11.10}$$

où les paramètres ν_0 et L_l représentent respectivement une variance et une longueur caractéristiques.

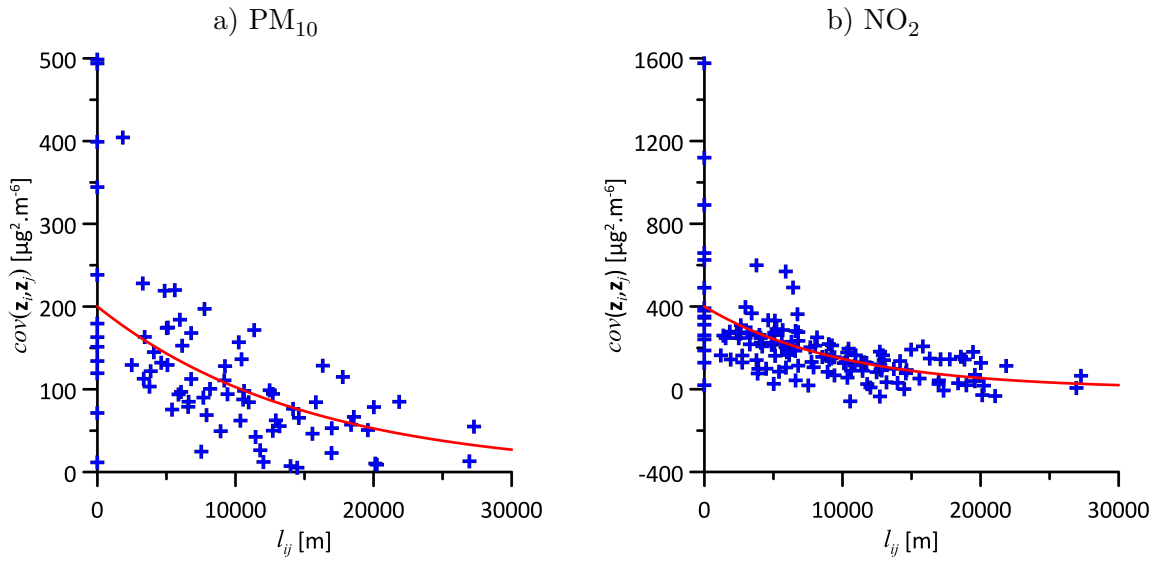


FIGURE 11.8 – Covariances des innovations, $cov(\mathbf{z}_i, \mathbf{z}_j)$, en fonction de la distance l_{ij} sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b) (la courbe rouge représente une régression exponentielle)

Modèle B(ρ)

Blond *et al.* (2003) modélisent le coefficient de corrélation ρ^{z}_{ij} des innovations en fonction du coefficient de corrélation ρ^{b}_{ij} entre les concentrations modélisées (ébauche) aux points p_i et p_j. De même, ils estiment la variance $\sigma^{2,\mathrm{z}}_i$ de l'innovation en fonction de la variance $\sigma^{2,\mathrm{b}}_i$ des concentrations modélisées (ébauche) au point p_i. Cette approche suppose que les erreurs d'ébauche relatives aux points p_i et p_j sont plus corrélées lorsque ces points sont impactés par les mêmes évènements. La variation de ρ^{z}_{ij} en fonction de ρ^{b}_{ij} et celle de $\sigma^{2,\mathrm{z}}_i$ en fonction de $\sigma^{2,\mathrm{b}}_i$ sur le cas d'étude 2008 sont représentées sur les figures 11.9 et 11.10. Dans ce projet de recherche, la deuxième approche, appelée B(ρ), consiste à modéliser la covariance des erreurs d'ébauche B_{ij} en fonction du coefficient de corrélation ρ^{b}_{ij} et des variances $\sigma^{2,\mathrm{b}}_i$ et $\sigma^{2,\mathrm{b}}_j$ de l'ébauche avec l'équation 11.11 :

$$\mathrm{B}_{ij} = \sqrt{\sigma^{2,\mathrm{z}}_i \sigma^{2,\mathrm{z}}_j}\,\rho^{\mathrm{z}}_{ij}$$
$$\text{avec} \begin{cases} \sigma^{2,\mathrm{z}}_i = \alpha \sigma^{2,\mathrm{b}}_i \\ \rho^{\mathrm{z}}_{ij} = \rho_0 \exp\left(-\dfrac{1-\rho^{\mathrm{b}}_{ij}}{L_\rho}\right) \end{cases} \tag{11.11}$$

où les paramètres α, ρ_0 et L_ρ représentent respectivement un coefficient d'ajustement, un coefficient de corrélation caractéristique et une longueur de corrélation caractéristique. Les variances des innovations, $\sigma^{2,\mathrm{z}}_i$, ne sont pas modélisées avec une fonction affine ($y = ax + b$) mais avec une fonction linéaire ($y = ax$) afin de garantir leur positivité (pour les deux polluants, la modélisation de $\sigma^{2,\mathrm{z}}_i$ en

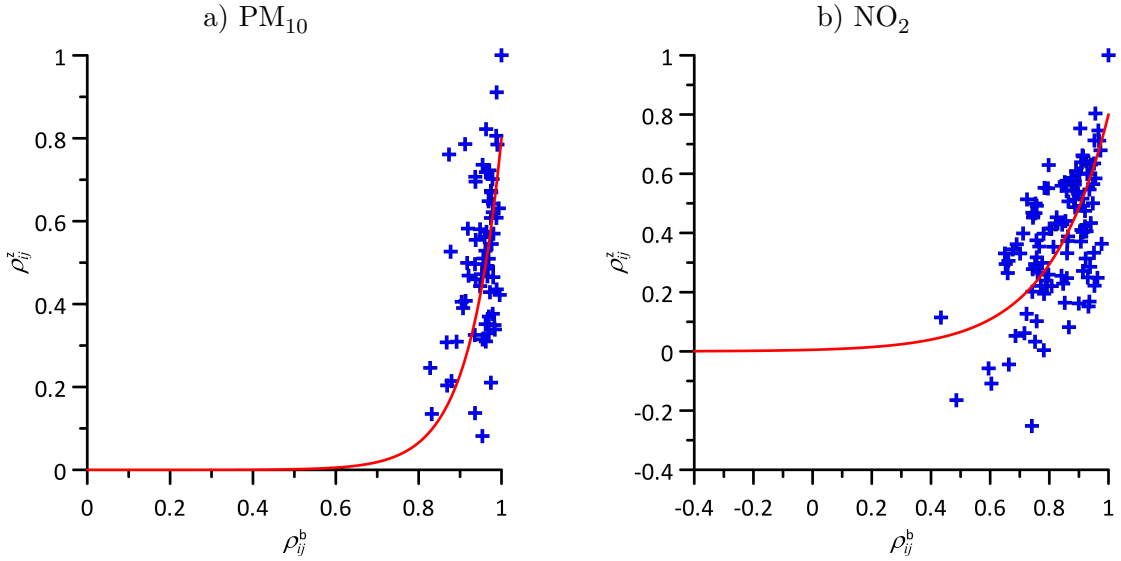


FIGURE 11.9 – Coefficients de corrélation des innovations, ρ^{z}_{ij}, en fonction des coefficients de corrélations de l'ébauche, ρ^{b}_{ij}, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b) (la courbe rouge représente une régression exponentielle)

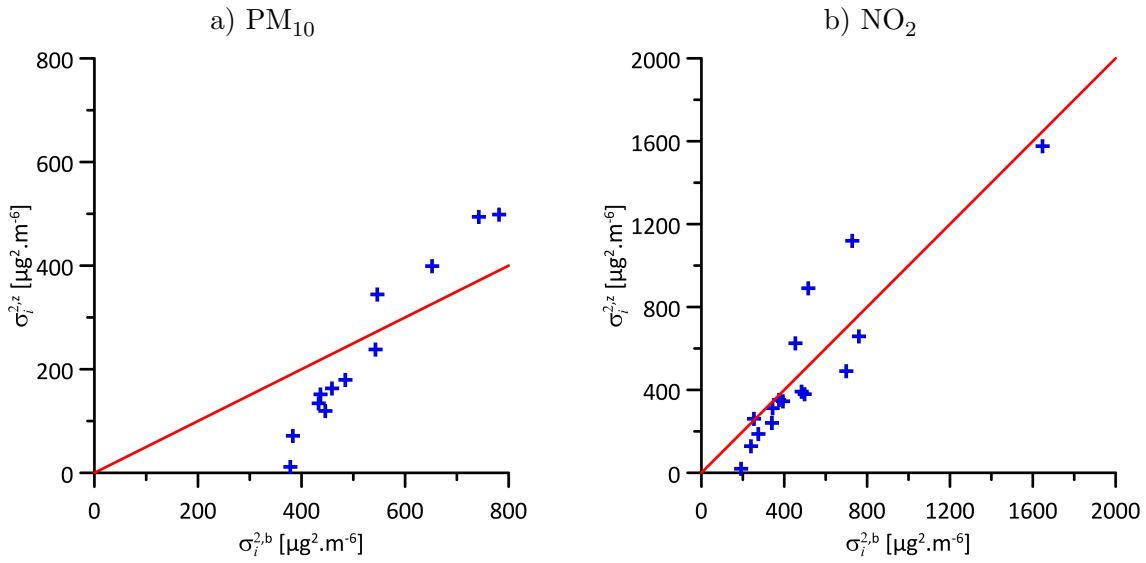


FIGURE 11.10 – Variances des innovations, $\sigma_i^{2,\mathrm{z}}$, en fonction des variances de l'ébauche, $\sigma_i^{2,\mathrm{b}}$, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b) (la courbe rouge représente une régression linéaire)

fonction de $\sigma_i^{2,\mathrm{b}}$ avec une expression de type $ax + b$ conduirait à des variances qui pourraient être négatives car le paramètre b serait négatif (figure 11.10)).

Modèle B(ΔC)

Dans ce travail de thèse, ρ_{ij}^{z} est également évalué en fonction de la variable ΔC_{ij} ($\Delta C_{ij} = \overline{|\mathrm{x}_i^{\mathrm{b}} - \mathrm{x}_j^{\mathrm{b}}|}$) qui correspond à l'écart absolu entre les concentrations moyennes modélisées (ébauche) $\overline{\mathrm{x}_i^{\mathrm{b}}}$ et $\overline{\mathrm{x}_j^{\mathrm{b}}}$ aux points p_i et p_j. Cette approche suppose que les erreurs d'ébauche associées aux points p_i et p_j sont plus corrélées lorsque les concentrations moyennes modélisées relatives à ces deux points sont plus proches. La variation de ρ_{ij}^{z} en fonction de ΔC_{ij} sur le cas d'étude 2008 est représentée sur la figure 11.11. Dans notre étude, la troisième approche, nommée B(ΔC), consiste à modéliser les covariances B_{ij} en fonction de ΔC_{ij} et des variances de l'ébauche $\sigma_i^{2,\mathrm{b}}$ et $\sigma_j^{2,\mathrm{b}}$ avec la relation 11.11 :

$$\mathrm{B}_{ij} = \sqrt{\sigma_i^{2,\mathrm{z}} \sigma_j^{2,\mathrm{z}}} \rho_{ij}^{\mathrm{z}}$$
$$\text{avec} \begin{cases} \sigma_i^{2,\mathrm{z}} = \alpha \sigma_i^{2,\mathrm{b}} \\ \rho_{ij}^{\mathrm{z}} = \rho_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta C_{ij}}{L_c}\right) \end{cases} \tag{11.12}$$

où les paramètres α, ρ_0 et L_c sont respectivement un coefficient d'ajustement, un coefficient de corrélation caractéristique et une longueur de corrélation caractéristique. A l'instar du modèle B(ρ), les variances $\sigma_i^{2,\mathrm{z}}$ sont modélisées en fonction des variances $\sigma_i^{2,\mathrm{b}}$ avec une relation linéaire.

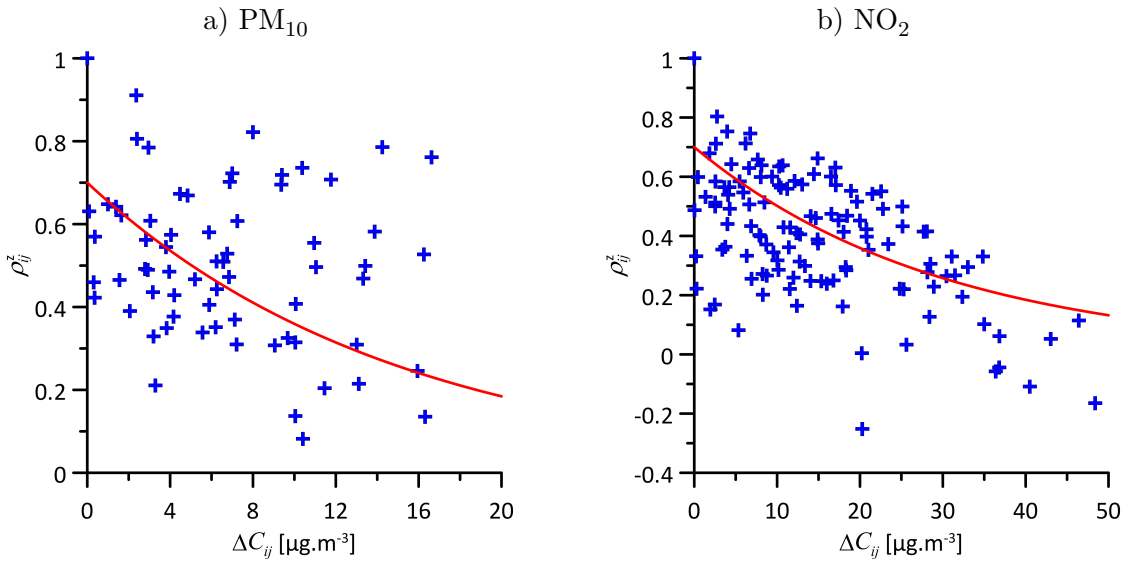


FIGURE 11.11 – Coefficients de corrélation des innovations, ρ^z_{ij}, en fonction de l'écart absolu entre les concentrations moyennes modélisées aux points p_i et p_j, ΔC_{ij}, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b) (la courbe rouge représente une régression exponentielle)

Modèle B(d)

Le quatrième modèle utilisé dans cette étude est celui proposé par Tilloy *et al.* (2013). Tilloy *et al.* (2013) déterminent les covariances des erreurs d'ébauche en tenant compte du réseau de rues. Cette approche suppose que plus les points points p_i et p_j sont proches le long du réseau de rues plus les évènements qui les impactent sont similaires et par conséquent plus les erreurs d'ébauche associées à ces points sont corrélées. De même, plus les longueurs de projection relatives aux points p_i et p_j sont similaires plus les erreurs d'ébauche sont corrélées (la longueur de projection d'un point correspond à la distance entre ce même point et sa projection sur la rue la plus proche). Tilloy *et al.* (2013) modélisent B_{ij} avec la relation 11.13 :

$$\mathrm{B}_{ij} = \nu_0 \exp\left(-\frac{d_{ij}}{L_d} - \frac{|P_i - Pj|}{L_p + \beta min(P_i - P_j)}\right) \tag{11.13}$$

où d_{ij} est la distance la plus courte le long du réseau de rues entre les points p_i et p_j (ou entre leur projection sur la rue la plus proche) et P_i est la longueur de projection. Les paramètres β, ν_0, L_l et L_p correspondent respectivement à un coefficient d'ajustement, une variance caractéristique, une longueur caractéristique le long du réseau de rues et une longueur caractéristique de projection. Ce modèle est par la suite appelée B(d).

Modèle B($l, \Delta C, \rho$)

Dans cette étude, les covariances des erreurs d'ébauche B_{ij} sont aussi déterminées avec deux modèles hybrides. Le cinquième modèle combine les modèles B(l), B(ΔC) et B(ρ). Avec ce cinquième

modèle, appelé $\mathrm{B}(l, \Delta C, \rho)$, les covariances B_{ij} sont modélisées avec l'expression 11.14.

$$\mathrm{B}_{ij} = \sqrt{\sigma_i^{2,\mathrm{z}} \sigma_j^{2,\mathrm{z}}} \rho_{ij}^{\mathrm{z}}$$
$$\text{avec} \begin{cases} \sigma_i^{2,\mathrm{z}} = \alpha \sigma_i^{2,\mathrm{b}} \\ \rho_{ij}^{\mathrm{z}} = \rho_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta C_{ij}}{L_c} - \dfrac{1-\rho_{ij}}{L_\rho} - \dfrac{l_{ij}}{L_l}\right) \end{cases} \tag{11.14}$$

Modèle $\mathbf{B}(d, \Delta C, \rho)$

Le sixième modèle, nommé $\mathrm{B}(d, \Delta C, \rho)$, combine les modèles $\mathrm{B}(d)$, $\mathrm{B}(\Delta C)$ et $\mathrm{B}(\rho)$. Dans ce cas, les covariances des erreurs d'ébauche sont évaluées avec la relation 11.15.

$$\mathrm{B}_{ij} = \sqrt{\sigma_i^{2,\mathrm{z}} \sigma_j^{2,\mathrm{z}}} \rho_{ij}^{\mathrm{z}}$$
$$\text{avec} \begin{cases} \sigma_i^{2,\mathrm{z}} = \alpha \sigma_i^{2,\mathrm{b}} \\ \rho_{ij}^{\mathrm{z}} = \rho_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta C_{ij}}{L_c} - \dfrac{1-\rho_{ij}}{L_\rho} - \dfrac{d_{ij}}{L_d} - \dfrac{|P_i - Pj|}{L_p + \alpha min(P_i - P_j)}\right) \end{cases} \tag{11.15}$$

	$\mathrm{B}(l)$	$\mathrm{B}(d)$	$\mathrm{B}(\rho)$	$\mathrm{B}(\Delta C)$	$\mathrm{B}(l, \rho, \Delta C)$	$\mathrm{B}(d, \rho, \Delta C)$
PM_{10}	ν_0=220 µg^2.m^{-6} L_l=6 km	ν_0=255 µg^2.m^{-6} L_d=12 km L_p=1 m β=15	ρ_0=0.90 L_ρ=0.15 α=0.75	ρ_0=0.60 L_μ=35 µg.m^{-3} α=0.40	ρ_0=0.90 L_l=30 km L_μ=135 µg.m^{-3} L_ρ=0.15 α=0.45	ρ_0=1.00 L_d=40 km L_p=800 m β=1 L_μ=45 µg.m^{-3} L_ρ=0.15 α=0.45
NO_2	ν_0=580 µg^2.m^{-6} L_l=4 km	ν_0=575 µg^2.m^{-6} L_d=12 km L_p=1 m β=5	ρ_0=0.50 L_ρ=0.30 α=0.80	ρ_0=0.40 L_μ=35 µg.m^{-3} α=0.75	ρ_0=0.60 L_l=24 km L_μ=75 µg.m^{-3} L_ρ=0.90 α=0.80	ρ_0=0.80 L_d=24 km L_p=10 m β=10 L_μ=225 µg.m^{-3} L_ρ=0.85 α=0.85

TABLE 11.10 – Paramètres des modèles de covariance des erreurs d'ébauche sur le cas d'étude 2008

Estimation des paramètres

Pour chaque modèle, les paramètres sont déterminés en recherchant ceux qui permettent de vérifier le diagnostic du χ^2 (sous-section 10.3.2). Plusieurs combinaisons de paramètres peuvent valider le diagnostic du χ^2. Lorsque c'est le cas, la combinaison retenue pour chaque modèle correspond à celle qui conduit au RMSE moyen le plus faible lors de la validation croisée. Les paramètres utilisés pour chaque modèle sont indiqués dans le tableau 11.10. Il convient de signaler qu'aucun des six modèles ne permet d'évaluer des covariances négatives qui peuvent néanmoins exister (figures 11.8.b, 11.9.b et 11.11.b). De même, la méthode BLUE ne garantit pas la positivité des résultats. Dans Silver *et al.* (2013a), les valeurs négatives de concentration obtenues avec la méthode BLUE sont remplacées par la valeur minimale de l'ébauche, différente de zéro. Dans notre cas, les valeurs négatives de concentration obtenues lors de l'AD sont remplacées par zéro.

11.4.3 Influence du nombre et des *types* de capteurs utilisés avec la méthode BLUE

L'objectif de cette sous-section est d'étudier l'influence du nombre et des *types* de mesures utilisées avec la méthode BLUE. Cette étude est effectuée en utilisant le modèle $\mathrm{B}(d, \Delta C, \rho)$. De même, elle est réalisée sur le cas d'étude 2008. La première analyse consiste à évaluer la variation du RMSE moyen en fonction du nombre de capteurs utilisés (N_a) lors de l'assimilation de données.

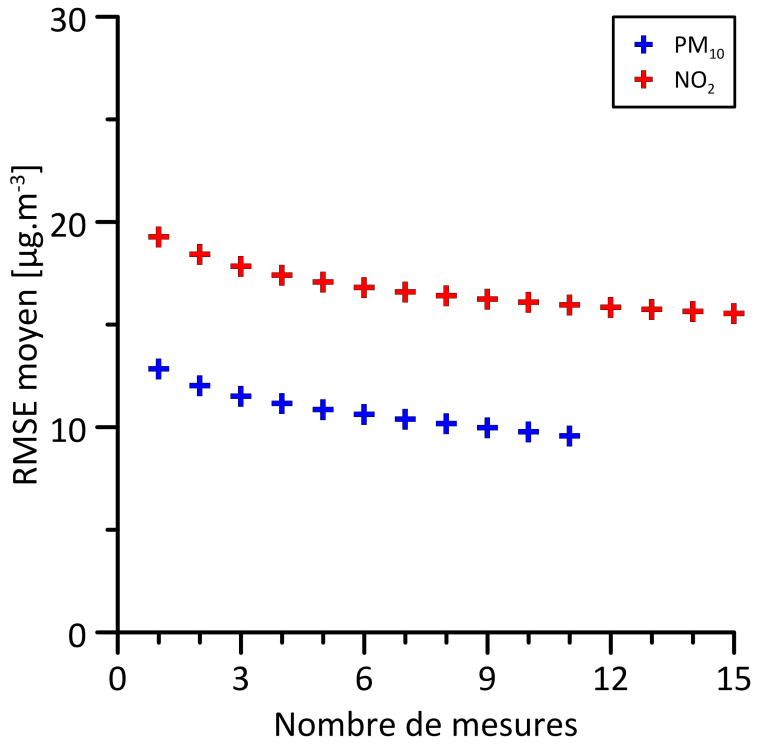


FIGURE 11.12 – Erreur type moyenne (RMSE moyen) en fonction du nombre de mesures utilisées avec la méthode BLUE (appliquée avec le modèle $\mathrm{B}(d, \Delta C, \rho)$) sur le cas d'étude 2008

Cette analyse est identique à celle qui est décrite dans la sous-section 11.2.2. Le RMSE moyen en fonction du nombre de mesures utilisées avec la méthode BLUE est indiqué sur la figure 11.12. Pour les deux polluants, la variation du RMSE moyen est relativement similaire. Plus N_a est important plus le RMSE moyen est satisfaisant. Le RMSE moyen diminue notamment de $3.20\,\mu\text{g.m}^{-3}$ entre $N_a = 1$ et $N_a = 11$ dans le cas des PM_{10} et de $3.80\,\mu\text{g.m}^{-3}$ entre $N_a = 1$ et $N_a = 15$ dans le cas du NO_2. De même, l'évolution du RMSE moyen suggère qu'il peut être encore plus faible en utilisant un nombre de mesures plus élevé. Cela est cohérent avec Denby *et al.* (2007) qui affirme que les résultats sont meilleurs à l'issue de l'AD en utilisant plus de capteurs. Denby *et al.* (2007), qui applique la méthode de krigeage (Cressie, 1993), indique néanmoins que l'AD fournit des estimations plus satisfaisantes lorsque la variabilité spatiale des concentrations est associée à une échelle spatiale supérieure aux distances qui séparent les capteurs. Dans notre étude, ce n'est pas le cas puisque la variabilité spatiale des concentrations est de l'ordre de la dizaine de mètres alors que la distance entre les deux capteurs les plus proches est de 1.20 km (la distance moyenne entre les stations est de 9.70 km).

Le RMSE à la station Lyon centre en fonction du nombre de mesures utilisées avec la méthode BLUE est représenté sur la figure 11.13. On constate que le RMSE relatif à $N_a = m - 1$ (m est le nombre de capteurs disponibles : 12 pour les PM_{10} et 16 pour le NO_2) est plus élevé que certains RMSE qui sont associés à des valeurs de N_a plus faibles. Le RMSE le plus satisfaisant est notamment associé à $N_a = 5$ dans le cas des PM_{10} et à $N_a = 8$ dans le cas du NO_2. De même, on note que pour chaque valeur de N_a, sauf pour $N_a = m - 1$, le RMSE varie significativement

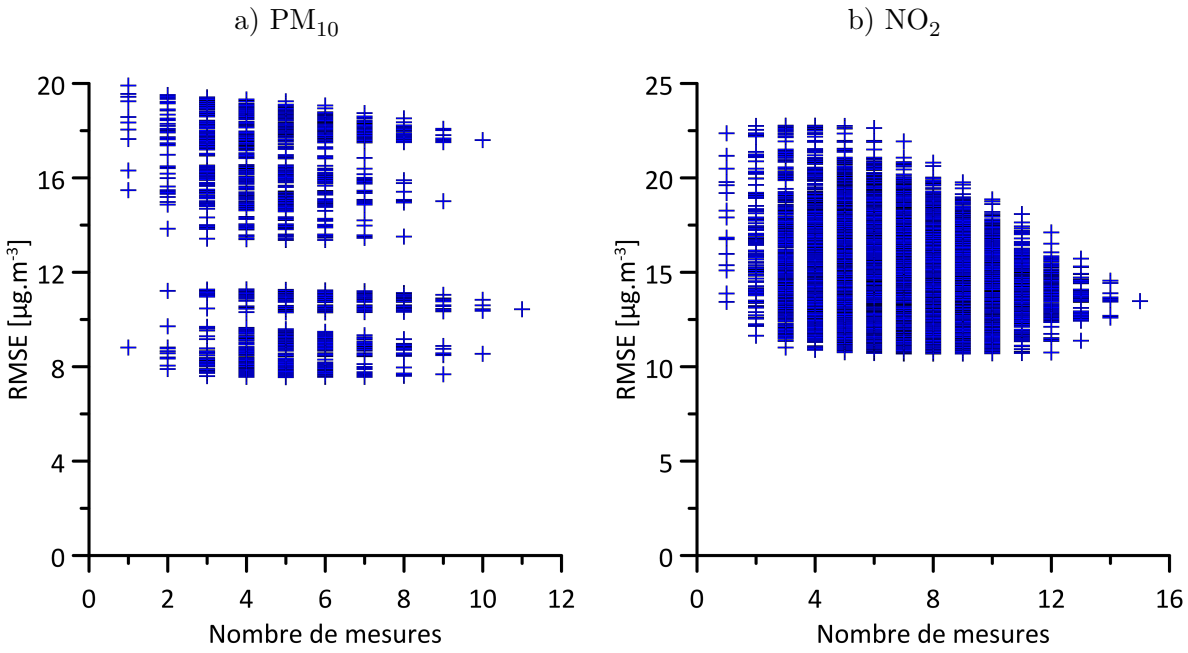


FIGURE 11.13 – Erreur type (RMSE) associée à la station Lyon centre en fonction du nombre de mesures utilisées avec la méthode BLUE (appliquée avec le modèle $B(d, \Delta C, \rho)$) sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b)

en fonction des combinaisons de capteurs utilisés. Ainsi, bien que le RMSE soit, en moyenne, plus faible en utilisant un nombre élevé de capteurs, il peut être localement plus satisfaisant en utilisant uniquement certains capteurs lors de l'AD avec la méthode BLUE (ce constat est similaire pour les autres stations mais les résultats ne sont pas indiqués dans ce rapport). On distingue notamment deux *gammes* de RMSE sur la figure 11.13.a : les RMSE entre 13.00 μg.m^{-3} et 20.00 μg.m^{-3} (dans la partie supérieure) et les RMSE entre 7.00 μg.m^{-3} et 12.00 μg.m^{-3}. Ce constat indique qu'il y a vraisemblablement des combinaisons de capteurs plus pertinentes que d'autres à utiliser avec la méthode BLUE pour évaluer les concentrations de PM_{10} à la station Lyon centre.

La seconde analyse consiste à évaluer l'influence des *types* de capteurs utilisés lors de l'AD avec la méthode BLUE. Cette analyse est similaire à celle qui est décrite dans la sous-section 11.2.2. Pour cette analyse, trois *filtres de capteurs* sont utilisées : F-Type, F-Dist et F-Corr (sous-section 11.2.2). Le RMSE moyen en fonction du filtre de capteurs appliqué avec la méthode BLUE sur le cas d'étude 2008 est indiqué dans le tableau 11.11. Pour les deux polluants, les RMSE moyens relatifs à l'utilisation d'un filtre sont comparables à celui associé à l'utilisation de tous les capteurs (utilisation de $m-1$ capteurs), hormis dans le cas des PM_{10} où le filtre F-Type conduit à un RMSE moyen plus important (par rapport au cas où aucun filtre n'est appliqué). Cela signifie que ces filtres de capteurs ne sont pas forcément pertinents avec la méthode BLUE. Ces résultats confirment néanmoins que l'utilisation d'un nombre limité d'observations lors de l'AD peut conduire à un RMSE moyen comparable à celui obtenu en utilisant le nombre maximal de mesures disponibles.

Filtre	RMSE moyen [μg.m^{-3}]	
	PM_{10}	NO_2
aucun	9.55	15.53
F-Type	11.27	16.35
F-Dist	9.65	15.76
F-Corr	9.65	16.31

TABLE 11.11 – Erreur type moyenne (RMSE moyen) en fonction des filtres de capteurs appliqués avec la méthode BLUE (appliquée avec le modèle $B(d, \Delta C, \rho)$) sur le cas d'étude 2008

11.4.4 Résultats de la méthode BLUE sur le cas d'étude 2008

La méthode BLUE est évaluée sur le cas d'étude 2008 en effectuant une validation croisée sur tous les pas de temps. Sur ce cas d'étude, les concentrations *initialement* négatives à l'issue de l'AD (remplacées par zéro par la suite) représentent moins de 1 % des résultats. Les performances statistiques globales associées à la méthode BLUE sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} sont indiquées sur le tableau 11.12. Quel que soit le modèle de covariance des erreurs d'ébauche, le biais moyen (Bias moyen) est relativement proche de zéro (valeur optimale pour cet indice statistique) avec la méthode BLUE. Les performances statistiques globales relatives aux modèles $B(l)$, $B(d)$, $B(\rho)$, $B(l, \rho, \Delta C)$ et $B(d, \rho, \Delta C)$ sont globalement du même ordre de grandeur. Cela montre notamment

que les modèles hybrides B($l, \rho, \Delta C$) et B($d, \rho, \Delta C$) ne sont pas significativement plus satisfaisants que les modèles *simples* (B(l), B(d), B(ρ)). Celles associées au modèle B(ΔC) sont légèrement moins bonnes avec notamment un RMSE moyen plus élevé. Néanmoins, les performances statistiques globales sont satisfaisantes pour tous les modèles car l'ensemble des critères de qualité relatifs aux indices statistiques est vérifié. De plus, elles sont meilleures que celles de la simulation SIRANE de référence. Avec la méthode BLUE appliquée avec le modèle B($d, \rho, \Delta C$), le RMSE moyen et le coefficient de corrélation moyen sont notamment améliorés (par rapport à la simulation SIRANE de référence) de 32 % et 10 %.

Méthode		$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
SIRANE		29.60	33.96	-4.36	-0.14	13.95	0.20	0.83	0.90
BLUE	B(l)		30.21	-0.61	-0.03	10.30	0.12	0.90	0.95
	B(d)		29.73	-0.13	-0.01	10.07	0.12	0.90	0.95
	B(ρ)		29.55	0.04	0.00	10.22	0.12	0.89	0.95
	B(ΔC)		29.65	-0.05	-0.01	11.39	0.15	0.88	0.93
	B($l, \rho, \Delta C$)		29.63	-0.04	-0.01	9.68	0.11	0.90	0.96
	B($d, \rho, \Delta C$)		29.88	-0.29	-0.02	9.51	0.10	0.91	0.96

TABLE 11.12 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation SIRANE de référence et à la méthode BLUE ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Méthode		$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
SIRANE		42.18	38.79	3.39	0.06	20.83	0.26	0.69	0.81
BLUE	B(l)		40.67	1.51	0.01	18.17	0.19	0.79	0.85
	B(d)		40.83	1.35	0.02	16.14	0.15	0.82	0.88
	B(ρ)		41.48	0.71	0.01	17.36	0.18	0.82	0.85
	B(ΔC)		41.38	0.80	0.01	17.32	0.18	0.82	0.86
	B($l, \rho, \Delta C$)		41.03	1.16	0.02	16.38	0.15	0.84	0.88
	B($d, \rho, \Delta C$)		41.02	1.16	0.02	15.65	0.14	0.84	0.89

TABLE 11.13 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2014 relatif au NO_2, associées à la simulation SIRANE de référence et à la méthode BLUE ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Les performances statistiques globales associées à la méthode BLUE sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2 sont indiquées sur le tableau 11.13. Celles associées aux modèles B(d), B($l, \rho, \Delta C$) et B($d, \rho, \Delta C$) sont relativement comparables. Ceci indique que le modèle hybride B($d, \rho, \Delta C$) n'est pas sensiblement plus satisfaisant que le modèle B(d). Celles relatives aux autres modèles sont légèrement plus mauvaises avec notamment un RMSE moyen moins bon. Néanmoins, les performances statistiques globales sont satisfaisantes avec chaque modèle puisque tous les critères de qualité associés aux indices statistiques sont vérifiés. De même, elles sont plus satisfaisantes que celles associées à la simulation SIRANE de référence. Le RMSE moyen et le coefficient de corrélation moyen sont notamment améliorés (par rapport à la simulation SIRANE) de 25 % et 22 % en utilisant le modèle B($d, \rho, \Delta C$).

Pour les deux polluants, le meilleur RMSE moyen avec la méthode BLUE est relatif à l'utilisation du modèle B($d, \rho, \Delta C$). Les performances statistiques locales (pour chaque station) associées à ce modèle sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} sont indiquées dans le tableau 11.14. Les performances statistiques relatives aux stations de type fond et industrie sont relativement meilleures que celles associées aux stations de type trafic et urbain. Localement, les performances statistiques sont satisfaisantes puisque l'ensemble des critères de qualité est vérifié pour tous les capteurs. Les performances statistiques associées au modèle B($d, \rho, \Delta C$) sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2 sont indiquées sur le tableau 11.15. Globalement, les meilleures performances statistiques sont relatives

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	42.34	37.94	4.40	0.11	19.71	0.24	0.71	0.94
	BER	30.10	33.96	-3.86	-0.12	10.01	0.10	0.88	0.96
	GC	36.19	30.73	5.46	0.16	16.00	0.23	0.90	0.87
	LP	35.83	32.47	3.35	0.10	11.89	0.12	0.88	0.94
Urbain	LC	28.42	32.58	-4.15	-0.14	10.30	0.11	0.91	0.94
	VeV	27.03	29.91	-2.88	-0.10	8.01	0.08	0.94	0.97
Industrie	FEY	28.86	26.80	2.06	0.07	7.21	0.07	0.94	0.98
	STF	27.51	30.15	-2.64	-0.09	7.43	0.07	0.94	0.98
Fond	COT	23.77	24.07	-0.30	-0.01	5.77	0.06	0.95	0.98
	GEN	25.02	27.50	-2.47	-0.09	6.53	0.06	0.95	0.98
	STE	23.50	25.23	-1.73	-0.07	3.23	0.02	0.99	1.00
	TER	26.61	27.27	-0.66	-0.02	8.06	0.09	0.91	0.96
Moyenne		29.60	29.88	-0.29	-0.02	9.51	0.10	0.91	0.96

Table 11.14 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10}, associées à la méthode BLUE appliquée avec le modèle B($d, \rho, \Delta C$) ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Type	Capteur	$\overline{c_m}$ [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ [µg.m^{-3}]	Bias [µg.m^{-3}]	FB	RMSE [µg.m^{-3}]	NMSE	r	FAC2
Trafic	A7	79.05	82.71	-3.65	-0.05	35.88	0.20	0.66	0.85
	BER	52.50	58.37	-5.87	-0.11	17.05	0.09	0.84	0.94
	GAR	74.06	63.13	10.93	0.16	25.91	0.14	0.82	0.97
	GC	47.06	43.17	3.89	0.09	18.89	0.18	0.81	0.91
	LP	50.67	48.97	1.70	0.03	17.33	0.12	0.83	0.94
	VAI	59.10	45.37	13.73	0.26	23.24	0.20	0.79	0.85
Urbain	GER	38.08	35.95	2.13	0.06	9.95	0.07	0.92	0.97
	LC	37.95	47.33	-9.38	-0.22	13.82	0.11	0.93	0.93
	STJ	36.78	35.52	1.26	0.03	13.47	0.14	0.84	0.87
	VeV	26.67	26.26	0.40	0.02	8.67	0.11	0.91	0.89
Industrie	FEY	33.84	33.64	0.21	0.01	12.56	0.14	0.83	0.88
	STF	35.35	36.49	-1.14	-0.03	12.62	0.12	0.88	0.88
Fond	COT	23.26	22.77	0.49	0.02	9.40	0.17	0.86	0.86
	GEN	33.36	31.13	2.23	0.07	12.02	0.14	0.84	0.88
	STE	17.78	20.73	-2.95	-0.15	5.57	0.08	0.95	0.88
	TER	29.41	24.75	4.66	0.17	14.02	0.27	0.73	0.78
Moyenne		42.18	41.02	1.16	0.02	15.65	0.14	0.84	0.89

TABLE 11.15 – Performances statistiques, sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2, associées à la méthode BLUE appliquée avec le modèle B$(d, \rho, \Delta C)$ ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

aux stations de type urbain. Pour les autres types de stations, elles sont relativement comparables. Localement, elles sont satisfaisantes car tous les critères de qualité relatifs aux indices statistiques sont vérifiés pour l'ensemble des stations. Il convient de signaler que la méthode BLUE est la seule méthode d'AD testée dans cette étude qui a conduit à des performances statistiques satisfaisantes pour tous les capteurs dans les deux cas (PM_{10} et NO_2).

Les biais (Bias), les erreurs types (RMSE) et les coefficients de corrélation (r) relatifs à la méthode BLUE appliquée avec le modèle B$(d, \rho, \Delta C)$ sont comparés à ceux de la simulation SIRANE de référence sur la figure 11.14. Pour les deux polluants, les biais associés à la méthode BLUE sont parfois plus importants que ceux de la simulation SIRANE de référence. Néanmoins, ils sont meilleurs pour la majorité des stations. De plus, la valeur absolue du biais le moins satisfaisant est sensiblement plus faible après l'AD. De même, les erreurs types et les coefficients de corrélation relatifs à la méthode BLUE sont généralement plus satisfaisants que ceux de la simulation SIRANE pour les deux polluants. Le plus mauvais RMSE et le plus mauvais coefficient de corrélation sont notamment plus satisfaisants après l'AD.

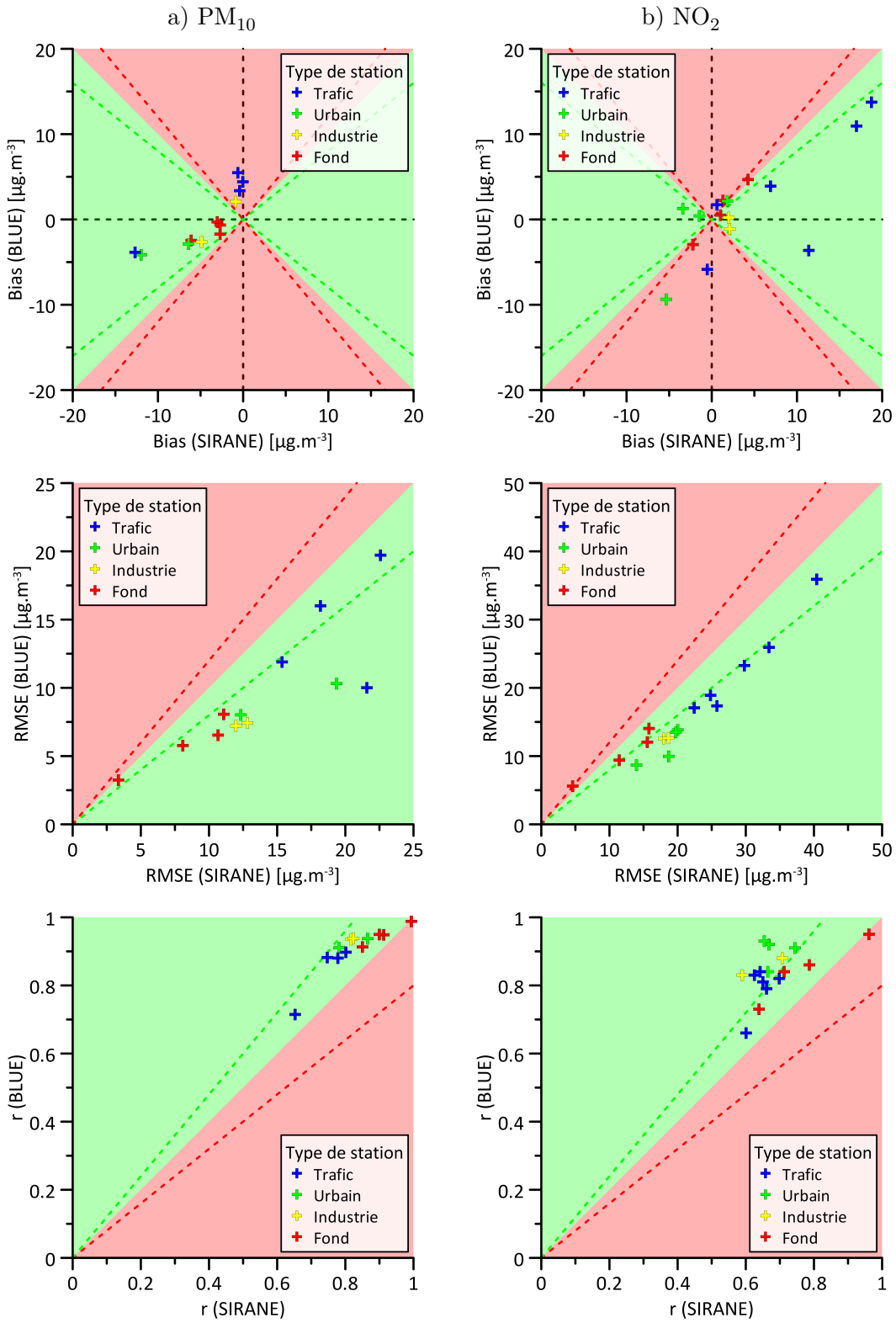


FIGURE 11.14 – Comparaison, sur le cas d'étude 2014 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés à la méthode BLUE appliquée avec le modèle $B(d, \rho, \Delta C)$ et à la simulation SIRANE de référence (zone verte (rouge) : BLUE est meilleur (plus mauvais) que SIRANE, ligne verte (rouge) en pointillés : BLUE est meilleur (plus mauvais) que SIRANE de 20 %)

11.5 Inter-comparaison des méthodes d'assimilation de données sur le cas d'étude 2008

Dans les trois sections précédentes (sections 11.2 à 11.4), la méthode de débiaisement, la méthode MCS et la méthode BLUE ont été évaluées de manière indépendante. L'objectif de cette section est de comparer les résultats obtenus avec ces trois méthodes d'assimilation de données et la mise en œuvre de celles-ci sur le cas d'étude 2008. Pour la méthode de débiaisement et la méthode BLUE, seules les estimations associées au meilleur RMSE sont utilisées pour la comparaison des résultats. Aussi, cette comparaison porte sur les estimations obtenues avec la méthode Déb-Rap, la méthode MCS et la méthode BLUE appliquée avec le modèle B$(d, \rho, \Delta C)$. Dans cette analyse, les estimations relatives à la méthode MCS sont celles qui sont associées à l'utilisation de trois groupes de sources (sous-section 11.3.3). Dans la suite de cette section, l'expression *méthode BLUE* sous-entend *méthode BLUE appliquée avec le modèle* $B(d, \rho, \Delta C)$.

11.5.1 Comparaison des performances statistiques associées aux méthodes d'assimilation de données sur le cas d'étude 2008

Les performances statistiques globales associées aux trois méthodes d'AD sur le cas d'étude 2008 sont indiquées dans les tableaux 11.16 et 11.17. Pour les deux polluants, le biais moyen (Bias moyen) est légèrement plus satisfaisant avec la méthode Déb-Rap et la méthode MCS alors que le RMSE moyen et le coefficient de corrélation moyen sont légèrement plus satisfaisants avec la méthode BLUE. Cela est dû au fait que la méthode BLUE définit la meilleure estimation comme celle qui minimise l'erreur quadratique vis-à-vis de l'état réel alors que la méthode Déb-Rap l'associe à celle qui est non biaisée. Bien qu'elle cherche également la solution qui minimise l'erreur quadratique vis-à-vis des mesures, la méthode MCS détermine l'analyse avec une expression relativement proche de celle qui est utilisée avec la méthode Déb-Rap (équations 11.4 et 11.2). Avec ces deux méthodes,

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
SIRANE	29.60	33.96	-4.36	-0.14	13.95	0.20	0.83	0.90
Déb-Rap		29.60	0.00	0.00	10.48	0.12	0.90	0.95
MCS		29.58	0.02	-0.01	10.27	0.12	0.90	0.96
BLUE		29.88	-0.29	-0.02	9.51	0.10	0.91	0.96

TABLE 11.16 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10}, associées à la simulation SIRANE de référence, à la méthode Déb-Rap, à la méthode MCS et à la méthode BLUE appliquée avec le modèle B$(d, \rho, \Delta C)$ ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

Méthode	$\overline{c_m}$ moyen [µg.m^{-3}]	$\overline{c_p}$ moyen [µg.m^{-3}]	Bias moyen [µg.m^{-3}]	FB moyen	RMSE moyen [µg.m^{-3}]	NMSE moyen	r moyen	FAC2 moyen
SIRANE	42.18	38.79	3.39	0.06	20.83	0.26	0.69	0.81
Déb-Rap		42.13	0.05	-0.03	17.13	0.17	0.81	0.87
MCS		42.44	-0.26	-0.03	17.79	0.19	0.80	0.85
BLUE		41.02	1.16	0.02	15.65	0.14	0.84	0.89

TABLE 11.17 – Performances statistiques globales, sur le cas d'étude 2008 relatif au NO_2, associées à la simulation SIRANE de référence, à la méthode Déb-Rap, à la méthode MCS et à la méthode BLUE appliquée avec le modèle B$(d, \rho, \Delta C)$ ($\overline{c_m}$: concentration moyenne mesurée, $\overline{c_p}$: concentration moyenne modélisée, Bias : biais, FB : biais fractionnel, RMSE : erreur type, NMSE : erreur quadratique normalisée, r : coefficient de corrélation, FAC2 : facteur 2, les valeurs en rouge ne vérifient pas les critères de qualité : $|\text{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, $|\text{FB}| \leq 0.67$, RMSE $\leq \overline{c_m}$, NMSE ≤ 6, r ≥ 0.60, FAC2 ≥ 0.30)

l'analyse correspond globalement à l'ébauche multipliée par un coefficient uniforme spatialement. Cela explique certainement le fait que les performances de ces deux méthodes soient très similaires. Néanmoins, les performances statistiques globales de ces trois méthodes d'AD sont relativement comparables. Elles sont notamment satisfaisantes puisque tous les critères de qualité associés aux indices statistiques sont vérifiés. De même, elles sont plus satisfaisantes que celles associées à la simulation SIRANE de référence.

Les performances statistiques locales (pour chaque capteur) associées aux trois méthodes d'AD sur le cas d'étude 2008 sont comparées (sur la base des résultats associés à la simulation SIRANE de référence) sur la figure 11.15. Pour les deux polluants, les biais associés aux trois méthodes d'AD sont relativement comparables. Néanmoins, la valeur absolue du biais le moins satisfaisant est plus faible avec la méthode BLUE pour les deux espèces. De même, il convient de noter dans le cas du NO_2 que la méthode BLUE est la seule qui corrige à la fois des biais initialement négatifs et des biais initialement positifs (les biais *initiaux* correspondent à ceux de l'ébauche, c'est-à-dire à ceux de la simulation SIRANE de référence). Aussi, cela montre que la méthode BLUE permet de corriger l'ébauche dans des cas complexes, où les biais ne sont pas forcément homogènes spatialement. A l'instar des biais, les erreurs types et les coefficients de corrélation associés aux trois méthodes d'AD sont globalement du même ordre de grandeur dans le cas des PM_{10}. Ils sont cependant légèrement plus satisfaisants avec la méthode BLUE dans le cas du NO_2, Pour les deux polluants, le plus mauvais RMSE est moins élevé avec la méthode BLUE. De même, le plus mauvais coefficient de corrélation est plus élevé (meilleur) avec cette méthode.

Globalement, les performances statistiques des trois méthodes d'AD sur le cas d'étude 2008 sont comparables. Néanmoins, la méthode BLUE est la seule qui corrige des biais qui ne sont pas homogènes spatialement. De plus, le plus mauvais biais, le plus mauvais RMSE et le plus mauvais coefficient de corrélation sont plus satisfaisants avec la méthode BLUE.

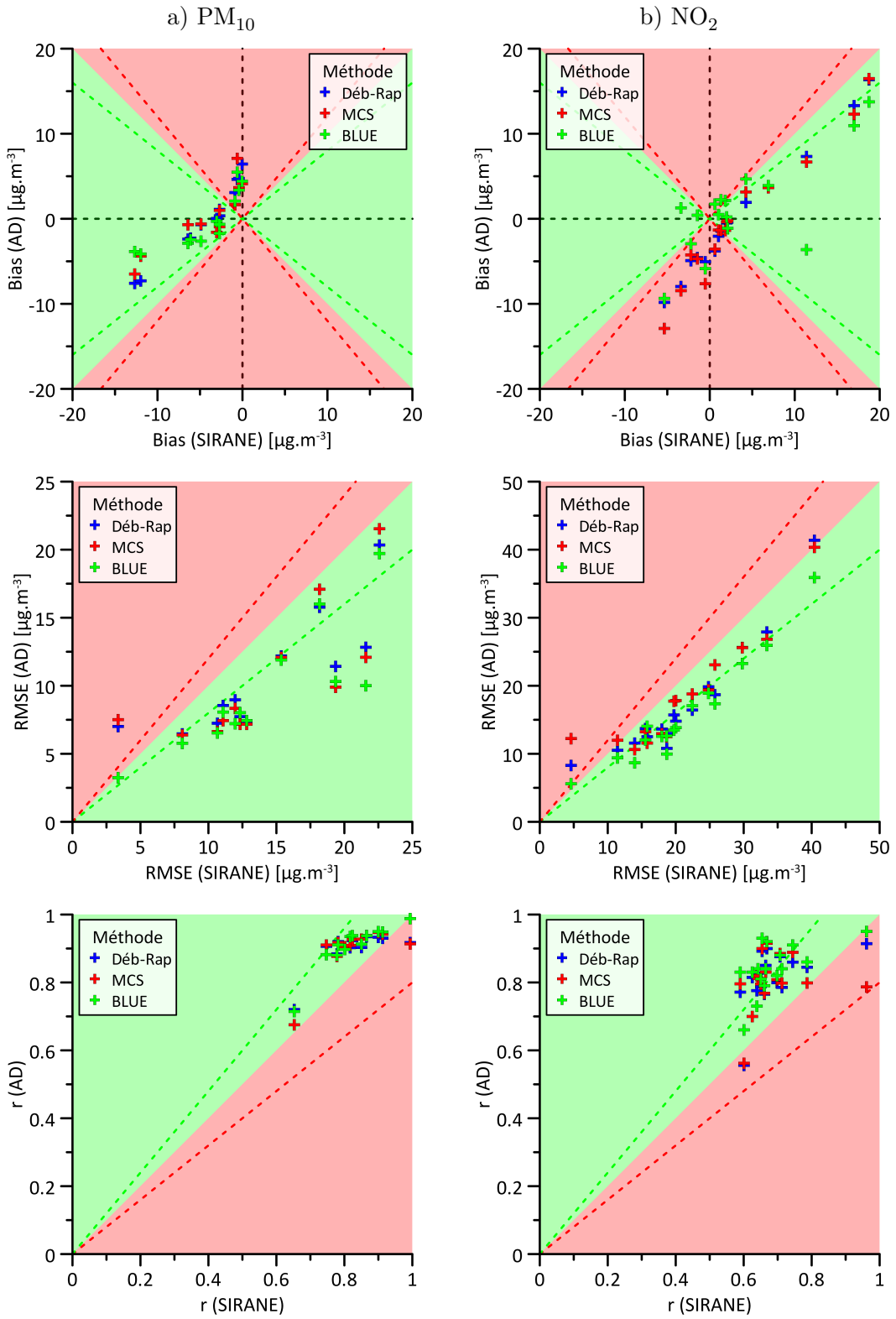


FIGURE 11.15 – Comparaison, sur le cas d'étude 2008 relatif aux PM_{10} (a) et au NO_2 (b), des biais (Bias), des erreurs types (RMSE) et des coefficients de corrélation (r) associés à la méthode Déb-Diff, à la méthode MCS et à la méthode BLUE appliquée avec le modèle $\mathbf{B}(d, \rho, \Delta C)$ à ceux de la simulation SIRANE de référence (zone verte (rouge) : l'approche d'AD est meilleure (plus mauvaise) que SIRANE, ligne verte (rouge) en pointillés : l'approche d'AD est meilleure (plus mauvaise) que SIRANE de 20 %)

11.5.2 Comparaison qualitative des concentrations modélisées avec les méthodes d'assimilation de données sur le cas d'étude 2008

Les figures 11.16 et 11.17 montrent les signaux temporels de concentration en PM_{10} et en NO_2 aux stations Cotière de l'Ain et Berthelot, relatifs à deux semaines de l'été 2008, obtenus à partir des mesures, de la simulation SIRANE de référence et avec les trois méthodes d'AD. Les signaux temporels de concentration associés aux différentes méthodes d'AD sont généralement comparables bien que les différences soient quelquefois significatives localement. De même, les écarts entre les estimations de la simulation SIRANE de référence et celles des méthodes d'AD sont parfois importants, notamment à la station Berthelot.

Bien que les résultats des validations croisées soient comparables, les champs de concentration moyenne en PM_{10} estimés avec les trois méthodes d'AD (figure 11.18) sont légèrement différents. Les concentrations sur la ville de Lyon (partie centrale de l'agglomération) estimées avec les méthodes d'AD sont globalement plus faibles que celles modélisées avec la simulation SIRANE de référence. Dans le centre de l'agglomération lyonnaise, les concentrations sont plus élevées avec la méthode Deb-Rap qu'avec les méthodes MCS et BLUE. En revanche, les concentrations le long des axes routiers sont généralement plus importantes avec la méthode BLUE. Dans le cas du NO_2, les champs de concentration moyenne évalués avec les méthodes d'AD présentent également des différences (figure 11.19). Les champs de concentration estimés avec les méthodes Déb-Rap et MCS sont relativement comparables. Ceux-ci sont légèrement plus importants que celui associé à la simulation SIRANE. Les concentrations sur la ville de Lyon sont légèrement plus faibles avec la méthode BLUE qu'avec les deux autres méthodes d'AD. Cependant, les concentrations à proximité des axes routiers sont généralement plus élevées avec la méthode BLUE.

11.5.3 Comparaison de la mise en œuvre des méthodes d'assimilation de données sur le cas d'étude 2008

La mise en œuvre de l'assimilation de données est plus ou moins complexe selon la méthode utilisée. La méthode de débiaisement est la plus simple. Celle-ci ne nécessite aucune étape de préparation ni de calculs supplémentaires par rapport à la mise en œuvre *classique* d'un modèle de dispersion atmosphérique. En revanche, il est nécessaire de déterminer la contribution des sources pour utiliser la méthode MCS. Cela se traduit par une augmentation du temps de préparation et de calcul de la simulation. La mise en œuvre de la méthode BLUE est la plus complexe. Contrairement aux deux autres méthodes, celle-ci nécessite une *étape d'apprentissage* qui inclut la réalisation d'une *première* simulation sur une période antérieure ou sur la période d'étude. Cette étape, qui permet de modéliser les matrices $\mathbf{B}$ et $\mathbf{R}$, consiste notamment à évaluer les variables (l, d, P, ΔC et/ou ρ) relatives au modèle de covariances des erreurs d'ébauche ainsi que les paramètres associés.

Le coût en temps de calcul des trois méthodes d'AD est aussi différent. La moins coûteuse est la méthode de débiaisement. Avec cette méthode, le temps de calcul pour déterminer les champs de concentration en PM_{10} et en NO_2 pour une échéance horaire sur le cas d'étude 2008 (14.40 millions de points) est d'environ 3 secondes.CPU avec un processeurs Intel® Xeon® Processor

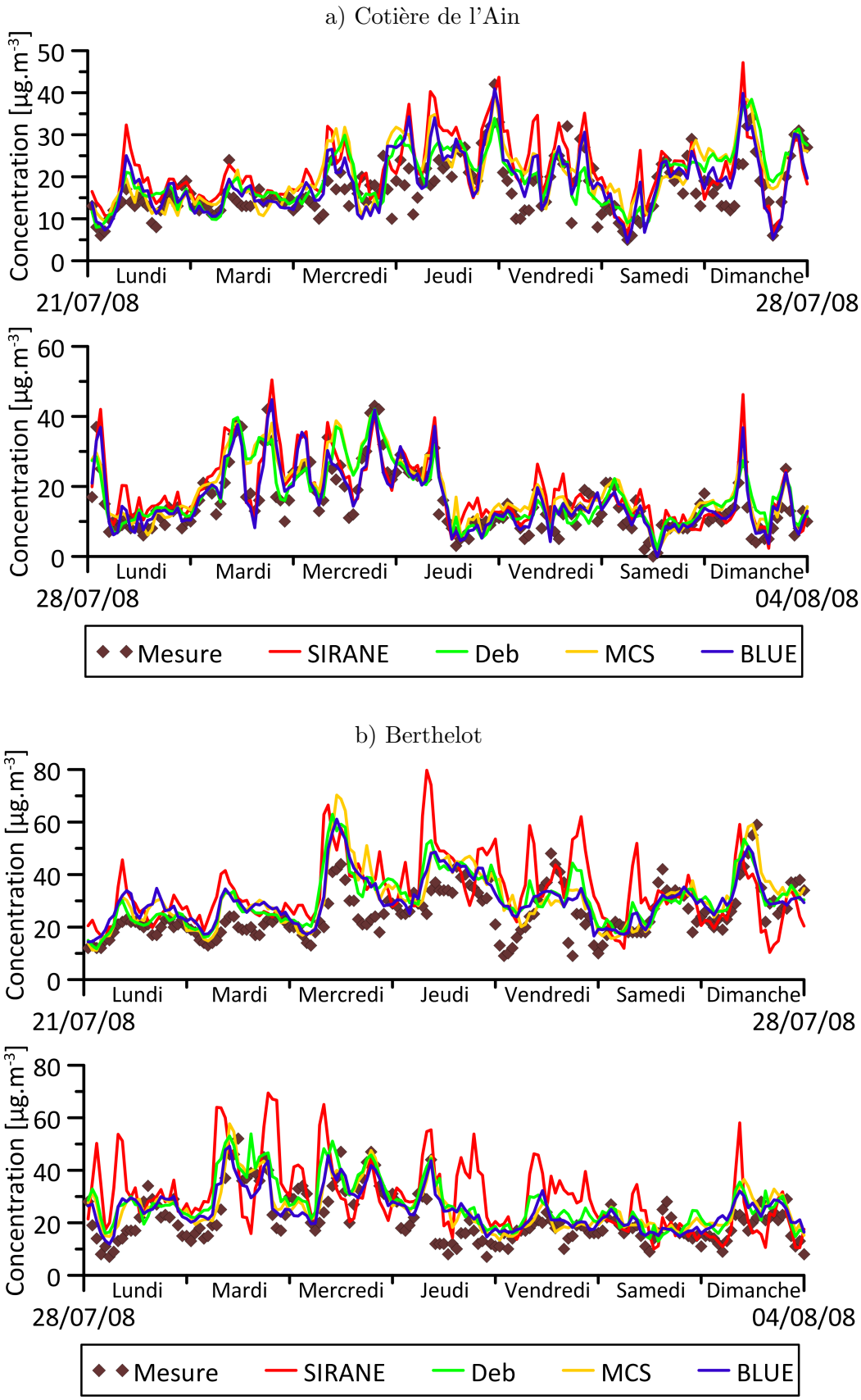


FIGURE 11.16 – Signaux temporels de concentration en PM_{10} entre le 21 juillet 2008 et le 4 août 2008 aux stations Cotière de l'Ain (a) et Berthelot (b) obtenus à partir des mesures, de la simulation SIRANE de référence et des méthodes d'assimilation de données

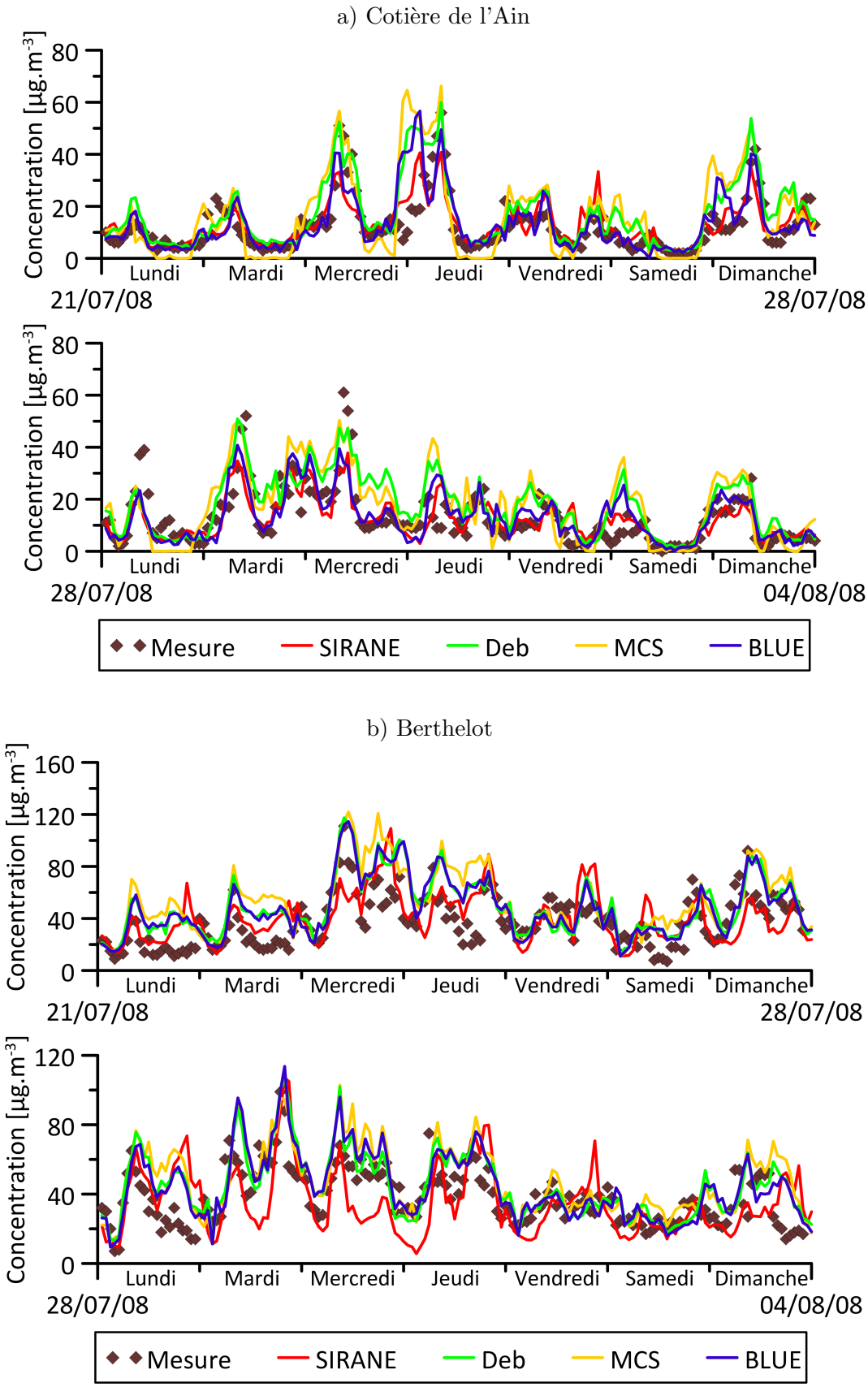


FIGURE 11.17 – Signaux temporels de concentration en NO_2 entre le 21 juillet 2008 et le 4 août 2008 aux stations Cotière de l'Ain (a) et Berthelot (b) obtenus à partir des mesures, de la simulation SIRANE de référence et des méthodes d'assimilation de données

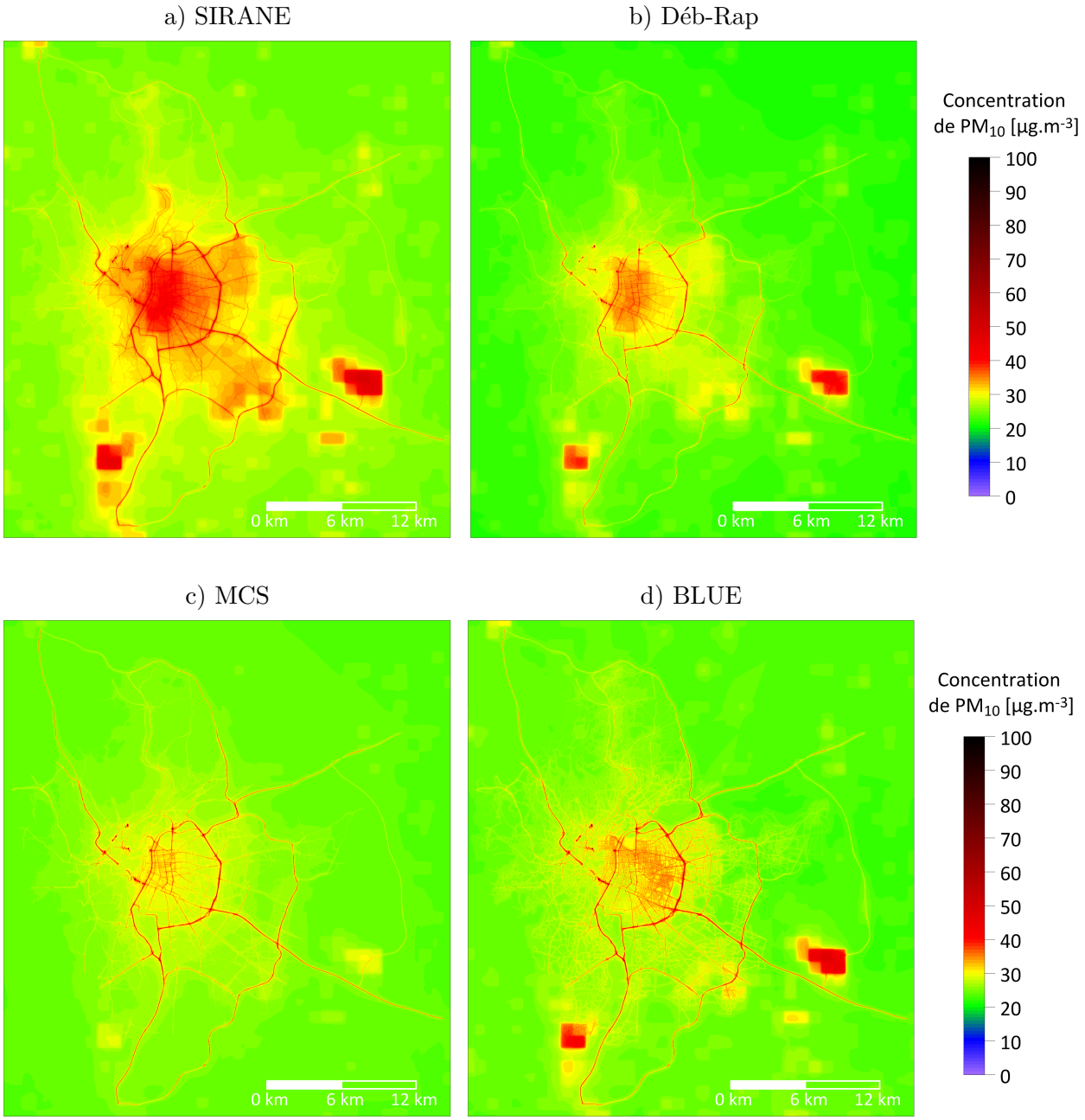


FIGURE 11.18 – Concentrations moyennes de PM_{10} sur l'agglomération lyonnaise en 2008 estimées avec le modèle SIRANE (a), la méthode Déb-Rap (b), la méthode MCS (c) et la méthode BLUE (d) appliquée avec le modèle $B(d, \rho, \Delta C)$

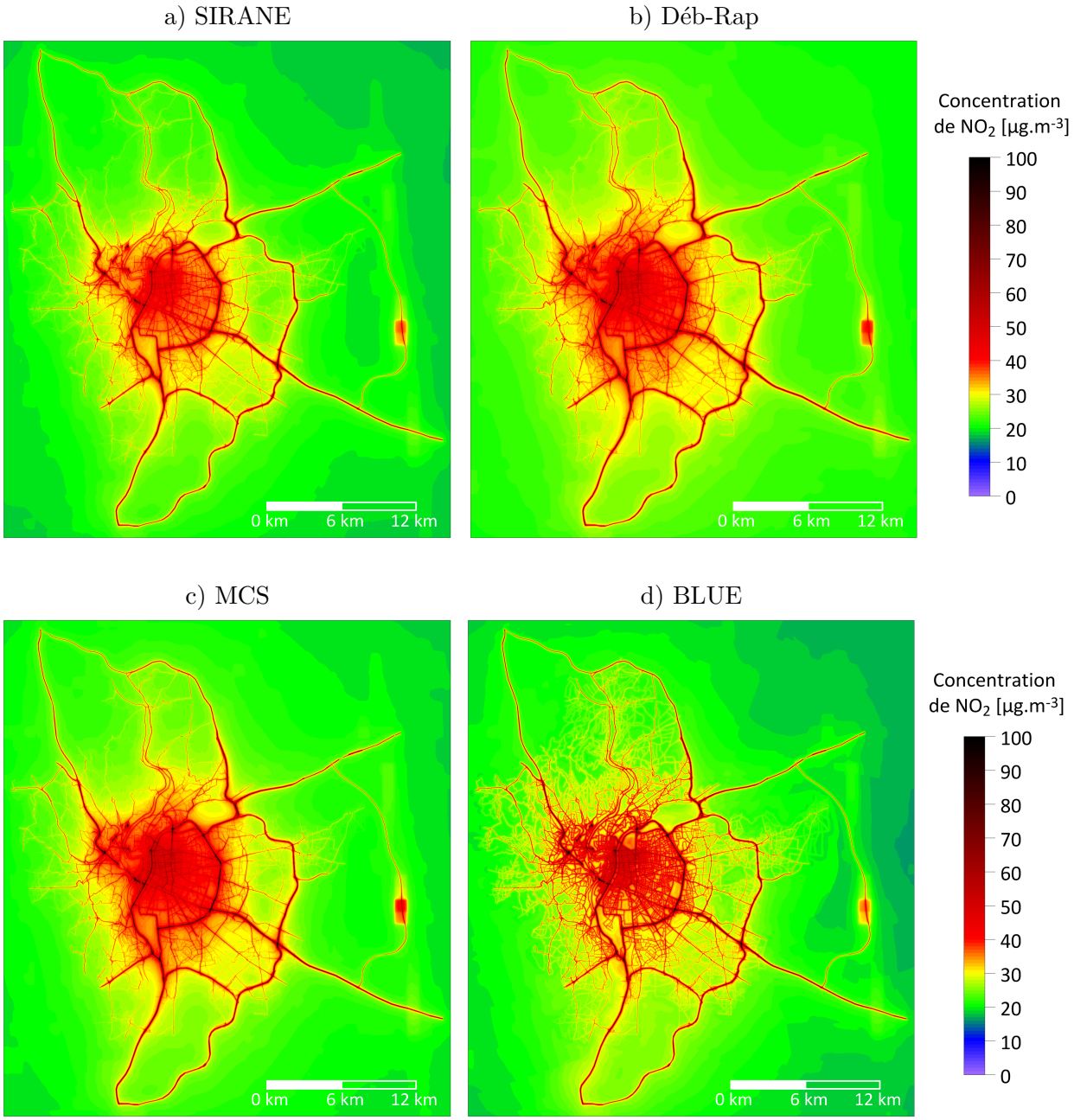


FIGURE 11.19 – Concentrations moyennes de NO_2 sur l'agglomération lyonnaise en 2008 estimées avec le modèle SIRANE (a), la méthode Déb-Rap (b), la méthode MCS (c) et la méthode BLUE (d) appliquée avec le modèle B$(d, \rho, \Delta C)$

3000 Sequence, à 3.2 GHz, 4 cœurs, 8 threads. Avec la même configuration, il est en moyenne de 7 secondes.CPU avec la méthode MCS et de 60 secondes.CPU avec la méthode BLUE. Le temps de calcul est sensiblement plus élevé avec la méthode BLUE car il est nécessaire de réaliser des produits matriciels, notamment pour déterminer la matrice **K** (avec les deux autres méthodes, il est *seulement* nécessaire de multiplier un (des) vecteur(s) par un (des) coefficient(s)). Avec les mêmes ressources informatiques, le temps de calcul pour estimer, sur une échéance horaire, les champs de concentration en PM_{10} et en NO_2 est d'environ 270 secondes.CPU avec le modèle SIRANE. Aussi, l'augmentation du temps de calcul en appliquant la méthode de débiaisement et la méthode MCS est relativement négligeable. En revanche, l'application de la méthode BLUE induit une augmentation du temps de calcul plus importante qui est d'environ 20 %.

11.6 Conclusion

Trois méthodes d'assimilation de données ont été appliquées avec le modèle SIRANE afin d'améliorer l'estimation de la qualité de l'air à l'échelle urbaine. La première méthode est la méthode de débiaisement. Celle-ci consiste à débiaiser les estimations du modèle SIRANE vis-à-vis des mesures. La seconde méthode appliquée, appelée *modulation de la contribution des sources* (MCS), consiste à moduler la contribution des sources afin de minimiser l'erreur quadratique vis-à-vis des observations. La troisième méthode est la méthode BLUE. Celle-ci détermine la meilleure estimation en fonction des erreurs du modèle et des erreurs de mesures. Ces trois méthodes ont été évaluées sur le cas d'étude 2008. Globalement, les résultats fournis par ces méthodes sont meilleures en utilisant un nombre important de mesures lors de l'AD. Cependant, ils sont parfois aussi bons voire meilleurs en utilisant uniquement certains capteurs. Les performances statistiques associées à ces méthodes d'AD sur le cas d'étude 2008 sont globalement satisfaisantes. Elles sont notamment plus satisfaisantes que celles de la simulation SIRANE de référence. De même, elles sont relativement comparables (pour chaque méthode d'AD). Néanmoins, les performances statistiques locales (à chaque station) les plus mauvaises sont généralement plus satisfaisantes avec la méthode BLUE. De même, cette méthode est la seule (sur ce cas d'étude) qui corrige des biais qui ne sont pas uniformes spatialement.

Conclusion de la quatrième partie

L'approche d'assimilation de données consiste à combiner des données modélisées et mesurées afin de déterminer la meilleure estimation possible de l'état d'un système. La notion de *meilleure estimation* varie en fonction des méthodes. Généralement, la meilleure estimation correspond à celle qui minimise l'erreur quadratique par rapport aux valeurs réelles. Néanmoins, elle est parfois associée à une estimation non biaisée vis-à-vis des valeurs réelles. De même, la complexité et le coût en temps de calcul diffèrent selon les méthodes d'assimilation de données. Dans le cadre de ce projet de recherche, trois méthodes d'assimilation de données ont été appliquées avec le modèle SIRANE afin d'estimer la qualité de l'air à l'échelle urbaine. Il s'agit de la méthode de débiaisement, de la méthode nommée *modulation de la contribution des sources* (MCS) et de la méthode BLUE. Les performances statistiques associées à ces trois méthodes d'assimilation de données sur le cas d'étude 2008 montrent que ces méthodes permettent d'améliorer les résultats fournis par le modèle SIRANE. Ces performances statistiques sont globalement satisfaisantes, vis-à-vis des critères de qualité adoptés dans ce travail de thèse. Généralement, le biais moyen est légèrement plus satisfaisant avec la méthode de débiaisement et la méthode MCS mais le RMSE moyen et le coefficient de corrélation moyen sont légèrement meilleurs avec la méthode BLUE. Néanmoins, les performances statistiques relatives aux trois méthodes d'assimilation de données sont globalement comparables.

Conclusion et perspectives

L'objectif de ce projet de recherche était d'améliorer les estimations fournies par les modèles de dispersion atmosphérique à l'échelle urbaine. Pour cela, nous avons étudié les approches de modélisation multi-échelles et d'assimilation de données. L'apport de ces deux approches a été analysé vis-à-vis de deux simulations de référence, effectuées avec le modèle urbain SIRANE, qui avaient pour but d'estimer les concentrations en PM_{10} et en NO_2 sur l'agglomération lyonnaise.

L'approche de modélisation multi-échelles consiste à modéliser la qualité de l'air en couplant plusieurs modèles à différentes échelles. Dans le cadre de cette thèse, nous avons couplé le modèle à méso-échelle CHIMERE et le modèle urbain SIRANE avec trois méthodes différentes. La première méthode, nommée *évaluation de la concentration de fond*, consiste à déterminer les conditions aux limites d'une simulation à l'échelle urbaine à partir d'une simulation à l'échelle régionale. La seconde méthode, proposée par Stocker *et al.* (2012), consiste à évaluer la contribution des polluants *jeunes* avec un modèle urbain et celle des polluants *anciens* avec un modèle à méso-échelle. Enfin, la dernière méthode, appelée *estimation de la variabilité spatiale des concentrations*, consiste à estimer les concentrations moyennes spatiales à l'échelle kilométrique avec un modèle à méso-échelle et à évaluer la variabilité spatiale des concentrations à l'échelle urbaine avec un modèle urbain. Ce travail de thèse montre que les méthodes de couplage appliquées permettent potentiellement d'estimer la qualité de l'air en milieu urbain de manière plus satisfaisante qu'un modèle à méso-échelle seul. Néanmoins, elles ne permettent pas forcément d'améliorer l'estimation des conditions aux limites d'un modèle urbain et les résultats fournis par celui-ci. Il convient de rappeler que la simulation à l'échelle régionale utilisée lors du couplage ne fournit pas de bons résultats sur le cas d'étude analysé. Aussi, il est a priori normal que les estimations avec les méthodes de couplage ne le soient pas non plus.

L'approche d'assimilation de données consiste à combiner, de manière statistique ou géométrique, des données modélisées et mesurées afin de déterminer la meilleure estimation possible de l'état d'un système. Jusqu'à présent, cette approche est couramment employée pour améliorer les estimations fournies par les modèles de qualité de l'air à méso-échelle mais elle l'est encore peu avec les modèles urbains. Au cours de ce travail de thèse, nous avons utilisé trois méthodes d'assimilation de données. La première est la méthode de débiaisement qui consiste à supprimer le biais des données modélisées vis-à-vis des valeurs mesurées. La deuxième, appelée *modulation de la contribution des sources* (MCS), consiste à corriger la contribution des sources afin de minimiser l'écart entre les données

modélisées et mesurées. La troisième et la dernière méthode est la méthode *Best Linear Unbiased Estimator* (BLUE) qui s'appuie sur une modélisation des erreurs, relatives aux observations et aux données modélisées, pour déterminer la meilleure estimation. Cette étude montre que ces méthodes d'assimilation de données permettent potentiellement d'améliorer les estimations fournies par les modèles de qualité de l'air à l'échelle urbaine. De même, elle indique que les résultats obtenus avec les trois méthodes d'assimilation de données sont du même ordre de grandeur.

Ce projet de recherche constitue une des premières études qui comparent l'apport de plusieurs méthodes de couplage d'échelles et d'assimilation de données pour améliorer l'estimation de la qualité de l'air à l'échelle urbaine. Bien que les méthodes d'assimilation de données permettent de réduire globalement les incertitudes des estimations fournies par les modèles urbains, cette étude indique que les écarts modèle-mesure à l'issue de l'assimilation de données restent parfois significatifs et supérieurs à l'incertitude des mesures pour les stations qui ne sont pas assimilées. Aussi, est-il nécessaire de continuer à travailler sur l'amélioration de la mise en œuvre des méthodes d'assimilation de données (par exemple la modélisation des matrices $\mathbf{B}$ et $\mathbf{R}$) et des modèles urbains (par exemple la modélisation des émissions, de la météorologie, des processus de transport et des phénomènes physico-chimiques).

Plusieurs perspectives à ce projet de recherche sont envisageables. Pour consolider les conclusions de ce travail de thèse, il serait pertinent d'évaluer les méthodes utilisées sur un autre site d'étude, avec d'autres modèles urbains de dispersion atmosphérique et pour d'autres polluants. Il semble notamment nécessaire d'appliquer de nouveau les méthodes de couplage dans un cas où le modèle à méso-échelle fournirait des estimations relativement satisfaisantes afin de confirmer les résultats. De plus, il serait intéressant d'utiliser des méthodes d'assimilation de données pour améliorer la simulation à l'échelle régionale avant d'appliquer les méthodes de couplage. De même, pour réduire la complexité du problème et réduire les incertitudes associées à la modélisation des réactions chimiques, il serait également pertinent d'étudier ces méthodes de couplage pour des espèces chimiquement inertes.

Pour réduire davantage les incertitudes des estimations à l'issue de l'assimilation de données, plusieurs pistes sont possibles. Ces dernières années, des micro-capteurs à bas coût, mais cependant moins précis que les capteurs actuellement déployés pour la surveillance de la qualité de l'air, ont été développés (Spinelle *et al.*, 2015 ; Boubrima *et al.*, 2016). Cette technologie permettrait potentiellement d'augmenter le nombre de capteurs des réseaux de mesure en milieu urbain et de réduire les distances entre les capteurs. Les analyses, effectuées aux cours de cette thèse, portant sur l'influence du nombre de capteurs utilisés lors de l'assimilation de données montrent que les résultats sont en moyenne plus satisfaisants en utilisant davantage de capteurs. De même, Denby *et al.* (2007) affirment que les méthodes d'assimilation de données conduisent à des résultats plus satisfaisants lorsque les distances qui séparent les capteurs sont inférieures à l'échelle spatiale qui caractérise la variabilité spatiale des concentrations. Aussi, l'utilisation d'un nombre important de capteurs est une piste à approfondir. Cette piste est actuellement étudiée par l'équipe AIR qui participe au projet UrPolSens (Labex Institut des Mondes Urbains) portant sur le déploiement de micro-capteurs en

zone urbaine. Les analyses montrent également qu'il existe a priori des combinaisons de capteurs plus pertinentes que d'autres à utiliser lors de l'assimilation de données en fonction de l'endroit où l'on souhaite estimer la concentration. Une analyse plus approfondie de ces combinaisons ainsi que l'étude du positionnement *optimal* des capteurs, avec une approche de *network design* (Fan et Jin, 2010 ; Fateh *et al.*, 2013), constituent une seconde piste de recherche. Une troisième piste à envisager est l'étude d'autres approches, telle que la méthode d'ensemble, pour modéliser les matrices **B** et **R** nécessaires à l'application de la méthode BLUE. Les incertitudes des simulations numériques peuvent notamment provenir d'une erreur de modélisation des données d'entrée. Aussi, l'utilisation de méthodes d'inversion pour corriger les données d'entrée telles que les émissions représente une quatrième piste à étudier (Elbern *et al.*, 2000 ; Laupsa *et al.*, 2009). Enfin, une cinquième piste à étudier est l'utilisation intensive de données avec des algorithmes de machine learning. Cette approche est notamment étudiée par IBM pour évaluer et prévoir la qualité de l'air en Chine (Xi *et al.*, 2015).

Annexe

Annexe A
Comparaison des critères de qualité

L'objectif de cette annexe est de comparer les critères de qualité que nous proposons pour le biais (Bias) et l'erreur type (RMSE) à ceux proposés par Hanna et Chang (2012) pour le biais fractionnel (FB) et l'erreur quadratique normalisée (NMSE). Ces indices statistiques et les critères de qualité associés sont définis dans le tableau A.1 où c_m et c_p correspondent respectivement aux concentrations mesurées et aux concentrations prédites par le modèle ($^{-}$ représente la moyenne sur l'ensemble des données utilisées). Les estimations d'un modèle sont considérées comme satisfaisantes lorsque les indices statistiques vérifient les critères de qualité.

	Bias	FB	RMSE	NMSE
Formulation	$\overline{c_m - c_p}$	$\frac{2\,(\overline{c_m} - \overline{c_p})}{\overline{c_m} + \overline{c_p}}$	$\sqrt{\overline{(c_m - c_p)^2}}$	$\frac{\overline{(c_m - c_p)^2}}{\overline{c_m}\,\overline{c_p}}$
Critère de qualité	$\lvert\text{Bias}\rvert \leq 0.33\,\overline{c_m}$	$\lvert\text{FB}\rvert \leq 0.67$	$\text{RMSE} \leq \overline{c_m}$	$\text{NMSE} \leq 6$

Table A.1 – Formulation du biais (Bias), du biais fractionnel (FB), de l'erreur type (RMSE) et de l'erreur quadratique normalisée et les critères de qualité associés

Biais (Bias) et bias fractionnel (FB)

Supposons que la moyenne des concentrations mesurées, $\overline{c_m}$, est du même ordre de grandeur que la moyenne des concentrations prédites par un modèle, $\overline{c_p}$ (équation A.1).

$$\overline{c_m} \simeq \overline{c_p} \tag{A.1}$$

En considérant cette hypothèse, le biais fractionnel peut s'exprimer approximativement sous la forme de l'expression A.2.

$$\text{FB} \simeq \frac{(\overline{c_m} - \overline{c_p})}{\overline{c_m}} \tag{A.2}$$

A partir de l'expression A.2, il est possible d'exprimer le critère de qualité proposé par Hanna et Chang (2012) pour le biais fractionnel en un critère de qualité pour le biais (équation A.3)

$$|\mathrm{FB}| \leq 0.67 \Leftrightarrow |\overline{c_m - c_p}| \leq 0.67\,\overline{c_m} \tag{A.3}$$

Cette autre formulation du critère de qualité associé au biais fractionnel montre que le critère de qualité que nous proposons pour le biais, $|\mathrm{Bias}| \leq 0.33\,\overline{c_m}$, est deux fois plus sévère que celui proposé par Hanna et Chang (2012) pour le biais fractionnel, $|\mathrm{FB}| \leq 0.67$, lorsque $\overline{c_m}$ et $\overline{c_p}$ sont du même ordre de grandeur. Le critère de qualité que nous proposons pour le biais (Bias) signifie que le biais doit être inférieur à 33 % de la concentration moyenne mesurée.

Erreur type (RMSE) et erreur quadratique normalisée (NMSE)

En supposant également que $\overline{c_m}$ et $\overline{c_p}$ sont comparables (équation A.1), l'erreur quadratique normalisée peut approximativement être définie avec l'expression A.4.

$$\mathrm{NMSE} \simeq \frac{\overline{(c_m - c_p)^2}}{\overline{c_m}^2} \tag{A.4}$$

En considérant l'expression A.4, il est possible de reformuler le critère de qualité proposé par Hanna et Chang (2012) pour l'erreur quadratique normalisée en un critère de qualité pour l'erreur type (équation A.5).

$$\mathrm{NMSE} \leq 6 \Leftrightarrow \sqrt{\overline{(c_m - c_p)^2}} \leq \sqrt{6}\,\overline{c_m} \quad \text{avec} \quad \sqrt{6} \simeq 2.45 \tag{A.5}$$

Cette autre formulation du critère de qualité associé à l'erreur quadratique normalisée indique que le critère de qualité que nous proposons pour l'erreur type, $|\mathrm{RMSE}| \leq \overline{c_m}$, est plus sévère que celui proposé par Hanna et Chang (2012) pour l'erreur quadratique normalisée, $|\mathrm{NMSE}| \leq 6$, dans le cas où $\overline{c_m}$ et $\overline{c_p}$ sont comparables. Lorsque la distribution des écarts modèle-mesure est gaussienne avec une moyenne nulle, le critère de qualité que nous proposons pour l'erreur type (RMSE) signifie que 68.20 % de ces écarts doivent être inférieurs à 100 % de la concentration moyenne mesurée.

Conclusion

Lorsque $\overline{c_m}$ et $\overline{c_p}$ sont comparables, les critères de qualité que nous proposons pour le biais (Bias) et l'erreur type (RMSE) sont plus sévères que ceux proposées par Hanna et Chang (2012) pour le biais fractionnel (FB) et l'erreur quadratique normalisée (NMSE). Le choix de ces critères plus restrictifs s'explique par le fait que nos jugeons ceux proposés par Hanna et Chang (2012) trop permissifs.

Bibliographie

Abhijith, K., Gokhale, S., 2015. Passive control potentials of trees and on-street parked cars in reduction of air pollution exposure in urban street canyons. Environmental Pollution 204, 99–108.

Aïchi, L., 2015. Rapport n° 610 sur le coût économique et financier de la pollution de l'air. Technical Report. Sénat.

Adetona, O., Reinhardt, T.E., Domitrovich, J., Broyles, G., Adetona, A.M., Kleinman, M.T., Ottmar, R.D., Naeher, L.P., 2016. Review of the health effects of wildland fire smoke on wildland firefighters and the public. Inhalation Toxicology 28, 95–139.

Alapaty, K., Mathur, R., Odman, T., 1998. Intercomparison of Spatial Interpolation Schemes for Use in Nested Grid Models. Monthly Weather Review 126, 243–249.

Alfaro, S.C., Gomes, L., 2001. Modeling mineral aerosol production by wind erosion : Emission intensities and aerosol size distributions in source areas. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 106, 18075–18084.

Alier, M., Felipe, M., Hernández, I., Tauler, R., 2011. Trilinearity and component interaction constraints in the multivariate curve resolution investigation of no and o3 pollution in barcelona. Analytical and bioanalytical chemistry 399, 2015–2029.

Alier, M., Felipe-Sotelo, M., Hernàndez, I., Tauler, R., 2009. Variation patterns of nitric oxide in catalonia during the period from 2001 to 2006 using multivariate data analysis methods. Analytica chimica acta 642, 77–88.

Allen, M.R., Frame, D.J., Huntingford, C., Jones, C.D., Lowe, J.A., Meinshausen, M., Meinshausen, N., 2009. Warming caused by cumulative carbon emissions towards the trillionth tonne. Nature 458, 1163–1166.

Almeida, S.M., Pio, C.A., Freitas, M.C., Reis, M.A., Trancoso, M.A., 2006. Approaching PM2.5 and PM2.5- 10 source apportionment by mass balance analysis, principal component analysis and particle size distribution. Science of The Total Environment 368, 663–674.

Amann, M., Klimont, Z., Wagner, F., 2013. Regional and Global Emissions of Air Pollutants : Recent Trends and Future Scenarios. Annual Review of Environment and Resources 38, 31–55.

Amer, N.H., Abbas, A.A., 2015. Combined Influence of Stack Height and Exit Velocity on Dispersion of Pollutants Caused by Helwan Cement Factory (Study using AERMOD Model). International Journal of Computer Applications 121.

Andreae, M.O., Gelencsér, A., 2006. Black carbon or brown carbon ? The nature of light-absorbing carbonaceous aerosols. Atmos. Chem. Phys. 6, 3131–3148.

Anisimov, O., 2007. Potential feedback of thawing permafrost to the global climate system through methane emission. Environmental Research Letters 2, 045016.

Aouba, A., Eb, M., Rey, G., Pavillon, G., Jougla, É., 2011. Données sur la mortalité en france : principales causes de décès en 2008 et évolutions depuis 2000. Transport 1, Y85.

Atkins, D.H.F., Lee, D.S., 1995. Spatial and temporal variation of rural nitrogen dioxide concentrations across the United Kingdom. Atmospheric Environment 29, 223–239.

Balis, D., Giannakaki, E., Amiridis, V., Mamouri, R., Kokkalis, P., Tsaknakis, G., Papayannis, A., 2013. Forest fire aerosols : Vertically resolved optical and microphysical properties and mass concentration from lidar observations, in : Advances in Meteorology, Climatology and Atmospheric Physics. Springer, pp. 905–910.

Bannister, R.N., 2008. A review of forecast error covariance statistics in atmospheric variational data assimilation. I : Characteristics and measurements of forecast error covariances. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society 134, 1951–1970.

Batchvarova, E., Gryning, S.E., 1991. Applied model for the growth of the daytime mixed layer. Boundary-Layer Meteorology 56, 261–274.

Bates, T.S., Lamb, B.K., Guenther, A., Dignon, J., Stoiber, R.E., 2004. Sulfur emissions to the atmosphere from natural sourees. Journal of Atmospheric Chemistry 14, 315–337.

Beckett, K.P., Freer-Smith, P.H., Taylor, G., 2000. Particulate pollution capture by urban trees : effect of species and windspeed. Global Change Biology 6, 995–1003.

Beelen, R., Hoek, G., van den Brandt, P.A., Goldbohm, R.A., Fischer, P., Schouten, L.J., Armstrong, B., Brunekreef, B., 2008. Long-Term Exposure to Traffic-Related Air Pollution and Lung Cancer Risk :. Epidemiology 19, 702–710.

Beevers, S.D., Kitwiroon, N., Williams, M.L., Carslaw, D.C., 2012. One way coupling of CMAQ and a road source dispersion model for fine scale air pollution predictions. Atmospheric Environment 59, 47–58.

Belcher, S.E., 2005. Mixing and transport in urban areas. Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences 363, 2947–2968.

Bellander, T., Berglind, N., Gustavsson, P., Jonson, T., Nyberg, F., Pershagen, G., Järup, L., 2001. Using geographic information systems to assess individual historical exposure to air pollution from traffic and house heating in Stockholm. Environmental Health Perspectives 109, 633–639.

Bennett, A.F., Chua, B.S., Harrison, D.E., McPhaden, M.J., 1998. Generalized inversion of tropical atmosphere–ocean data and a coupled model of the tropical pacific. Journal of Climate 11, 1768–1792.

Benson, P.E., 1992a. A review of the development and application of the CALINE3 and 4 models. Atmospheric Environment. Part B. Urban Atmosphere 26, 379–390.

Benson, P.E., 1992b. A review of the development and application of the caline3 and 4 models. Atmospheric Environment. Part B. Urban Atmosphere 26, 379–390.

Berger, M.J., Oliger, J., 1984. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. Journal of Computational Physics 53, 484–512.

Berkowicz, R., 2000a. OSPM — A Parameterised Street Pollution Model, in : Sokhi, R.S., José, R.S., Moussiopoulos, N., Berkowicz, R. (Eds.), Urban Air Quality : Measurement, Modelling and Management. Springer Netherlands, pp. 323–331.

Berkowicz, R., 2000b. A simple model for urban background pollution, in : Urban Air Quality : Measurement, Modelling and Management. Springer, pp. 259–267.

Bernstein, J.A., Alexis, N., Barnes, C., Bernstein, I.L., Nel, A., Peden, D., Diaz-Sanchez, D., Tarlo, S.M., Williams, P.B., Bernstein, J.A., 2004. Health effects of air pollution. Journal of Allergy and Clinical Immunology 114, 1116–1123.

Bessagnet, B., Hodzic, A., Vautard, R., Beekmann, M., Cheinet, S., Honoré, C., Liousse, C., Rouil, L., 2004. Aerosol modeling with CHIMERE—preliminary evaluation at the continental scale. Atmospheric Environment 38, 2803–2817.

Bey, I., Jacob, D.J., Yantosca, R.M., Logan, J.A., Field, B.D., Fiore, A.M., Li, Q., Liu, H.Y., Mickley, L.J., Schultz, M.G., 2001. Global modeling of tropospheric chemistry with assimilated meteorology : Model description and evaluation. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 106, 23073–23095.

Bicheron, P., Amberg, V., Bourg, L., Petit, D., Huc, M., Miras, B., Brockmann, C., Hagolle, O., Delwart, S., Ranera, F., others, 2011. Geolocation assessment of MERIS GlobCover orthorectified products. IEEE Transactions on geoscience and remote sensing 49, 2972–2982.

Biemmi, S., Gaveglio, R., Salizzoni, P., Boffadossi, M., Casadei, S., Bedogni, M., Garbero, V., Soulhac, L., 2010. Estimate of boundary layer parameters and background concentrations for pollutant dispersion modeling in urban areas, in : 31st NATO/SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Application.

Biljecki, F., Ledoux, H., Stoter, J., 2016. An improved LOD specification for 3d building models. Computers, Environment and Urban Systems 59, 25–37.

Blond, N., Bel, L., Vautard, R., 2003. Three-dimensional ozone data analysis with an air quality model over the Paris area. Journal of Geophysical Research D : Atmospheres 108, ACH 10–1 – ACH 10–17.

Blond, N., Vautard, R., 2004. Three-dimensional ozone analyses and their use for short-term ozone forecasts. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 109.

Bocquet, M., 2012. Parameter-field estimation for atmospheric dispersion : application to the Chernobyl accident using 4d-Var. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society 138, 664–681.

Bond, T.C., Doherty, S.J., Fahey, D.W., Forster, P.M., Berntsen, T., DeAngelo, B.J., Flanner, M.G., Ghan, S., Kärcher, B., Koch, D., Kinne, S., Kondo, Y., Quinn, P.K., Sarofim, M.C., Schultz, M.G., Schulz, M., Venkataraman, C., Zhang, H., Zhang, S., Bellouin, N., Guttikunda, S.K., Hopke, P.K., Jacobson, M.Z., Kaiser, J.W., Klimont, Z., Lohmann, U., Schwarz, J.P., Shindell, D., Storelvmo, T., Warren, S.G., Zender, C.S., 2013. Bounding the role of black carbon in the climate system : A scientific assessment. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 118, 5380–5552.

Bornman, J.F., Barnes, P.W., Robinson, S.A., Ballaré, C.L., Flint, S.D., Caldwell, M.M., 2015. Solar ultraviolet radiation and ozone depletion-driven climate change : effects on terrestrial ecosystems. Photochem. Photobiol. Sci. 14, 88–107.

Borrego, C., Monteiro, A., Pay, M.T., Ribeiro, I., Miranda, A.I., Basart, S., Baldasano, J.M., 2011. How bias-correction can improve air quality forecasts over Portugal. Atmospheric Environment 45, 6629–6641.

Borrego, C., Tchepel, O., Costa, A.M., Martins, H., Ferreira, J., Miranda, A.I., 2006. Traffic-related particulate air pollution exposure in urban areas. Atmospheric Environment 40, 7205–7214.

Bott, A., 1989. A Positive Definite Advection Scheme Obtained by Nonlinear Renormalization of the Advective Fluxes. Monthly Weather Review 117, 1006–1016.

Boubrima, A., Bechkit, W., Rivano, H., Ruas, A., 2016. Wireless sensor networks deployment for air pollution monitoring, in : 21st International Transport and Air Pollution Conference.

Bousserez, N., Attié, J.L., Peuch, V.H., Michou, M., Pfister, G., Edwards, D., Emmons, L., Mari, C., Barret, B., Arnold, S.R., Heckel, A., Richter, A., Schlager, H., Lewis, A., Avery, M., Sachse, G.,

Browell, E.V., Hair, J.W., 2007. Evaluation of the MOCAGE chemistry transport model during the ICARTT/ITOP experiment. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 112, D10S42.

Bouttier, F., Courtier, P., 2002. Data assimilation concepts and methods March 1999. Meteorological training course lecture series. ECMWF .

Brandt, J., Christensen, J.H., Frohn, L.M., Berkowicz, R., 2001. Operational air pollution forecasts from regional scale to urban street scale. Part 1 : system description. Physics and Chemistry of the Earth, Part B : Hydrology, Oceans and Atmosphere 26, 781–786.

Brandt, J., Christensen, J.H., Frohn, L.M., Berkowicz, R., 2003. Air pollution forecasting from regional to urban street scale—implementation and validation for two cities in Denmark. Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C 28, 335–344.

Brasseur, G.P., Hauglustaine, D.A., Walters, S., Rasch, P.J., Müller, J.F., Granier, C., Tie, X.X., 1998. MOZART, a global chemical transport model for ozone and related chemical tracers : 1. Model description. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 103, 28265–28289.

Briggs, G.A., 1984. Plume rise and buoyancy effects. Atmospheric Science and Power Production , 327–366.

Brimblecombe, P., Grossi, C.M., 2007. Damage to buildings from future climate and pollution. APT bulletin 38, 13–18.

Britter, R.E., Hanna, S.R., 2003. Flow and Dispersion in Urban Areas. Annual Review of Fluid Mechanics 35, 469–496.

Brook, R.D., Brook, J.R., Urch, B., Vincent, R., Rajagopalan, S., Silverman, F., 2002. Inhalation of Fine Particulate Air Pollution and Ozone Causes Acute Arterial Vasoconstriction in Healthy Adults. Circulation 105, 1534–1536.

Broquereau, L., 1999. Davisum, un outil de modélisation multimodale des transports. REVUE GENERALE DES ROUTES (RGRA) .

Brown, M.J., Gowardhan, A., Nelson, M., Williams, M., Pardyjak, E.R., 2009. Evaluation of the quic wind and dispersion models using the joint urban 2003 field experiment dataset, in : AMS 8th Symp. Urban Env.

Brown, M.J., Gowardhan, A.A., Nelson, M.A., Williams, M.D., Pardyjak, E.R., 2013. QUIC transport and dispersion modelling of two releases from the Joint Urban 2003 field experiment. International Journal of Environment and Pollution 52, 263–287.

Brunekreef, B., Holgate, S.T., 2002. Air pollution and health. The Lancet 360, 1233–1242.

Buccolieri, R., Gromke, C., Di Sabatino, S., Ruck, B., 2009. Aerodynamic effects of trees on pollutant concentration in street canyons. Science of the Total Environment 407, 5247–5256.

Buccolieri, R., Salim, S.M., Leo, L.S., Di Sabatino, S., Chan, A., Ielpo, P., de Gennaro, G., Gromke, C., 2011. Analysis of local scale tree–atmosphere interaction on pollutant concentration in idealized street canyons and application to a real urban junction. Atmospheric Environment 45, 1702–1713.

Buehner, M., Houtekamer, P., Charette, C., Mitchell, H.L., He, B., 2010. Intercomparison of variational data assimilation and the ensemble kalman filter for global deterministic nwp. part ii : One-month experiments with real observations. Monthly Weather Review 138, 1567–1586.

Burgers, G., Jan van Leeuwen, P., Evensen, G., 1998. Analysis Scheme in the Ensemble Kalman Filter. Monthly Weather Review 126, 1719–1724.

Burke, J., Hoyer, M., Keeler, G., Scherbatskoy, T., 1995. Wet Deposition of Mercury and Ambient Mercury Concentrations at a Site in the Lake Champlain Basin, in : Porcella, D.B., Huckabee, J.W., Wheatley, B. (Eds.), Mercury as a Global Pollutant. Springer Netherlands, pp. 353–362.

Businger, J.A., Wyngaard, J.C., Izumi, Y., Bradley, E.F., 1971. Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer. Journal of the atmospheric Sciences 28, 181–189.

Butler, T.M., Lawrence, M.G., Taraborrelli, D., Lelieveld, J., 2011. Multi-day ozone production potential of volatile organic compounds calculated with a tagging approach. Atmospheric Environment 45, 4082–4090.

Byun, D., Schere, K.L., 2006. Review of the Governing Equations, Computational Algorithms, and Other Components of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. Applied Mechanics Reviews 59, 51–77.

Byun, D.W., Ching, J., *et al.*, 1999. Science algorithms of the EPA Models-3 community multiscale air quality (CMAQ) modeling system. US Environmental Protection Agency, Office of Research and Development Washington, DC.

Candiani, G., Carnevale, C., Finzi, G., Pisoni, E., Volta, M., 2013. A comparison of reanalysis techniques : Applying optimal interpolation and Ensemble Kalman Filtering to improve air quality monitoring at mesoscale. Science of The Total Environment 458–460, 7–14.

Candiani, G., Carnevale, C., Pisoni, E., Volta, M., 2010. Assimilation of Chemical Ground Measurements in Air Quality Modeling, in : Lirkov, I., Margenov, S., Waśniewski, J. (Eds.), Large-Scale Scientific Computing. Springer Berlin Heidelberg, pp. 157–164.

Carissimo, B., Dupont, E., Musson-Genon, L., Marchand, O., 1997. Note de principe du code mercure. EDF R&D technical Note N : HE-33/97 A 2.

Carnevale, C., Finzi, G., Pederzoli, A., Pisoni, E., Thunis, P., Turrini, E., Volta, M., 2015. A methodology for the evaluation of re-analyzed PM10 concentration fields : a case study over the PO Valley. Air Quality, Atmosphere & Health 8, 533–544.

Carpentieri, M., Salizzoni, P., Robins, A., Soulhac, L., 2012. Evaluation of a neighbourhood scale, street network dispersion model through comparison with wind tunnel data. Environmental Modelling & Software 37, 110–124.

Carruthers, D., Edmunds, H., Lester, A., McHugh, C., Singles, R., 2000. Use and validation of adms-urban in contrasting urban and industrial locations. International Journal of Environment and Pollution 14, 364–374.

Carruthers, D.J., Edmunds, H.A., McHugh, C.A., Singles, R.J., 1998. Development of Adms-Urban and Comparison with Data for Urban Areas in the UK, in : Air Pollution Modeling and Its Application XII. Springer, pp. 467–475.

Carruthers, D.J., Holroyd, R.J., Hunt, J.C.R., Weng, W.S., Robins, A.G., Apsley, D.D., Thompson, D.J., Smith, F.B., 1994. UK-ADMS : A new approach to modelling dispersion in the earth's atmospheric boundary layer. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics 52, 139–153.

Carter, W.P., 2010. Development of the SAPRC-07 chemical mechanism. Atmospheric Environment 44, 5324–5335.

Casado, L.S., Rouhani, S., Cardelino, C.A., Ferrier, A.J., 1994. Geostatistical analysis and visualization of hourly ozone data. Atmospheric Environment 28, 2105–2118.

Castagnetti, F., Salizzoni, P., Garbero, V., Genon, G., Soulhac, L., 2008. Atmosferic pollution modelling in urban areas at local scale : An exemple of the application to a neightborhood in turin [la modellizzazione dell'inquinamento atmosferico in aree urbane su scala locale : un esempio di applicazione in un quartiere di torino]. Geoingegneria Ambientale e Mineraria 124, 63–76.

CCFA, 2015. L'industrie automobile française : Analyse et statistiques 2015. Technical Report. Comité des Constructeurs Français d'Automobiles.

CERC, 2000. Adms-3 technical specification .

CERC, 2001. ADMS-Urban User Guide .

CERC, 2006. Amds-roads an air quality management system user guide .

CERC, 2010. Adms-urban user guide, version 3.0. .

CGDD, 2015. Bilan de la qualité de l'air en France en 2014. Technical Report. Commissariat Général au Développement Durable.

Chafe, Z.A., Brauer, M., Klimont, Z., Van Dingenen, R., Mehta, S., Rao, S., Riahi, K., Dentener, F., Smith, K.R., 2014. Household Cooking with Solid Fuels Contributes to Ambient PM2.5 Air Pollution and the Burden of Disease. Environmental Health Perspectives .

Chai, T., Carmichael, G.R., Tang, Y., Sandu, A., Hardesty, M., Pilewskie, P., Whitlow, S., Browell, E.V., Avery, M.A., Nédélec, P., Merrill, J.T., Thompson, A.M., Williams, E., 2007. Four-dimensional data assimilation experiments with International Consortium for Atmospheric Research on Transport and Transformation ozone measurements. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 112, D12S15.

Chakrabarty, R.K., Gyawali, M., Yatavelli, R.L.N., Pandey, A., Watts, A.C., Knue, J., Chen, L.W.A., Pattison, R.R., Tsibart, A., Samburova, V., Moosmüller, H., 2016. Brown carbon aerosols from burning of boreal peatlands : microphysical properties, emission factors, and implications for direct radiative forcing. Atmos. Chem. Phys. 16, 3033–3040.

Chan, C.C., Ozkaynak, H., Spengler, J.D., Sheldon, L., 1991. Driver exposure to volatile organic compounds, carbon monoxide, ozone and nitrogen dioxide under different driving conditions. Environmental Science & Technology 25, 964–972.

Chan, S.T., Leach, M.J., 2007. A Validation of FEM3mp with Joint Urban 2003 Data. Journal of Applied Meteorology and Climatology 46, 2127–2146.

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

Chang, J.C., Hanna, S.R., Boybeyi, Z., Franzese, P., 2005. Use of Salt Lake City URBAN 2000 Field Data to Evaluate the Urban Hazard Prediction Assessment Capability (HPAC) Dispersion Model. Journal of Applied Meteorology 44, 485–501.

Chauvet, C., Leitl, B., Schatzmann, M., 2001. High resolution flow measurements in an idealised urban street canyon, in : This Conference.

Chen, Y., Bond, T.C., 2010. Light absorption by organic carbon from wood combustion. Atmos. Chem. Phys. 10, 1773–1787.

Chen, Z.H., Cheng, S.Y., Li, J.B., Guo, X.R., Wang, W.H., Chen, D.S., 2008. Relationship between atmospheric pollution processes and synoptic pressure patterns in northern China. Atmospheric Environment 42, 6078–6087.

Cheng, S., 2003. Heavy metal pollution in China : origin, pattern and control. Environmental Science and Pollution Research 10, 192–198.

Chin, M., Ginoux, P., Kinne, S., Torres, O., Holben, B.N., Duncan, B.N., Martin, R.V., Logan, J.A., Higurashi, A., Nakajima, T., 2002. Tropospheric Aerosol Optical Thickness from the GOCART Model and Comparisons with Satellite and Sun Photometer Measurements. Journal of the Atmospheric Sciences 59, 461–483.

Chin, M., Rood, R.B., Lin, S.J., Müller, J.F., Thompson, A.M., 2000. Atmospheric sulfur cycle simulated in the global model GOCART : Model description and global properties. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 105, 24671–24687.

Cho, S., Morris, R., McEachern, P., Shah, T., Johnson, J., Nopmongcol, U., 2012. Emission sources sensitivity study for ground-level ozone and PM2.5 due to oil sands development using air quality modelling system : Part II – Source apportionment modelling. Atmospheric Environment 55, 542–556.

Chowdhury, Z., Campanella, L., Gray, C., Al Masud, A., Marter-Kenyon, J., Pennise, D., Charron, D., Zuzhang, X., 2013. Measurement and modeling of indoor air pollution in rural households with multiple stove interventions in Yunnan, China. Atmospheric Environment 67, 161–169.

Cierco, F.X., Soulhac, L., Méjean, P., Lamaison, G., Salizzoni, P., Armand, P., 2010. SIRANE-RISK : an operational dispersion model for urban areas incorporating a new method to account for concentration fluctuations, in : 13th International Conference on Harmonisation Within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Paris, France, 1e4 June.

Cimorelli, A.J., Perry, S.G., Venkatram, A., Weil, J.C., Paine, R., Wilson, R.B., Lee, R.F., Peters, W.D., Brode, R.W., 2005. AERMOD : A Dispersion Model for Industrial Source Applications. Part I : General Model Formulation and Boundary Layer Characterization. Journal of Applied Meteorology 44, 682–693.

CITEPA, 2015. Rapport national d'inventaire-Format SECTEN, avril 2015. Technical Report. Centre Interprofessionnel Technique d'Etudes de la Pollution Atmosphérique.

Clark, T.L., Farley, R.D., 1984. Severe Downslope Windstorm Calculations in Two and Three Spatial Dimensions Using Anelastic Interactive Grid Nesting : A Possible Mechanism for Gustiness. Journal of the Atmospheric Sciences 41, 329–350.

Colella, P., Woodward, P.R., 1984. The piecewise parabolic method (ppm) for gas-dynamical simulations. Journal of computational physics 54, 174–201.

Coman, A., Foret, G., Beekmann, M., Eremenko, M., Dufour, G., Gaubert, B., Ung, A., Schmechtig, C., Flaud, J.M., Bergametti, G., 2012. Assimilation of IASI partial tropospheric columns with an Ensemble Kalman Filter over Europe. Atmos. Chem. Phys. 12, 2513–2532.

Constantinescu, E.M., Sandu, A., Carmichael, G.R., 2008. Modeling atmospheric chemistry and transport with dynamic adaptive resolution. Computational Geosciences 12, 133–151.

Counillon, F., Bertino, L., 2009. Ensemble Optimal Interpolation : multivariate properties in the Gulf of Mexico. Tellus. Series A, Dynamic meteorology and oceanography 61, 296–308.

Counillon, F., Sakov, P., Bertino, L., 2009. Application of a hybrid EnKF-OI to ocean forecasting. Ocean Sci. 5, 389–401.

Courant, R., Isaacson, E., Rees, M., 1952. On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences. Communications on Pure and Applied Mathematics 5, 243–255.

Courtier, P., Andersson, E., Heckley, W., Vasiljevic, D., Hamrud, M., Hollingsworth, A., Rabier, F., Fisher, M., Pailleux, J., 1998. The ecmwf implementation of three-dimensional variational assimilation (3d-var). i : Formulation. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society 124, 1783–1807.

Cressie, N.A.C., 1993. Statistics for spatial data. J. Wiley.

Crilley, L.R., Bloss, W.J., Yin, J., Beddows, D.C.S., Harrison, R.M., Allan, J.D., Young, D.E., Flynn, M., Williams, P., Zotter, P., Prevot, A.S.H., Heal, M.R., Barlow, J.F., Halios, C.H., Lee, J.D., Szidat, S., Mohr, C., 2015. Sources and contributions of wood smoke during winter in London : assessing local and regional influences. Atmos. Chem. Phys. 15, 3149–3171.

Crutzen, P.J., Arnold, F., 1986. Nitric acid cloud formation in the cold Antarctic stratosphere : a major cause for the springtime 'ozone hole'. Nature 324, 651–655.

Dabberdt, W., Hoydysh, W., Schorling, M., Yang, F., Holynskyj, O., 1995. Dispersion modeling at urban intersections. Science of the total environment 169, 93–102.

Dabberdt, W.F., Hoydysh, W.G., 1991. Street canyon dispersion : Sensitivity to block shape and entrainment. Atmospheric Environment. Part A. General Topics 25, 1143–1153.

Daget, N., 2007. Revue des méthodes d'assimilation .

Daley, R., 1993. Atmospheric data analysis. 2, Cambridge university press.

Dallmann, T.R., Onasch, T.B., Kirchstetter, T.W., Worton, D.R., Fortner, E.C., Herndon, S.C., Wood, E.C., Franklin, J.P., Worsnop, D.R., Goldstein, A.H., Harley, R.A., 2014. Characterization of particulate matter emissions from on-road gasoline and diesel vehicles using a soot particle aerosol mass spectrometer. Atmos. Chem. Phys. 14, 7585–7599.

Davidson, M., Snyder, W., Lawson, R., Hunt, J., 1996. Wind tunnel simulations of plume dispersion through groups of obstacles. Atmospheric Environment 30, 3715–3731.

De Brouwere, K., Buekers, J., Cornelis, C., Schlekat, C.E., Oller, A.R., 2012. Assessment of indirect human exposure to environmental sources of nickel : Oral exposure and risk characterization for systemic effects. Science of The Total Environment 419, 25–36.

De Ridder, K., Kumar, U., Lauwaet, D., Blyth, L., Lefebvre, W., 2012. Kalman filter-based air quality forecast adjustment. Atmospheric Environment 50, 381–384.

Debreu, L., Blayo, E., 2008. Two-way embedding algorithms : a review. Ocean Dynamics 58, 415–428.

Delle Monache, L., Deng, X., Zhou, Y., Stull, R., 2006. Ozone ensemble forecasts : 1. A new ensemble design. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 111, D05307.

Delle Monache, L., Wilczak, J., Mckeen, S., Grell, G., Pagowski, M., Peckham, S., Stull, R., Mchenry, J., Mcqueen, J., 2008. A Kalman-filter bias correction method applied to deterministic, ensemble averaged and probabilistic forecasts of surface ozone. Tellus B 60, 238–249.

Denby, B., Horálek, J., Walker, S.E., Eben, K., Fiala, J., 2005. Interpolation and assimilation methods for European scale air quality assessment and mapping. Part I : Review and Recommendations. European Topic Centre on Air and Climate Change Technical Paper 7.

Denby, B., Pochman, M., Macou, J., Dudek, A., van den Elshout, S., 2007. Basic data assimilation : application to the urban scale. Technical Report 6th Framework Programme : Deliverable D7.1.6. Air4EU.

Denby, B., Schaap, M., Segers, A., Builtjes, P., Horálek, J., 2008. Comparison of two data assimilation methods for assessing PM10 exceedances on the European scale. Atmospheric Environment 42, 7122–7134.

Denby, B., Spang, W., 2010. The combined use of models and monitoring for applications related to the european air quality directive : A working sub-group of fairmode, in : Proc. of 13th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Paris, France, pp. 1–4.

DePaul, F.T., Sheih, C.M., 1985. A tracer study of dispersion in an urban street canyon. Atmospheric Environment (1967) 19, 555–559.

Derber, J.C., 1989. A variational continuous assimilation technique. Monthly weather review 117, 2437–2446.

Derognat, C., Beekmann, M., Baeumle, M., Martin, D., Schmidt, H., 2003. Effect of biogenic volatile organic compound emissions on tropospheric chemistry during the Atmospheric Pollution Over the Paris Area (ESQUIF) campaign in the Ile-de-France region. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 108.

Derwent, R.G., Jenkin, M.E., Saunders, S.M., Pilling, M.J., Simmonds, P.G., Passant, N.R., Dollard, G.J., Dumitrean, P., Kent, A., 2003. Photochemical ozone formation in north west Europe and its control. Atmospheric Environment 37, 1983–1991.

Di Sabatino, S., Kastner-Klein, P., Berkowicz, R., Britter, R., Fedorovich, E., 2003. The modelling of turbulence from traffic in urban dispersion models—part i : theoretical considerations. Environmental Fluid Mechanics 3, 129–143.

Dietachmayer, G.S., Droegemeier, K.K., 1992. Application of Continuous Dynamic Grid Adaption Techniques to Meteorological Modeling. Part I : Basic Formulation and Accuracy. Monthly Weather Review 120, 1675–1706.

Dobre, A., Arnold, S.J., Smalley, R.J., Boddy, J.W.D., Barlow, J.F., Tomlin, A.S., Belcher, S.E., 2005. Flow field measurements in the proximity of an urban intersection in London, UK. Atmospheric Environment 39, 4647–4657.

Doney, S.C., Mahowald, N., Lima, I., Feely, R.A., Mackenzie, F.T., Lamarque, J.F., Rasch, P.J., 2007. Impact of anthropogenic atmospheric nitrogen and sulfur deposition on ocean acidification and the inorganic carbon system. Proceedings of the National Academy of Sciences 104, 14580–14585.

Draxler, R.R., Hess, G.D., 1997. Description of the HYSPLIT4 modeling system .

Duchenne, C., Armand, P., Oldrini, O., Olry, C., Moussafir, J., 2011. Application of pmss, the parallel version of mss, to the micrometeorological flow field and deleterious dispersion inside an extended simulation domain covering the whole paris area, in : 14th International conference on harmonisation within atmospheric dispersion modelling fir regulatory purposes, Harmo.

Dufour, A., Amodei, M., Ancellet, G., Peuch, V.H., 2005. Observed and modelled "chemical weather" during ESCOMPTE. Atmospheric Research 74, 161–189.

Duvall, R.M., Norris, G.A., Burke, J.M., Olson, D.A., Vedantham, R., Williams, R., 2012. Determining spatial variability in PM2.5 source impacts across Detroit, MI. Atmospheric Environment 47, 491–498.

Dědelě, A., Miškinytė, A., 2015. The statistical evaluation and comparison of adms-urban model for the prediction of nitrogen dioxide with air quality monitoring network. Environmental Monitoring and Assessment 187.

Dyer, A., 1974. A review of flux-profile relationships. Boundary-Layer Meteorology 7, 363–372.

Eben, K., Juruş, P., Resler, J., Belda, M., Pelikán, E., Krüger, B.C., Keder, J., 2005. An ensemble Kalman filter for short-term forecasting of tropospheric ozone concentrations. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society 131, 3313–3322.

EEA, 2013. Réduire les 45 milliards d'euros de coûts sanitaires générés par la pollution atmosphérique causée par les camions European Environment Agency.

EEA, 2014. Cost of air pollution from European industrial facilities 2008-2012. Technical Report. European Environmental Agency.

EEA, 2015. Air quality in Europe- 2015 report. Technical Report. European Environmental Agency.

EEA, 2016. European Union emission inventory report 1990-2014 under the UNECE Convention on Long-range Transboundary Air Pollution (LRTAP). Technical Report. European Environmental Agency.

Elbern, H., Schmidt, H., 1999. A four-dimensional variational chemistry data assimilation scheme for Eulerian chemistry transport modeling. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 104, 18583–18598.

Elbern, H., Schmidt, H., 2001. Ozone episode analysis by four-dimensional variational chemistry data assimilation. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 106, 3569–3590.

Elbern, H., Schmidt, H., Ebel, A., 1997. Variational data assimilation for tropospheric chemistry modeling. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 102, 15967–15985.

Elbern, H., Schmidt, H., Talagrand, O., Ebel, A., 2000. 4d-variational data assimilation with an adjoint air quality model for emission analysis. Environmental Modelling & Software 15, 539–548.

Elminir, H.K., 2005. Dependence of urban air pollutants on meteorology. Science of The Total Environment 350, 225–237.

Elsberry, R.L., Ley, G.W., 1976. On the Strategy of Initializing Nested Grid Meshes in Numerical Weather Prediction. Monthly Weather Review 104, 797–799.

Emmons, L.K., Hess, P.G., Lamarque, J.F., Pfister, G.G., 2012. Tagged ozone mechanism for MOZART-4, CAM-chem and other chemical transport models. Geosci. Model Dev. 5, 1531–1542.

Emmons, L.K., Walters, S., Hess, P.G., Lamarque, J.F., Pfister, G.G., Fillmore, D., Granier, C., Guenther, A., Kinnison, D., Laepple, T., Orlando, J., Tie, X., Tyndall, G., Wiedinmyer, C., Baughcum, S.L., Kloster, S., 2010. Description and evaluation of the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4). Geosci. Model Dev. 3, 43–67.

ENVIRON, U.G., 2008. Comprehensive air quality model with extensions (camx). version 4.50. ENVIRON International Corporation, Novato .

Eriksson, A.C., Nordin, E.Z., Nyström, R., Pettersson, E., Swietlicki, E., Bergvall, C., Westerholm, R., Boman, C., Pagels, J.H., 2014. Particulate PAH Emissions from Residential Biomass Combustion : Time-Resolved Analysis with Aerosol Mass Spectrometry. Environmental Science & Technology 48, 7143–7150.

Erisman, J.W., Bleeker, A., Hensen, A., Vermeulen, A., 2008. Agricultural air quality in Europe and the future perspectives. Atmospheric Environment 42, 3209–3217.

Erisman, J.W., Schaap, M., 2004. The need for ammonia abatement with respect to secondary PM reductions in Europe. Environmental Pollution 129, 159–163.

Escobedo, F.J., Nowak, D.J., 2009. Spatial heterogeneity and air pollution removal by an urban forest. Landscape and Urban Planning 90, 102–110.

Escrig, A., Monfort, E., Celades, I., Querol, X., Amato, F., Minguillón, M.C., Hopke, P.K., 2009. Application of Optimally Scaled Target Factor Analysis for Assessing Source Contribution of Ambient PM10. Journal of the Air & Waste Management Association 59, 1296–1307.

Evans, J., van Donkelaar, A., Martin, R.V., Burnett, R., Rainham, D.G., Birkett, N.J., Krewski, D., 2013. Estimates of global mortality attributable to particulate air pollution using satellite imagery. Environmental research 120, 33–42.

Evelyn, J., 1661. Fumifugium or the inconvenience of the air and smoke or london dissipated. Fumifugium : Or the Inconvenience of the Aer and Smoake of London Dissipated .

Evensen, G., 1994. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics. Journal of Geophysical Research : Oceans 99, 10143–10162.

Evensen, G., 2003. The Ensemble Kalman Filter : theoretical formulation and practical implementation. Ocean Dynamics 53, 343–367.

Evensen, G., 2004. Sampling strategies and square root analysis schemes for the EnKF. Ocean Dynamics 54, 539–560.

Evtyugina, M.G., Nunes, T., Pio, C., Costa, C.S., 2006. Photochemical pollution under sea breeze conditions, during summer, at the Portuguese West Coast. Atmospheric Environment 40, 6277–6293.

Fan, G., Jin, S., 2010. Coverage problem in wireless sensor network : A survey. JNW 5, 1033–1040.

Fankhauser, S., 2013. Valuing Climate Change : The Economics of the Greenhouse. Routledge.

Fann, N., Lamson, A.D., Anenberg, S.C., Wesson, K., Risley, D., Hubbell, B.J., 2012. Estimating the National Public Health Burden Associated with Exposure to Ambient PM2.5 and Ozone. Risk Analysis 32, 81–95.

Fateh, B., Govindarasu, M., Ajjarapu, V., 2013. Wireless network design for transmission line monitoring in smart grid. ieee transactions on smart grid 4, 1076–1086.

Federico, S., 2013. Implementation of a 3d-var system for atmospheric profiling data assimilation into the rams model : initial results. Atmospheric Measurement Techniques 6, 3563–3576.

Feliu, S., Morcillo, M., 1993. The prediction of atmospheric corrosion from meteorological and pollution parameters—i. annual corrosion. Corrosion Science 34, 403–414.

Feng, C., Li, J., Sun, W., Zhang, Y., Wang, Q., 2016. Impact of ambient fine particulate matter (PM2.5) exposure on the risk of influenza-like-illness : a time-series analysis in Beijing, China. Environmental Health 15, 17.

Fenger, J., 1999. Urban air quality. Atmospheric Environment 33, 4877–4900.

Fluent, A., 2009. 12.0 theory guide. Ansys Inc 5.

Folberth, G.A., Hauglustaine, D.A., Lathiere, J., Brocheton, F., 2006. Interactive chemistry in the Laboratoire de Météorologie Dynamique general circulation model : model description and impact analysis of biogenic hydrocarbons on tropospheric chemistry. Atmospheric Chemistry and Physics 6, 2319.

Frohn, L.M., Christensen, J.H., Brandt, J., 2002. Development and testing of numerical methods for two-way nested air pollution modelling. Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C 27, 1487–1494.

Frydendall, J., Brandt, J., Christensen, J.H., Frydendall, J., Brandt, J., Christensen, J.H., 2009. Implementation and testing of a simple data assimilation algorithm in the regional air pollution forecast model, DEOM. Atmospheric Chemistry and Physics 9, 5475–5488.

G. A. Grell, J.D., 1994. A description of the fifth-generation Penn State/NCAR mesoscale model (MM5). NCAR Scientific Tech Note NCAR/TN-398 STR, 138pp.

Gangwar, J.N., Gupta, T., Agarwal, A.K., 2012. Composition and comparative toxicity of particulate matter emitted from a diesel and biodiesel fuelled CRDI engine. Atmospheric Environment 46, 472–481.

Gao, M., Guttikunda, S.K., Carmichael, G.R., Wang, Y., Liu, Z., Stanier, C.O., Saide, P.E., Yu, M., 2015. Health impacts and economic losses assessment of the 2013 severe haze event in Beijing area. Science of the Total Environment 511, 553–561.

Garbero, V., 2008. Pollutant dispersion in urban canopy study of the plume behaviour through an obstacle array. Ph.D. thesis. Ph. D. thesis, Politecnico di Torino–Ecole Centrale de Lyon.

Garbero, V., Mejan, P., Perkins, R., Salizzoni, P., Soulhac, L., 2006. Dispersion through an obstacle array : a wind tunnel investigation. WIT Transactions on Ecology and the Environment 86.

Garbero, V., Montalto, A., Lazovic, N., Salizzoni, P., Berrone, S., Soulhac, L., 2011. The impact of the urban air pollution on the human health : a case-study in turin, in : Air Pollution Modeling and its Application XXI. Springer, pp. 729–732.

Garbero, V., Salizzoni, P., Soulhac, L., 2010. Experimental Study of Pollutant Dispersion Within a Network of Streets. Boundary-Layer Meteorology 136, 457–487.

Garcia-Menendez, F., Odman, M.T., 2011. Adaptive grid use in air quality modeling. Atmosphere 2, 484–509.

Garcia–Menendez, F., Yano, A., Hu, Y., Talat Odman, M., 2010. An adaptive grid version of CMAQ for improving the resolution of plumes. Atmospheric Pollution Research 1, 239–249.

Garg, A., Shukla, P.R., Kapshe, M., 2006. The sectoral trends of multigas emissions inventory of India. Atmospheric Environment 40, 4608–4620.

Garratt, J., *et al.*, 1992. The atmospheric boundary layer. cambridge atmospheric and space science series. Cambridge University Press, Cambridge 416, 444.

Garratt, J.R., 1994. The Atmospheric Boundary Layer. Cambridge University Press.

Garrod, A., Rimmer, D., Robertshaw, L., Jones, T., 1998. Occupational exposure through spraying remedial pesticides. Annals of Occupational Hygiene 42, 159–165.

Gaubert, B., Coman, A., Foret, G., Meleux, F., Ung, A., Rouil, L., Ionescu, A., Candau, Y., Beekmann, M., 2014. Regional scale ozone data assimilation using an ensemble Kalman filter and the CHIMERE chemical transport model. Geosci. Model Dev. 7, 283–302.

Gauss, C.F., 1809. Theoria motus corporum coelestium in sectionibus conicis solem ambientium auctore Carolo Friderico Gauss. sumtibus Frid. Perthes et IH Besser.

Gauthier, P., Charette, C., Fillion, L., Koclas, P., Laroche, S., 1999. Implementation of a 3d variational data assimilation system at the canadian meteorological centre. part i : The global analysis. Atmosphere-Ocean 37, 103–156.

Gelbard, F., Seinfeld, J.H., 1980. Simulation of multicomponent aerosol dynamics. Journal of colloid and Interface Science 78, 485–501.

Gerry, S., Godowitch, J., Schere, R., Scheffe, R.D., 1989. User's guide for the urban airshed model. Volume I : User's manual for UAM (CB-IV), SYSAPP-90/018a, final report prepared for the South Coast Air Quality Management District for Contract .

Ghorai, S., Tomlin, A.S., Berzins, M., 2000. Resolution of pollutant concentrations in the boundary layer using a fully 3d adaptive gridding technique. Atmospheric Environment 34, 2851–2863.

Giambini, P., Salizzoni, P., Soulhac, L., Corti, A., 2010. Air quality modelling system for traffic scenario analysis in florence : Model validation and identification of critical issues, pp. 195–199.

Giambini, P., Salizzoni, P., Soulhac, L., Corti, A., 2011. Influence of meteorological input parameters on urban dispersion modelling for traffic scenario analysis, in : Air Pollution Modeling and its Application XXI. Springer, pp. 453–457.

Gijzen, M., Lewinsohn, E., Savage, T.J., Croteau, R.B., 1993. Conifer monoterpenes : Biochemistry and bark beetle chemical ecology. ACS symposium series (USA) .

Giles, L.V., Koehle, M.S., 2013. The Health Effects of Exercising in Air Pollution. Sports Medicine 44, 223–249.

Ginoux, P., Chin, M., Tegen, I., Prospero, J.M., Holben, B., Dubovik, O., Lin, S.J., 2001. Sources and distributions of dust aerosols simulated with the GOCART model. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 106, 20255–20273.

Giri, S., Shrivastava, D., Deshmukh, K., Dubey, P., 2013. Effect of air pollution on chlorophyll content of leaves. Current Agriculture Research Journal 1, 93–98.

Gkatzoflias, D., Kouridis, C., Ntziachristos, L., Samaras, Z., 2007. Copert 4 : Computer programme to calculate emissions from road transport. European Environment Agency .

Gowardhan, A.A., Brown, M.J., Williams, M.D., Pardyjak, E., 2006. Evaluation of the QUIC urban dispersion model using the Salt Lake City URBAN 2000 tracer experiment data—IOP 10, in : Sixth Symposium on the Urban Environment/14th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the Air and Waste Management Association. Atlanta. January J.

Gowardhan, A.A., Pardyjak, E.R., Senocak, I., Brown, M.J., 2011. A cfd-based wind solver for an urban fast response transport and dispersion model. Environmental fluid mechanics 11, 439–464.

Goyal, P., Rama Krishna, T.V.B.P.S., 2002. Dispersion of pollutants in convective low wind : a case study of Delhi. Atmospheric Environment 36, 2071–2079.

Graf, H.F., Feichter, J., Langmann, B., 1997. Volcanic sulfur emissions : Estimates of source strength and its contribution to the global sulfate distribution. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 102, 10727–10738.

Grange, S.K., Salmond, J.A., Trompetter, W.J., Davy, P.K., Ancelet, T., 2013. Effect of atmospheric stability on the impact of domestic wood combustion to air quality of a small urban township in winter. Atmospheric Environment 70, 28–38.

Granier, C., Müller, J.F., Pétron, G., Brasseur, G., 1999. A three-dimensional study of the global CO budget. Chemosphere - Global Change Science 1, 255–261.

Granier, C., Pétron, G., Müller, J.F., Brasseur, G., 2000. The impact of natural and anthropogenic hydrocarbons on the tropospheric budget of carbon monoxide. Atmospheric Environment 34, 5255–5270.

Greene, J., Kalkstein, L., Ye, H., Smoyer, K., 1999. Relationships between synoptic climatology and atmospheric pollution at 4 us cities. Theoretical and Applied Climatology 62, 163–174.

Grell, G.A., Peckham, S.E., Schmitz, R., McKeen, S.A., Frost, G., Skamarock, W.C., Eder, B., 2005. Fully coupled “online” chemistry within the WRF model. Atmospheric Environment 39, 6957–6975.

Grewe, V., 2004. Technical Note : A diagnostic for ozone contributions of various NOx emissions in multi-decadal chemistry-climate model simulations. Atmos. Chem. Phys. 4, 729–736.

Grewe, V., Dahlmann, K., Matthes, S., Steinbrecht, W., 2012. Attributing ozone to NOx emissions : Implications for climate mitigation measures. Atmospheric Environment 59, 102–107.

Grewe, V., Tsati, E., Hoor, P., 2010. On the attribution of contributions of atmospheric trace gases to emissions in atmospheric model applications. Geosci. Model Dev. 3, 487–499.

Grossi, C., Brimblecombe, P., 2007. Effect of long-term changes in air pollution and climate on the decay and blackening of european stone buildings. Geological Society, London, Special Publications 271, 117–130.

Gryning, S.E., Batchvarova, E., 2012. Air Pollution Modeling and Its Application XIII. Springer Science & Business Media.

Guenther, A., 1997. Seasonal and spatial variations in natural volatile organic compound emissions. Ecological applications 7, 34–45.

Guenther, A., Hewitt, C.N., Erickson, D., Fall, R., Geron, C., Graedel, T., Harley, P., Klinger, L., Lerdau, M., McKay, W., *et al.*, 1995. A global model of natural volatile organic compound emissions. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 100, 8873–8892.

Guenther, C., 2006. Estimates of global terrestrial isoprene emissions using megan (model of emissions of gases and aerosols from nature). Atmospheric Chemistry and Physics 6.

Guerreiro, C.B.B., Foltescu, V., de Leeuw, F., 2014. Air quality status and trends in Europe. Atmospheric Environment 98, 376–384.

Guo, H., Wang, T., Louie, P., 2004. Source apportionment of ambient non-methane hydrocarbons in hong kong : application of a principal component analysis/absolute principal component scores (pca/apcs) receptor model. Environmental Pollution 129, 489–498.

Guo, L.C., Bao, L.J., She, J.W., Zeng, E.Y., 2014. Significance of wet deposition to removal of atmospheric particulate matter and polycyclic aromatic hydrocarbons : a case study in guangzhou, china. Atmospheric environment 83, 136–144.

de Haan, P., 1999. On the use of density kernels for concentration estimations within particle and puff dispersion models. Atmospheric Environment 33, 2007–2021.

Hamlyn, D., Hilderman, T., Britter, R., 2007. A simple network approach to modelling dispersion among large groups of obstacles. Atmospheric Environment 41, 5848–5862.

Hamra, G.B., Guha, N., Cohen, A., Laden, F., Raaschou-Nielsen, O., Samet, J.M., Vineis, P., Forastiere, F., Saldiva, P., Yorifuji, T., *et al.*, 2014. Outdoor particulate matter exposure and lung cancer : a systematic review and meta-analysis .

Han, L., Zhou, W., Li, W., Li, L., 2014. Impact of urbanization level on urban air quality : a case of fine particles (PM 2.5) in Chinese cities. Environmental Pollution 194, 163–170.

Hanea, R.G., Velders, G.J.M., Heemink, A., 2004. Data assimilation of ground-level ozone in Europe with a Kalman filter and chemistry transport model. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 109, D10302.

Hanna, S., Chang, J., 2012. Acceptance criteria for urban dispersion model evaluation. Meteorology and Atmospheric Physics 116, 133–146.

Hanna, S.R., Britter, R.E., 2010. Wind flow and vapor cloud dispersion at industrial and urban sites. volume 7. John Wiley & Sons.

Hansen, M., Reed, B., 2000. A comparison of the igbp discover and university of maryland 1 km global land cover products. International Journal of Remote Sensing 21, 1365–1373.

Hanson, P.J., Lindberg, S.E., 1991. Dry deposition of reactive nitrogen compounds : A review of leaf, canopy and non-foliar measurements. Atmospheric Environment. Part A. General Topics 25, 1615–1634.

Hass, H., Memmesheimer, M., Geiβ, H., Jakobs, H.J., Laube, M., Ebel, A., 1990. Simulation of the chernobyl radioactive cloud over Europe using the eurad model. Atmospheric Environment. Part A. General Topics 24, 673–692.

Hassan, A.A., Crowther, J.M., 1998. Modelling of Fluid Flow and Pollutant Dispersion in a Street Canyon, in : Sokhi, R.S. (Ed.), Urban Air Quality : Monitoring and Modelling. Springer Netherlands, pp. 281–297.

Hauglustaine, D.A., Hourdin, F., Jourdain, L., Filiberti, M.A., Walters, S., Lamarque, J.F., Holland, E.A., 2004. Interactive chemistry in the Laboratoire de Météorologie Dynamique general circulation model : Description and background tropospheric chemistry evaluation. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 109, D04314.

Häder, D.P., Williamson, C.E., Wängberg, S.k., Rautio, M., Rose, K.C., Gao, K., Helbling, E.W., Sinha, R.P., Worrest, R., 2015. Effects of UV radiation on aquatic ecosystems and interactions with other environmental factors. Photochem. Photobiol. Sci. 14, 108–126.

Held, T., Ying, Q., Kaduwela, A., Kleeman, M., 2004. Modeling particulate matter in the San Joaquin Valley with a source-oriented externally mixed three-dimensional photochemical grid model. Atmospheric Environment 38, 3689–3711.

Held, T., Ying, Q., Kleeman, M.J., Schauer, J.J., Fraser, M.P., 2005. A comparison of the UCD/CIT air quality model and the CMB source–receptor model for primary airborne particulate matter. Atmospheric Environment 39, 2281–2297.

Hendricks, E.A., Diehl, S.R., Burrows, D.A., Keith, R., 2007. Evaluation of a Fast-Running Urban Dispersion Modeling System Using Joint Urban 2003 Field Data. Journal of Applied Meteorology and Climatology 46, 2165–2179.

Hendriks, C., Kranenburg, R., Kuenen, J., van Gijlswijk, R., Wichink Kruit, R., Segers, A., Denier van der Gon, H., Schaap, M., 2013. The origin of ambient particulate matter concentrations in the Netherlands. Atmospheric Environment 69, 289–303.

Hertel, O., Berkowicz, R., 1989. Modelling Pollution from Traffic in a Street Canyon : Evaluation of Data and Model Development. National Environmental Research Institute.

Hill, A.C., 1971. Vegetation : A Sink for Atmospheric Pollutants. Journal of the Air Pollution Control Association 21, 341–346.

Hoegh-Guldberg, O., Bruno, J.F., 2010. The impact of climate change on the world's marine ecosystems. Science 328, 1523–1528.

Hoelzemann, J.J., Elbern, H., Ebel, A., 2001. PSAS and 4d-var data assimilation for chemical state analysis by urban and rural observation sites. Physics and Chemistry of the Earth, Part B : Hydrology, Oceans and Atmosphere 26, 807–812.

Hollingsworth, A., Lönnberg, P., 1986. The statistical structure of short-range forecast errors as determined from radiosonde data. Part I : The wind field. Tellus A 38A, 111–136.

Holloway, T., Scotty, E., Harkey, M., 2014. Estimating Lightning NOx Emissions for Regional Air Quality Modeling. AGU Fall Meeting Abstracts 33.

Holman, C., Harrison, R., Querol, X., 2015. Review of the efficacy of low emission zones to improve urban air quality in European cities. Atmospheric Environment 111, 161–169.

Horálek, J., Denby, B., de Smet, P., de Leeuw, F., Kurfürst, P., Swart, R., van Noije, T., 2007. Spatial mapping of air quality for european scale assessment. etc/acc technical paper 2006/6.

Horálek, J., Denby, B., de Smet, P., de Leeuw, F., Kurfürst, P., Swart, R., van Noije, T., 2006. Spatial mapping of air quality for European scale assessment. ETC/ACC Technical paper 6, 2007.

Hourdin, F., Musat, I., Bony, S., Braconnot, P., Codron, F., Dufresne, J.L., Fairhead, L., Filiberti, M.A., Friedlingstein, P., Grandpeix, J.Y., Krinner, G., LeVan, P., Li, Z.X., Lott, F., 2006. The LMDZ4 general circulation model : climate performance and sensitivity to parametrized physics with emphasis on tropical convection. Climate Dynamics 27, 787–813.

Houtekamer, P.L., Mitchell, H.L., 2001. A Sequential Ensemble Kalman Filter for Atmospheric Data Assimilation. Monthly Weather Review 129, 123–137.

Houtekamer, P.L., Mitchell, H.L., Pellerin, G., Buehner, M., Charron, M., Spacek, L., Hansen, B., 2005. Atmospheric Data Assimilation with an Ensemble Kalman Filter : Results with Real Observations. Monthly Weather Review 133, 604–620.

Van der Hoven, I., 1957. Power spectrum of horizontal wind speed in the frequency range from 0.0007 to 900 cycles per hour. Journal of meteorology 14, 160–164.

Hoydysh, W.G., Dabberdt, W.F., 1988. Kinematics and dispersion characteristics of flows in asymmetric street canyons. Atmospheric Environment (1967) 22, 2677–2689.

Hoydysh, W.G., Dabberdt, W.F., 1994. Concentration fields at urban intersections : fluid modeling studies. Atmospheric Environment 28, 1849–1860.

Huang, Q., Cheng, S., Perozzi, R.E., Perozzi, E.F., 2012. Use of a MM5–CAMx–PSAT Modeling System to Study SO2 Source Apportionment in the Beijing Metropolitan Region. Environmental Modeling & Assessment 17, 527–538.

Hülsmann, F., Gerike, R., Ketzel, M., 2014. Modelling traffic and air pollution in an integrated approach–the case of munich. Urban Climate 10, 732–744.

Hunt, J., Holroyd, R., Carruthers, D., 1988. Preparatory studies for a complex dispersion model. CERC Report HB9/88 .

IARC, 2006. Formaldehyde, 2-butoxyethanol and 1-tert-butoxypropan-2-ol. Internation Agency for Research on Cancer monographs on the evaluation of carcinogenic risks to humans 88, 1.

Isnard, O., 1999. Dispersion atmosphérique en présence de groupes d'obstacles.

Jacquemin, B., Lepeule, J., Boudier, A., Arnould, C., Benmerad, M., Chappaz, C., Ferran, J., Kauffmann, F., Morelli, X., Pin, I., *et al.*, 2013. Impact of geocoding methods on associations between long-term exposure to urban air pollution and lung function. Environmental health perspectives 121, 1054.

Jakobs, H.J., Feldmann, H., Hass, H., Memmesheimer, M., 1995. The Use of Nested Models for Air Pollution Studies : An Application of the EURAD Model to a SANA Episode. Journal of Applied Meteorology 34, 1301–1319.

Jarosz, N., Loubet, B., Durand, B., Foueillassar, X., Huber, L., 2005. Variations in Maize Pollen Emission and Deposition in Relation to Microclimate. Environmental Science & Technology 39, 4377–4384.

Järup, L., 2003. Hazards of heavy metal contamination. British medical bulletin 68, 167–182.

Jensen, K., Kozlowski, T., 1975. Absorption and translocation of sulfur dioxide by seedlings of four forest tree species. Journal of Environmental Quality 4, 379–382.

Johansson, L.S., Leckner, B., Gustavsson, L., Cooper, D., Tullin, C., Potter, A., 2004. Emission characteristics of modern and old-type residential boilers fired with wood logs and wood pellets. Atmospheric Environment 38, 4183–4195.

Johnson, T., Mol, A.P.J., Zhang, L., Yang, S., 2017. Living under the dome : Individual strategies against air pollution in Beijing. Habitat International 59, 110–117.

Jones, A.M., Harrison, R.M., 2004. The effects of meteorological factors on atmospheric bioaerosol concentrations—a review. Science of The Total Environment 326, 151–180.

Jones, R.W., 1977. A Nested Grid for a Three-Dimensional Model of a Tropical Cyclone. Journal of Atmospheric Sciences 34, 1528–1553.

Jonson, J.E., Sundet, J.K., Tarrasón, L., 2001. Model calculations of present and future levels of ozone and ozone precursors with a global and a regional model. Atmospheric Environment 35, 525–537.

Kallos, G., Nickovic, S., Papadopoulos, A., Jovic, D., Kakaliagou, O., Misirlis, N., Boukas, L., Mimikou, N., Sakellaridis, G., Papageorgiou, J., others, 1997. The regional weather forecasting system SKIRON : An overview, in : Proceedings of the symposium on regional weather prediction on parallel computer environments, p. 17.

Kalman, R.E., 1960. A new approach to linear filtering and prediction problems. Journal of basic Engineering 82, 35–45.

Kalman, R.E., Bucy, R.S., 1961. New results in linear filtering and prediction theory. Journal of basic engineering 83, 95–108.

Kalnay, E., 2003. Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability. Cambridge University Press.

Kampa, M., Castanas, E., 2008. Human health effects of air pollution. Environmental Pollution 151, 362–367.

Kang, D., Mathur, R., Rao, S.T., Yu, S., 2008. Bias adjustment techniques for improving ozone air quality forecasts. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 113, D23308.

Kasten, F., Czeplak, G., 1980. Solar and terrestrial radiation dependent on the amount and type of cloud. Solar energy 24, 177–189.

Kastner-Klein, P., Berkowicz, R., Plate, E., 2000. Modelling of vehicle-induced turbulence in air pollution studies for streets. International Journal of Environment and Pollution 14, 496–507.

Kastner-Klein, P., Fedorovich, E., Rotach, M., 2001. A wind tunnel study of organised and turbulent air motions in urban street canyons. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics 89, 849–861.

Kastner-Klein, P., Plate, E.J., 1999. Wind-tunnel study of concentration fields in street canyons. Atmospheric Environment 33, 3973–3979.

Kern, C., Werner, C., Kelly, P., Brewer, I., Ketner, D., Paskievitch, J., Power, J., 2016. Sulfur dioxide emissions from Alaskan volcanoes quantified using an ultraviolet SO_{2} camera, p. 10514.

Kesselmeier, J., Kuhn, U., Wolf, A., Andreae, M., Ciccioli, P., Brancaleoni, E., Frattoni, M., Guenther, A., Greenberg, J., Vasconcellos, P.D.C., *et al.*, 2000. Atmospheric volatile organic compounds (voc) at a remote tropical forest site in central amazonia. Atmospheric Environment 34, 4063–4072.

Kessler, R., Douglas, S., 1992. User's guide to the systems applications international mesoscale model. California : Systems Applications .

Khan, M.U., Malik, R.N., Muhammad, S., Ullah, F., Qadir, A., 2015. Health Risk Assessment of Consumption of Heavy Metals in Market Food Crops from Sialkot and Gujranwala Districts, Pakistan. Human and Ecological Risk Assessment : An International Journal 21, 327–337.

Kim, J.J., Baik, J.J., 2003. Effects of inflow turbulence intensity on flow and pollutant dispersion in an urban street canyon. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics 91, 309–329.

Knippertz, P., Todd, M.C., 2012. Mineral dust aerosols over the Sahara : Meteorological controls on emission and transport and implications for modeling. Reviews of Geophysics 50, RG1007.

Koch, S.E., Mcqueen, J.T., 1987. A survey of nested grid techniques and their potential for use within the MASS weather prediction model. Technical Report.

Koo, B., Wilson, G.M., Morris, R.E., Dunker, A.M., Yarwood, G., 2009. Comparison of source apportionment and sensitivity analysis in a particulate matter air quality model. Environmental science & technology 43, 6669–6675.

Kousa, A., Kukkonen, J., Karppinen, A., Aarnio, P., Koskentalo, T., 2002. A model for evaluating the population exposure to ambient air pollution in an urban area. Atmospheric Environment 36, 2109–2119.

Kovar-Panskus, A., Louka, P., Mestayer, P., Savory, E., Sini, J., Toy, N., 2001. Influence of geometry on the flow and turbulence characteristics within urban street canyons–intercomparison of wind tunnel experiments and numerical simulations, in : Proceedings of the 3rd International Conference on Urban Air Quality, pp. 19–23.

Kranenburg, R., Segers, A.J., Hendriks, C., Schaap, M., 2013. Source apportionment using LOTOS-EUROS : module description and evaluation. Geosci. Model Dev. 6, 721–733.

Kristensson, A., Johansson, C., Westerholm, R., Swietlicki, E., Gidhagen, L., Wideqvist, U., Vesely, V., 2004. Real-world traffic emission factors of gases and particles measured in a road tunnel in Stockholm, Sweden. Atmospheric Environment 38, 657–673.

Krupa, S.V., Manning, W.J., 1988. Atmospheric ozone : Formation and effects on vegetation. Environmental Pollution 50, 101–137.

Krzyzanowski, M., Kuna-Dibbert, B., Schneider, J., 2005. Health effects of transport-related air pollution. WHO Regional Office Europe.

Kukkonen, J., Partanen, L., Karppinen, A., Walden, J., Kartastenpää, R., Aarnio, P., Koskentalo, T., Berkowicz, R., 2003. Evaluation of the OSPM model combined with an urban background model against the data measured in 1997 in Runeberg Street, Helsinki. Atmospheric Environment 37, 1101–1112.

Kulmala, M., Laaksonen, A., Pirjola, L., 1998. Parameterizations for sulfuric acid/water nucleation rates. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 103, 8301–8307.

Kumar, U., De Ridder, K., Lefebvre, W., Janssen, S., 2012. Data assimilation of surface air pollutants (O3 and NO2) in the regional-scale air quality model AURORA. Atmospheric Environment 60, 99–108.

Kurihara, Y., Bender, M.A., 1980. Use of a Movable Nested-Mesh Model for Tracking a Small Vortex. Monthly Weather Review 108, 1792–1809.

Kurihara, Y., Tripoli, G.J., Bender, M.A., 1979. Design of a Movable Nested-Mesh Primitive Equation Model. Monthly Weather Review 107, 239–249.

Kwok, R.H.F., Napelenok, S.L., Baker, K.R., 2013. Implementation and evaluation of PM2.5 source contribution analysis in a photochemical model. Atmospheric Environment 80, 398–407.

Laanbroek, H.J., 2010. Methane emission from natural wetlands : interplay between emergent macrophytes and soil microbial processes. A mini-review. Annals of Botany 105, 141–153.

Lagzi, I., Kármán, D., Turányi, T., Tomlin, A.S., Haszpra, L., 2004. Simulation of the dispersion of nuclear contamination using an adaptive Eulerian grid model. Journal of Environmental Radioactivity 75, 59–82.

Lagzi, I., Turányi, T., Tomlin, A.S., Haszpra, L., 2009. Modelling photochemical air pollutant formation in Hungary using an adaptive grid technique. International Journal of Environment and Pollution 36, 44–58.

Lamaison, G., Soulhac, L., Cierco, F.X., Salizzoni, P., Armand, P., 2011. Validation of SIRANERISK-2.0 operational model against a Lagrangian particle dispersion Model and a new campaign of dispersion experiments in the LMFA ECL wind tunnel in an idealized mock up, in : 14th international conference on harmonisation within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes, Kos Island, Greece.

Lamarque, J.F., Hess, P., 2003. Model analysis of the temporal and geographical origin of the co distribution during the topse campaign. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 108.

Lamb, R., 1978. The effects of release height on material dispersion in the convective planetary boundary layer, in : Symposium on turbulence, diffusion, and air pollution, 4th, Reno, NV, January 15-18, 1979, preprints.

Lambert, G., Le Cloarec, M.F., Pennisi, M., 1988. Volcanic output of SO2 and trace metals : A new approach. Geochimica et Cosmochimica Acta 52, 39–42.

Lantzy, R.J., Mackenzie, F.T., 1979. Atmospheric trace metals : global cycles and assessment of man's impact. Geochimica et Cosmochimica Acta 43, 511–525.

Last, J.A., Sun, W.M., Witschi, H., 1994. Ozone, NO, and NO2 : oxidant air pollutants and more. Environmental Health Perspectives 102, 179–184.

Lattuati, M., 1997. Contribution à l'étude du bilan de l'ozone troposphérique à l'interface de l'Europe et de l'Atlantique Nord : modélisation lagrangienne et mesures en altitude. These de sciences, Université Paris 6.

Laupsa, H., Denby, B., Larssen, S., Schaug, J., 2009. Source apportionment of particulate matter (PM2.5) in an urban area using dispersion, receptor and inverse modelling. Atmospheric Environment 43, 4733–4744.

Lawson, C.L., Hanson, R.J., 1974. Linear least squares with linear inequality constraints. Solving least squares problems. Englewood Cliffs (NJ) : Prentice-Hall. p 161.

LCSQA, 2015. Conception, implantation et suivi des stations françaises de surveillance de la qualité de l'air. Technical Report. Laboratoire Central de Surveillance de la Qualité de l'Air.

LCSQA, 2016. Guide de validation des données de mesures automatiques. Technical Report. Laboratoire Central de Surveillance de la Qualité de l'Air.

Lee, T., Marotzke, J., 1998. Seasonal cycles of meridional overturning and heat transport of the indian ocean. Journal of Physical Oceanography 28, 923–943.

van Leer, B., 1979. Towards the ultimate conservative difference scheme. V - A second-order sequel to Godunov's method. Journal of Computational Physics 32, 101–136.

Lefohn, A.S., Knudsen, H.P., McEvoy Jr., L.R., 1988. The use of kriging to estimate monthly ozone exposure parameters for the Southeastern United States. Environmental Pollution 53, 27–42.

Leitl, B., Chauvet, C., Schatzmann, M., 2001. Effects of geometrical simplification and idealization on the accuracy of microscale dispersion modelling, in : 3rd International Conference on Urban Air Quality, pp. 19–23.

Lewis, J.M., Derber, J.C., 1985. The use of adjoint equations to solve a variational adjustment problem with advective constraints. Tellus A 37A, 309–322.

Li, C., Chen, P., Kang, S., Yan, F., Hu, Z., Qu, B., Sillanpää, M., 2016. Concentrations and light absorption characteristics of carbonaceous aerosol in PM2.5 and PM10 of Lhasa city, the Tibetan Plateau. Atmospheric Environment 127, 340–346.

Ling, Z.H., Guo, H., 2014. Contribution of VOC sources to photochemical ozone formation and its control policy implication in Hong Kong. Environmental Science & Policy 38, 180–191.

Ling, Z.H., Guo, H., Zheng, J.Y., Louie, P.K.K., Cheng, H.R., Jiang, F., Cheung, K., Wong, L.C., Feng, X.Q., 2013. Establishing a conceptual model for photochemical ozone pollution in subtropical Hong Kong. Atmospheric Environment 76, 208–220.

Long, S., Hällgren, J.E., 1993. Measurement of co2 assimilation by plants in the field and the laboratory, in : Photosynthesis and Production in a Changing Environment. Springer, pp. 129–167.

van Loon, M., Builtjes, P.J.H., Segers, A.J., 2000. Data assimilation of ozone in the atmospheric transport chemistry model LOTOS. Environmental Modelling & Software 15, 603–609.

van Loon, M., Vautard, R., Schaap, M., Bergström, R., Bessagnet, B., Brandt, J., Builtjes, P.J.H., Christensen, J.H., Cuvelier, C., Graff, A., Jonson, J.E., Krol, M., Langner, J., Roberts, P., Rouil, L., Stern, R., Tarrasón, L., Thunis, P., Vignati, E., White, L., Wind, P., 2007. Evaluation of long-term ozone simulations from seven regional air quality models and their ensemble. Atmospheric Environment 41, 2083–2097.

Louka, P., Belcher, S.E., Harrison, R.G., 2000. Coupling between air flow in streets and the well-developed boundary layer aloft. Atmospheric Environment 34, 2613–2621.

Louka, P., Vachon, G., Sini, J.F., Mestayer, P., Rosant, J.M., 2002. Thermal effects on the airflow in a street canyon–nantes' 99 experimental results and model simulations. Water, air and soil pollution : Focus 2, 351–364.

Lozef, C., Bornstein, R.D., 1970. Comparison of nesting techniques within a meteorological model. WIT Transactions on Ecology and the Environment 37.

Luhar, A.K., Britter, R.E., 1989. A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. Atmospheric Environment (1967) 23, 1911–1924.

Lyu, X.P., Liu, M., Guo, H., Ling, Z.H., Wang, Y., Louie, P.K.K., Luk, C.W.Y., 2016. Spatiotemporal variation of ozone precursors and ozone formation in Hong Kong : Grid field measurement and modelling study. Science of The Total Environment 569–570, 1341–1349.

Machera, K., Goumenou, M., Kapetanakis, E., Kalamarakis, A., Glass, C., 2003. Determination of potential dermal and inhalation operator exposure to malathion in greenhouses with the whole body dosimetry method. Annals of Occupational Hygiene 47, 61–70.

Madronich, S., Flocke, S., 1999. The Role of Solar Radiation in Atmospheric Chemistry, in : Boule, D.P. (Ed.), Environmental Photochemistry. Springer Berlin Heidelberg. number 2 / 2L in The Handbook of Environmental Chemistry, pp. 1–26.

Maguregui, M., Knuutinen, U., Martínez-Arkarazo, I., Castro, K., Madariaga, J.M., 2011. Thermodynamic and spectroscopic speciation to explain the blackening process of hematite formed by atmospheric so2 impact : The case of marcus lucretius house (pompeii). Analytical chemistry 83, 3319–3326.

Manahan, S.E., 2013. Fundamentals of Environmental and Toxicological Chemistry : Sustainable Science, Fourth Edition. CRC Press.

Marro, M., Salizzoni, P., Cierco, F.X., Korsakissok, I., Danzi, E., Soulhac, L., 2014. Plume rise and spread in buoyant releases from elevated sources in the lower atmosphere. Environmental Fluid Mechanics 14, 201–219.

Maryon, R.H., Smith, F.B., Conway, B.J., Goddard, D.M., 1991. The U.K. nuclear accident model. Progress in Nuclear Energy 26, 85–104.

Massart, S., Cariolle, D., Peuch, V.H., 2005. Vers une meilleure représentation de la distribution et de la variabilité de l'ozone atmosphérique par l'assimilation des données satellitaires. Comptes Rendus Geoscience 337, 1305–1310.

Massart, S., Pajot, B., Piacentini, A., Pannekoucke, O., 2010. On the merits of using a 3d-fgat assimilation scheme with an outer loop for atmospheric situations governed by transport. Monthly Weather Review 138, 4509–4522.

McGaughey, G.R., Desai, N.R., Allen, D.T., Seila, R.L., Lonneman, W.A., Fraser, M.P., Harley, R.A., Pollack, A.K., Ivy, J.M., Price, J.H., 2004. Analysis of motor vehicle emissions in a Houston tunnel during the Texas Air Quality Study 2000. Atmospheric Environment 38, 3363–3372.

McHugh, C., Carruthers, D., Edmunds, H., 1997. ADMS–Urban : an air quality management system for traffic, domestic and industrial pollution. International Journal of Environment and Pollution 8, 666–674.

McKeen, S., Wilczak, J., Grell, G., Djalalova, I., Peckham, S., Hsie, E.Y., Gong, W., Bouchet, V., Menard, S., Moffet, R., McHenry, J., McQueen, J., Tang, Y., Carmichael, G.R., Pagowski, M., Chan, A., Dye, T., Frost, G., Lee, P., Mathur, R., 2005. Assessment of an ensemble of seven real-time ozone forecasts over eastern North America during the summer of 2004. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 110, D21307.

McPherson, R., Bergman, K., Kistler, R., Rasch, G., Gordon, D., 1979. The nmc operational global data assimilation system. Monthly Weather Review 107, 1445–1461.

McPherson, R.D., 1975. Progress, problems, and prospects in meteorological data assimilation. Bulletin of the American Meteorological Society 56, 1154–1166.

MEEM, 2016. Améliorer la qualité de l'air extérieur. Technical Report. Ministère de l'Environnement de l'Energie et de la Mer.

Meinshausen, M., Meinshausen, N., Hare, W., Raper, S.C., Frieler, K., Knutti, R., Frame, D.J., Allen, M.R., 2009. Greenhouse-gas emission targets for limiting global warming to 2 c. Nature 458, 1158–1162.

Menut, L., Bessagnet, B., Khvorostyanov, D., Beekmann, M., Blond, N., Colette, A., Coll, I., Curci, G., Foret, G., Hodzic, A., Mailler, S., Meleux, F., Monge, J.L., Pison, I., Siour, G., Turquety, S.,

Valari, M., Vautard, R., Vivanco, M.G., 2013. CHIMERE 2013 : a model for regional atmospheric composition modelling. Geosci. Model Dev. 6, 981–1028.

Menut, L., Bessagnet, B., Khvorostyanov, D., Turquety, S., Monge, J.L., Valari, M., Vautard, R., 2011. Tropospheric chemical composition modeling with CHIMERE.

Menut, L., Goussebaile, A., Bessagnet, B., Khvorostiyanov, D., Ung, A., 2012. Impact of realistic hourly emissions profiles on air pollutants concentrations modelled with CHIMERE. Atmospheric environment 49, 233–244.

Messina, P., D'Isidoro, M., Maurizi, A., Fierli, F., 2011. Impact of assimilated observations on improving tropospheric ozone simulations. Atmospheric Environment 45, 6674–6681.

Meyer, N.K., 2012. Particulate, black carbon and organic emissions from small-scale residential wood combustion appliances in Switzerland. Biomass and Bioenergy 36, 31–42.

Miller, C.W., Hively, L.M., 1987. A review of validation studies for the Gaussian plume atmospheric dispersion model. Nuclear Safety 28, 522–531.

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

Minguillón, M.C., Schembari, A., Triguero-Mas, M., de Nazelle, A., Dadvand, P., Figueras, F., Salvado, J.A., Grimalt, J.O., Nieuwenhuijsen, M., Querol, X., 2012. Source apportionment of indoor, outdoor and personal PM2.5 exposure of pregnant women in Barcelona, Spain. Atmospheric Environment 59, 426–436.

Miquel, G., 2014. Rapport n° 600 : Projet de loi relatif à la nocivité du diesel pour la santé. Technical Report. Sénat.

Miyakoda, K., Rosati, A., 1977. One-Way Nested Grid Models : The Interface Conditions and the Numerical Accuracy. Monthly Weather Review 105, 1092–1107.

Miyakoda, K., Strickler, R., Chludzinski, J., 1978. Initialization with the data assimilation method. Tellus 30, 32–54.

Miyakoda, K., Umscheid, L., Lee, D., Sirutis, J., Lusen, R., Pratte, F., 1976. The near-real-time, global, four-dimensional analysis experiment during the gate period, part i. Journal of the Atmospheric Sciences 33, 561–591.

Ménard, R., Chang, L.P., 2000. Assimilation of Stratospheric Chemical Tracer Observations Using a Kalman Filter. Part II : χ^2-Validated Results and Analysis of Variance and Correlation Dynamics. Monthly Weather Review 128, 2672–2686.

Monteiro, A., Ribeiro, I., Tchepel, O., Sá, E., Ferreira, J., Carvalho, A., Martins, V., Strunk, A., Galmarini, S., Elbern, H., Schaap, M., Builtjes, P., Miranda, A.I., Borrego, C., 2013. Bias Correction Techniques to Improve Air Quality Ensemble Predictions : Focus on O3 and PM Over Portugal. Environmental Modeling & Assessment 18, 533–546.

Moonen, P., Gromke, C., Dorer, V., 2013. Performance assessment of large eddy simulation (les) for modeling dispersion in an urban street canyon with tree planting. Atmospheric environment 75, 66–76.

Moreira, D.M., Tirabassi, T., Carvalho, J.C., 2005. Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers. Atmospheric Environment 39, 3643–3650.

Morel, P., Talagrand, O., 1974. Dynamic approach to meteorological data assimilation. Tellus 26, 334–344.

Morelli, X., Rieux, C., Cyrys, J., Forsberg, B., Slama, R., 2016. Air pollution, health and social deprivation : A fine-scale risk assessment. Environmental research 147, 59–70.

Moussafir, J., Oldrini, O., Tinarelli, G., Sontowski, J., Dougherty, C., 2004. A new operational approach to deal with dispersion around obstacles : The MSS (Micro-Swift-Spray) software suite. Proceedings of the 9th Int'l Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes 2, 114–118.

Namdeo, A., Colls, J., 1996. Development and evaluation of SBLINE, a suite of models for the prediction of pollution concentrations from vehicles in urban areas. Science of The Total Environment 189-190, 311–320.

de Nazelle, A., Seto, E., Donaire-Gonzalez, D., Mendez, M., Matamala, J., Nieuwenhuijsen, M.J., Jerrett, M., 2013. Improving estimates of air pollution exposure through ubiquitous sensing technologies. Environmental Pollution 176, 92–99.

Nenes, A., Pilinis, C., Pandis, S., 1998. ISORROPIA : A new thermodynamic model for inorganic multicomponent atmospheric aerosols. Aquatic Geochem 4, 123–152.

Nho, E.Y., Le Cloarec, M.F., Ardouin, B., Tjetjep, W.S., 1996. Source strength assessment of volcanic trace elements emitted from the Indonesian arc. Journal of Volcanology and Geothermal Research 74, 121–129.

Nicholls, R.J., Hanson, S.E., Lowe, J.A., Warrick, R.A., Lu, X., Long, A.J., 2014. Sea-level scenarios for evaluating coastal impacts. Wiley Interdisciplinary Reviews : Climate Change 5, 129–150.

Nicholson, S.E., 1975. A pollution model for street-level air. Atmospheric Environment (1967) 9, 19–31.

Nieuwstadt, F., Tennekes, H., 1981. A rate equation for the nocturnal boundary-layer height. Journal of the Atmospheric Sciences 38, 1418–1428.

Noel, S., Bovensmann, H., Burrows, J., Frerick, J., Chance, K., Goede, A., 1999. Global atmospheric monitoring with sciamachy. Physics and Chemistry of the Earth, Part C : Solar, Terrestrial & Planetary Science 24, 427–434.

Nowak, D.J., Crane, D.E., Stevens, J.C., 2006. Air pollution removal by urban trees and shrubs in the United States. Urban Forestry & Urban Greening 4, 115–123.

Nriagu, J.O., 1989. A global assessment of natural sources of atmospheric trace metals. Nature 338, 47–49.

Nyberg, F., Gustavsson, P., Järup, L., Bellander, T., Berglind, N., Jakobsson, R., Pershagen, G., 2000. Urban air pollution and lung cancer in Stockholm. Epidemiology (Cambridge, Mass.) 11, 487–495.

Odman, M.T., Khan, M., Srivastava, R., McRae, D.S., 2002. Initial Application of the Adaptive Grid Air Quality Model, in : Borrego, C., Schayes, G. (Eds.), Air Pollution Modeling and Its Application XV. Springer US, pp. 319–328.

Odman, M.T., Mathur, R., Alapaty, K., Srivastava, R.K., McRae, D.S., Yamartino, R.J., 1997. Nested and adaptive grids for multiscale air quality modeling, in : Next generation environmental models and computational methods, SIAM, Philadelphia. pp. 59–68.

Odman, M.T., Russell, A.G., 1991. Multiscale modeling of pollutant transport and chemistry. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 96, 7363–7370.

Offerle, B., Eliasson, I., Grimmond, C.S., Holmer, B., 2007. Surface heating in relation to air temperature, wind and turbulence in an urban street canyon. Boundary-Layer Meteorology 122, 273–292.

Ojha, N., Naja, M., Sarangi, T., Kumar, R., Bhardwaj, P., Lal, S., Venkataramani, S., Sagar, R., Kumar, A., Chandola, H., 2014. On the processes influencing the vertical distribution of ozone over the central himalayas : Analysis of yearlong ozonesonde observations. Atmospheric Environment 88, 201–211.

Oke, P.R., Brassington, G.B., Griffin, D.A., Schiller, A., 2008. The Bluelink ocean data assimilation system (BODAS). Ocean Modelling 21, 46–70.

Oke, P.R., Brassington, G.B., Griffin, D.A., Schiller, A., 2010. Ocean data assimilation : a case for ensemble optimal interpolation. Australian Meteorological and Oceanographic Journal 59, 67–76.

Oke, P.R., Schiller, A., Griffin, D.A., Brassington, G.B., 2005. Ensemble data assimilation for an eddy-resolving ocean model of the Australian Region.

Oke, T.R., 1988. Street design and urban canopy layer climate. Energy and Buildings 11, 103–113.

Oke, T.R., 2002. Boundary layer climates. Routledge.

Omasa, K., Saji, H., Youssefian, S., Kondo, N., 2012. Air Pollution and Plant Biotechnology : Prospects for Phytomonitoring and Phytoremediation. Springer Science & Business Media.

Palmgren, F., Berkowicz, R., Hertel, O., Vignati, E., 1996. Effects of reduction of nox on the no2 levels in urban streets. Science of the Total Environment 189, 409–415.

Panebianco, J., Mendez, M., Buschiazzo, D., 2016. Pm10 emission, sandblasting efficiency and vertical entrainment during successive wind-erosion events : A wind-tunnel approach. Boundary-Layer Meteorology 161, 335–353.

Pant, P., Harrison, R.M., 2013. Estimation of the contribution of road traffic emissions to particulate matter concentrations from field measurements : A review. Atmospheric Environment 77, 78–97.

Pascal, M., Corso, M., Chanel, O., Declercq, C., Badaloni, C., Cesaroni, G., Henschel, S., Meister, K., Haluza, D., Martin-Olmedo, P., Medina, S., 2013. Assessing the public health impacts of urban air pollution in 25 European cities : Results of the Aphekom project. Science of The Total Environment 449, 390–400.

Pavageau, M., 1996. Concentration fluctuations in urban street canyons–groundwork for future studies. Meteorological Institute of the University of Hamburg Tech. Rep .

Perk, M.v.d., 2013. Soil and Water Contamination, 2nd Edition. CRC Press.

Pfister, G., Pétron, G., Emmons, L.K., Gille, J.C., Edwards, D.P., Lamarque, J.F., Attie, J.L., Granier, C., Novelli, P.C., 2004. Evaluation of CO simulations and the analysis of the CO budget for Europe. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 109, D19304.

Pham, D.T., 2001. Stochastic methods for sequential data assimilation in strongly nonlinear systems. Monthly weather review 129, 1194–1207.

Phillips, N.A., 1979. The nested grid model .

Phillips, S.B., Arya, S.P., Aneja, V.P., 2004. Ammonia flux and dry deposition velocity from near-surface concentration gradient measurements over a grass surface in North Carolina. Atmospheric Environment 38, 3469–3480.

Pio, C.A., Alves, C.A., Duarte, A.C., 2001. Identification, abundance and origin of atmospheric organic particulate matter in a Portuguese rural area. Atmospheric Environment 35, 1365–1375.

Pisano, J., McKendry, I., Steyn, D., Hastie, D., 1997. Vertical nitrogen dioxide and ozone concentrations measured from a tethered balloon in the lower fraser valley. Atmospheric Environment 31, 2071–2078.

Pleim, J.E., Chang, J.S., Zhang, K., 1991. A nested grid mesoscale atmospheric chemistry model. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 96, 3065–3084.

Pope, C.A., Burnett, R.T., Thurston, G.D., Thun, M.J., Calle, E.E., Krewski, D., Godleski, J.J., 2004. Cardiovascular Mortality and Long-Term Exposure to Particulate Air Pollution. Circulation 109, 71–77.

Prata, A., Prata, A., 2012. Eyjafjallajökull volcanic ash concentrations determined using spin enhanced visible and infrared imager measurements. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 117.

Pregger, T., Friedrich, R., 2009. Effective pollutant emission heights for atmospheric transport modelling based on real-world information. Environmental Pollution 157, 552–560.

Protano, C., Guidotti, M., Vitali, M., 2009. Performance of different work clothing types for reducing skin exposure to pesticides during open field treatment. Bulletin of environmental contamination and toxicology 83, 115–119.

Putaud, J.P., Raes, F., Van Dingenen, R., Brüggemann, E., Facchini, M.C., Decesari, S., Fuzzi, S., Gehrig, R., Hüglin, C., Laj, P., Lorbeer, G., Maenhaut, W., Mihalopoulos, N., Müller, K., Querol, X., Rodríguez, S., Schneider, J., Spindler, G., Brink, H.t., Tørseth, K., Wiedensohler, A., 2004. A European aerosol phenomenology—2 : chemical characteristics of particulate matter at kerbside, urban, rural and background sites in Europe. Atmospheric Environment 38, 2579–2595.

Qin, Y., Kot, S., 1993. Dispersion of vehicular emission in street canyons, guangzhou city, south china (prc). Atmospheric Environment. Part B. Urban Atmosphere 27, 283–291.

Querol, X., Alastuey, A., Rodríguez, S., Plana, F., Ruiz, C.R., Cots, N., Massagué, G., Puig, O., 2001. PM10 and PM2.5 source apportionment in the Barcelona Metropolitan area, Catalonia, Spain. Atmospheric Environment 35, 6407–6419.

Querol, X., Alastuey, A., Rodríguez, S., Viana, M.M., Artíñano, B., Salvador, P., Mantilla, E., do Santos, S.G., Patier, R.F., de La Rosa, J., de la Campa, A.S., Menéndez, M., Gil, J.J., 2004. Levels of particulate matter in rural, urban and industrial sites in Spain. Science of The Total Environment 334–335, 359–376.

Rabier, F., 1993. Assimilation variationnelle de données météorologiques en présence d'instabilité barocline. La Météorologie 8ème série, 57–72.

Rabier, F., Järvinen, H., Klinker, E., Mahfouf, J.F., Simmons, A., 2000. The ecmwf operational implementation of four-dimensional variational assimilation. i : Experimental results with simplified physics. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society 126, 1143–1170.

Rafailidis, S., 1997. Influence of building areal density and roof shape on the wind characteristics above a town. Boundary-layer meteorology 85, 255–271.

Ratheesh, S., Sharma, R., Basu, S., 2014. An EnOI Assimilation of Satellite Data in an Indian Ocean Circulation Model. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing 52, 4106–4111.

Röckle, R., 1990. Bestimmung der stomungsver-haltnisse im Bereich Komplexer Bebauugsstrukturen. Bestimmung der Strömungsverhältnisse im Bereich Komplexer Bebauungsstrukturen .

R&D, E., 2008. Code saturne 1.3. 2 theory and programmer's guide. Technical Report. Technical report. http ://www. code-saturne. org.

Reich, P.B., Amundson, R.G., 1985. Ambient levels of ozone reduce net photosynthesis in tree and crop species. Science(Washington) 230, 566–570.

Renard, J.B., Dulac, F., Berthet, G., Lurton, T., Vignelle, D., Jégou, F., Tonnelier, T., Thaury, C., Jeannot, M., Couté, B., *et al.*, 2015. Loac : a small aerosol optical counter/sizer for ground-based and balloon measurements of the size distribution and nature of atmospheric particles–part 2 : First results from balloon and unmanned aerial vehicle flights. Atmospheric Measurement Techniques Discussions 8, 1261–1299.

Righi, S., Lucialli, P., Pollini, E., 2009. Statistical and diagnostic evaluation of the adms-urban model compared with an urban air quality monitoring network. Atmospheric Environment 43, 3850–3857.

Rizzo, M.J., Scheff, P.A., 2007. Fine particulate source apportionment using data from the USEPA speciation trends network in Chicago, Illinois : Comparison of two source apportionment models. Atmospheric Environment 41, 6276–6288.

Rojas, A.L.P., Venegas, L.E., 2013. Upgrade of the daumod atmospheric dispersion model to estimate urban background no 2 concentrations. Atmospheric Research 120, 147–154.

Rotach, M.W., 1995. Profiles of turbulence statistics in and above an urban street canyon. Atmospheric Environment 29, 1473–1486.

Rouil, L., Honoré, C., Bessagnet, B., Malherbe, L., Meleux, F., Vautard, R., Beekmann, M., Flaud, J.M., Dufour, A., Martin, D., Peuch, A., Peuch, V.H., Elichegaray, C., Poisson, N., Menut, L., 2009. Prev'air : An Operational Forecasting and Mapping System for Air Quality in Europe. Bulletin of the American Meteorological Society 90, 73–83.

Roussel, I., Charles, L., 2013. Les carburants : essence, gasoil, éthanol ? carburants, transports, santé en france : quelle cohérence ? 2268-3798 .

Ryerson, T.B., Trainer, M., Angevine, W.M., Brock, C.A., Dissly, R.W., Fehsenfeld, F.C., Frost, G.J., Goldan, P.D., Holloway, J.S., Hübler, G., Jakoubek, R.O., Kuster, W.C., Neuman, J.A., Nicks, D.K., Parrish, D.D., Roberts, J.M., Sueper, D.T., Atlas, E.L., Donnelly, S.G., Flocke, F., Fried, A., Potter, W.T., Schauffler, S., Stroud, V., Weinheimer, A.J., Wert, B.P., Wiedinmyer, C., Alvarez, R.J., Banta, R.M., Darby, L.S., Senff, C.J., 2003. Effect of petrochemical industrial emissions of reactive alkenes and NOx on tropospheric ozone formation in Houston, Texas. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 108, 4249.

Ryerson, T.B., Trainer, M., Holloway, J.S., Parrish, D.D., Huey, L.G., Sueper, D.T., Frost, G.J., Donnelly, S.G., Schauffler, S., Atlas, E.L., Kuster, W.C., Goldan, P.D., Hübler, G., Meagher, J.F., Fehsenfeld, F.C., 2001. Observations of Ozone Formation in Power Plant Plumes and Implications for Ozone Control Strategies. Science 292, 719–723.

Salem, N., Garbero, V., Salizzoni, P., Lamaison, G., Soulhac, L., 2015. Modelling Pollutant Dispersion in a Street Network. Boundary-Layer Meteorology 155, 157–187.

Salizzoni, P., 2006. Mass and momentum transfer in the urban boundary layer. Ph.D. thesis. Ecully, Ecole centrale de Lyon.

Salizzoni, P., Marro, M., Soulhac, L., Grosjean, N., Perkins, R.J., 2011. Turbulent Transfer Between Street Canyons and the Overlying Atmospheric Boundary Layer. Boundary-Layer Meteorology 141, 393–414.

Salizzoni, P., Soulhac, L., Mejean, P., 2009a. Street canyon ventilation and atmospheric turbulence. Atmospheric Environment 43, 5056–5067.

Salizzoni, P., Soulhac, L., Mejean, P., Perkins, R.J., 2008. Influence of a Two-scale Surface Roughness on a Neutral Turbulent Boundary Layer. Boundary-Layer Meteorology 127, 97–110.

Salizzoni, P., Van Liefferinge, R., Soulhac, L., Mejean, P., Perkins, R.J., 2009b. Influence of wall roughness on the dispersion of a passive scalar in a turbulent boundary layer. Atmospheric Environment 43, 734–748.

Salthammer, T., Schripp, T., Wientzek, S., Wensing, M., 2014. Impact of operating wood-burning fireplace ovens on indoor air quality. Chemosphere 103, 205–211.

Sandu, A., Chai, T., 2011. Chemical Data Assimilation—An Overview. Atmosphere 2, 426–463.

Sandu, I., Olariu, R.I., Sandu, I.G., Stirbu, C., Pascu, C., Vasilache, V., Vione, D., Arsene, C., 2015. Investigation of the dynamics and kinetics involved in saline aerosol generation under air erosion of pure and contaminated halide salts. Journal of Aerosol Science 81, 100–109.

Sasaki, Y., 1958. An objective analysis based on the variational method. Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II 36, 77–88.

Scaperdas, A., Colvile, R.N., 1999. Assessing the representativeness of monitoring data from an urban intersection site in central London, UK. Atmospheric Environment 33, 661–674.

Schaap, M., Timmermans, R.M., Roemer, M., Boersen, G., Builtjes, P., Sauter, F., Velders, G., Beck, J., 2008. The LOTOS-EUROS model : description, validation and latest developments. International Journal of Environment and Pollution 32, 270–290.

Schaap, M., Vautard, R., Bergstrom, R., van Loon, M., Bessagnet, B., Brandt, J., Christensen, H., Cuvelier, K., Foltescu, V., Graff, A., others, 2007. Evaluation of long-term aerosol simulations

from seven air quality models and their ensemble in the EURODELTA study. Atmos. Environ 41, e2097.

Schaefer, K., Lantuit, H., Romanovsky, V.E., Schuur, E.A., Witt, R., 2014. The impact of the permafrost carbon feedback on global climate. Environmental Research Letters 9, 085003.

Schauer, J.J., Lough, G.C., Shafer, M.M., Christensen, W.F., Arndt, M.F., DeMinter, J.T., Park, J.S., 2006. Characterization of metals emitted from motor vehicles. Research Report (Health Effects Institute) , 1–76 ; discussion 77–88.

Schmidt, A., Leadbetter, S., Theys, N., Carboni, E., Witham, C.S., Stevenson, J.A., Birch, C.E., Thordarson, T., Turnock, S., Barsotti, S., Delaney, L., Feng, W., Grainger, R.G., Hort, M.C., Höskuldsson, r., Ialongo, I., Ilyinskaya, E., Jóhannsson, T., Kenny, P., Mather, T.A., Richards, N.A.D., Shepherd, J., 2015. Satellite detection, long-range transport, and air quality impacts of volcanic sulfur dioxide from the 2014–2015 flood lava eruption at Bárdarbunga (Iceland). Journal of Geophysical Research : Atmospheres 120, 2015JD023638.

Schmidt, H., Derognat, C., Vautard, R., Beekmann, M., 2001. A comparison of simulated and observed ozone mixing ratios for the summer of 1998 in Western Europe. Atmospheric Environment 35, 6277–6297.

Schuur, E., McGuire, A., Schädel, C., Grosse, G., Harden, J., Hayes, D., Hugelius, G., Koven, C., Kuhry, P., Lawrence, D., *et al.*, 2015. Climate change and the permafrost carbon feedback. Nature 520, 171–179.

Scire, J.S., Strimaitis, D.G., Yamartino, R.J., others, 2000. A user's guide for the CALPUFF dispersion model. Earth Tech, Inc. Concord, MA .

Segers, A.J., Heemink, A.W., Verlaan, M., van Loon, M., 2000. A modified rrsqrt-filter for assimilating data in atmospheric chemistry models. Environmental Modelling & Software 15, 663–671.

Sehmel, G.A., 1980. Particle and gas dry deposition : A review. Atmospheric Environment (1967) 14, 983–1011.

Seinfeld, J.H., 1986. Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution. 1 edition ed., Wiley-Interscience, New York.

Seinfeld, J.H., Pandis, S.N., 2016. Atmospheric Chemistry and Physics : From Air Pollution to Climate Change. John Wiley & Sons.

Self, S., Zhao, J.X., Holasek, R.E., Torres, R.C., King, A.J., 1993. The Atmospheric Impact of the 1991 Mount Pinatubo Eruption. Technical Report.

Seo, S., Hwang, Y., 2001. Estimation of CO2 Emissions in Life Cycle of Residential Buildings. Journal of Construction Engineering and Management 127, 414–418.

Shang, Y., Sun, Z., Cao, J., Wang, X., Zhong, L., Bi, X., Li, H., Liu, W., Zhu, T., Huang, W., 2013. Systematic review of Chinese studies of short-term exposure to air pollution and daily mortality. Environment International 54, 100–111.

Sharma, M., Kishore, S., Tripathi, S.N., Behera, S.N., 2007. Role of atmospheric ammonia in the formation of inorganic secondary particulate matter : A study at Kanpur, India. Journal of Atmospheric Chemistry 58, 1–17.

Shaw, E.C., McNeil, B.I., Tilbrook, B., 2012. Impacts of ocean acidification in naturally variable coral reef flat ecosystems. Journal of Geophysical Research : Oceans 117.

Shi, G.L., Li, X., Feng, Y.C., Wang, Y.Q., Wu, J.H., Li, J., Zhu, T., 2009. Combined source apportionment, using positive matrix factorization–chemical mass balance and principal component analysis/multiple linear regression–chemical mass balance models. Atmospheric Environment 43, 2929–2937.

Sicardi, V., Ortiz, J., Rincón, A., Jorba, O., Pay, M.T., Gassó, S., Baldasano, J.M., 2012. Assessment of Kalman filter bias-adjustment technique to improve the simulation of ground-level ozone over Spain. Science of The Total Environment 416, 329–342.

Silver, J.D., Brandt, J., Hvidberg, M., Frydendall, J., Christensen, J.H., 2013a. Assimilation of OMI NO2 retrievals into the limited-area chemistry-transport model DEHM (V2009.0) with a 3-D OI algorithm. Geosci. Model Dev. 6, 1–16.

Silver, J.D., Ketzel, M., Brandt, J., 2013b. Dynamic parameter estimation for a street canyon air quality model. Environmental Modelling & Software 47, 235–252.

Sini, J.F., Anquetin, S., Mestayer, P.G., 1996. Pollutant dispersion and thermal effects in urban street canyons. Atmospheric environment 30, 2659–2677.

Siour, G., Colette, A., Menut, L., Bessagnet, B., Coll, I., Meleux, F., 2013. Bridging the scales in a eulerian air quality model to assess megacity export of pollution. Environmental modelling & software 46, 271–282.

Sivacoumar, R., Bhanarkar, A.D., Goyal, S.K., Gadkari, S.K., Aggarwal, A.L., 2001. Air pollution modeling for an industrial complex and model performance evaluation. Environmental Pollution 111, 471–477.

Skamarock, W.C., Klemp, J.B., Dudhia, J., Gill, D.O., Barker, D.M., Wang, W., Powers, J.G., 2005. A description of the advanced research WRF version 2. Technical Report. DTIC Document.

Slinn, W.G.N., 1977. Some approximations for the wet and dry removal of particles and gases from the atmosphere. Water, Air, and Soil Pollution 7, 513–543.

Smolarkiewicz, P.K., Grell, G.A., 1992. A class of monotone interpolation schemes. Journal of Computational Physics 101, 431–440.

Sofiev, M., Siljamo, P., Ranta, H., Linkosalo, T., Jaeger, S., Rasmussen, A., Rantio-Lehtimaki, A., Severova, E., Kukkonen, J., 2012. A numerical model of birch pollen emission and dispersion in the atmosphere. Description of the emission module. International Journal of Biometeorology 57, 45–58.

Solazzo, E., Bianconi, R., Vautard, R., Appel, K.W., Moran, M.D., Hogrefe, C., Bessagnet, B., Brandt, J., Christensen, J.H., Chemel, C., Coll, I., Denier van der Gon, H., Ferreira, J., Forkel, R., Francis, X.V., Grell, G., Grossi, P., Hansen, A.B., Jeričević, A., Kraljević, L., Miranda, A.I., Nopmongcol, U., Pirovano, G., Prank, M., Riccio, A., Sartelet, K.N., Schaap, M., Silver, J.D., Sokhi, R.S., Vira, J., Werhahn, J., Wolke, R., Yarwood, G., Zhang, J., Rao, S.T., Galmarini, S., 2012. Model evaluation and ensemble modelling of surface-level ozone in Europe and North America in the context of AQMEII. Atmospheric Environment 53, 60–74.

Solomon, S., 1999. Stratospheric ozone depletion : A review of concepts and history. Reviews of Geophysics 37, 275–316.

Song, H., Hoteit, I., Cornuelle, B.D., Subramanian, A.C., 2010. An Adaptive Approach to Mitigate Background Covariance Limitations in the Ensemble Kalman Filter. Monthly Weather Review 138, 2825–2845.

Song, Y., Xie, S., Zhang, Y., Zeng, L., Salmon, L.G., Zheng, M., 2006. Source apportionment of PM2.5 in Beijing using principal component analysis/absolute principal component scores and UNMIX. Science of The Total Environment 372, 278–286.

Soriano, A., Pallarés, S., Pardo, F., Vicente, A.B., Sanfeliu, T., Bech, J., 2012. Deposition of heavy metals from particulate settleable matter in soils of an industrialised area. Journal of Geochemical Exploration 113, 36–44.

Soriano, C., Jorba, O., Baldasano, J.M., 2004. One-Way Nesting Versus Two-Way Nesting : Does It Really Make a Difference ?, in : Borrego, C., Schayes, G. (Eds.), Air Pollution Modeling and Its Application XV. Springer US, pp. 177–185.

Soulhac, L., 2000. Modélisation de la dispersion atmosphérique à l'intérieur de la canopée urbaine. Ecully, Ecole centrale de Lyon.

Soulhac, L., Garbero, V., Salizzoni, P., Mejean, P., Perkins, R.J., 2009. Flow and dispersion in street intersections. Atmospheric Environment 43, 2981–2996.

Soulhac, L., Lamaison, G., Cierco, F.X., Ben Salem, N., Salizzoni, P., Mejean, P., Armand, P., Patryl, L., 2016. SIRANERISK : Modelling dispersion of steady and unsteady pollutant releases in the urban canopy. Atmospheric Environment 140, 242–260.

Soulhac, L., Mejean, P., Perkins, R., 2001. Modelling the transport and dispersion of pollutants in street canyons. International journal of environment and pollution 16, 404–413.

Soulhac, L., Perkins, R.J., Salizzoni, P., 2008. Flow in a Street Canyon for any External Wind Direction. Boundary-Layer Meteorology 126, 365–388.

Soulhac, L., Puel, C., Duclaux, O., Perkins, R.J., 2003. Simulations of atmospheric pollution in Greater Lyon an example of the use of nested models. Atmospheric Environment 37, 5147–5156.

Soulhac, L., Salizzoni, P., 2010. Dispersion in a street canyon for a wind direction parallel to the street axis. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics 98, 903–910.

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

Soulhac, L., Salizzoni, P., Mejean, P., Didier, D., Rios, I., 2012. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion ; PART II, validation of the model on a real case study. Atmospheric Environment 49, 320–337.

Soulhac, L., Salizzoni, P., Mejean, P., Perkins, R.J., 2013. Parametric laws to model urban pollutant dispersion with a street network approach. Atmospheric Environment 67, 229–241.

Spinelle, L., Gerboles, M., Villani, M.G., Aleixandre, M., Bonavitacola, F., 2015. Field calibration of a cluster of low-cost available sensors for air quality monitoring. part a : Ozone and nitrogen dioxide. Sensors and Actuators B : Chemical 215, 249–257.

Sportisse, B., 2007. A review of parameterizations for modelling dry deposition and scavenging of radionuclides. Atmospheric Environment 41, 2683–2698.

Sportisse, B., 2008. Pollution atmosphérique : des processus à la modélisation. Springer Science & Business Media.

Srinivasan, A., Chassignet, E.P., Bertino, L., Brankart, J.M., Brasseur, P., Chin, T.M., Counillon, F., Cummings, J.A., Mariano, A.J., Smedstad, O.M., Thacker, W.C., 2011. A comparison of sequential assimilation schemes for ocean prediction with the HYbrid Coordinate Ocean Model (HYCOM) : Twin experiments with static forecast error covariances. Ocean Modelling 37, 85–111.

Srivastava, R., McRae, D., Odman, M., 2001. Simulation of dispersion of a power plant plume using an adaptive grid algorithm. Atmospheric Environment 35, 4801–4818.

Srivastava, R.K., McRae, D., Odman, M., 2000. An adaptive grid algorithm for air-quality modeling. Journal of Computational Physics 165, 437–472.

Stedman, D.H., 1989. Automobile carbon monoxide emission. Environmental Science & Technology 23, 147–149.

Stelson, A.W., Seinfeld, J.H., 1982. Relative humidity and temperature dependence of the ammonium nitrate dissociation constant. Atmospheric Environment (1967) 16, 983–992.

Stocker, J., Hood, C., Carruthers, D., McHugh, C., 2012. ADMS-Urban : Developments in modelling dispersion from the city scale to the local scale. International Journal of Environment and Pollution 50, 308–316.

Stohl, A., Forster, C., Frank, A., Seibert, P., Wotawa, G., 2005. Technical note : The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 6.2. Atmos. Chem. Phys. 5, 2461–2474.

Straif, K., Cohen, A., Samet, J., *et al.*, 2013. Air pollution and cancer. International Agency for Research on Cancer scientific publication 161.

Streets, D.G., Waldhoff, S.T., 2000. Present and future emissions of air pollutants in China : : SO2, NOx, and CO. Atmospheric Environment 34, 363–374.

Stull, R.B., 1988. An Introduction to Boundary Layer Meteorology. Springer Science & Business Media.

Subramanian, R., Donahue, N.M., Bernardo-Bricker, A., Rogge, W.F., Robinson, A.L., 2006. Contribution of motor vehicle emissions to organic carbon and fine particle mass in Pittsburgh, Pennsylvania : Effects of varying source profiles and seasonal trends in ambient marker concentrations. Atmospheric Environment 40, 8002–8019.

Subramanian, R., Donahue, N.M., Bernardo-Bricker, A., Rogge, W.F., Robinson, A.L., 2007. Insights into the primary–secondary and regional–local contributions to organic aerosol and PM2.5 mass in Pittsburgh, Pennsylvania. Atmospheric Environment 41, 7414–7433.

Swinbank, R., Shutyaev, V., Lahoz, W.A., 2003. Data Assimilation for the Earth System. Springer Science & Business Media.

Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov, T., 2013. Downscaling of Bulgarian chemical weather forecast from Bulgaria region to Sofia city, pp. 120–132.

Szopa, S., Foret, G., Menut, L., Cozic, A., 2009. Impact of large scale circulation on european summer surface ozone and consequences for modelling forecast. Atmospheric Environment 43, 1189–1195.

Talagrand, O., 1997. Assimilation of observations, an introduction. Journal of the Meteorological Society of Japan 75, 191–209.

Tang, Y., Carmichael, G.R., Thongboonchoo, N., Chai, T., Horowitz, L.W., Pierce, R.B., Al-Saadi, J.A., Pfister, G., Vukovich, J.M., Avery, M.A., Sachse, G.W., Ryerson, T.B., Holloway, J.S., Atlas, E.L., Flocke, F.M., Weber, R.J., Huey, L.G., Dibb, J.E., Streets, D.G., Brune, W.H., 2007. Influence of lateral and top boundary conditions on regional air quality prediction : A multiscale study coupling regional and global chemical transport models. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 112, n/a–n/a.

Tarrasón, L., Semb, A., Hjellbrekke, A.G., Tsyro, S., Schaug, J., Bartnicki, J., Solberg, S., 1998. Geographical distribution of sulphur and nitrogen compounds in Europe derived both from modelled and observed concentrations. The Norwegian Meteorological Institute, Oslo, Norway (EMEP/MSC-W Note 4/98) .

Tchepel, O., Costa, A., Martins, H., Ferreira, J., Monteiro, A., Miranda, A., Borrego, C., 2010. Determination of background concentrations for air quality models using spectral analysis and filtering of monitoring data. Atmospheric Environment 44, 106–114.

Theurer, W., 1999. Typical building arrangements for urban air pollution modelling. Atmospheric Environment 33, 4057–4066.

Thunis, P., Pernigotti, D., Gerboles, M., 2013. Model quality objectives based on measurement uncertainty. Part I : Ozone. Atmospheric environment 79, 861–868.

Tilloy, A., Mallet, V., Poulet, D., Pesin, C., Brocheton, F., 2013. BLUE-based NO 2 data assimilation at urban scale. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 118, 2031–2040.

Tinarelli, G., Brusasca, G., Oldrini, O., Anfossi, D., Castelli, S.T., Moussafir, J., 2007. Micro-Swift-Spray (MSS) : A New Modelling System for the Simulation of Dispersion at Microscale. General Description and Validation, in : Borrego, C., Norman, A.L. (Eds.), Air Pollution Modeling and Its Application XVII. Springer US, pp. 449–458.

Tombette, M., Mallet, V., Sportisse, B., 2009. PM10 data assimilation over Europe with the optimal interpolation method. Atmos. Chem. Phys. 9, 57–70.

Tombrou, M., Bossioli, E., Protonotariou, A.P., Flocas, H., Giannakopoulos, C., Dandou, A., 2009. Coupling GEOS-CHEM with a regional air pollution model for Greece. Atmospheric Environment 43, 4793–4804.

Tomlin, A., Berzins, M., Ware, J., Smith, J., Pilling, M.J., 1997. On the use of adaptive gridding methods for modelling chemical transport from multi-scale sources. Atmospheric Environment 31, 2945–2959.

Tomlin, A.S., Ghorai, S., Hart, G., Berzins, M., 2000. 3-D Multi-scale air pollution modelling using adaptive unstructured meshes. Environmental Modelling & Software 15, 681–692.

Tuan Pham, D., Verron, J., Christine Roubaud, M., 1998. A singular evolutive extended Kalman filter for data assimilation in oceanography. Journal of Marine Systems 16, 323–340.

Turner, M.C., Krewski, D., Pope, C.A., Chen, Y., Gapstur, S.M., Thun, M.J., 2011. Long-term Ambient Fine Particulate Matter Air Pollution and Lung Cancer in a Large Cohort of Never-Smokers. American Journal of Respiratory and Critical Care Medicine 184, 1374–1381.

Uchida, T., Ohya, Y., 1999. Numerical simulation of atmospheric flow over complex terrain. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics 81, 283–293.

UN, 2014. World urbanization prospects : The 2014 revision, Highlights. Technical Report.

Vachon, G., Louka, P., Rosant, J., Mestayer, P., Sini, J., 2002. Measurements of traffic-induced turbulence within a street canyon during the nantes' 99 experiment. Water, Air and Soil Pollution : Focus 2, 127–140.

Vainonen, J.P., Kangasjärvi, J., 2015. Plant signalling in acute ozone exposure. Plant, Cell & Environment 38, 240–252.

Vallero, D., 2014. Fundamentals of Air Pollution. Academic Press.

Van Donkelaar, A., Martin, R.V., Brauer, M., Boys, B.L., 2015. Use of satellite observations for long-term exposure assessment of global concentrations of fine particulate matter. Ph.D. thesis. University of British Columbia.

Van Leeuwen, E.P., Draaijers, G.P.J., Erisman, J.W., 1996. Mapping wet deposition of acidifying components and base cations over Europe using measurements. Atmospheric Environment 30, 2495–2511.

Van Loon, M., Heemink, A.W., 1997. Kalman filtering for nonlinear atmospheric chemistry models : first experiences. Report-Modelling, analysis and simulation , 1–17.

Vardoulakis, S., Fisher, B.E.A., Pericleous, K., Gonzalez-Flesca, N., 2003. Modelling air quality in street canyons : a review. Atmospheric Environment 37, 155–182.

Vautard, R., Maidi, M., Menut, L., Beekmann, M., Colette, A., 2007. Boundary layer photochemistry simulated with a two-stream convection scheme. Atmospheric Environment 41, 8275–8287.

Vedula, V.S., Krishna, M., Paul, Y., Murty, V., 2015. Observed changes in ocean acidity and carbon dioxide exchange in the coastal bay of bengal-a link to air pollution. Tellus B 67.

van Velzen, N., Segers, A.J., 2010. A problem-solving environment for data assimilation in air quality modelling. Environmental Modelling & Software 25, 277–288.

Vendel, F., 2011. Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes : application à l'étude de sites industriels. Ph.D. thesis. Ecole Centrale de Lyon.

Venkatram, A., 1992. Vertical dispersion of ground-level releases in the surface boundary layer. Atmospheric Environment. Part A. General Topics 26, 947–949.

Viana, M., Kuhlbusch, T.A.J., Querol, X., Alastuey, A., Harrison, R.M., Hopke, P.K., Winiwarter, W., Vallius, M., Szidat, S., Prévôt, A.S.H., Hueglin, C., Bloemen, H., Wåhlin, P., Vecchi, R., Miranda, A.I., Kasper-Giebl, A., Maenhaut, W., Hitzenberger, R., 2008. Source apportionment of particulate matter in Europe : A review of methods and results. Journal of Aerosol Science 39, 827–849.

Vidard, A., 2001. Vers une prise en compte des erreurs-modèle en assimilation de données 4D-variationnelle. Application à un modèle réaliste d'océan. Ph.D. thesis. Université Joseph-Fourier-Grenoble I.

Voldner, E.C., Barrie, L.A., Sirois, A., 1986. A literature review of dry deposition of oxides of sulphur and nitrogen with emphasis on long-range transport modelling in North America. Atmospheric Environment (1967) 20, 2101–2123.

Vos, P.E., Maiheu, B., Vankerkom, J., Janssen, S., 2013. Improving local air quality in cities : to tree or not to tree ? Environmental pollution 183, 113–122.

Wagstrom, K.M., Pandis, S.N., Yarwood, G., Wilson, G.M., Morris, R.E., 2008. Development and application of a computationally efficient particulate matter apportionment algorithm in a three-dimensional chemical transport model. Atmospheric Environment 42, 5650–5659.

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

Wang, S.X., Zhao, B., Cai, S.Y., Klimont, Z., Nielsen, C.P., Morikawa, T., Woo, J.H., Kim, Y., Fu, X., Xu, J.Y., Hao, J.M., He, K.B., 2014. Emission trends and mitigation options for air pollutants in East Asia. Atmos. Chem. Phys. 14, 6571–6603.

Wang, X., Mallet, V., Berroir, J.P., Herlin, I., 2011. Assimilation of OMI NO2 retrievals into a regional chemistry-transport model for improving air quality forecasts over Europe. Atmospheric Environment 45, 485–492.

Wang, Z., Maeda, T., Hayashi, M., Hsiao, L.F., Liu, K.Y., 2001. A Nested Air Quality Prediction Modeling System for Urban and Regional Scales : Application for High-Ozone Episode in Taiwan. Water, Air, and Soil Pollution 130, 391–396.

Wang, Z.S., Chien, C.J., Tonnesen, G.S., 2009. Development of a tagged species source apportionment algorithm to characterize three-dimensional transport and transformation of precursors and secondary pollutants. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 114, D21206.

Watson, J.G., 1984. Overview of receptor model principles. Journal of the Air Pollution Control Association 34, 619–623.

Weil, J.C., 1985. Updating Applied Diffusion Models. Journal of Climate and Applied Meteorology 24, 1111–1130.

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

WHO, 2000. Air quality guidelines for Europe. Technical Report. World Health Organization.

WHO, 2006. Air quality guidelines : global update 2005 : particulate matter, ozone, nitrogen dioxide, and sulfur dioxide. World Health Organization.

WHO, 2013. Outdoor air pollution a leading environmental cause of cancer deaths. World Health Organization, Press release 221.

WHO, 2014. 7 million premature deaths annually linked to air pollution. World Health Organization, Geneva, Switzerland .

WHO, 2015. Economic cost of the health impact of air pollution in europe : Clean air, health and wealth. World Health Organization Regional office for Europe, Copenhagen .

WHO, 2016. Ambient Air Pollution Database. Technical Report. World Health Organization.

Wilczak, J., McKeen, S., Djalalova, I., Grell, G., Peckham, S., Gong, W., Bouchet, V., Moffet, R., McHenry, J., McQueen, J., Lee, P., Tang, Y., Carmichael, G.R., 2006. Bias-corrected ensemble and probabilistic forecasts of surface ozone over eastern North America during the summer of 2004. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 111, D23S28.

Wilkinson, S., Mills, G., Illidge, R., Davies, W.J., 2012. How is ozone pollution reducing our food supply ? Journal of Experimental Botany 63, 527–536.

Wilson, R.C., Fleming, Z.L., Monks, P.S., Clain, G., Henne, S., Konovalov, I.B., Szopa, S., Menut, L., 2012. Have primary emission reduction measures reduced ozone across Europe ? An analysis of European rural background ozone trends 1996–2005. Atmos. Chem. Phys. 12, 437–454.

Wu, L., Mallet, V., Bocquet, M., Sportisse, B., 2008. A comparison study of data assimilation algorithms for ozone forecasts. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 113, D20310.

Xi, X., Wei, Z., Xiaoguang, R., Yijie, W., Xinxin, B., Wenjun, Y., Jin, D., 2015. A comprehensive evaluation of air pollution prediction improvement by a machine learning method, in : Service Operations And Logistics, And Informatics (SOLI), 2015 IEEE International Conference on, pp. 176–181.

Xie, J., Zhu, J., 2010. Ensemble optimal interpolation schemes for assimilating Argo profiles into a hybrid coordinate ocean model. Ocean Modelling 33, 283–298.

Xing, J., Wang, J., Mathur, R., Pleim, J., Wang, S., Hogrefe, C., Gan, C.M., Wong, D.C., Hao, J., 2016. Unexpected Benefits of Reducing Aerosol Cooling Effects. Environmental Science & Technology 50, 7527–7534.

Yamartino, R.J., Scire, J.S., Carmichael, G.R., Chang, Y.S., 1992. The CALGRID mesoscale photochemical grid model—I. Model formulation. Atmospheric Environment. Part A. General Topics 26, 1493–1512.

Yamartino, R.J., Wiegand, G., 1986. Development and evaluation of simple models for the flow, turbulence and pollutant concentration fields within an urban street canyon. Atmospheric Environment (1967) 20, 2137–2156.

Yang, J., Duan, K., Kang, S., Shi, P., Ji, Z., 2016. Potential feedback between aerosols and meteorological conditions in a heavy pollution event over the Tibetan Plateau and Indo-Gangetic Plain. Climate Dynamics , 1–17.

Yarwood, G., Morris, R.E., Wilson, G.M., 2007. Particulate Matter Source Apportionment Technology (PSAT) in the CAMx Photochemical Grid Model, in : Borrego, C., Norman, A.L. (Eds.), Air Pollution Modeling and Its Application XVII. Springer US, pp. 478–492.

Yendrek, C.R., Leisner, C.P., Ainsworth, E.A., 2013. Chronic ozone exacerbates the reduction in photosynthesis and acceleration of senescence caused by limited n availability in nicotiana sylvestris. Global change biology 19, 3155–3166.

Yim, S.H.L., Fung, J.C.H., Lau, A.K.H., 2010. Use of high-resolution MM5/CALMET/CALPUFF system : SO2 apportionment to air quality in Hong Kong. Atmospheric Environment 44, 4850–4858.

Ying, Q., Kleeman, M.J., 2006. Source contributions to the regional distribution of secondary particulate matter in California. Atmospheric Environment 40, 736–752.

Zeng, X., Chen, X., Zhuang, J., 2015. The positive relationship between ocean acidification and pollution. Marine pollution bulletin 91, 14–21.

Zhang, D.L., Chang, H.R., Seaman, N.L., Warner, T.T., Fritsch, J.M., 1986. A Two-Way Interactive Nesting Procedure with Variable Terrain Resolution. Monthly Weather Review 114, 1330–1339.

Zhang, L., Wright, L.P., Blanchard, P., 2009. A review of current knowledge concerning dry deposition of atmospheric mercury. Atmospheric Environment 43, 5853–5864.

Zhang, Y., Bocquet, M., Mallet, V., Seigneur, C., Baklanov, A., 2012. Real-time air quality forecasting, part II : State of the science, current research needs, and future prospects. Atmospheric Environment 60, 656–676.

Zhao, B., Wang, S.X., Liu, H., Xu, J.Y., Fu, K., Klimont, Z., Hao, J.M., He, K.B., Cofala, J., Amann, M., 2013. NOx emissions in China : historical trends and future perspectives. Atmos. Chem. Phys. 13, 9869–9897.

Zheng, J., Zhu, J., Wang, Z., Fang, F., Pain, C., Xiang, J., 2015. Towards a new multiscale air quality transport model using the fully unstructured anisotropic adaptive mesh technology of fluidity (version 4.1. 9). Geoscientific Model Development 8, 3421–3440.

Zubrow, A., Chen, L., Kotamarthi, V.R., 2008. EAKF-CMAQ : Introduction and evaluation of a data assimilation for CMAQ based on the ensemble adjustment Kalman filter. Journal of Geophysical Research : Atmospheres 113, D09302.

Zyryanov, D., Foret, G., Eremenko, M., Beekmann, M., Cammas, J.P., D'Isidoro, M., Elbern, H., Flemming, J., Friese, E., Kioutsioutkis, I., Maurizi, A., Melas, D., Meleux, F., Menut, L., Moinat, P., Peuch, V.H., Poupkou, A., Razinger, M., Schultz, M., Stein, O., Suttie, A.M., Valdebenito, A., Zerefos, C., Dufour, G., Bergametti, G., Flaud, J.M., 2012. 3-D evaluation of tropospheric ozone simulations by an ensemble of regional Chemistry Transport Model. Atmos. Chem. Phys. 12, 3219–3240.

dernière page de la thèse

AUTORISATION DE SOUTENANCE

Vu les dispositions de l'arrêté du 25 mai 2016,

Vu la demande du Directeur de Thèse

Monsieur L. SOULHAC

et les rapports de

M. B. BESSAGNET
Docteur HRD - INERIS - Parc Technologique ALTA - 60550 Verneuil en Halatte

et de

M. A. CLAPPIER
Professeur - Faculté de Géographie et d'Aménagement - 3 rue de l'Argonne - 67000 Strasbourg

Monsieur NGUYEN Chi-Vuong

est autorisé à soutenir une thèse pour l'obtention du grade de **DOCTEUR**

Ecole doctorale MECANIQUE, ENERGETIQUE, GENIE CIVIL ET ACOUSTIQUE

Fait à Ecully, le 10 mai 2017

P/Le directeur de l'E.C.L.
La directrice des Etudes

ECOLE CENTRALE DE LYON
Service Scolarité
ECULLY

M-A. GALLAND