

calculée sur 2000 et 2001, voir les détails sur les espèces dans les Tableaux C.3 et C.4 en Annexe C).

II.2 Participation à l'évaluation de CHIMERE dans le cadre de MEGAPOLI

Dans le cadre de projets scientifiques de grande envergure impliquant plusieurs modèles (GEMS, MAAC, CityZen, MEGAPOLI...) il est courant de réaliser des simulations avec des données de forçages communes imposées. Cela permet de s'affranchir des différences qu'elles génèrent dans les sorties des modèles lors d'exercices d'intercomparaison. Dans le cadre du projet MEGAPOLI (<http://megapoli.dmi.dk/>), un tel exercice a été mené (Haller *et al.*, 2011b;a; Sofiev *et al.*, 2011) : j'ai pour cela implémenté dans le modèle CHIMERE l'ensemble des forçages imposés (météorologie et émissions) et réalisé la totalité des simulations demandées sur l'Europe (soit toute l'année 2005 ainsi que la période de campagne de terrain couvrant juillet 2009). La configuration du modèle utilisée pour réaliser ces simulations avec le modèle CHIMERE est rappelée dans le Tableau F.1 en Annexe F. Les données d'émissions ont été utilisées dans la plupart des simulations réalisées dans le cadre de cette thèse mais les données de forçages aux limites n'ont été utilisées que dans le cadre de cette intercomparaison de modèles.

II.2.1 Implémentation de nouvelles données d'émissions

Initialement, la base de données *GLCF* (Global Land Cover Facility : <http://glcf.umd.edu>) qui possède une résolution kilométrique était implémentée dans le modèle CHIMERE. Afin de disposer d'une base de données plus fine, j'ai implémenté la base de données *GLOBCOVER* (Arino *et al.* (2008) ; <http://ionia1.esrin.esa.int/>). Elle a été produite par l'ESA (European Spatial Agency) et utilise un ensemble de données acquises par le capteur MERIS embarqué sur ENVISAT entre 2005 et 2006. Elle a également été utilisée par l'INERIS pour générer l'inventaire d'émissions du projet CityZen sur la période allant de 1998 à 2007 à partir de l'inventaire EMEP (<https://wiki.met.no/cityzen/start>). Les inventaires ainsi obtenus ont été décrits, et leurs tendances annuelles comparées avec d'autres inventaires de la

littérature, dans Granier *et al.* (2011).

Dans le cadre du projet MEGAPOLI, le TNO (<http://www.tno.nl>) a fourni un inventaire d'émissions d'une résolution de $0,125^\circ \times 0,625^\circ$ sur toute l'Europe pour toute l'année 2005. Comme pour l'inventaire EMEP, les chercheurs du TNO ont utilisé les données d'émissions rapportées par chaque pays Européen et les ont respatialisées (Denier van der Gon *et al.*, 2009) avec des techniques d'interpolations plus fines. Dans le but d'apprécier la différence de résolution de ces trois inventaires (EMEP, EMEP-INERIS et TNO), j'ai représenté en Figure II.3 une illustration des émissions annuelles de NO_x en 2005. La technique d'interpolation utilisée pour générer l'inventaire EMEP-INERIS permet d'avoir localement sur les villes des émissions plus intenses que dans l'inventaire EMEP. Mais l'inventaire TNO étant le plus fin, on peut même y observer le tracé des routes autour de Moscou. Ainsi en utilisant l'inventaire TNO, la précision sur la répartition des sources d'émissions devient plus importante que si l'on avait utilisé l'inventaire EMEP avec la technique d'interpolation de CHIMERE représenté ici par l'inventaire EMEP-INERIS.

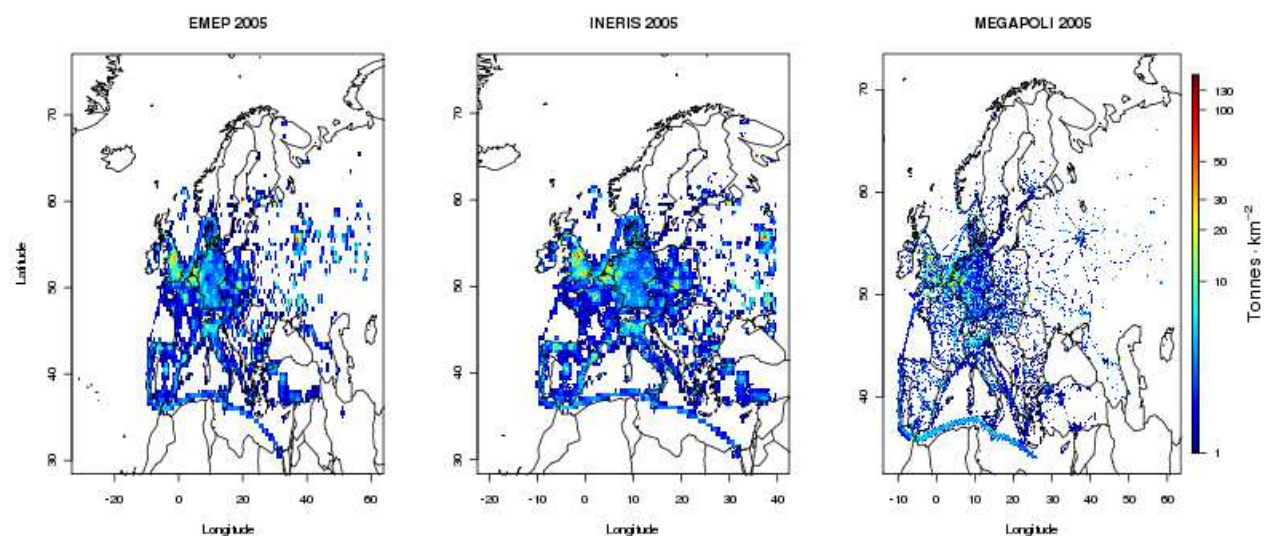


FIGURE II.3 – Illustration des inventaires d'émissions. Émissions de NO_x pour l'année 2005 en Tonnes.km^{-2} : de gauche à droite, les émissions de l'inventaire EMEP ($0,5^\circ$), de l'inventaire EMEP-INERIS ($0,1^\circ$) et de l'inventaire TNO $0,125^\circ \times 0,625^\circ$ de résolution.

II.2.2 Implémentation des données de forçages

Les données de forçages aux limites du domaine européen, mises à disposition dans le cadre de MEGAPOLI, proviennent de simulations réalisées pour toute l'année 2005 et pour

l'été 2009 par le modèle MATCH-MPIC (Lawrence *et al.*, 1999). Le principal intérêt de telles conditions aux limites réside dans leur résolution temporelle (horaire), ce qui permet une meilleure prise en compte des conditions extérieures ayant effectivement impacté notre domaine. La Figure II.4 illustre les différences entre les deux champs de forçages (LMDz-INCA et MATCH-MPIC) pour l'ozone en moyenne sur juin 2005. Outre la meilleure résolution temporelle apportée par le modèle MATCH, les concentrations au bord du domaine sont moins importantes à l'Est et au Nord et plus importantes à l'Ouest et au Sud pour le modèle MATCH, ce qui aura un impact non négligeable sur la simulation.

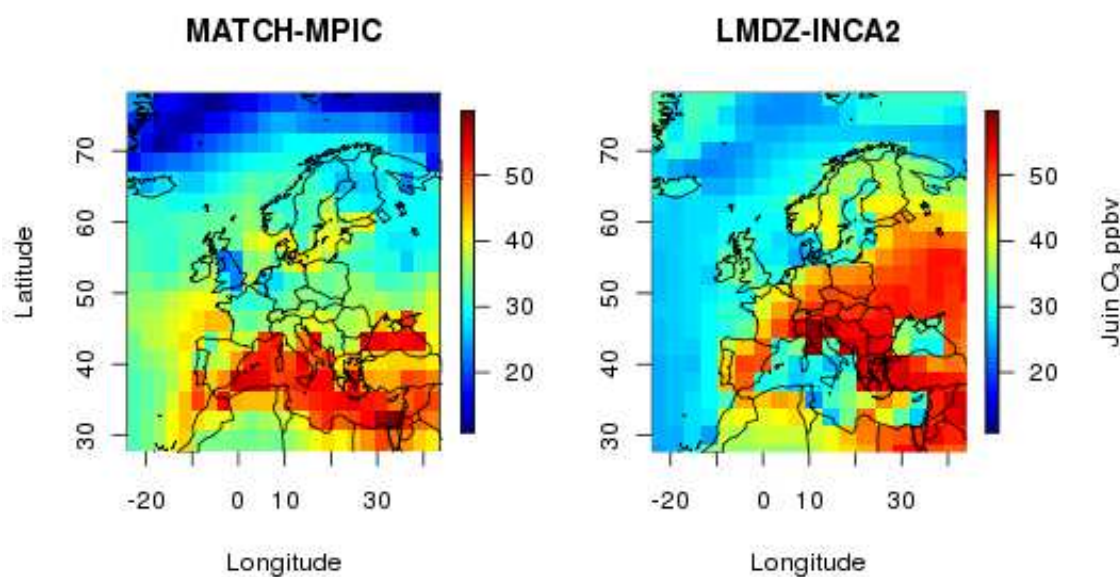


FIGURE II.4 – Concentrations mensuelles (juin) d'ozone (ppbv) au niveau du sol : à gauche les concentrations données par le modèle MATCH-MPIC et à droite les concentrations issues de la climatologie de LMDz-INCA2.

Les composés pris en compte dans le modèle MATCH-MPIC sont représentés dans le Tableau C.5 en Annexe C. À l'exception de deux espèces organiques (le propane et l'acétone), ils sont identiques à ceux utilisés par défaut dans CHIMERE. Il est possible, comme pour les émissions, d'agréger ces deux composés dans des espèces de substitution. J'ai choisi de les ajouter respectivement aux espèces NC4H10 et CH3OE. En théorie, pour agréger ces espèces, il faudrait suivre la procédure mise au point par Middleton *et al.* (1990) qui prend en compte la réactivité de chaque composé. Néanmoins, si les espèces ont une réactivité similaire, le rapport des masses molaires permet alors de représenter ces différences de réactivité. Les

concentrations aux limites de ces deux espèces sont donc calculées comme suit :

$$[NC4H10]_{CHIMERE} = [NC4H10]_{MATCH} + [C3H8]_{MATCH} \times \frac{M_{C3H8}}{M_{NC4H10}} \quad (II.10)$$

Les simulations MATCH ne concernant que la phase gazeuse, les données de forçages pour la phase particulaire sont restées propres à chaque modèle. J'ai choisi d'utiliser les données LMDZAERO décrites précédemment (II.1.5).

$$[CH3OE]_{CHIMERE} = [MEK]_{MATCH} + [ACET]_{MATCH} \times \frac{M_{ACET}}{M_{CH3OE}} \quad (II.11)$$

II.2.3 Illustration des résultats de l'intercomparaison

Les travaux d'intercomparaison de modèles réalisés dans le cadre du projet MEGAPOLI sont en phase finale d'exploitation. Une illustration en est donnée par la Figure II.5 (Sofiev *et al.*, 2011), qui représente les concentrations de HCHO ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) simulées sur un domaine européen au niveau du sol le 05 juillet 2009 à 15h et les dépôts simulés le 07 juillet à 3h par 5 modèles (CHIMERE, Schmidt *et al.* (2001); LOTOS-EUROS, Schaap *et al.* (2008); WRF-CMAQ, Byun et Schere (2006); FARM, cite76; et SILAM, Sofiev *et al.* (2006)). Une description détaillée de la plupart de ces modèles est en outre donnée par Kukkonen *et al.* (2011). Pour les composés gazeux inorganiques mesurés couramment (O_3 , NO_x , SO_2), les modèles donnent des résultats très similaires. Sofiev *et al.* (2011) rapportent que la plus grande incertitude entre les modèles porte sur les concentrations simulées de particules, et sur des espèces gazeuses non mesurées en routine (HCHO par exemple), ainsi que sur les paramètres physiques complexes des modèles comme la hauteur de couche limite. Les auteurs montrent que le résultat le plus surprenant de cette comparaison est le grand désaccord qui existe sur le dépôt sec de formaldéhyde : la comparaison entre les 5 modèles présente en effet une forte dispersion des résultats, certains modèles montrant même une anti-corrélation entre eux (FARM et WRF notamment) alors que les concentrations simulées (bien qu'en désaccord) ne divergent pas autant. Cette figure illustre notre méconnaissance de certains processus qui restent à quantifier ainsi que la possible compensation d'erreurs qu'y peut exister dans les modèles. Ce phénomène pourrait de plus expliquer la divergence des champs de concentration d'ozone entre les deux climatologies de la Figure II.4.

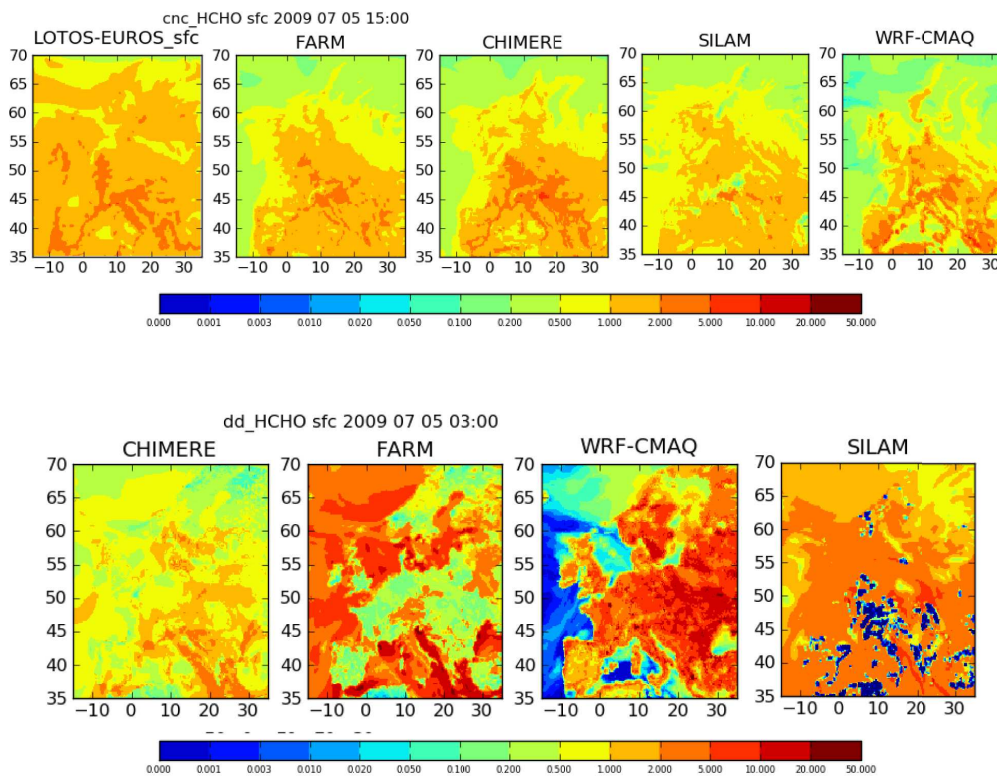


FIGURE II.5 – En haut de gauche à droite, les concentrations de HCHO ($\mu\text{g.m}^{-3}$) le 05 juillet 2009 à 15h simulée par les modèles : LOTOS, FARM, CHIMERE, SILAM et WRF-CMAQ. En bas de gauche à droite dépôt sec de HCHO en $\mu\text{g.m}^{-3}$ le 05 juillet 2009 à 3h (Sofiev *et al.*, 2011).

II.3 Développement d'une version dédiée à l'étude des mégapoles

II.3.1 Développement d'un calcul de flux

Afin de quantifier l'impact des mégapoles sur leur environnement proche et lointain, j'ai implémenté un calcul de flux dans le modèle CHIMERE. L'idée est de pouvoir quantifier le bilan de la quantité de polluants entrant et sortant d'une zone géographique donnée. Bien sur, ce terme de flux est calculé par le schéma numérique de transport (voir partie II.1.1), mais ne fait pas partie des données de sorties conventionnelles. En outre, accéder à la quantification de ce terme de flux doit permettre de fermer le bilan chimique dans chaque maille du modèle. C'est-à-dire de pouvoir réaliser un bilan complet d'une zone donnée en termes de sources et de puits aussi bien physiques que chimiques pour n'importe quelle espèce du mécanisme chimique. Je présenterai tout d'abord la résolution des équations différentielles