

TABLE II.1 – Moyennes des coefficients de corrélation, de la RMSE et du biais pour les deux schémas chimiques calculées sur toute la période (été 2005) et sur toutes les stations de la base de données *AirBase* (Urbaines, Périurbaines et Rurale) ~1300 stations.

| | SAPRC | MELCHIOR |
|-------------|------------|------------|
| R | 0,71±0,08 | 0,71±0,08 |
| RMSE (ppb) | 13,18±2,03 | 13,69±2,14 |
| Biais (ppb) | 8,19±2,65 | 9,29±2,65 |

TABLE II.2 – Moyennes des coefficients de corrélation, de la RMSE et du biais pour les deux schémas chimiques calculées sur toute la période (été 2005) et sur toutes les stations de fond de NO₂ de la base de données *AirBase* ~1000 stations.

| | SAPRC | MELCHIOR |
|-------------|------------|------------|
| R | 0,43±0,11 | 0,42±0,11 |
| RMSE (ppb) | 5,28±1,15 | 5,31±1,16 |
| Biais (ppb) | -1,39±1,20 | -1,35±1,21 |

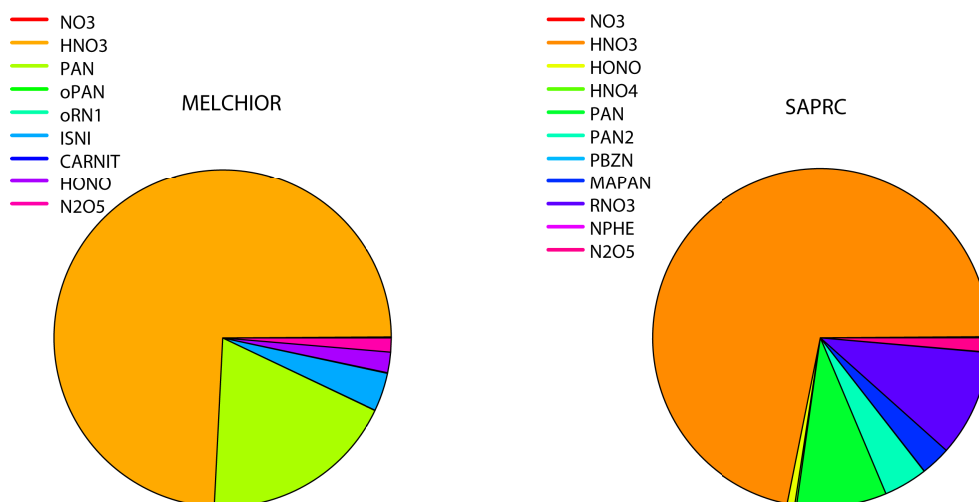


FIGURE II.16 – Répartition de l'azote dans les NO_z (toutes les espèces azotées issues de l'oxydation des NO_x) en moyenne sur tout le domaine de simulation le 23 juin 2005. À gauche la répartition de l'azote donnée par le schéma chimique MELCHIOR et à droite celle donnée par le schéma chimique SAPRC.

II.3.3 Développement d'une version dédiée à l'étude des interactions d'échelles

Comment représenter au mieux les interactions entre une mégapole et son environnement? Représenter le plus finement les émissions, ainsi que les processus physico-chimiques et météorologiques d'une mégapole permet-il de mieux quantifier son impact sur le reste du

continent ? Pour répondre à cette question nous devons représenter la mégapole à une fine échelle tout en ayant accès à son impact à une échelle plus large. Evidemment pour des raisons de temps de calcul, il ne nous est pas possible de simuler à très haute résolution (quelques kilomètres) les processus météorologiques et chimiques sur tout un continent.

La méthode la plus utilisée pour représenter les interactions d'échelles dans un CTM est le nesting one-way (Jakobs *et al.*, 1995). Cette approche consiste à réaliser une simulation de grande échelle qui servira de conditions initiales et de conditions aux limites pour une simulation de plus fine échelle (plus haute résolution). Cette méthode permet de représenter l'impact de la grande échelle sur la petite, mais sans rétroaction possible. Or pour étudier l'impact des mégapoles sur leur environnement proche et plus lointain, nous avons besoin d'un outil permettant de représenter ces interactions entre la petite et la grande échelle.

Il existe des méthodes alternatives qui permettent de représenter finement une zone d'intérêt et de la faire rétroagir sur une zone plus large. La première méthode utilisée notamment dans les modèles météorologiques est le nesting two-ways. Cette méthode permet de faire communiquer dans les deux sens et en temps réel deux grilles de résolutions différentes. Le problème d'une telle approche est qu'elle demande de faire des hypothèses de transport pour redistribuer les concentrations de plusieurs mailles fines vers une maille plus large. Quelle valeur prendre ? La moyenne ou la médiane des concentrations ? La difficulté d'implémenter cette technique dans les CTM a poussé la communauté à développer des méthodes alternatives. Ainsi, Maurizi *et al.* (2011a) ont développé dans le modèle Bolchem (Mircea *et al.*, 2008) une méthode dite de nudging inspirée des modèles météorologiques. Dans les modèles météorologiques, le nudging permet d'exercer une force de rappel sur les paramètres préalablement définis (vent, humidité, température...) pour que les valeurs simulées ne divergent pas des observations ou des champs de forçage. La technique développée par Maurizi *et al.* (2011a) consiste à forcer par une méthode de nudging une simulation de résolution modérée par une simulation de plus fine résolution respatialisée. Le principal avantage de cette méthode réside dans le fait qu'elle peut potentiellement être utilisée avec différents modèles.

L'INERIS, en collaboration avec Laurent Menut (Laboratoire de Météorologie Dynamique), a commencé à concevoir une autre approche dite de « stretching » ou de « zooming » qui consiste à resserrer le maillage sur une bande de latitude et sur une bande de longitude afin d'obtenir un maillage plus fin sur une zone d'intérêt, tout en conservant un maillage plus

large sur le reste du domaine. Cette méthode présente l'avantage de pouvoir faire communiquer le petit et le grand domaine dans les deux sens, en une seule simulation et sans faire d'hypothèse sur le transport (pas de frontière entre mailles de largeur différente), donc en restant conservatif et ne demande que peu de modification du modèle. Originellement cette approche a été principalement utilisée dans des modèles météorologiques (Schmidt, 1977; Staniforth et Mitchell, 1978) puis dans des modèles climatiques (FoxRabinovitz *et al.*, 1997) pour représenter de façon plus précise certaines régions du globe.

Pour un modèle comme CHIMERE, nous pouvons utiliser ce type de maillage pour étudier l'impact d'une fine échelle (quelques kilomètres) sur une échelle plus grande (continentale), et inversement, en une seule simulation. Dans notre cas, cet outil devrait donc permettre d'étudier l'impact d'une fine représentation des processus conduisant à la formation de pollution au sein de la mégapole sur son environnement, et permettre de procéder à des calculs d'export mieux résolus. En outre, cette grille devrait permettre de mieux représenter les processus de brises de terre et de brises de mer dans le cas d'une zone cible côtière ainsi que le transport des espèces inertes ou réactives issues de zones possédant un fort gradient d'émissions. J'ai donc choisi d'appliquer cette approche à l'étude de la région du BeNeLux, considérée comme l'une des principales mégapoles européennes, qui possède des émissions anthropiques très denses et qui est située en bordure de la Mer du Nord, très riche en émissions maritimes. Valari et Menut (2008) ont réalisé une étude sur la région parisienne pour la période d'août 2003. Ils ont réalisé plusieurs simulations à différentes résolutions, et ont identifié une résolution optimale (12km) pour laquelle la différence relative entre les concentrations d'ozone simulées par le modèle CHIMERE et les données de mesures est la plus faible ($\sim 9\%$). Même s'ils ne généralisent pas ce résultat à d'autres périodes ou à d'autres zones géographiques, j'ai choisi d'utiliser une résolution de $0,1^\circ$ ($\sim 10\text{km}$) comme fine résolution pour notre étude.

II.3.3.1 Le maillage zoomé

J'ai tout d'abord généré un maillage zoomé sur la région du BeNeLux. La Figure II.17 illustre ce maillage et représente les variations de résolution en latitude et en longitude pour un maillage de $0,5^\circ \times 0,5^\circ$ de résolution horizontale sur l'Europe ($14,30^\circ\text{W}$, $34,60^\circ\text{E}$, $35,8^\circ\text{N}$, $69,7^\circ\text{N}$), et resserré avec une résolution de $0,1^\circ \times 0,1^\circ$ sur la région du BeNeLux (région d'étude

du projet CityZen : 2,5°E, 8°E, 49,3°N, 53,6°N). Afin de valider notre approche, j'ai défini deux autres domaines de résolution constante (je les appellerai par la suite maillages « réguliers ») correspondant respectivement aux parties faiblement et finement résolues du domaine zoomé : i) un domaine continental de résolution horizontale de 0,5° (frontières en rouge) qui forcera en nesting one-way ii) un domaine fin de résolution horizontale de 0,1° (frontières en vert).

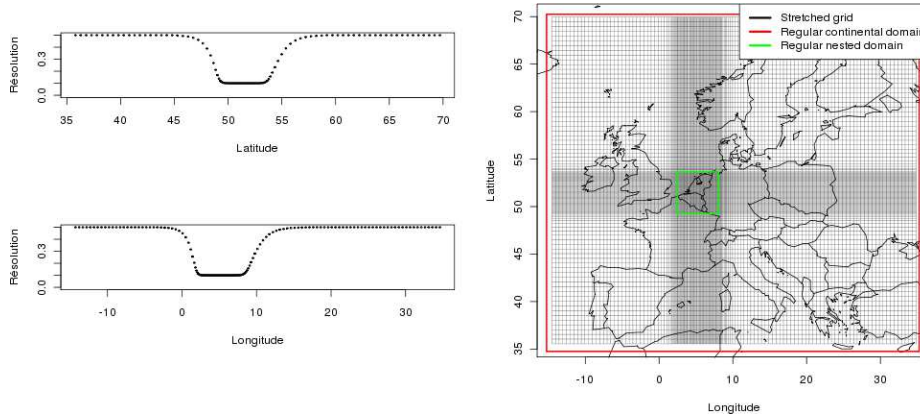


FIGURE II.17 – Évolution de la résolution en fonction de la latitude et de la longitude (à gauche). À droite, représentation du maillage zoomé, avec les frontières du domaine continental en rouge et du domaine fin en vert.

Simuler un tel domaine en version zoomée demande de réaliser les calculs sur un grand nombre de mailles (17649). Pour la configuration plus classique de nesting one-way, le grand domaine comprend 7171 mailles et le petit 2464. Le temps de calcul sera donc plus important avec une grille zoomée. Mais cet outil possède également un autre désavantage. Réduire la résolution sur un maillage recouvrant tout le continent, impose de réduire le pas de temps physique pour satisfaire la condition dite de Courant-Friedrichs-Lewy ou CFL (Courant *et al.*, 1967) sur tout le domaine. En effet, la dimension Δx de la grille doit être égale ou supérieure à la distance parcourue par une masse d'air se déplaçant à la vitesse u dans la maille, pendant l'intervalle de temps ($u\Delta x$). Si cette condition n'est pas remplie, il faut diminuer le temps de calcul. En pratique dans le modèle, le temps pour satisfaire cette condition est le même sur tout le domaine. Il est donc calculé comme étant le minimum de $u\Delta x$ calculé sur toutes les mailles du domaine, ce qui rend critique l'existence de petites mailles dans le domaine. Ainsi, augmenter même partiellement la résolution d'un facteur 5 (comme c'est le cas dans cet exemple) revient à augmenter le temps physique de calcul d'un facteur maximal de 5 également.

II.3.3.2 Étude d'un cas académique

Il est difficile, dans un cas réel simulé, d'identifier un panache de pollution bien défini à cause du mélange des différents panaches entre eux et dans un bruit de fond atmosphérique, ainsi qu'à cause de la transformation chimique des polluants primaires en composés secondaires. C'est pourquoi, pour estimer avec confiance l'impact hypothétique du raffinement du maillage sur l'évolution des panaches, un cas académique a été défini. Un traceur inerte a été émis au centre de la région du BeNeLux ($51,5^{\circ}\text{N}$ et $5,25^{\circ}\text{E}$) dans les trois configurations décrites ci-dessus. Ce traceur possède une masse molaire de 100 g.mol^{-1} ; et 1000 tonnes en ont été émises entre le début et la fin de la simulation (5 jours). Son profil vertical d'émission est de type gaussien avec un maximum à 1000 m ($\delta=100 \text{ m}$). Sa vitesse de dépôt est comparable à celle du NO_2 . Afin de représenter un panache bien défini, les composantes du vent zonal et méridien ont été fixées à 3 m.s^{-1} chacune. Les concentrations des panaches après 5 jours de simulation sont représentées sur la Figure II.18 pour le premier niveau du modèle. La première figure en haut à gauche représente le champ de concentration du traceur sur le grand maillage régulier, celle en haut à droite ce même champ de concentration sur le maillage fin, et enfin la figure en bas à gauche représente (sur un extrait de la grille) le panache simulé avec la grille zoomée.

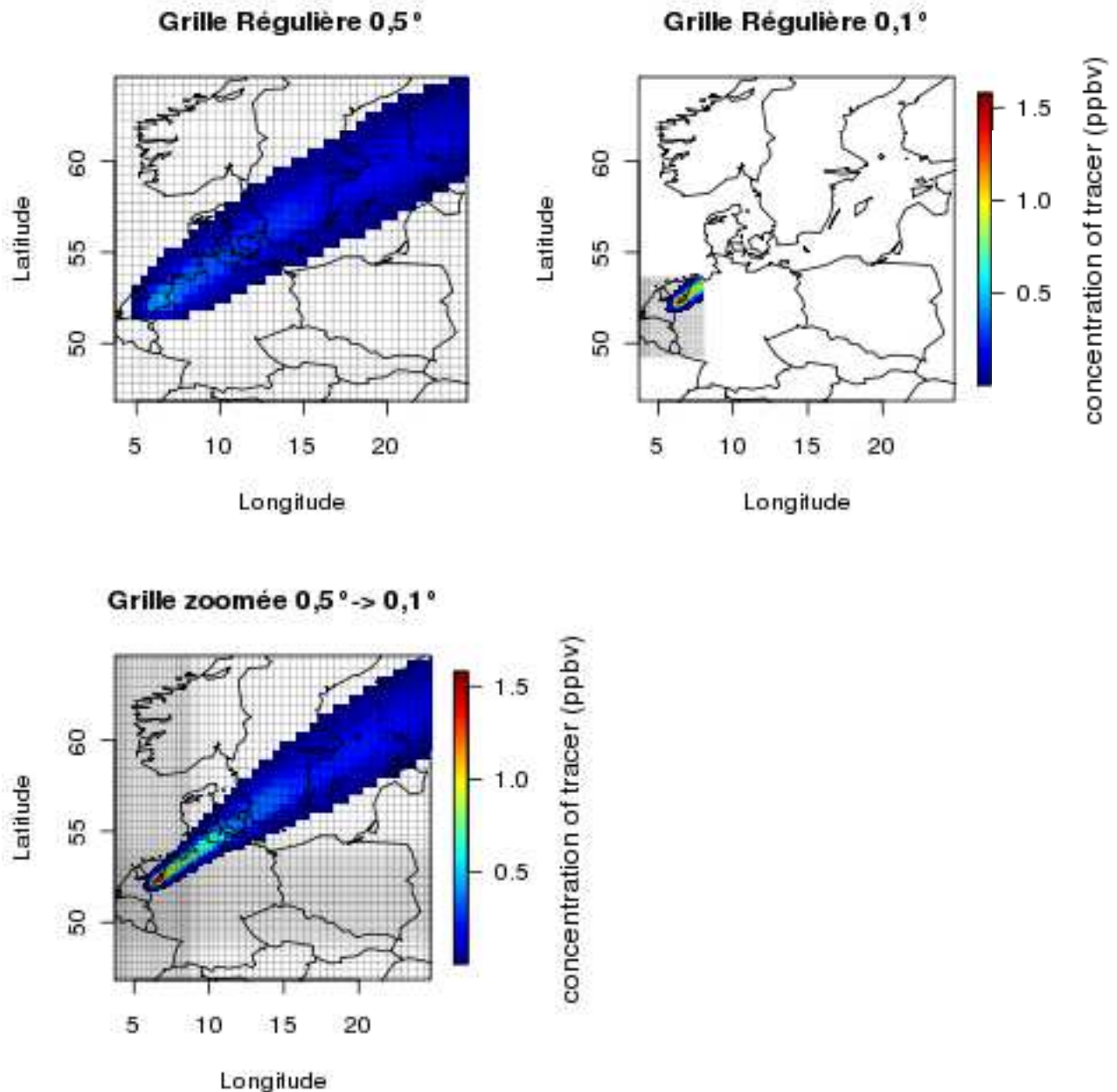


FIGURE II.18 – Concentrations (ppbv) du traceur dans le cas académique après 120h de simulation au niveau 1 du modèle (0-25m) centré sur le panache issue de la zone zoomée : En haut à gauche un extrait de la grille continentale de $0,5^{\circ} \times 0,5^{\circ}$ de résolution, en haut à droite le domaine fin de $0,1^{\circ} \times 0,1^{\circ}$ de résolution et en bas un extrait du domaine zoomé de $0,5^{\circ}$ à $0,1^{\circ}$ de résolution.

Dans les trois configurations, le panache se caractérise par des concentrations élevées sur la zone d'émission, qui décroissent en s'éloignant vers le nord-est. Pour la plus fine grille, le panache est 3 fois plus concentré sur la zone d'émission que pour la grille plus large. Cette différence de concentration s'explique simplement par l'effet de la résolution. Réduire la résolution permet de réduire la diffusion liée à une résolution plus grossière. Dans le cas

de la grille zoomée, le panache situé sur la zone du BeNeLux est identique en termes de concentration et d'étendue à celui de la fine grille. Mais contrairement à la configuration nesting one-way, ce panache plus fin peut impacter la grande échelle. On observe ainsi que le panache reste plus fin et plus concentré sur plusieurs centaines de kilomètres après la zone d'émission sur le maillage zoomé. Le même phénomène peut être observé avec un traceur émis en dehors de la zone zoomée et arrivant sur le BeNeLux. La grille zoomée permet donc une plus fine représentation de l'import et de l'export des panaches.

II.3.3.3 Les données de forçages

Afin de garder le bénéfice de l'augmentation de la résolution offerte par un tel maillage, il est nécessaire de raffiner également les données d'entrées (*ie.* émissions et données météorologiques) forçant la simulation sur la zone de fine résolution.

II.3.3.3.1 Les émissions

La technique d'interpolation de type Top-Down décrite dans la partie II.1.4.1 permet d'affiner la répartition spatiale des émissions sur la base d'informations finement résolues. Pour le maillage zoomé, les émissions seront donc plus fines sur la région du BeNeLux et plus grossières sur le reste du domaine. À titre d'illustration du gain sur les émissions, j'ai représenté en Figure II.19 les flux d'émissions de NO_2 pour un matin d'une journée de la période de simulation, en $\text{molécules.cm}^2.\text{s}^{-1}$, respectivement pour mes trois domaines. Comme on peut le voir sur le reste du domaine, nous avons bien dans les 2 cas (zoomé et régulier) des structures et des intensités d'émissions similaires, mais les émissions dans la région du BeNeLux sont logiquement plus détaillées pour le maillage zoomé et le maillage fin que pour le domaine régulier. Les valeurs de flux d'émissions atteignent alors des maxima locaux de 1.10^{+11} $\text{molécules.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ contre $1,4.10^{+10}$ $\text{molécules.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ seulement sur le maillage régulier large.

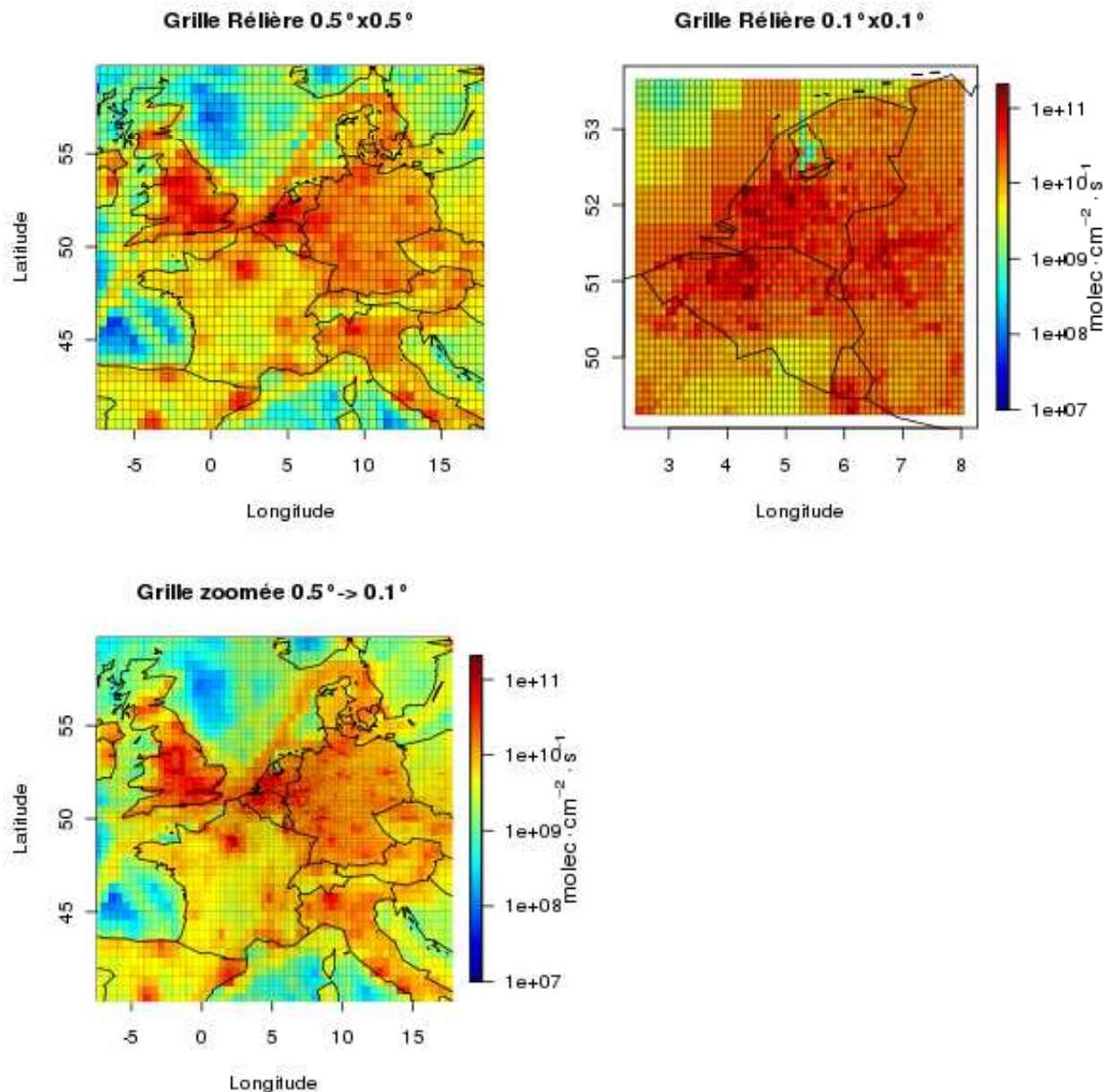


FIGURE II.19 – Flux d'émissions anthropiques de NO_2 pour une journée type d'août 2003, à 7h (en $\text{molecules.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$) : en haut à gauche la grille continentale de $0,5^\circ$ de résolution horizontale, en haut à droite le domaine zoomé de $0,5^\circ$ à $0,1^\circ$ de résolution, et en bas le domaine fin de $0,1^\circ \times 0,1^\circ$ de résolution.

II.3.3.3.2 Les données météorologiques

Comme vu dans la partie II.1.3, dans le modèle CHIMERE, la météorologie n'est pas calculée on-line, mais au préalable interpolée sur le domaine de simulation, à partir d'un modèle météorologique de méso échelle. Or le maillage zoomé, pour garder son intérêt, impose l'utilisation d'une météo de fine échelle pour la partie zoomée. Pour des raisons de temps de calcul, au même titre que pour le modèle CHIMERE, il n'est pas envisageable de calculer

la météorologie à une échelle de $0,1^\circ \times 0,1^\circ$ sur toute l'Europe. J'utiliserai donc des calculs effectués à l'échelle de $0,5^\circ$ pour le domaine large, que je combinerai à des calculs à $0,1^\circ$ sur le sous-domaine à haute résolution. De plus, il faut absolument que toutes les données météorologiques que j'utiliserai soient cohérentes entre elles.

J'ai choisi d'utiliser le modèle WRF dans sa version nesting two-ways afin de disposer de champs météorologiques cohérents entre eux mais de résolution différente. Le grand domaine WRF est simulé avec une résolution ($45 \times 45 \text{ km}$) du même ordre de grandeur que celle de CHIMERE. Pour le petit domaine météorologique, dont les frontières englobent le petit domaine CHIMERE de $0,1^\circ$ de résolution, les calculs sont effectués avec une résolution horizontale de 15 km . Les données météorologiques du grand et du petit domaine météorologiques sont ensuite toutes deux interpolées sur le maillage de la Figure II.17, puis combinées pour disposer d'un seul jeu de données avec deux résolutions différentes. La Figure II.20 présente, pour les vitesses de vent méridien, la combinaison des calculs du modèle WRF de large et fine échelle en une météorologie hybride.

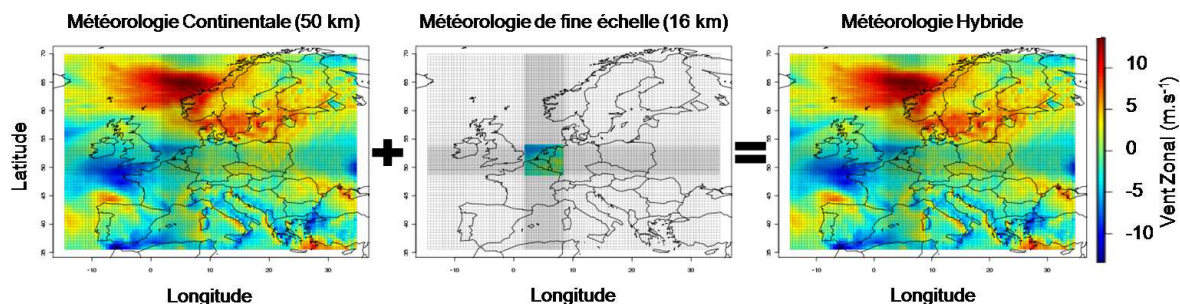


FIGURE II.20 – Vitesse du vent méridien issue du calcul continental à gauche, fine échelle au milieu, pour une échéance donnée, et projetée sur la grille zoomée. À droite, combinaison de ces deux jeux en une météorologie hybride.

II.3.3.4 Validation sur un cas d'étude

Afin de valider mon approche, j'ai réalisé une simulation sur la période du 20 juillet au 13 août 2003, le mois d'août 2003 offrant des situations de pollution et de recirculation de panaches tout à fait intéressantes pour mon test. L'été 2003 est en effet identifié comme le plus chaud que nous ayons connu au cours des cinquante dernières années en Europe. Les valeurs maximales de température sont significativement plus élevées ($+2^\circ\text{C}$) que celles des trois étés les plus chauds enregistrés au cours du siècle précédent (1976, 1983 et 1994). Les

deux premières semaines d'août sont les plus chaudes de la période estivale. Le 1^{er} août, les réseaux d'observation indiquent que l'Europe est soumise à des concentrations d'ozone allant de faibles (une centaine de $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) à modérées ($\sim 160 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$). Le 2 août, les concentrations augmentent fortement jusqu'à excéder les seuils réglementaires de qualité de l'air ($180 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) dans une grande partie de l'Europe et notamment sur la région du BeNeLux. C'est une situation météorologique classique d'été avec des hautes pressions sur l'Europe occidentale, mais avec une durée et une intensité inégalées. Des valeurs très élevées ($400 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) de concentration d' O_3 ont été mesurées, en particulier dans la région du BeNeLux (Vautard *et al.*, 2005). Cet épisode prend fin aux alentours du 12 août avec l'arrivée d'un front froid venu de l'Atlantique. Cette période exceptionnelle va me permettre de valider l'implémentation de la grille zoomée sur un épisode où la photochimie est particulièrement active.

II.3.3.4.1 Les données de mesures de la base *AirBase*

Pour valider et quantifier l'éventuel apport de cette approche, il est nécessaire de comparer les résultats simulés dans les différentes configurations du modèle aux données mesurées par les réseaux de surveillance de la qualité de l'air. J'ai pour cela utilisé la base de données *AirBase* (<http://air-climate.eionet.europa.eu/databases/airbase>, European Environment Agency) qui inclut un grand nombre de stations (~ 1700 stations) mesurant les deux espèces gazeuses cibles de la qualité de l'air : NO_2 et O_3 . La répartition des stations mesurant l'ozone sur le continent est représentée en Figure II.21. Afin de bien décrire et de quantifier l'impact de ce changement de résolution, trois jeux de stations ont été définis, en fonction de leur localisation géographique par rapport à la région zoomée du maillage :

- En vert, les stations utilisées pour une validation locale sur la région du BeNeLux (131 stations dont 35 urbaines, 45 rurales et 51 périurbaines),
- En noir, les stations utilisées pour valider les concentrations autour de la région du BeNeLux (360 stations dont 155 urbaines, 93 rurales et 112 périurbaines),
- En rouge les stations utilisées pour une validation à plus grande échelle sur le reste du continent (1005 stations dont 403 urbaines, 328 rurales and 274 périurbaines).

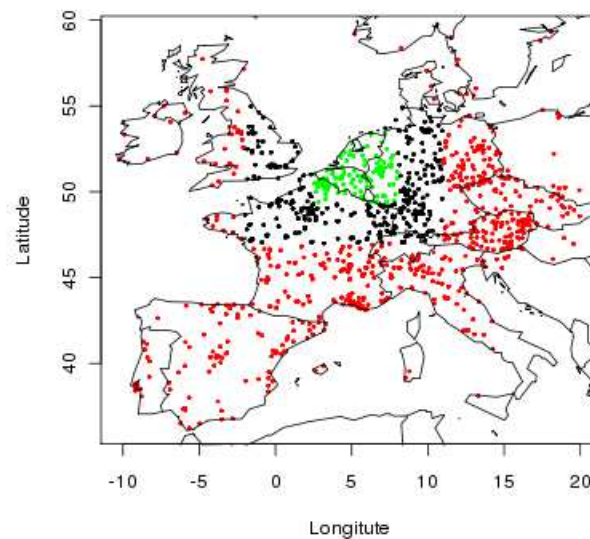


FIGURE II.21 – Localisation des stations *AirBase* mesurant l' O_3 utilisées pour comparer les concentrations d'ozone simulées par le modèle aux mesures.

II.3.3.4.2 Analyse des concentrations d'ozone simulées

Les concentrations d'ozone modélisées et mesurées ont été comparées sur la période allant du 31 juillet au 13 août 2003. J'ai calculé pour chaque jour et chaque station (Figure II.21), les coefficients de corrélation (R), la RMSE et le biais. J'ai ensuite reporté dans le Tableau II.3 les moyennes, médianes et les déviations standards pour chacun des jeux de stations définis ci-dessus, en les regroupant par domaine de résolution comparable. Pour la validation continentale (points rouges) et la validation de la zone autour de la région du BeNeLux (points noirs) le domaine Régulier représente le domaine de $0,5^\circ \times 0,5^\circ$ de résolution. Pour la validation de la zone la plus fine (La région du BeNeLux), le domaine Régulier représente le petit domaine de $0,1^\circ \times 0,1^\circ$ de résolution.

À l'échelle continentale, le modèle dans ses deux configurations reproduit de façon satisfaisante les variations temporelles observées par les mesures, avec des coefficients de corrélations médians de 0,84 et moyens de 0,74. Ces résultats sont en accord avec les précédentes évaluations du modèle (Honore *et al.*, 2008; Vautard *et al.*, 2006; de Meij *et al.*, 2009) qui utilisent des forçages météorologiques différents. Comme attendu, sur la grille zoomée, le coefficient de corrélation est identique à celui de la grille régulière puisque la chimie y est représentée de la même façon, et que les deux sous-domaines possèdent la même météorologie et les

mêmes émissions. Cependant, le biais et la RMSE sont respectivement inférieurs de 14% et 3% par rapport à la grille régulière. À cette échelle, le maillage zoomé permet donc de moins surestimer les concentrations d’ozone.

TABLE II.3 – Résultats de la comparaison entre les concentrations mesurées d’O₃ et les concentrations modélisées sur les trois jeux de stations.

| | | R | | RMSE (ppbv) | | BIAIS (ppbv) | |
|------------------------|----------|----------|----------|--------------------|----------|---------------------|----------|
| | | Zoomé | Régulier | Zoomé | Régulier | Zoomé | Régulier |
| Le domaine continental | Moyenne | 0,74 | 0,74 | 19,63 | 20,14 | 8,11 | 9,22 |
| | Médiane | 0,84 | 0,84 | 18,66 | 19,20 | 7,92 | 9,04 |
| | σ | 0,29 | 0,29 | 8,95 | 9,23 | 13,80 | 13,96 |
| Autour du BeNeLux | Moyenne | 0,79 | 0,80 | 18,43 | 18,96 | 5,59 | 7,08 |
| | Médiane | 0,87 | 0,87 | 17,64 | 18,32 | 8,07 | 9,73 |
| | σ | 0,23 | 0,23 | 7,94 | 8,28 | 12,43 | 12,62 |
| Sur le BeNeLux (0,1°) | Moyenne | 0,84 | 0,85 | 19,42 | 16,23 | 8,24 | 4,41 |
| | Médiane | 0,89 | 0,90 | 17,98 | 15,12 | 8,56 | 4,80 |
| | σ | 0,18 | 0,17 | 8,40 | 6,99 | 12,18 | 10,46 |

Si on s’intéresse plus spécifiquement à la zone autour du BeNeLux définie précédemment, là encore on observe que les coefficients de corrélation sont très peu différents et que la RMSE et le biais sont respectivement diminués de 20% et 4% avec la grille zoomée. Plus on se rapproche de la région du BeNeLux, plus les concentrations simulées d’ozone se rapprochent de celles qui sont mesurées. Enfin, à l’intérieur du BeNeLux, les coefficients de corrélations sont très proches entre les deux configurations (0,89 et 0,90) mais cette fois, le biais médian passe de 4,80 ppbv sur le domaine régulier à 8,56 ppbv sur le domaine zoomé. Ce résultat indique que la grille zoomée augmente la surestimation des concentrations d’ozone par rapport à la grille régulière. Pour expliquer cet effet, il est nécessaire d’observer dans un premier temps le comportement des NO_x sur cette zone.

II.3.3.4.3 Représentation des concentrations de NO_x simulées

J’ai dans un premier temps comparé les concentrations de NO₂ prédites par les différentes configurations du modèle. La Figure II.22 représente les différences de concentrations de NO₂ entre le domaine zoomé et régulier, autour du BeNeLux à gauche et sur la zone du BeNeLux à droite. Ces différences ont été moyennées sur la même période que précédemment (du 31/07/2003 au 13/08/2003). Sur la figure de gauche, les différences les plus grandes sont observées sur la zone du BeNeLux où les résolutions sont très différentes, mais également à proximité de cette zone, et peuvent atteindre jusqu’à ± 10 ppbv. Les NO_x ayant un temps de

vie de l'ordre de la journée, ils peuvent être transportés sur une échelle spatiale de plusieurs dizaines de kilomètres (Seinfeld et Pandis, 1998). C'est pourquoi sur le reste du domaine, là où la résolution et les forçages sont identiques, les différences ne sont pas significatives. La moyenne des différences entre les deux domaines finement résolus (figure de droite) est plus faible. Elle peut atteindre ± 2 ppbv, principalement sur les bords du domaine puisque contrairement au nesting one-way, le zooming permet de faire communiquer les échelles dans les deux sens et donc d'avoir des échanges différents entre les parties continentale et locale du domaine.

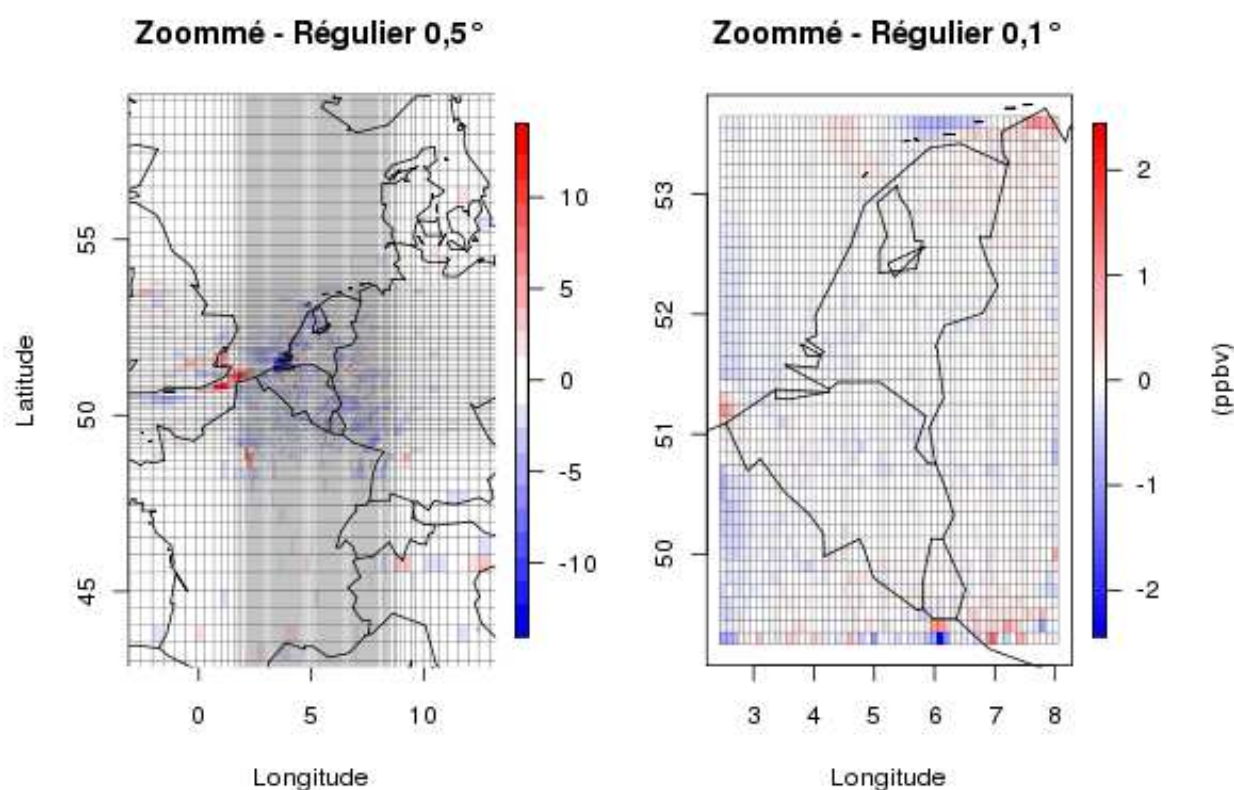


FIGURE II.22 – Moyenne des différences de concentrations (ppbv) de NO_2 entre la grille zoomée et les grilles régulières, calculées du 31/07/2003 au 13/08/2003 : à gauche différences avec le domaine continental et à droite différences avec le petit domaine.

Afin de savoir si ces différences vont dans le bon sens, j'ai comparé les concentrations modélisées de NO_2 avec les données mesurées. Comme précédemment, j'ai reporté dans le Tableau II.4 les moyennes et les médianes de la RMSE et du biais calculés chaque jour à chaque station pour la même période. Sur cette zone, les résultats du modèle montrent qu'avec la grille zoomée on estime mieux les concentrations de NO_2 qu'avec la grille régulière,

avec un biais négatif de -0,73 ppbv contre un biais positif de 2,56 ppbv lorsque l'on utilise la grille régulière. Cette différence ne peut être expliquée que par la part - plus faible - de NO₂ transportée depuis l'extérieur, puisque les émissions et la dynamique sont identiques sur les deux domaines.

TABLE II.4 – Statistiques de la comparaison entre les concentrations de NO₂ mesurées et simulées sur la région du BeNeLux.

| | | RMSE (ppbv) | | Biais (ppbv) | |
|-----------------------------|----------|-------------|----------|--------------|----------|
| | | Zoomé | Régulier | Zoomé | Régulier |
| La région du BeNeLux (0,1°) | Moyenne | 12,57 | 11,65 | -1,28 | 1,59 |
| | Médiane | 10,99 | 10,55 | -0,73 | 2,56 |
| | σ | 6,63 | 6,18 | 10,15 | 8,27 |

Un premier indicateur de cette part transportée de NO₂ peut être calculé par une comparaison avec les mesures en fonction du type de station (urbaine, périurbaine ou rurale) autour de la région du BeNeLux. Les stations sont classées en trois types distincts :

- Urbain : localisées au cœur de la ville
- Périurbain : localisées dans des secteurs résidentiels
- Rurale : en dehors des principales zones d'émission

Les stations de type Urbain et Périurbain sont principalement influencées par les émissions. Les stations de type Rural ne subissent pas l'impact de sources locales et sont donc essentiellement influencées par du transport (on Air et ETC/ACC, 2004). Les résultats de cette comparaison pour la zone du BeNeLux sont reportés dans le Tableau II.5. Pour les stations de type Urbain et Périurbain, la RMSE et le biais moyen sont plus petits en valeur absolue autour de la zone raffinée de la grille zoomée. On observe donc que la diminution progressive de la résolution permet d'augmenter significativement la finesse de description des émissions autour de la zone à haute résolution, et de mieux y représenter les gradients de concentration de NO₂. La même masse étant émise, la différence observée sur les biais des stations urbaines du BeNeLux est compensée par une diminution de 11% et 13% respectivement du biais moyen et médian autour de la zone sur les stations rurales. La grille zoomée permet donc de mieux représenter les champs de concentration autour de la zone zoomée, en diminuant les concentrations. D'après ce résultat, on s'attend donc à avoir des flux d'imports de NO_x moins importants sur la zone du BeNeLux.

TABLE II.5 – Statistiques de la comparaison entre les concentrations de NO₂ mesurées et simulées autour de la région du BeNeLux, par type de station.

| | | RMSE (ppbv) | | BIAIS (ppbv) | |
|------------|----------|-------------|----------|--------------|----------|
| | | Zoomé | Régulier | Zoomé | Régulier |
| Rural | Moyenne | 8,30 | 8,77 | 4,04 | 4,49 |
| | Médiane | 7,47 | 7,96 | 3,72 | 4,22 |
| | σ | 4,88 | 4,78 | 5,16 | 5,25 |
| Périurbain | Moyenne | 9,41 | 9,35 | -0,25 | -0,62 |
| | Médiane | 8,39 | 8,42 | 0,18 | 0,02 |
| | σ | 5,30 | 5,07 | 6,04 | 5,94 |
| Urbain | Moyenne | 11,79 | 11,84 | -4,30 | -5,18 |
| | Médiane | 10,83 | 10,91 | -3,81 | -4,70 |
| | σ | 5,62 | 5,58 | 7,22 | 7,17 |

II.3.3.4.4 Calcul des flux de NO₂

Grâce au calcul de flux implémenté dans le modèle et décrit dans la partie II.3.1, il est possible de calculer l'apport de cette meilleure représentation des concentrations de NO₂ sur les flux d'import et d'export de la zone à haute résolution. Si l'amélioration des concentrations de NO₂ provient de la méthodologie même du zoom, alors il est également possible, sauf compensation d'erreur, que les concentrations des autres polluants primaires soient également améliorées sur la zone. Le CO est une espèce peu réactive, ce qui en fait un bon traceur des émissions. J'ai donc calculé les flux moyens de NO_x et de CO exportés par le BeNeLux pour la grille régulière et la grille zoomée ; ils sont reportés dans le Tableau II.6. Pour ces deux espèces, les flux d'import (valeurs positives) sont moins importants que les flux d'export (valeurs négatives), ce qui apparaît logique au vu de la forte densité d'émissions anthropiques sur la région du BeNeLux (Figure II.19). Une grande quantité de composés primaires et secondaires est également exportée. Jakobs et Memmesheimer (2010; 2011) ont calculé avec le modèle Eurad (Hass *et al.*, 1993; Jakobs *et al.*, 1995) les flux horizontaux d'import et d'export de cette zone, mais pour un domaine plus large, sur toute l'année 2003. Ils trouvent une tendance similaire. Pourtant, notre étude montre que les flux d'import et d'export calculés sur la grille régulière sont 2% supérieurs à ceux obtenus sur la grille zoomée. Cette différence est directement imputable à la plus fine répartition des émissions autour de la zone sur la grille zoomée puisque la même masse est émise et que cette espèce est peu réactive. Cette tendance doit donc être retrouvée sur les flux de NO_x. Effectivement, les flux d'import et d'export sont respectivement 7% et 4% inférieurs sur la grille zoomée.

TABLE II.6 – Flux d’import-export calculés autour du BeNeLux ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$) et moyennés du 31/07/2003 au 13/08/2003.

| | | NO_x | CO |
|------------------|---------------|---------------|--------|
| Grille zoomée | Flux entrants | 6,12 | 555,99 |
| | Flux sortants | 7,74 | 650,96 |
| | Flux net | -1,62 | -94,97 |
| Grille régulière | Flux entrants | 6,56 | 569,46 |
| | Flux sortants | 8,05 | 664,80 |
| | Flux net | -1,49 | -95,34 |
| zoomée/régulière | Flux entrants | 0,93 | 0,98 |
| | Flux sortants | 0,96 | 0,98 |
| | Flux net | 1,09 | 1,00 |

La part importée de NO_x est donc moins importante sur le domaine zoomé ce qui peut justifier dans une certaine mesure la meilleure estimation des concentrations de NO_2 simulées sur le BeNeLux par le maillage zoomé (Tableau II.4). Cette différence aux limites peut elle engendrer une différence dans la représentation de la production d’ozone et mener à une surestimation accrue des concentrations d’ozone sur la région zoomée ?

II.3.3.4.5 Production d’ozone

Nous avons vu dans la partie II.3.1.4 qu’il était possible de quantifier le terme de production d’ozone (PO_3) du bilan de l’ozone incluant la variation de concentration d’ozone (ΔO_3), le terme de dépôt et le flux net. L’évolution horaire de chacun de ces paramètres est représentée sur la Figure II.23, les paramètres étant intégrés horizontalement sur toute la région du BeNeLux et verticalement sur toute la hauteur de la couche limite pour les deux configurations.

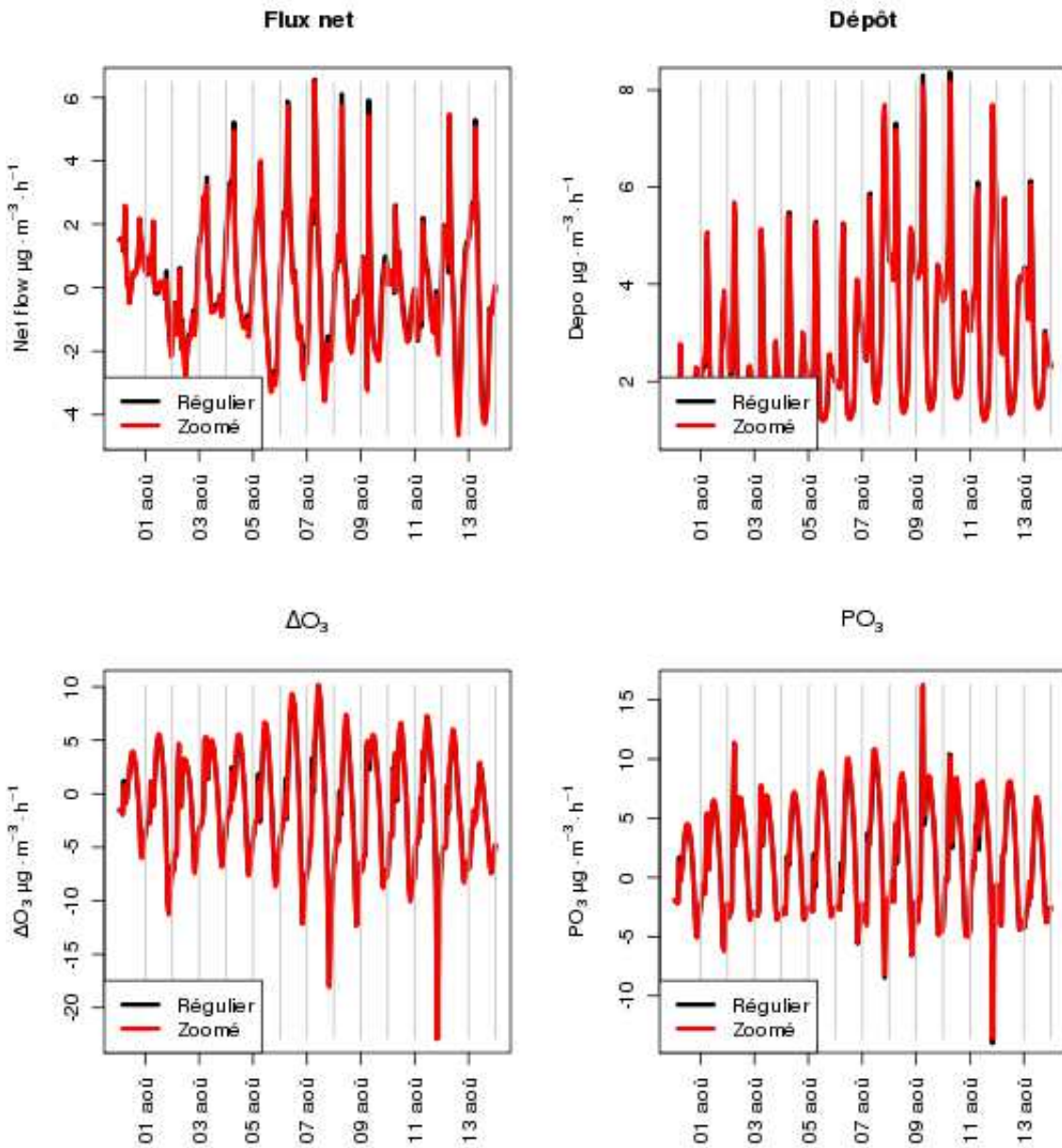


FIGURE II.23 – Évolution temporelle ($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{h}^{-1}$) des paramètres permettant de dériver la production d'ozone (PO_3) sur la région du BeNeLux, intégrés sous la couche limite : en haut à gauche l'évolution du flux net, en haut à droite l'évolution du dépôt, en bas à gauche la variation d' O_3 (ΔO_3) et en bas à droite la production d' O_3 (PO_3) dérivée de ces paramètres.

TABLE II.7 – Moyennes et médianes, calculées du 31-07-2003 au 13-08-2003, des paramètres permettant de dériver la production d’ozone (PO_3) en $\mu\text{g.m}^{-3}.\text{h}^{-1}$ sur la région du BeNeLux. Les valeurs sont intégrées sous la hauteur de la couche limite (ΔO_3 , Dépôt, flux net et PO_3).

| | | ΔO_3 | Dépôt | Flux Net | PO_3 |
|------------------|----------|--------------------|-------|----------|---------------|
| Grille zoomée | Moyenne | -1,33 | 2,76 | -0,09 | 1,52 |
| | Médiane | -1,46 | 2,28 | -0,15 | 1,28 |
| | σ | 5,35 | 1,56 | 1,87 | 4,68 |
| Grille régulière | Moyenne | -1,34 | 2,75 | 0,02 | 1,39 |
| | Médiane | -1,53 | 2,26 | -0,09 | 1,19 |
| | σ | 5,18 | 1,56 | 1,85 | 4,54 |
| zoomée/régulière | Moyenne | 0,99 | 1,00 | -3,95 | 1,10 |
| | Médiane | 0,96 | 1,01 | 1,57 | 1,08 |

Ce graphique met clairement en évidence que la variation temporelle de chaque paramètre est représentée de la même façon par les deux configurations. Néanmoins, les valeurs moyennes et médianes au cours de cette période peuvent être différentes. Ces valeurs sont reportées dans le Tableau II.7 (en $\mu\text{g.m}^{-3}.\text{h}^{-1}$) pour les deux domaines. Le tableau indique que les flux nets d’ozone varient entre les deux domaines ($0,06 \mu\text{g.m}^{-3}.\text{h}^{-1}$ de différence sur la valeur médiane et $0,11 \mu\text{g.m}^{-3}.\text{h}^{-1}$ sur les valeurs moyennes soit entre 20 et 40% de différence). Ces différences n’étant pas compensées par une différence significative des termes de dépôt, elles conduisent à augmenter la vitesse de production d’ozone de 10% et 8% respectivement pour la moyenne et la médiane. C’est cette augmentation de la vitesse de production qui conduit à avoir une surestimation plus importante des concentrations d’ozone sur la zone zoomée, les émissions et la météorologie étant identiques sur les deux domaines. La différence entre les deux configurations est donc principalement due aux changements induits (flux d’ozone et de NO_x) autour de la zone du BeNeLux. Nous avons vu plus haut que la quantité de NO_x importée par la zone était moins importante dans le cas de la grille zoomée ce qui semble être compensé par une production d’ozone accrue dans la région du BeNeLux.

L’implémentation du maillage zoomé a été validée par comparaison à des données de mesures à une échelle continentale. Cette méthode permet d’obtenir de meilleurs résultats que sur un maillage régulier notamment autour de la zone, ce qui permet de mieux quantifier l’impact de la mégapole elle-même sur son environnement et donc de mieux définir le rayon d’impact d’une mégapole sur son environnement. Néanmoins sur la zone zoomé, une surestimation de

la production d'ozone est engendrée par cette meilleure représentation des concentrations extérieures. Si l'on considère bien les changements sur NO_x comme une amélioration du modèle, alors les « moins bons » résultats sur l'ozone résultent sans doute ici de la non-compensation d'une erreur préexistant dans le modèle.

La contrepartie de cette méthode est qu'elle ne permet pas de comparer l'impact de différentes mégapoles. Il faudrait pour cela multiplier le nombre de zooms réalisés sur la grille et donc augmenter le temps de calcul de façon trop importante. Cet outil constitue donc un gain réel pour définir l'impact d'une zone géographique unique par simulation.