

Guide méthodologique en modélisation déterministe

Rapport final

Laboratoire Central de Surveillance
de la Qualité de l’Air

Janvier 2002

**LAURENCE ROUÏL
ANDRE WROBLEWSKI**



1 RESUME

Le but de cette mission est d'élaborer un document de référence à l'usage des AASQA qui souhaitent mettre en œuvre des outils de modélisation déterministes. Il s'agit de répondre aux différentes questions inhérentes à leur utilisation : domaine d'application, élaboration des bases de données d'entrée (météorologie et émissions), type d'approche numérique, résultats attendus ... Une attention particulière a également été portée aux questions de mise en œuvre opérationnelle de ces outils (coût, moyens humains, société distributrices...).

Le document rédigé s'articule autour de deux grands chapitres :

La partie « généralités sur la modélisation déterministe de la qualité de l'air » aborde le problème de la modélisation déterministe dans son ensemble, par une partie introductive sur les différents types de modèles en fonction des objectifs visés. " Une grille de lecture " a été établie, dont le but est d'aider l'association à diagnostiquer, en fonction de ses objectifs affichés et de ses moyens, la démarche qu'il semble le plus pertinent de mettre en place. Des paragraphes plus ciblés sur les applications suivent, et fournissent une description précise de la problématique envisagée, et des modèles disponibles pour y répondre :

Impact des installations industrielles,
Impact local (échelle de la rue),
Impact urbain (échelle de l'agglomération),
Impact régional.

Dans tous les cas les avantages et les inconvénients des méthodes de modélisation à mettre en œuvre sont décrits, en s'appuyant sur une bibliographie internationale importante.

La deuxième partie « **Mise en œuvre pratique** » relève de l'application des concepts précédemment exposés. Les thèmes abordés portent sur :

Les données d'émission (rédigé en collaboration avec le CITEPA),
La météorologie (données nécessaires et disponibles pour la modélisation)
La phase de calage des modèles,
La validation et les incertitudes.

Des annexes techniques fournissent une description mathématique théorique des différents modèles cités dans le corps du document :

Modèle gaussien,
Modèle de rue,
Modèle eulérien non réactif,
Modèle eulérien photochimique
Modèle continental

De plus quelques notions météorologiques simples sont également fournies de manière à sensibiliser le lecteur sur les facteurs prépondérants en matière de qualité de l'air.

TABLE DES MATIERES

1	RESUME	2
2	GLOSSAIRE.....	6
3	INTRODUCTION.....	7
3.1	Contexte	7
	Le contexte réglementaire	7
	Les besoins des AASQA.....	8
3.2	la modélisation déterministe dans les réseaux de mesure	8
3.3	La modélisation déterministe	9
3.4	Le guide méthodologique.....	10
4	Différents types de modèles en fonction des Objectifs	12
4.1	Introduction	12
4.2	Les différents types de modèles disponibles.....	13
	Les “ modèles boîtes ” (ou box models).....	13
	Les modèles déduits de l'observation	14
	Les modèles gaussiens de dispersion	14
	Les modèles lagrangiens	15
	Les modèles eulériens	16
4.3	Synthèse et grille de lecture	18
	Tableau récapitulatif :	19
	Grille de lecture.....	20
5	Impact des installations Industrielles.....	21
5.1	Problématique	21
	Champ d'application	21
	Les polluants concernés	21
	Remarque sur l'état de l'art.....	22
5.2	Les données d'entrée.....	22
	Les sources.....	22
	Le site et la météorologie	23
	Quels outils et quels investissements	25
	Tableau récapitulatif : Impact industriel	30
6	Impact au niveau de la rue	31
6.1	Problématique	31
	Champ d'application	31
	Les polluants concernés	32
	Généralités sur les phénomènes observés	32
6.2	Les données d'entrée.....	34
	Les sources.....	34

Le site et la météorologie	35
6.3 Quels outils et quels investissements.....	36
Approches empiriques basées sur les observations	36
Modèles analytiques.....	37
Modèles tridimensionnels	38
Modèles de screening.....	40
Tableau récapitulatif : Pollution au niveau de la rue	42
7 Du quartier à l'agglomération	43
7.1 Problématique	43
Champ d'application	43
Les polluants concernés	44
Généralités sur les phénomènes observés	45
7.2 Les données d'entrée.....	46
Les sources.....	46
Le site et la météorologie	47
7.3 Quels outils et quels investissements.....	48
Approches empiriques basées sur les observations	48
Modèles gaussiens.....	49
Modèles tridimensionnels	51
Conclusions.....	53
Tableau récapitulatif : Impact sur zone urbaine	54
8 L'impact régional	55
8.1 Problématique	55
Champ d'application	55
Les polluants concernés	56
Généralités sur les phénomènes observés	56
8.2 Les données d'entrée.....	57
Les sources.....	57
Domaine de calcul.....	57
8.3 Quels outils et quels investissements.....	57
Généralités	58
Conclusions.....	59
Tableau récapitulatif : Impact régional	60
9 Les inventaires d'émission	62
9.1 Introduction.....	62
9.2 Généralités sur les inventaires/cadastres d'émission	63
Définition du problème	63
Choix de la méthode d'estimation des sources.....	64
Collecte des données et des informations.....	65
Traitement des données et allocation spatio-temporelle.....	65
Validation et formatage des résultats finaux	66
9.3 Recommandations générales pour la réalisation des inventaires.....	66
10 Les données météorologiques	70

10.1	Informations mesurées.....	70
	Mesures par station fixe	70
	Anémomètre ultrasonique	70
	Sodar et Rass	72
	Radiosondage	72
10.2	Sorties de modèles numériques	72
11	Evaluation des modélisations et Incertitude des résultats.....	74
11.1	Introduction.....	74
11.2	La comparaison mesures – calcul.	75
	Nature des mesures à utiliser.....	75
	Nombre de points de mesure.....	75
	Représentativité de la mesure.....	76
	Comparaison entre chaque point de mesure et le calcul au point correspondant,	76
	Comparaison entre chaque point de mesure et le “ plus proche voisin ” dans le temps et dans l’espace,.....	77
11.3	Indicateurs permettant de quantifier la performance	77
	Utilisation d’indices statistiques.....	77
	Utilisation d’indices graphiques.....	79
	Les analyses de sensibilité	80
11.4	Recommandations pour l’évaluation des modèles à des fins opérationnelles	80
12	Le calage des modèles.....	82
12.1	Introduction et définitions.....	82
12.2	Mise en œuvre du calage.....	82
	Difficultés.....	82
	Méthodologie	83
12.3	Conclusions	84
13	Bibliographie	85

2 GLOSSAIRE

AASQA	Associations Agréées de surveillance de la Qualité de l’Air
ADEME	Agence de l’Environnement et de la Maîtrise de l’Énergie
CCC	Chemical Coordination Center
CERC	Cambridge Environmental Research Consultants
CETE	Centre d’Etudes Techniques de l’Équipement
CFC	Chlorofluorocarbone
CFD	Computational Fluid Dynamics
CH₄	Méthane
CITEPA	Centre Interprofessionnel Technique d’Etudes de la Pollution Atmosphérique
CLA	Couche limite atmosphérique
CO	Monoxyde de carbone
CO₂	Dioxyde de carbone
COPERT	Computer Programme to calculate Emissions from Road Transport
CORINAIR	CORe Inventory of AIR pollution in Europe
COST	CO-operation in the field of Scientific and Technical research
COV	Composés Organiques Volatils
DDE	Direction Départementale de l’Équipement
DRIRE	Direction Régionale de l’Industrie de la Recherche et de l’Environnement
ECMWF	European Center of Medium Scale Weather Forecast
EMEP	Co-operative Programme for Monitoring and Evaluation of the Long Range Transmission of Air Pollutants in Europe
ETC-AQ	European Topic Center – Air Quality
FB	Fractional Bias
FMI	Finnish Meteorological Institute
GSP	Grande Source Ponctuelle
H₂O	Eau
HAP	Hydrocarbure Aromatique Polycyclique
HR	Humidité relative
ICPE	Installations Classées pour la Protection de l’Environnement
INSEE	Institut National de la Statistique et des Etudes Economiques
L	Monin Obukhov
MATE	Ministère de l’Aménagement du Territoire et de l’Environnement
MDS	Model Documentation Système
NILU	Norsk institutt for luftforskning (Institut norvégien de recherche sur l’air)
NMSE	Normalised Mean Square Error
NNR	Normalised-Normalised ratio
OMS	Organisation Mondiale de la Santé (en anglais : World Health Organization)
PDU	Plan de Déplacement Urbain
PPA	Plan de Protection de l’Atmosphère
PRQA	Plan Régional de la Qualité de l’Air
PS	Particules en suspension
RMSE	Root Mean Square Error
SIG	Système d’Information Géographique
SMHI	Swedish Meteorological and Hydrological Institute
SNAP	Selected Nomenclature for Air Pollution
u*	Vitesse de frottement
US EPA	United States Environmental Protection Agency- Agence Nationale de Protection de l’Environnement des Etats Unis
WNR	Weighted Normalised Ratio

3 INTRODUCTION

3.1 CONTEXTE

Le contexte réglementaire

Le développement des sites d'industrialisation, la croissance de la population dans les zones urbaines et l'extension des réseaux de transport, l'influence de conditions météorologiques ou topographiques spécifiques sont autant de facteurs influençant grandement la Qualité de l'Air. Les impacts de la pollution de l'air sur la santé humaine et l'environnement justifient toute l'attention que les pouvoirs publics leur consacrent depuis plusieurs années. Ainsi la Loi sur l'Air et l'Utilisation Rationnelle de l'Energie (décembre 1996), afin d'évaluer, préserver et améliorer la Qualité de l'Air sur l'ensemble du territoire, impose la mise en place de stratégies locales telles que les PRQA (Plan Régional de la Qualité de l'Air), les PPA (Plan de Protection de l'Atmosphère) et les PDU (Plan de Déplacement Urbain). Elles ont pour but de déterminer les structures nécessaires à l'évaluation et à la surveillance de la qualité de l'air, et les politiques urbaines et régionales destinées à la réduction des émissions polluantes afin de répondre aux objectifs réglementaires.

La mesure des polluants atmosphériques par un réseau de stations fixes constitue la source privilégiée d'éléments de réponse à ces questions. Cependant il est illusoire, autant pour des raisons techniques que financières de quadriller suffisamment finement l'ensemble du territoire, et d'autres moyens d'évaluation doivent être envisagés. Des campagnes de mesures à l'aide de tubes passifs ou de moyens mobiles, définies dans un laps de temps déterminés offrent une information ponctuelle souvent pertinente mais parfois difficile à interpréter (représentativité dans le temps). La modélisation numérique des phénomènes de transfert et de transformation des polluants peut constituer une réponse appropriée à au moins trois types de questions stratégiques:

- les zones non ou peu couvertes par le dispositif de surveillance,
- l'impact en terme de réduction des concentrations atmosphériques des scénarios de réduction des émissions polluantes imaginés par les autorités à plus ou moins long terme,
- éventuellement la prévision des pointes de pollution.

La législation européenne¹ prend en compte ces différentes possibilités et affecte même un champ d'application pour chacune d'elle : combinaison des mesures et des résultats de modèle suivant les sites et les niveaux de pollution, possibilité de réduire le nombre de points de mesure fixes grâce à la modélisation dans certains cas, incertitudes admises.

Il est cependant instructif de constater que les recommandations se rapportant à la modélisation restent encore peu précises, faute de disposer d'un retour d'expérience suffisant.

¹ Directive 96/62/CE du 27 septembre 1996 sur l'évaluation et la gestion de la qualité de l'air ambiant
Directive 99/30/CE du 22 avril 1999 sur la fixation des valeurs limites pour l'anhydride sulfureux, le dioxyde d'azote et les oxydes d'azote, les particules et le plomb dans l'air ambiant

Les besoins des AASQA

Les Associations de Surveillance de la Qualité de l’Air, agréées par le Ministère de l’Aménagement du Territoire et de l’Environnement (AASQA) jouent un rôle important dans l’aboutissement des exigences de la Loi sur l’Air et de ses objectifs. Au nombre de 39 à ce jour, elles regroupent l’ensemble des partenaires locaux impliqués dans la gestion de la Qualité de l’Air (collectivités locales, industriels, administrations...). Leur rôle est multiple, il concerne aussi bien :

- la gestion du dispositif technique de mesure,
- la collecte, la validation et le traitement des données issues des stations,
- la détection du dépassement des seuils réglementaires de concentrations en polluants,
- la fourniture d’information aux autorités pour la mise en œuvre de mesures d’alerte et au public,
- la réalisation d’études spécifiques dans le cadre de leur mission de surveillance.

Pour mener à bien l’ensemble de ces missions, les réseaux français assurent le développement et l’exploitation du dispositif de surveillance qui permet d’évaluer la Qualité de l’Air sur tout le territoire. La pollution, quelle que soit la source, (issue des activités industrielles, liée au trafic urbain, ou d’origine domestique) est observée par des stations de mesure. Certaines sont spécialisées dans le suivi des pollutions de fond, d’autres dans le suivi des pollutions de proximité. Les polluants ainsi ciblés, sont des substances primaires telles que le dioxyde de soufre (SO₂), le monoxyde de carbone (CO), les oxydes d’azote (NO_x) et les particules en suspension (PS), et des produits issus de transformations chimiques et photochimiques tels que l’ozone (O₃), mais aussi des substances considérées comme “ nouveaux polluants ” tels que les métaux lourds, ou les HAP.

Cependant, comme souligné dans le paragraphe précédent, la surveillance permanente en différents points du territoire, ne suffit pas à résoudre toutes les questions liées à l’occurrence des épisodes de pollution : prévision des dépassements de seuils, facteurs déterminants dans leur apparition, mesures concrètes et efficaces de réduction de leur intensité. C’est pourquoi les AASQA sont de plus en plus amenées à envisager la mise en œuvre d’outils numériques en complément des mesures effectuées.

Cette démarche revêt une grande diversité suivant les objectifs visés : interpolation de données mesurées afin d’établir des cartographies de la qualité de l’air, prévision des épisodes de pollution, ou diagnostics et analyses de scénarios associés aux approches déterministes. Les techniques numériques applicables pour résoudre ces questions s’étendent des méthodes statistiques ou géostatistiques, basées sur la recherche de relations plus ou moins explicites entre différents paramètres aux méthodes déterministes, qui s’appuient sur la résolution approchée des équations mathématiques caractérisant les phénomènes. C’est précisément cette gamme d’outils que nous nous proposons d’examiner dans le présent document.

3.2 LA MODELISATION DETERMINISTE DANS LES RESEAUX DE MESURE

Les possibilités d’exploitation offertes par les modèles déterministes ont amené les associations à développer un intérêt certain et parfois un savoir-faire important pour la mise en œuvre opérationnelle de ces techniques. En effet, elles permettent de répondre à plusieurs questions au centre de leurs préoccupations :

- Information sur des zones non couvertes,
- Prévision des épisodes de pollution (mesures d'urgence),
- Optimisation du réseau de mesure (nombre de capteurs à mettre en place, localisation optimale, par exemple en vue de l'évaluation de l'exposition de la population ou de la protection des écosystèmes),
- Analyse de scénario (études d'impact, évaluation des stratégies de réduction des émissions polluantes).

La modélisation numérique est certainement la technique la moins coûteuse (comparée aux modèles physiques ou aux mesures en temps réel) et la plus simple à mettre en œuvre pour résoudre l'ensemble des problèmes cités précédemment.

Une enquête réalisée en 1999 par le LCSQA [Rouil et Wroblewski 1999] faisait état de l'expérience des AASQA en matière de modélisation. A cette date, peu d'entre elles disposaient d'une expérience significative sur ce type de produit. Concrètement seule AIRPARIF exploitait une plate-forme régionale de modélisation, et pour quatre autres les travaux étaient largement engagés (ASPA, Air Pays de Loire, Atmo Auvergne, Ascoparg). D'autres associations étaient en phase de réflexion pour s'engager dans une telle démarche, mais cette dernière restait complètement exclue pour plus de la moitié. La méconnaissance du domaine, le coût d'investissement en moyens matériels et surtout humains, et la gestion d'autres priorités telles que l'installation du réseau de mesure expliquent cet état de fait.

Aujourd'hui, une évolution sensible se dessine dans l'intégration de la modélisation déterministe au sein des AASQA. Les progrès scientifiques les plus récents, l'enseignement tiré des expériences nationales (Airparif [Mietlicki et Gombert 1999], programme Primequal [Balkanski et Poisson 2001]), les possibilités offertes par l'informatique autorisent désormais un essor plus important de l'application des techniques numériques. Plusieurs nouvelles initiatives de mise en place d'un programme de modélisation sont en cours: Airlor, Airmarais-Airfobep-Qualitair06, Air LR, Air des 2 Savoie, Coparly, Oramip en sont autant d'exemples. Des efforts croissants de collaboration entre les associations voisines, et avec les organismes locaux participant à l'évaluation de la qualité de l'air (Météo France, CETE, industriels, etc....) sont à ce titre judicieusement déployés.

3.3 LA MODELISATION DETERMINISTE

La modélisation numérique du transport des polluants implique une gamme d'outils très complète permettant de répondre à différentes échelles (de quelques centaines de mètres à plusieurs milliers de kilomètres), à tous les types de problème de transport (dépendance vis à vis du milieu géographique, prise en compte éventuelle des transformations chimiques, problème des particules...). Du plus simple au plus compliqué, les modèles suivants peuvent être utilisés suivant le contexte : modèles boîtes, modèles gaussien simple ou à bouffées, modèles lagrangiens, modèles eulériens non réactifs ou photochimiques.

Ces outils s'intègrent dans une chaîne de calcul comprenant invariablement les mêmes maillons. En effet une modélisation du comportement et de l'évolution des polluants doit s'appuyer sur cinq étapes fondamentales :

- Le recueil des données d'entrée : orographie, occupation des sols, météorologie, calcul des émissions,
- Les calculs du transport, de la dispersion et éventuellement de la transformation des polluants,
- Le calage du modèle
- La vérification du calage et l'évaluation des performances du modèle,

- L'exploitation des résultats produits.

Ces étapes fondamentales forment l'architecture de tous les projets de modélisation et ce guide ambitionne la description de leur traitement.

3.4 LE GUIDE METHODOLOGIQUE

Cet ouvrage tente de consigner les éléments de base de tous les calculs de modélisation afin d'appréhender de la meilleure façon possible un projet de ce type. L'objectif est de recenser à la fois les techniques de base, leur domaine d'application et de décrire les données nécessaires au bon fonctionnement de chaque outil. Dans un souci d'utilisation pratique, les aspects liés aux difficultés et aux coûts de mise en œuvre, sont également largement évoqués.

Pour atteindre cet objectif, ce guide a été structuré en deux parties principales. La première consigne des éléments d'appréciation des différents types de modèles numériques du comportement des polluants atmosphériques. Un paragraphe introductif décline les objectifs de la modélisation déterministe, et les approches disponibles en fonction des besoins. Une " grille de lecture " du problème est également proposée.

Pour permettre au lecteur de mieux appréhender ces concepts de base, les méthodes de traitement des différents domaines d'application sont ensuite déclinées : impact industriel, impact sur la rue, impact sur l'agglomération et impact régional. A ce stade des éléments aidant à la qualification de ces problèmes, les outils numériques associés et leurs contraintes d'utilisation sont décrits². Dans chaque cas un tableau de synthèse est proposé, consignait les données nécessaires, les logiciels disponibles sur le marché, et une évaluation de leur coût d'achat et de mise en œuvre.

La deuxième partie du guide est dédiée à l'utilisation pratique des modèles déterministes. La réalisation de l'inventaire des émissions, l'acquisition des données météorologiques, l'étape de calage et l'évaluation des incertitudes sont les thèmes abordés à ce stade.

Ce document est enfin complété d'annexes techniques détaillant d'un point de vue mathématique et théorique les différents modèles utilisables référencés dans les parties principales : modèles gaussiens, modèles de rue, modèles eulériens avec ou sans photochimie et modèles continentaux. En introduction les recommandations des directives européennes et leur adaptation à la législation française sont également rappelées. Enfin, afin de faciliter la compréhension des techniques décrites dans les parties principales, il nous a semblé important de recadrer un certain nombre de concepts relevant en particulier de la dynamique de l'atmosphère. Ainsi des éléments de définition ciblés sont proposés dans une annexe dédiée à la météorologie ; pour ce qui est des mécanismes chimiques de formation de l'ozone, nous nous référons au rapport LCSQA de [Rouïl et Léo, 1999].

Ce guide a été rédigé dans l'optique d'offrir une vision la plus synthétique possible de l'utilisation des modèles déterministes dans le cadre de la pollution de l'air et de fournir les informations de base aux associations pour appréhender une étude de modélisation du transport des polluants.

² Il est important de noter que cette partie a été conçue comme la compilation d'éléments permettant d'aborder chaque thème indépendamment des autres. Cela entraîne certaines redites, dans une lecture linéaire du texte, qui est cependant volontaire dans la conception du document, en tant que guide technique.

PARTIE I

GENERALITES SUR LA MODELISATION DETERMINISTE DE LA QUALITE DE L'AIR

4 DIFFERENTS TYPES DE MODELES EN FONCTION DES OBJECTIFS

4.1 INTRODUCTION

Les objectifs que l'on se propose d'atteindre en ayant recours aux modèles numériques conditionnent le type de logiciel qui sera mis en œuvre, et par la suite, le type de données d'entrée.

Une première étape consiste donc à qualifier correctement l'étude que l'on souhaite mener. Il s'agit de la définition du cas de calcul. Pour ce faire, une grille de lecture est proposée en fin de chapitre. Elle détaille les points qui méritent d'être correctement identifiés afin de cibler par la suite le logiciel de calcul à appliquer. Ces éléments relèvent essentiellement des questions suivantes :

- *Quels sont les polluants visés* : gaz ou particules, polluants primaire (qui sont censés ne pas interagir avec les autres composants de l'atmosphère) ou polluants secondaires (issus de réactions chimiques ou photochimiques tels que l'ozone).
- *Quelle est la nature des sources prises en compte* : ponctuelle (cheminée d'usine), linéique (trafic routier ou ferroviaire), surfacique (chauffage résidentiel et tertiaire, agrégation de sources linéiques voire ponctuelles) et comment se répartit chacune de ces classes dans le domaine de calcul.
- *Echelle spatiale* : sur quelle surface le domaine de calcul s'étend-il ? Cela peut varier de quelques dizaines à quelques centaines de mètres autour de la source (échelle locale), quelques dizaines à une centaine de kilomètres (échelle urbaine) ou quelques centaines de kilomètres (échelles régionale et continentale).
- *Quel degré de complexité du site souhaite-t-on prendre en compte* ? Il s'agit d'une question étroitement liée à la précédente, relative aux détails de site qui peuvent avoir une influence non négligeable sur les niveaux de concentration : présence d'obstacles ou de bâtiments, complexité du relief, évaluation de la (ou des) rugosité.
- *Echelle temporelle* : Quel est finalement le but de la simulation ? L'analyse d'épisodes de pollution ou d'évènements de pollution accidentelle et l'étude de scénarios alternatifs (réduction des émissions, influence de la nature du rejet). On se place alors dans une logique "court terme" (quelques heures à quelques jours) qui vise à intégrer dans le calcul des données d'entrée (émissions et météorologie) mises à jour avec un pas de temps relativement faible (horaire voire ¼ horaire).
- *Quelle est la finalité du calcul* ? deux situations peuvent schématiquement être considérées :
 - L'analyse des effets chroniques de la pollution afin d'évaluer l'exposition des populations. Les scénarios d'évaluation des risques se calent sur une base temporelle annuelle, voire pluriannuelle. Ainsi les données d'entrée (émissions et météorologie) sont prises en compte sur une période longue de

l'ordre d'une ou plusieurs années. Les émissions sont des valeurs moyennes éventuellement pondérées suivant la saison ou d'autres contraintes. Les données météorologiques sont issues de roses des vents et de roses de stabilité, ou intégrées dans les outils avec un pas de temps horaire ou tri-horaire.

- L'analyse de l'impact maximal ou des concentrations les plus couramment enregistrées issus d'une ou plusieurs sources de polluants (émissions industrielles, plans de déplacements urbains). Le calcul est réalisé pour une situation météorologique et des données d'émission fixées. Il s'agit d'un calcul stationnaire, sans évolution temporelle. Ce type de démarche est très souvent utilisé dans la conduite d'études de danger.

4.2 LES DIFFERENTS TYPES DE MODELES DISPONIBLES

Suivant les réponses que l'on aura apportées aux questions précédentes, des modèles de nature différente peuvent être envisagés. Une liste balayant ces diverses possibilités est donnée ci-dessous. Seul leur contexte général d'application est décrit, les détails de leur formulation mathématique étant livrés dans les annexes.

Le problème de la dispersion de polluants non réactifs peut se traduire par une équation dite de convection/diffusion :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = S + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)$$

où C désigne la concentration en polluant, $\vec{V}(u, v, w)$ est la vitesse de vent, et (K_x, K_y, K_z) les coefficients de diffusion. S est un terme source, représentant l'émission de polluant. Il s'agit de l'équation de base régissant le comportement des polluants dans l'atmosphère, à laquelle tous les modèles se réfèrent de manière plus ou moins explicite.

Lorsque plusieurs composants sont mis en jeu et sont susceptibles de réagir entre eux chimiquement (photochimie, formation d'aérosols secondaires...) cette équation, résolue pour chaque espèce, est modifiée par l'introduction des termes décrivant ces processus. Ainsi pour l'espèce n°i, elle s'écrit:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + u \frac{\partial C_i}{\partial x} + v \frac{\partial C_i}{\partial y} + w \frac{\partial C_i}{\partial z} = S_i + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C_i}{\partial z} \right) + P_i - L_i C_i - V_i C_i$$

P_i désigne les termes de production photochimique de l'espèce i, $L_i C_i$ les termes de destruction de l'espèce i, et $V_i C_i$ son dépôt au niveau du sol.

Les " modèles boîtes " (ou box models)

Il s'agit de l'approche la plus simple que l'on puisse envisager. Toute la surface du domaine de calcul est recouverte par un volume parallélépipédique dans lequel la concentration est supposée uniforme. La hauteur de cette boîte correspond en principe à la hauteur de mélange.

La concentration s'exprime par une relation simple, liant, le débit d'émission, la vitesse de vent (également supposée uniforme) et des paramètres de longueur.

Cette méthode a été initialement introduite par Hanna [Hanna 1971] afin d'évaluer des niveaux moyens de concentration sur une ville, assimilée à une source surfacique. Elle reste très utilisée dans les outils intégrés de calcul de l'exposition des populations. La simplicité de sa formulation en fait un outil attrayant. Il n'empêche que l'information que

l'on peut espérer en tirer est assez limitée, et en aucun cas de nature quantitative. En effet, réduire la contribution de la météorologie à une vitesse de vent uniforme sur le domaine ou ne pas tenir compte des spécificités de la source est loin d'être réaliste ! L'information fournie est donc plutôt de nature qualitative, utile par exemple pour l'évaluation des contributions relatives de différents types d'émetteurs.

Dans des versions plus élaborées, cet outil prend la forme d'un modèle "multiboîte". Le principe est globalement le même, sauf que le domaine d'étude est découpé en plusieurs boîtes se répartissant dans tout le volume. Les concentrations sont uniformes à l'intérieur de chaque volume. Les échanges entre ces derniers (provenant du vent ou de la diffusion) sont représentés par des vitesses d'échanges à ajuster correctement. Il s'agit là d'un exercice difficile à mener dans la phase de calage de l'outil, en se référant par exemple à des données mesurées.

Le modèle POLYTOX commercialisé par la société System Consult fonctionne sur ce principe. Directement couplé à un modèle de trafic, il est spécialisé dans la représentation des immissions provenant du transport routier.

Les modèles déduits de l'observation

Ils définissent une approche scientifique basée sur l'observation et l'expérience. Ils sont établis à partir de relations statistiques ou mathématiques. Ils définissent ainsi une approche relativement simplifiée. Par exemple, dans [Landrieu et Malherbe 2001], la démarche visant à établir une relation de type "box model" entre les émissions et les immissions de polluants urbains est présentée.

Un autre exemple est fourni par les modèles de rue. Plusieurs d'entre eux se déduisent d'une relation simple issue de données observées. Ces outils seront plus largement développés dans le paragraphe sur les modèles de rue dans le chapitre application.

Les modèles gaussiens de dispersion

Initialement développés au début des années 60 pour représenter le comportement d'un panache issu d'une cheminée, ils postulent que la concentration dans le panache est régie par une loi gaussienne (solution analytique de l'équation de base pour des conditions aux limites et initiales particulières).

Cette formulation introduit des coefficients de dispersion dans les directions horizontales et verticales normales à la direction du panache. L'une des difficultés majeures de mise en œuvre de ces modèles réside justement dans l'obtention d'une valeur correcte pour ces coefficients. Ils sont classiquement donnés comme une fonction de la distance à la source, du vent et de la stabilité atmosphérique. Ces relations ont été établies sur la base d'observations en situation expérimentale réalisées durant les années 50-60 (expérience de Prairie Grass par exemple). Les abaques issus de ces manipulations représentant les coefficients de dispersion en fonction de la distance à la source sous le vent ont permis d'aboutir à l'établissement des formules analytiques.

Afin de formaliser la notion fondamentale de "stabilité atmosphérique" (cf annexe sur les notions météorologiques), et en l'absence de mesures fiables de la turbulence, les chercheurs ont introduit une classification de la stabilité atmosphérique, basée sur des observations du gradient thermique vertical, de la nébulosité ou encore du rayonnement solaire, et d'autres paramètres météorologiques. Pasquill, Gifford et Turner [Turner 1970] ont fourni des exemples de tables de classification les plus couramment utilisées. Leur mise à jour en fonction des progrès réalisés dans la connaissance de la turbulence atmosphérique fait encore l'objet de recherches actuelles [Mohan et Siddiqui 1998].

L'IPSN préconise un autre type de classification basée sur le temps de rejet (classes de Doury) [Doury 1976].

La simplicité de cette approche analytique fait que les modèles gaussiens sont bien adaptés au calcul sur du long terme. En effet il est tout à fait envisageable de réaliser plusieurs milliers de calculs correspondant à l'ensemble des situations horaires sur une année afin d'en tirer des moyennes de concentration annuelles.

Par contre, leur formulation propre, issue d'abaques établis dans des conditions très précises et prenant en compte une classification plus ou moins arbitraire, restreint leur domaine de validité, rendant leur usage délicat en certaines situations :

- Ils ne sont pas validés pour le calcul en champ proche, typiquement dans les 100 premiers mètres autour de la source. Cette limitation reflète les conditions pour lesquelles les abaques donnant les coefficients de dispersion ont été obtenus.
- Ils ne sont pas performants pour le traitement de vents faibles (inférieurs à 0.5m/s), le panache n'ayant plus un profil gaussien dans ces situations,
- Leur usage reste limité à des situations où le relief est peu important, et sans obstacles. Il faut néanmoins préciser que des corrections sont souvent introduites afin de prendre en compte de manière simplifiée un relief légèrement chahuté ou des effets de déviation du panache dus à la présence d'un bâtiment.

Les modèles gaussiens sont plus largement utilisés pour représenter des panaches émis par des sources ponctuelles, telles des cheminées d'usine. Des développements spécifiques ont néanmoins été effectués afin de traiter des sources surfaciques ou linéiques, et ce avec plus ou moins de succès.

Tous ces aspects seront plus largement développés dans l'annexe consacrée à ce type d'outil.

Il est cependant important de noter que les remarques précédentes concernent les modèles gaussiens classiques, basés sur une classification de la stabilité atmosphérique. Ce sont les outils les plus répandus. Nous citerons par exemple ISC, outil de référence de l'USEPA, APC3 commercialisé par la société Aria Technologies (Aria Risk), et de nombreux outils "maison" développés en interne par les entreprises pour leurs besoins propres.

Depuis une dizaine d'années, une nouvelle génération de modèles gaussiens est proposée par les chercheurs. Les classes de stabilité sont abandonnées au profit d'une paramétrisation théorique de la turbulence atmosphérique dans la couche limite atmosphérique (CLA). Des analyses mathématiques permettent d'aboutir à des formulations complexes des coefficients de dispersion [Hanna et Chang 1993]. Cette alternative permet d'étendre le champ d'application des modèles gaussiens. Parmi les plus connus, et les plus probants après évaluation sur des cas tests [Bennett et hunter 1997], [Hall et al. 1999], se trouvent ADMS développé par la société anglaise CERC, et AERMOD développé par l'EPA.

Les modèles lagrangiens

Dans cette logique, les panaches sont décrits par le déplacement des éléments qui le composent et qui sont suivis dans leur mouvement. Les modèles gaussiens à bouffées et les modèles particuliers sont les deux représentants de cette catégorie.

Les premiers sont une alternative aux modèles gaussiens précédemment décrits, lorsque l'on souhaite traiter des émissions non stationnaires et non homogènes. Le rejet est alors assimilé à une succession de bouffées qui évoluent de façon gaussienne. Le centre de masse de chaque bouffée émise à l'instant t suit la trajectoire du vent.

Les modèles particuliers assimilent le polluant à plusieurs milliers de particules dont on calcule la trajectoire. Celle-ci est obtenue par l'équation multidimensionnelle $x(t + \Delta t) = x(t) + V(x, t)\Delta t$, exprimée dans un référentiel lié à la particule. V , la vitesse, est obtenue comme la somme d'une contribution moyenne ($\bar{V}$) et d'une partie fluctuante (V') transcrivant la nature aléatoire de la turbulence. Les concentrations sont finalement calculées par sommation du nombre de particules comptabilisées dans un volume donné.

Cette technique peut s'avérer relativement précise, notamment à l'échelle locale à condition de multiplier les calculs de trajectoire. En effet le suivi des particules dans leur cheminement permet de s'affranchir des effets de diffusion artificielle introduits par des calculs moyens réalisés sur un maillage (approche eulérienne). La contrepartie est logiquement leur coût très élevé, ce qui explique qu'elle demeure assez peu utilisée dans un contexte opérationnel. Néanmoins de plus en plus d'outils de ce type sont proposés sur le marché pour le traitement des problèmes locaux à régionaux (SPRAY- Aria Technologies ou HYPACT- Numtech)

De plus on recense un certain nombre de modèles continentaux (ou grande échelle) basés sur ce principe : EMEP, modèle de référence européen [Simpson 1993] ou encore NAME [Ryall et Maryon 1998].

Les modèles eulériens

Ils reposent sur une approximation tridimensionnelle des équations de la mécanique des fluides (équation de Navier-Stokes) pour la partie dynamique et de l'équation de conservation de la masse pour la dispersion des polluants. Mais ces relations sont établies par rapport à un référentiel fixe, à partir duquel a été défini un maillage tridimensionnel. Celui-ci peut se composer de parallélépipèdes de même taille ou de tailles différentes (maillage structuré), ou d'autres éléments disposés de façon non régulière tels que des tétraèdres (maillage non structuré). Les équations sont intégrées numériquement sur ce maillage, de façon à calculer une valeur de chaque variable (vitesse, température, turbulence, concentration...) en chaque sommet ou centre de maille. Des techniques numériques souvent très élaborées permettent d'aboutir à la solution recherchée par des processus itératifs. Cette description très succincte de la démarche permet d'entrevoir deux caractéristiques principales de ces modèles :

La précision de la solution recherchée est très dépendante de la qualité du maillage choisi dans le domaine de calcul. En effet il est évident que plus le nombre de mailles est important, et plus la solution approchée sera satisfaisante. En contrepartie, l'augmentation du nombre de points de calcul a un coût informatique non négligeable, que ce soit en temps de calcul ou en place mémoire. La solution réside dans le choix d'une stratégie judicieuse de maillage, avec une grille raffinée dans les zones où les phénomènes physiques sont déterminants (près du sol, à proximité d'obstacle...) et des mailles de taille plus importante dans les zones moins problématiques.

Le processus itératif de résolution des équations induit également un coût en temps de calcul plus ou moins élevé afin de converger vers une solution satisfaisante. Le pas de temps utilisé est déterminé en fonction de conditions de stabilité issues de l'analyse numérique des équations. Un ajustement correct des paramètres numériques est

indispensable pour utiliser convenablement ces méthodes, d'où la nécessité de disposer d'une expérience certaine en la matière.

Comme rappelé ci-dessus les modèles eulériens sont basés sur la résolution de l'équation de continuité $\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla} C = 0$. En décomposant dans cette expression la vitesse $\vec{V}$ en une partie moyenne $\vec{\bar{V}}$, et une partie fluctuante $\vec{V}'$, on aboutit à l'équation de convection/diffusion citée en introduction, dans laquelle les termes de diffusion proviennent des contributions fluctuantes, i.e. de la turbulence. Celle-ci est donc représentée par des variables supplémentaires qui sont intégrées au même titre que la vitesse, la température ou la concentration. Le traitement numérique de ces termes aboutit à la mise en œuvre de modèles de turbulence qui déterminent le modèle et sa précision. Ainsi suivant la technique employée, on aura recours à des modèles de type k-ε, k-l, ou encore des modèles plus sophistiqués dits “de second ordre”, rarement utilisés en conditions opérationnelles.

Les modèles tridimensionnels eulériens peuvent réaliser des simulations satisfaisantes, s'ils sont utilisés convenablement : qualité de maillage, ajustement des paramètres numériques, qualité des données d'entrée. Ainsi ils présentent la seule alternative pour traiter certaines situations, qui développent des caractéristiques physiques ou thermiques spécifiques : relief important, présence d'obstacles, prise en compte de phénomènes météorologiques locaux (brises de mer ou brise de pentes...).

Certains codes eulériens de qualité de l'air incluent l'hypothèse de pression hydrostatique (voir annexe sur les notions en météorologie) pour résoudre la dynamique de l'écoulement dans la direction verticale. L'introduction de cette équation simplifiée permet de réduire le temps de calcul de manière significative. Elle n'est cependant pas adaptée au traitement de toutes les situations, et doit rester limitée à la modélisation d'écoulement à méso-échelle dans des zones où le relief n'est pas trop important.

Dans le cas d'un écoulement réactif, les modules numériques de transport sont couplés avec un module chimique qui simule la création ou la destruction d'espèces chimiques. Cela complique considérablement le modèle et augmente le temps de calcul. En effet la résolution de la partie chimique des équations impose des pas de temps très faibles.

De manière générale les outils eulériens sont utilisés pour la simulation d'épisodes de pollution ponctuels, s'étendant sur quelques heures ou quelques jours. Leur coût de calcul élevé ne permet pas en effet d'intégrer (dans un contexte opérationnel) une rose des vents annuelle de manière à en déduire des concentrations annuelles. Ils peuvent également être mis en œuvre pour l'évaluation d'une situation donnée (soit situation la plus fréquente, soit la plus pénalisante du point de vue de la dispersion) dans des études d'impact ou de danger.

Parmi les logiciels les plus connus, nous pouvons citer ANSWER (ACRI), FLUENT (Fluent France), MERCURE (EDF-ARIA Technologies), ou DFA (Siria technologies), PHOENICS (Cham), qui sont des outils 3D non hydrostatiques. Ils sont dédiés principalement à la simulation des phénomènes à échelle locale.

HERMES (EDF - Aria Technologies), MESO-NH (Météo France), sont des exemples de codes méso-échelle. Ils incluent l'hypothèse d'équilibre hydrostatique.

AIRQUAL (Aria Technologies), CALGRID, CHIMERE (LMD-Aria technologies) ou MESO-NH Chimie (Météo France) sont des logiciels de simulation de phénomènes photochimiques.

4.3 SYNTHÈSE ET GRILLE DE LECTURE

Il est possible de relier schématiquement les différents types d'approches listées ci-dessus à des considérations relevant des objectifs et des dimensions de la zone d'étude, comme illustré dans la figure 1. De manière à mieux cerner ses objectifs, il est recommandé à l'utilisateur de qualifier précisément ses attentes, par exemple en répondant aux points suivants:

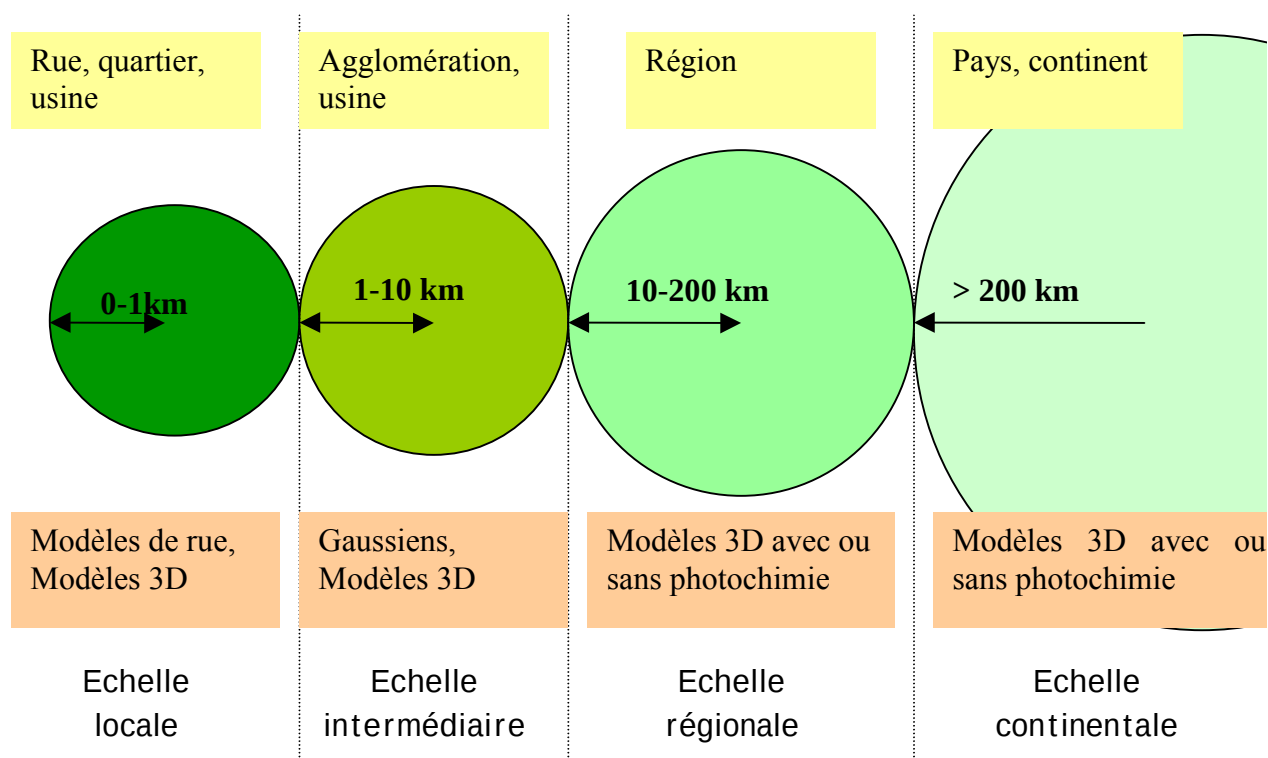


Figure 1 : différents modèles pour différentes échelles

Il est intéressant de noter que quelle que soit l'application visée, les modèles tridimensionnels (eulériens ou lagrangiens) permettent toujours de rechercher une solution. En revanche, des nuances importantes existent suivant leur champ d'application. Taille du maillage, précision du cadastre d'émission et autres données d'entrée, nature des conditions aux limites, paramètres numériques et méthodes de résolution diffèrent largement suivant la nature de l'étude et le domaine géographique couvert. Ainsi l'application des modèles tridimensionnels, qui apparaît trop souvent comme une "boîte noire" est largement conditionnée par l'objectif visé.

Les paragraphes suivants, décrivent par thème d'application, les données d'entrée, les modèles numériques proposés et les résultats que l'on peut en attendre. Quelques références commerciales, non exhaustives, et une évaluation de l'investissement financier associé sont également données à titre d'exemple.

Tableau récapitulatif :

Type de modèle	Données d'entrées		Domaine d'étude		Exemples de modèles	Limitations	Avantages
	Polluants visés	Sources	Echelle spatiale	Echelle temporelle			
Gaussiens	Gaz particules Polluants primaires	Ponctuelle, linéique surfacique	Locale intermédiaire	Horaire moyenne annuelle	ISC, AERMOD APC3 ADMS	Pas valide en champ proche (< 100m) Pas valide par vent faible (< 0,5 m/s) Pas de relief	Faible coût Rapide à mettre en œuvre
Lagrangiens	Gaz particules Polluants primaires secondaires	Ponctuelle	De locale à continentale	Horaire	Spray Hypact Emep Name	Nombreuses données météo nécessaires Coût élevés Temps de calcul très long	Bonne précision
Eulériens	Gaz particules Polluants primaires secondaires	Ponctuelle, linéique surfacique	De locale à continentale	Horaire	Answer ⁽¹⁾ Calgrid ⁽³⁾ Chimere ⁽³⁾ Dfa ⁽¹⁾ Fluent ⁽¹⁾ Hermès ⁽²⁾ Mercure ⁽¹⁾ Meso-NH ⁽²⁾ Miskamm ⁽¹⁾ UAM ⁽³⁾	Coût élevés Temps de calcul très long	Bonne précision, Bonne prise en compte des phénomènes chimiques

(1)Modèle 3D non hydrostatique

(2)Modèle 3D hydrostatique

(3) Prise en compte de la photochimie

Grille de lecture

		Echelle spatiale											
		Locale				Intermédiaire				Régionale		Continentale	
	Polluants (1)	Primaires		Secondaires (3)		Primaires		Secondaires		Primaires	Secondaires	Primaires	Secondaires
	Site (2)	Influence faible	Influence forte	Influence faible	Influence forte	Influence faible	Influence forte	Influence faible	Influence forte	Tous types(4)	Tous types(4)	Tous types(4)	Tous types(4)
Echelle tempor elle	Horaire	Gaussien Eulérien Lagrangien	Eulérien Lagrangien	Gaussien Eulérien Lagrangien	Eulérien Lagrangien	Eulérien Lagrangien	Eulérien Lagrangien	Eulérien	Eulérien	Eulérien	Eulérien	Eulérien Lagrangien	Eulérien Lagrangien
	Annuelle	Gaussien	Gaussien	Gaussien	Gaussien	Gaussien	Gaussien	Gaussien	Gaussien	Eulérien	Eulérien	Eulérien	Eulérien

- (1) La grille est déterminée par les polluants plutôt que par les sources, car il est considéré que l'ensemble des modèles cités peuvent incorporer tous les types de source.
- (2) ce paramètre sous-entend la nécessité ou non de prendre en compte dans la modélisation l'influence des particularités du site (fort relief, proximité de la mer, régimes de vents locaux)
- (3) à cette échelle les polluants réactifs auxquels on s'intéresse ne peuvent ressortir que d'une chimie simplifiée (transformation NO/NO2)
- (4) à ces échelles le domaine est généralement représenté à l'aide d'un modèle numérique de terrain et un plan d'occupation des sols

5 IMPACT DES INSTALLATIONS INDUSTRIELLES

5.1 PROBLEMATIQUE

Champ d'application

Cette question concerne l'évaluation de l'impact sur l'environnement et les populations avoisinantes d'une installation industrielle ou d'un groupe d'installations amenées à rejeter des produits polluants dans l'air. Ces effets sont considérés réglementairement dans le cadre d'études d'impact ou d'études de danger, demandées par les autorités administratives avant implantation ou développement d'une installation classée (ICPE).

Les études de danger ont pour vocation d'évaluer les effets consécutifs à un dysfonctionnement grave de l'usine (incendie, perte de confinement...). Dans ce cas les quantités de polluant rejetées sont importantes, mais limitées à une période relativement courte, le temps pour les services de sécurité de neutraliser le sinistre. Les zones géographiques concernées sont souvent relativement proches de la source. Ces applications ne font pas précisément l'objet de ce document.

Les études d'impact ont pour but d'estimer les effets sur l'environnement de l'industrie en fonctionnement normal. Elles incluent maintenant un volet sanitaire destiné à évaluer l'exposition des populations avoisinantes. Dans ce cas, on se place alors dans une logique de long terme, avec la recherche de concentrations annuelles ou pluriannuelles, qui seront introduites dans les modèles d'exposition.

Une troisième application possible concerne les zones très industrialisées et grandes émettrices de polluants (région du Havre et de Notre Dame de Gravenchon ou couloir Rhodanien par exemple). Il peut être très utile, pour les pouvoirs publics, d'appréhender les contributions des différents émetteurs aux importants niveaux de pollutions enregistrés dans le secteur géographique. Il s'agit alors d'évaluer l'effet des rejets industriels lors d'épisodes de pollution qui sont simulés. Des AASQA telles qu'AIR NORMAND, AIRMARAIX, AIRFOBEP ou COPARLY sont très impliquées dans cette logique.

Les polluants concernés

Les polluants visés dans ce contexte sont essentiellement :

- le SO₂, émis par les systèmes de combustion et dans divers procédés industriels, et qui fait l'objet d'efforts constants de réduction des émissions depuis une vingtaine d'années,
- les NOx rejetés la plupart du temps par les installations de combustion
- les dioxines, polluants particuliers et gazeux rejetés par de nombreuses industries, et qui font l'objet d'une surveillance étroite,
- les métaux lourds (sous forme gazeuse ou particulaire) issus de catégories bien identifiées de procédés industriels, également surveillés du fait de leur grande nocivité (plomb, mercure, cadmium, arsenic...),
- des produits spécifiques aux industries considérées si leur effet sur la santé humaine présente un risque.

Pour les polluants particuliers et les poussières, l'évaluation de la dispersion et des concentrations atmosphériques est complétée par l'évaluation des retombées aux sols, notamment dans le cadre d'études d'impact. En effet, la diffusion de polluants dans le sol et les végétaux constitue une voie d'exposition qu'il est parfois indispensable de considérer. Du point de vue de la modélisation, il est souvent traité par un module spécifique du logiciel, chargé de simuler le dépôt.

Le dépôt sec (hors précipitations) est paramétré par une "*vitesse de dépôt*" qui dépend de la taille des particules, et qui permet de traduire un flux de déposition au sol. Celui ci est conditionné par la gravité pour les plus grosses particules, ou par les effets du mouvement brownien pour les plus petites. Le flux de polluant retombé au sol s'écrit :

$$F(x,y) = V_d C(x,y,0)$$

où V_d est la vitesse de dépôt, et $C(x,y,0)$ la concentration de polluants au niveau du sol.

Pour les rejets industriels, le phénomène de dépôt est également représenté dans le modèle par un appauvrissement du panache, en fonction du temps et de la distance à la source.

Le dépôt humide traduit l'entraînement des particules par la pluie, le brouillard, la brume... Le flux déposé dû à ces mécanismes se traduit souvent par le produit du taux de précipitations par un coefficient de lessivage. Ce dernier est difficile à évaluer, ce qui explique les incertitudes admises sur la quantification du dépôt humide.

Dans des situations accidentelles, les polluants rejetés peuvent être des gaz lourds. Cela implique un traitement particulier du panache et de ses propriétés thermodynamiques. Cet aspect n'est pas développé dans ce document, car il s'inscrit dans une problématique très spécifique, qui s'éloigne des préoccupations des AASQA.

Remarque sur l'état de l'art

L'impact industriel, et plus particulièrement les rejets issus des cheminées d'usine, est l'une des applications les plus anciennes de la dispersion atmosphérique. Elle a justifié le développement des premiers modèles gaussiens. Ainsi, il s'agit d'un domaine dans lequel il existe un nombre important de références, relatives à des campagnes de mesure d'envergure utilisées pour calibrer les modèles. C'est autour de ce type d'application que s'articule une part importante des objectifs recherchés par des initiatives telles que les "Conferences on harmonization within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes". Cette manifestation se répète tous les 2 ans environ (dernière édition en mai 2001 en Italie), et rend compte des démarches qui visent à promouvoir une cohérence à l'échelle européenne, des codes numériques de modélisation de la qualité de l'air. Pour ce qui est des rejets industriels, un outil de validation se référant à des campagnes de mesures d'envergure a été mis au point ("Model Validation Kit") et est plus largement décrit dans un paragraphe ultérieur.

5.2 LES DONNEES D'ENTREE

Les sources

Il faut distinguer deux types de sources, dans le domaine de l'impact industriel :

Les sources canalisées, qui désignent les cheminées d'usines et les brèches créées par d'éventuels sinistres. Les émissions qui y sont associées sont " aisément " quantifiables. En effet, la géométrie de la source (forme, taille, hauteur) ainsi que les propriétés physiques et thermodynamiques du rejet (vitesse d'éjection, densité, température du polluant rejeté) peuvent être mesurées ou modélisées et directement fournies au code de calcul de la dispersion. Le background scientifique le plus conséquent en terme d'outils et de validation concerne ces rejets. Les modèles de type gaussiens sont bien adaptés à leur traitement, ayant été à l'origine développés dans ce but

Les sources diffuses désignent les émissions situées très souvent au niveau du sol, surfaciques ou volumiques, qui proviennent de l'activité quotidienne sur le site de l'usine : zones de stockage, circulation de véhicules, émissions échappées des bâtiments... Leur contribution peut s'avérer très importante, notamment en champ proche de l'installation. Ainsi les modèles tridimensionnels sont les mieux adaptés au traitement du comportement de ces rejets. Malheureusement, tout le problème réside dans la quantification de l'émission associée, difficilement mesurable. Il est cependant essentiel de surmonter cette difficulté si l'on veut espérer réaliser une modélisation correcte des phénomènes.

Il est enfin important de rappeler que les applications industrielles induisent la présence de gaz aux propriétés thermodynamiques particulières (gaz lourds) et de particules dont il faut bien appréhender les propriétés. Ainsi, avoir une information sur la granulométrie des éléments rejetés est primordial afin d'ajuster correctement les paramètres qui conditionnent la modélisation des retombées atmosphériques.

Le site et la météorologie

En sus du domaine d'application, l'échelle de modélisation et le type de code que l'on souhaite utiliser définissent la nature des données orographiques à fournir. Comme indiqué en introduction, le contexte dans lequel les rejets industriels sont modélisés relève souvent de l'étude de danger (rejet accidentel) ou de l'étude d'impact (rejet chronique).

5.2.1.1 REJETS ACCIDENTELS

Dans ce premier cas, l'intérêt est d'estimer les conséquences induites par l'émission d'une quantité très importante de polluant dans des conditions météorologiques pénalisante pour la dispersion. Comme cela implique souvent des calculs en champ proche (sur le site de l'usine ou dans les quartiers avoisinants), une description relativement précise du bâti et du relief sera sans doute nécessaire.

En revanche les données météorologiques se résument à des situations ponctuelles limitées à des configurations très néfastes pour la dispersion (pas de dispersion du panache) ou courantes. Elles sont définies par une température moyenne, un niveau d'humidité relative, une vitesse de vent et un degré de turbulence (qui peut d'ailleurs être connecté aux classes de stabilité de type Pasquill). Une analyse de la situation orographique et économique du site considéré pourra aider à diagnostiquer les situations pertinentes à examiner : recherche des zones les plus peuplées, prise en compte d'effets locaux (proximité de la mer, fort relief).

Ce problème sortant du champ direct de préoccupation des AASQA, il n'est pas plus développé dans ce document.

5.2.1.2 REJETS CHRONIQUES

Les études d'impact, surtout si elles sont suivies d'une évaluation des risques sanitaires, nécessitent la recherche de concentrations en moyenne annuelle, qui seront fournies aux modèles d'exposition.

Il est donc logique d'intégrer des données météorologiques annuelles, concernant la température, la vitesse et la direction de vent, et tout élément susceptible d'évaluer la stabilité atmosphérique. Sur ce dernier point, certaines stations de Météo France, peuvent fournir avec un pas tri-horaire, la nébulosité (en octats avec une valeur de 1 à 8), le nombre d'heures d'ensoleillement, ou le rayonnement. Il est alors possible d'en déduire les classes de stabilité de Pasquill (voir annexe "motions en météorologie"), via des tables de correspondance. Météo France peut parfois directement fournir ce résultat sous forme de roses de stabilité. Une information sur la hauteur de la couche de mélange peut s'avérer également très pertinente, notamment en situation d'inversion de température.

Météo France dispose de plusieurs stations par département susceptibles de mesurer une information sur le vent et la température. Il faut accorder un soin particulier au choix de la station utilisée pour représenter la météorologie sur le site étudié. Le problème est la prise en compte des effets de vent locaux (en particulier en présence de relief) qui implique que le vent sur le site ne présente pas les mêmes caractéristiques que celui au niveau de la station. La seule solution raisonnable sera dans certains cas de disposer une station sur le site même et de réaliser des mesures sur une période donnée. Météo France proposera en 2001 un service permettant d'extrapoler numériquement la rose des vents mesurée au niveau d'une station sur la zone d'étude en tenant compte du relief. Cette information pourra s'avérer précieuse dans certains cas.

La nébulosité est mesurée avec un pas tri-horaire en un nombre restreint de points, et pour des zones complémentaires des observateurs donnent une indication sur la couverture nuageuse pendant le jour. En corroborant ces différentes sources d'informations, Météo France peut fournir une information sur la nébulosité sur le site d'étude. Ces considérations illustrent bien à quel point il est délicat d'ajuster convenablement les données au problème que l'on souhaite traiter.

L'exercice de modélisation consiste alors à simuler l'ensemble des situations météorologiques recensées sur une période représentative (5 ans par exemple) et à en déduire une évaluation des concentrations moyennes annuelles. Les situations météorologiques sont en principe regroupées par classe de caractéristiques similaires auxquelles l'on affecte des fréquences d'apparition. Les valeurs de concentrations annuelles sont obtenues en effectuant la moyenne des valeurs calculées pour chaque classe, pondérée par leur fréquence d'apparition.

5.2.1.3 LE CAS PARTICULIER DES SOURCES DIFFUSES

Les points évoqués dans les paragraphes précédents sont globalement valables pour la modélisation des sources diffuses. Les outils tridimensionnels sont cependant mieux adaptés à leur traitement. En effet les méthodes d'intégration des termes surfaciques dans les modèles gaussiens ne sont pas également performantes.

Le coût élevé de mise en œuvre des modèles tridimensionnels limite leur usage au calcul de situations météorologiques ponctuelles. Cela n'est pas très rigoureux compte tenu la nature de ces sources, souvent présentes toute l'année (zones de stockage, lieux de circulation des véhicules, échappements par les ouvertures des bâtiments...) à l'origine d'une pollution typiquement chronique. L'intégration de la

rose des vents annuelle sur le site demeure le meilleur traitement bien que trop coûteux.

Quels outils et quels investissements

5.2.1.4 MODELES GAUSSIENS

5.2.1.4.1 Généralités

De manière générale, les modèles les plus utilisés pour les études de rejets industriels sont les modèles gaussiens.

Historiquement, ils ont été développés dans cet objectif précis (hors sources diffuses). La préoccupation constante des chercheurs reste leur ajustement afin de mieux prendre en compte les spécificités pour lesquelles ils n'ont pas été conçus initialement (présence d'obstacles et de bâtiments, relief).

Néanmoins leur degré de maturité apparaît satisfaisant pour les applications visées. De nombreux exercices de validation et d'intercomparaison attestent de ce fait [Hall et al. 1999 ; Hanna et al 1999]. La communauté scientifique européenne a mis au point un outil de validation, le "Model Validation Kit" disponible sur internet à l'adresse suivante : www.dmu.dk/atmosphericenvironment/harmoni.htm

Il s'agit d'un ensemble de données relatives à 4 campagnes de mesures de rejets issus de cheminées d'usine en différents lieux (Copenhague, Kinkaid, Lillestrom et Indianapolis). Des outils d'analyse statistique des performances du logiciel par rapport à ces informations mesurées sont également proposés.

Le traitement des sources non ponctuelles (i.e. linéiques, surfaciques ou volumiques) fait l'objet de traitements spécifiques dans les modèles gaussiens. Plusieurs méthodes sont ainsi rencontrées :

- L'intégration numérique d'une infinité de sources ponctuelles qui représentent la source réelle,
- Le découpage de la source en un nombre fini de sources ponctuelles judicieusement placées et paramétrées en fonction du vent et de la position des récepteurs,
- L'assimilation de la source surfacique à une source ponctuelle à localiser correctement, de manière à retrouver les caractéristiques de la source réelle au niveau de la dispersion (principe du point source virtuel).

Des résultats relativement disparates peuvent être obtenus suivant la situation et les paramètres adoptés. Il s'agit là d'une limitation dans l'usage des modèles gaussiens.

Dans tous les cas, le plus grand avantage de ces outils, reste leur faible coût de mise en œuvre qui permet de réaliser un nombre important de simulations et donc d'établir des bilans annuels ou pluriannuels, en de nombreux points du site.

L'investissement en moyens humains et matériels est relativement faible. En effet l'usage pertinent de ces modèles repose avant tout sur l'expérience de terrain, et les concepts pragmatiques sur lesquels ils s'appuient ne requièrent pas de connaissances poussées en analyse numérique.

Ce sont des logiciels qui fonctionnent dans la plupart des cas sur un système PC, sous Windows, voire MSDOS. Leur coût en temps de calcul et place mémoire ne dépend que des demandes de l'utilisateur.

5.2.1.4.2 Les produits disponibles

Parmi les modèles gaussiens traditionnels éprouvés et connus, nous pouvons citer :

- En France, la société Aria Technologies (www.aria.fr) commercialise le modèle gaussien APC3 avec une interface conviviale (traitement des aspects long terme, représentation cartographique des panaches) et adaptée aux applications visées (Aria Impact). Son coût est de l'ordre de 10 000 €.
- ISCST3 (Short Term) et ISCLT3 (Long Term) [EPA 1995] sont les modèles de référence de l'USEPA (Agence de l'environnement américaine). Ils sont disponibles gratuitement sur internet, ainsi que la documentation associée ; à l'adresse suivante : www.epa.gov/ttn/scram. Les programmes sources écrits en fortran sont également ouverts si l'on souhaite s'investir dans des développements spécifiques. Hormis sa gratuité, il s'agit là d'un de ses meilleurs atouts. Néanmoins pour un utilisateur moins concerné, sa mise en oeuvre peut s'avérer laborieuse. En effet il n'y a pas d'interface graphique. Ce manque de convivialité ne facilite pas la maîtrise des différents paramètres du code (système de mots clefs).
- Il existe des versions packagées de ISC commercialisées par des sociétés privées. Une interface conviviale et des outils adaptés au pré et post-traitement du code, souvent basés sur des SIG, en facilitent l'utilisation. Nous pouvons citer par exemple la version ISC-AERMOD-View commercialisée par la société Scientific Software Group (www.scisoftware.com) ou le logiciel Breeze-ISC distribué par la société T3 du groupe Trinity Consultants (www.breeze-software.com/air).

Les modèles gaussiens de seconde génération [Hanna et Chang 1993] constituent une alternative très prometteuse, puisqu'ils allient la simplicité de formulation propre aux gaussiens standards, et une meilleure prise en compte de la turbulence atmosphérique dans la couche de surface. La paramétrisation mathématique suivant la théorie de Monin-Obukhov des variables qui la caractérisent remplace la classification de la stabilité atmosphérique. Cela permet de pallier un certain nombre de limitations des outils traditionnels (vents faibles, modélisation en champ proche). De plus les situations de fortes convections ne sont généralement pas traitées par l'approche gaussienne.

Dans cette catégorie deux exemples de référence peuvent être cités :

- AERMOD [EPA 1998], développé par l'USEPA. Il est également téléchargeable gratuitement sur le site de l'agence. Cependant, le code n'est pas figé et de développement récent ; il peut donc encore contenir quelques bugs informatiques. Il n'en reste pas moins vrai que AERMOD a déjà fait l'objet de nombreuses évaluations.
- Comme pour ISC, il existe des versions commerciales de AERMOD, dont l'interface utilisateur est agréable et conviviale. Scientific Software Group et Trinity Consultants en sont deux distributeurs.
- ADMS3 [CERC 1999] est développé CERC (Cambridge Environmental Research Center) et commercialisé en France par la société NUMTECH (www.numtech.fr). Il s'agit d'un outil convivial qui fait encore l'objet de mises à jour grâce aux recherches scientifiques menées par ses concepteurs.

Son coût s'élève à 2000 € pour une licence annuelle et 6 000 € environ pour une licence permanente.

5.2.1.4.3 Différents types de résultats

Les modèles gaussiens sont souvent utilisés dans des configurations long terme pour extraire des moyennes sur une période fixée, de concentrations en polluant. Des logiciels tels que ADMS ou APC3 permettent également de réaliser des analyses statistiques pour aboutir à une estimation des percentiles. Dans des configurations “ court terme ”, des moyennes de concentrations sur des périodes réduites à une ou quelques heures, ou au mois sont obtenues.

Les concentrations sont en général représentées par des coupes horizontales du panache, qui permettent de visualiser la concentration des polluants sur l'ensemble du domaine d'étude, en principe au niveau du sol. Le système de représentation, s'il est connecté avec un SIG aboutit à la création de cartographies, facilement interprétables.

La plupart des logiciels permettent également de représenter les concentrations dans l'axe de panache, à une hauteur donnée, en fonction de la distance à la source. Il s'agit d'une information précieuse pour évaluer les distances d'impact de la pollution.

5.2.1.5 MODELES EULERIENS TRIDIMENSIONNELS

5.2.1.5.1 Généralités

Ces modèles constituent la seule alternative raisonnable pour le traitement numérique de situations complexes telles que :

- Les zones de fort relief (a fortiori les montagnes),
- Les situations dans lesquelles l'on souhaite évaluer l'impact de la source en champ proche et en présence d'obstacles (bâti),
- La prise en compte correcte des sources diffuses.

Leur contexte d'utilisation est radicalement différent de celui évoqué précédemment, puisque :

- Ces modèles sont lourds à mettre en oeuvre (place mémoire et temps de calcul),
- Ils résultent de l'implantation numérique de techniques sophistiquées pour approcher les équations de la physique, et ne peuvent donc être appliqués de manière pertinente que par des utilisateurs avisés. En effet la génération d'un maillage cohérent, l'ajustement des paramètres numériques, l'identification et la neutralisation d'éventuels artéfacts numériques sont autant de difficultés qui ne peuvent être surmontées sans le “ background ” adéquat.
- Leur usage est souvent limité à la simulation de situations ponctuelles, caractéristiques d'un type de condition météorologique. Le choix de ces situations est dicté par la prédominance de tel ou tel vent sur le site (après analyse de la rose des vents), la recherche de scénarios pénalisants du point de vue de la dispersion, la proximité de zones sensibles (village, écoles, hôpitaux...).

Ces modèles font l'objet de nombreuses validations, souvent basées sur la comparaison avec des mesures effectuées en soufflerie. Dans ce cas, les chercheurs s'attachent à vérifier que l'impact des obstacles, qui perturbent le panache et créent des turbulences, des zones d'accumulation de polluants ou des zones mortes, est bien reproduit. Ainsi il existe des données théoriques, établies à partir d'observations, qui permettent de qualifier les zones tourbillonnaires se créant autour d'un bâtiment assimilé à un pavé, situé dans l'écoulement atmosphérique [Kaplan et Dinar, 1996]. Ces formules permettent en particulier de vérifier le bon comportement du modèle pour rapporter les effets de turbulence.

Comme évoqué plus haut, ces outils peuvent s'avérer très performants si l'on accepte de mailler suffisamment finement le domaine de calcul. Tout le problème est de trouver le bon compromis entre le nombre de mailles que l'on s'autorise, et le prix que cela implique en temps de calcul et en difficultés numériques.

Grâce aux progrès de l'informatique, un nombre de plus en plus important de ces outils fonctionne sur des systèmes PC, mais la plupart d'entre eux ont été développés sur des stations de travail sous UNIX.

5.2.1.5.2 Les produits disponibles

Nous distinguerons deux classes de logiciels tridimensionnels disponibles sur le marché : ceux qui ont pour finalité la dispersion atmosphérique, et ceux qui abordent globalement des problèmes de mécanique des fluides, appelés logiciels de CFD (Computational Fluid Dynamics). Les équations et les méthodes implémentées sont globalement similaires dans chaque cas.

Cependant alors que la première catégorie inclut les spécificités propres au calcul atmosphérique (variables météorologiques), les autres traitent cet aspect à travers des modules indépendants activés selon les besoins de l'utilisateur. Ces derniers s'intègrent dans un outil global dont la vocation s'étend bien au delà du problème de dispersion (calculs de combustion, interaction fluide-structure, etc...).

Parmi les logiciels 3D spécifiques au calcul de dispersion distribués en France on trouve :

- ANSWER commercialisé par la société ACRI (www.acri.fr)
- ARIA Local (ou MERCURE) distribué par la société Aria Technologies (www.aria.fr)
- DFA développé par la société Siria Technologies (www.siriatech.com).
- FLUIDYN Panache, commercialisé par la société Transoft (www.fluidyn.com)
- MISKAM, logiciel allemand commercialisé en France par la société KISTERS France, (www.kisters.de).

Les principes sur lesquels sont développés ces logiciels sont globalement équivalents.

Parmi les logiciels de mécanique des fluides plus généraux et néanmoins utilisables dans le domaine de la dispersion (outils « CFD »), les plus connus sont:

- CFX Tascflow (www.software.aeat.com) est aussi un produit très répandu dans plusieurs domaines industriels

- FLUENT (www.fluent.com) est un logiciel très connu et performant dans le domaine de l'industrie aéronautique et des turbomachines. Il est moins adapté aux problèmes environnementaux.
- PHOENICS (www.cham.uk) est un logiciel très ouvert disposant de modules spécifiques pour le traitement de la dispersion.
- STAR-CD (www.cd.co.uk) est l'un des logiciels de CFD les plus connus sur le marché international.

De manière générale ces outils sont relativement onéreux. Le prix d'une licence est de l'ordre de 20 à 35 K€. Il faut intégrer en complément du module de calcul, les outils annexes nécessaires à leur utilisation (outil de définition de la géométrie, outil de maillage, post-processeur pour la représentation).

5.2.1.5.3 Les résultats

Les calculs réalisés concernent généralement une évaluation de la dispersion pour une situation météorologique donnée. Ainsi le calcul réalisé est stationnaire : on suppose que le champ de vent et le niveau d'émission restent tels qu'ils ont été définis initialement, et la solution calculée correspond à celle obtenue en régime établi. Il s'agit évidemment d'une approche plutôt majorante, toute fluctuation du vent étant écartée. Des coupes représentant le panache dans le plan horizontal ou des représentations tridimensionnelles du site et du rejet sont disponibles suite à ces calculs.

Il est également possible de générer les simulations correspondant à un régime transitoire, notamment en situation accidentelle, lorsque l'on s'intéresse à la dispersion dans les premiers instants qui suivent l'accident. Dans ce cas le comportement des émissions varie également dans le temps.

5.2.1.6 LES MODELES LAGRANGIENS

Les modèles lagrangiens offrent une bonne solution pour le calcul de la dispersion de rejets de cheminées dans des environnements construits ou à fort relief.

En effet ils sont par nature bien adaptés à la nature ponctuelle de ce type d'application. La qualité des résultats obtenus avec une telle approche est bien connue à condition de traiter un nombre suffisant de particules.

Le calcul des trajectoires peut être effectué en "pré-processing" par un modèle météorologique simplifié, reposant par exemple sur l'interpolation consistante de données météorologiques mesurées (modèle diagnostic). Le logiciel Aria Risk distribué par la société Aria Technologies repose exactement sur ce principe, avec un champ de vent calculé par l'outil d'interpolation MINERVE et la dispersion prise en charge par le modèle lagrangien à particules SPRAY. La société Numtech propose une démarche similaire avec le modèle météorologique RAMS (modèle pronostique basé sur la résolution numérique des équations de la mécanique des fluides) et le modèle lagrangien à particules HYPACT.

La pertinence des résultats obtenus à l'aide de modèles lagrangiens, notamment en champ proche et en présence d'obstacles, a fait l'objet de nombreuses publications [kaplan et Dinar 1997 ; Lee et Näslund, 1998].

Tableau récapitulatif : Impact industriel

Objectif ⁽¹⁾	Etude de l'impact industriel		
Polluants	SO₂, NO_x, dioxine, métaux...		
Sources	Ponctuelles Surfaciques	Rejets canalisés Rejets diffus	
Données météorologiques	Météorologies annuelles		Vent, température, nébulosité, ensoleillement
Type de modèle			
	Avantages	Inconvénients	Exemples de modèles Et coût
Gaussiens	Simplicité de mise en oeuvre	Traitement simplifié, incertitudes pouvant être grandes	ISC, AERMOD, APC3, ADMS (1000 à 5000 €)
Lagrangiens	Grandes précisions dans la description des rejets, traitement précis des trajectoires en terrain complexe	Temps calcul prohibitif	ARIA RISK (1000 à 5000 €)
Eulériens	Seuls outils capables de traiter : Les forts reliefs Les sources diffuses Champ proche	Très lourd à mettre en œuvre, outils demandant un opérateur spécialisé. Temps calcul relativement élevé	ANSWER, DFA, FLUENT, MERCURE ou ARIA LOCAL, MISCAM, FLUIDYN PANACHE ⁽²⁾ (20 à 40 K€)

(1) Prise en compte uniquement d'une étude de rejets chroniques

(2) Modèles CFD (Computational Fluid Dynamics) 3D non hydrostatiques.

6 IMPACT AU NIVEAU DE LA RUE

6.1 PROBLEMATIQUE

Champ d'application

Considérer le comportement des polluants atmosphériques au niveau de la rue s'inscrit dans la problématique très générale de l'évaluation de la qualité de l'air dans le milieu urbain. Il est fondamental d'appréhender cette question de manière spécifique, les effets à cette échelle très locale ne pouvant pas être déduits des situations constatées à méso-échelle.

En effet, la géométrie du site et des bâtiments qui le composent, la nature des matériaux, mais aussi la circulation des véhicules influencent directement la typologie de l'écoulement atmosphérique, qui peut ainsi devenir extrêmement complexe. Afin de mieux comprendre ces phénomènes les scientifiques s'attachent depuis près de trente ans à raisonner sur des structures urbaines unitaires.

La rue canyon (ou “ street canyon ”) initialement définie dans [Nicholson 1975] et [Jonhson et al 1973], comme une rue étroite bordée de part et d'autre d'une ligne continue de hauts bâtiments, constitue l'un de ces éléments de base. Les études destinées à cerner les mécanismes atmosphériques et thermiques dans les rues canyon sont nombreuses et s'appuient sur des expériences en soufflerie [Uehara 2000 ; Plate 1999], la modélisation [Yamartino et Wiegand 1986] ou plus rarement des campagnes de mesures en site réel [Nakaruma et Oke 1988].

Les conclusions qui découlent de ces travaux sont directement connectées aux stratégies d'aménagement urbain, et cela à deux niveaux.

Dans une optique de planification du développement urbain, les décideurs doivent trouver les meilleurs compromis par rapport aux attentes des citoyens, aux enjeux économiques, et aux technologies disponibles. Des études de scénarios à l'échelle de la rue peuvent aider à définir l'implantation de nouvelles infrastructures, la mise en place des Plans de Déplacements Urbains (PDU), la détermination de zones critiques...

A plus court terme, la prise en compte du confort et de la santé de la population est un autre exemple concret d'application de ces études. Plus précisément, la compréhension du comportement et des effets des polluants atmosphériques dans la rue, où l'homme est particulièrement exposé et où les concentrations enregistrées sont susceptibles d'être les plus élevées, est un point déterminant de l'évaluation du risque sanitaire dans l'agglomération. En effet, à ce niveau, les sources prépondérantes de pollution résultent du trafic routier et sont donc situées au niveau du sol. Par conséquent elles impactent directement le citoyen, dans son rythme de vie quotidien, lors de ses trajets piétonniers ou véhiculés, de sa présence dans des locaux (bureaux, habitation, ou autres).

Enfin, une application directe de cette démarche pour les organismes chargés de la mesure de la qualité de l'air en milieu urbain est d'évaluer le degré de représentativité d'une station donnée. Suivant la localisation du point de mesure, nécessairement soumis à des sollicitations très locales induites par les structures urbaines, les niveaux de concentrations enregistrés peuvent subir des variations importantes. La modélisation à échelle locale est un moyen d'anticiper l'identification de zones cibles au comportement particulier du point de vue de la dispersion.

Les polluants concernés

Cette problématique se réfère à l'évaluation de l'impact des émissions provenant du trafic routier. Les polluants visés sont donc ceux qui y sont associés, à savoir :

- Les NO_x et le NO₂, si le modèle utilisé incorpore une chimie simplifiée qui permet de tenir compte de la transformation NO/NO₂,
- Le monoxyde de carbone,
- Les hydrocarbures, qui constituent l'un des maillons de la formation de l'ozone et dont certains composés sont pris en considération en tant que tels du fait de leur toxicité. Le benzène par exemple, composé cancérogène qui fait aujourd'hui l'objet d'une attention particulière de la part des industriels,
- Les poussières fines particulièrement mises en cause pour les véhicules diesel.

De nombreuses études théoriques sont focalisées sur le suivi du monoxyde de carbone ou du benzène, qui sont des traceurs idéaux de la pollution. Les études d'impact au niveau de la rue se développent, et les campagnes de mesure également (ce qui permet de disposer de données mesurées dans des situations réelles), et ils n'interagissent pas ou peu avec d'autres composés.

D'un point de vue opérationnel, il est enfin utile de préciser que dans ces études à petite échelle, les résultats de modélisation calculés à partir de la dispersion des émissions du trafic ne suffisent pas à représenter la situation réellement observée. Il ne faut pas omettre d'ajouter explicitement la concentration de fond évaluée pour le polluant visé. Celle-ci peut avoir de multiples origines et est transportée dans la rue par le vent incident.

Généralités sur les phénomènes observés

La situation de rue canyon induit des phénomènes très spécifiques qu'il est parfois complexe de décrire bien qu'ils soient déterminants pour justifier la présence de niveaux de concentration élevés.

Afin de simplifier le problème, les scientifiques le considèrent souvent sous un aspect bidimensionnel. L'étude porte alors sur une section verticale de la rue. Le vent est supposé perpendiculaire à l'axe de la rue, et celle-ci suffisamment longue pour s'affranchir des effets de bord. Dans les cas contraires (vent oblique et longueur de la rue trop courte par rapport à la hauteur moyenne des bâtiments) les effets tridimensionnels de l'écoulement ne sont plus négligeables [Hunter et al 1992].

6.1.1.1 DESCRIPTION GENERALE DE L'ÉCOULEMENT

Différents régimes d'écoulement apparaissent suivant les caractéristiques géométriques des bâtiments bordant la rue. Le rapport H/W de la hauteur moyenne des bâtiments sur la largeur de la rue est déterminant [Oke 1988]:

Pour de faibles valeurs de H/W (entre 0,15 et 0,2), l'écoulement dans le canyon, suffisamment large, dégénère en profil de vent du même type que celui du vent incident. Cela correspond à une situation classique d'écoulement visqueux ("Isolate Roughness flow"). Une zone de recirculation s'étend néanmoins en aval du premier obstacle.

Pour des valeurs plus importantes (H/W variant de 0,2 à 0,65), l'influence du bâtiment face au vent commence à se faire sentir et la zone de recirculation en amont

du premier bâtiment interagit avec celle située en aval du deuxième (“Wake interference flow”),

Pour des valeurs suffisamment importantes de H/W , un seul mouvement tourbillonnaire est induit dans la cavité, pour des directions et des valeurs de vent appropriées. Il s’agit de la situation typique de rue canyon, souvent représentée par le schéma donné en figure 2.

L’étendue et les conditions d’apparition de ces différents régimes ne sont cependant pas encore très bien identifiés [jonhson et Hunter 1999]. Les recherches en cours, basées sur des modélisations numériques et expérimentales visent en particulier à mieux comprendre les conditions de vent incident et les rapports géométriques qui conditionnent l’apparition d’un ou plusieurs vortex dans la rue [Lee et Park 1994].

6.1.1.2 CARACTERE TRIDIMENSIONNEL

Le caractère tridimensionnel de l’écoulement est particulièrement sensible pour des vents incidents non perpendiculaires à l’axe de la rue. Un mouvement hélicoïdal se crée alors pour des angles d’incidence suffisamment importants (de 20 à 90°). Pour des angles plus faibles, l’écoulement devient parallèle à l’axe de la rue, sans mouvement de rotation.

6.1.1.3 TURBULENCE INDUITE PAR LES VEHICULES

Il est aussi important de noter les récents développements consacrés à la prise en compte de la turbulence induite par le déplacement des véhicules. Il est montré qu’il s’agit d’un facteur déterminant, trop souvent négligé, dans l’évolution des polluants dans la rue. La compréhension de ces effets connaît aujourd’hui un regain d’attention de la part de la communauté scientifique [Kastner-Klein et al 1999 ; Ketzel et al. 1999].

6.1.1.4 PRISE EN COMPTE DES FLUCTUATIONS DU VENT

Du point de vue de la dispersion des polluants, les concentrations généralement calculées par les modèles numériques, simplifiés ou pas, correspondent à une situation météorologique et à une valeur d’émission données. Il s’agit de la simulation d’un état stationnaire caractérisé par ces éléments. Ainsi les fluctuations imputables aux variations de régimes de vent, et qui peuvent être non négligeables ne sont absolument pas représentées. Cela peut fausser l’interprétation des résultats fournis par les modèles, car à cette échelle la nature très turbulente de l’écoulement ne peut être ignorée. Des incertitudes apparaissent notamment sur l’évaluation des probabilités de dépassement de seuil, ou de la génération de pics de concentrations [Schatzmann et al 1997 ; Hanna 1993]. Les difficultés pour comparer et valider les résultats numériques par rapport aux campagnes de mesures (en site réel ou sur maquette) s’expliquent en partie par ce fait.

Les spécialistes s’accordent à reconnaître que la modélisation numérique et les essais en soufflerie restent les démarches les mieux appropriées afin de comprendre les effets canyons sur la dispersion des polluants. En effet, l’organisation de campagnes de mesures dans les grandes villes demeure fastidieuse. Elle implique des négociations avec les autorités publiques, un matériel sophistiqué et lourd à mettre en place, et des efforts importants pour le dépouillement et l’interprétation des résultats. Aussi,

relativement peu de références existent en la matière. Des travaux européens importants ont néanmoins été menés à Zurich [Rotach 1995], et en Allemagne [Yamartino et Wiegand 1988], et au Japon [Oke 1988]. En France, il faut notamment citer les contributions de l'Ecole Centrale de Nantes, à Nantes (programme Nantes 96) et dans le cadre du programme ESCOMPTE, à Marseille, de l'Ecole Centrale de Lyon [Soulhac, 2000] et de l'INERIS dans deux rues parisiennes [Vardoulakis et al, 2002].

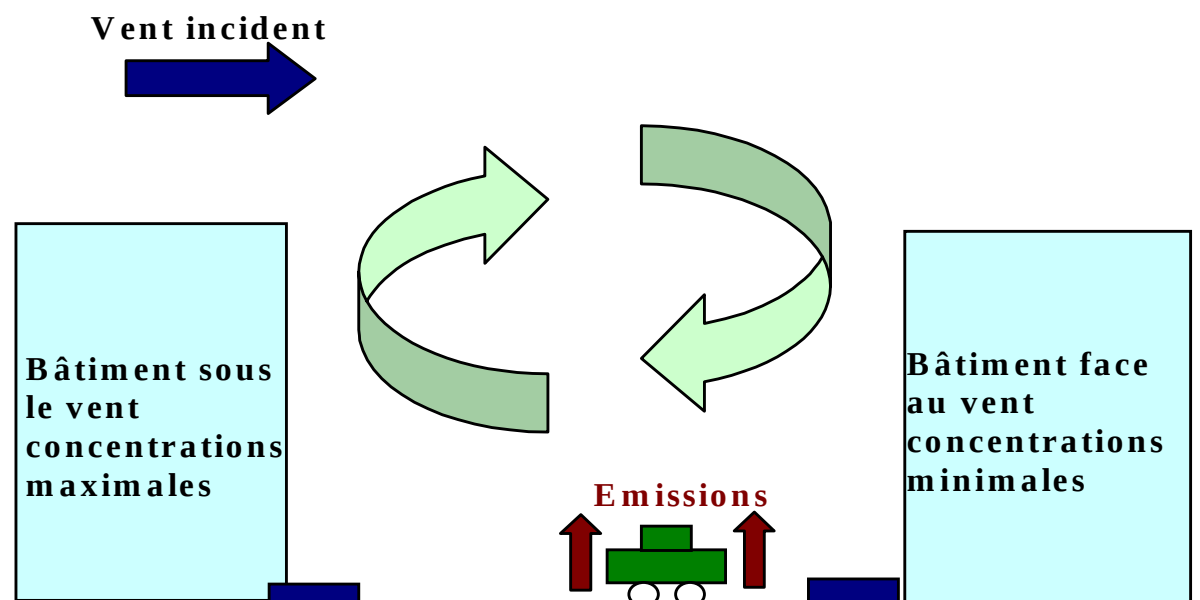


Figure 2 . Représentation schématique du mouvement de dispersion dans la rue canyon

6.2 LES DONNEES D'ENTREE

Les sources

Les sources principales prises en considération sont celles dues au trafic routier. Elles dépendent donc du nombre de véhicules qui circulent sur le domaine considéré, de leur vitesse, de leur nature (véhicule léger, véhicule utilitaire, poids lourd, essence ou diesel) et du régime de roulage. L'association de modèles de trafic intégrant des données de comptage et des éléments statistiques de manière à avoir une représentation réaliste du trafic sur la voie, et de facteurs d'émissions permet d'accéder à une valeur de débit d'émission sur le site.

En France, le logiciel IMPACT, distribué par l'ADEME permet de réaliser ce calcul, à partir des facteurs d'émissions actuels et projetés dans les années futures définis dans la méthodologie européenne COPERT.

Dans le cas où l'on met en œuvre des modèles simplifiés de façon à évaluer le niveau moyen ou maximal des concentrations dans la rue, un débit d'émission moyen est nécessaire en entrée du modèle. Celui-ci sera de nature linéique (en g/s.m) ou surfacique (en g/s.m²).

Le même type de données est requis lorsqu'une approche bidimensionnelle est adoptée. Dans le cas où une modélisation tridimensionnelle est réalisée, la définition de la source peut être affinée, en prenant en compte, par exemple les variations

d'émission le long de la rue. Les sources imputables au trafic sont néanmoins traditionnellement assimilées à des lignes d'émission.

Il convient enfin de préciser que la hauteur d'émission n'est pas réellement au niveau du sol. En effet la dynamique et la température des gaz en sortie du pot d'échappement font que la hauteur de rejet peut être relativement importante. Dans [Yamartino et Wiegand 1988], elle est définie comme une fonction de la vitesse de déplacement. Dans [Berkowicz 1997] elle vaut 2m.

Le site et la météorologie

6.2.1.1 DESCRIPTION DU SITE

Une description plus ou moins précise de la rue est demandée en entrée du modèle. En effet la forte dépendance de l'écoulement et du mode de dispersion des produits suivant la géométrie du canyon a longuement été évoquée dans les paragraphes précédents.

Suivant le type de modèle employé le niveau de détail demandé sera plus ou moins approfondi. Les modèles empiriques ou semi-empiriques intègrent généralement dans leur formulation la hauteur moyenne des bâtiments, et la largeur de la rue (le rapport H/W étant déterminant dans l'apparition ou pas de la zone de recirculation), et parfois sa longueur.

Les modèles eulériens ou lagrangiens sont définis sur la base d'une description fine de la situation, que l'on peut simplifier si nécessaire (prise en compte ou pas de la forme des toits, représentation des discontinuités dans le bâti, obstacles éventuels dans le canyon...).

Dans tous les cas on s'en tient à une description de la seule zone cible, et non de la répartition des éléments qui l'entourent. Leur influence est prise en compte à travers les valeurs affectées aux champs de vent et de concentration incidents.

6.2.1.2 DESCRIPTION DE LA METEOROLOGIE

Le niveau de complexité de ces données est également conditionné par celui du modèle mis en œuvre.

Les modèles empiriques ou semi-empiriques se bornent à utiliser une vitesse de vent incident. Ce type de modèle étant généralement dédié à l'évaluation du niveau moyen de concentration suivant une coupe verticale du canyon, la direction de vent est implicitement supposée perpendiculaire à l'axe de la rue. A partir de la situation météorologique supposée au-dessus des toits et des propriétés géométriques de la rue, des formulations simples faisant état du vent induit au cœur de la rue, sont recherchées. Des corrections plus ou moins pointues, peuvent être introduites, également de manière empirique, afin de reproduire les effets tridimensionnels d'un vent d'incidence quelconque par rapport à l'axe de la rue.

Les modèles les plus sophistiqués et notamment les modèles tridimensionnels lagrangiens ou eulériens sont plus exigeants et requièrent un niveau d'information conforme à la paramétrisation des conditions aux limites. Cela inclut la description du profil de vent et de la turbulence atmosphérique. Si les équations les incluent [Sini et al 1996], des données de nature thermique (rayonnement, température atmosphérique et aux parois) peuvent également être demandées.

6.3 QUELS OUTILS ET QUELS INVESTISSEMENTS

Comme cela a été sous-entendu dans les paragraphes précédents, un éventail important de techniques de modélisation a été développé pour simuler la dispersion dans les rues canyon. Elles sont maintenant présentées de manière succincte afin d'en définir les grands principes. Une description détaillée de chacune des catégories évoquées est donnée en annexe.

Approches empiriques basées sur les observations

6.3.1.1 GENERALITES

Bien que s'éloignant du thème central de ce document qui est la modélisation déterministe, ces approches largement utilisées pour évaluer la pollution atmosphérique au niveau de la rue mérite d'être développée.

Ces modèles reposent sur des formulations simples établies à partir d'observations et de mesures. Celles-ci proviennent de campagnes expérimentales effectuées en site réel ou d'études en soufflerie incluant un grand nombre de paramètres. Cette description suffit à imaginer les limitations de ces outils.

D'une part ils ne peuvent pas véritablement prendre en compte les mouvements complexes de circulation d'air dans la rue canyon, et les variations de concentrations qui en découlent. Typiquement, des valeurs moyennes des concentrations sont évaluées comme la somme d'une contribution provenant de sources extérieures à la rue (niveau de fond urbain) et d'une part directement dépendante du trafic enregistré et de la géométrie de la rue.

D'autre part, ils sont définis à partir de l'examen de données mesurées (en situations réelles ou reproduites en soufflerie), ce qui limite théoriquement leur domaine de validité à la reproduction de ces cas types. Ils ne peuvent donc être utilisés qu'en première approximation.

Par contre leur très faible coût d'utilisation permet de multiplier les situations étudiées dans le cadre d'analyses de sensibilité par exemple ou pour qualifier la qualité de l'air dans chacune des rues d'une ville, plusieurs milliers de calculs pouvant être répétés en des temps raisonnables.

6.3.1.2 OUTILS DISPONIBLES

Le modèle le plus ancien et le plus connu de cette gamme d'outils est le modèle APRAC/STREET, proposé par [Jonhson 1973] calibré à partir d'expériences réalisées dans les rues de San Jose et Saint Louis (USA), il propose une formulation simple pour les valeurs de concentrations atteintes en chaque côté de la rue.

Le modèle développé aux Pays-Bas par le TNO, CAR [Eerens et al 1993], est construit à partir d'une série d'essais en soufflerie. Quarante neuf configurations ont été étudiées variant suivant la forme de la rue, la vitesse et direction de vent, la présence d'arbres.... Paramétré en fonction des caractéristiques des villes allemandes, ce logiciel est utilisé par les autorités allemandes et hollandaises comme outil réglementaire d'aide à la décision. Son coût est relativement modeste (de l'ordre de quelques dizaines de milliers de francs).

Modèles analytiques

6.3.1.3 GENERALITES

Ils sont définis à partir de l'analyse physique du problème et des équations qui le décrivent. Ils se décomposent en principe en deux parties :

- Une formulation analytique pour le champ de vent dans le canyon et éventuellement les champs de turbulence pour les modèles les plus sophistiqués.
- Une formulation analytique pour les champs de concentrations également définis avec un degré plus ou moins élevé de précision suivant les modèles.

Dans cette approche le champ de vent est découpé en composantes transversales et longitudinales (perpendiculaires et parallèles à l'axe de la rue) dont l'expression est déduite de considérations théoriques (profils logarithmiques ou exponentiels, intégration d'équations de la mécanique des fluides).

La modélisation de la turbulence est un point difficile. Pour les outils les plus évolués, les coefficients de fluctuation du vent sont définis à partir de relations semi-empiriques qui incluent des paramètres censés agir sur la turbulence. Suivant leur degré de complexité les effets mécaniques, thermiques ou encore ceux induits par le déplacement des véhicules peuvent être ainsi pris en compte.

Le calcul de la dispersion repose sur la prise en compte de différents régimes, suivant la vitesse et la direction de vent, et la localisation du récepteur. Typiquement deux composantes permettent de reconstruire la concentration totale dans la rue :

- La concentration de recirculation, uniforme, qui représente le niveau de fond produit par l'enroulement du panache sur lui-même. Elle varie suivant l'importance des échanges avec le milieu extérieur à la rue, et est en principe calculée à partir d'un modèle boîte. Les variantes des modèles se distinguent par la définition de ce volume et des paramètres d'ajustement de la formule.
- La contribution directe exprime la variabilité spatiale des concentrations, étroitement liée aux caractéristiques de vent, à la géométrie du problème, et à la présence de la source. Généralement, elle est évaluée grâce à une représentation gaussienne (dans sa version source linéique) du panache.

Ces modèles, notamment les plus récents, s'appuient sur une analyse approfondie du problème physique. Ainsi, bien qu'ils soient définis à partir de formulations simplifiées des équations, ils intègrent un maximum d'informations qui rend l'approche réaliste. Des campagnes de validation récentes montrent la pertinence de ces formulations.

6.3.1.4 OUTILS DISPONIBLES

Le modèle de [Nicholson 1973] l'un des plus anciens, a surtout une importance "historique". Un profil moyen de vent (logarithmique ou exponentiel) est adopté en fonction de sa direction par rapport à l'axe de la rue. Suivant le même découpage, un modèle boîte calcule un niveau moyen de concentration.

- Le Modèle CPBM (Canyon-Plume Box Model) [Yamartino et Wiegand 1986] repose sur les considérations décrites dans le paragraphe précédent : un champ de vent dissocié en une composante transversale et une composante longitudinale, et une concentration résultant de deux types de contributions, l'une de fond et l'autre représentative des émissions directes du trafic. Un

modèle chimique simplifié permet de tenir compte des transformations NO/NO₂. Il s'agit du modèle pionnier de cette approche. Il est commercialisé sous le nom CPBM/IMMIS par la société allemande IUV, et est aujourd'hui utilisé par les autorités allemandes à des fins réglementaires.

- Le code OSPM (Operational Street Pollution Model) [Berkowicz 1997] est basé sur des principes similaires. Il a été développé à partir de travaux initiés par le NERI (Danemark), le NILU (Norvège) et le SMHI (Suède). Sa principale particularité est d'intégrer une paramétrisation de la turbulence qui prenne en compte le déplacement des véhicules. Il fait à ce jour l'objet de campagnes d'évaluation dont les résultats sont positifs. Il a été intégré dans le modèle de qualité de l'air urbain, ADMS-Urban, commercialisé par la société CERC (cambridge Environmental Research Consultants). Il est possible de l'acquérir auprès de ses concepteurs du NERI (www.dmu.dk).

La mise au point de ces outils fait encore l'objet de recherches actuelles. En France, un modèle a été récemment proposé par l'école Centrale de Lyon [Soulhac 2000], dont l'ambition est de mieux appréhender la physique du problème et les performances de cette gamme de modèles dans des situations complexes : vents incidents non perpendiculaires ou parallèles à la rue, prise en compte des intersections, prise en compte des dissymétries de la rue. Le logiciel développé n'est pas commercialisé à ce jour.

Modèles tridimensionnels

6.3.1.5 GENERALITES

Dans cette présentation, les modèles lagrangiens et eulériens ont été regroupés. Les uns comme les autres sont rarement utilisés de manière opérationnelle par les autorités car ils demandent une bonne pratique des techniques numériques. Néanmoins, ils offrent un degré de précision qui permet d'appréhender au mieux les phénomènes propres aux situations de rue canyon (vortex, couches limites). Ils permettent en particulier de simuler l'influence de facteurs extérieurs loin d'être négligeables, tels que les effets thermiques.

Les modèles eulériens [Sini et al 1996] sont basés sur la résolution numérique de l'équation de transport-diffusion régissant le comportement du polluant, dans un référentiel donné. Un maillage tridimensionnel permet de repérer les points auxquels les concentrations sont évaluées. Les champs de vent et de turbulence dans lesquels évolue le polluant sont régis par les équations de Navier-Stokes, résolues numériquement suivant les mêmes principes d'approximation.

Les modèles lagrangiens [Lanzani et Tamponi 1995] suivent les particules fluides dans leur mouvement, dans un référentiel local. Dans ce cas, des volumes élémentaires de polluant sont assimilés à des particules, et suivis dans leur trajectoire. A un instant donné la concentration est calculée en intégrant les volumes élémentaires sur le domaine considéré. Le champ de vent et de turbulence sur lequel évoluent les volumes élémentaires est déduit soit de manière expérimentale, soit de manière numérique. C'est ainsi que des modèles couplés eulériens-lagrangiens sont développés [Lakehal et al 1995]. Dans la suite nous ne nous étendrons pas plus sur les modèles lagrangiens qui sont plutôt utilisés dans un contexte de recherche ou par

des bureaux d'études spécialisés. En effet pour être réellement pertinents, ils nécessitent de prendre en compte un grand nombre de particules, d'où des coûts d'utilisation élevés qui limitent leur usage dans un contexte opérationnel.

- Bien que plus répandus, il est tout de même important de préciser que les modèles eulériens présentent également des spécificités qui rendent leur usage parfois délicat :
- Ils sont lourds à mettre en œuvre (place mémoire et temps de calcul),
- Ils résultent de l'implantation numérique de techniques sophistiquées pour approcher les équations de la physique, et ne peuvent donc être utilisés de manière pertinente que par des utilisateurs avisés. En effet la génération d'un maillage cohérent, l'ajustement des paramètres numériques, l'identification et la neutralisation d'éventuels artéfacts numériques sont autant de difficultés qui ne peuvent être surmontés sans le " background " adéquat.

Ces modèles font l'objet de nombreuses validations, souvent basées sur la comparaison avec des mesures effectuées en soufflerie. Dans ce cas, les chercheurs s'attachent à vérifier que les effets de turbulence, tellement importants à l'échelle de la rue sont correctement simulés, ainsi que les principaux schémas phénoménologiques présentés plus haut.

Grâce aux progrès de l'informatique, un nombre de plus en plus important de ces outils fonctionne sur des systèmes PC, mais la plupart d'entre eux ont été développés sur des stations de travail sous UNIX.

6.3.1.6 LES PRODUITS DISPONIBLES

Nous distinguerons deux classes de logiciels tridimensionnels disponibles sur le marché : ceux qui ont pour finalité la dispersion atmosphérique, et ceux qui abordent globalement des problèmes de mécanique des fluides, appelés logiciels de CFD (Computational Fluid Dynamics). Les équations et les méthodes implémentées sont globalement similaires dans chaque cas.

Cependant alors que la première catégorie inclut les spécificités propres au calcul atmosphérique (variables météorologiques), les autres traitent cet aspect à travers des modules indépendants activés selon les besoins de l'utilisateur. Ces derniers s'intègrent dans un outil global dont la vocation s'étend bien au delà du problème de dispersion (calculs de combustion, interaction fluide-structure, etc...).

Parmi les logiciels 3D spécifiques au calcul de dispersion distribués en France on trouve :

- ANSWER commercialisé par la société ACRI (www.acri.fr)
- ARIA Local ou MERCURE distribué par la société Aria Technologies (www.aria.fr)
- CHENSI [Sini et al 1996], qui n'a pas réellement de vocation commerciale, puisque développés à l'Ecole Centrale de Nantes à des fins de recherche. Il n'en demeure pas moins que c'est un outil national reconnu.
- DFA (Dragon Fly Air) distribué par la société Siria Technologies (www.siriatech.com).
- FLUIDYN Panache, commercialisé par la société Transoft (www.fluidyn.com)
- MISKAM est un logiciel tridimensionnel développé par un bureau d'étude allemand, et désormais distribué en France par la société KISTERS France (www.kisters.de).

Les principes sur lesquels sont développés ces logiciels sont globalement équivalents.

Parmi les logiciels de mécanique des fluides plus généraux et néanmoins utilisables dans le domaine de la dispersion, les plus connus sont :

- FLUENT (www.fluent.com) est un logiciel très connu et performant dans le domaine de l'industrie aérospatiale et des turbomachines. Il est moins adapté aux problèmes environnementaux.
- CFX-TASCFLOW (www.software.aeat.com/cfx) est un logiciel bien référencé dans le domaine de la mécanique des fluides numérique. Une version spécialement dédiée à la modélisation des écoulements atmosphériques locaux et de la dispersion de polluants en rue canyon est maintenue à l'Université de Thessalonique (Grèce).
- PHOENICS (www.cham.uk) qui est un logiciel très ouvert disposant de modules spécifiques pour le traitement de la dispersion.
- STAR-CD (www.cd.co.uk) est l'un des logiciels de CFD les plus connus sur le marché international.

De manière générale ces outils sont relativement onéreux. Le pris d'une licence est de l'ordre de 20 à 35 K€. Il faut intégrer en complément du module de calcul, les outils annexes nécessaires à leur utilisation (outil de définition de la géométrie, outil de maillage, post-processeur pour la représentation).

Modèles de screening

Ce terme qualifie en fait une approche, très simplificatrice dont l'objet est d'effectuer un diagnostic préliminaire d'une situation donnée, afin de décider de la pertinence de la mise en œuvre d'une approche plus approfondie.

Dans ce cadre, il nous semble important d'ouvrir une parenthèse sur une gamme d'outils "paramétrés" qui ne sont pas réellement des modèles numériques, dans la mesure où ils n'incluent pas directement de résolution numérique du problème. Ils se présentent plutôt comme des bases de données de résultats issues de batteries de tests réalisés avec des logiciels spécifiques.

Leur emploi est donc conditionné par la typologie des situations de référence qui sont intégrées dans la base de données.

Le principe se résume ainsi :

- 1) Le logiciel possède une base de données consignnant les résultats de calcul obtenus pour un nombre important de situations étudiées. Celles-ci varient suivant la météorologie (vitesse et direction de vent) et la géométrie de la rue (hauteur des bâtiments, largeur de la rue, front continu ou pas de bâtiments, rues dissymétriques..).
- 2) L'utilisateur définit son cas d'étude propre. Il est guidé en cela par le logiciel qui limite les possibilités offertes en fonction des références dont il dispose en mémoire.
- 3) Les résultats relatifs au cas de référence le plus proche de celui proposé par l'utilisateur, et ajustés en fonction de ses contraintes sont donc donnés en sortie de l'outil.

Ainsi cette démarche présente l'énorme avantage d'être peu coûteuse à mettre en œuvre et de fournir des produits conviviaux.

En revanche, l'usage de ces modèles doit être impérativement limité à l'évaluation d'une première approximation de la situation. En effet, toute la complexité des phénomènes mis en jeu dans les rues canyons a largement été évoquée précédemment. La dispersion est particulièrement sensible à la forme de la rue ou à l'incidence du vent. Ces "modèles paramétrés" ne peuvent recenser toutes les configurations possibles et trouvent donc rapidement leurs limites suivant la typologie des villes. En effet ils sont mis au point dans un objectif bien identifié et des incertitudes non négligeables sur la qualité de leurs résultats surgissent quand on les transpose hors de leur contexte d'utilisation.

Au niveau national, l'outil de ce type le plus répandu est certainement STREET commercialisé par la société Targeting [Targeting 2000]. Il a été établi à partir des résultats de calcul obtenus avec le code eulérien tridimensionnel MISKAM (KTT) pour 98 types de rues et carrefours et 30 situations météorologiques (direction/vitesse de vent). Il se réfère aux typologies urbaines essentiellement rencontrées dans les villes allemandes, pour lesquelles il a été conçu. Pour le traitement des émissions, il est couplé avec le logiciel IMPACT de l'ADEME qui combine caractéristiques du parc roulant français et facteurs d'émission établis sur la méthodologie COPERT2. Des évaluations plutôt satisfaisantes ont été présentées par rapport aux mesures d'AIRPARIF, sur la ville de Paris [Petit et al 2000], et l'ASPA l'exploite pour réaliser des cartographies d'exposition sur Strasbourg.

La philosophie d'AEOLIUS (www.meto.gov.uk) [Buckland et Middleton 1999] est un peu différente. Il a été mis en place à la demande des autorités anglaises. Il est construit à partir des résultats de calcul obtenus avec le code OSPM. L'exploitation se fait à partir de nomogrammes qui permettent d'extrapoler les concentrations calculées pour les situations de références à d'autres configurations météorologiques. Il est disponible sur simple demande.

Tableau récapitulatif : Pollution au niveau de la rue

Objectif	Niveau de pollution au niveau de la rue		
Polluants	CO, NO _x , NO ₂ , COV, PM...		
Sources	Trafic automobile		
Données météorologiques	Météorologie locale		Vent, température, nébulosité, ensoleillement
Type de modèle	avantages	inconvénients	Exemples de modèles Et coût
Empiriques	Simplicité de mise en œuvre, faibles coûts	Traitement simplifié, applicables à une seule configuration (géométrie du bâti + trafic) Incertitudes pouvant être grandes	APRAC/STREET, CAR, (1000 à 5000 €)
Analytiques	Approche paramétrique de la turbulence dans la rue, bonne description du phénomène	Limités à une vision globale de la pollution dans la rue	CPBM, OSPM, ADMS-Urban (3000-8000 €)
« Screening »	Etat des lieux simple d'une situation	Exploitation d'une base de données, Adaptation très faible au site d'étude	STREET, IMPACT, AEOLIUS (1000-3000 €)
Eulériens	Résolution de l'écoulement Approche détaillée des phénomènes	Très lourd à mettre en œuvre, outil demandant un opérateur spécialisé. Temps calcul relativement élevé	ANSWER, CHENSI, FLUENT, MERCURE ou ARIA LOCAL, MISKAM, PHOENICS, CFX-TASCFLOW, STAR-CD, FLUIDYN PANACHE ⁽²⁾ (20 à 40 K€)

⁽²⁾ Modèles CFD (Computational Fluid Dynamics) 3D non hydrostatiques.

7 DU QUARTIER A L'AGGLOMERATION

7.1 PROBLEMATIQUE

Champ d'application

Il s'agit d'une dimension intermédiaire entre l'échelle locale qui se focalise sur le comportement des polluants à quelques centaines de mètres de la source (impact au niveau de la rue), et l'échelle régionale, qui peut s'étendre sur quelques centaines de kilomètres aux alentours. Sur le plan de la qualité de l'air, cette problématique s'inscrit dans l'évaluation de l'impact des développements et aménagements urbains. En France, la mise en place de PDU (Plans de Déplacements Urbains) ou de PPA (Plans de Protection de l'Atmosphère) en sont des exemples. Ces démarches impliquent l'analyse de situations existantes, mais aussi la planification de développements futurs.

Les questions intéressant les décideurs concernent la typologie de la ville (influence de la présence de bâtiments dans certaines zones, effets sur les matériaux, sur la végétation) et le confort et le bien-être des citoyens (exposition aux substances nocives, odeurs, etc.). Elles induisent des réflexions sur les politiques locales à mettre en œuvre :

- Faut-il séparer complètement les zones industrielles des zones résidentielles au risque d'augmenter et peut-être de congestionner le trafic automobile ?
- Quel type de mesure mettre en place pour limiter l'usage de la voiture en centre ville (taxes, rues piétonnes...). Comment délocaliser le trafic en périphérie du noyau urbain ?
- Comment concevoir l'implantation des espaces verts ?
- Comment sont exposés les citoyens à la pollution atmosphérique, suivant leurs lieux de vie ?

La qualité de l'air dans l'agglomération est essentiellement influencée par le trafic automobile, mais aussi par la présence d'usines et l'activité tertiaire ou résidentielle (pressings, stations essence, chauffage...). Les échanges avec la pollution générée à l'échelle régionale et au-delà doivent également être considérés.

Des campagnes de mesures, bien que coûteuses et représentatives de conditions météorologiques spécifiques (celles rencontrées durant la période d'étude) permettent de disposer d'éléments de réponses précis concernant la qualité de l'air d'une ville. Elles sont cependant peu répandues et la mise en œuvre de modèles physiques (reproduction en soufflerie) et numériques (résolution d'un problème mathématique) offre une information complémentaire qui reste incontournable pour les études de planification.

Ainsi la nature des informations recherchées et les démarches scientifiques associées varient suivant les objectifs :

Parfois, il s'agit simplement d'une valeur maximale de concentration à comparer avec les seuils réglementaires. Dans ce cas des modèles de " screening " sont utilisés. Ils reposent sur des approximations simples de la physique de problème ce qui limite considérablement leur coût d'utilisation. En revanche leur domaine d'application est assez restreint et toute la difficulté est de s'assurer qu'ils sont appliqués de manière pertinente et que l'information obtenue offre bien un caractère majorant .

Si cette première phase démontre l'existence de points de dépassement, dont les conditions d'apparition doivent être affinées ou si l'on souhaite appréhender des phénomènes locaux, des modèles plus sophistiqués sont utilisés. Ce sont souvent des modèles tridimensionnels appliqués à des zones géographiques réduites, et calibrés sur des résultats obtenus lors de campagnes de mesures.

La modélisation de la qualité de l'air à l'échelle de toute l'agglomération nécessite de lourds moyens numériques et de représentation (modèles complexes, SIG) et un important volume de données d'entrée (météorologie, inventaire d'émission, conditions aux limites). Cela implique des difficultés supplémentaires, pour disposer d'une vision globale réaliste de la situation.

Les polluants concernés

La liste des polluants ciblés pour évaluer la qualité de l'air urbain peut être très vaste, tant les sources sont variées. Au niveau de l'agglomération, les processus de combustion constituent la source dominante. Ils concernent majoritairement le trafic automobile, mais aussi les industries, la génération d'énergie, et le chauffage tertiaire et résidentiel. Les substances associées sont les polluants dits " classiques " qui font l'objet de réglementations européennes et nationales.

Il s'agit :

- Du dioxyde soufre (SO_2), émissions liées typiquement à la présence d'industries dans ou en périphérie de l'agglomération. Il est en nette régression suite aux efforts fournis par les industriels pour réduire la teneur en soufre de leurs combustibles,
- Les oxydes d'azote (NO_x et NO_2), émis majoritairement par le trafic automobile. Plus précisément le monoxyde d'azote est rejeté pour être rapidement oxydé en dioxyde d'azote,
- Le monoxyde de carbone, émis majoritairement par les véhicules mais en régression grâce à la mise en place des pots catalytiques,
- Les particules (PM) et plus particulièrement les poussières fines mises en cause pour les véhicules diesel,
- Le plomb, rejeté lors de certains processus industriels fait également l'objet d'une surveillance du fait de sa toxicité.
- D'autres produits, également surveillés, ne font pas nécessairement l'objet de la réglementation actuelle, mais s'inscriront dans les futures politiques environnementales :
- Les Composés organiques Volatils (COV) qui sont pris en compte au niveau urbain, soit parce qu'ils jouent un rôle spécifique dans la formation des polluants dits secondaires tels que l'ozone, soit parce que leur présence pose des problèmes de santé publique (le benzène, les HAP (hydrocarbures Aromatiques Polycycliques), le 1-3 butadiène et certains aldéhydes).
- Les métaux lourds font l'objet d'une surveillance accrue, les plus courants étant le cadmium, le nickel, l'arsenic, ou le mercure rencontrés en présence de certains types d'industries.

Généralités sur les phénomènes observés

La modélisation de la qualité de l'air à l'échelle de l'agglomération est un problème délicat à traiter puisqu'elle nécessite d'appréhender le site et les émissions très localement (structure et disposition des rues, implantation des sources) pour déduire une répartition des polluants à un niveau global (l'agglomération voire la région). Le choix des modèles qui permettent de gérer le compromis entre précision et lourdeur des calculs et prise de décisions politiques, n'est pas aisé.

7.1.1.1 METEOROLOGIE

Pour la représentation de la dynamique de l'écoulement atmosphérique, il faudrait idéalement modéliser des phénomènes très locaux (influence des bâtiments bordant une rue) et d'autres relevant de la mésoéchelle. En effet le mode de dispersion du panache urbain résulte aussi bien de la structure propre de la ville (orientation des rues, taille des immeubles, disposition du réseau routier et des industries...) que de sa climatologie. Celle-ci varie suivant la position géographique de l'agglomération. La proximité de la mer ou d'un relief montagneux crée des perturbations importantes qu'il faut reproduire correctement. C'est ainsi que des villes ayant des niveaux d'émissions polluantes équivalents peuvent afficher une atmosphère de qualité totalement différente. L'exemple de Milan et Copenhague exposé dans [Fenger 1999] est éloquent.

Les études de dispersion atmosphérique à l'échelle de l'agglomération distinguent usuellement 4 zones, repérées par leur distance à la source et la direction de vent, traitées de façon spécifique [Plate 1999].

- Le site qui s'étend sur quelques dizaines de mètres autour de la source. L'effet des obstacles (relief ou bâtiments) doit être représenté dans ce périmètre. Les méthodes recommandées pour traiter cet aspect sont discutées dans le chapitre " impact local ".
- Le champ proche, qui concerne quelques centaines de mètres. Le panache est influencé par la présence d'obstacles, dont les effets combinés créent des situations particulières. Cette zone s'étend jusqu'au " rayon d'homogénéisation ", notion introduite dans [Theurer et al 1996] pour définir la distance à partir de laquelle les effets locaux deviennent négligeables. Cette grandeur dépend de la disposition des bâtiments, du positionnement et de la hauteur des sources, et des conditions de vent.
- Le champ lointain décrit la zone s'étirant du rayon d'homogénéisation à 5-10 km environ. A ces distances le panache de pollution est assimilable à un panache gaussien, puisqu'il n'est plus sous l'influence directe des obstacles.

Au-delà de la dizaine de kilomètres, la zone considérée est influencée par des processus météorologiques régionaux (mésoéchelle), décrits longuement dans le chapitre sur l'" impact régional " et l'annexe sur les "notions de météorologie".

La phénoménologie du champ proche et du champ lointain de la source est traitée dans ce paragraphe. Le comportement des variables météorologiques qui s'y développent (en particulier le vent) varie également en fonction de l'altitude. Au niveau de la canopée urbaine (zone la plus proche du sol, s'élevant jusqu'à la hauteur moyenne des bâtiments) les effets sont conditionnés par la présence d'obstacles, et l'écoulement, hautement turbulent, est particulièrement complexe. Au-delà le profil

de vent est décrit par des lois logarithmiques et des lois puissances dont les paramètres doivent être ajustés correctement [Plate 1999].

7.1.1.2 CHIMIE

En atmosphère urbaine, les polluants tels que les NO_x, les COV et l'ozone sont amenés à interagir. On assiste ainsi à la formation de pointes de pollution suivant les saisons (NO_x en hiver et ozone en été), et l'heure de la journée (effet heure de pointe).

La formation et le comportement des particules fines sont également régis par des réactions chimiques multiples. Les recherches actuelles visent à améliorer les modèles numériques afin qu'ils puissent tenir compte de ces aspects. Cela n'est possible qu'au prix d'un investissement important ciblé sur la précision de l'inventaire des émissions, et la qualité des modèles. Un dilemme apparaît alors, pour la définition de politiques environnementales, entre la lourdeur d'une démarche scientifique rigoureuse et les impératifs liés à une utilisation opérationnelle de l'outil de modélisation.

7.2 LES DONNEES D'ENTREE

Les sources

Les sources principales à l'échelle de l'agglomération sont multiples : trafic routier, industries, chauffage urbain. L'élaboration d'un inventaire puis d'un cadastre des émissions suffisamment précis est indispensable pour disposer d'informations représentatives. Cela sous-entend un lourd travail de collecte et de traitement de l'information.

7.2.1.1 LE TRAFIC ROUTIER

Les émissions qui lui sont imputables dépendent du nombre de véhicules qui circulent sur le domaine considéré, de leur vitesse, de leur nature (véhicule léger, véhicule utilitaire, poids lourd, essence ou diesel) et du régime de roulage. L'association de modèles de trafic intégrant des données de comptage et des éléments statistiques de manière à avoir une représentation réaliste du trafic sur la voie, et de facteurs d'émissions permet d'accéder à une valeur de débit d'émission sur le site.

En France, le logiciel IMPACT, distribué par l'ADEME permet de réaliser ce calcul, à partir des facteurs d'émissions actuels et projetés dans les années futures, définis suivant la méthodologie européenne COPERT.

En principe il est possible de disposer d'éléments chiffrés caractérisant le trafic routier sur les axes principaux de la ville (comptages effectués par les autorités locales, par les CETE ou les DDE). Dans ce cas ces voies sont représentées comme telles, de manière linéique, et les émissions peuvent être affectées avec précision. Pour le centre ville, caractérisé par un réseau très dense de petites voies, ou les axes de moindre importance qui ne sont pas toujours surveillés, la zone d'émissions est considérée comme une surface sur laquelle se répartissent des émissions moyennes, décrites avec un débit exprimé en g/s.m².

7.2.1.2 LES INDUSTRIES

Pour évaluer les émissions qui leur reviennent, un recensement des industries situées dans le domaine d'intérêt est nécessaire.

Elles sont alors assimilées à des sources ponctuelles caractérisées par leur localisation, leur géométrie (forme, taille, hauteur), et les propriétés physiques et thermodynamiques du rejet (vitesse d'éjection, température, densité, débit).

Ces informations peuvent être obtenues de manière idéale auprès des industriels. Cela n'est malheureusement pas toujours possible et les DRIRE ou le CITEPA peuvent offrir une assistance non négligeable dans cette phase.

7.2.1.3 LES SECTEURS RESIDENTIELS ET TERTIAIRES

Ce sont les sources de pollution les plus difficiles à appréhender. En effet elles concernent principalement le chauffage des habitations, des bureaux, des hôpitaux et des écoles. Par nature ce sont des sources surfaciques, caractérisées par plusieurs paramètres : Nature de l'émetteur (habitat, bureau...), année de construction des locaux, mode et cadence de chauffage...

Ces informations sont difficiles à collecter. Elles relèvent autant de statistiques INSEE, que de données technologiques. La meilleure source d'information se trouve certainement dans les enquêtes des services spécialisés des collectivités locales.

Le site et la météorologie

7.2.1.4 DESCRIPTION DU SITE

Suivant que l'on souhaite cibler l'étude sur le champ proche de la source (quartier) ou sur le champ lointain (agglomération), la même précision n'est pas requise dans la description du site. Dans le premier cas, il sera important de bien situer les obstacles éventuels et de localiser correctement les sources.

Dans le second cas, l'organisation des bâtiments n'est plus prise en compte. En revanche, le positionnement des sources reste un paramètre important. C'est pourquoi la plupart des outils utilisés de manière opérationnelle s'appuient sur un Système d'Information Géographique (SIG), qui facilite la lisibilité des données.

7.2.1.5 DESCRIPTION DE LA METEOROLOGIE

Le type d'information météorologique requise dépend fortement de l'échelle à laquelle l'on souhaite observer les phénomènes.

Les calculs réalisés à l'échelle de l'agglomération peuvent aider à comprendre a posteriori le développement d'un épisode de pollution, et de rechercher des solutions pour en limiter la portée. Dans ce cas les données météorologiques qui seront intégrées seront celles caractérisant la situation s'étendant de quelques heures à quelques jours, durée de l'épisode de pollution (court terme). Des informations relatives au vent, à la température, aux précipitations, à la couverture nuageuse, ou à l'insolation compilées avec un pas temporel variant du quart d'heure à l'heure sont en principe utilisées. La hauteur de couche de mélange, bien que souvent difficilement accessible est également une information importante, souvent calculée par un modèle. L'analyse de ces épisodes passés de pollution peut être prolongée par l'étude de scénarios de réduction des émissions.

Météo France peut fournir ce type de données pour les agglomérations les plus importantes.

Les applications visées peuvent également s'inscrire dans une optique de "prévision de la qualité de l'air". Dans ce cas, des prévisions météorologiques sont utilisées.

A l'échelle du quartier, on souhaite généralement représenter des phénomènes locaux qui se produisent dans des conditions de vent particulières. Alors la situation météorologique est caractérisée par une vitesse et une direction de vent, et des conditions de turbulence atmosphériques (qui peuvent être définies par la nébulosité, le rayonnement ou plus simplement par des classes de stabilité).

Les modèles les plus sophistiqués et notamment les modèles tridimensionnels lagrangiens ou eulériens sont plus exigeants et requièrent un niveau d'information dicté par la paramétrisation des conditions aux limites. Cela inclut la description du profil de vent et de la turbulence atmosphérique. Si les équations les prennent en compte [Sini et al 1996], des données de nature thermique (rayonnement, température atmosphérique et aux parois) peuvent également être demandées.

7.3 QUELS OUTILS ET QUELS INVESTISSEMENTS

La gamme d'outils développés pour simuler la qualité de l'air en milieu urbain (du quartier à la ville) s'étend de l'approche empirique basée sur des observations, à la représentation tridimensionnelle du transport des polluants, en passant par des méthodes analytiques telles que les modèles gaussiens. Le choix de la technique appropriée est essentiellement régi par les dimensions de la zone d'intérêt:

1) Raisonner à l'échelle du quartier permet de limiter le domaine de calcul de quelques centaines de mètres à un ou deux kilomètres. Les sources considérées sont essentiellement celles dues au trafic routier et sont donc de nature linéique. Dans ce contexte, les approches numériques disponibles sont :

- les modèles gaussiens adaptés pour le traitement des sources linéiques,
- les modèles empiriques basés sur des mesures réalisées en situation réelle ou en soufflerie,
- Les modèles tridimensionnels, s'appuyant sur la résolution des équations de la mécanique des fluides, et de l'équation de transport/diffusion du polluant.

2) A l'échelle de l'agglomération, le modèle doit pouvoir étendre son domaine de calcul sur quelques dizaines de kilomètres, et représenter l'influence de toutes les sources potentielles de pollution (trafic routier, industries, chauffage...). Les modèles gaussiens et les méthodes basées sur la résolution numérique de l'équation de transport/diffusion (K-modèles) sont alors les plus utilisés.

Dans certains cas, de manière à avoir une approche optimale par rapport à l'échelle du problème et au type d'informations recherchées, des outils incorporant explicitement un couplage entre des techniques adaptées au quartier et celles relevant de la plus grande échelle sont préconisées. On parle alors de “modèle hybride” [Nikmo et al 1999].

Dans la suite chacune de ces techniques est succinctement développée et illustrée d'exemples.

Approches empiriques basées sur les observations

Ces modèles reposent sur des formulations simples établies à partir d'observations et de mesures. Celles-ci proviennent de campagnes expérimentales effectuées en site réel ou d'études en soufflerie incluant un grand nombre de paramètres. Très répandus en réponse aux problématiques de type “street canyon”, ils sont parfois utilisés dans un contexte un peu plus large (le quartier).

La concentration en un point est exprimée en fonction d'un certain nombre de paramètres liés à la météorologie, à la source d'émission et à la disposition du site. Les hauteurs, longueurs et largeurs moyennes de l'ensemble des bâtiments considérés ainsi que les écarts-types associés, la largeur des rues, les rapports entre aire construite et aire totale définis suivant l'orientation des bâtiments par rapport à la direction du vent, la forme des toits sont des exemples des paramètres de forme, considérés par ces techniques.

Le plus souvent, des essais en soufflerie sur des configurations types permettent de disposer de concentrations observées et de références.

Le manque de généralité par rapport à la typologie des villes et par rapport à la variabilité des conditions météorologiques est le principal inconvénient de cette approche. Elle ne peut fournir que des éléments préliminaires pour apprécier la qualité de l'air d'un site "non standard". Elle est cependant mise en œuvre de manière opérationnelle par les autorités allemandes [Theurer 1999 ; Theurer et al 1996].

Modèles gaussiens

7.3.1.1 LES MODELES GAUSSIENS LINEIQUES

Ils reposent sur une formulation adaptée à la prise en compte des sources linéiques (voir annexe sur les modèles gaussiens). Ils ont été initialement développés pour traiter les problèmes urbains [Hanna 1971]. Ils proposent une approximation de la qualité de l'air à l'échelle du quartier, comprenant un réseau de rues. Au-delà il faut pouvoir tenir compte des autres types d'émetteurs (ponctuel ou surfaciques).

Des exemples d'intercomparaison des performances de ces méthodes dans le contexte urbain sont donnés dans [Rao et al 1989 ; Kono et al 1990].

7.3.1.2 L'APPROCHE GAUSSIENNE A L'ECHELLE DE L'AGGLOMERATION

Bon nombre d'outils utilisés de manière opérationnelle par les pouvoirs publics reposent sur des modèles gaussiens suffisamment sophistiqués pour :

- Pouvoir intégrer les contributions de sources multiples et de nature différente,
- Prendre en compte certaines spécificités liées au milieu urbain (turbulence induite par les voitures par exemple),
- Traiter des données météorologiques représentatives d'épisodes de pollution ou des données statistiques sur une ou plusieurs années.
- Intégrer un modèle simplifié à l'échelle de la rue de façon à disposer d'une information "zoomée" complémentaire,
- Prendre en compte une chimie simplifiée (du type transformation NO/NO₂)
- Pouvoir éventuellement être branchés sur un modèle d'exposition.

Ces logiciels sont clairement les plus répandus pour appréhender les niveaux de pollution à l'échelle d'un arrondissement ou d'une ville. Leur développement a connu ces dernières années une explosion à l'échelle européenne, particulièrement dans le cadre du programme EUROTRAC2. Parmi les plus connus nous pouvons citer :

- ADMS-Urban développé par le CERC (www.cerc.co.uk) et commercialisé en France par la société NUMTECH (www.numtech.fr). Ce modèle répond à l'ensemble des caractéristiques listées ci-dessus. Le modèle de rue qu'il utilise est le modèle OSPM développé au NERI [Berkowicz 1997], et il propose un schéma chimique simplifié pour les NO_x et l'ozone. Un module de gestion des

émissions couplé à un système d'information géographique (Arcview ou Mapinfo) permet de calculer et de représenter les données d'émission. D'un point de vue météorologique ce logiciel repose sur la prise en compte d'une paramétrisation théorique de la couche limite atmosphérique suivant la théorie de Monin-Obukhov, et est assimilé aux modèles gaussiens dits de « seconde génération ». Le coût d'une licence s'élève à 13 000 euros environ pour la caractérisation d'un site.

- AIRVIRO [Mukherjee et al 2000], développé par le SMHI (Suède – www.indic-airviro.smhi.se). Ce logiciel intègre également la plupart des caractéristiques citées ci-dessus. En particulier tout type de source est pris en compte par une modélisation gaussienne du panache et un modèle simplifié de rue canyon [Jonhson 1975] est intégré. Une approche statistique de la météorologie permet de disposer de données sur le long terme. Une comparaison de ses performances avec celles de ADMS-Urban est proposée dans [Veals et Appely 1997]. AIRVIRO est un système de modélisation intégré, qui contient un large éventail de logiciels. Il inclut aussi un pré-processeur météorologique et un code tridimensionnel. Ceci explique le coût élevé de cet outil, de l'ordre de quelques dizaines de kiloeuros.
- ARIA Impact commercialisé par la société Aria Technologies (www.aria.fr) est un logiciel de calcul d'impact de tous types de sources. Il repose sur une approche gaussienne traditionnelle et ne modélise pas la chimie complexe. Il s'agit d'un outil entièrement intégré, conçu pour la réalisation d'études d'impact urbain ou industriel. Son coût est de l'ordre de 10 000 euros.
- OML (www.dmu.dk/AtmosphericEnvironment/OML_Intr.htm) est l'équivalent danois de ADMS_Urban. Il s'agit d'un modèle gaussien de seconde génération, applicable à tous types de sources. Il est cependant nettement moins élaboré que les deux logiciels précédents (pas de modélisation des effets de rue canyon ou de la chimie). Il est cependant utilisé à des fins réglementaires, son prix est de l'ordre de 1500 euros.
- PROKAS_V est un modèle gaussien adapté à la modélisation de la pollution imputable au trafic routier. Il est développé et commercialisé par le bureau d'étude allemand de A. Lohmeyer (LOHMEYER_KA@t-online.de). Il est basé sur une modélisation gaussienne du panache pour des termes sources linéiques. Il inclut la possibilité de prendre en compte les typologies de rues.
- UDM_FMI (www.fmi.fi) est cité à titre d'exemple. Il ne s'agit pas d'un outil commercial, mais du logiciel proposé par le FMI (Finnish Meteorological Institute) à des fins réglementaires. Il est basé sur une modélisation gaussienne du transport des polluants, avec prise en compte d'une chimie simplifiée et du dépôt des particules.

Modèles tridimensionnels

7.3.1.3 GENERALITES

Les modèles eulériens sont basés sur la résolution numérique de l'équation de transport-diffusion régissant le comportement du polluant, dans un référentiel donné. Un maillage tridimensionnel permet de repérer les points auxquels les concentrations sont évaluées. Les champs de vent et de turbulence dans lesquels évolue le polluant peuvent être 1) soit calculés sur le même principe, ce qui implique la résolution des équations de Navier-Stokes, 2) soit reconstruits à partir de données mesurées par des techniques d'interpolation. L'approche se décompose donc en deux étapes principales

- Le calcul des champs météorologiques par un pré-processeur adapté
- Le calcul des concentrations en résolvant l'équation de convection/diffusion.

Il est délicat de mettre en œuvre ces techniques, coûteuses en données et en temps de calcul, pour disposer d'éléments statistiques représentatifs de la qualité de l'air d'une agglomération sur une ou plusieurs années. Cette démarche est plutôt adaptée à l'analyse de scénarios, et au diagnostic de situations de pollution. Un exemple de mise en œuvre pratique de cette approche est donné dans [Prabha et al 1999]

Les modèles tridimensionnels résultent de l'implantation numérique de techniques sophistiquées pour approcher les équations de la physique, et ne peuvent donc être utilisés de manière pertinente que par des utilisateurs avisés. En effet la génération d'un maillage cohérent, l'ajustement des paramètres numériques, l'identification et la neutralisation d'éventuels artéfacts numériques sont autant de difficultés qui ne peuvent être surmontées sans le "background" adéquat.

Grâce aux progrès de l'informatique, un nombre de plus en plus important de ces outils fonctionne sur des systèmes PC, mais la plupart d'entre eux a été développé sur des stations de travail sous UNIX.

7.3.1.4 LES PRODUITS DISPONIBLES

A l'échelle du quartier, les logiciels 3D adaptés, sont les mêmes que ceux utilisables pour l'analyse de l'impact local des sources de pollution. Ce sont des codes tridimensionnels qui résolvent les équations complètes de la mécanique des fluides, associées au traitement de l'équation de convection/diffusion. La finesse des maillages utilisés permet de représenter correctement le bâti, les sources et les phénomènes physiques. Les dimensions du domaine, plus importantes qu'au niveau local, induisent simplement un temps de préparation et de calcul très supérieur. Parmi les logiciels disponibles, nous pouvons citer :

- ANSWER commercialisé par la société ACRI (www.acri.fr)
- ARIA Local (ou MERCURE) distribué par la société Aria Technologies (www.aria.fr).
- DFA (Dragon Fly Air) distribué par la société Siria Technologies (www.siriatech.com).
- FLUIDYN Panache, commercialisé par la société Transoft (www.fluidyn.com)
- MISKAM est un logiciel tridimensionnel développé par un bureau d'étude allemand, spécialisé dans les problèmes environnementaux. Il est distribué depuis 2001 par la société KISTERS France (www.kisters.de).

Les principes sur lesquels sont développés ces logiciels sont globalement équivalents.

Parmi les logiciels de mécanique des fluides plus généraux et néanmoins utilisables dans le domaine de la dispersion, nous citons les plus connus :

- CFX-TASCFLOW (www.software.aeat.com/cfx) est un logiciel bien référencé dans le domaine de la mécanique des fluides numérique. Une version spécialement dédiée à la modélisation des écoulements atmosphériques locaux et de la dispersion de polluants est maintenue à l'Université de Thessalonique (Grèce).
- FLUENT (www.fluent.com) est un logiciel très connu et performant dans le domaine de l'industrie aérospatiale et des turbomachines. Il est moins adapté aux problèmes environnementaux.
- PHOENICS (www.cham.uk) est un logiciel très ouvert disposant de modules spécifiques pour le traitement de la dispersion.

A l'échelle de l'agglomération, i.e. pour des domaines de calcul de l'ordre de quelques dizaines de kilomètres, la gamme des logiciels disponibles se situe plutôt dans celle des modèles méso-échelle ou régionaux. Dans ce cas le pré-processeur météorologique est très souvent un logiciel à part entière. Etant donné les dimensions du domaine, la reconstitution des champs de vent et de turbulence se fait très souvent par interpolation de données mesurées, si celles-ci sont suffisamment nombreuses. Il n'est de plus pas rare que ces outils comportent un module de chimie complexe qui permet de calculer les concentrations en ozone sur la zone cible. Parmi les outils disponibles en Europe, les exemples les plus connus sont :

- AIRVIRO, dans sa version tridimensionnelle développé par le SMHI (Suède – www.indic-airviro.smhi.se) et commercialisé en France par Néréides. Une comparaison des modèles de dispersion passive de Aria Régional et de AIRVIRO a été menée par le LCSQA en 1998 [Chhuon et Wroblewski 1998].
- ARIA Régional distribué par la société Aria Technologies (www.aria.fr)
- CALMET/CALGRID est un système de modélisation de la qualité de l'air avec prise en compte de la photochimie, développé par des universitaires américains et téléchargeable gratuitement sur Internet (www.arb.ca.gov/html/soft.htm). Des sociétés spécialisées proposent des versions packagées et conviviales de ce logiciel. Par exemple en France, il fait partie des outils de la société ACRI (www.acri.fr). Il est décrit précisément dans [Yamartino et al 1992], et un exemple d'application à un milieu urbain est donné dans [Silibello et al 1998].
- MARS développé par l'Université de Thessalonique en Grèce (<http://aix.meng.auth.gr/lhtee>) est un système de modélisation de la qualité de l'air à l'échelle urbaine et régionale, avec prise en compte de la photochimie. Il n'a pas de vocation commerciale mais a fait l'objet de nombreuses évaluations [Moussiopoulou et al 1995 ; Moussiopoulou et al 1997].
- MESO-NH développé par Météo France et le Laboratoire d'Aérodynamique, est un modèle très sophistiqué particulièrement du point de vue de la modélisation de la météorologie (résolution minimale de l'ordre de 100m). Cela implique qu'il requiert un support informatique très performant (super-ordinateurs parallèles ou cluster de stations) ce qui limite son usage en conditions opérationnelles.

De manière générale les outils tridimensionnels disponibles sur le marché sont relativement onéreux. Le prix d'une licence est de l'ordre de 20 à 35 K€ pour le

module de calcul. A cela il faut rajouter les outils annexes nécessaires à sa mise en œuvre : outil de définition de la géométrie, outil de maillage, outil de recensement et de gestion des émissions, pré-processeur pour le traitement de la météorologie, post-processeur pour la représentation. Le coût total est alors très élevé. L'utilisation opérationnelle de ces logiciels nécessite logiquement des compétences pointues dans le domaine de la modélisation de la qualité de l'air.

Conclusions

Les exemples d'outils listés dans les paragraphes précédents ont largement été empruntés à l'état de l'art européen, et notamment aux travaux qui se déroulent dans le cadre du programme SATURN, composante d'EUROTRAC2 (www.lhtee.gr/saturn.html). Il s'agit d'un programme dédié au développement et à la validation des modèles de qualité de l'air en milieu urbain. Ses préoccupations s'étendent du modèle de rue (échelle locale), à l'échelle de l'agglomération. Un effort de cohérence dans les démarches d'évaluation et d'amélioration des modèles est fourni dans ce cadre.

Dans le même ordre d'idée, les actions COST de la Communauté européenne, ont abouti au recensement des outils disponibles pour la modélisation de la qualité de l'air, en 1996 (COST 615). Il est maintenant sur Internet sur le site du Centre Européen de la Qualité de l'air (ETC-AQ, www.etcaq.rivm.nl/databases/mds.htm) sous la forme d'un système de documentation (Model Documentation System MDS). Un certain nombre de renseignements sur les outils disponibles, notamment pour les problèmes urbains, sont consignés à cette adresse.

Enfin, concernant les objectifs de la modélisation à l'échelle de l'agglomération, il est intéressant de noter l'importance prise par l'aide à la gestion des politiques de réduction des émissions, la définition des réglementations, et l'information au public. Avec ces préoccupations, la présentation claire et attractive des résultats de calcul devient un élément déterminant, d'où les efforts fournis par les scientifiques pour proposer des outils intégrés. Ils allient une gestion simple et efficace des données d'entrée (à l'aide d'un Système d'Information Géographique par exemple), le calcul d'indicateurs dépassant largement le niveau de concentration (exposition des populations, coût économique), et l'utilisation des nouvelles technologies (Internet par exemple) pour la présentation et la diffusion des informations. Ces démarches se multiplient en Europe. Le système norvégien AirQUIS (www.nilu.no/avd/imis/airquis.html), ou encore le logiciel espagnol ANA (www.ercim.org/publication/Ercim-news/env34/jose.html) en sont des exemples.

Tableau récapitulatif : Impact sur zone urbaine

Objectif	Impact des développements et aménagements urbains		
Polluants	SO ₂ , CO, NO _x , NO ₂ , COV, PM...		
Sources	Ponctuelles Surfaciques Linéiques		Rejets industriels canalisés Rejets domestiques et industriels diffus Trafic automobile
Données météorologiques	Météorologie locale ou synoptique		Vent, température, nébulosité, ensoleillement
Type de modèle			Exemples de modèles Et coût
	avantages	inconvénients	
Gaussiens	Simplicité de mise en œuvre, faibles coûts	Traitement simplifié, applicables à une seule configuration (géométrie du bâti + trafic) Incertitudes pouvant être grandes	ADMS-Urban, OSPM, ARIA Impact, OML, PROKAS_V, UDM_FMI (1000 à 5000 €)
Eulériens non hydrostatiques	Traitement spécifique du champ météorologiques Utilisation plus simple que les codes hydrostatiques	Mal adapté au traitement du bâti local	ARIA Régional, AIRVIRO, MESO-NH, CALMET/CALGRID, MARS (20 à 40 K€)
Eulériens hydrostatiques	Résolution de l'écoulement Approche détaillée des phénomènes	Très lourd à mettre en œuvre, outil demandant un opérateur spécialisé. Temps calcul relativement élevé	ANSWER, CHENSI, FLUENT, MERCURE ou ARIA LOCAL, MISKAM, PHOENICS, CFX-TASCFLOW, STAR-CD, FLUIDYN PANACHE (20 à 40 K€)

8 L'IMPACT REGIONAL

8.1 PROBLEMATIQUE

Champ d'application

Il s'agit de traiter le comportement des polluants dans le cadre de la zone de surveillance d'une Association afin d'appréhender les différents facteurs qui contrôlent la pollution sur le site. A cette échelle (typiquement 300x300 km²), la problématique s'inscrit dans l'évaluation des transports inter-agglomérations et des pollutions externes au domaine. Dans cet optique deux types de modèles doivent être utilisés, un modèle régional imbriqué dans un modèle de transport transfrontière (domaine de 1000x1000 km²).

Les questions soulevées portent sur l'impact global de l'agglomération, sur l'environnement et notamment sur la détermination du "panache urbain" et de son influence sur les zones rurales proches. Ces outils doivent aider à comprendre et à évaluer les mesures régionales à mettre en œuvre :

- Comment équilibrer les communications inter-agglomération, comment gérer le trafic en zone péri-urbaine, ou en zone urbaine ?
- Quel type de mesure mettre en place pour limiter les émissions de polluants d'origine automobile ?
- Comment limiter l'impact de l'agglomération sur son environnement ?

Cependant d'autres questions sont également à prendre en compte, notamment la prévision d'épisodes de pollution atmosphérique. Les dimensions des domaines de calculs permettent de construire correctement le trajet des masses d'air et leur recirculation, en fournissant un bon descriptif de l'évolution de l'atmosphère.

A cette échelle la principale préoccupation est l'impact du trafic automobile sur la qualité de l'air. Il convient néanmoins de ne pas négliger les autres sources anthropogéniques (industrie, activité tertiaire ou résidentielle) ainsi que les sources biotiques. Un point très important concerne les échanges de pollution entre agglomérations.

Pour bâtir des stratégies de réduction des émissions et accroître la compréhension des phénomènes, il convient de s'appuyer sur des campagnes de mesures. En effet celles-ci permettent de disposer d'éléments précis de réponse concernant la qualité de l'air d'une zone d'étude. Hélas elles sont peu répandues et, du fait de leur coût, souvent très incomplètes pour cartographier correctement une zone d'étude régionale. Les modèles numériques (résolution d'un problème mathématique) offrent une information complémentaire qui reste incontournable dans l'optique d'études de planification.

La modélisation de la qualité de l'air à l'échelle régionale nécessite de lourds moyens numériques (modèles complexes, SIG) et un important volume de données d'entrée (météorologie, inventaire d'émissions, conditions aux limites). Cela implique aussi l'imbrication de modèles de différentes échelles pour évaluer au mieux les apports externes au domaine.

Les polluants concernés

Il s'agit de l'ensemble des polluants classiquement étudiés:

- Le dioxyde soufre (SO₂), émissions liées typiquement à la présence d'industries,
- Les oxydes d'azote (NO_x et NO₂), émis majoritairement par le trafic automobile
- Les COV intervenant dans les processus de formation de l'ozone,
- Le monoxyde de carbone, Les particules (PM) et plus particulièrement les poussières fines mises en cause pour les véhicules diesel,
- L'ozone (O₃), polluant secondaire issu de processus photochimiques.

Généralités sur les phénomènes observés

La modélisation de la qualité de l'air à l'échelle de la région est un problème délicat à traiter puisqu'elle nécessite d'appréhender le site et les émissions très localement (structure et disposition des rues, implantation des sources) pour déduire une répartition des polluants à un niveau global (l'agglomération voire la région). Le choix des modèles à appliquer dans ce contexte, pour arriver au meilleur compromis entre précision, lourdeur des calculs et prise de décisions politiques, n'est pas aisé.

8.1.1.1 METEOROLOGIE

La description de l'écoulement dynamique de l'atmosphère relève de la mésoéchelle. Les modèles doivent décrire le passage de grandes perturbations et fronts météorologiques. La description de ces phénomènes d'influences globales (la formation d'une perturbation qui atteint la France débute à quelques milliers de kilomètres dans l'Atlantique) demande l'utilisation de modèles météorologiques très lourds et très complexes. Les modèles de dispersion à échelle régionale utilisent généralement des données qui proviennent de ces codes météorologiques en les interpolant sur le domaine de calcul, ou en les utilisant comme conditions aux limites de leur module d'écoulement. Les modules dynamiques de description de l'écoulement sont de type météorologique méso-échelle.

Les données proviennent en général de modèles de prévision météorologique à grande échelle. En France elles proviennent soit du modèle européen de l'ECMWF (European Center of Medium Scale Weather Forecast), soit de Météo France, à partir des modèles ARPEGE et ALADIN.

8.1.1.2 CHIMIE

En atmosphère régionale, les polluants tels que les NO_x, les COV et l'ozone sont amenés à interagir et à être transportés sur de grandes distances. Les polluants biotiques provenant d'espaces verts et de forêts sont des sources très importantes de composés et doivent être prises en compte finement dans cette approche.

8.2 LES DONNEES D'ENTREE

Les sources

Les sources principales à l'échelle régionale sont de nature multiple. Il s'agit principalement du trafic routier, des industries, et du chauffage urbain. Cependant la globalité de la situation impose de réaliser un inventaire le plus exhaustif possible. Cela sous-entend un lourd travail de collecte et de traitement de l'information.

Dans le cadre de l'impact régional, deux approches sont possibles pour la réalisation de ces inventaires, soit une approche "bottom up", soit une approche "top down".

8.2.1.1 L'APPROCHE "BOTTOM UP"

Les émissions du domaine considéré sont déterminées de manière individuelle sur chaque cellule du domaine de calcul. On procède ensuite à une agrégation de ces données pour reconstruire un inventaire sur l'ensemble du domaine. Les sources prises en compte sont décrites dans la partie "impact urbain". Cette approche se révèle très délicate pour une application à échelle régionale, la taille du domaine et le nombre de sources à traiter rendant cette approche onéreuse.

8.2.1.2 L'APPROCHE "TOP DOWN"

Dans ce cas, on considère des bilans nationaux sur chacun des secteurs d'activités impliqués et ces bilans sont projetés sur le maillage du domaine considéré. Cette approche est moins précise que la précédente, mais offre l'avantage d'une grande souplesse et d'une uniformisation dans le traitement des informations. Dans le cadre des inventaires à très grande échelle (continentale) on peut citer celui proposé par le CCC (Chemical Coordination Center) du programme EMEP, et les bases de données développées par le programme européen GENEMIS, sous l'égide de l'IER de Stuttgart.

Domaine de calcul

Dans le cadre d'une modélisation régionale il convient de raisonner sur des domaines de calcul imbriqués sur différentes échelles. Il est recommandé d'utiliser au moins deux domaines:

Le premier de l'ordre de 1000x1000 km² doit permettre de décrire l'ensemble des recirculations de polluants (essentiellement transport photochimique) et doit intégrer les apports externes provenant d'autres agglomérations au delà des frontières du domaine.

Le deuxième de plus petite taille (300x300 km² par exemple), et centré sur la zone d'étude permet, de prendre en compte les émissions locales et de décrire l'atmosphère sujet de l'étude.

8.3 QUELS OUTILS ET QUELS INVESTISSEMENTS

Les outils développés pour simuler la qualité de l'air en zone régionale s'appuient fortement sur la représentation tridimensionnelle du transport des polluants.

les méthodes basées sur la résolution numérique de l'équation de transport/diffusion (K-modèles) sont alors les plus utilisées.

La majorité des modèles possèdent, à cette échelle, un module photochimique qui est couplé au modèle de transport dynamique.

Ce type de modélisation est complexe, et de tels projets impliquent l'utilisation de matériel logiciel sophistiqué mis en œuvre par du personnel hautement qualifié.

Les ordres de grandeurs des coûts de telles applications sont de plusieurs millions de francs, si l'on compte la prise en charge de l'ensemble du travail de développement de la plate-forme de modélisation (compilation et gestion des données, achat des machines et logiciels, phase de calage).

Généralités

Les modèles eulériens photochimiques sont basés sur la résolution numérique de l'équation de transport-diffusion qui régit le comportement du polluant sur un domaine donné. Les équations sont intégrées sur un maillage tridimensionnel. Les champs de vent et de turbulence, peuvent être : soit calculés sur le même principe, ce qui implique la résolution des équations de Navier-Stokes, soit interpolés à partir de données mesurées.

La partie photochimie est traitée par de nombreux réacteurs photochimiques qui résolvent l'équilibre chimique sur chaque maille.

La lourdeur des calculs nécessaires a longtemps limité l'utilisation de ce type d'outils. Cependant grâce aux progrès de l'informatique, un nombre de plus en plus important d'entre eux fonctionne sur des systèmes PC, ce qui facilite l'accès à ces codes.

8.3.1.1 LES PRODUITS DISPONIBLES

Dans le cadre de la pollution régionale une majorité de produits reste encore du domaine universitaire ou de la recherche, cela est encore plus net pour les outils trans-frontières. On peut cependant recenser un certain nombre de codes de calcul opérationnels, qui peuvent être classés en trois catégories suivant leurs objectifs :

1) Résolution de la dynamique de l'écoulement et du transport passif

- ARIA Régional distribué par la société Aria Technologies (www.aria.fr)
- CALMET(www.arb.ca.gov/html/soft.htm). Des sociétés spécialisées proposent des versions packagées et conviviales de ce logiciel. Par exemple en France, il fait partie de SAMAA code de la société ACRI (www.acri.fr).
- FLUIDYN Panache, commercialisé par la société Transoft (www.fluidyn.com),
- MESO-NH est le code pronostique de résolution de la météorologie à méso-échelle de Météo-France;
- RAMS est un modèle pronostique de résolution de l'écoulement atmosphérique. Il est disponible gratuitement sur internet à l'adresse suivante, mais sa version commerciale est distribuée en France par la société NUMTECH (www.numtech.fr).

2) Résolution de la chimie

- UAM V modèle de l'US EPA commercialisé par la société SAI.
- AIRQUAL développé par le consortium français EDF/IFP/LISA et dont les licences sont distribuées et gérées par la société ARIA Technologies,
- CALGRID est un système de modélisation de la qualité de l'air avec prise en compte de la photochimie, développé par des universitaires américains et

téléchargeable gratuitement sur internet (www.arb.ca.gov/html/soft.htm). Comme CALMET, il est distribué en France par ACRI.

- CHIMERE version régionale (CNRS/IPSL), distribué par la société ARIA Technologies,
- MESO-NH Chimie, version de MESO-NH avec prise en compte de la photochimie à travers l'implantation de plusieurs modules chimiques disponibles dans le domaine public (SAPRC97, RACM, CB IV, MOCA).

3) Modèles dédiés à l'échelle continentale

- CHIMERE Continental développé par le CNRS/IPSL et désormais disponible dans le domaine public
- EMEP (version lagrangienne et version eulérienne) a été développé par la Météorologie nationale norvégienne (www.dnmi.no) afin de fournir des éléments d'appréciations aux politiques de gestion de la qualité de l'air européen dans le cadre de la Convention de Genève sur le transport des polluants à longue distance (www.emep.int),
- MOCAGE modèle de qualité de l'air grande échelle basé sur le module météorologique ARPEGE (Météo-France),
- LOTOS (TNO, Pays-Bas), Long Term Ozone Simulation, le modèle couvre l'Europe sur un domaine de 70x70 mailles de 60 km de côté. Le modèle simule le transport à longue distance de l'ozone, et maintenant la formation des aérosols secondaires,
- EURAD (Institut fuer Geophysik und Meteorologie, Allemagne),European Air Pollution Dispersion Model, composé de plusieurs modules :EEM EURAD Emission Module, MM5 Meteorological Model Version 5 et CTM Chemistry and Transport Model.

Conclusions

La particularité du transport des polluants à l'échelle régionale est de combiner des informations provenant des deux échelles proches : les émissions provenant du niveau urbain et le transport des polluants à longue distance provenant des modèles trans-frontières. La nécessité de prendre en compte ces deux sources d'information implique une modélisation lourde en moyen et en coût. De plus l'objectif, qui est fortement porté sur la description de l'ozone troposphérique impose l'utilisation du module photochimique ce qui complique encore le travail.

Ces projets régionaux reposent sur le couplage et l'imbrication de modèles de différentes échelles qui sont des procédures non figées sur lesquelles la recherche est encore en cours. Cela vaut aussi pour la modélisation photochimique toujours en cours de développement (modélisation multi-phasique...) ce qui rend ces outils très délicats d'emploi.

Une fois intégrés toutes ces contraintes, la modélisation régionale peut être un formidable outil d'analyse et de planification d'une région en matière de qualité de l'air, voire avec les progrès de l'informatique et les simplifications numériques appropriées, un outil de prévision comme semblent le montrer les différentes expériences en cours (CHIMERE continental notamment).

Tableau récapitulatif : Impact régional

Objectif	Compréhension des comportements des polluants à l'échelle régionale		
Polluants	O₃, SO₂, CO, NO_x, NO₂, COV, PM...		
Sources	Ponctuelles Surfaciques Linéiques		Rejets industriels canalisés Rejets domestiques et industriels diffus Trafic automobile
Données météorologiques	Météorologie synoptique + sorties de modèle de prévision météorologique		Vent, température, nébulosité, ensoleillement
Type de modèle			
	Avantages	Inconvénients	Exemples de modèles
Eulériens	Traitement spécifique du champ météorologiques Résolution de l'écoulement et de la dispersion	Très lourd à mettre en œuvre, outil demandant un opérateur spécialisé. Temps calcul relativement élevé	ARIA Régional ⁽¹⁾ , DFA ⁽¹⁾ , MARS ⁽²⁾ , CALMET/CALGRID ⁽²⁾ , CHIMERE ⁽³⁾ , MOCAGE ⁽³⁾ , EMEP ⁽³⁾ , LOTOS ⁽³⁾ , EURAD ⁽³⁾ , FLUIDYN Panache ⁽²⁾ , UAM V ⁽²⁾ , AIRQUAL ⁽²⁾

Résolution de la dynamique de l'écoulement et du transport passif⁽¹⁾Résolution de la chimie⁽²⁾Modèles dédiés à l'échelle continentale⁽³⁾

PARTIE II

MISE EN ŒUVRE PRATIQUE

9 LES INVENTAIRES D'EMISSION

9.1 INTRODUCTION

La description des rejets émis par les sources considérées pour évaluer la qualité de l'air par la modélisation dans une zone donnée, est une étape fondamentale. En effet, il serait illusoire d'espérer obtenir des résultats exploitables en alimentant les modèles de dispersion, aussi sophistiqués soient ils avec des données d'émission trop approximatives ou erronées. L'étape d'inventaire et de quantification des émissions conditionne la qualité des résultats des modèles de dispersion.

Suivant les objectifs de l'étude, cette étape peut s'avérer plus ou moins fastidieuse. Par exemple, dans le cas où l'on se limite à des rejets provenant de cheminées d'installations industrielles, les caractéristiques physiques et thermodynamiques des polluants ainsi que la géométrie de la source, sont connues de l'exploitant. Le débit rejeté du polluant considéré peut être estimé par des mesures à l'émission ou l'analyse du procédé industriel. Dans ce cas précis, l'émission est relativement bien cernée.

Lorsque l'on s'intéresse à la qualité de l'air en milieu urbain, les sources provenant du trafic automobile deviennent prépondérantes. Leur quantification est beaucoup plus délicate à obtenir. En effet cela suppose de disposer de données sur le trafic propre aux voies visées (nombre de véhicules, vitesse, type de véhicule), mais aussi sur la répartition du parc roulant à l'époque considérée (type de carburants, pots catalytiques). Pour être tout à fait exact, il est aussi nécessaire de distinguer les différents régimes d'émission (échappement, démarrage à froid/chaud, évaporation en roulage ou en stationnement...). Autant de paramètres qui compliquent considérablement la démarche d'inventaire des émissions.

Les difficultés se présentent lorsque l'objectif visé est la modélisation photochimique à l'échelle urbaine ou régionale. Il faut alors recenser les sources de toute nature (industrie, trafic, chauffage, végétaux...) sur l'ensemble du domaine qui peut s'étendre sur plusieurs centaines de kilomètres, avec une précision spatio-temporelle très fine (le km^2 et l'heure suivant les applications) en discernant au mieux la nature des polluants. Dans ce cas le travail minutieux d'inventaire peut-être très coûteux en temps et en moyens humains. Cela est dû à l'étendue du domaine de calcul, à la variété des sources à considérer, aux lourdes incertitudes qui entachent certaines données (chauffage, végétaux), mais aussi à la volonté et à la disponibilité, plus ou moins bonnes, des organismes qui détiennent ces informations.

Il n'empêche que l'impact de la qualité des données d'entrée sur les simulations réalisées par la suite est suffisamment déterminant pour amener les modélisateurs à s'impliquer de plus en plus dans la stratégie de réalisation de ces inventaires. A l'heure actuelle, deux AASQA, AIRPARIF et ASPA ont réalisé un travail énorme afin de recenser des données correctes pour alimenter leur modèle photochimique. La sensibilité des résultats à la qualité de l'inventaire est apparue de manière évidente. Mais ces expériences ont également montré toutes les difficultés liées à son établissement, à sa maintenance et le besoin de définir une méthodologie générale. A titre d'exemple ces deux associations ont consacré près de trois ans chacune à

l'établissement de leur inventaire, et emploient une personne à plein temps afin d'en assurer l'évolution et la mise à jour.

Un groupe de travail national, animé par le MATE, l'ADEME et le LCSQA, s'est constitué en octobre 2000, sur cette thématique, afin de recenser les sources d'informations, et de définir une stratégie d'accès à ces données. Le CITEPA, centre de référence national en la matière, prépare un guide méthodologique pour la réalisation d'inventaires locaux. Ce document sera prêt pour 2002/2003. Ces initiatives devraient contribuer à éclaircir le débat.

C'est pourquoi, dans ce chapitre, nous nous bornerons à expliciter un certain nombre de définitions et de recommandations très générales, établies avec le concours du CITEPA. Les détails de la démarche de réalisation des inventaires d'émissions seront développés dans le guide du CITEPA, et ne font donc pas l'objet du présent document.

9.2 GENERALITES SUR LES INVENTAIRES/CADASTRES D'EMISSION

Traditionnellement, lorsque l'on parle de cadastre d'émission, la répartition spatiale, souvent dépendante de l'échelle de modélisation visée, est implicitement intégrée. C'est ce qui distingue la notion de cadastre de celle d'inventaire.

La démarche globale de réalisation des inventaires peut se décliner autour des étapes suivantes :

Définition du problème

Cela inclut la définition des polluants que l'on souhaite incorporer dans l'inventaire. Elle est très dépendante de l'application visée. Ainsi en cas de modélisation photochimique, il sera indispensable de disposer d'un inventaire précis des Composés Organiques Volatils émis (COV).

Mais il s'agit également d'inventorier les sources, leurs caractéristiques géométriques, et leur localisation. Cette phase de collecte de données et de rapportage, est extrêmement fastidieuse. Les sources sont habituellement réparties suivant de grandes catégories :

Les sources ponctuelles : elles se réfèrent typiquement aux rejets canalisés d'une installation fixe telle qu'une usine. Une enquête auprès des industriels concernés ou des DRIRE doit permettre à l'inventoriste d'accéder au type de polluants rejetés, par quelles voies et sous quelles formes, afin de juger de la nécessité d'incorporer la source ou non. On parle de Grande Source Ponctuelle (GSP) lorsque les émissions sont jugées importantes ou susceptibles d'atteindre des niveaux relativement élevés dans certaines conditions. Les seuils définis dépendent des objectifs et des moyens fixés.

Les sources linéiques : elles sont imputables en grande partie au trafic routier, et plus modestement à d'autres moyens de communication (train, fluvial). Dans le premier cas leur recensement nécessite une modélisation du réseau routier, et des données chiffrées sur les caractéristiques des véhicules circulant (nature du parc, style de conduite),

Les sources surfaciques de nature anthropogénique : ce terme désigne typiquement les sources dues à l'activité humaine. Leur origine peut être liée à l'habitat (chauffage), mais aussi au transport routier (agrégation de sources linéiques sur le noyau urbain), assimilées à des surfaces d'émission sur le domaine d'étude,

Les sources surfaciques d'origine biogénique : il s'agit des émissions de COV liées aux surfaces végétales. Leur prise en compte est en particulier déterminante dans la modélisation photochimique.

Il est nécessaire de définir ces sources par rapport à un référentiel cohérent. Plusieurs types de formats sont à la disposition de l'utilisateur, établis suivant des règles économiques (SECTEN, NAMEA) ou géographiques (PRQA, DEPARTEMENT) pour ce qui est des formats produits par le CITEPA.

Les activités émettrices sont représentées à l'aide de nomenclatures adaptées. En Europe la classification SNAP (Selected Nomenclature for Air Pollution) associée à la méthodologie CORINAIR (CORE Inventory of AIR pollution in Europe) est largement utilisée et retenue par la Commission Economique pour l'Europe des Nations Unies (www.aeat.co.uk/netcen/corinair/corinair.html) . Elle résulte d'un programme de travail géré par l'Agence Européenne de l'Environnement, et initié au cours des années 80. Régulièrement mise à jour, elle décline aujourd'hui les activités émettrices en 11 catégories différentes (transport routier ou non, biogénique, combustion industrielle ou pas, procédés industriels, solvants...) au sein desquelles sont décrits 2 niveaux d'identification. Un type donné d'émission est donc représenté par les 3 nombres à deux chiffres relatifs aux catégories et sous-catégories. Il existe des nomenclatures dérivées permettant de mieux caractériser un certain type d'activité. Pour mémoire nous citerons également la nomenclature SCC (Source Classification Codes) développée par l'USEPA aux Etats Unis (www.epa.gov/ttn/chief/codes/index.html) .

Il est important de bien choisir son référentiel par rapport à ce que le code de qualité de l'air (avec prise en compte de la photochimie ou pas) sera en mesure d'interpréter par la suite : nature des informations relatives aux sources (géoréférencement, maillage, type d'activité) et aux émissions (spéciation des COV en particulier).

Choix de la méthode d'estimation des sources

Il s'agit de définir une stratégie qui permette de quantifier les émissions que l'on associera à chaque source recensée. Deux techniques sont usuellement rencontrées :

Le Bottom-up : les émetteurs sont individuellement recensés et un travail d'investigation permet d'affecter à chacun d'eux une donnée chiffrée d'émission. par sommation, des entités plus importantes sont ainsi reconstituées automatiquement.

Le top-down : Des sources d'informations globales, telles que les enquêtes régionales, des données INSEE, des statistiques de consommation, qui font référence à des états annuels sont exploitées et désagrégées de manière à en tirer une estimation des émissions horaires.

Au cours de l'élaboration de l'inventaire, il sera certainement nécessaire de coupler ces deux approches, suivant la nature des sources considérées (grandes sources ponctuelles ou source surfacique), les informations disponibles, le degré de complexité

que l'on s'autorise. Ainsi la précision requise, mais également le budget disponible sont des critères de choix à prendre en considération.

Collecte des données et des informations

Elle constitue l'étape la plus fastidieuse de l'élaboration effective du cadastre des émissions. Il s'agit du recensement de toutes les données chiffrées nécessaires au calcul des émissions.

Dans le meilleur des cas elles sont composées de paramètres fournissant une information directement exploitable : le débit d'émission mesuré pour une cheminée d'usine pendant une période donnée et le nombre d'occurrences d'une telle période, pendant la durée sur laquelle est réalisé l'inventaire par exemple.

Sinon il faut collecter auprès des organismes pertinents toutes les informations susceptibles de fournir des indications sur un type d'activité. Ce seront souvent des données statistiques issues d'enquêtes, de recensements, ou de travaux d'expert. Tout le problème est d'extraire de ces éléments, ceux qui, associés à des facteurs d'émission qu'il reste à choisir judicieusement, permettront d'aboutir aux émissions. La méthodologie européenne CORINAIR, présentée par le CITEPA [CITEPA, 2000], résume cette démarche par les équations suivantes :

$$E_{s,t} = \sum_{a=1}^{a=n} E_{s,a,t}$$

où $E_{s,t}$ est l'émission totale de la substance s pendant le temps t , et $E_{s,a,t}$, l'émission liée à l'activité a . Celle-ci se définit comme suit :

$$E_{s,a,t} = A_{a,t} \times F_{s,a}$$

$A_{a,t}$ est la quantité d'activité relative à l'activité a pendant le temps t (une consommation annuelle par exemple), et $F_{s,a}$ est le facteur d'émission relatif à la substance s pendant le temps t .

Dans la pratique la quantification des émissions, est un exercice particulièrement compliqué. L'ajustement des facteurs d'émission dépend d'un nombre important de paramètres. Ils sont parfois tels que la seule solution correcte est de recourir à des modèles spécifiques pour évaluer les émissions induites par une activité. C'est par exemple le cas du trafic routier, pour lequel on a classiquement recours à des "modèles de trafic".

Traitement des données et allocation spatio-temporelle

Les données récoltées et calculées dans les étapes précédentes doivent être formatées de manière à pouvoir être utilisées pour les applications visées. Par exemple, la modélisation déterministe implique la simulation d'épisodes de pollution de manière à mieux en comprendre les tenants et aboutissants. Pour les reproduire correctement il est indispensable d'affecter avec soin les émissions au niveau spatial comme au niveau temporel.

La spatialisation des émissions nécessite donc la définition d'un maillage et d'un système cohérent de géo-référencement. Ces derniers sont étroitement liés à l'échelle de modélisation de l'application visée. Les SIG (Systèmes d'Information Géographiques) peuvent offrir un support très visuel pour réaliser cette opération.

La répartition temporelle des émissions consiste le plus souvent en la désagrégation de données annuelles ou mensuelles en données exploitables par le modèle de calcul. Par exemple, suivant le type d'application il sera nécessaire de disposer d'une description des émissions avec un pas horaire, dépendant du jour de la semaine considéré. Des clefs de répartition temporelles établies sur des observations et des statistiques et affectées aux différents types d'émission permettent de déduire ces informations.

Le CITEPA, dans le cadre du programme MEHARI développe une méthodologie formalisant des solutions pour aborder cette problématique.

Validation et formatage des résultats finaux

Cette dernière étape concerne l'évaluation de la qualité de l'inventaire, sa vérification et sa mise en forme pour une utilisation en conditions opérationnelles. Elle peut être menée en recoupant les résultats obtenus avec des données publiées, en calculant des indicateurs de qualité ou en évaluant l'incertitude associée aux émissions calculées. Sur ce dernier point, les travaux de la communauté scientifique sont encore au stade de la recherche. En effet la question s'est posée assez récemment pour les problèmes liés au changement climatique, mais il n'existe que peu de travaux sur lesquels s'appuyer pour traiter l'échelle locale.

Certains axes de recherche privilégient le développement de la "modélisation inverse" pour évaluer les inventaires. Ils s'agit dans un premier temps de vérifier la cohérence entre les concentrations calculées par les modèles avec les données de l'inventaire et celles observées par le système de mesure. S'il s'avère que des différences significatives sont enregistrées et si l'on s'est assuré que toute autre source d'incertitude (météorologie, topographie, constantes de réaction, paramètres numériques) a été raisonnablement écartée, il est fort probable que les erreurs sur l'inventaire soient responsables de ces différences. De manière à les corriger, la modélisation inverse permet de mener une analyse de sensibilité sur les paramètres d'émission de façon à converger vers une meilleure solution (les concentrations mesurées).

Le développement des modèles inverses connaît un réel essor mais impose des contraintes numériques lourdes qui limitent leur usage en conditions opérationnelles.

9.3 RECOMMANDATIONS GENERALES POUR LA REALISATION DES INVENTAIRES

Le déroulement des différentes étapes d'élaboration du cadastre des émissions ayant été présenté, ce paragraphe est destiné à mettre l'accent sur un certain nombre de difficultés et de pièges classiquement rencontrés par les inventaristes. Cette liste n'est malheureusement pas exhaustive et pour plus d'éléments nous renvoyons le lecteur au guide méthodologique élaboré par le CITEPA, qui sera disponible pour 2002/2003.

Un soin particulier doit être apporté lors de la réalisation du cadastre, sur les questions suivantes :

□ **La définition de l'inventaire par rapport à ses objectifs**

Il est important de bien cerner le périmètre des informations qui seront compilées dans l'inventaire, en fonction de l'application que l'on souhaite en faire. Dans ce contexte, il s'agit essentiellement de modélisation déterministe.

Concrètement, les objectifs politiques, stratégiques ou encore scientifiques des simulations à réaliser sur la base de l'inventaire doivent contribuer à en définir le cahier des charges. Cela porte en particulier :

- sur la définition des polluants à incorporer : des polluants peuvent sortir du champ d'application visé et être considérés comme non prioritaires, alors que d'autres s'y trouvent impérativement (les NOx et les COV en cas de modélisation de l'ozone par exemple),
- sur les sources d'émissions qui seront considérées : la contribution de certains secteurs pourra être négligée suivant les cas,
- sur la précision spatiale et temporelle de l'inventaire, qui doit être conditionnée par celle du modèle.

Tout le problème est donc d'identifier les informations incontournables, pour mener à bien les objectifs de modélisation visés. D'un point de vue très pratique, la façon dont le code de calcul incorpore les données d'émission conditionne également l'inventaire. Ce besoin de cohérence au niveau de l'interface définit le format des informations à prendre en compte, tout le problème étant de le respecter. Cela met en évidence la nécessité de privilégier le dialogue entre le modélisateur, qui a des contraintes en terme de données à fournir au code de calcul, et l'inventoriste qui doit caler sa réponse pour répondre à ces exigences.

□ **L'utilisation d'un référentiel approprié**

La notion de format induit celle de représentation des données, et de leur référentiel. Les spécialistes recommandent l'utilisation de codes internationaux qui offrent l'avantage d'être reconnus par un nombre important d'outils de modélisation, et de faciliter la discussion entre organismes. Les catégories SNAP de la méthodologie CORINAIR sont celles qui font référence en Europe, et auxquelles il est vivement conseillé de se référer. A noter enfin que ces référentiels évoluent dans le temps (contenu, structure) et qu'il faudra veiller à utiliser les versions les plus récentes, et faire évoluer les inventaires et outils de modélisation en conséquence.

□ **Rechercher les meilleures données disponibles**

Le cas le plus favorable est celui dans lequel l'on dispose de mesures des émissions spécifiques de la période et du site sur lesquels s'effectue la modélisation. A l'inverse, la seule solution peut consister parfois à exploiter des données globales à désagréger suivant les besoins et les informations disponibles. Ces deux situations extrêmes ne sont pas réalistes pour élaborer un inventaire complet. La première parce qu'elle serait trop coûteuse et fastidieuse à mettre en œuvre, la seconde parce qu'elle n'offre pas suffisamment de garanties au niveau de la qualité du résultat obtenu.

Ainsi il s'agit de rechercher le meilleur compromis entre les deux, en ayant recours, le plus souvent possible à des informations issues d'études locales. Cela

s'avère indispensable pour des émissions spécifiques de régions (les émissions agricoles par exemple).

❑ **Le choix des facteurs d'émission**

C'est un point très sensible puisque ces facteurs, mal utilisés, peuvent introduire des erreurs importantes dans les calculs d'émission. Rigoureusement, les facteurs d'émission dépendent d'éléments extérieurs tels que la température des sources, leur typologie, et les hypothèses de fonctionnement... Ils évoluent logiquement au cours du temps. Ainsi des facteurs globaux fournis à l'échelle nationale (voire internationale) sont entachés d'incertitudes qui peuvent avoir des conséquences non négligeables au niveau de l'application.

Un certain nombre d'organismes (EMEP/CORINAIR, EPA) diffusent ainsi des guides consignants des valeurs de facteurs d'émission. Ces dernières doivent être considérées attentivement afin de s'assurer de leur pertinence par rapport à la situation visée.

Le recoupement avec les résultats d'études extérieures (statistiques énergétiques, données recueillies auprès des industriels, études de trafic, consultation d'experts) doivent permettre d'affiner les choix effectués et de les valider.

❑ **La spéciation des COV**

Les Composés Organiques Volatils entrent en jeu dans les mécanismes de formation de l'ozone. Il est important de distinguer la contribution des différentes espèces au niveau de la modélisation puisque leur effet est variable suivant leur nature chimique et leur réactivité. Tout le problème est d'affecter une répartition quantifiée des COV à un type d'émission.

Pour les rejets d'usine, dans le meilleur des cas, la connaissance parfaite des procédés industriels peut aider à répondre à cette question. De même, pour les émissions automobiles, les mesures effectuées par les scientifiques fournissent des données appropriées.

La réponse est nettement plus floue lorsque l'on s'intéresse aux rejets des catégories résidentiel et tertiaire. Il existe donc des tables de spéciation, consignants pour les différents types de source d'émission, la répartition qualitative et quantitative des COV émis par cette voie. Ces tables sont élaborées de manière générique sur la base d'observations et d'analyse. Le programme européen GENEMIS, soutenu par l'équipe de R. Friedrich de l'Université de Stuttgart propose des profils de spéciation pour l'ensemble des activités émettrices recensées dans la méthodologie CORINAIR. Le CITEPA est également en mesure de fournir une spéciation sur un nombre important de sources. Il est d'ailleurs important de noter que les différentes spéciations existantes divergent sensiblement, ce qui doit conduire leurs utilisateurs à beaucoup de prudence.

Pour mener à bien cette étape de l'inventaire il est également important de se référer à des données standardisées de manière à pouvoir les interpréter facilement dans les modèles photochimiques. D'où l'importance de s'assurer de la cohérence et de la validité des choix retenus pour la description des émissions de COV.

□ La gestion de l'inventaire

Les difficultés liées à l'élaboration ont été largement évoquées dans les paragraphes précédents. Il est donc indispensable d'avoir conçu cet outil de manière à faciliter sa gestion et sa mise à jour. Les informations qu'il compile seront amenées à évoluer, suivant le développement et les stratégies mises en œuvre sur le site, et les politiques de contrôle. L'exploitation conviviale et la maintenance "aisée" de l'inventaire doivent être intégrées lors de l'élaboration de son cahier des charges, et donc conçues dès les premières réflexions.

10 LES DONNEES METEOROLOGIQUES

Tout projet de modélisation des polluants atmosphériques nécessite l'utilisation de données météorologiques. L'objectif est ici de décrire les principaux outils disponibles, ainsi que le format sous lequel les données sont en général fournies aux utilisateurs.

10.1 INFORMATIONS MESUREES

Mesures par station fixe

Les données les plus courantes sont fournies par des stations de mesure au sol qui renseignent sur les paramètres fondamentaux :

- Vent en vitesse et direction,
- Température,
- Humidité,
- Pression.

Généralement ces mesures sont effectuées à une altitude de dix mètres afin de se dégager des perturbations du sol.

Ces stations de mesures sont positionnées dans les zones urbaines par les AASQA ou en zones rurales par Météo-France. Plusieurs stations sont ainsi disponibles par département, le problème étant d'identifier la plus représentative du site étudié.

Ces stations fournissent généralement des informations suffisantes pour les études locales, de type impact industriel, et sont les supports de constitution des roses de vents. De plus les données sont disponibles avec un pas de temps adapté à l'application (tri-horaire, horaire ou quart-horaire).

Il est également possible de disposer de données traitées statistiquement de manière à disposer d'informations moyennes. Il s'agit des roses des vents qui fournissent suivant chaque direction (par classe de 20°) la fréquence et l'intensité du vent. Elles sont généralement établies mensuellement, par saisons ou annuellement.

Anémomètre ultrasonique

L'anémomètre ultrasonique est un capteur permettant de mesurer les composantes horizontales et verticales de la vitesse de l'écoulement atmosphérique, à une fréquence élevée (jusqu'à 20 Hz). Il existe également des modèles perfectionnés qui donnent des mesures de la célérité du son, reliée à la température.

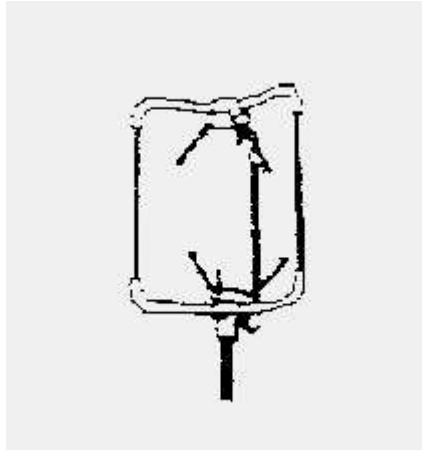


Figure n°10.1 : Anémomètre ultrasonique

Ce type de capteur (figure n°10.1) se compose de trois paires de transducteurs qui agissent alternativement en émetteur et en récepteur d'impulsions ultrasonores.

La composante de la vitesse V du vent sur l'axe des transducteurs est déduite de la mesure de temps de transit aller ($t1$) et de retour ($t2$) de ces impulsions entre deux transducteurs.

$$\text{On a } t1 = \frac{L}{c + V} \quad \text{et} \quad t2 = \frac{L}{c - V} \quad \Rightarrow \quad V = \frac{L}{2} \left(\frac{1}{t1} - \frac{1}{t2} \right) \quad \text{et} \quad c = \frac{L}{2} \left(\frac{1}{t1} + \frac{1}{t2} \right)$$

Avec c : célérité du son et L : distance séparant les transducteurs

Il est possible de déterminer les composantes u , v , w de la vitesse du vent dans les trois directions tout en minimisant les perturbations de l'écoulement par le dispositif de mesure grâce à l'orientation des transducteurs.

Un anémomètre ultrasonique possède une gamme de mesures comprise entre 0 et 60 m/s, avec une précision relative d'environ 4% pour le modèle standard, et de 2% pour un modèle de recherche.

Le fréquence de coupure de ce type d'anémomètre étant supérieure à 5 Hz, elle est suffisante pour mesurer les plus petites échelles de la turbulence atmosphérique.

Pour de l'air sec, considéré comme un gaz parfait, en écoulement isentropique, la relation entre la célérité du son c et la température T s'écrit :

$$c = \sqrt{\gamma \cdot r \cdot T} \quad \Rightarrow \quad T = \frac{c^2}{\gamma \cdot r}$$

où γ représente le rapport des chaleurs spécifiques ($\gamma \approx 1,4$) et r la constante massique des gaz parfaits ($r \approx 287 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$)

Les hypothèses admises pour cette relation (air sec, écoulement isentropique, γ et r constants) peuvent conduire à des erreurs relatives de l'ordre de 1% sur l'estimation de température.

Sodar et Rass

Le SODAR (SOund Detection And Ranging) est un instrument de télédétection permettant de mesurer en continu la vitesse du vent et la direction du vent, les mouvements verticaux, les turbulences à des hauteurs variant de vingt mètres à cinq mille mètres.

Ces mesures sont effectuées en émettant dans l'atmosphère, à partir d'une antenne d'émission (figure n°10.2), une onde sonore de forte puissance dans la gamme de fréquence audible. Le signal de rétrodiffusion, reçu par une ou plusieurs antennes, correspond à l'énergie dispersée par l'atmosphère étudiée. Le traitement de ce signal permet ensuite de remonter à la vitesse et la direction du vent ainsi qu'à la turbulence.

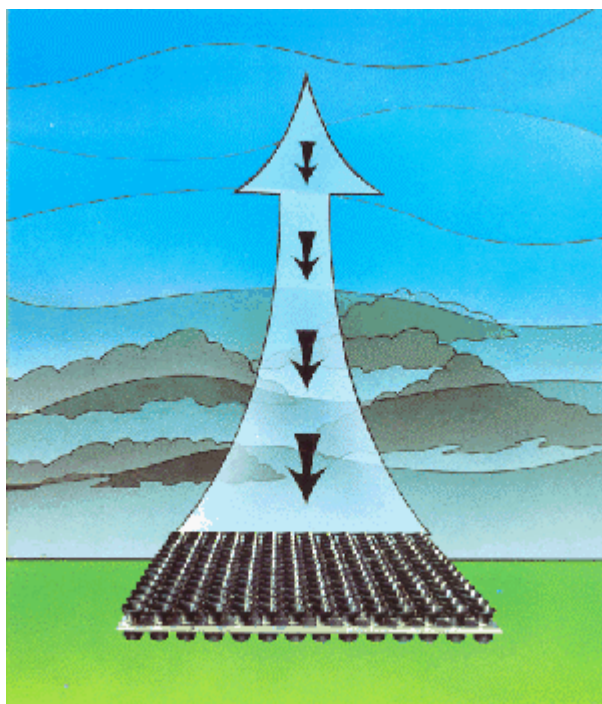


figure n°10.2 : antenne plate sodar (Remtech)

Radiosondage

Le radiosondage est une technique de mesure en altitude des propriétés de l'atmosphère par ballon ascendant.

Il permet, grâce aux mesures effectuées par la radiosonde, de connaître le profil de [température](#), d'[humidité](#) et de [pression](#) jusqu'à éclatement du ballon, généralement vers 30 km d'altitude. Le [vent](#) est déterminé par le suivi de la trajectoire du ballon

10.2 SORTIES DE MODELES NUMERIQUES

La prévision météorologique repose, pour une large part, sur l'emploi de logiciels de simulation numérique de l'atmosphère, couramment appelés "modèles".

Dans ces modèles l'atmosphère est divisée en [petites "boîtes" élémentaires](#) (figure n°10.3) dans lesquelles on résout les équations de transport de l'air. Sur chaque verticale correspondant à un côté des boîtes élémentaires on peut obtenir un profil de paramètres élémentaires (vitesse et direction du vent, pression, température...) pouvant servir comme données d'entrées aux modélisations locales.

Les modèles ARPEGE et ALADIN sont les outils proposés par Météo France. Le Centre Météorologique Européen développe et utilise le modèle ECMWF qui repose sur des principes similaires à ceux implantés dans ALADIN.

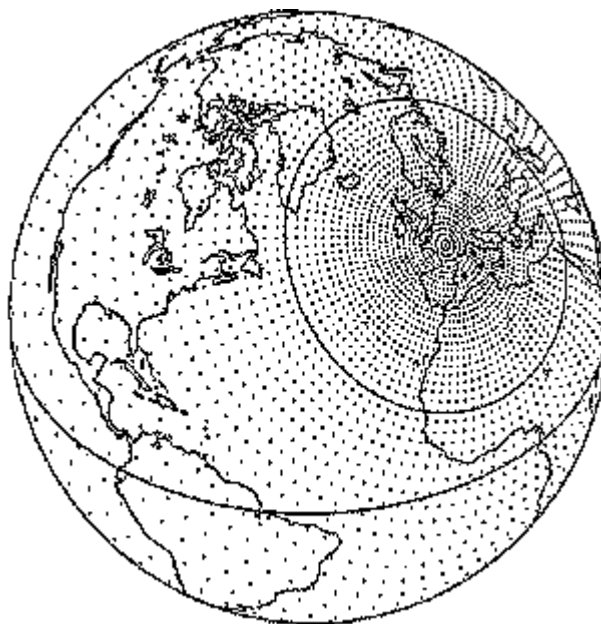


figure n°10.3 : Maillage du modèle Arpège (Météo France)

11 EVALUATION DES MODELISATIONS ET INCERTITUDE DES RESULTATS

11.1 INTRODUCTION

Dans le cadre d'une étude de modélisation il convient de valider les hypothèses et formulations physiques employées. Pour ce faire plusieurs méthodes peuvent être appliquées : intercomparaisons de modèles, évaluation des résultats de calculs réalisés en situation académique, comparaison entre modélisation numérique et modélisation physique (maquettes en soufflerie ou hydrauliques), comparaison entre résultats de calcul et mesures réelles. Cette dernière solution est certainement la plus coûteuse et la plus délicate à mettre en place (définition de la campagne de mesure, mobilisation de moyens lourds). En contrepartie, elle offre des garanties certaines quant à la qualité et la représentativité des résultats.

Dans ce cadre, la démarche se résume toujours à la compilation de données (émissions, météorologie, chimie) caractéristiques d'un ou plusieurs épisodes de référence, et à l'application de cette configuration dans le modèle pour évaluer la fidélité de sa réponse. Celle-ci doit être quantifiée en fonction de la qualité supposée des données d'entrée, mais aussi en fonction des incertitudes associées aux grandeurs mesurées.

Différentes approches sont possibles: analyse graphique, analyse d'indicateurs statistiques, analyse de la réponse à différentes sollicitations. Cependant dans tous les cas, l'objectif singulier est de comparer des surfaces d'isovaleurs de concentrations calculées à des résultats mesurés discrètement sur un espace donné, ce qui introduit une difficulté supplémentaire d'interprétation. Ces approches d'évaluation sont décrites dans les paragraphes suivants ainsi que les indicateurs associés, et l'interprétation que l'on peut en donner.

En conclusion, des recommandations relatives à la procédure "d'évaluation des modèles déterministes" sont formulées. Il est important de noter que ces questions fondamentales font l'objet de travaux de recherche ambitieux, et sont encore soumises à des évolutions. Si l'on considère le cas particulier des outils de modélisation de la photochimie, leur évaluation requiert sur un vaste domaine un nombre important de mesures (concentrations en ozone et précurseurs et paramètres météorologiques), au sol et en altitude. Ces informations ne peuvent être obtenues qu'à partir de vastes programmes de campagne, encore assez peu développés en Europe. En France, les programmes ESQUIF [Vautard et al 2001] et ESCOMPTE [www.media.obs-mip.fr:8000/escompte/maquette] vont permettre des progrès considérables dans le domaine de l'évaluation des modèles.

L'idée plus modeste privilégiée dans ce document est de décrire des éléments qui pourraient être mis en œuvre dans un contexte opérationnel, par une AASQA, avec les moyens de mesure dont elle dispose. Il n'en demeure pas moins que suivant la complexité de la situation (relief, influence forte de la météorologie locale) , des campagnes de mesure spécifiques devront être mises en place, par exemple à l'aide d'un réseau de tubes passifs ou de moyens de mesures lourds (expérience

ASCOPARG durant l'été 2000). Ce point n'est pas développé dans ce document, mais fait l'objet d'un rapport LCSQA dédié à cette question, disponible en 2002.

11.2 LA COMPARAISON MESURES – CALCUL.

Globalement, l'enjeu de ces comparaisons est de confronter des données provenant de capteurs de mesure discrets et dépendant du milieu de mesure avec des résultats de calcul, présentés sur une grille plus ou moins raffinée.

Nature des mesures à utiliser

La première étape consiste alors à définir des situations de comparaison portant sur des données de même nature (voir table 11.1) :

Par exemple, dans le cadre d'une modélisation à l'échelle d'une agglomération effectuée avec un modèle eulérien hydrostatique, le résultat obtenu est une concentration moyenne à hauteur des toits de l'agglomération. La seule comparaison possible est donc une confrontation avec les mesures provenant des capteurs de pollution de fond de la zone considérée. A l'inverse une modélisation fine dans une rue canyon doit être comparée à des stations de proximité automobile.

Type de modélisation	Comparaison avec des mesures	Résultats de campagne et références européennes
Impact industriel	Capteurs de mesure proches de la source et sous influence directe de celle-ci Analyse de la rose des vents	Exemples développés par un consortium de chercheurs européens dans le "Model Validation Kit" (MVK) www.dmu.dk/AtmosphericEnvironment
Modélisation locale	Capteurs de mesure de proximité	Campagnes de mesures réalisées à l'échelle de la rue [Vachon et al, 1999], ESCOMPTE –CLU, [Rotach, 1995]
Modélisation à échelle urbaine	Capteurs de mesure urbain de fond	Programme européen SATURN (www.aix.meng.auth.gr/saturn) [carruthers, 2001]
Modélisation régionale	Capteurs de mesure rural de fond	Expériences ESQUIF, ESCOMPTE Campagne BERLIOZ en Allemagne (www.gsf.de/ptukf)

Tableau 11.1 : nature des capteurs à prendre en compte en fonction de l'échelle de la modélisation

Nombre de points de mesure

Il est délicat de définir, a priori, pour chaque configuration un nombre optimal de capteurs à prendre en considération pour évaluer de manière pertinente le modèle. En réalité plus le nombre de données disponibles est important, meilleure est la démarche d'évaluation. Comme indiqué plus haut, il est souvent judicieux de compléter l'information fournie par les stations fixes avec celle issue de campagnes de mesure ponctuelles dans le temps (tubes passifs, camions mobiles ou autres).

Représentativité de la mesure

Le choix des informations à inclure dans l'évaluation étant réalisé, il faut déterminer les variables à comparer. En effet la meilleure comparaison que l'on puisse exploiter est celle qui oppose une valeur mesurée ponctuelle (soumise aux effets locaux) à une valeur moyenne prédite sur une cellule de maillage. Plus le maillage est raffiné (notamment dans les zones de forts gradients), et plus la valeur calculée dans ses cellules sera représentative de la valeur mesurée ponctuelle. En contrepartie, le coût en temps de calcul sera largement alourdi.

Il faut tenir compte dans l'interprétation des comparaisons de ces phénomènes de lissage qui par nature ne peuvent rendre compte des perturbations très locales des champs de concentration. Cela n'est pas sans conséquences sur le choix de la méthode de comparaison mise en œuvre par la suite. Les deux méthodes directes les plus utilisées sont décrites dans les paragraphes suivants.

Comparaison entre chaque point de mesure et le calcul au point correspondant,

Sur chacun des points de mesures du domaine de calcul on compare la concentration simulée avec la concentration mesurée (Voir figure 11.1).

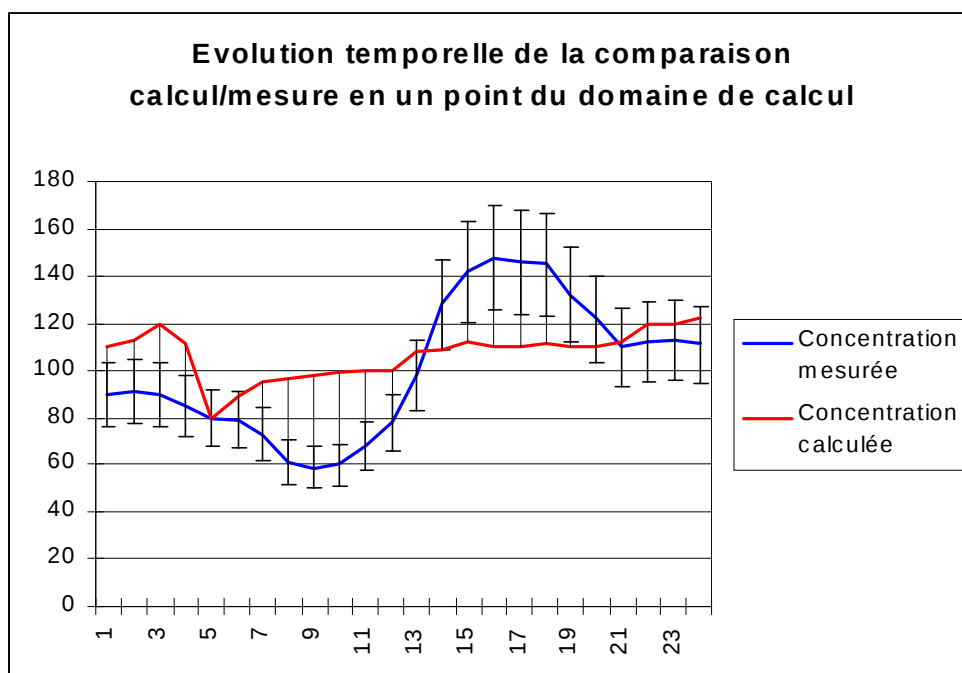


Figure 11.1 : Comparaison mesures/calcul sur des séries temporelles

La comparaison est directe sur les séries chronologiques entre la valeur mesurée, en prenant en compte son incertitude, et la valeur simulée. Cela sous-entend que l'on souhaite reproduire un pic de concentration dans la cellule où il a eu réellement lieu et à l'heure correspondante. Cette comparaison est très brutale et est relativement pénalisante pour le code de calcul. En effet mis à part les incertitudes sur la mesure on cumule également des incertitudes sur la position spatiale de la mesure et des

incertitudes sur le moment de la mesure. Cet ensemble entraîne inévitablement des résultats médiocres en terme de comparaison mesure/calcul.

A cette approche directe est souvent préférée une comparaison plus nuancée qui consiste à intégrer l'incertitude tant spatiale que temporelle.

Comparaison entre chaque point de mesure et le “ plus proche voisin ” dans le temps et dans l'espace,

L'objectif est de prendre en compte le décalage temporel et spatial pouvant exister entre la modélisation et la mesure. Le principe est d'incorporer les neuf points de calcul situés autour du capteur de mesure concerné (figure 11.2). L'écart spatial est inclus dans la maille de calcul, l'écart temporel est de plus ou moins 1 pas de temps.

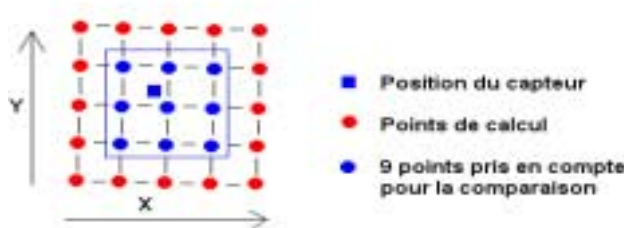


Figure 11.2 : Points extraits pour la comparaison mesures/calcul

L'exploitation de cette extraction des points à comparer peut être effectuée de différentes façons :

On peut par exemple prendre la moyenne des valeurs spatiales et temporelles calculées sur les neuf points du domaine et sur les trois pas de temps considérés et la comparer avec la mesure du capteur. Ces moyennes peuvent être pondérées par la distance au capteur (en temps et en espace).

Une autre approche consiste en la comparaison entre l'ensemble des valeurs simulées pré-citées et la valeur mesurée sur le capteur en prenant les valeurs les plus proches.

Dans tous les cas, il est nécessaire de calculer une moyenne et un écart type des écarts entre modélisation et calcul sur tous les points de mesures et sur toute la période de simulation. A partir de ces comparaisons élémentaires il est possible de calculer des scores de simulation plus perfectionnés qui permettront, entre autres de comparer plus aisément deux modèles entre eux.

11.3 INDICATEURS PERMETTANT DE QUANTIFIER LA PERFORMANCE

Utilisation d'indices statistiques.

Pour la comparaison des champs de vent plusieurs indices statistiques peuvent être employés : FB (Fractional Bias), RMSE (Root Mean Square Error) [Poli et al., 1993]. Pour ce qui concerne le transport des polluants la comparaison avec d'autres modèles ou avec des mesures peut être effectuée par les outils statistiques développés à cet effet. Un certain nombre d'entre eux sont proposés dans le “ Model Evaluation Kit ”

[Olesen, 1998; Hanna et al., 1993] à savoir, FB, et NMSE , WNR (Weighted Normalised Ratio) et NNR (Normalised-Normalised ratio) .

Ces quantités portent généralement sur le résidu, différence entre la valeur de concentration observée C^O et la valeur de concentration prédite, C^S .

La représentativité de l'information contenue dans ces indicateurs se traduit dans les théories statistiques en terme d'intervalle de confiance. En particulier, il s'agit d'estimer si un indicateur est "*significativement différent de 0*" (ce qui sous-entend la plupart de temps une très faible performance du modèle) ou si compte tenu des incertitudes sur les données d'entrée, la performances des modèles peut être considérée comme satisfaisante. [Hanna, 1988] a proposé la mise en œuvre d'un ensemble de procédures afin de déterminer les intervalles de confiance associés aux indicateurs calculés, dans le contexte très particulier des modèles de dispersion atmosphérique. Si l'analyse s'avère intéressante pour les modèles réglementaires utilisés pour évaluer l'impact des installations industrielles (typiquement les modèles gaussiens), elle devient beaucoup plus discutable quand il s'agit de modéliser la formation et le transport des panaches d'ozone [Hanna, 1989], [CARB, 1990]. La raison principale provient du nombre relativement limité et de l'interdépendance des données disponibles pour conduire ce type d'analyse.

Il est donc souvent recommandé d'allier l'analyse de performance statistique à d'autres considérations (analyse graphique ou étude de sensibilité) de manière à mieux cerner les performances du modèle.

Les indicateurs statistiques les plus courants sont décrits dans les paragraphes suivants.

11.3.1.1 FB (FRACTIONAL BIAS)

$$FB = \frac{C_i^o - C_i^s}{0.5(C_i^o + C_i^s)}$$

Le FB permet une comparaison rapide du modèle par rapport aux mesures. Sa valeur varie entre -2, pour une très forte sur-estimation, et +2 dans le cas d'une très forte sous-estimation.

11.3.1.2 RMSE (ROOT MEAN SQUARE ERROR)

$$RMSE = \sqrt{\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_i^o - C_i^s)^2 \right)}$$

où N est le nombre total de couple $(C_i^o - C_i^s)$ avec C_i^o la concentration observée et C_i^s la concentration simulée.

11.3.1.3 NMSE (NORMALISED MEAN SQUARE ERROR)

$$NMSE = \frac{\overline{(C_i^o - C_i^s)^2}}{\overline{C_i^o} \overline{C_i^s}}$$

où $\overline{C}$ désigne la valeur moyenne de la variable C .

Le NMSE traduit la dispersion globale des données sur l'échantillon considéré (Hanna, 1988). Plus le NMSE est faible, meilleure est la simulation. Cependant en cas de surestimation générale du code, ce critère n'est pas pertinent.

11.3.1.4 WNNR (WEIGHTED NORMALISED MEAN SQUARE ERROR OF THE NORMALISED RATIOS)

$$WNNR = \frac{\sum_{i=1}^N C_i^O \left(1 - e^{-|\ln(C_i^q / C_i^O)|} \right)^2}{\overline{C^O} \sum_{i=1}^N C_i^O \left(e^{-|\ln(C_i^q / C_i^O)|} \right)^2}$$

Le WNNR met l'accent sur les valeurs de pointe de pollution. Le modèle est jugé sur ses performances pour les fortes valeurs. Plus le WNNR est faible, meilleure est la simulation.

11.3.1.5 NNR (NORMALISED MEAN SQUARE ERROR OF THE DISTRIBUTION OF NORMALISED RATIOS)

$$NNR = \frac{\sum_{i=1}^N \left(1 - e^{-|\ln(C_i^q / C_i^O)|} \right)^2}{\sum_{i=1}^N C_i^O \left(e^{-|\ln(C_i^q / C_i^O)|} \right)^2}$$

Le NNR reflète la qualité des valeurs faibles du domaine, ce critère fournit une estimation des performances du code sur l'ensemble du domaine d'application. Il est particulièrement pertinent en dehors des pointes de pollution. De la même manière plus le NNR est faible, meilleure est la simulation.

L'utilisation combinée de ces critères permet de définir des scores de performances des codes de calcul dans les domaines d'application de ceux-ci. A l'aide de ces scores il est possible d'établir des comparaisons objectives entre les différents modèles.

Cependant une analyse complète de la situation d'application doit être menée. En effet la combinaison de plusieurs critères entre eux peut être explicative, mais dans tous les cas un seul critère ne peut pas traduire, de manière objective, les performances d'un modèle mathématique et de la façon dont il est appliqué.

Utilisation d'indices graphiques

En complément de l'analyse statistique décrite précédemment il est pertinent de mener une évaluation qualitative des résultats à partir de l'examen de représentations graphiques. Celles-ci peuvent porter sur la représentation des indices statistiques, mais également sur les indicateurs suivants :

11.3.1.6 LES SERIES TEMPORELLES

Il s'agit de la représentation de l'évolution dans un laps de temps donné des concentrations mesurées et calculées en un récepteur fixé.

Pour les valeurs calculées, les grandeurs obtenues dans les cellules adjacentes à la position du capteur sont exploitées suivant les termes définis dans le paragraphe

précédent. Les grandeurs ainsi examinées sont généralement moyennées sur une heure.

L'intérêt des séries temporelles est d'estimer l'aptitude du modèle à reproduire les gradients de concentration. En cela la procédure est plus sévère que celle liée aux indicateurs statistiques. Elle est aussi plus dépendante de la méthode choisie pour estimer la concentration calculée au niveau du capteur (plus proche voisin, moyenne obtenue sur la cellule contenant le capteur, moyenne pondérée entre plus proches voisins).

11.3.1.7 LES ISOCONCENTRATIONS AU NIVEAU DU SOL (ISOPLETHS)

Elles représentent la distribution spatiale des panaches calculées pour une période donnée. Elles permettent en particulier d'identifier aisément les biais éventuels entre la localisation des concentrations maximales calculées et mesurées.

Ces courbes permettent aussi de se rendre compte de la qualité de la prise en considération du relief et des obstacles éventuels.

Les représentations ponctuelles des concentrations observées par rapport aux concentrations calculées (scatter plots)

Ces graphiques permettent de mesurer très rapidement si le modèle a tendance à sous-estimer ou surestimer les concentrations qu'il calcule. De même la dispersion des points (chacun représentant une station de mesure à une heure donnée) permet d'appréhender de manière visuelle l'erreur potentielle du modèle.

Les analyses de sensibilité

L'analyse de sensibilité est souvent présentée comme l'une des composantes essentielles de l'évaluation [Seinfeldt, 1988]. Après avoir identifié les données d'entrée susceptibles d'influencer notablement le comportement du code de calcul, et leurs marges d'incertitude, celles-ci sont propagées dans les calculs individuellement ou de manière groupées, de façon à estimer l'incertitude associée aux modélisations.

11.4 RECOMMANDATIONS POUR L'EVALUATION DES MODELES A DES FINS OPERATIONNELLES

L'évaluation du modèle est une opération indispensable lors de la mise en place d'un outil numérique à des fins opérationnelles. Elle comporte plusieurs degrés d'approfondissement, et s'établit selon différents critères. Elle est souvent menée de manière cyclique par les concepteurs du logiciel, une nouvelle évaluation étant réalisée à l'issue de chaque phase de modification apportée. Elle peut donc être très lourde. Il faut soigneusement en fixer les objectifs afin de limiter le champ d'investigation que l'on s'autorise.

Il est recommandé de multiplier les indicateurs et critères qui peuvent être statistiques mais également graphiques ou relatifs à des analyses de sensibilité. En complément une analyse scientifique du modèle est souvent pertinente. Elle inclut l'analyse des hypothèses numériques adoptées, mais aussi l'évaluation du comportement du modèle dans des situations « non standard » : paramétrisation des conditions initiales et aux limites, vents faibles, variation de hauteur de la couche de mélange...

L'évaluation est fortement dépendante des données d'entrée. Les données d'émission, la météorologie et les conditions aux limites sont les principaux paramètres influençant le résultat de modélisation. Il est important de s'affranchir des

risques de biais imputables à ces données. Par exemple l'affectation de conditions aux limites pertinentes, issues de l'exploitation de mesures effectuées hors du domaine, ou de résultats de modèle est l'un des points sensibles de cette question.

12 LE CALAGE DES MODELES

12.1 INTRODUCTION ET DEFINITIONS

L'idée de "caler " un modèle numérique sur un site sous-entend de rechercher le *meilleur choix* parmi les données d'entrée disponibles, avec leurs marges d'incertitude, pour obtenir la meilleure reconstitution possible *d'un (ou plusieurs) scénario représentatif donné*. Ces paramètres étant fixés, l'utilisateur peut espérer obtenir une réponse fiable dans des conditions d'utilisation (notamment au niveau des données d'émission et de la météorologie) différentes de celles sur lesquelles le calage a été effectué. Bien que cette opération inspire souvent peu de confiance aux utilisateurs qui ont l'impression qu'ainsi le « modèle calculera ce que l'on attend », elle est indispensable dans l'optique d'utiliser un modèle à des fins opérationnelles, d'aide à la décision.

Ainsi dans le domaine de la qualité de l'air, cette étape incontournable du processus de développement de tout outil logiciel, est effectuée dès que le modèle est appliqué à un nouveau site géographique. Elle impose de se prononcer sur le choix :

- D'un ou plusieurs scénarios qui constitueront les cas de références à simuler lors de la réalisation du calage,
- D'un ensemble de données d'entrée sur lesquelles le modélisateur va agir pour reconstituer la simulation optimale. Celles-ci sont choisies parmi:
 - Les données d'émissions,
 - Les données météorologiques,
 - Les conditions aux limites et initiales,
 - Les paramètres numériques du modèle.

12.2 MISE EN ŒUVRE DU CALAGE

Difficultés

Il s'agit d'un exercice particulièrement difficile à appréhender. Le premier écueil est de disposer d'un ensemble de mesures dans l'atmosphère (auxquelles seront confrontés les résultats de calcul) suffisamment représentatif pour être assuré de la pertinence de la démarche. En effet, des critères statistiques établis lors de l'évaluation du modèle (biais, erreur absolue) constituent les bases sur lesquelles se fonde le travail de calage. Ces indicateurs doivent alors être fiables et donc reposer sur un nombre significatif d'informations.

Une autre difficulté réside dans le fait qu'il n'existe sûrement pas (en particulier dans le domaine de la photochimie) une solution unique au problème du calage. Il est possible d'obtenir des performances équivalentes du logiciel avec des paramètres ajustés différemment. Dans cette situation quel gamme de paramètres retenir?

Ce choix n'est pas anodin, notamment si l'objectif est de s'appuyer sur le modèle pour rechercher des stratégies de contrôle de la pollution. Différentes possibilités d'ajustement des données d'émissions peuvent conduire à des comportements sensiblement différents en réponse à des scénarios de réduction des rejets. Pour les modèles simulant la photochimie, l'utilité de la démarche devient même très limitée si elle ne permet pas de trancher sur la nature de contrôle à exercer (COV ou NOx).

A ce titre l'exemple donné dans [Reynolds et al, 1996] est instructif. Une procédure complète visant à caler le modèle UAM est proposée. Deux épisodes ont été choisis pour mener à bien cet exercice, empruntés à la campagne de mesure de la SCAQS (Southern California Air Quality Study - 1990). Cette sélection se justifie par le nombre important de références disponibles, aussi bien pour la mesure des paramètres météorologiques, que des concentrations dans l'air ambiant. Les épisodes étudiés sont ceux du 23-25 juin 1987 et 26-28 août 1987. Plusieurs configurations des paramètres d'entrée ont permis d'aboutir pour les épisodes choisis, à des résultats équivalents et satisfaisants. Cependant l'étude de sensibilité aux émissions effectuée par la suite a révélé des comportements sensiblement différents aux réductions appliquées, voire des comportements contraires (réduction des concentrations dans un cas, et accroissement dans un autre), suivant les hypothèses de calage choisies. Ce constat très embarrassant doit alors inciter le modélisateur à se montrer prudent sur les performances attendues du code, et si possible à multiplier les épisodes de calage. Il se heurte alors au problème de l'existence d'une base de donnée suffisamment « riche » pour obtenir des résultats acceptables sur tous les fronts (sur les épisodes choisis et lors de l'analyse de sensibilité).

Méthodologie

En intégrant les difficultés pointées dans le paragraphe précédent, il est possible de décliner le calage en trois étapes :

1- *Analyse et amélioration du modèle*

Dans un premier temps l'amélioration éventuelle du modèle à partir de l'analyse des expériences réalisées par le passé, et du savoir-faire des modélisateurs permet de définir des bases en phase avec l'état de l'art. Il s'agit aussi d'établir un diagnostic de ses capacités par rapport à la situation visée, et notamment de mieux cerner son domaine de validité et ses limites.

En effet, avant de s'impliquer plus largement dans le calage du modèle, opération coûteuse en temps et en énergie, il est important de s'assurer que, malgré ses défauts, le code pourra répondre aux attentes des utilisateurs. A titre d'exemple, les aspects considérés dans cette étape pourront concerner le calcul des champs météorologiques, de la hauteur de mélange, du comportement des précurseurs de l'ozone. Il est évident que ce travail doit être mené en étroite collaboration avec les concepteurs de logiciels.

2- *Identification des valeurs des paramètres de calage*

Cette phase consiste en la recherche des différentes possibilités de calage des paramètres pour obtenir des résultats satisfaisants, du point de vue de critères à définir (simulation des concentrations et prédiction des pics par exemple).

Ces paramètres peuvent porter sur :

- Les données d'émissions : quantités émises suivant la nature de la source, spéciation des COV...
- Les données météorologiques : vitesses de vent, hauteur de mélange et coefficient de diffusion verticale...

- Les données aux limites : concentrations en polluants primaires et secondaires et précurseurs

Les plages de variations de ces paramètres sont bornées par l'incertitude associée à chacun d'entre eux.

Afin d'évaluer l'impact de chacune de ces possibilités, une mesure de la précision des résultats doit être proposée en incluant éventuellement la contribution de plusieurs indicateurs. Ces derniers sont généralement de nature statistique : le biais normalisé, la précision de la prédiction des pics, et l'erreur normalisée en sont des exemples courants. A titre d'exemple, une combinaison linéaire de ces composantes, pondérée par le poids que l'on souhaite accorder à chacune d'elle, est utilisée dans [Reynolds et al, 1996]. Enfin pour déduire de l'analyse un avis objectif sur la qualité des simulations obtenues, un niveau d'acceptation du résultat est fixé (par exemple 2% sur le biais ou 10% sur l'erreur). Cette marge d'incertitude sera également utilisée pour déterminer si des résultats peuvent être considérés comme équivalents ou pas.

3-Choix des paramètres de calage

La dernière phase concerne le choix définitif des paramètres de calage de façon à s'assurer un comportement satisfaisant lorsque différentes stratégies de contrôle des émissions seront appliquées. Pour se faire une analyse de sensibilité est recommandée. C'est le point le plus délicat à aborder, puisque, comme expliqué ci-dessus il requiert une base de données conséquente, souvent difficile à élaborer.

12.3 CONCLUSIONS

- 1) La phase de calage est indispensable lorsque l'on souhaite appliquer un modèle numérique de manière opérationnelle, sur un site. Elle nécessite cependant d'avoir accès à des données bien documentées.
- 2) Idéalement, plusieurs épisodes doivent être étudiés, de manière à départager les éventuels scénarios-tests (du point de vue des paramètres de calage) qui aboutiraient à des résultats équivalents sur un épisode. Il est clair, que cet objectif est souvent difficile à résoudre car il demande de disposer de nombreuses informations et de temps pour conduire l'analyse.
- 3) Dans une optique d'élaboration d'outil d'aide à la décision pour la définition de stratégies de contrôle, il est recommandé de mener une analyse de sensibilité lors du calage.
- 4) Cette incertitude constitue une information à part entière que les décisionnaires sont obligés d'intégrer. Ainsi un effort important des modélisateurs lors de la phase de calage et de la recherche des incertitudes doit être fourni.

13 BIBLIOGRAPHIE

- Balkanski Y., Poisson N., (2001), Etude préliminaire de l'influence des réductions des émissions sur la pollution par l'ozone et les oxydes d'azote en Ile de France Rapport d'évaluation PRIMEQUAL
- Bennet M., Hunter G.C, (1997), *Some comparisons of Lidar estimates of peak ground level concentrations with the predictions of UK-ADMS*, Atm. Env., Vol 31, pp 429-439
- Berkowicz R., O. Hertel, N.N. Sorensen, J.A. Michelsen, (1997) *Modelling Air Pollution from Traffic in urban areas*, Flow and dispersion through groups of obstacles édité par R.J. Perkins, S.E Belcher, Clarendon Press-Oxford
- Buckland A.T., D.R. Middleton, (1999) *Nomograms for calculating pollution within street canyons*, Atm. Env. Vol 33, pp 1017-1036
- Carruthers D.J, H.A. Edmunds, A.E. lester, C.A. Mac Hugh, R.J. Kyle, *Use and validation of ADMS-Urban in contrasting urban and industrial locations*, submitted to Int. J. of Environment and Pollution
- CERC (1999) *ADMS3 User guide*, CERC février 1999
- Chhuon B., A. Wroblewski, (1998) Evaluation de logiciels de dispersion chronique de polluants passifs dans l'atmosphère, Rapport LCSQA de janvier 1998
- CITEPA (2000), Calcul des émissions dans l'air – principes méthodologiques généraux, rapport disponible sur le site www.citepa.org/emissions/methodologie
- Doury A., (1976), *Une méthode de calcul pratique et générale pour la prévision numérique des pollutions véhiculées par l'atmosphère*, Rapport CEA-R-4280
- Eerens H.C., C.J. Sliggers, K.D. Van Den Hout, (1993) *The car model : the dutch method to determine city street air quality*, Atm.Env. Vol.27B, n°4, pp 389-399
- EPA (USA), (1970), *Workbook of atmospheric dispersion*, Office of Air Program Pub. N° AP-26
- EPA (1995), *User's guide for the Industrial Source Complex (ISC) dispersion models, Volume I User instructions*, EPA-454/B-95-003a
- EPA (1998), *User's guide for the AMS/EPA regulatory model –AERMOD*, revised draft disponible à l'adresse www.epa.gov/ttn/scram/7thconf/aermod/aermodug.pdf
- Fenger J., (1999), Urban Air quality, Atm. Env. n°33, pp 4877-4900
- Hall D.J, Spanton A.M. Bennett M., Dunkerley F., Griffiths R.F., (1999), *Evaluation of a new generation of Atmospheric Dispersion Models*, Sixth International Conference on harmonization within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes, Rouen 1999

Hanna S.R., (1971), *A simple method of calculating dispersion in urban area sources*, *J. of Air pollution Control Association*, Vol 21, pp 774-777

Hanna S.R. (1988), Air quality model evaluation and uncertainties, JAPCA n°38, pp 406-412
Hanna S.R., Confidence limits for air quality evaluations as estimates by bootstrap and jackknife resampling procedures, *Atm. Env.* Vol 23, pp 1385-1398

Improvement of procedures for evaluating photochemical models CARB report n° PB 91-160374 (1990)

Hanna S.R. et Chang J.C., (1993) Hybrid Plume Dispersion model (HPDM) improvements and testing at three field sites, *Atm. Env.* Vol 27A, pp 1491-1508

Hanna S.R., *Uncertainties in air quality model predictions*, *Boundary Layer Meteorology*, Vol 62, pp3-20 (1991)

Hanna S.R. et al., (1993), *Hazardous gas model evaluation with field observations*, *Atm. Env.* Vol27A, pp2265-2285.

Hanna S.R., Egan B.A., Purdum J., Wagler J., (1999), *Evaluation of the ADMS, AERMOD and ISC dispersion models with the Kinkaid*, Indianapolis, Lovett, Sweeney and Duke Forest data sets, Sixth International Conference on harmonization within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes, Rouen 1999

Hunter L.J., G.T. Johnson, I.D. Watson (1992), *An investigation of the three-dimensional characteristics of flow regimes within the urban canyon*, *Atm. Env.* Vol 26B, pp 425-432
Johnson G.T., L.J. Hunter, (1999), *Some insights into typical urban canyon airflows*, *Atm. Env.* Vol 33, pp 3991-3999

Johnson W.B., F.W. Ludwig, W.F. Dabbert, R.J. Allen (1975), *An urban diffusion simulation model for carbon monoxide*, JAPCA Vol 23, n°6, pp 490-498

Kaplan H and Dinar N.(1996), *A lagrangian dispersion model for calculating concentration distribution within a built up domain*, *Atm. Env* Vol 30, pp 4197-4207

Kastner-Klein P., E. Fedorovitch, M.W. Rotach (1999), *Organized and turbulent air motions in a wind tunnel model of a street canyon with and without moving vehicles*, Proceedings of 6th conference on harmonization within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes, Rouen 1999

Ketzel M., R. Berkowicz, W. Müller, A. Lohmeyer, (1999) *Dependence of street canyon concentrations on above roof wind speed – Implications for numerical modelling*, Proceedings of 6th conference on harmonization within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes, Rouen 1999

Kono H., S. Ito, (1990), *A micro-scale dispersion model for motor vehicle exhaust gas in urban areas*, *Atm. Env.* Vol 24B, pp 243-251

Lakehal D., P.G. Mestayer, J.B Edson, S. Anquetin, J.F. Sini, (1995), *Eulero-lagrangian simulation of raindrop trajectories and impacts within urban canopy*, *Atm. Env.* Vol 29, pp 3501-3517

Landrieu G. et Malherbe L., (2001), *Analyse statistique des déterminants de la qualité de l'air en milieu urbain sur une longue période*, Rapport INERIS

Lanzani G., M. Tamponi, (1995) *A microscale lagrangian particle model for the dispersion of primary pollutants in a street canyon. Sensitivity analysis and first validation trials*, *Atm. Env.* Vol 29, pp 3465-3475

Lee R.L. and Näslund E., (1998) *Lagrangian stochastic particle model simulations of turbulent dispersion around buildings*, *Atm. Env.* Vol 32, pp 665-672

Lee J.Y., A.M.Park (1994), *Parametrization of the pollutant transport and dispersion in urban street canyon*, *Atm. Env.* Vol 28, n°4, pp 2343-2349

Mietlicki F., Gombert D (1999), *Enforcement of trafic bans :the lessons of the first october experience, a first study based on the Airparif Air Quality tool*, Sixth international Conference on Harmonization of Atmospheric regulatory purposes, Rouen 1999.

Mohan M., Siddiqui T.A., *Analysis of various schemes for the estimation of atmospheric stability classification*, *Atm. Env.* Vol 21, pp 3775-3781

Moussiopoulous N., P. Sham, Ch. Kessler, (1995), *Numerical simulation of photochemical smog formation in Athens, greece, a case study*, *Atm. Env.* Vol 29, pp 3619-3632

Moussiopoulous N., P. Sham, R. Kunz, T. Vögele, Ch. Schneider, Ch. Kessler, (1997) *High resolution simulations of the wind flow and the ozone formation during the Heilbronn ozone experiment*, *Atm. Env.* Vol 31, pp 3177-3186

,Mukherjee P., S. Viswanathan, L. Cheng Choon, (2000), *Modelling mobile source emissions in presence of stationnary, sources J. of Hazardous Material*, A76, pp 23-37

Nakamura Y., T.R. Oke, (1988) *Wind, temperature and stability conditions in east-west oriented urban canyon*, *Atm. Env.* Vol 22, pp 2691-2700

Nicholoson S.E. (1973), *A pollution model for street-level air pollution*, *Atm. Env.* Vol 9, pp 19-31

Nikmo J., J.P. Tuovinen, J. Kukkonen, I. Valkoma, (1999), *A hybrid plume model for local scale atmospheric dispersion* *Atm. Env.* n°33, pp 4389-4399

Oke T.R., (1988), *Street design and urban canopy layer climate*, *Energy and Buildings*, Vol 11, pp 103-113

Olesen H.R., (1998), *Model Validation Kit - Status and Outlook*. Presented at the 5th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purpose in Rhodes, May 1998. To be published in the IJEP.

Petit C., M. de Jerphanion, M. Brou, (2000) *Analyse de sensibilité d'un logiciel d'évaluation des immissions liées au trafic automobile, au niveau de la rue. Le cas de Street3.I*, proceedings du colloque "Transport et Pollution de l'air", Avignon

Plate E.J. (1999) *Methods of investigating urban wind fields – physical models*, Atm.Env. Vol 33, pp 3981-3989

Poli A.A. et al, (1993), *On the use of normalized mean square error in evaluating dispersion model performace*, Atm. Env. Vol 27A, pp 2427-2434.

Prabha T.V., E. Mursch-Radlgruber, (1999), Investigation of air pollution distribution in Linz : case study to evaluate a K-type diffusion model coupled with a mass consistent wind model, Atm. Env. Vol 33, pp 4067-4080

Rao K.S., J.Y. Ku, S.T. Rao, (1989), A comparison study of three urban air pollution models, Atm. Env. Vol 23, pp 793-801

Rotach M.W. (1995), *Profiles turbulence statistics in and above an urban street canyon*, Atm. Env. Vol 29, pp 1473-1486

Rouïl L. et Léoz E. (1999), *Analyse des modèles à transformation chimique*, Rapport LCSQA convention 42/99

Rouïl L., Wroblewski A., (1999), *Retour d'expérience en matière de modélisation*, Rapport LCSQA

Ryall D.B. Maryon R.H. (1998), *Validation of the UK Met office's NAME model against the ETEX dataset*, Atm.Env. Vol 32, pp 4265-4276

Schatzmann M., S. Rafailidis, M. Pavageau, (1997) *Some remarks on the validation of small-scale dispersion models with field and laboratory data*, J. of wind Eng. And Ind. Aerod., Vol 67-68, pp 885-893

Seinfeldt. (1988), *Ozone air quality models: a critical review*, JAPCA, Vol 38, pp 616-645

Silibello C., G. Calori, G. Brusasca, G. Catenacci, G. Finzi, (1998) *Application of a photochemical grid model to Milan metropolitan area*, Atm. Env. Vol 32, pp 2025-2038

Simpson D. (1993), *Photochemical model calculations over Europe for two extended summer periods : 1985 and 1989. Model results and comparisons with observations*, Atm. Env. Vol 27A, pp 921-943

Sini J.F., S. Anquetin, P.G. Mestayer, (1996) *Polluant dispersion and thermal effects in urban street canyons*, Atm.Env. Vol 30, n°15, pp 2659-2677

Soulhac L., (2000) *Modélisation de la dispersion atmosphérique à l'intérieur de la canopée urbaine*, Rapport de thèse, Ecole Centrale de Lyon

Targeting (2000), *Street3.1, logiciel d'évaluation simple de la pollution atmosphérique provoquée par la circulation automobile*, manuel utilisateur

Theurer W. , E.J. Plate, K. Hoeschel, (1996), *Semi-empirical models as a combination of wind tunnel and numerical dispersion modelling*, *Atm. Env* Vol 30, pp 3583-3597

Theurer W., (1999) Typical building arrangements for urban air pollution modelling, *Atm. Env.* Vol 33, pp 4057-4066

Uehara K., S. Murakami, S. Oikawa (2000), *Wind tunnel experiments on how thermal stratification low in and above urban street canyons*, *Atm. Env.* Vol 34, pp 1553-1562

Vachon G. Rosant J.M., Mestayer P.G., Sini J.F., *Measurement of dynamic and thermal fields in a street canyon, Urbcap, Nantes 99*, 6th Conference on Harmonization within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes, 11-14 octobre 1999, Rouen.

Vautard et al. (2001), *Validation of a hybrid forecasting system for the ozone concentrations over the Paris area*, *Atm. Env* Vol 35, pp 2449-2461

Veals A.T., R.S.Appely, (1997), *Comparison of ADMS-Urban and Indic AIRVIRO Regional Scale dispersion models*, Université de Birmingham (www.bham.ac.uk/geography/met/task1.html)

Yamartino R.J., G. Wiegand (1988) *Development and evaluation of simple models for the flow, turbulence and pollutant concentration fields within an urban street canyon*, *Atm. Env* Vol 20 pp 2137-2156

Yamartino R.J., J.S Scire, G.R Charmichael, Y.S. Chang, (1992) *The CALGRID mesoscale photochemical grid model-I model formulation*, *Atm.Env* Vol 26A, pp 1493-1512

Liste des annexes

[illegible]

LES MODELES GAUSSIENS

PRESENTATION GENERALE

GENERALITES

La formulation gaussienne de la dispersion d'un panache de polluant a été introduite par Pasquill et Gifford dans les années 60.

Elle exprime une relation analytique simple pour décrire la concentration C d'un polluant gazeux ou assimilé comme tel en un point de l'espace repéré par ses coordonnées (x,y,z) sous la forme suivante :

$$C(x, y, z; H) = \frac{Q}{2\Pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right\}$$

L'axe x coïncide avec l'axe du panache, et z désigne la direction verticale.

Q est le débit de la source, u la vitesse de vent et H la hauteur d'émission. σ_y et σ_z sont les déviations standards dans les directions transversale et verticale, caractérisant la répartition gaussienne des concentrations.

Pour la recherche de concentrations au niveau du sol, cette équation devient :

$$C(x, y, 0; H) = \frac{Q}{\Pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \exp\left(-\frac{H^2}{2\sigma_z^2}\right)$$

Les hypothèses sous-jacentes à cette formulation sont les suivantes :

- Emissions continues, ce qui permet de négliger la diffusion dans l'axe du panache,
- Conservation de la masse par réflexion complète du panache par le sol,
- Vitesse et direction de vent constantes à une hauteur donnée,
- Effets de cisaillement du vent négligés, ce qui implique que la diffusion transversale et verticale du panache est normale à son axe. Cette hypothèse ne vaut que jusqu'à une distance de 10km environ,
- C , u , σ_y et σ_z sont moyennés sur la même base temporelle (10 min en principe).
-

ESTIMATION DES COEFFICIENTS DE DISPERSION

Généralités

L'estimation des coefficients de dispersion est l'un des points les plus délicats du développement de modèles gaussiens. σ_y et σ_z dépendent de la stabilité (ou de la turbulence) atmosphérique, de la rugosité du site, de la vitesse de vent et de la distance à la source. Plusieurs méthodes sont décrites dans la littérature pour les estimer.

La stabilité atmosphérique étant une notion difficile à appréhender (cf chapitre météo §6), les scientifiques ont recherché une classification simple permettant de la caractériser en fonction de critères tels que la nébulosité la nuit et le rayonnement et l'insolation le jour, le gradient thermique vertical ou encore les fluctuations du vent observé [Mohan et Siddiqui 1998].

Approche la plus courante

Les catégories les plus connues sont celles définies par [Pasquill et Gifford, 1976] , formalisées par des lettres de A (situation très instable) à F (situation très stable) et dont la répartition en fonction de la vitesse de vent et de la nébulosité, est donnée dans le tableau 1. Une classification développée sur les fluctuations mesurées du vent dans les directions horizontale (σ_y) et verticale (σ_z) a été proposée par [Cramer, 1957] (tableau 2).

Vitesse de vent (m/s)	Insolation (jour)			Conditions de nuit	
	Forte	Modérée	Faible	Faible nébulosité (>4/8)	Forte nébulosité (<3/8)
<2	A	A-B	B		
2	A-B	B	C	E	F
4	B	B-C	C	D	E
6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Tableau 1 : Classes de stabilité selon Pasquill

Stabilité	σ_y (deg)	σ_z (deg)
Très instable	30	10
Neutre-Instable	15	5
Neutre-Stable	6	2
Très stable	3	1

Tableau 2 : Classes de stabilité de Cramer

Dans l'approche la plus traditionnelle, pour chaque classe de stabilité, les coefficients de dispersion sont déduits, en fonction de la distance à la source, de la lecture d'abaques établis à partir de programmes expérimentaux de mesure américains (prairie Grasse en 1959 par exemple). Elles sont présentées en figure 1. Il est important de noter que ces résultats se réfèrent souvent à une situation en zone rurale et terrain plat (qui correspond à celle observée durant la campagne de mesure), ce qui délimite leur domaine de validité :

- terrain plat,
- distances supérieures à 100m,
- vitesse de vent supérieure à 2 m/s (en dessous il n'y a pas de direction privilégiée et le panache a un comportement erratique et non gaussien).

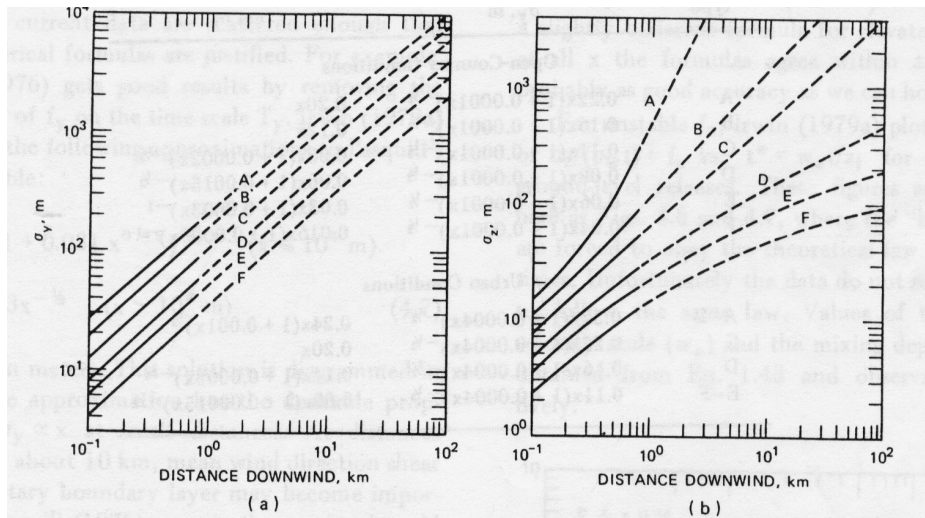


Fig. 4.4 Curves of σ_y and σ_z for turbulence types based on those reported by Pasquill (1961). [From F. A. Gifford, *Turbulent Diffusion-Typing Schemes: A Review*, *Nucl. Saf.*, 17(1): 71 (1976).]

Figure 1 :abaques définissant les coefficients de dispersion selon Pasquill

De manière à faciliter l'exploitation de ces informations les scientifiques ont proposé des formulations des coefficients de dispersion sous la forme de fonctions puissance de x . Les exemples les plus connus utilisent les fonctions suivantes :

$$\sigma_y = ax^b \quad \sigma_z = cx^d$$

avec a , b , c , d définis en fonction de la classe de stabilité, de la vitesse de vent. Plusieurs auteurs en ont proposé des valeurs.

Les formules les plus connues et utilisées sont cependant celles recommandées par Briggs en 1973, qui résultent de la compilation de résultats relatifs à plusieurs campagnes de mesures. Elles sont valables pour x compris entre 100m et 10 km, et sont données dans le tableau 3. Elles sont utilisées dans le code de référence de l'EPA, ISC3 pour représenter la dispersion d'un panache émis par une source ponctuelle.

Classe de Pasquill	$\sigma_y (m)$	$\sigma_z (m)$
Conditions rurales		
A	$0.22x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.20x$
B	$0.16x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.12x$
C	$0.11x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.08x(1 + 0.0002x)^{-1/2}$
D	$0.08x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.06x(1 + 0.0015x)^{-1/2}$
E	$0.06x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.03x(1 + 0.0003x)^{-1}$
F	$0.04x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.16x(1 + 0.0003x)^{-1}$
Conditions urbaines		
A-B	$0.32x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$	$0.24x(1 + 0.001x)^{-1/2}$
C	$0.22x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$	$0.20x$
D	$0.16x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$	$0.14x(1 + 0.0003x)^{-1/2}$
E-F	$0.11x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$	$0.08x(1 + 0.00015x)^{-1/2}$

Tableau 3 : coefficients de dispersion proposés par Briggs (1973)

Exemple : le cas d'ISC3 (USEPA)

Le logiciel ISC3 est le logiciel de référence (du type gaussien de première génération) de l'Agence de l'Environnement américaine. Pour le calcul des coefficients de dispersion, il utilise plusieurs formulations qui sont toutes dépendantes de la classification de stabilité définie selon Pasquill.

- Pour les conditions urbaines les formules données dans le tableau 3 sont utilisées.
- Pour les conditions rurales, les coefficients se déduisent des expressions suivantes :

$$\sigma_z = ax^b$$

$$\sigma_y = 465.11628(x) \tan(TH) \quad TH = 0.017453293[c - d \ln(x)]$$

a, b, c, d sont issues de tables complètement décrites dans le manuel utilisateur [EPA, 1995].

Autres méthodes

Il est cependant important de préciser que de nombreuses méthodes ont été proposées par les chercheurs pour l'estimation des coefficients de dispersion. Certaines d'entre elles incorporent de manière plus ou moins complexe, la déviation standard de la direction de vent dans le calcul de l'un des deux coefficients de dispersion ou des deux [Cirillo et Poli 1992]. Cette possibilité s'avère pertinente pour traiter les situations de vents faibles caractérisées par des fluctuations importantes, et mal approchées par les méthodes classiques basées sur les courbes de Pasquill-Gifford [Sharan et al 1995].

La démarche préconisée par Doury, repose sur une autre classification de la stabilité atmosphérique. Deux situations de stabilité (diffusion faible et diffusion normale) sont considérées et les coefficients de dispersion dépendent du temps écoulé après le rejet, et non plus de la distance à la source. Cette approche est implantée en particulier dans les logiciels de dispersion de l'IPSN (BATEX), mais aussi dans l'outil pédagogique d'évaluation des risques par inhalation, développé par l'Université de Grenoble, POL'ER.

Prise en compte des obstacles

La présence de bâtiments dans le voisinage de la cheminée, susceptibles de modifier la dispersion peut également être modélisée. Les critères réglementaires sur lesquels cette influence doit être prise en compte reposent sur des considérations purement géométriques. Par exemple dans le logiciel ISC, l'influence du bâtiment est supposée avérée s'il se trouve à une distance de la cheminée inférieure à 5 fois le minimum de sa hauteur ou de sa largeur. Si tel est le cas, sa hauteur est examinée.

Les deux procédures les plus utilisées sont celles de Schulman-Scire et celle de Huber-Snyder. Dans le premier cas on néglige l'effet du bâtiment si la hauteur de rejet est supérieure à $h_b + 1.5 \min(h_b, h_w)$ où h_b est la hauteur du bâtiment, et h_w sa largeur. Dans le deuxième cas, il n'est pas pris en compte, si la hauteur de rejet est supérieure à 2.5 fois celle du bâtiment. Si ces critères ne sont pas vérifiés, les coefficients de dispersion sont modifiés selon une procédure dépendant de l'état de stabilité de l'atmosphère [Bowman 2000].

ESTIMATION DE LA VITESSE DE VENT

La vitesse moyenne de vent apparaît dans l'expression du gaussien. Elle doit être estimée à la hauteur effective H . L'idéal est de disposer de mesures à cette hauteur, ce qui n'est pas toujours possible.

Aussi suivant les données disponibles et les hypothèses adoptées, la vitesse u peut être déduite d'équations théoriques complexes impliquant des paramètres de la couche limite atmosphériques (vitesse de frottement u^* , longueur de Monin-Obukhov L , gradients de vent et de température). Il est plus classique d'assimiler la répartition verticale du vent à une loi en puissance, bien connue sous la forme :

$$u = u_{ref} \left(\frac{z}{z_{ref}} \right)^p$$

z_{ref} est une hauteur de référence et u_{ref} la vitesse de vent à cet endroit, mesurée par un anémomètre. Ainsi il est très courant de prendre 10m pour hauteur de référence.

p est un coefficient dépendant de la classe de stabilité et de la rugosité. Les modèles de référence de l'USEPA (dont ISC3) utilisent de valeurs proposées par Irwin en 1979 et données dans le tableau 4.

Cette approximation est considérée comme invalide pour des hauteurs supérieures à 200m. Néanmoins en deçà, elle constitue une alternative pratique.

	A	B	C	D	E	F
rural	0.15	0.15	0.20	0 ; 25	0.40	0.60
urbain	0.07	0.07	0.10	0.15	0.35	0.55

Tableau 4 : valeur du coefficient p suivant la stabilité et la rugosité

CALCUL DE LA SURHAUTEUR

La hauteur H intervenant dans la formulation de l'équation gaussienne, n'est pas la hauteur de cheminée, h . En effet, les polluants étant généralement émis à une température et une vitesse importantes, le panache est surélevé d'une hauteur Δh , appelée surhauteur. Ainsi, $H = h + \Delta h$.

Le calcul de la surhauteur est fait de manière transparente pour l'utilisateur du code gaussien. Cette grandeur dépend de la stabilité atmosphérique, et de la prédominance de l'effet thermique (influence de la température en sortie de cheminée) ou de l'effet dynamique (influence de la vitesse en sortie de cheminée) dans l'éjection. Les formules de Briggs ou de Holland, sont parmi les plus connues pour formaliser ces considérations. Elles ne sont pas développées dans ce document, mais les bases sur lesquelles elles sont établies sont données dans [EPA, 1995].

Certaines formules peuvent également tenir compte de la présence d'une couche d'inversion et de ses effets sur le panache (limitation de la dispersion).

En conclusion, notons que la hauteur physique de rejet (h) est également susceptible d'être modifiée par les effets aérodynamiques propres induits par la cheminée. Ils sont supposés non négligeables si la vitesse d'éjection des gaz est inférieure à $1.5u$ (vitesse de vent). Dans ce cas la dépression créée par la cheminée attire le panache vers le sol. La hauteur de rejet se déduit de l'expression suivante :

$$h' = h + 2 \left(\frac{w_0}{u} - 1.5 \right) D$$

où w_0 est la vitesse d'éjection et D le diamètre de cheminée.

MOYENNES TEMPORELLES

Les coefficients de dispersion formulés suivant les abaques de Pasquill-Gifford sont représentatifs d'états moyennés sur une dizaine de minutes. Ainsi les concentrations calculées

sur la base de ces coefficients sont valides pour cette même période. Mais les études réalisées à l'aide d'outils gaussiens nécessitent souvent la connaissance des concentrations sur des périodes plus ou moins longues (moyennes horaires).

Afin d'adapter de manière simple les coefficients établis pour une période de 10 minutes à une période quelconque Gifford a proposé la modification suivante :

$$\frac{\sigma_{yd}}{\sigma_{ye}} = \left(\frac{T_{yd}}{T_{ye}} \right)^q$$

où d et e se réfèrent à des durées différentes. σ_{ye} est le coefficient lisible sur les abaques de Pasquill Gifford pour une période T_{ye} de 10 minutes et σ_{yd} est le coefficient recherché pour la période T_{yd} . q est un paramètre compris entre 0.25 et 0.3 pour des périodes T_{yd} de 3 minutes à 1 heure, et valant approximativement 0.2 pour des périodes allant de 1 heure à 100 heures. Pour des calculs relevant du "long terme" (moyennes mensuelles ou annuelles) la démarche est différente. En effet sur de telles périodes, il est logique de supposer que le vent souffle pendant un temps donné dans toutes les directions, en n'en privilégiant aucune. Ainsi la notion de dispersion transversale, matérialisée par le σ_y , n'a plus réellement de sens. Ainsi, on utilise classiquement un modèle calculant la dispersion moyenne pour une direction de vent variant dans un secteur angulaire donné, en négligeant la dispersion transversale. La rose des vents est alors divisée en 16 secteurs de 22.5° ou 18 secteurs de 20° . La concentration au niveau du sol pour un secteur de largeur $(2\pi/n)$ d'où provient le vent avec une fréquence f pour la période étudiée est donnée par :

$$C = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{fQn}{2\pi\sigma_z ux} \right) e^{-H^2 / 2\sigma_z^2}$$

Pour avoir la concentration totale sur la période recherchée il suffit de sommer les contributions de ce type.

TRAITEMENT DES SOURCES SURFACIQUES

Le traitement des sources non ponctuelles (i.e. linéiques, surfaciques ou volumiques) fait l'objet de traitements spécifiques dans les modèles gaussiens. Plusieurs méthodes sont ainsi rencontrées :

- L'intégration numérique d'une infinité de sources ponctuelles qui représentent la source réelle,
- Le découpage de la source en un nombre fini de sources ponctuelles judicieusement placées et paramétrées en fonction du vent et de la position des récepteurs,
- L'assimilation de la source surfacique à une source ponctuelle à localiser correctement, de manière à retrouver les caractéristiques de la source réelle au niveau de la dispersion (principe du point source virtuel).

Des résultats relativement disparates peuvent être obtenus suivant la situation et les paramètres adoptés. Il s'agit là d'une limitation dans l'usage des modèles gaussiens.

MODELES GAUSSIENS DE « SECONDE GENERATION »

Ces modèles sont présentés comme une alternative aux modèles gaussiens traditionnels qui souffrent des limitations déjà longuement évoquées dans les paragraphes précédents.

Ils incorporent des paramétrisations analytiques de la couche de surface de la couche limite atmosphérique, et des fonctions de calcul de la dispersion dépendantes des conditions de stabilité.

Les principes sur lesquels se basent ces outils sont précisément décrits dans [Hanna et Chang 1993]. Ils sont succinctement rappelés dans ce paragraphe.

Le calcul des concentrations atmosphériques se décline en deux parties :

- Le module météorologique dont le rôle est de calculer les variables qui permettront de caractériser la couche limite atmosphérique (flux de chaleur et vitesses de frottement) à partir d'un certain nombre de données mesurées ou observées (caractéristiques de vent, de température, d'humidité, d'ensoleillement, rugosité du site, albédo...).
- Le module de dispersion qui à partir des flux de surface et des conditions d'émission, déduit les concentrations en polluants.

MODULE METEOROLOGIQUE

La notion de classification de stabilité atmosphérique telle qu'exposée précédemment avec, par exemple, la théorie de Pasquill-Gifford, n'est plus utilisée. La couche limite atmosphérique est représentée par sa hauteur, et les flux qui s'y développent, d'origine thermique ou dynamique.

Leur nature conditionne la valeur de la longueur de Monin-Obukhov. En situation instable elle est négative, et représente une mesure de la hauteur sur laquelle les mouvements turbulents sont essentiellement liés à la convection thermique. En situation stable, elle est positive et représente la hauteur sur laquelle les mouvements turbulents sont inhibés par la couche stable. Elle s'exprime de la façon suivante :

$$L = - \frac{u_*^3 T \rho C_p}{0.4 g Q_h}$$

où u_* est la vitesse de frottement, Q_h le flux de chaleur à la surface. Ces deux grandeurs sont rarement mesurées à l'occasion de campagnes de mesure. Dans la pratique elles sont plutôt déduites d'expressions analytiques impliquant des éléments plus facilement mesurables (vitesse de vent, nébulosité et ensoleillement, humidité) et des paramètres convenablement ajustés en fonction de la situation (rugosité, albédo...).

Dans le pré-processeur météorologique, les valeurs des écarts-types des fluctuations latérales et verticales du vent $\sigma_v(z)$ et $\sigma_w(z)$ doivent aussi être définies. En l'absence de mesures, elles sont déduites de formules empiriques qui impliquent les variables caractéristiques de la CLA (L , u_*).

De même la hauteur h de la CLA est déduite de mesures, ou issue de formules théoriques. Elle dépend alors des paramètres précédents, du moment de la journée, et de la stabilité de l'atmosphère.

Certaines limitations apparaissent encore dans cette approche. Elles concernent souvent des situations difficiles à modéliser, par manque de données et de considérations théoriques sur les phénomènes qui les animent. Il s'agit par exemple des cas de vent faible en condition de forte stabilité, des fins d'après midi qui voient la décroissance progressive de la couche limite, ou encore des cas où la hauteur de mélange est inférieure à la hauteur de rejet.

Néanmoins des progrès constant dans ces domaines, permettent d'appréhender de mieux en mieux ces phénomènes complexes.

MODULE DE DISPERSION

La plupart des outils opérationnels caractérisent le comportement dispersif du polluant, suivant les conditions de stabilité atmosphérique rencontrées, voire, pour les plus complexes, les caractéristiques du rejet (prise en compte de sa hauteur par rapport à l'épaisseur de la couche de mélange). Ainsi suivant la nature des conditions observées, différents modèles peuvent être mis en œuvre.

Couche limite stable à neutre : le modèle gaussien

La formulation est exactement similaire à celle proposée au paragraphe précédent.

La différence se situe au niveau du calcul des coefficients de dispersion σ_y et σ_z . Ils ne sont plus déterminés par les abaques tels que ceux proposés par Pasquill-Gifford, mais sont calculés en fonction des écarts-types de déviation du vent, $\sigma_v(z)$ et $\sigma_w(z)$, estimés dans le module météorologique.

Les fonctions qui lient ces composantes sont plus ou moins complexes et ne sont pas explicitées dans ce document. Elles sont détaillées dans les manuels utilisateurs des logiciels concernés : ADMS3 [CERC, 1999], AERMOD (ww.epa.gov), ou HPDM (Hybrid Plume Dispersion Model) [Hanna et Chang, 1993].

Remarque : des adaptations sont incorporées pour tenir compte de la présence de bâtiments au voisinage du point de rejet, ou des effets aérodynamiques induits par la structure (cheminée ou bâtiment) qui le supporte.

Couche limite instable

Des observations en laboratoire et des études numériques ont montré que dans les zones soumises à des effets turbulents importants, imputables à la convection thermique, le profil vertical de dispersion des polluants n'était plus gaussien.

Aussi des alternatives mieux adaptées [Hanna et Chang 1993] ont été développées afin d'améliorer la prise en compte des phénomènes typiques de cette zone. Elles sont basées sur les paramètres calculés dans le module météorologique.

MODELISATION DU DEPOT

Le dépôt des gaz et particules sur le sol et la végétation est l'un des mécanismes assurant la disparition du polluant dans l'atmosphère (puits). Il est souvent utile de quantifier l'importance de ce phénomène, d'une part pour appréhender les modifications qu'il engendre sur les concentrations atmosphériques, et d'autre part pour évaluer l'éventuelle pollution du sol qui en résulte.

Deux types de dépôts sont classiquement considérés : le dépôt sec, et le dépôt humide résultant des précipitations.

LE DEPOT SEC

Le phénomène de dépôt sec est régi principalement par la taille des particules de polluant. En effet suivant sa valeur, elles seront soumises à des sollicitations d'origine différente qui les amèneront à se déposer à la surface du sol.

Les particules les plus grosses sont soumises aux effets de leur propre poids. Suivant leur densité, la loi de Stokes leur associe une vitesse de sédimentation v_t définie comme suit :

$$v_t = \frac{2r^2 g \rho_p}{9\mu}$$

où r est le rayon de la particule, ρ_p sa densité, g l'accélération de la pesanteur, et μ la viscosité de l'air. Le taux de déposition de polluant au sol est alors donné par l'expression suivante :

$$\omega = v_t C(x, y, 0)$$

où $C(x, y, 0)$ est la concentration de polluant calculée ou mesurée au niveau du sol.

Les gaz et les particules fines (de diamètre inférieur à 10 μm) sont également amenés à se déposer au sol sous l'effet de la diffusion turbulente et du mouvement brownien. Des processus chimiques, physiques ou même biologiques propres à la surface achèvent de conditionner la nature du dépôt. Toute la question est donc de déterminer la vitesse de dépôt v_d qui permet de déduire le taux de déposition au sol par la formule suivante :

$$\omega = v_d C(x, y, 0)$$

Des études en laboratoire et des mesures en conditions réelles ont permis de définir des vitesses de dépôt suivant la taille de la particule considérée et la nature de la surface du sol. Des abaques ont ainsi pu être établis compilant ces données pour des situations particulières (dépôt sur une surface liquide, sur l'herbe...). Des exemples bien connus sont donnés dans [Mac Mahon et Denison 1979].

Pour les gaz, la vitesse de dépôt est souvent modélisée par une formule analogue à celle de la loi d'Ohm utilisée pour les circuits électriques [Wesley et Kicks, 2000] :

$$v_d = \frac{1}{R_a + R_b + R_c}$$

R_a représente la résistance aérodynamique au-dessus de la surface du sol. Elle ne dépend que de la turbulence en ce point. R_b est un autre facteur aérodynamique qui est représentatif de la dynamique dans la couche limite visqueuse immédiatement en contact avec le sol. Ces paramètres sont liés à la nature du sol et aux conditions atmosphériques et peuvent être connus de manière empirique. R_c est la résistance liée à la nature même de la surface du sol. Sa valeur dépend également du type de polluant. A titre d'exemple, dans le logiciel ADMS3, elle est nulle pour les particules, vaut 30 sm^{-1} pour les gaz réactifs, 1000 sm^{-1} pour les gaz passifs, et tend vers l'infini pour les gaz inertes.

Dans les modèles numériques, le dépôt implique la détermination d'une vitesse de dépôt qui permettra de déduire un flux de polluant au niveau du sol. Les effets sur le panache atmosphérique doivent également être considérés. Différentes techniques sont appliquées dans les modèles gaussiens. L'une des plus connues consiste à modifier la valeur du débit en fonction de la distance à la source de façon à simuler un appauvrissement du panache. Il obéit à la loi suivante :

$$\frac{\partial Q}{\partial x} = \int \omega(x, y) dy$$

ce qui revient à définir Q comme la solution d'une équation différentielle.

LE DEPOT HUMIDE

Il provient de l'entraînement des polluants vers le sol, par les précipitations de tout type (brume, pluie...). Son influence sur la concentration atmosphérique en polluant est modélisée par la formule suivante :

$$C(t) = C(0)e^{-\Lambda t}$$

Λ est le coefficient de lessivage (en s^{-1}) et t est le temps écoulé depuis le début de la précipitation. Il est ainsi possible de déduire un taux de déposition au sol par la formule :

$$\omega_h = \int_0^{Z_h} \Lambda C dz \text{ où } Z_h \text{ est la hauteur sur laquelle s'étend le panache humide.}$$

Cette méthode connaît des limites importantes du fait de la détermination du coefficient de lessivage. Des mesures ont permis d'en établir des valeurs, qui ne sont valides que dans des conditions bien précises, dépendantes de la nature de l'aérosol (taille), de la surface, de la région géographique

REFERENCES

- W.A. Bowman, (2000), *Maximum ground level concentrations with down-wash analysis*, J. of Air & Waste Manag. Ass. Vol 50, pp 348-356
- CERC (1999), *ADMS3 User Guide*, CERC, février 1999
- M.C. Cirillo, A.P. Poli, (1992), *An intercomparison of semiempirical diffusion models under low wind speed, stable conditions*, Atm. Env. Vol 26A, pp 765-774
- H.E. CRAMER (1957), *A practical method for estimating the dispersal of atmospheric contaminants*, proceedings of the first national conference on applied meteorology
- EPA, (1995), *User's guide for the Industrial Source Complex (ISC) dispersion models*, Volume I User Instruction, EPA-454/B-95-003a
- F.A. GIFFORD, (1976), *Turbulent diffusion typing schemes, A Review*, Nuclear Safety, Vol 17, p71
- S.R Hanna, J.C. Chang, (1993), *Hybrid plume dispersion model (HPDM). Improvements and testing at three fields situations*, Atm. Env. Vol 27A, pp 1491-1508
- T.A. MacMahon, P.J. Denison, (1979), *Empirical atmospheric deposition parameters A survey*, Atm. Env. Vol 13, pp 571-585
- M. Mohan, T.A. Siddiqui, (1998) *Analysis of various schemes for the estimation of atmospheric stability classification*, Atm. Env. Vol 32, pp 3775-3781
- Sharan M., A. KumarYadav, M.P. Singh, (1995), *Comparison of sigma schemes for estimation of air pollutant dispersion in low winds*, Atm. Env Vol 29, pp 2051-2059
- M.L. Wesley, B.B. Hicks, (2000), *A review of current status of knowledge on dry deposition*, Atm. Env. Vol 34, pp 2261-2282

LES MODELES DE RUE

INTRODUCTION

Dans le chapitre consacré aux modèles de rue plusieurs types d'approches ont été distingués :

- les outils purement tridimensionnels qui font l'objet d'une annexe spécifique et qui ne seront donc pas évoqués par la suite,
- les modèles empiriques qui reposent sur la compilation et la transcription de résultats obtenus à partir de campagnes de mesures et d'essais en soufflerie (modèle de Jonhson, CAR),
- les modèles analytiques définis à partir de l'analyse de la physique mise en jeu.

Il est proposé dans cette partie d'approfondir les concepts généraux sur lesquels reposent les deux dernières classes de modèles, que l'on qualifie généralement de "modèles de rue". En particulier, les modèles empiriques, bien que relativement éloignés par nature des modèles déterministes, ont un développement pour les problématiques de rue qu'il est important de souligner.

LES MODELES EMPIRIQUES

Globalement la concentration dans la rue est exprimée comme la somme d'une contribution provenant de sources situées à l'extérieur de la rue, qui est transportée par le vent (concentration de fond C_b), et d'une contribution provenant des émissions de la rue elle-même (ΔC).

C_b dépend de la concentration en polluant au niveau urbain ou régional. Elle peut être mesurée sur un site dit "de fond" ou calculée par un modèle adapté.

Les modèles empiriques exploitent, pour le calcul de ΔC , les observations qui montrent que lorsque le vent est "presque" perpendiculaire à l'axe de la rue, il se crée une recirculation d'air qui entraîne les polluants dans un mouvement de rotation. Naturellement si l'on imagine une coupe de la rue, le côté face au vent connaît des concentrations plus faibles (notées C_w) que le côté sous le vent, où il y a accumulation de polluant (C_L). Ainsi une valeur de concentration est affectée à chacun des côtés de la rue (figure 1).

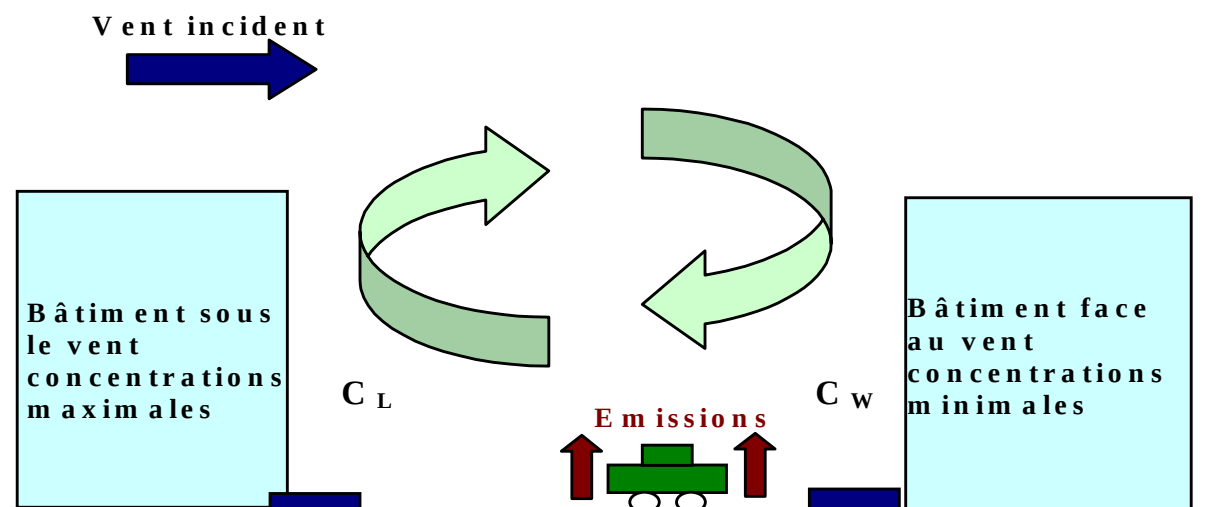


Figure 1 : Représentation schématique de l'écoulement dans une rue canyon

MODELE DE JONHSON

Dans la démarche adoptée par Jonhson [Jonhson 1973], les concentrations dans les cas où le vent est perpendiculaire à l'axe de la rue, sont calculées par les formules suivantes :

$$\Delta C_L = \frac{Q}{U_S Y} = \frac{Q}{k_1 k_2 (U + 0.5) [(x^2 + z^2)^{1/2} + 2]}$$

Pour la concentration du côté sous le vent, où Q est le débit des émissions dans la rue, $U_S = k_1 (U + 0.5)$ est la vitesse moyenne du vent dans la rue : U est la vitesse de vent incident, et la valeur arbitraire de 0.5 m/s retranscrit l'influence de la circulation des véhicules.

$Y = k_2 [(x^2 + z^2)^{1/2} + 2]$ est la hauteur du volume de mélange. x et z sont les positions relatives du récepteur par rapport à la source. La valeur arbitraire de 2m est choisie pour représenter la hauteur initiale, à l'émission.

Empiriquement, il est recommandé, d'après les expériences réalisées lors de la mise au point du modèle, d'imposer $K = \frac{1}{k_1 k_2} = 7$.

La concentration du coté face au vent est calculée de la manière suivante :

$$\Delta C_W = \frac{KQ}{W(U + 0.5)}$$

où W est la largeur de la rue.

Lorsque la direction du vent est intermédiaire entre la normale et l'axe de la rue, une moyenne de ces deux quantités est utilisée.

Bien que très approximatif, du fait des constantes empiriques qui le définissent, ce modèle est encore aujourd'hui largement utilisé en raison de sa simplicité. Il est par exemple implémenté dans le système AIRVIRO du SMHI et a été utilisé pour différentes études de pollution urbaine [Stein et Toselli 1996 ; Qin et Kot 1993].

LE MODELE CAR

Dans le modèle CAR [Eerens et al 1993], la contribution ΔC s'exprime sous la forme :

$$\Delta C = Q \Phi_S F_t F_0$$

où Q est le débit d'émission lié au trafic routier,

Φ_S (s.m-2) est un polynôme défini empiriquement en fonction de la distance du récepteur à l'axe de la route, et de la configuration de la rue,

F_t est un facteur représentatif de la vitesse du vent,

F_0 paramétrise les effets sur le vent imputables à l'éventuelle présence d'arbres en bordure de route. Il est défini en fonction d'expériences en soufflerie.

Un exemple des configurations étudiées dans le modèle CAR et des fonctions associées est donné en figure 3.

CAR a été initialement mis au point pour les besoins réglementaires des villes allemandes (modèle de référence), mais il a été également adapté à la problématique néerlandaise.

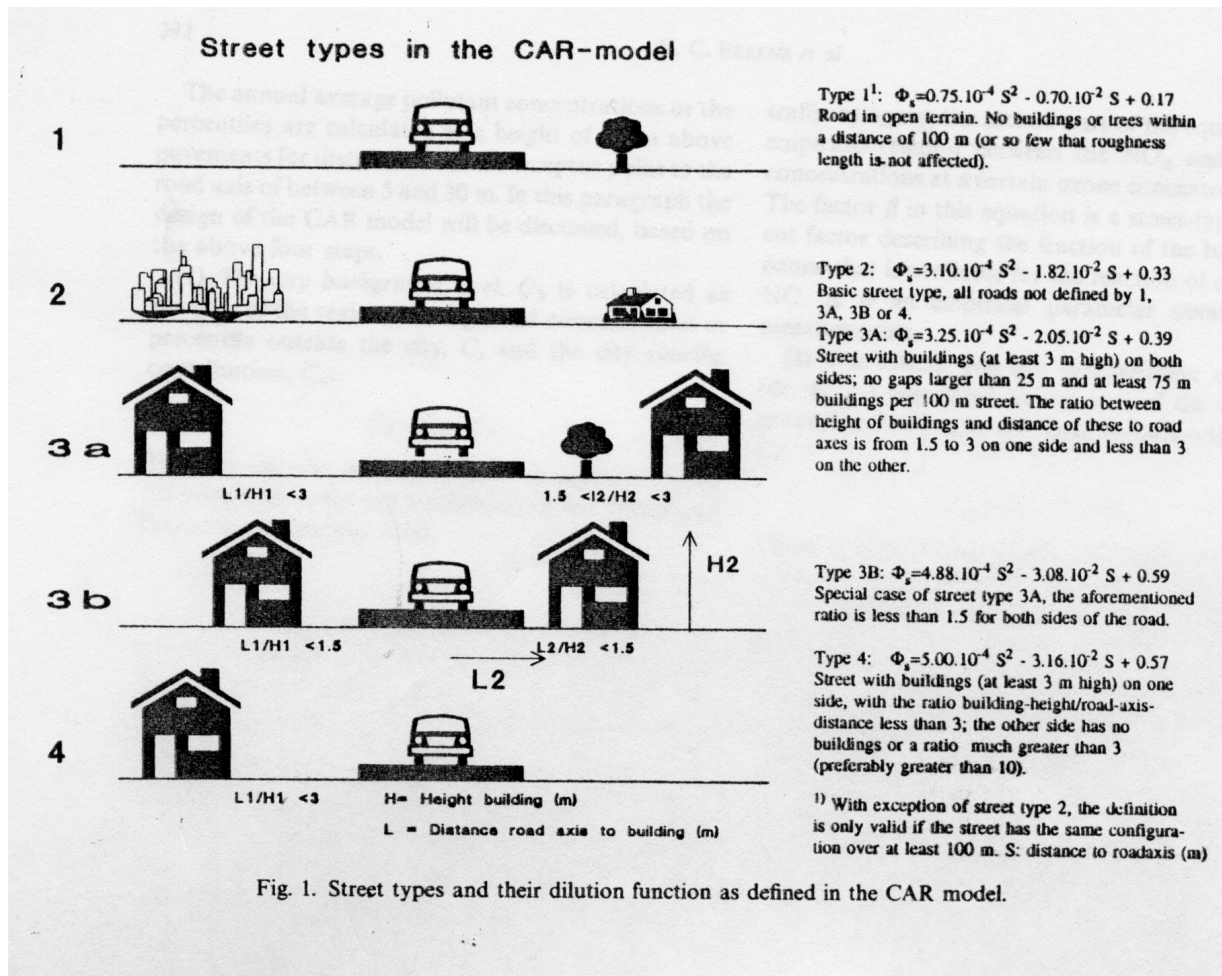


Figure 3 : configurations utilisées dans le modèle CAR

LES MODELES ANALYTIQUES

Les outils les plus récents et les plus performants dans cette gamme, sont développés sur des considérations physiques simples, caractérisant l'écoulement dans une rue canyon.

Dans de nombreux cas, la concentration est calculée à l'aide d'un modèle boîte. Un premier exemple est décrit par [Nicholson 1975]. Il s'appuie sur des formulations théoriques représentant le profil de vent intégré de manière à disposer d'une vitesse moyenne dans la rue. Celle-ci est ensuite utilisée en entrée du modèle boîte pour le calcul des concentrations. Ce modèle relativement ancien, ne sera pas détaillé dans la suite.

En fait, il est préférable d'insister sur les principes généraux sur lesquels sont définis les modèles analytiques les plus récents et utilisés de manière opérationnelle dans les codes de calcul. Le modèle précurseur dans cette gamme, est celui proposé par [Yamartino et Wiegand 1986], et connu sous le nom de CPBM (Canyon Plume Box model). Dans cette approche, le calcul du champ de vent et celui des concentrations font l'objet de deux étapes distinctes.

LE MODELE CPBM

Calcul des champs de vent

Pour des écoulements perpendiculaires ou parallèles à l'axe de la rue, des formulations analytiques simples sont adoptées pour décrire le champ de vent. Par exemple, dans le premier cas, les composantes horizontales et verticales de la vitesse de vent sont les solutions de l'équation bidimensionnelle de vortécité décrivant le comportement d'un fluide incompressible, avec des conditions aux limites appropriées :

$$\begin{cases} u = u_0(1 - \beta)^{-1}[\gamma(1 + ky) - \beta(1 - ky)/\gamma]\sin(kx) \\ w = -u_0ky(1 - \beta)^{-1}[\gamma - \beta/\gamma]\cos(kx) \end{cases}$$

avec $k = \Pi / W$, $\beta = \exp(-2kH)$, $\gamma = \exp(ky)$, $y = z - H$

Le champ de turbulence (fluctuations de vitesses, σ_u , σ_v , σ_w) est établi à partir de relations empiriques qui tiennent compte des effets de turbulence mécanique, mais aussi des effets thermiques dues à l'insolation. Ces grandeurs, ainsi que les composantes de vitesses sont ensuite intégrées, de façon à définir des valeurs moyennes le long de la rue, ainsi que sur chaque côté, le long des parois verticales.

Calcul des concentrations

Lorsque le régime de vent établi est propice à la formation d'une zone tourbillonnaire, la concentration en polluants dans la rue est décomposée en deux contributions : l'une, " directe " (C_d) est issue du panache émis par la rue, l'autre dite de " recirculation " (C_r) est due au transport et à la dispersion des polluants entraînés et accumulés par le mouvement de rotation de l'écoulement, et représente un niveau de fond.

La contribution directe exprime également la variabilité spatiale de la répartition des polluants dans la rue, puisqu'elle décrit le panache de pollution émis par le trafic routier. Elle est calculée à l'aide d'un modèle gaussien linéique. La diffusion dans la direction du vent est négligée et la source est définie comme une infinité de sources linéiques de longueur infinie se répartissant dans la rue.

Le débit associé à chacune de ces sources s'exprime de la manière suivante :

$$dQ = \frac{Q}{W} dx$$

Q désignant dans ce cas le débit total par unité de longueur et de temps.

D'après la formulation gaussienne adoptée, la concentration associée à cet élément est donnée par :

$$dC_d = \frac{2}{\Pi u_b \sigma_z(x)} \frac{dQ}{dx}$$

u_b est la vitesse de vent au niveau de la rue, et σ_z est le coefficient de dispersion du panache dans la direction verticale, à ajuster suivant les données disponibles.

Cette équation est finalement intégrée le long du chemin emprunté par le panache pour avoir la contribution totale. Alternativement à ce calcul rigoureux, la procédure proposée par Yamartino, introduit en fait les contributions de 3 panaches linéiques distincts. Pour un récepteur donné la valeur de concentration la plus importante est retenue.

La concentration de recirculation C_r est calculée à l'aide d'un modèle boîte, reposant sur l'hypothèse de conservation de la masse. Néanmoins la formulation standard est modifiée afin de rendre compte du fait qu'à chaque nouveau tour, seule une fraction de polluant circule encore :

$$C_r = \frac{Q}{u_b(W/2)} \frac{F}{1 - F}$$

où $F = \exp(-t_s / \tau) \in [0,1]$, τ exprimant le temps de rétention des polluants dans la rue, et $t_s \approx 2H / u_b$ est le temps caractéristique de recirculation.

Cette équation reproduit donc l'accumulation de polluant émis dans la rue avec un débit Q , dilué avec une vitesse u_b , et atténué à chaque tour d'un facteur F . En fait,

$$\frac{F}{1 - F} = \sum_{i=1}^{\infty} F^i$$

LE MODELE OSPM

Une variante du modèle précédent est celle proposée par [Berkowicz 1997], est appelée OSPM (Operational Street Pollution Model).

Dans cette approche, la définition du chemin d'intégration des contributions directes s'appuie sur une description plus rigoureuse du comportement du vent dans le canyon, notamment dans le cas d'une direction incidente quelconque par rapport à l'axe de la rue.

De plus le coefficient de dispersion verticale du panache gaussien est paramétré pour tenir compte de la turbulence induite par le mouvement des véhicules :

$$\sigma_z(x) = \sigma_w \frac{x}{u_b} + h_0$$

$$\sigma_w = ((\alpha u_b)^2 + \sigma_{w0}^2)^{1/2}$$

$h_0 \approx 2m$ est la hauteur à laquelle les polluants sont initialement dispersés, α est une constante dont la valeur proposée par défaut est 0.1, et σ_{w0} représente la turbulence induite par les véhicules. Elle s'exprime de la manière suivante :

$$\sigma_{w0}^2 = b^2 V^2 D$$

où V est la vitesse moyenne des véhicules, D est la densité de trafic : $D = \frac{NS^2}{VW}$, avec N le nombre de véhicules par unité de temps, S^2 , l'aire moyenne occupée par une voiture. b est un coefficient représentatif de l'aérodynamique des véhicules, une valeur de 0.3 est recommandée.

La concentration de recirculation est également calculée à l'aide d'un modèle boîte appliqué à une zone trapézoïdale, sur laquelle s'étend le tourbillon (figure 4).

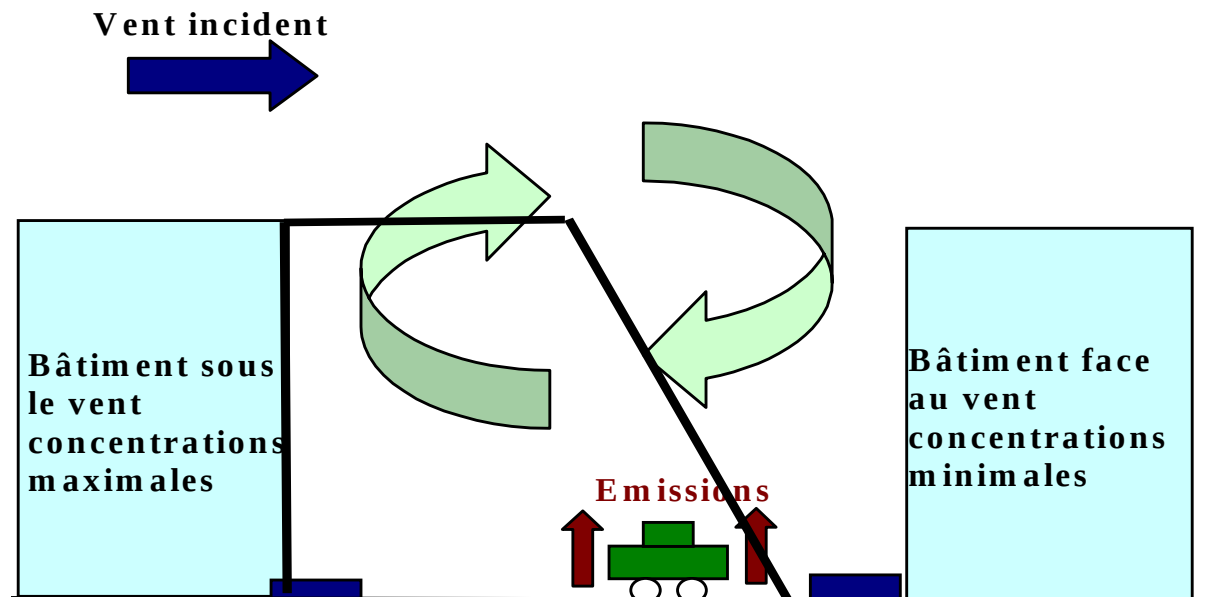


Figure 4 : définition de la boîte pour le calcul de la concentration de recirculation dans OSPM

LE MODELE DE SOULHAC

Dans sa thèse réalisée au laboratoire de Mécanique des fluides de l'Ecole centrale de Lyon, [Soulhac 2000] a très récemment proposé un nouveau modèle de rue s'appuyant globalement sur des principes similaires.

Un modèle boîte permet de calculer la contribution de recirculation. Un travail important a été fourni au niveau de la description théorique de l'interface turbulente entre la rue et l'atmosphère extérieure (échanges au sommet de la rue). Celle-ci est représentée par une couche de mélange, régie par les équations de la mécanique des fluides turbulente. Il en résulte la formulation suivante :

$$C_r = \frac{Q}{U_H WL} \sqrt{\frac{\Pi}{\Lambda}}$$

où Π est un coefficient dépendant des caractéristiques turbulentes de l'écoulement, et L est la longueur de la rue.

Pour calculer la contribution directe, les caractéristiques de l'écoulement dans la rue sont précisément prises en compte. Aussi, trois situations sont clairement distinguées dans l'étude : 1) le cas où le vent est perpendiculaire à l'axe de la rue, 2) le cas où il est parallèle, 3) et le cas où sa direction est quelconque.

Dans la première situation, le modèle repose sur la résolution analytique de l'équation de convection-diffusion, avec des conditions aux limites appropriées. Cette démarche a été validée par des études d'intercomparaison avec des modèles tridimensionnels, et des résultats issus de campagnes de mesures expérimentales en soufflerie.

Lorsque le vent est parallèle à l'axe de la rue, un modèle analytique permet de déterminer le profil de vitesses de l'écoulement canalisé, qui est utilisé dans un modèle gaussien pour décrire le champ de concentration.

Le cas d'un vent d'une incidence quelconque est traité comme une superposition des deux états précédents.

Ce travail de recherche a débouché sur l'élaboration d'un code de calcul qui demeure aujourd'hui un outil de recherche, mais qui a le mérite d'étendre le champ d'application traditionnel des modèles de rue : prise en compte des vents non perpendiculaires à l'axe de la rue, traitement des intersections, traitement d'un réseau de rues (quartier).

REFERENCES

- Berkowicz R., O. Hertel, N.N. Sorensen, J.A. Michelsen, (1997) *Modelling Air Pollution from Traffic in urban areas*, Flow and dispersion through groups of obstacles édité par R.J. Perkins, S.E Belcher, Clarendon Press-Oxford
- Eerens H.C., C.J. Sliggers, K.D. Van Den Hout, (1993) *The car model : the dutch method to determine city street air quality*, Atm.Env. Vol.27B, n°4, pp 389-399
- Jonhson W.B., F.W. Ludwig, W.F. Dabbert, R.J. Allen (1973), *An urban diffusion simulation model for carbon monoxide*, JAPCA Vol 23, n°6, pp 490-498
- Nicholason S.E. (1975), *A pollution model for street-level air pollution*, Atm. Env. Vol 9, pp 19-31
- Y. Qin, S.C. Kot, (1993), *Dispersion of vehicular emissions in street canyons, GuangZhou City, South China*, Atm. Env. Vol 27, pp 283-291
- Soulhac L., (2000) *Modélisation de la dispersion atmosphérique à l'intérieur de la canopée urbaine*, Rapport de thèse, Ecole Centrale de Lyon
- A.F. Stein, B.M. Toselli, (1996), *Street level air pollution in Cordoba city, Argentina*, Atm. Env. Vol 30, pp 3491-3495
- Yamartino R.J., G. Wiegand (1986) *Development and evaluation of simple models for the flow, turbulence and pollutant concentration fields within an urban street canyon*, Atm. Env Vol 20 pp 2137-2156

LES MODELES EULERIENS NON REACTIFS

PRESENTATION GENERALE

GENERALITES

Le modèle eulérien se propose de résoudre les équations de transports diffusion dans la couche limite atmosphérique au moyen d'une discrétisation numérique sur une grille de calcul décrivant l'espace.

Cette approche permet de décrire complètement le milieu de transport (atmosphère autour des sources de rejet de polluant) et l'évolution du rejet dans le même processus de calcul. Son inconvénient majeur, bien que d'un point de vue théorique elle soit la plus aboutie, est son coût en calcul important a contraint toute application opérationnelle pendant de nombreuses années.

La puissance des moyens de calcul ayant augmentée de manière importante, cette technique de modélisation est aujourd'hui largement répandue.

FORMULATION

La simulation de la pollution atmosphérique consiste essentiellement à décrire le comportement d'un certain nombre d'espèces dans la couche limite atmosphérique. Soient N espèces (supposées non réactives chimiquement) présentes dans le fluide caractérisé par sa vitesse (u,v,w) , la concentration $C_i(x,y,z,t)$ de chaque espèce (i variant de 1 à N) doit satisfaire l'équation de continuité :

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + u \frac{\partial C_i}{\partial x} + v \frac{\partial C_i}{\partial y} + w \frac{\partial C_i}{\partial z} = D_i \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} \right) + S_i(x, y, z, t)$$

où :

D_i est la diffusivité moléculaire de l'espèce i dans l'air

S_i représente l'émission du polluant i à partir des différentes sources.

Dans un problème de mécanique des fluides classique, il est nécessaire de résoudre de manière simultanée les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour obtenir les valeurs de C_i , u,v,w , ainsi que les effets des variations de chacune de ces variables sur toutes les autres.

Pour résoudre un problème de pollution atmosphérique, en revanche, il est raisonnable de supposer que les transformations chimiques des polluants, présents à l'état de traces, ne vont pas affecter de manière significative les différents paramètres météorologiques. Il est donc possible d'intégrer les équations de continuité seules et elles peuvent être résolues indépendamment des équations de Navier et Stokes et de conservation d'énergie. [Reynolds et al., 1973]

Comme le flux de la couche limite atmosphérique est turbulent, les composantes du vecteur vitesse de vent peuvent être représentées comme la somme d'une grandeur moyenne et d'une fluctuation turbulente. On écrira donc :

$$u = \bar{u} + u'; v = \bar{v} + v'; w = \bar{w} + w'$$

On rappelle qu'il s'agit de moyennes temporelles, et que par définition :

$$\bar{u}' = \bar{v}' = \bar{w}' = 0$$

En introduisant ces termes dans l'équation de continuité, des termes non linéaires de type $\overline{u'C_i}$ apparaissent :

$$\frac{\partial \overline{C_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{uC_i}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{vC_i}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{wC_i}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{u'C_i}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'C_i}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'C_i}}{\partial z} = D_i \left(\frac{\partial^2 \overline{C_i}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{C_i}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \overline{C_i}}{\partial z^2} \right) + S_i(x, y, z, t) \quad (1)$$

La présence de ces termes non-linéaires pose un problème dit de “ fermeture ” du système. Plus d'inconnues que d'équations (au nombre de N) forment le système, et il convient donc de trouver de nouvelles équations ou de faire des approximations pour pouvoir le résoudre.

La méthode la plus simple et la plus utilisée est une approximation utilisant le tenseur de diffusivité $\overline{\overline{K}}$. Cette approximation, appelée K-Theory ou fermeture en K, s'appuie sur une formulation à trois équations :

$$\begin{aligned} \overline{u'C_i} &= -K_{xx} \frac{\partial \overline{C_i}}{\partial x} \\ \overline{v'C_i} &= -K_{yy} \frac{\partial \overline{C_i}}{\partial y} \\ \overline{w'C_i} &= -K_{zz} \frac{\partial \overline{C_i}}{\partial z} \end{aligned}$$

où K_{xx} , K_{yy} , K_{zz} sont les composantes diagonales du tenseur de second ordre $\overline{\overline{K}}$.

Une approximation courante faite dans l'atmosphère est que les composantes non diagonales de ce tenseur sont nulles, et que l'on a :

$$K_{xx} = K_{yy} = K_H \text{ et } K_{zz} = K_v$$

En introduisant ces termes dans l'équation précédente, et en négligeant la diffusivité moléculaire devant la dispersion turbulente, on obtient l'équation suivante :

$$\frac{\partial \overline{C_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{uC_i}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{vC_i}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{wC_i}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial \overline{C_i}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial \overline{C_i}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_v \frac{\partial \overline{C_i}}{\partial z} \right) + S_i(x, y, z, t)$$

Une autre méthode plus sophistiquée est la fermeture en K-ε.

$$\text{On pose } K_{xx} = K_{yy} = K_{zz} = C \frac{K^2}{\varepsilon}$$

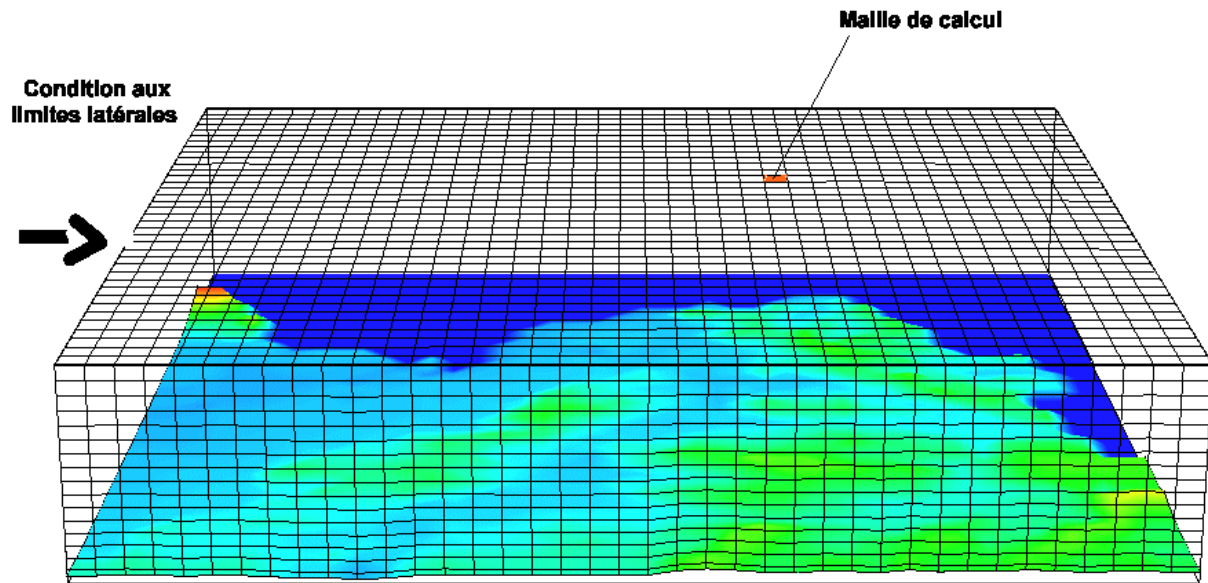
Avec C une constante, K l'énergie cinétique turbulente et ε le taux de dissipation de K par viscosité moléculaire.

Cependant, [Reynolds et al., 1973] rappellent qu'il faut toujours garder à l'esprit lors de l'utilisation de tels modèles que cette équation n'est pas l'équation fondamentale décrivant le comportement des polluants dans l'atmosphère, mais constitue une approximation. Elle comporte donc un certain nombre de limites, étudiées notamment par [Lamb, 1973].

MISE EN ŒUVRE

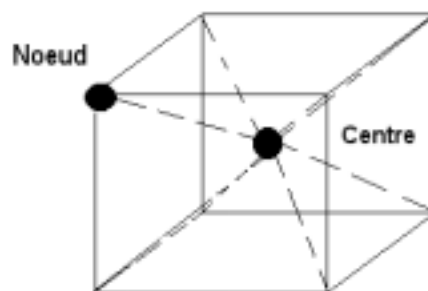
Le modèle eulérien consiste en la résolution des équations précédemment décrites dans un espace tri-dimensionnel couvrant la zone d'étude.

Il faut donc définir un maillage, représenté ci-dessous, sur lequel le système d'équations à résoudre est projeté.



Domaine de calcul

Cette projection peut être réalisée au moyen de différentes techniques de discrétisation (différences finies, éléments finis...). L'objectif est de calculer les variables entrant dans la formulation soit, au nœud des mailles, soit au centre des mailles.



Maille élémentaire de calcul

TRAITEMENT DE L'ADVECTION DES POLLUANTS

L'advection des polluants est traitée en considérant le vent horizontal, c'est à dire les composantes u et v au centre de chaque maille de la grille de calcul. Le vent vertical, composante w , intervient souvent à partir de l'équation de conservation de la masse. Dans une logique " diagnostique " le champ de vent provient d'interpolations spatiales et temporelles d'observations au sol et en altitude. Dans une approche " pronostique " il est calculé à partir de la résolution numérique des équations de Navier-Stokes sur un maillage tridimensionnel.

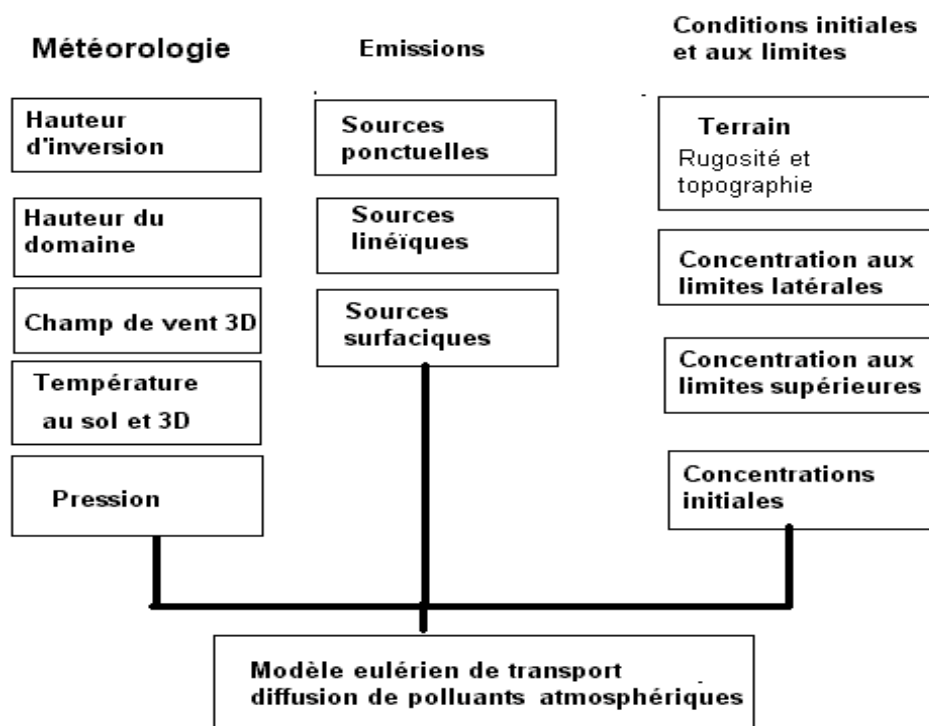
TRAITEMENT DE LA DIFFUSION TURBULENTE

La méthode la plus utilisée dans les modèles de dispersion de la qualité de l'air est la K-théorie. La dispersion des polluants est donc supposée proportionnelle au gradient de concentration dans l'espace. Les facteurs de proportionnalité sont les coefficients de diffusivité visqueuse (K_x , K_y , K_z).

Comme il est très difficile d'obtenir une mesure précise de ces coefficients, des estimations théoriques sont utilisées.

DONNEES D'ENTREES

Les modèles eulériens nécessitent un certain nombre de données fondamentales communes à chaque modèle. Bien évidemment des spécificités persistent suivant les modèles et ces particularités ne sont pas traitées dans ce document.



Données d'entrées d'un code eulérien

DONNEES METEOROLOGIQUES

Les modèles eulériens intègrent d'un certain nombre de données météorologiques :

- Hauteur d'inversion,
- gradient thermique vertical,
- champs de vent et de pression 3D.

Ces paramètres, dont certains sont très délicats à obtenir, peuvent provenir soit entièrement d'un organisme de météorologie (essentiellement Météo-France pour les AASQA), soit d'une combinaison entre les données de l'organisme de météorologie et des mesures sur site effectuées ponctuellement ou en routine par les AASQA.

DONNEES D'EMISSIONS

Suivant la complexité de l'étude les sources à prendre en compte sont d'origine anthropogénique (industrie, tertiaire, transport, activités de loisirs ou de confort...) ou biogénique (forêt, animaux...). Ces sources d'émissions sont modélisées par des points

d'émissions (essentiellement les sources industrielles canalisées), des lignes d'émissions (activités de transport), des surfaces émettrices (l'ensemble des autres sources).

Les émissions proviennent d'un inventaire préalablement établi à des fins de modélisation ou non. Il est à noter que cette partie de la chaîne de calcul est indispensable et peut être relativement longue et coûteuse suivant la taille du domaine de calcul.

CONDITIONS AUX LIMITES

Les conditions aux limites comprennent plusieurs entrées. Tout d'abord la topographie et la rugosité afin de décrire l'interface air-sol. Ces données sont disponibles aujourd'hui sous forme de Modèle Numérique de Terrain (MNT) commercialisé par l'IGN et de Modèle d'Occupation des Sols (MOS), disponible par exemple auprès de l'IFEN (Institut Français de l'Environnement).

Les données en polluants provenant de l'extérieur du domaine doivent être traitées par des profils verticaux de polluants en limite de domaine obtenus par mesures ou par données provenant d'un modèle d'échelle supérieure.

REFERENCES

Reynolds S.D., Roth P.M., Seinfeld J.H., 1973 : *Mathematical modeling of photochemical air pollution _I formulation of the model*. Atmospheric Environment, 7, PP. 1033-1061.

Lamb R.G., 1973 : *Note on the application of K-Theory to diffusion problems involving non linear chemical reactions*. Atmospheric Environment, 7, pp257-263

LES MODELES EULERIENS PHOTOCIMIQUES

GENERALITES

Les modèles photochimiques sont aujourd'hui majoritairement basés sur des schémas de transport eulérien. Sur le schéma de discrétisation dynamique on vient rajouter un schéma de résolution locale des équations chimiques. Pour définir l'espace de calcul, le domaine est découpé dans le plan horizontal en mailles souvent régulières. Leur taille dépend de l'ensemble du domaine, mais aussi des capacités de calcul disponibles. En effet plus le pas est fin et meilleur est le résultat, mais le coût en espace mémoire et en temps calcul devient alors très vite prohibitif. C'est pourquoi de nombreux codes photochimiques offrent la possibilité de définir des maillages imbriqués qui permettent de déclarer des maillages très lâches en bord de domaine (maille de 6x6 km²) et relativement denses près des centres d'intérêts (2x2 km²) sur des domaines de 500x500 km².

Dans la dimension verticale, les domaines peuvent s'étendre jusqu'à plusieurs kilomètres d'altitude, avec un maillage irrégulier plus fin à proximité du sol qu'au sommet de la boîte de calcul. Cependant le nombre de mailles verticales reste relativement faible dans les codes photochimiques, et souvent inférieur à 10.

Les codes photochimiques utilisent largement le traitement dynamique de code eulérien non réactif pour reconstituer l'atmosphère de transport, c'est pourquoi une grande partie du traitement dynamique est exposée dans l'annexe technique " Les modèles eulériens non réactifs "

EQUATIONS RESOLUES

On retrouve les mêmes équations de transport que dans le cadre du calcul non réactif (voir annexe technique " Les modèles eulériens non réactifs ") avec l'apparition d'un terme complémentaire comportant le traitement chimique des espèces.

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} \right) + R_i(\overline{C_1}, \dots, \overline{C_N}, T) + S_i(x, y, z, t)$$

où :

D_i est la diffusivité moléculaire de l'espèce i dans l'air

S_i représente la vitesse d'émission du polluant i à partir des différentes sources.

R_i représente le terme de variation de concentration du polluant i dû aux réactions chimiques avec les N espèces réactives.

T est la température du milieu.

LE MODULE DE TRAITEMENT DES MECANISMES CHIMIQUES ET PHOTOCIMIQUES

Différents types de modèles

Le traitement de la chimie du code de calcul peut être effectué de diverses manières, mais reste dans tous les cas une approximation de la réalité. En effet le schéma réactionnel global de la pollution photochimique est d'une complexité qui est encore inaccessible. Il faut donc imaginer des mécanismes de réductions des systèmes réactionnels. Trois grandes approches peuvent être identifiées :

- Les schémas chimiques explicites : Ils intègrent toutes les chaînes de réactions impliquées et décrivent le comportement d'un nombre important de composés réels. C'est une

approche très lourde et très peu usitée. On atteint très vite plusieurs centaines de composés et plusieurs milliers de réactions.

- Les schémas directs : Ils représentent les processus chimiques pour un nombre limité de molécules de COV représentatives des différentes classes de composés. Le code EMEP développé et utilisé dans le cadre des négociations européennes sur les pollutions transfrontières fonctionne sur ce principe.
- Les schémas paramétriques : Les réactions sont définies pour des classes de composés regroupés suivant différents principes. Il faut noter que du fait de ces regroupements elles sont équilibrées par des coefficients spécifiques à chaque regroupement de classe. Ces approches permettent une réduction du nombre d'espèces et du nombre d'équations mises en jeu. C'est pourquoi ils constituent l'écrasante majorité des schémas photochimiques présents dans les codes de calcul à échelle régionale.

DIFFERENTS SCHEMAS DE REGROUPEMENT EN FAMILLE MOLECULAIRES

L'objectif est de présenter ici les regroupements les plus couramment utilisés. [Rouil et Al. , 1998] apporte une approche exhaustive de ces schémas de regroupement.

Espèces généralisées

Dans cette option l'espèce modèle est choisie pour sa réactivité. La réactivité de l'espèce modèle est la moyenne de la réactivité des COV qu'elle représente.

Les codes RADM, SAPRC et MOCA utilisent cette méthode de regroupement

Regroupement en famille structurales

Les COV sont répartis en différentes familles selon le type de liaison chimique présente. Chaque COV est décomposé en fonction élémentaire et est représenté comme la somme des réactivités associées à chacune de ses liaisons (liaisons C-C, C=C, C-O...)

Certains composés primaires sont traités de manière explicite, le mécanisme photochimique le plus employé, le Carbon Bond Mechanism (CBM), utilise ce type de regroupement.

Dans le CBM les familles sont nommées par type de liaison : PAR représente les liaisons C-C, OLE les liaisons C=C....

Ce qui donne par exemple :

Propène : 1 OLE + 1 PAR

n-butane : 4 PAR

Cette approche donne des mécanismes très condensés et le bilan carbone est conservé. Cependant le regroupement par type de liaison interdit un retour à une information pour chacun des COV élémentaires présent dans l'atmosphère.

LES EMISSIONS

Dans le cadre d'un calcul de modélisation photochimique, comme dans tout exercice de modélisation du transport des polluants atmosphériques, il est nécessaire de prévoir un inventaire des émissions le plus complet possible. Les bases de cet inventaire sont communes avec les autres types de modélisation. Les particularités de l'inventaire à des fins de calcul photochimique portent sur le traitement spécifique des COV.

Dans chacun des secteurs d'activités des sources émettrices il faut définir le plus précisément possible les COV émis.

L'approche la plus courante est de repérer la nature et l'origine de la source d'émission au moyen d'une classification prise comme référence. En Europe la classification SNAP (Standard Nomenclature for Air Pollution) semble être cette référence. Cette nomenclature

présente une codification de chaque activité émettrice permettant de hiérarchiser les données d'émissions.

Pour chaque code, et donc pour chaque catégorie d'émetteur, on peut adjoindre un profil de spéciation de COV. Ce profil de spéciation fournit la liste complète des COV, ainsi que la proportion émise par chacun d'eux par rapport au rejet total en COV. Par cette méthode la connaissance de la nature de l'émission et de la quantité totale de COV émise permet de renseigner complètement la source émettrice pour le calcul photochimique. A titre d'exemple, dans le programme européen EUROTRAC2, le projet GENEMIS mené sous la responsabilité de l'IER de Stuttgart, propose des profils de spéciation.

LA METEOROLOGIE

De nouveau les paramètres météorologiques nécessaires au code photochimique ne sont pas très différents des paramètres utilisés par les code eulériens non réactifs. Le seul paramètre supplémentaire est la radiation solaire, indispensable pour les calculs photochimiques. Ce paramètre peut être atteint directement ou par l'intermédiaire de la couverture nuageuse.

LES CONDITIONS AUX LIMITES

Le traitement des conditions aux limites est fondamental dans le cadre d'une modélisation photochimique.

Tout d'abord la forte réactivité de certains composés, même en faible quantité, peut fortement perturber l'équilibre photochimique établi. Dès lors un apport négligé de faible quantité de polluant peut avoir des répercussions très importantes sur le résultat final.

Ensuite, l'ozone est un polluant ayant une durée de vie relativement longue et qui est donc très propice au transport sur de longues distances. Ignorer ces apports peut là aussi compromettre gravement les chances de succès d'une modélisation.

Le traitement des conditions aux limites, bien qu'indispensable, est cependant très délicat. Lorsque l'utilisateur ne dispose d'aucune information, la méthode la plus simple consiste à introduire sur les bords du domaine des valeurs bibliographiques. Ces données peuvent être complétées par des mesures effectuées par les AASQA elles-mêmes. Cependant cette approche ne constitue pas une solution satisfaisante.

Une alternative consiste en l'utilisation de données provenant d'un code de calcul de plus grande échelle (échelle continentale) qui peut fournir aux modèles des estimations des concentrations en polluants au bord du domaine de calcul. Différents modèles existent aujourd'hui. Malgré le caractère encore expérimental de ces produits on peut tout de même citer deux exemples français :

Le code MOCAGE développé par Météo France, et le code CHIMERE continental réalisé par le Laboratoire de Météorologie Dynamique (CNRS/IPSL).

LES CODES NUMERIQUES LES PLUS COURANTS

Parmi les outils les plus connus et les plus communément utilisés à l'heure actuelle se trouvent un bon nombre de produits américains, souvent fruits de nombreuses évolutions du même modèle initial. Ainsi nous pouvons citer :

- UAM IV et UAM V versions très proches du fameux Urban Airshed Model développé par l'EPA. UAM V (Urban Airshed Model with Variable Grid) est une version améliorée de UAM IV, avec une interface utilisateur plus conviviale, commercialisée et diffusée par SAI (System Applications International). Ces deux produits sont basés sur le mécanisme chimique développé dans le modèle CBM IV. Ils peuvent traiter des domaines dont les

dimensions sont de l'ordre de $100\text{km} \times 100\text{km}$ pour UAM IV à $500\text{km} \times 800\text{km}$ pour UAM V. Quatre à quinze niveaux verticaux peuvent être répartis sur une hauteur de quelques kilomètres. Le manuel utilisateur de UAM IV ainsi que le logiciel lui-même, peuvent être téléchargés à l'adresse électronique suivante : <http://www.epa.gov/ttn/scram>. UAM IV et UAM V ont fait l'objet de nombreuses évaluations aux Etats-Unis, objet de plusieurs publications. Nous y reviendrons dans le paragraphe suivant. Dans ces exemples, ils sont utilisés avec pour pré-processeur météorologique des outils tels que CALMET (diagnostic) ou RAMS (pronostique). La société Aria technologies a développé une interface avec ses propres outils MINERVE, et HERMES.

- CALGRID, développé par l'Agence de Protection de l'Environnement Californienne. Il est très proche des précédents par sa structure et se distingue par l'implémentation de techniques numériques basées sur des choix différents. A l'origine il incorporait le schéma chimique CBM IV. Les dernières versions de CALGRID proposent également la possibilité d'utiliser SAPRC. Il est souvent utilisé avec le pré-processeur diagnostique CALMET. Il peut être téléchargé à l'adresse suivante : <http://www.arb.ca.gov/eos/soft.html>.
- CAMx, produit commercial très proche des précédents diffusé gratuitement par la société américaine Environ (<http://www.enviroware.com/enviweb/source/models.htm>). Il intègre aussi bien les mécanismes chimiques de CBM IV que ceux de SAPRC.
- CALTECH/CIT est un logiciel universitaire développé au Carnegie/Caltech Institute of Technology. La chimie implantée dans ce produit résulte de plusieurs évolutions des mécanismes usuels (LCC/SAPRC).

Parmi les modèles européens, nous notons :

- AIRQUAL, outil français développé par EDF, l'IFP et le LISA de l'Université de Créteil et commercialisé par la société Aria Technologies. Il s'appuie sur le modèle photochimique français MOCA, et est couplé avec les pré-processeurs météorologiques distribués par Aria Technologies : MINERVE (diagnostique) et HERMES (pronostique).
- MESO-NH CHIMIE développé par Météo-France et le Laboratoire d'Aérodynamique de Toulouse, avant tout présenté comme un produit de recherche. Il incorpore plusieurs modules chimiques dont RADM. La partie météorologique, très complète et sophistiquée restitue tout le savoir faire de Météo-France.
- MARS, produit universitaire développé à l'Université de Thessalonique par Nicola Moussiopoulos. Il fait en fait partie de la chaîne logicielle EZM (EUMAC Zooming Model) mise au point dans le cadre d'un programme européen EUROTRAC. Il est souvent associé avec le modèle météorologique pronostique MEMO proposé par la même équipe. Il incorpore un module chimique relativement simple KOREM (20 espèces pour 39 réactions et un regroupement des espèces par structure) , également développé dans le cadre d'EUROTRAC. Ce logiciel a déjà fait l'objet d'un certain nombre de benchmarks sur lesquels nous reviendrons ultérieurement.
- CHIMERE, est un logiciel légèrement différent dans son principe. Il est développé par une équipe du CNRS/LMD (Laboratoire de Météorologie Dynamique) et repose sur une modélisation simplifiée des phases dynamiques. En particulier il ne prend en compte que trois à cinq couches dans sa description de la structure verticale de l'atmosphère. CHIMERE modélise des échanges horizontaux entre les "boîtes" et les mélanges verticaux entre les couches. Il incorpore le modèle chimique MELCHIOR, et assimile des données météorologiques fournies par le modèle du Centre Européen (profils ECMWF). Il fait actuellement l'objet de travaux importants d'évaluation (programme ESQUIF). A noter qu'il a été développé dans une optique particulière de prévision des pointes d'ozone [Vautard et al, 2001].

Cette liste n'est évidemment pas exhaustive. En particulier nous n'avons pas cité certains outils, moins connus ou encore en cours de développement dont les résultats publiés sont tout aussi intéressants. Il est nécessaire de rappeler que le domaine de la modélisation de la formation des polluants photochimiques est encore en pleine expansion et fait l'objet de nombreuses recherches actuelles.

BIBLIOGRAPHIE

Rouil L, Leoz E., 1998 : *Analyse des modèles à transformations chimiques*, rapport INERIS.
R. Vautard, M. Beekman, J. Roux, D. Gombert, *Validation of a hybrid forecasting system for the ozone concentrations over Paris area*, Atm. Env. Vol 35, pp 2449-2461 (2001)

LES MODELES CONTINENTAUX

CONTEXTE ET HISTORIQUE

Les conséquences graves de l'accident de Chernobyl [Rodriguez et al 1995], les pluies acides sont autant d'exemples qui ont incité les scientifiques à développer des outils de simulation du comportement atmosphérique des polluants à grande échelle. En effet, pour appréhender des phénomènes d'une telle ampleur, la compilation de mesures éparées s'avère insuffisante. Cependant le challenge technique représenté par la mise au point de ces modèles, explique la relative jeunesse de l'état de l'art dans ce domaine, une vingtaine d'année environ.

A l'échelle européenne la nécessité de comprendre et de limiter l'acidification (dépôts d'oxydes de soufre) des lacs scandinaves, et l'eutrophisation (dépôts d'oxydes d'azote) a encouragé les différents états à signer une convention visant à limiter les émissions à l'origine de la pollution atmosphérique sur le continent. Il s'agit de la Convention de Genève ou CLRATP (Convention on Long Range Transport Air Pollution – www.unece.org/env/lrtap) signée en 1979. A cette occasion, une initiative visant à développer une politique commune de réduction des émissions polluantes en Europe, à l'aide d'un important réseau de mesure (réseau MERA en France), et de simulations numériques a été lancée. Ces actions sont regroupées dans le programme EMEP (www.emep.int).

Aujourd'hui l'intérêt des modèles de transport et de chimie des polluants atmosphériques à grande échelle s'étend bien au-delà des problèmes d'acidification et d'eutrophisation. En effet, la formation et le transport de l'ozone s'inscrivent par nature dans cette logique de long terme et de longues distances, et plus récemment les préoccupations liées aux particules fines, certainement nuisibles pour la santé humaine, ont dynamisé les recherche dans ce domaine [EMEP 2000 ; Malcom et al 2000].

Au-delà de la définition de politiques environnementales, le développement de modèles à grande échelle trouve un intérêt croissant pour la fourniture de conditions aux limites pertinentes pour les modèles locaux. En effet il serait illusoire de limiter les causes d'apparition des épisodes de pollution aux seuls facteurs déterminants d'une zone géographique cible. Ils ne peuvent s'expliquer que dans un contexte très global, en particulier pour les polluants secondaires tels que l'ozone ou les aérosols. Aussi les recherches dans le domaine du numérique s'orientent vers l'imbrication des modèles, de l'échelle locale à l'échelle continentale, les uns fournissant les données d'entrées ou de validation des autres. Il s'agit de l'un des axes prioritaires à développer dans le cadre du programme européen CAFE (Clean Air For Europe), mis en place courant 2001.

Enfin une dernière application émergente des modèles continentaux est la possibilité de les utiliser pour fournir des prévisions de la qualité de l'air à l'échelle nationale. Un important travail est réalisé dans ce sens par les équipes du LMD qui fournissent sur leur site les résultats de simulations de la qualité de l'air sur l'Europe de l'Ouest jusqu'à une échéance J+3 avec le modèle CHIMERE Continental (www.euler.polytechnique.fr/pioneer). Au Danemark un service en ligne similaire est proposé par le NERI (www.dmu.dk/AtmosphericEnvironment/thor/index.htm) avec le système DMU-ATMI THOR.

En conclusion, il est important d'insister sur la place désormais occupée par les modèles continentaux dans le domaine de l'évaluation de la qualité de l'air. Un programme européen proposé dans le cadre de EUROTRAC2 est spécialement dédié à cette problématique. Il s'agit du programme GLOREAM (Global and Regional Atmospheric Modeling). Il réunit plusieurs

équipes européennes confrontant leurs approches sur le sujet. Le rapport annuel du projet (disponible sur le site www.dmu.dk/AtmosphericEnvironment/gloream) fait état des recherches en cours dans ce domaine.

PRESENTATION GENERALE

GENERALITES

Le fait que le développement de modèles grande échelle opérationnels soit plus récent que celui des modèles petite échelle s'explique certainement par la lourdeur des moyens informatiques qu'ils impliquent (domaine de calcul de taille importante à gérer) et par la complexité des phénomènes physiques à représenter : convection, advection des masses d'air, chimie, dépôt sec et humide des polluants.

L'inventaire des émissions devient aussi un exercice particulièrement difficile, qui nécessite un effort de coordination considérable entre les états.

Enfin, le calcul des éléments météorologiques nécessaires est aussi un point crucial surtout dans une optique de prévision. Des modèles météorologiques complexes doivent être alors mis en œuvre, tels que ARPEGE ou ALADIN pour Météo France, et ECMWF (Medium Range Weather Forecasting) pour le Centre Européen.

Les modèles continentaux reposent donc sur des formulations souvent simplifiées des problèmes physiques, de manière à conserver des temps de calcul acceptables. Les progrès de l'informatique permettent cependant d'affiner les approximations effectuées afin de réduire l'incertitude numérique, notamment sur le transport des polluants. Ainsi le modèle MOCAGE, en cours de développement à Météo France à pour objectif de fournir à terme, des simulations fines de la qualité de l'air sur toute l'Europe.

Pour simuler la dynamique des polluants deux types d'approches sont développés :

- Les modèles lagrangiens (ou de trajectoire) qui décrivent le comportement d'une particule dans un référentiel qui lui est propre. Ils distinguent ainsi la phase de calcul de la trajectoire sur laquelle la particule évolue, de la phase de dispersion des polluants,
- Les modèles eulériens qui décrivent le comportement du panache de polluant (transport et dispersion) dans un référentiel fixe. En résumé, les champs de vent, de turbulence, de température, de concentrations et de dépôts, sont calculés aux nœuds d'un domaine maillé dans les trois dimensions de l'espace.

Les modèles lagrangiens sont par nature bien adaptés au traitement des sources ponctuelles, mais souffrent d'imprécisions pour reproduire les phénomènes s'étendant sur une longue période. Les modèles eulériens permettent d'atteindre de meilleures performances, au prix cependant d'un coût de calcul élevé. Les deux écoles sont également représentées parmi les modèles continentaux recensés à ce jour.

FORMULATION

L'aspect grande échelle (aussi bien spatiale que temporelle) oblige les modélisateurs à recenser et prendre en compte toute source et tout puits susceptible d'influencer la qualité de l'air, et cela pour tous les composants chimiques considérés ! En particulier, les réactions chimiques, les phénomènes de dépôt sec et humide ou la construction des champs météorologiques constituent des opérations délicates faisant partie intégrante du modèle continental.

L'ensemble de ces points est abordé ci-dessous, notamment à travers une description de l'état de l'art dans le domaine, après un bref rappel théorique sur les modèles lagrangiens et eulériens.

Modèles lagrangiens

Dans cette gamme de méthodes, il est d'usage de distinguer deux approches : les modèles à bouffées et les modèles à particules. Pour les premiers, la source est associée à des bouffées de polluants rejetées à intervalle régulier. Chaque bouffée est advectée le long d'une trajectoire, et son volume croît selon les propriétés turbulentes de l'atmosphère, la fraction massique de polluant contenu dans chaque bouffée étant fixée au moment du rejet.

Dans le cas d'un modèle à particules, un nombre important de particules est rejeté par la source. Chacune d'elle glisse le long des trajectoires, tout en étant soumise à des mouvements aléatoires reflétant l'influence de la turbulence atmosphérique. Le décompte du nombre de particules en un point donné permet d'en déduire la concentration en polluant.

Les phases de transport et de dispersion sont distinctes. Ainsi une première étape consiste à calculer les trajectoires sur lesquelles les particules ou les bouffées de polluants évolueront. Cela nécessite une description tridimensionnelle du champ de vent.

D'une manière générale, la position P d'une particule ou d'une bouffée à l'instant $t + \Delta t$ s'exprime en fonction de sa position à l'instant t par la relation suivante :

$$P(t + \Delta t) = P(t) + \frac{dP(t)}{dt} \Delta t$$

L'approximation de la vitesse $\frac{dP(t)}{dt}$ peut être vue comme le résultat d'une interpolation en

temps et en espace. Une position intermédiaire est calculée par la formule

$$P'(t + \Delta t) = P(t) + V(P, t) \Delta t$$

Et la position finale de la particule s'écrit sous la forme :

$$P(t + \Delta t) = P(t) + 0.5[V(P, t) + V(P', t + \Delta t)] \Delta t$$

Cette équation intégrée en temps permet de définir les trajectoires.

La démarche précédente permet de fournir une localisation de la particule soumise à un champ de vent moyen. En réalité le calcul de dispersion implique la prise en compte de la turbulence, et donc des fluctuations de vitesse. En réalité, la vitesse en un point s'exprime comme la somme d'une valeur moyenne et d'une fluctuation :

$$V = \bar{V} + V'$$

Suivant la démarche décrite ci-dessus, il est nécessaire d'exprimer la quantité $V'(t + \Delta t)$. Une formulation classique est donnée par [Fay et al 1995]:

$$V'(t + \Delta t) = R(\Delta t) V'(t) + \sqrt{1 - R^2(\Delta t)} V'' + T_L (1 - R(\Delta t)) \partial \sigma_w^2 / \partial X$$

$R(\Delta t) = \exp(-\Delta t / T_L)$ est un facteur d'auto corrélation, T_L est la période des fluctuations turbulentes, est $V'' = \lambda \sigma$ est le produit du vecteur des fluctuations turbulentes (σ) et d'un nombre choisi aléatoirement par l'ordinateur dans une distribution gaussienne (λ).

Les trajectoires étant ainsi définies, l'équation de conservation de la masse pour chacune des espèces chimique est intégrée sur chacune d'elle :

$$\frac{dC}{dt} = P - L \text{ où } P \text{ désigne les termes de production, et } L, \text{ ceux de perte.}$$

Les modèles eulériens

La description de l'approche eulérienne pour calculer la dynamique des polluants est décrite précisément dans l'annexe consacrée à ce thème.

En résumé, les concentrations en polluant sont régies par une équation de continuité, qui sous certaines hypothèses admissibles pour les problèmes atmosphériques, peut se traduire dans un référentiel fixe :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(\vec{V} \cdot \frac{\partial C}{\partial \vec{X}}\right) + \overline{\overline{K}} \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} + P - L$$

où le vecteur $\vec{X}(x, y, z)$ désigne les coordonnées dans le référentiel fixe, $\vec{V}$ est le vecteur vitesse, $\overline{\overline{K}}$ est le tenseur de diffusivité supposé diagonal, P désigne les termes de production ou d'émission, et L les puits.

Les termes de production ou d'émission

Sous l'appellation P , deux types de termes sont considérés :

- **Les émissions de polluants** rejetés par les sources présentes dans le domaine de calcul. La contribution est un terme source la plupart du temps calculé par un pré-processeur qui gère le cadastre d'émissions,
- **Les composants produits** lors des réactions chimiques ou photochimiques qui s'enchaînent dans l'atmosphère. Il s'agit de termes non linéaires régis par le module chimique du code de calcul. Le principe est similaire à celui décrit dans l'annexe réservée aux modèles photochimiques. La nature et la quantité des polluants ainsi produits dépendent des hypothèses adoptées dans le schéma chimique (regroupement d'espèces, vitesses de réaction, constantes de photolyse...).

Les termes de puits

Trois processus de destruction des polluants sont regroupés sous cette appellation :

- Les composants détruits lors des réactions chimiques ou photochimiques. Les paramètres sont les mêmes que ceux exposés ci-dessus,
- Le dépôt sec sur la surface du sol, qui correspond aux retombées de gaz ou de particules du panache. Il est défini le plus souvent par une vitesse de dépôt v_d à ajuster correctement selon la nature du polluant et du sol,
- Le dépôt humide, qui correspond à la quantité de polluant entraînée par la pluie, ou capturé par les nuages. Dans le premier cas un coefficient de lessivage $\square$ est souvent introduit dans les équations, dans le deuxième cas une information sur la quantité et le type de nuages est nécessaire.

MISE EN ŒUVRE DES MODELES CONTINENTAUX

LE DOMAINE DE CALCUL

Les dimensions des domaines de calcul visés par ces modèles sont très importantes, de l'ordre de plusieurs milliers de kilomètres. Dans ce cadre le pas de maillage est également assez important. Suivant les outils il peut varier de 150km (version lagrangienne de EMEP [Simpson 1993]) à la cinquantaine de kilomètres ou au $\frac{1}{2}^\circ$ en coordonnées latitude/longitude. C'est le cas pour la version eulérienne de EMEP, ou d'autres modèles tels que CHIMERE Continental (CNRS/LMD), MOCAGE (Météo-France), LOTOS (Pays-Bas), EURAD (Allemagne [Hass et al 1993]), ou DEM (Danemark [Zlatev et al 1993]).

Le nombre de couches verticales est également variable. Il est souvent peu important, les contraintes informatiques nécessitant de limiter le nombre de mailles à traiter. Si les premiers modèles opérationnels ne comptaient qu'un nombre très restreint de couches (1 à 3), les

progrès réalisés en matière de moyens de calcul permettent aujourd'hui de développer des calculs à plus de 10 niveaux verticaux.

LES DONNEES D'EMISSIONS

Le recensement et la compilation des données d'émission est un exercice particulièrement fastidieux dans ce contexte. En effet un descriptif relativement précis des quantités de polluants émises doit être fourni, pour chaque pays. Dans le cadre du programme EMEP, le CCC (Chemical Coordination Center www.nilu.no/projects/ccc/index.html) se charge de réunir toutes ses informations et de les rendre exploitables par les modèles. L'une des difficultés est de faire coïncider la grille d'émission sur celle de calcul ! En général se sont des données annuelles, qui sont ensuite réparties sur la période de simulation.

Le programme européen GENEMIS, sous l'égide de l'IER de Stuttgart (www.gsf.de/eurotrac/sp-gen-f.htm), regroupe plusieurs équipes scientifiques contribuant à l'élaboration d'un inventaire des émissions européennes.

Enfin la base de données globale GEIA (<http://blueskies.sprl.umich.edu/geia/>) fournit également un certain nombre d'informations.

Il est intéressant de noter l'importance prise par les émissions biotiques dans ces inventaires globaux. Elles doivent être traitées avec autant de soin que les émissions anthropogéniques.

LES DONNEES METEOROLOGIQUES

Elles sont en général tirées de modèles de prévision météorologique à grande échelle. En Europe le Centre Européen met en œuvre le logiciel ECMWF, qui permet de disposer de profils verticaux des différentes variables météorologiques sur le continent (vent, température, humidité relative), mais aussi des grandeurs relatives aux échanges thermiques sol/air (flux de chaleur sensible, flux de chaleur latente), à la couverture nuageuse ou au frottement du vent sur le sol.

Les modèles ARPEGE et ALADIN développés par Météo France fournissent des informations similaires.

L'une des évolutions majeures des modèles numériques est l'assimilation de données. En effet la possibilité de corriger les calculs effectués au fur et à mesure que l'on dispose d'informations mesurées complémentaires, permet de réduire l'incertitude liée aux résultats calculés. Ces techniques s'appliquent en particulier aux données météorologiques. Cette fonctionnalité fait encore l'objet de recherches, mais les modèles français CHIMERE Continental ou MOCAGE sont paramétrés pour l'intégrer [Vautard].

LES CONDITIONS AUX LIMITES

Ce problème est particulièrement sensible à cette échelle où le nombre de données disponibles se fait de plus en plus restreint.

Le couplage avec des modèles globaux ou hémisphériques, est une voie qui fait l'objet de recherches actuelles [Jonson et al 2001].

Afin d'exploiter des données mesurées ou estimées en bordure du domaine de calcul, les techniques d'assimilation de données peuvent également être appliquées pour imposer des conditions aux limites cohérentes, en concentrations de polluants (secondaires et précurseurs).

BIBLIOGRAPHIE

EMEP (2000), *State report with respect to measurement, modelling and emissions of Particulate Matter in EMEP – An integrated approach*, EMEP report 5/2000

- ,B. Fay, H. Glaab, I. Jacobsen, R. Schrodin, (1995), *Evaluation of eulerian and lagrangian atmospheric transport models at the deutscher Wetterdienst using ANATEX surface tracer data*, Atm. Env. Vol 29, pp 2485-2497
- H. Hass, A. Ebel, H. Feldman, H.J. Jacobs, M. Memmesheimer, (1993), *Evaluation studies with a regional chemical transport model (EURAD) using air quality data from the EMEP monitoring network*, Atm. Env. Vol 27A, pp 867-887
- J.E. Jonson, J.K Sundet, L. Tarrason, (2001), *Model calculations of present and future levels of ozone and ozone precursors with a global and regional model*, Atm. Env. Vol 35, pp 525-537
- ,A.L. Malcom, R.G. Derwent, R.H. Maryon, (2000) *Modelling the long-range transport of secondary PM10 to the UK*, Atm. Env. Vol 34, pp 881-894
- ,D. Rodriguez, H. Walker, N. Klepikova, A. Kostrikov, Y. Zhuk, (1995), *Evaluation of two pollutant dispersion models over continental scales*, Atm. Env. Vol 29, pp 799-812
- D. Simpson, (1993), *Photochemical model calculations over Europe for two extended summer periods : 1985 and 1989. Model results and comparisons with observations*, Atm. Env. Vol 27A, pp 921-943
- ,Z. Zlatev, J. Christensen, A. Eliassen, (1993), *Studying high ozone concentrations by using the Danish Eulerian model*, Atm. Env. Vol 27A, pp 845-865

NOTIONS DE METEOROLOGIE

L'analyse du comportement des polluants atmosphériques est étroitement liée à la compréhension des phénomènes météorologiques qui régissent leur transport et éventuellement leur dépôt.

L'objet du présent paragraphe est d'introduire des notions élémentaires concernant la physique des écoulements atmosphériques, et des grands mécanismes météorologiques qui influencent la qualité de l'air. Il s'agit avant tout de fournir au lecteur un certain nombre de définitions et de qualifier les phénomènes et principes importants pour une bonne compréhension des codes de calcul de dispersion des polluants.

STRUCTURE ET DYNAMIQUE DE L'ATMOSPHERE – NOTIONS BASIQUES

Généralités

L'enveloppe gazeuse qui constitue notre atmosphère est composée très schématiquement à 78% d'azote (N₂) et 21% d'oxygène (O₂). Les 1% restants sont essentiellement composés d'argon, de dioxyde de carbone (CO₂), et d'autres éléments présents à l'état de trace : l'ozone (O₃), le chlorofluorocarbène (CFC), autres gaz rares (hélium, krypton, néon...) et enfin le méthane (CH₄).

Grâce à la gravité ces éléments restent dans l'environnement de la planète. Cependant la gravité diminuant au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la surface de la Terre, le nombre de molécules dans l'atmosphère diminue également avec l'altitude. Cela influe sur trois facteurs physiques principaux qui permettent de caractériser l'atmosphère :

- ***la densité est une mesure de la concentration de matière aux différents points de l'espace.*** Du fait de la gravité, elle diminue très rapidement avec l'altitude. En fait, 90% des molécules se trouvent dans les 16 premiers kilomètres de l'atmosphère. La densité est exprimée en masse par unité de volume.
- ***la pression est une force résultant des collisions intermoléculaires.*** Elle décroît donc avec l'altitude, dans les mêmes proportions que la densité. La pression en n'importe quel point de l'atmosphère peut être assimilée au poids de l'air exercé sur ce point. L'hétérogénéité du comportement des molécules dans l'atmosphère explique les fortes variations de pression que l'on peut enregistrer. Ces changements sont à l'origine des perturbations météorologiques. La pression s'exprime en force par unité de surface. Sa valeur de référence, au niveau de la mer est de 1013,25 millibars (mb) ou 101325 Pascals (Pa).
- ***la température peut être considérée comme une mesure de l'énergie cinétique moyenne des molécules, induite par leur déplacement.*** Elle subit de nombreuses variations en fonction de l'altitude. Elle croît ou décroît, chaque couche de l'atmosphère ayant son propre profil de température. Ce comportement sera discuté dans les paragraphes suivants.

Ces trois quantités sont liées par des principes physiques et thermodynamiques fondamentaux, qui régissent tout comportement atmosphérique. Ainsi il est important de retenir que :

- *les volumes d'air qui s'élèvent sont soumis à une pression moins élevée et donc auront tendance à se refroidir sous l'effet de dilatation,*
- *au contraire lorsque les masses d'air redescendent elles se réchauffent par effet de compression (augmentation de la pression atmosphérique).*

De manière à se référer à un standard de données, il est d'usage de comparer les variables météorologiques par rapport à leur valeur au niveau de la mer, supposé constant. Ainsi la densité de l'air au niveau de la mer est de l'ordre de $1,2 \text{ kg/m}^3$, et sa pression de 101,325 kPa à une température de 273K.

Les différentes couches de l'atmosphère

L'atmosphère est composée de cinq couches principales (voir figure 6.1) qui ont chacune leurs propres caractéristiques :

La troposphère de 0 à 10 km : c'est la couche la plus basse à l'intérieur de laquelle se produisent les changements de temps. C'est aussi dans cette zone que les polluants atmosphériques sont formés et transportés. La densité et la pression décroissent rapidement avec l'altitude et il en est généralement de même pour la température. Le gradient de température est estimé à $-6,5^\circ\text{C/km}$. Cependant près du sol il peut considérablement varier suivant l'heure de la journée et la couverture nuageuse. Ainsi on assiste parfois à des inversions de températures au cours desquelles la température croît avec l'altitude. L'atmosphère est alors particulièrement stable, situation idéale pour la formation d'épisodes de pollution. La troposphère est le siège de nombreux mouvements et est en principe bien mélangée. Elle est bornée par la tropopause, déterminée comme la zone où la température cesse de décroître avec l'altitude et devient constante. Elle correspond approximativement à une pression 200 mb.

La stratosphère de 10 à 50 à km environ est une couche très stable, stratifiée, caractérisée par une inversion de température. Malgré cela, il y a de nombreux échanges verticaux avec la troposphère. La stratosphère contient une importante couche d'ozone qui protège la surface des rayons ultraviolets. Elle est bornée par la stratopause, à partir de laquelle l'atmosphère devient isotherme (1mb).

La mésosphère de 50 à 85 km environ est caractérisée par la forte décroissance des températures (-90°C en son sommet) et par le faible nombre de molécules qui la composent (0,1% de la masse totale de l'atmosphère).

La thermosphère soumise à un fort rayonnement solaire, est une couche chaude où règne une forte inversion de température.

L'exosphère est la région dans laquelle les molécules peuvent s'arracher à l'attraction terrestre. Elle est supposée débiter à 500 km environ de la surface du globe.

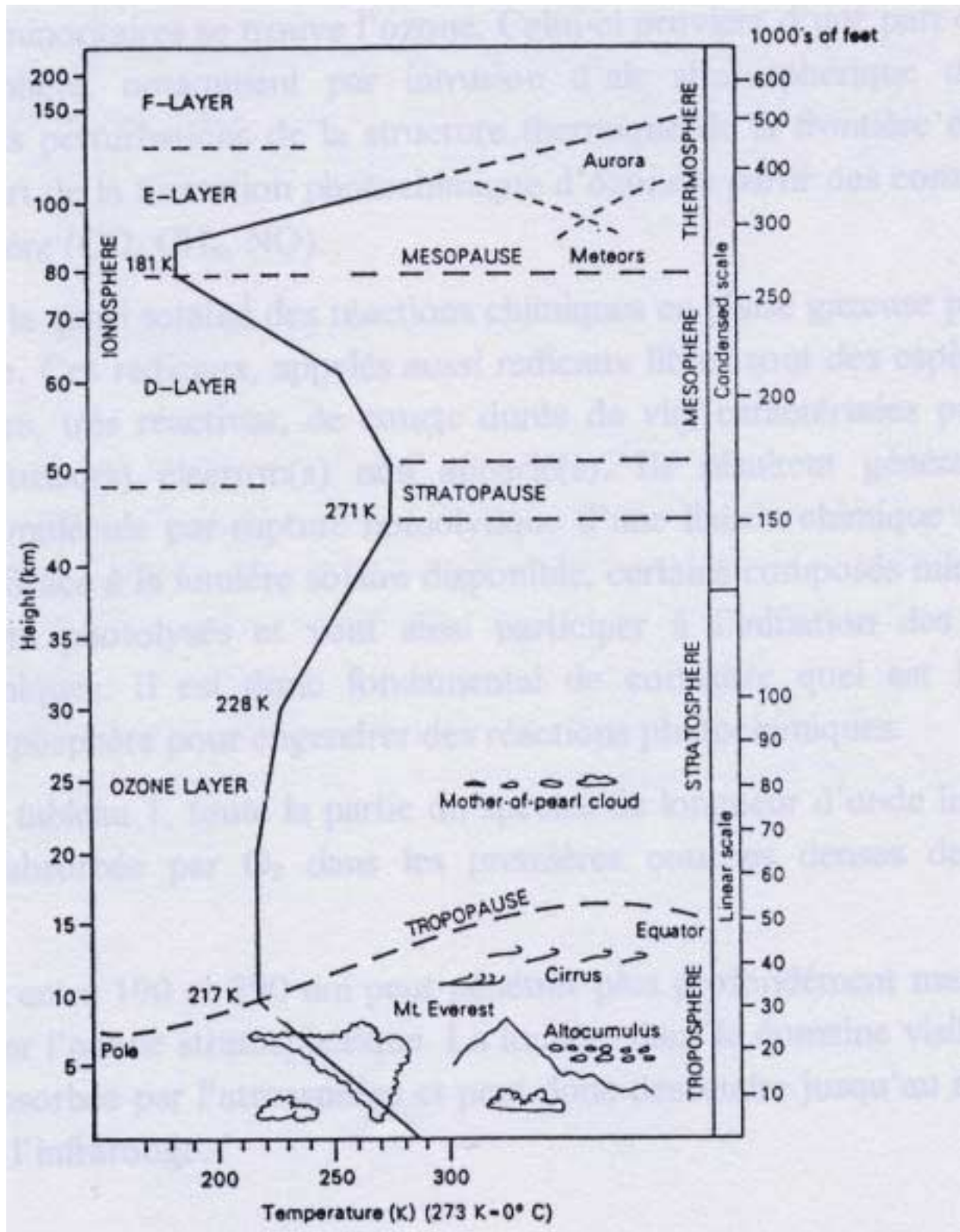


Figure.1 : Structure verticale de l'atmosphère

LES MECANISMES DE TRANSFERT ENERGETIQUE DANS L'ATMOSPHERE

Le rayonnement solaire constitue la première source d'énergie sur Terre. Cette énergie est transformée dans l'atmosphère par quatre voies distinctes :

- par radiation (absorption et propagation de l'énergie solaire sous forme d'ondes électromagnétiques). Cette forme d'énergie est fondamentale puisqu'elle est à l'origine des déplacements d'air, de la formation des nuages, et des réactions chimiques entre les différents composants de l'atmosphère. Les différents rayonnements sont rappelés dans le tableau 1.
- par conduction (échanges intermoléculaires), principe à l'origine des échanges de chaleur entre matières,
- par convection (transfert de chaleur par les mouvements verticaux des masses d'air). Rigoureusement ce terme désigne les échanges thermiques entre un fluide en mouvement (l'atmosphère) et un solide (la surface du sol),
- par advection (transfert de chaleur par les mouvements horizontaux des masses d'air).

Type de rayonnement	Longueur d'onde associée
Ondes radio	100 m
Ondes de télévision	1 m
Micro-ondes	1 mm
Infrarouge	1 μm
Lumière visible	0,3 à 0,7 μm
Ultraviolet	0,1 μm
Rayons X	0,001 μm

Tableau 1 : Différents types de rayonnement

Le rayonnement solaire peut non seulement être absorbé et transformé, mais aussi réfléchi. Ainsi l'albédo d'une surface permet de mesurer ce phénomène : il s'agit du ratio entre rayonnement réfléchi et rayonnement incident. Le tableau 2 donne les valeurs typiques d'albédo utilisées dans les études météorologiques.

Surface	Albédo (%)	Surface	Albédo (%)
Neige	79-95	Sol noir	5-15
Glace	30-40	Prairie	10-30
Nuages épais	60-90	Forêt	5-15
Nuages légers	30-50	Eau	10
Sable mouillé	20-30	Lune	7
Sable sec	35-45	Terre	34-42
Béton	17-27	Asphalte	5-10

Tableau 2 : Albédo des surfaces les plus courantes

Ainsi la nature du sol (béton, asphalte, eau ou végétation...), la couverture nuageuse, les gaz à effet de serre ou encore les panaches de pollution sont autant de facteurs qui peuvent influencer l'équilibre énergétique de l'atmosphère. Ils sont donc souvent à l'origine de perturbations ou de constances météorologiques et leur contribution mérite d'être rapidement développée :

- *La couverture du sol.* En général les surfaces sombres absorbent et émettent l'énergie beaucoup plus rapidement que les surfaces claires. Ces dernières peuvent cependant réfléchir une part plus importante de l'énergie incidente. A titre d'exemple, la présence de l'eau a un effet non négligeable, puisqu'elle se réchauffe et se refroidit beaucoup plus lentement que le sol. Sa chaleur spécifique (quantité de

chaleur nécessaire pour réchauffer de 1°C une unité de masse) est plus élevée : 1 cal/g contre 0.33 cal/g pour l'argile. Ainsi l'air à proximité d'un plan d'eau semble toujours plus chaud l'hiver et plus frais l'été.

- *La couverture nuageuse.* Les nuages réfléchissent et émettent des rayonnements thermiques. Les rayons de faible longueur d'onde émis par le soleil sont en principe réfléchis, alors que ceux de longueur d'onde plus élevée, émis par la terre, sont absorbés et émis de nouveau. La nature des nuages joue naturellement un rôle important.
- *Les gaz à effet de serre.* Ils jouent le rôle de piègeurs de chaleur, et la renvoient par l'intermédiaire de processus complexes.
- *La pollution atmosphérique.* Elle influence l'équilibre énergétique de l'atmosphère par les nombreuses réactions chimiques qu'elle engendre.

L'évolution d'un flux d'énergie solaire traversant l'atmosphère peut être très schématiquement représentée par la figure 2.

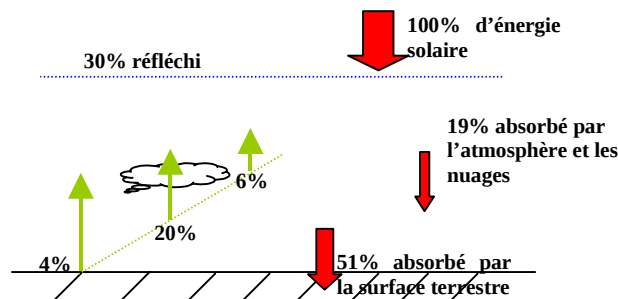


Figure 2 : Evolution du rayonnement solaire incident

LES VARIABLES METEOROLOGIQUES

Les grandeurs mesurées

La description des mouvements atmosphériques est largement dépendante de quatre facteurs basiques : la température, l'humidité, la pression, le vent. Ces paramètres sont régulièrement mesurés, et fournissent les données nécessaires à la mise en œuvre des modèles chargés de représenter la dynamique de l'atmosphère. Il est donc important de bien appréhender les mécanismes physiques susceptibles d'influencer leur comportement (transferts énergétiques sol/atmosphère, relations entre paramètres).

LA TEMPERATURE ATMOSPHERIQUE

Il s'agit d'une grandeur révélatrice de l'énergie cinétique des molécules en mouvement qui composent l'air. Ainsi à très haute altitude (dans la thermosphère) bien que directement soumis au rayonnement solaire, le faible nombre de molécules présentes engendre une température peu élevée.

La température est souvent exprimée en degrés Celsius (°C), mais l'unité SI est le degré Kelvin (K). 0K correspond au zéro absolu, lorsque tout mouvement moléculaire a cessé. 0K vaut -273 °C.

Si le mouvement moléculaire (i.e. la température) augmente, on assiste à une dilatation du volume d'air considéré. Ainsi il devient moins dense et aura tendance à

s'élever. Il s'agit du phénomène de convection qui intervient largement dans le transport vertical des polluants.

L'HUMIDITE ATMOSPHERIQUE

Il est d'usage de la quantifier en définissant **un taux d'humidité relative** (HR), rapport de la quantité de vapeur d'eau dans un échantillon d'air donné sur la quantité totale de vapeur d'eau que cet échantillon contient avant saturation (condensation). Il s'exprime pour une pression et une température fixées, sous la forme d'un pourcentage.

En principe, plus l'air est chaud, moins il est dense, offrant ainsi la possibilité de contenir de la vapeur d'eau. Lorsqu'il se refroidit, l'attraction naturelle entre les molécules d'eau les conduit à se regrouper jusqu'à condensation. Cela explique en partie la formation des nuages, de la brume, du brouillard, et des précipitations.

LA PRESSION ATMOSPHERIQUE

La pression est une mesure de la force exercée par les molécules d'air sur une unité d'aire.. La pression atmosphérique de référence est estimée au niveau de la mer et vaut 1013,25 mb. Elle diminue avec l'altitude.

La pression en un point donné varie toujours en fonction des échanges de chaleur entre la terre et l'atmosphère. Ces variations induisent une force, dont l'effet se traduit par le vent.

LE VENT

Comme expliqué dans le paragraphe précédent, la formation de vent est initiée par les différences de pression enregistrées dans l'atmosphère. Ainsi les zones les plus chaudes ont tendance à s'élever, engendrant des espaces de densité plus faible et donc de pression plus faible. L'air, comme tout fluide, se déplace des hautes pressions vers les basses pressions. L'apparition de ces volumes de plus faible pression induit la mise en mouvement de masses d'air, et la création du vent.

La vitesse du vent est mesurée en nœuds ou plus généralement en mètres par secondes (1 nœud=0.51m/s). En pratique (par exemple lors de la lecture de roses des vents) la notion de “ direction du vent ” fait référence à la direction d'où il provient.

Equation d'état

Le comportement de tout gaz considéré comme parfait, est régi par une équation d'état, qui définit la relation entre la température exprimée en Kelvin (T), la densité donnée en kg/m³ (ρ) et la pression exprimée en Pascals (P). Cette équation s'écrit :

$$PV = nRT$$

R est la constante des gaz parfaits, valant 8,314 J/K.mol à une température de 273K et une pression de 1013.3 mb.

Cette loi fondamentale est à la base de tout système météorologique et a fortiori du transport des polluants.

LES MOUVEMENTS ATMOSPHERIQUES

Les mouvements horizontaux

La première force à l'origine des mouvements horizontaux de l'atmosphère a été largement discutée dans les paragraphes précédents, il s'agit de la force induite par **les gradients de pression**.

Cependant son action est compliquée par l'effet de rotation de la Terre sur son axe, matérialisé par la **Force de Coriolis**. Cette dernière dépend de la vitesse de rotation de la Terre, de la latitude, et de la masse et la vitesse de l'objet auquel elle est appliquée. Elle est toujours perpendiculaire à la direction de déplacement de l'objet et croît avec la latitude (elle est nulle à l'Equateur). Cette force est à l'origine des mouvements tourbillonnants (dans des sens opposés) propres aux zones de hautes pressions et aux zones de basses pressions.

Enfin le dernier facteur influençant le mouvement horizontal des masses d'air est **la force de frottement**, opposée à la direction de déplacement. Elle dépend de la vitesse de l'objet considéré et de la viscosité relative du milieu dans lequel il évolue. Ainsi elle est prépondérante par rapport à la force de Coriolis près de la surface terrestre, dans la zone communément appelée **couche limite atmosphérique (CLA)** et décrite ultérieurement. En revanche, elle devient négligeable à 1 ou 2 km d'altitude, dans l'atmosphère libre.

A haute altitude (où les frottements sont négligeables), il est possible de calculer la vitesse de déplacement des masses d'air nécessaire pour maintenir l'équilibre entre la force induite par les gradients de pression, et la force de Coriolis. Il s'agit du **vent géostrophique**, considéré comme une bonne approximation du vent réel à ces altitudes. Il joue souvent le rôle de condition limite dans la représentation de l'écoulement au sein de la CLA. Ce vent est parallèle aux isobares, et n'est pas constant, la pression variant avec l'altitude.

Les mouvements verticaux

Ils sont la clef de la formation des nuages et des précipitations. Trois forces influencent les déplacements verticaux de l'atmosphère :

- La force imputable aux gradients de pression,
- La force de gravité représentative de l'attraction terrestre,
- Les forces de frottement, toujours prédominantes dans la couche limite atmosphérique.

Les facteurs qui influencent l'équilibre entre ces trois forces et induisent des mouvement verticaux sont aussi au nombre de trois. Il s'agit :

- Des effets de convergence et de divergence : comme expliqué précédemment l'air sous l'effet combiné des trois forces " horizontales " va tourbillonner en spirale vers le centre des dépressions. Il se comprime à la surface terrestre (effet de convergence) et remonte rapidement, d'où la formation de nuages et de précipitations. Dans les régimes de hautes pressions l'air est au contraire entraîné vers l'extérieur et ralentit considérablement du fait de la décompression.
- Des phénomènes de flottabilité, qui se traduisent par l'élévation des zones les moins denses (poussée d'Archimède). Ils sont très liés aux profils verticaux de température.
- Du relief, qui lorsqu'il est important oblige mécaniquement des mouvements atmosphériques ascendants et descendants.

Lorsque les forces de gravité et de pression (hors couche limite atmosphérique) s'équilibrent parfaitement, **l'équilibre hydrostatique** est atteint. Il s'exprime mathématiquement par l'équation suivante :

$$\frac{dP}{dz} = -\rho g$$

g désigne l'accélération de la pesanteur. Cette relation et l'équation d'état permettent de déduire une loi d'évolution de la température avec l'altitude.

L'équilibre hydrostatique est une bonne approximation des phénomènes réels à grande échelle, loin des fronts. En revanche, dans les zones où l'on constate des accélérations verticales importantes, ou à des échelles plus petites dans les zones soumises à de fortes turbulences (relief, îlot urbain) cette hypothèse est inappropriée.

Il s'agit d'une approximation fondamentale sur laquelle ont été construits bon nombre de modèles numériques (les modèles hydrostatiques). Cependant la plus grande vigilance s'impose sur leur champ d'application, qui doit se limiter strictement aux situations dans lesquelles l'hypothèse est valide, sous peine d'obtenir des résultats erronés.

Les équations de la dynamique

L'air est soumis aux forces listées dans les paragraphes précédents. Il est mu suivant le principe fondamental de la dynamique qui aboutit à la formulation suivante :

$$\frac{dV}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{dP}{dz} + g - fV + M$$

V est la vitesse du volume d'air considéré, ρ sa densité, g l'accélération de la pesanteur, fV l'accélération de Coriolis, dP/dz le gradient de pression et M les forces de frottement.

Cette équation est à la base de tous les modèles numériques destinés à simuler les mouvements atmosphériques. Elle peut être traitée telle quelle ou bien sous une forme simplifiée, suivant les hypothèses adoptées.

LES DIFFERENTES ECHELLES DE MOUVEMENTS ATMOSPHERIQUES

Les météorologistes classent les phénomènes climatiques en quatre catégories suivant l'échelle spatio-temporelle considérée. Chacune d'elle est caractérisée par la prise en compte de paramètres physiques qui lui sont propres. Le transport des polluants peut être considéré pour chacune de ces classes. Aussi l'identification de l'échelle à laquelle appartiennent les phénomènes que l'on souhaite modéliser est fondamentale, de manière à utiliser correctement les outils numériques appropriés.

L'échelle globale

Il s'agit de l'échelle planétaire pour laquelle sont définis des schémas météorologiques très généraux qui se reproduisent sur plusieurs années. Ils désignent par exemple des pluies abondantes traditionnelles à une certaine période de l'année, ou au contraire des périodes de sécheresse. C'est également à cette échelle que s'identifient des vents prédominants pour un continent, qui conditionnent le déplacement des masses d'air et qui sont à l'origine de changements de temps typiques (apparition de fronts chauds ou froids).

L'échelle synoptique

Elle couvre des surfaces importantes (de l'ordre des continents) et est caractéristique de phénomènes s'étalant sur plusieurs semaines. Quatre types d'éléments météorologiques bien connus sont associés à cette classe :

- **Les masses d'air**, énormes zones atmosphériques soumises à une température et une humidité quasi-uniformes,
- **Les fronts**, zones de rencontre entre les masses d'air de densité différente,
- **Les cyclones**, terme définissant tout système dépressionnaire, porteur d'instabilités atmosphériques, de précipitations, voire d'ouragans,
- **Les anticyclones**, qui désignent à l'inverse les systèmes de hautes pressions, synonymes de temps sec et clair.

La méso-échelle

Elle englobe les phénomènes qui relèvent de l'échelle régionale (de 1 à quelques centaines de kilomètres) et s'étendant sur des périodes variant de quelques heures à quelques jours. L'écoulement atmosphérique est ainsi largement influencé par les échanges de chaleur entre l'air et le sol, et la nature de la surface terrestre.

LES MOUVEMENTS THERMIQUES

Ils sont causés par les gradients de température impliquant localement des mouvements ascendants d'air chaud et descendants d'air froid. Cela crée des variations de pression, et le développement de vents locaux. La nature de la surface du sol joue alors un rôle prépondérant : une surface absorbant et émettant fortement la chaleur (telle que l'asphalte) moyennant d'un faible émetteur thermique (l'herbe par exemple) seront responsables de ces gradients thermiques.

Les fameuses brises de mer (ou de terre) et brises de pentes trouvent ainsi leur explication. De même la présence de villes importantes peut perturber l'équilibre thermique de l'atmosphère et engendrer des "microclimats" : on parle alors de l'îlot de chaleur urbain. Ces phénomènes particuliers jouent un rôle déterminant dans la dispersion des polluants atmosphériques. Aussi l'une des préoccupations majeures des modélisateurs est de pouvoir les reproduire numériquement. Le principe des brises est rapidement détaillé ci-dessous.

Brises de mer et brises de terre

Ces vents se forment dans les zones où de larges étendues d'eau côtoient les terres. Les brises de mer apparaissent durant le jour, cédant la place aux brises de terre pendant la nuit.

Le jour, le sol absorbe et émet la chaleur plus efficacement que l'eau. Ainsi l'air au-dessus des terres se réchauffe plus rapidement par conduction et convection. La masse d'air chaud s'élevant ainsi au-dessus des terres, une différence de pression se crée entre terre et mer, qui initie un mouvement de recirculation des hautes pressions vers les basses pressions. L'air arrive de la mer, plus frais et plus humide (voir figure 3.a). D'ailleurs la zone de front entre l'air chaud au niveau du sol et l'air frais incident peut générer nuages et précipitations.

L'inverse se produit la nuit, la terre se refroidissant beaucoup plus rapidement que l'eau, les brises de terre se créent alors (voir figure 3.b).

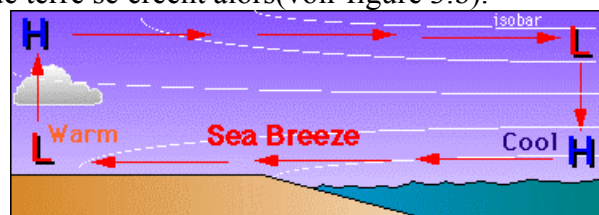


Figure 3.a : brise de mer

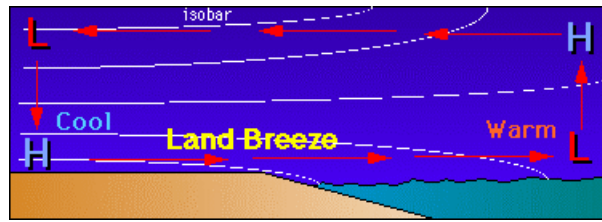


Figure 3.b : brise de terre

Brises de pentes

Il s'agit de phénomènes thermiques de nature similaire, typiques des zones montagneuses. Le jour, le fond des vallées se réchauffe beaucoup plus rapidement que les versants de la montagne, créant ainsi un courant thermique ascendant, la brise de vallée. La nuit, le mouvement s'inverse suite au refroidissement rapide des surfaces montagneuses.

LES MOUVEMENTS MECANIQUES

La topographie de la région considérée est alors en cause. Ainsi si le relief est important, les masses d'air sont forcées de longer les pentes des obstacles. Lors de cette ascension, l'air chargé d'humidité pourra atteindre son niveau de condensation et perdre une bonne partie de son humidité sous forme de nuages et de précipitations. L'air qui redescendra le long du versant opposé sera donc chaud et sec. La gravité, et donc les différences de densité entre masses d'air jouent un rôle fondamental dans ces mouvements.

La micro-échelle

DEFINITIONS

Les phénomènes observés à l'échelle très locale ont une amplitude de quelques mètres et une période souvent inférieure à quelques minutes. Ils peuvent être d'origine mécanique et/ou thermique, et sont qualifiés par le terme de turbulence.

La turbulence thermique est déterminée par la différence de température entre la surface et l'air ambiant. La chaleur dégagée par une surface chaude est à l'origine de l'excitation des molécules d'air en contact. Leur mouvement est ainsi accéléré, et leur interaction avec des molécules plus lentes induit turbulences et instabilités.

La turbulence mécanique est déterminée par la vitesse de vent et la rugosité de la surface. Ses effets conduisent à introduire les notions de **viscosité moléculaire** et de **viscosité turbulente**. La première fait référence aux contraintes occasionnées par les mouvements moléculaires souvent très erratiques. L'autre décrit les effets de frottement induits par l'interaction des différents mouvements tourbillonnaires. Les viscosités moléculaire et turbulente sont impliquées dans le développement de forces de frottement.

Ces deux paramètres jouent un rôle important dans les équations de la mécanique des fluides et sont représentés dans tous les codes de calcul basés sur leur résolution numérique.

EXEMPLES

Un exemple typique d'écoulement turbulent à l'échelle locale est donné par les perturbations très complexes engendrées par la présence d'un obstacle, même de forme simple dans le champ de l'écoulement.

Ainsi le cas de l'écoulement autour d'un parallélépipède a fait l'objet de multiples études, numériques et expérimentales. Il met en évidence de nombreuses zones de

recirculation, aujourd'hui bien caractérisées qualitativement, et quantitativement (voir figure 4).

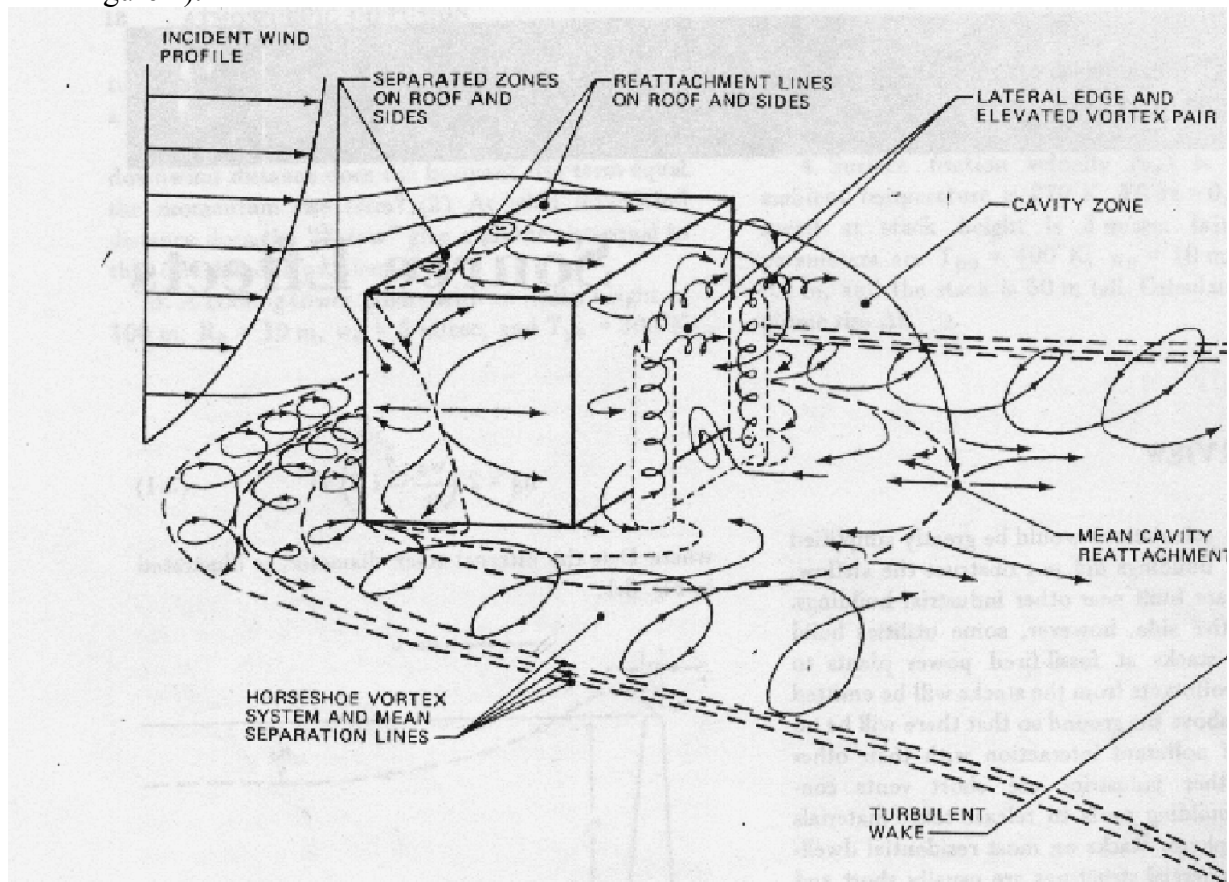


Figure 4 : Mouvements de l'air autour d'un obstacle

Le deuxième exemple est celui fourni par les écoulements se développant à l'échelle de la rue appelés "effets canyons". Ils varient en forme et en intensité suivant la direction et la force du vent, et les paramètres géométriques tels que la largeur de la rue ou la hauteur des bâtiments qui la bordent. C'est ainsi que l'on constate parfois l'apparition d'un mouvement de recirculation responsable de l'accumulation des polluants en des points précis, ou au contraire des zones "d'eau morte". Cette partie sera plus largement développée dans le chapitre sur l'impact local.

LA COUCHE LIMITE ATMOSPHERIQUE (CLA)

Les applications visées dans ce document ciblent les problèmes de la qualité de l'air du niveau local au niveau continental. Ainsi les phénomènes météorologiques intervenant dans ce contexte relèvent de la mésoéchelle ou de la microéchelle. Ils sont prépondérants dans la Couche Limite Atmosphérique (CLA), qui définit la zone troposphérique inférieure s'étendant sur 1 ou 2 km. A ce niveau, les effets de frottement sont non négligeables (par opposition à la troposphère libre). Elle est sous l'influence directe de la surface terrestre, que ce soit sous forme de frottements, d'effets de relief, d'échanges avec la couverture végétale ou d'échanges thermiques.

Cette zone est particulièrement importante lorsque l'on s'intéresse aux interactions entre atmosphère et activités humaines et donc en particulier à la qualité de l'air. En fait, le changement de temps, le transport et la dispersion des polluants ou leur dépôt ne sont réellement significatifs que dans la CLA. D'où l'importance de bien la caractériser.

La hauteur de la CLA, variable suivant le moment de la journée et la saison, est appelée *hauteur de mélange*.

Description de la Couche Limite Atmosphérique

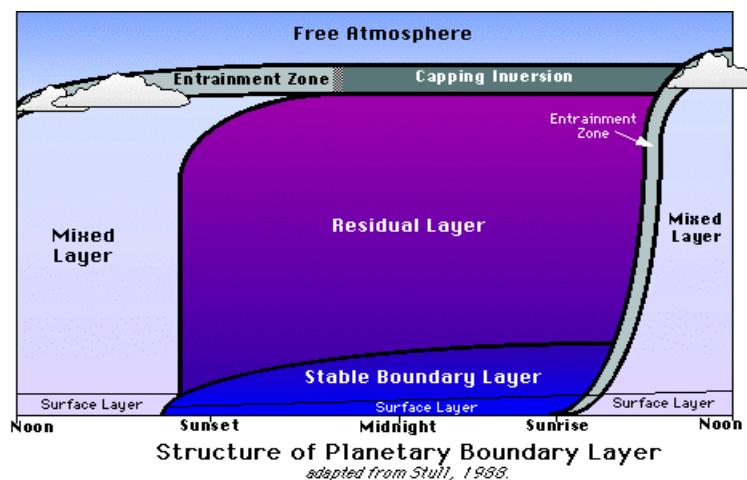
La CLA est divisée en quatre zones apparaissant et évoluant suivant les moments de la journée (figure 5) :

La couche de surface dont la hauteur représente environ 10% de celle de la CLA. Il s'agit de la zone la plus proche du sol, les contraintes turbulentes y sont quasiment constantes, et la force de Coriolis y est pratiquement inexistante. La description mathématique de la couche de surface, siège de multiples événements favorisant ou inhibant la dispersion des polluants, a fait l'objet de recherches acharnées. La théorie bien connue de Monin-Obukhov, basée sur la théorie des similitudes, permet de décrire les relations existant entre vent et température et les flux de surface grâce à des fonctions universelles et des facteurs d'échelle bien connus : la longueur de Monin Obukhov (L), la vitesse de frottement (u^*) ou le flux de chaleur sensible.

La couche de mélange apparaît le jour. Il s'agit de la zone dans laquelle l'air est brassé sous l'effet du réchauffement du sol. Ces mouvements induisent une turbulence importante qui favorise le mélange des gaz et aérosols présents dans la couche (air et polluants éventuels).

La couche d'inversion est une zone très stable résidant au dessus de la couche de mélange. Elle bloque tout mouvement de convection. Sa hauteur varie suivant les moments de la journée et se trouve proche du sol la nuit, alors que la hauteur de mélange décroît. Les vents y sont faibles, de même que les effets de turbulence. Elle s'étend en principe sur une hauteur moindre que la couche de mélange.

La couche réservoir s'installe au dessus de la couche stable d'inversion, et se développe la nuit. Il s'agit d'une zone dans laquelle les propriétés atmosphériques (composition chimique, température, pression) développées dans la couche de mélange durant la journée, sont maintenues. Elle se caractérise souvent par un profil neutre du point de vue de la stabilité. Son expansion verticale est généralement bloquée par une nouvelle couche d'inversion. La présence de cette couche peut avoir un effet important, notamment sur la persistance des épisodes d'ozone. En effet, les polluants piégés durant la nuit seront réintégrés durant la journée à la couche de mélange, contribuant ainsi au maintien de concentrations élevées.



*Figure 5 : structure de la Couche Limite atmosphérique³***Facteurs influençant la CLA**

Les propriétés de la CLA (hauteur, stabilité...) sont influencées par de nombreux facteurs, dont certains jouent un rôle prépondérant :

- Les échanges thermiques entre le sol et l'atmosphère : plus la surface de la terre sera chaude et plus les effets de turbulence thermique seront favorisés et par là même le mélange.
- L'humidité fortement impliquée dans les transferts de chaleur. Un air chargé de vapeur d'eau a tendance à limiter la conduction de chaleur, ce qui a une conséquence directe sur la hauteur de mélange.
- Les différences de densité (imputables par exemple aux variations de température) sont à l'origine de mouvements de convection dans la CLA.
- Les effets de cisaillement, dus au frottement de l'air sur la surface de la terre, impliquent des variations de vitesse et de direction de vent en fonction de l'altitude, ce qui favorise la turbulence.

L'influence du site : la rugosité

Parmi les facteurs influençant la CLA, il est à noter l'importance des effets de frottements mécaniques sur la surface du sol. Ainsi, il est nécessaire de qualifier correctement ceux-ci, en fonction des objectifs que l'on impose. Dans le cas d'une étude à petite échelle (i.e. champ proche), il faut être en mesure de décrire avec précision le bâti (description d'une rue, d'un quartier ou d'un site industriel...), et c'est la couche de surface qui est prise en compte.

En revanche à l'échelle régionale ou continentale, il est illusoire et inadapté de spécifier aussi précisément le site, mais il est tout de même nécessaire d'appréhender la surface du sol pour retranscrire ses effets sur la CLA. C'est ainsi qu'est introduite **la notion de rugosité** qui conditionne ces effets de frottement. Il s'agit d'un paramètre important, apparaissant dans tout modèle numérique (même les plus simples) de la qualité de l'air. Elle est traditionnellement représentée par la longueur de référence z_0 , qui peut varier de quelques centimètres pour une prairie ou une étendue d'eau à quelques mètres en présence d'une forêt ou d'une ville. Il s'agit d'une donnée relative. Il existe des tables proposant des valeurs de rugosité en fonction de la nature de la surface du sol (figure 6.).

³ Source : www.shodor.org/metweb

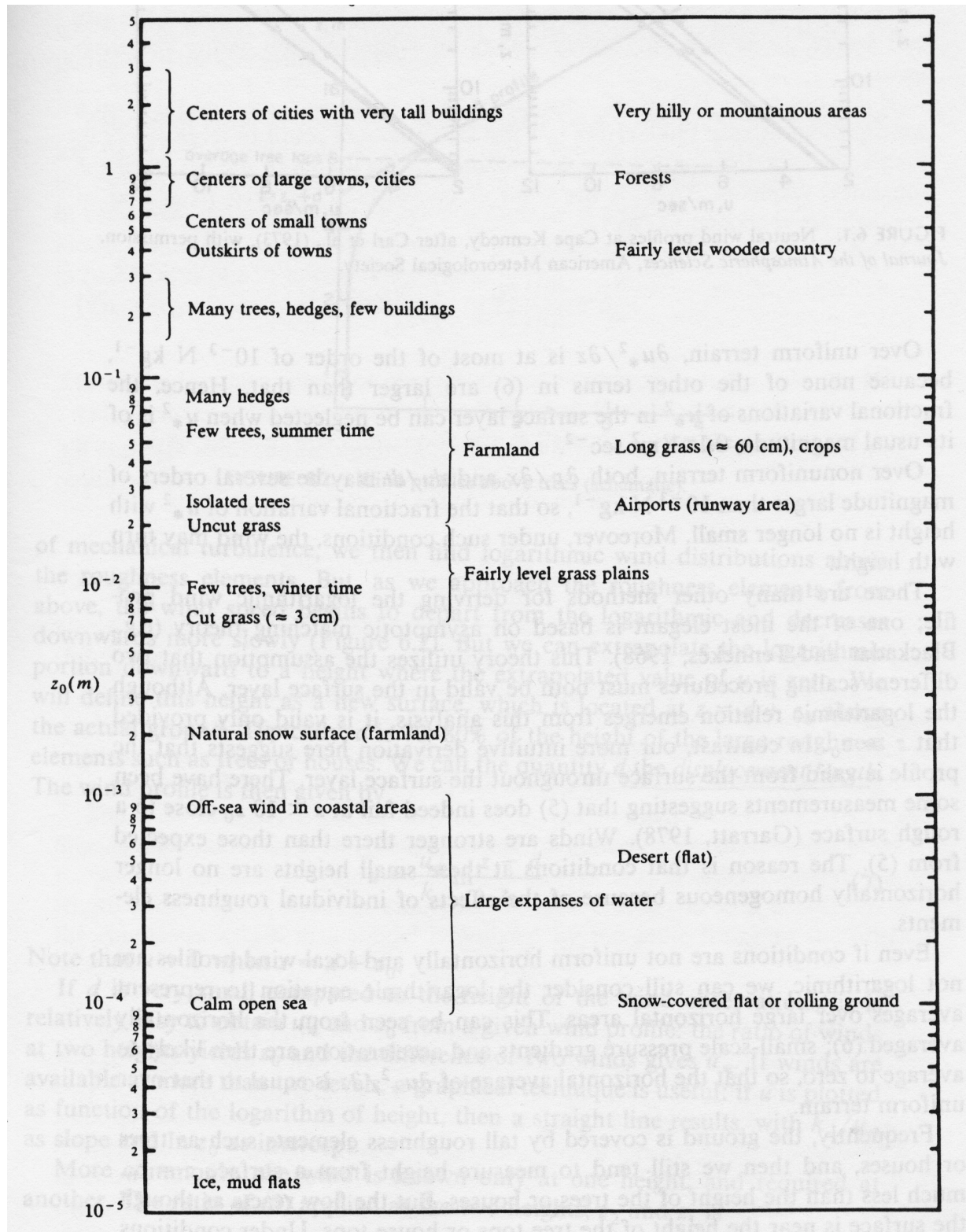


Figure 6 : valeurs types du paramètre z_0 en fonction de la nature du terrain

Notion de stabilité atmosphérique

La dispersion des polluants est essentiellement conditionnée par la *stabilité atmosphérique* qui représente l'aptitude de l'atmosphère à conserver un état physique et thermodynamique donné, malgré les sollicitations externes. Celles-ci peuvent être de nature mécanique ou thermique, et ont été largement évoquées dans les paragraphes précédents : présence de relief, convergence de l'écoulement, effets du rayonnement solaire.

L'idée de stabilité est étroitement liée à l'équilibre thermodynamique de l'atmosphère. Aussi pour la caractériser, la référence utilisée est le gradient de température atmosphérique en conditions adiabatiques (i.e. sans échange de chaleur). Ce gradient se déduit de la première loi de la thermodynamique et de l'équation hydrostatique, il est de l'ordre de **-0,98°C/100m**.

Les météorologues distinguent usuellement trois états de stabilité atmosphérique : instable, neutre et stable. Le critère de stabilité peut être formalisé suivant la valeur du gradient vertical de température :

$$\text{Atmosphère instable : } \frac{\partial T}{\partial z} < -0.98^{\circ}\text{C} / 100\text{m}$$

$$\text{Atmosphère neutre : } \frac{\partial T}{\partial z} = -0.98^{\circ}\text{C} / 100\text{m}$$

$$\text{Atmosphère stable : } \frac{\partial T}{\partial z} > -0.98^{\circ}\text{C} / 100\text{m}$$

Les après-midi d'été très ensoleillées et dégénérant en orage en fin de journée sont typiques d'une atmosphère instable. L'atmosphère est neutre par temps venteux et nuageux. Elle devient stable près de la surface terrestre durant la nuit ou tôt le matin, ou dans les couches d'inversion thermiques rencontrées à des altitudes éventuellement très élevées durant les journées.

Il est fréquent de constater des variations du gradient thermique suivant l'altitude, l'atmosphère se répartissant alors en couches stables et instables ou inversement. Les moments de transition jour/nuit sont les plus propices à ce phénomène.

Différents paramètres météorologiques, tels que les déviations standards de la direction de vent, le gradient vertical de température ou tout simplement, l'ensoleillement et la nébulosité sont classiquement utilisés pour définir le degré de stabilité ou d'instabilité de l'atmosphère [Mohan et Siddiqui 1998]. Ce dernier est souvent lisible sur des tables de classification établies en fonction des paramètres météorologiques cités ci-dessus. Pasquill-Gifford et Turner, [EPA, 1970] ont été les premiers à proposer un tel découpage avec 6 catégories de stabilité, allant de la situation très instable (classe A) à la situation très stable (classe F ou G).

Remarque : Il est aisé d'imaginer combien la stabilité est un facteur déterminant pour la dispersion des polluants (voir figure 7). Ainsi le panache d'une cheminée en atmosphère instable aura une forme relativement sinueuse, et même si des concentrations élevées seront observées près de la source, leur dispersion sera favorisée. Dans le cas d'une atmosphère neutre, le panache conservera une forme conique que l'on peut observer en début de matinée ou la nuit par vents forts. En situations stables le panache ne se mélange pas à l'air ambiant et reste rectiligne et étroit. Les polluants sont transportés à longue distance mais peu dispersés.

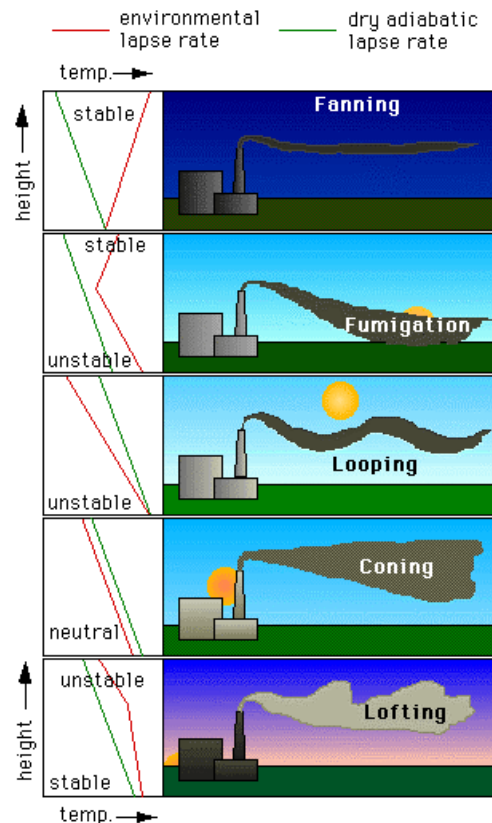


Figure 7 : stabilité atmosphérique et dispersion de panache

UN CAS PARTICULIER : LA CANOPEE URBAINE

Le vent, la température, la turbulence ou le bilan radiatif peuvent enfin être considérablement altérés par la présence d'infrastructures urbaines. En effet, une agglomération constitue un point chaud et rugueux par rapport à la zone rurale qui l'entoure. Ces différences induisent des effets thermiques et mécaniques qui se développent dans une couche limite interne, à la CLA, sur toute la surface de l'agglomération. La canopée urbaine est la partie inférieure de cette sous-couche de surface. Elle s'étend sur plusieurs dizaines de mètres et est le siège de mouvements turbulents hétérogènes et particulièrement mal identifiés. Plusieurs raisons peuvent expliquer leur développement :

- Les véhicules et les infrastructures urbaines sont à l'origine d'un important dégagement de chaleur (près de 1/3 de l'énergie absorbée),
- Les bâtiments et les routes sont de meilleurs conducteurs de chaleur que la végétation,
- La structure "canyon" des rues favorise la capture de l'énergie solaire et ses réflexions multiples entre bâtiments.
- Les phénomènes météorologiques très locaux induits par la présence de l'îlot de chaleur urbain (apparition de nuages, précipitations, vents locaux...) ont clairement été mis en évidence aussi bien par des analyses statistiques que par les techniques d'imagerie satellite.

Pour cette raison, la paramétrisation de la canopée urbaine, et la caractérisation de son expansion verticale, fait l'objet de nombreuses recherches actuelles, incluant mesures et modélisation [Vachon et al,1999], [Rotach, 1995].

GUIDE METHODOLOGIQUE EN MODELISATION DETERMINISTE

LABORATOIRE CENTRAL DE SURVEILLANCE DE LA QUALITE DE L'AIR

Convention 42/2000

JANVIER 2002

**Laurence ROUÏL (INERIS)
André WROBLEWSKI (EMD)**

Ce document comporte 89 pages (hors couverture et annexes).

	Rédaction	Vérification	Approbation
NOM	Laurence ROUÏL André WROBLEWSKI	Michel NOMINE	Martine RAMEL
Qualité	Ingénieurs Etudes et Recherches INERIS/DRC Ecole des Mines de Douai	Délégué Scientifique Direction des Risques Chroniques	Responsable LCSQA Direction des Risques Chroniques
Visa			